



Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ
Programa de Pós-Graduação em Astronomia
Observatório do Valongo

**Formação molecular ao longo da perda de massa atmosférica
dos exoplanetas Gliese 436b e HD 209458b**

Aluno: Heriberto Garzón Guacaneme

Orientadora: Profa. Dra. Heloisa Maria Boechat-Roberty

Co-Orientador: Dr. Rafael Pinotti

Rio de Janeiro – Brasil
Agosto de 2018

Formação molecular ao longo da perda de massa atmosférica dos exoplanetas Gliese 436b e HD 209458b

Heriberto Garzón Guacaneme

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Astronomia Observatório do Valongo, da Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências-Astronomia.

Orientadora:

Profa. Dra. Heloisa Maria Boechat-Roberty

Co-Orientador:

Dr. Rafael Pinotti

Rio de Janeiro – Brasil

Agosto de 2018

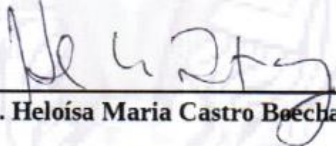
**Formação molecular ao longo da perda de massa atmosférica dos
exoplanetas Gliese 436b e HD209458b**

Heriberto Garzon Guacaneme

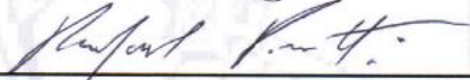
**Dra. Heloisa Maria Castro Boechat (Orientadora)
Rafael Pinotti (Co-orientador)**

Dissertação de mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Astronomia, Observatório do Valongo, da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências - Astronomia.


Aprovada por:



Presidente, Dra. Heloisa Maria Castro Boechat - (Orientadora) - OV/UFRJ



Dr. Rafael Pinotti - (co-orientador)- OV/UFRJ



Dr. Marcelo Borges Fernandes - (Avaliador Externo) - ON/MCTIC



Dr. Gustavo Frederico Porto de Mello - (Avaliador Interno) - OV/UFRJ

Rio de Janeiro
Agosto de 2018

CIP - Catalogação na Publicação

G245f Garzón Guacaneme, Heriberto
Formação molecular ao longo da perda de massa
atmosférica dos exoplanetas Gliese 436b e HD
209458b / Heriberto Garzón Guacaneme. -- Rio de
Janeiro, 2018.
178 f.

Orientadora: Heloisa Maria Boechat-Roberty.
Coorientador: Rafael Pinotti.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do
Rio de Janeiro, Observatório do Valongo, Programa de
Pós-Graduação em Astronomia, 2018.

1. Exoplanetas. 2. GJ 436b. 3. HD 209458b. 4.
Perda atmosférica. 5. Formação molecular. I. Boechat
Roberty, Heloisa Maria, orient. II. Pinotti,
Rafael, coorient. III. Título.

Elaborado pelo Sistema de Geração Automática da UFRJ com os
dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Agradecimentos

Agradeço à CAPES pela ajuda financeira ao longo destes dois anos de mestrado em Astronomia no Observatório do Valongo, OV.

A toda a comunidade OV, já que durante a minha estadia como estudante de mestrado, tive a oportunidade de me beneficiar de um programa de pós-graduação que atendeu minhas expectativas acadêmicas e humanas.

Aos meus orientadores, Dra. Heloisa Maria Boechat-Roberty e o Dr. Rafael Pinotti, pelo conhecimento adquirido e ajudas na realização deste trabalho.

A Cláudia pela ajuda nos assuntos burocráticos.

Aos astrônomos, Dr. Vincent Bourrier e o Dr. Tommi Koskinen, pelos dados fornecidos.

Ao Brasil, por ser um povo receptivo.

Dedicado à Heriberto Garzón, pai.

RESUMO

A proximidade entre exoplanetas e suas estrelas hospedeiras, como no caso dos chamados Júpiteres e Netunos quentes, pode levar à perda de massa atmosférica, gerando regiões semelhantes a caudas de cometas. Estas regiões são submetidas a intensos campos de radiação UV e raios-X, onde podem acontecer reações de destruição e formação de moléculas. Alguns planetas gasosos quentes têm suas atmosferas superiores, compostas principalmente de Hidrogênio neutro, estendidas além do seu lóbulo de Roche, como acontece com o Netuno quente GJ 436b e o Júpiter quente HD 209458b, e apresentando taxas de perda de massa atmosférica entre 10^9 - 10^{11} g s⁻¹. Estas taxas foram deduzidas a partir de observações de trânsito planetário primário na faixa espectral do UV, mostrando que a absorção da linha Ly α do H I é bem maior do que a esperada para o disco do planeta.

Nosso objetivo foi investigar a formação de moléculas ao longo da perda de massa atmosférica de GJ 436b e HD 209458b, usando um modelo estacionário 1D de reações químicas e fotoquímicas onde a temperatura é inferior a 2000 K. Utilizamos o pacote DASSLC (Differential Algebraic System Solver in C), adaptado para o programa MATLAB, onde foram incluídas 81 espécies contendo H, He, C, O e N, e 972 reações.

Os resultados sugerem que para GJ 436b, pequenas moléculas neutras e ionizadas contendo oxigênio e carbono, tais como OH⁺, H₂O⁺, OH, CH⁺, CH, CO⁺ são as mais abundantes, com valores de abundância e densidade de coluna na ordem de grandeza entre 10^{-5} - 10^{-8} e 10^8 - 10^5 cm⁻², respectivamente. No caso de HD 209458b, os resultados mostraram um cenário menos favorável para a formação molecular, devido ao campo de radiação estelar mais intenso, sendo que as espécies OH⁺, H₂O⁺, CH⁺, OH foram as mais abundantes, com valores entre 10^{-6} - 10^{-11} e densidades de coluna entre 10^8 - 10^3 cm⁻². Os resultados anteriores aumentaram quando a metalicidade da atmosfera ou a abundância de H₂ na exosfera foi aumentado. No caso da espécie molecular mais abundante, o íon OH⁺, sua intensidade na detecção poderia ser um forte indicador da presença de H₂ em abundâncias significativas ou para estimar o valor de metalicidade da atmosfera em cada um dos exoplanetas estudados. Só para HD 209458b, o efeito de aumentar o valor da extinção A_V ou diminuir o fator relacionado com o campo de radiação UV e raios-X estelar, levou a mudanças de ordens de grandeza nos valores de abundância e densidade de coluna para a maioria das espécies moleculares que foram consideradas neste trabalho.

Palavras chaves: exoplanetas – Netuno quente: GJ 436b – Júpiter quente: HD 209458b – radiação estelar: UV e raios-X – perda atmosférica – formação molecular – abundância – densidade de coluna.

ABSTRACT

The proximity between exoplanets and their host stars, as in the case of the so-called Hot Jupiters and Hot Neptunes, can lead to atmospheric mass loss, generating regions similar to tails of comets. These regions are subjected to intense fields of UV radiation and X-rays, where reactions of destruction and formation of molecules can occur. Some hot gaseous planets have their upper atmospheres, composed mainly of neutral hydrogen, extending beyond their Roche lobe, as the Hot Neptune GJ 436b and the Hot Jupiter HD 209458b, and having atmospheric mass loss rates between 10^9 - 10^{11} g s⁻¹. These rates were deduced from observations of primary planetary transit in the UV spectral range, showing the absorption of the Ly α line of H I is much larger than that expected for the planet's disk.

Our objective was to investigate the formation of molecules along the atmospheric mass loss of GJ 436b and HD 209458b using a 1D stationary model of chemical and photochemical reactions where the temperature is below 2000 K. We used the DASSLC (Differential Algebraic System Solver in C) package, adapted for the MATLAB program, including 81 species containing H, He, C, O and N, and 972 reactions.

The results suggest that for GJ 436b, small molecules containing neutral and ionized carbon and oxygen, such as OH⁺, H₂O⁺, OH, CH⁺, CH, CO⁺ are the most abundants, with abundance and column density values in the order of 10^{-5} - 10^{-8} and 10^8 - 10^5 cm⁻², respectively. In the case of HD 209458b, the results showed a less favorable scenario for molecular formation due to the more intense stellar radiation field, where the species OH⁺, H₂O⁺, CH⁺, OH were the most abundants, with values between 10^{-6} - 10^{-11} and column densities between 10^8 - 10^3 cm⁻². The previous results increased when the metallicity of the atmosphere or the abundance of H₂ in the exosphere was increased. In the case of the most abundant molecular species, the ion OH⁺, its intensity in the detection could be a strong indicator of the presence of H₂ in significant abundances or to estimate the metallicity value of the atmosphere in each of the studied exoplanets. Only for HD 209458b, the effect of increasing the extinction value A_V or decreasing the factor related to the stellar field of UV radiation and X-rays, led to changes of order of magnitude in the abundance and column density values for most molecular species which were considered in this work.

Keywords: exoplanets – Hot Neptune: GJ 436b – Hot Jupiter: HD 209458b - stellar radiation: UV and X-rays - atmospheric loss - molecular formation - abundance - column density.

SUMÁRIO

	Pág.
Lista de Figuras	10
Lista de Tabelas	16
1. Introdução	
1.1. Técnicas de detecção de exoplanetas	24
1.2. Classes de exoplanetas.....	27
1.3. HD 209458b e GJ 436b	29
2. Atmosferas de exoplanetas	
2.1. Introdução	32
2.2. Composição atmosférica	33
2.3. Razões C/O	36
2.4. Metalicidade	37
2.5. Opacidade	38
3. Perda de massa atmosférica em gigantes quentes	
3.1. Introdução	40
3.2. As observações	41
3.3. A teoria	47
4. Campo de radiação UV e raios-X estelar	
4.1. Introdução	53
4.2. A linha de emissão estelar H I Ly α	54
4.3. Radiação EUV e raios-X estelares.....	55
4.4. Campo de radiação UV e raios-X de HD 209458 e GJ 436	56
5. Modelo químico para a exosfera	
5.1. Introdução	60
5.2. A equação de continuidade para espécies químicas	61
5.3. As constantes da taxa de reação k e R	63

5.4. Processos químicos	64
5.5. Modelo químico da atmosfera superior de HD 209458b e GJ 436b	65
6. Metodologia	
6.1. Os programas AstroReactions e ReactionEquations	68
6.2. Os perfis para GJ 436b e HD 209458b	69
6.3. Abundâncias iniciais e valores de A_V para GJ 436b e HD 209458b	74
7. Resultados	
7.1. GJ 436b e HD 209458b com parâmetros padrão	76
7.2. Resultados variando a relação C/O	78
7.3. Resultados para perfis diferentes de H_2	80
7.4. Resultados variando a metalicidade	82
7.5. Resultados variando o fator de correção P	85
7.6. Resultados variando o valor de extinção A_V	87
7.7. Outros resultados para GJ 436b e HD 209458b	89
8. Conclusões e perspectivas futuras	92
A. Apêndice A – Programas MATLAB/DASSLC	
A.1. Programa densidade	94
A.2. Programa caminho	95
A.3. Programa de reações químicas e fotoquímicas ao longo da perda de massa atmosférica de GJ 436b e HD 209458b	97
B. Apêndice B – Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna total das espécies moleculares consideradas no modelo químico	
B.1. Resultados GJ 436b	104
B.2. Resultados HD 209458b	125
C. Apêndice C – Perfis de abundância fracionária molecular	
C.1. Perfis GJ 436b	145
C.2. Perfis HD 209458b	151
Referências	157

Lista de Figuras

	Pág.
1.1. Gráfico do número de exoplanetas descobertos por ano até a data de 30/03/2018 de acordo com o catálogo exoplanet.eu	23
1.2. Ilustração artística do sistema planetário Kepler-90 e sua comparação com o sistema Solar.....	23
1.3. Percentagem de exoplanetas detectados com cada técnica até a data de 30/03/2018. A amostra tem 3758 exoplanetas do catálogo exoplanet.eu	24
1.4. (a). Ilustração de um exoplaneta em trânsito primário e secundário. Fonte: adaptado de Seager 2010. (b). Curva de luz no infravermelho de HD 189733b e sua estrela hospedeira. Fonte: Knutson et al. 2007.....	26
1.5. Estatística do número de exoplanetas por distância desde a Terra. A amostra tem 2068 exoplanetas do catálogo exoplanet.eu com data de 30/03/2018.....	26
1.6. Distribuição de exoplanetas detectados em termos da massa planetária-período orbital mostrando as diferentes classes. A amostra tem 1585 exoplanetas. Fonte: adaptado desde o catálogo exoplanet.eu com data de 30/03/2018.....	28
1.7. Distribuição de exoplanetas detectados em termos do raio planetário – período orbital mostrando as diferentes classes. A amostra tem 2891 exoplanetas. Fonte: adaptado desde o catálogo exoplanet.eu com data de 30/03/2018.....	28
1.8. Distribuição de exoplanetas detectados em termos da temperatura efetiva da estrela hospedeira-raio planetário. A amostra tem 2851 exoplanetas. Fonte: adaptado desde o catálogo exoplanet.eu com data de 30/03/2018.....	29
1.9. Propriedades físicas de HD 209458b e sua estrela hospedeira.....	31
1.10. Propriedades físicas de GJ 436b e sua estrela hospedeira.....	31
2.1. Ilustração do trânsito primário e secundário.....	32
2.2. Representação esquemática das profundidades de absorção em uma atmosfera de um gigante gasoso quente. Fonte: Lammer & Khodachenko 2015.....	33
2.3. Gráfico de metalicidade vs temperatura efetiva para uma amostra de ~ 10 000 estrelas , onde é apresentado a distribuição de planetas gigantes hospedeiros. Fonte: Schlafman & Laughlin 2011.....	37
3.1. Os perfis Ly α de HD 209458 observados por Vidal-Madjar et al. (2003) antes e durante o trânsito planetário.....	42

3.2 Ilustração das curvas de luz obtidas para WASP-12b de observações no a) óptico e b) UV-Próximo, onde o choque em arco que rodeia a magnetosfera do planeta também é capaz de absorver radiação estelar. Fonte: Vidotto et al. (2011b).....	44
3.3. Curvas de luz Ly α do trânsito de GJ 436b.....	46
3.4. Gráfico ilustrativo apresentando os exoplanetas com perda de massa atmosférica detectada até agora, e a porcentagem de absorção na linha Ly α do H I.....	47
3.5. A modelagem 3D do escape de hidrogênio de HD 209458b . Fonte: Bourrier & Lecavelier des Etangs (2013).....	49
3.6. Mapa 2D do campo de velocidade do HI escapando desde GJ 436b no sistema de referência da estrela. Fonte: Ehrenreich et al. (2015).....	50
4.1. A linha H I Ly α da estrela α Centauri B observada com o Goddard High Resolution Spectrograph (GHRS), a primeira geração de instrumentos do telescópio Hubble. Fonte: https://blogs.stsci.edu/newsletter/files/2016/01/Linsky.pdf	54
5.1. Ciclo de vida do gás e a poeira no espaço interestelar. Fonte: Van Dishoeck 2017.....	64
5.2. Perfis de densidade numérica na atmosfera superior de HD 209458b obtidas por Koskinen et al. (2013a).....	66
5.3. Perfis de densidade numérica e razão de mistura na atmosfera superior de GJ 436b obtidas por Parke Loyd et al. (2017).....	67
6.1. Projeção no plano orbital de GJ 436b da nuvem 3D de metapartículas de H I escapando, no referencial do planeta. Resultados de Bourrier et al. (2016).....	70
6.2. Aumento da Figura 6.1 mostrando o comportamento não paralelo à linha estrela/planeta da trajetória de uma metapartícula de H I no campo de velocidade 3D da nuvem.....	70
6.3. Ajuste potencial do perfil de densidade do H I ao longo da trajetória mostrada na Figura 6.2.....	71
6.4. Ajuste linear do perfil de velocidade do H I ao longo da trajetória mostrada na Figura 6.2.....	71
6.5. Ajuste potencial do perfil de temperatura do H I de Parke Loyd et al. (2017).....	72
6.6. Vista de cima do sistema planetário HD 209458 mostrando a região considerada neste estudo, a partir de 6,9 R _p até 27,5 R _p , onde R _p é o raio do planeta. Fonte: adaptado de Bourrier & Lecavelier des Etangs (2013).....	73

- 7.1. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares mais abundantes ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão: $C/O = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$ 77
- 7.2. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares mais abundantes ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Parâmetros padrão: $C/O = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $P = 1 \times 10^9$; $A_V = 1,0$ 77
- 7.3. Perfis de abundância fracionária do OH^+ , a espécie molecular mais abundante ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b para diferentes valores de C/O. Parâmetros: $M = Z_{\odot}$; $A_V = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $P = 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$ 79
- 7.4. Perfis de abundância fracionária do OH^+ , a espécie molecular mais abundante ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b para diferentes valores de C/O. Parâmetros: $M = Z_{\odot}$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $P = 10^9$ 79
- 7.5. Perfis de abundância fracionária do OH^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b para perfis diferentes de H_2 . Parâmetros: $C/O = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $P = 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$ 81
- 7.6. Perfis de abundância fracionária do OH^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b para perfis diferentes de H_2 . Parâmetros: $C/O = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $P = 10^9$ 81
- 7.7. Perfis de abundância fracionária do OH^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b para diferentes valores de metalicidade. Parâmetros: $C/O = 1,0$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $P = 1 \times 10^5$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $A_V = 1,0$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$ 84
- 7.8. Perfis de abundância fracionária do OH^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b para diferentes valores de metalicidade. Parâmetros: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $P = 1 \times 10^9$; $A_V = 1,0$ 84
- 7.9. Perfis de abundância fracionária do OH^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b para diferentes valores do fator de correção P. Parâmetros: $C/O = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $A_V = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$ 86

- 7.10. Perfis de abundância fracionária do OH^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b para diferentes valores do fator de correção P . Parâmetros: $C/O = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $A_V = 1,0$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$ 86
- 7.11. Perfis de abundância fracionária do OH^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b para diferentes valores da extinção no visível, A_V . Parâmetros: $C/O = 1.0$; $M = Z_{\odot}$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$ 88
- 7.12. Perfis de abundância fracionária do OH^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b para diferentes valores da extinção no visível, A_V . Parâmetros: $C/O = 1.0$; $M = Z_{\odot}$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $P = 1 \times 10^9$ 89
- 7.13. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares mais abundantes ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b sem levar em conta os termos da derivada dos perfis de velocidade e densidade. Parâmetros padrão: $C/O = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $A_V = 1,0$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$ 90
- 7.14. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares mais abundantes ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b sem levar em conta os termos da derivada dos perfis de velocidade e densidade. Parâmetros padrão: $C/O = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^9$; $A_V = 1,0$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$ 90
- 7.15. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares mais abundantes ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Resultados de Pinotti & Boechat-Roberty (2016). Parâmetros padrão: $C/O = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $P = 1 \times 10^9$; $A_V = 1,0$ 91
- C.1. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares OH^+ , OH , CH^+ , CH , CO^+ , e H_2O^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão..... 145
- C.2. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares H_2^+ , NH , NO^+ , CH_2^+ , NH^+ , e CO ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão..... 146
- C.3. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares H_3^+ , CH_2 , H_2O , H_3O^+ , HCO^+ , e CN^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão..... 146

C.4. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares NO , CH_3^+ , C_2H^+ , NH_2^+ , HNO^+ , e CN ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão.....	147
C.5. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares N_2^+ , HCN^+ , N_2 , HCO , CH_3 , e $C_2H_2^+$ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão.....	147
C.6. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares HNC , N_2H^+ , HCN , HNO , C_2N^+ , e OH^- ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão.....	148
C.7. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares NO_2^+ , CO_2 , H_2CO , C_2H_2 , C_2H , e NH_2 ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão.....	148
C.8. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares $C_2H_3^+$, CNC^+ , OCN , OCN^+ , CH_4 , e CO_2^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão.....	149
C.9. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CH_4^+ , N_2O , $C_6H_5^+$, $C_4H_2^+$, N_2O^+ , e NO_2 ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão.....	149
C.10. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares $C_6H_7^+$, CN^- , $C_2H_4^+$, C_6H_6 , C_2H^- , e C_2H_3 ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão.....	150
C.11. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares C_2N , $C_6H_6^+$, C_2H_4 , $C_3H_4^+$, $C_5H_3^+$, e C_3H_2 ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão.....	150
C.12. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CH^- , $C_3H_3^+$, e C_3H_3 ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão.....	151
C.13. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares OH^+ , H_2O^+ , CH^+ , OH , e NO^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Parâmetros padrão.....	151
C.14. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares H_2^+ , H_3O^+ , H_3^+ , CH , NH^+ , e NH ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Parâmetros padrão.....	152
C.15. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CH_2^+ , CO^+ , NH_2^+ , HNO^+ , CN^+ , e N_2^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Parâmetros padrão.....	152

C.16. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CO , H_2O , HCN^+ , HCO^+ , N_2H^+ , e C_2H^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Parâmetros padrão.....	153
C.17. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CH_3^+ , CN , NO , $C_2H_2^+$, NO_2^+ , e N_2 ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Parâmetros padrão.....	153
C.18. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares OH^- , C_2N^+ , HCN , $C_2H_3^+$, CNC^+ , e HNO ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Parâmetros padrão.....	154
C.19. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares OCN^+ , NH_2 , C_2H , OCN , CO_2 , e C_2H_2 ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Parâmetros padrão.....	154
C.20. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CO_2^+ , $C_4H_2^+$, N_2O^+ , N_2O , NO_2 , e $C_6H_5^+$ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Parâmetros padrão.....	155
C.21. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CN^- , $C_2H_4^+$, $C_6H_7^+$, C_2H^- , e $C_6H_6^+$ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Parâmetros padrão.....	155
C.22. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares C_6H_6 , $C_5H_3^+$, $C_3H_4^+$, $C_3H_3^+$, e C_3H_3 ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Parâmetros padrão.....	156

Lista de Tabelas

	Pág.
2.1. Exoplanetas com espécies químicas detectadas em sua atmosfera (ou sugeridas pelos modelos). Fonte: catálogo exoplanet.eu com data de 30/03/2018.....	35
2.2. Razões C/O de 9 exoplanetas, onde 8 são Júpiteres quentes. Fonte: Line et al. 2014.....	36
3.1. Parâmetros dos modelos da literatura para a perda de massa atmosférica de HD 209458b. Fonte: Adaptado de Pinotti & Boechat-Roberty (2016).....	51
3.2. Parâmetros dos modelos da literatura para a perda de massa atmosférica de GJ 436b.....	52
4.1. Divisão em faixas de comprimento de onda e energia dos fótons do espectro ultravioleta estelar. Fonte: Lammer & Khodachenko (2015).....	53
4.2. Dados obtidos na literatura sobre o campo de radiação UV e raios-X da estrela HD 209458.....	57
4.3. Dados obtidos na literatura sobre o campo de radiação UV e raios-X da estrela GJ 436.....	58
4.4. Valores médios aproximados do fluxo UV e raios-X estelar incidente sobre o exoplaneta, com seu fator de correção multiplicativo P correspondente.....	59
5.1. Reações de dois corpos em fase gasosa e suas taxas.....	65
6.1. Espécies consideradas no modelo químico.....	68
6.2. Perfis de temperatura, densidade de HI, velocidade, e abundância de H ₂ usados na modelagem para GJ 436b.....	73
6.3. Perfis de temperatura, densidade de HI, velocidade, e abundância de H ₂ usados na modelagem para HD 209458b.....	74
6.4. Abundâncias fracionárias usadas como ponto de início na modelagem para GJ 436b.....	75
6.5. Abundâncias fracionárias usadas como ponto de início na modelagem para HD 209458b.....	75
7.1. Resultados de abundância máxima com sua respectiva densidade numérica para as espécies moleculares mais abundantes para GJ 436b, usando parâmetros padrão. N é a densidade colunar total.....	76

7.2. Resultados de abundância máxima com sua respectiva densidade numérica para as espécies moleculares mais abundantes para HD 209458b, usando parâmetros padrão. N é a densidade colunar total	76
7.3. Resultados de abundância máxima com sua respectiva densidade numérica para a espécie molecular mais abundante para GJ 436b ao variar a relação C/O. N é a densidade colunar total.....	78
7.4. Resultados de abundância máxima com sua respectiva densidade numérica para a espécie molecular mais abundante para HD 209458b ao variar a relação C/O. N é a densidade colunar total.....	78
7.5. Resultados de abundância máxima com sua respectiva densidade numérica para as espécies moleculares mais abundantes para GJ 436b ao variar o perfil de H ₂ . N é a densidade colunar total.....	80
7.6. Resultados de abundância máxima com sua respectiva densidade numérica para as espécies moleculares mais abundantes para HD 209458b ao variar o perfil de H ₂ . N é a densidade colunar total	80
7.7. Resultados de abundância máxima com sua respectiva densidade numérica para as espécies moleculares mais abundantes para GJ 436b ao variar a metalicidade. N é a densidade colunar total.....	82
7.8. Resultados de abundância máxima com sua respectiva densidade numérica para as espécies moleculares mais abundantes para HD 209458b ao variar a metalicidade. N é a densidade colunar total.....	83
7.9. Resultados de abundância máxima com sua respectiva densidade numérica para as espécies moleculares mais abundantes para GJ 436b, variando o fator de correção P. N é a densidade colunar total.....	85
7.10. Resultados de abundância máxima com sua respectiva densidade numérica para as espécies moleculares mais abundantes para HD 209458b, variando o fator de correção P. N é a densidade colunar total.....	85
7.11. Resultados de abundância máxima com sua respectiva densidade numérica para as espécies moleculares mais abundantes para GJ 436b, variando o valor A _V . N é a densidade colunar total.....	87
7.12. Resultados de abundância máxima com sua respectiva densidade numérica para as espécies moleculares mais abundantes para HD 209458b, variando o valor A _V . N é a densidade colunar total.....	88
B.1.1. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	104

B.1.2. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 2 \times 10^{-1}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	105
B.1.3. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = 55 \text{ Km s}^{-1}$, $v_f = 85 \text{ km s}^{-1}$	106
B.1.4. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 0,43$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	107
B.1.5. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 0,54$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	108
B.1.6. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 0,75$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	109
B.1.7. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,25$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	110
B.1.8. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,50$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	111
B.1.9. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 2,0$; $H_2 \text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2 \text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	112
B.1.10. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2 \text{ inicial} = 2 \times 10^{-2}$, $H_2 \text{ final} = 2 \times 10^{-3}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	113

B.1.11. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 5 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 5 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	114
B.1.12. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = 10Z_\odot$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	115
B.1.13. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = 100Z_\odot$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	116
B.1.14. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = 1000Z_\odot$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	117
B.1.15. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^4$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	118
B.1.16. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^6$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	119
B.1.17. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 0,1$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	120
B.1.18. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 0,5$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	121
B.1.19. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,5$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	122

B.1.20. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 2,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	123
B.1.21. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna sem levar em consideração a derivada do perfil de velocidade e densidade numérica do HI na equação de continuidade. Parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$	124
B.2.1. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^9$	125
B.2.2. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 0,54$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^9$	126
B.2.3. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 0,68$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^9$	127
B.2.4. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 0,75$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^9$	128
B.2.5. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,25$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^9$	129
B.2.6. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,50$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^9$	130
B.2.7. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 2,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^9$	131
B.2.8. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 2 \times 10^{-2}$, $H_2\text{ final} = 2 \times 10^{-3}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^9$	132
B.2.9. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 5 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 5 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^9$	133

- B.2.10. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = 5Z_\odot$; $P = 1 \times 10^9$ 134
- B.2.11. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = 10Z_\odot$; $P = 1 \times 10^9$ 135
- B.2.12. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = 25Z_\odot$; $P = 1 \times 10^9$ 136
- B.2.13. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^8$ 137
- B.2.14. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^{10}$ 138
- B.2.15. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 0,1$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^9$ 139
- B.2.16. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 0,5$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^9$ 140
- B.2.17. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,5$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^9$ 141
- B.2.18. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna com parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 2,0$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^9$ 142
- B.2.19. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna de Pinotti & Boechat-Roberty (2016). Parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^9$ 143
- B.2.20. Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna sem levar em consideração a derivada do perfil de velocidade e densidade numérica do H I na equação de continuidade. Parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $H_2\text{ inicial} = 1 \times 10^{-1}$, $H_2\text{ final} = 1 \times 10^{-2}$; $n_e/n_{HI} = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $M = Z_\odot$; $P = 1 \times 10^9$ 144

1. Introdução

A história diz que o conceito da pluralidade e diversidade de sistemas planetários remonta a mais de 2000 anos com Epicuro de Samos (341-270 A.C.) afirmando, “Há infinitos mundos, parecidos ou não com o nosso. Assim como os átomos são infinitos em número, não há em nenhuma parte obstáculo ao número infinito de mundos” (Bailey 1926). No século XVI, o italiano Giordano Bruno também escreveu sobre o assunto, “Há inúmeros Sóis e inúmeras Terras, todas elas girando em torno de seus Sóis, da mesma forma que os sete planetas de nosso sistema. Só vemos os Sóis, pois são corpos grandes e luminosos, mas seus planetas são invisíveis por serem pequenos e pouco luminosos (...)” (Bruno, 1584). Mas a procura sistemática por planetas extrassolares ou exoplanetas começou com astrometria em meados do século XIX (Jacob 1855), sem sucesso (Moulton 1899).

Mais de 50 anos depois, Struve (1952) propôs que os planetas tipo Júpiter poderiam existir em órbitas de 0,02 unidades astronômicas (UA). Ele destacou que as medições de velocidade radial de alta precisão poderiam descobrir tais planetas de período curto e seus trânsitos poderiam ser encontrados a partir de observações fotométricas. Foi só no final dos anos 80 que um objeto subestelar (massa mínima: $10,98 \pm 0,09$ massas Júpiteres (M_J) e distância orbital ($0,353 \pm 0,001$)UA) orbitando a estrela HD 114762 (distância desde a Terra: $39,46 \pm 2,86$ parsecs (pc) e tipo espectral F9 V) foi detectado por Latham et al. (1989) usando medições de velocidade radial. Nesse momento, Latham et al. se referiam a este objeto como uma anã marrom. Em 1991, Cochran et al. confirmaram esse objeto. No entanto, foi só no ano 2012 que seu status como exoplaneta foi confirmado (Kane & Dawn 2012).

Ao mesmo tempo que as medições por velocidade radial estavam em desenvolvimento, as observações de rádio a partir da variação no período de pulsares (ou “pulsar timing”) foram aproveitadas pela precisão na radiação emitida (efeito de “farol”). Em 1988, Fruchter et al. descobriram um objeto companheiro (massa $22 M_J$ e período orbital de 0,38 dias) do pulsar PSR B1957+20. A primeira confirmação de exoplanetas surgiu em 1992 com os radioastrônomos Wolszczan & Frail. Eles descobriram dois planetas com massas de $4,3 \pm 0,2 M_{\oplus}$ e $3,9 \pm 0,2 M_{\oplus}$ com períodos orbitais de 66,6 dias e 98,2 dias, respectivamente, orbitando o pulsar PSR 1257+12. Na época houve resistência da comunidade astronômica em aceitar os resultados, pois não era de esperar a existência de planetas em torno de uma estrela que explodiu como supernova.

Em outubro de 1995, Mayor & Queloz anunciaram a descoberta de um planeta de $0,47 M_J$ ($148 M_{\oplus}$) com período orbital de 4,2 dias (distância orbital 0,052 UA),

orbitando a estrela da sequência principal 51 Pegasi (distância desde a Terra: $15,61 \pm 0,09$ pc) através da técnica de velocidade radial, mudando a visão que o ser humano tinha sobre a arquitetura planetária, que envolve sua formação e evolução. Desde então, a taxa de descoberta foi aumentando como é mostrado na Figura 1.1, sobretudo com a disponibilidade de instrumentação espacial, dedicada principalmente às observações de trânsito planetário, tais como CoRoT (2006-2012) e Kepler em suas duas fases. Na primeira fase da missão Kepler (2009-2013) foram confirmados 2252 exoplanetas (1033 com período orbital menor a 10 dias), e na segunda fase (2013-atualmente) há confirmação de 364 exoplanetas até a data de 17/09/2018, de acordo com o catálogo da NASA Exoplanet Archive. Para o futuro, estão planejadas missões para estudar atmosferas exoplanetárias (por exemplo, o Telescópio Espacial James Webb - JWST), para caracterizar Super-Terras (por exemplo, o Characterising Exoplanets Satellite - CHEOPS), para detectar exoplanetas numa área 400 vezes maior do que a coberta pela missão Kepler (TESS -Transiting Exoplanet Survey Satellite¹) ou para encontrar planetas semelhantes à Terra (PLATO - Planetary Transits and Oscillations of Stars).

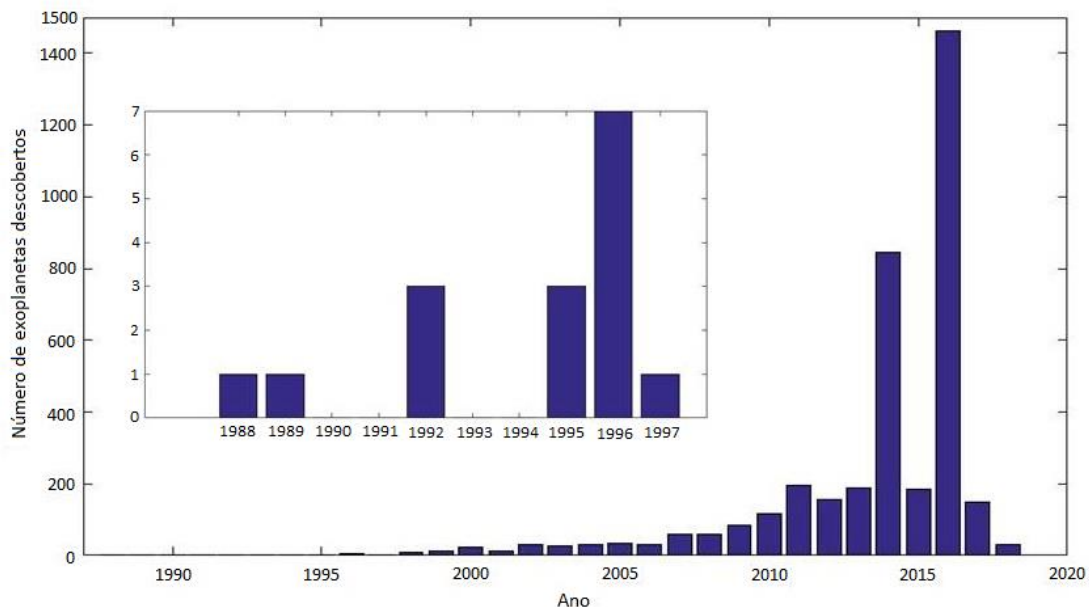


Figura 1.1. Gráfico do número de exoplanetas descobertos por ano até a data de 30/03/2018 de acordo com o catálogo *exoplanet.eu*

Até a data de 30/03/2018, e de acordo com o catálogo *exoplanet.eu*, o número de exoplanetas detectados era 3758, distribuídos em 2808 sistemas planetários, onde 627 destes sistemas têm mais de um planeta, sendo o sistema Kepler-90 (ver Figura 1.2) com o maior número de exoplanetas confirmados até o momento (Shallue & Vanderburg 2018).

¹ A TESS foi lançada na data de 18/04/2018.

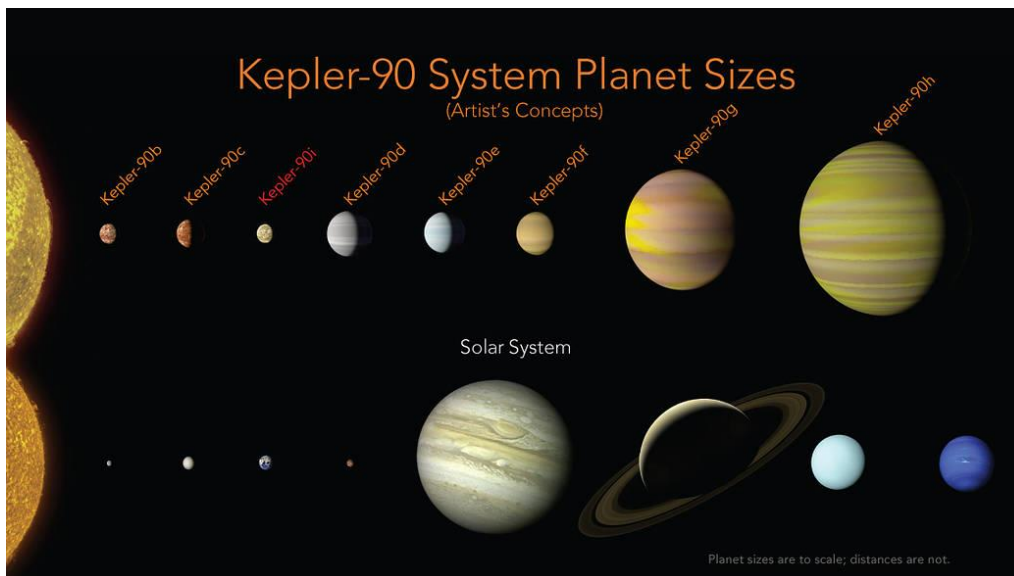


Figura 1.2. Ilustração artística do sistema planetário Kepler-90 e sua comparação com o sistema Solar.
Fonte: <https://www.nasa.gov/image-feature/ames/kepler-90-system-planet-sizes>

1.1. Técnicas de detecção de exoplanetas

Os exoplanetas estão sendo descobertos com várias técnicas de detecção (ver Figura 1.3), onde cada técnica é apropriada para certo tipo de exoplanetas em relação a sua massa (ou raio) e semi-eixo maior.

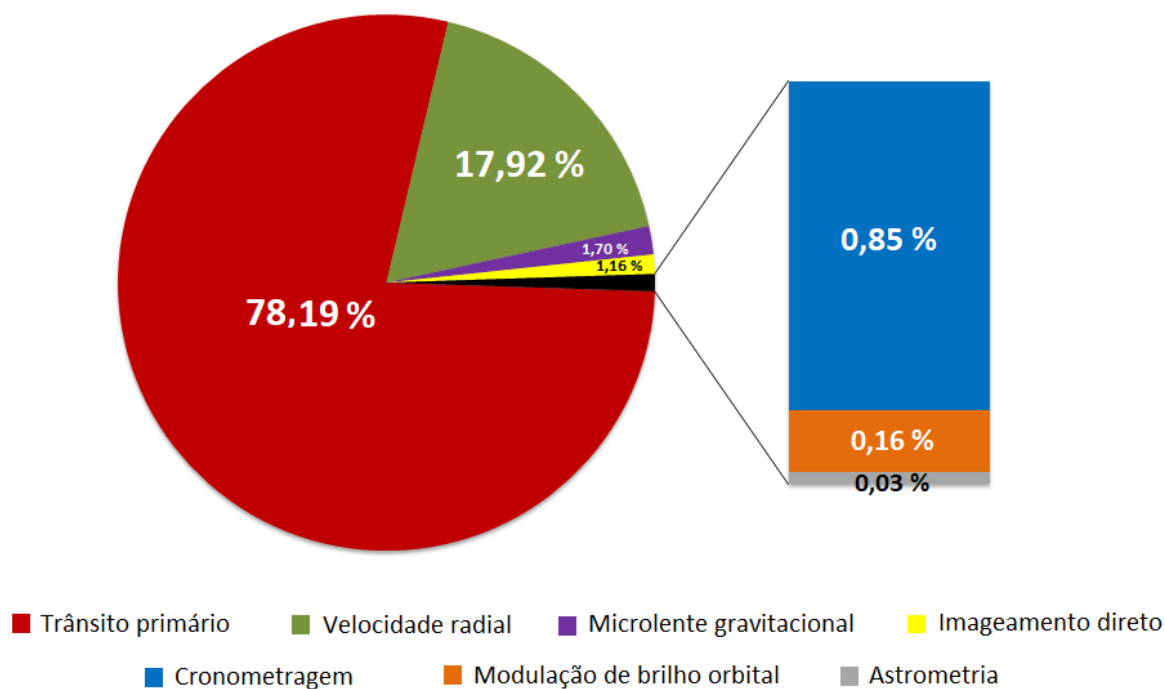


Figura 1.3. Percentagem de exoplanetas detectados com cada técnica até a data de 30/03/2018. A amostra tem 3758 exoplanetas do catálogo exoplanet.eu

A técnica de velocidade radial, que consiste em medir o efeito Doppler nas linhas espectrais da estrela devido à perturbação gravitacional do planeta orbitante, é mais produtiva para planetas mais massivos, próximos de sua estrela, e em torno de estrelas de baixa massa, como as estrelas do tipo espectral M, já que aquelas estrelas são mais afetadas pela atração gravitacional dos planetas e porque essas estrelas geralmente giram mais lentamente, levando a linhas espectrais mais nítidas e bem definidas. Além disso, permite que a excentricidade da órbita do exoplaneta seja medida diretamente. A principal desvantagem da técnica é que apenas a massa mínima (dada por $M_p \sin(i)$, onde M_p é a massa do planeta e i a inclinação orbital) de um exoplaneta é medida porque a sua inclinação orbital é indeterminada.

A astrometria mede a posição das estrelas. A presença de um planeta em volta de uma estrela induz nesta um movimento periódico em torno do centro de massa do sistema, resultando em uma mudança periódica da posição dessa estrela em relação a um referencial associado a objetos muito mais distantes. O método da astrometria mede ângulos minúsculos e não distâncias, o que requer medições de precisão extrema, só possíveis usando interferometria, o que aumenta a complexidade da técnica. Outras desvantagens são: (i) representa uma técnica lenta, pois se torna necessário observar várias órbitas; (ii) só pode ser utilizada para estrelas relativamente próximas, já que o movimento aparente da estrela em torno do baricentro do seu sistema planetário descreve um ângulo no céu que é inversamente proporcional à sua distância; (iii) revela dificuldade em detectar planetas rochosos porque eles produzem oscilações astrométricas muito pequenas na estrela hospedeira. Sua principal vantagem é que pode fornecer a massa planetária e todos os parâmetros orbitais.

A técnica do microlenteamento gravitacional é usada quando uma estrela passa entre a linha de visão do observador e uma estrela mais distante. A estrela atua como uma lente porque aumenta o brilho da estrela distante, sendo uma função do tempo e da separação angular entre elas. Se um planeta está orbitando a estrela que atua como lente, então a curva de luz pode ser ainda mais perturbada, levando à determinação da massa do planeta e sua distância orbital. A principal desvantagem é que o microlenteamento gravitacional é um evento sem repetição. A vantagem da técnica é a sensibilidade à exoplanetas de baixa massa em distâncias orbitais longas.

Em relação à técnica de imageamento direto, ela está atualmente limitada a objetos substelares grandes, brilhantes, jovens ou massivos e objetos localizados longe de suas estrelas (por exemplo, Chauvin et al. 2005; Marois et al. 2008; Biller 2014). A vantagem da técnica é que permite estudar a luz do planeta (temperatura) e seu espectro (composição), já que no infravermelho o contraste entre o brilho emitido pela estrela e o refletido pelo planeta diminui. No momento, a técnica não pode detectar exoplanetas com semi-eixo maior $\leq 0,1$ UA porque requer extrema resolução angular.

A técnica de detecção de exoplanetas de maior sucesso até agora é o trânsito planetário, representando 78,2 % do total de exoplanetas detectados de acordo com a Figura 1.3. Ele consiste em medir a variação do brilho devido à passagem de um planeta em frente ao disco estelar (ver Figura 1.4). A profundidade do trânsito observado depende principalmente da razão dos raios do planeta e da estrela hospedeira:

$$\frac{\Delta F}{F} = \left(\frac{R_p}{R_*}\right)^2$$

onde ΔF é a mudança observada no fluxo estelar F durante o trânsito, R_P e R_* são os raios planetário e estelar, respectivamente. Na relação anterior é assumido um fluxo uniforme por toda a superfície da estrela e desprezando qualquer fluxo do planeta. Portanto, uma grande vantagem da técnica é que fornece o raio do planeta. A desvantagem é que não é possível determinar a massa do objeto em trânsito. Entretanto, se a técnica for complementada pela técnica de velocidade radial, obtém-se a massa também e conseqüentemente uma boa estimativa da densidade do planeta (quando o planeta transita a sua massa mínima inferida pela velocidade radial aproxima-se da massa verdadeira). Os trânsitos de estrelas anãs também podem imitar um trânsito planetário. Nesse caso, é necessário um estudo espectroscópico.

Todas essas técnicas de detecção permitiram a descoberta de exoplanetas que estão entre 1,3 pc (Anglada-Escudé et al. 2016), sendo neste caso Proxima Centauri b (massa $\geq 1,27 M_{\oplus}$, semi-eixo maior 0,0485 UA e período orbital de 11,2 dias), e 8500 pc (Sahu et al. 2006) no caso do exoplaneta SWEEPS-04 (massa $< 3,8 M_J$, semi-eixo maior 0,055 UA e período orbital de 4,2 dias). A Figura 1.5 apresenta a estatística do número de exoplanetas por distância desde a Terra. As técnicas de detecção também permitiram a descoberta de novas classes de planetas: as Super-Terras, os Júpiteres quentes/aquecidos e os Netunos quentes/aquecidos.

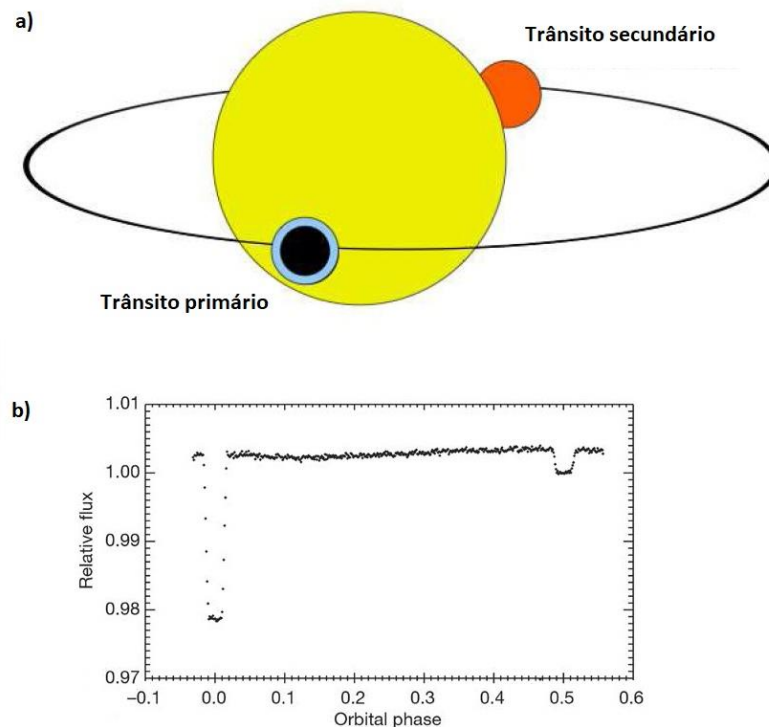


Figura 1.4. (a). Ilustração de um exoplaneta em trânsito primário e secundário. Fonte: adaptado de Seager 2010. (b). Curva de luz no infravermelho de HD 189733b e sua estrela hospedeira. A primeira variação no fluxo corresponde ao trânsito primário e a segunda variação pertence ao trânsito secundário. Fonte: Knutson et al. 2007.

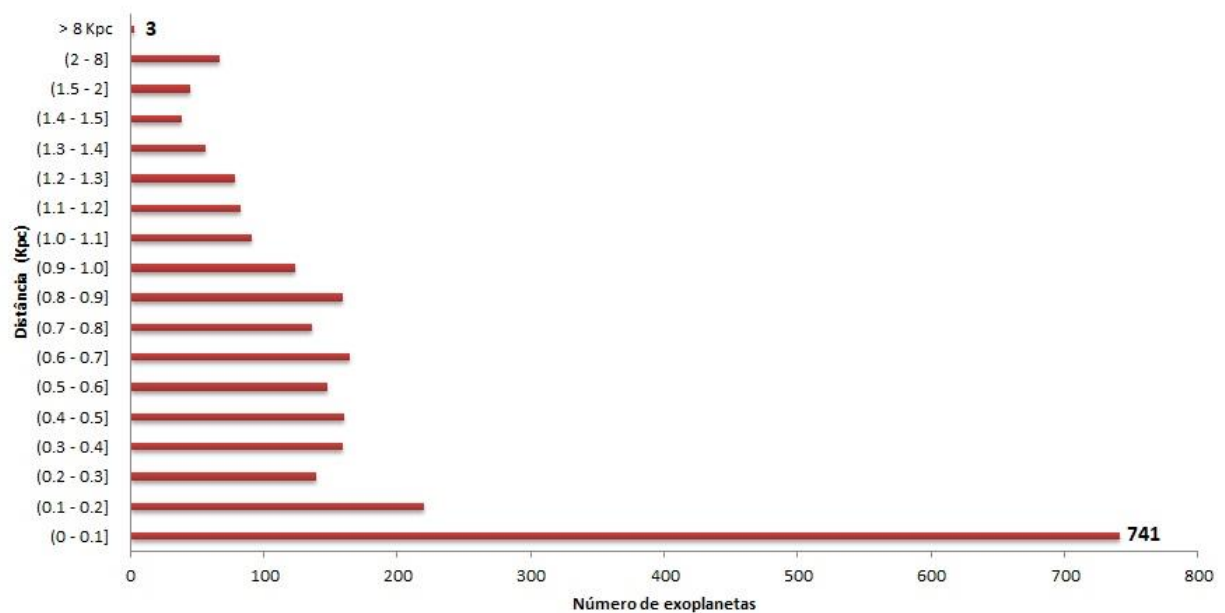


Figura 1.5. Estatística do número de exoplanetas por distância desde a Terra. A amostra tem 2068 exoplanetas do catálogo exoplanet.eu com data de 30/03/2018.

1.2. Classes de exoplanetas

No ano de 2003, o grupo de trabalho sobre planetas extrassolares da União Astronômica Internacional (IAU) decidiu dar uma definição provisória dos atributos necessários para que um objeto fora do Sistema Solar seja considerado um planeta:

1. São planetas, independentemente de como se formaram, os objetos com massa verdadeira abaixo da massa limite para fusão termonuclear do deutério (atualmente calculada em 13 vezes a massa de Júpiter para objetos de metalicidade solar (Saumon et al. 1996)), e que orbitam estrelas ou remanescentes estelares. A massa e tamanho mínimo requerido para um objeto extrassolar ser considerado um planeta devem ser os mesmos usados no Sistema Solar.
2. Objetos sub-estelares com massa verdadeira acima da massa limite para fusão termonuclear do deutério são “anãs marrons”, independentemente de como se formaram ou onde se localizam.
3. Objetos que não orbitam estrelas ou remanescentes estelares, com massa abaixo da massa limite para fusão termonuclear do deutério, não são planetas, mas são sub-anãs marrons (ou qualquer outro nome mais apropriado a ser atribuído).²

² Por exemplo, o objeto chamado PSO J318.5-22 com massa $6,5 M_J$ (Liu et al. 2013. ApJ 777, L20).

O limite de massa calculada em 13 vezes a massa de Júpiter não é o critério de massa que os principais catálogos de exoplanetas usam. Por exemplo, os catálogos NASA Exoplanet Archive e Exoplanet Data Explorer têm como limite de massa $30M_J$ e $24M_J$, respectivamente. Isso com base nos resultados de simulações de formação de planetas por acreção de núcleo que mostraram que objetos de até 25-30 massas Júpiter podem ser produzidos dessa maneira, e, portanto, o objeto pode potencialmente ser considerado como um planeta (Udry et al. 2002; Mordasini et al. 2007). No caso do catálogo Extrasolar Planets Encyclopaedia, ele tem como limite de massa $60M_J$ com base nos resultados de Hatzes & Rauer (2015) sobre as distribuições de densidade versus massa e raio versus massa de objetos na faixa $0,35-60 M_J$ em relação a objetos com massa maior a $60 M_J$. Além disso, Hallinan et al. (2015) descobriram que a anã marrom LSRJ 1835+3259, a 20 anos-luz do Sistema Solar, possui auroras boreais como a Terra e outros planetas. Este estudo dá força à ideia de que as anãs marrons se parecem mais com planetas, sendo chamados superplanetas.

Desde que Mayor & Queloz anunciaram em 1995 a descoberta de um planeta com a metade da massa de Júpiter orbitando a estrela tipo solar 51 Pegasi a uma distância de 0,05 UA, sendo classificado como Júpiter quente, novas classes de exoplanetas foram aparecendo ao longo dos anos, de modo que atualmente são classificados em 6 tipos de exoplanetas de acordo com sua massa ou tamanho, e 18 tipos de exoplanetas se considerarmos seu período orbital (ou distância desde a estrela hospedeira) como mostram as Figuras 1.6 e 1.7.

De acordo com essas figuras, os exoplanetas com massa maior a $50 M_{\oplus}$ ou raio entre $6 - 15 R_{\oplus}$ são chamados Júpiteres, massa entre $10 - 50 M_{\oplus}$ ou raio entre $2,5 - 6 R_{\oplus}$ são Netunos, massa entre $5 - 10 M_{\oplus}$ ou raio entre $1,5 - 2,5 R_{\oplus}$ são Superterras, massa entre $0,5 - 5 M_{\oplus}$ ou raio entre $0,8 - 1,5 R_{\oplus}$ são Terras, massa entre $0,1 - 0,5 M_{\oplus}$ ou raio entre $0,4 - 0,8 R_{\oplus}$ são Subterras, e massa entre $10^{-5} - 0,1 M_{\oplus}$ ou raio entre $0,03 - 0,4 R_{\oplus}$ são Mini-Terras. Em função de seu período orbital ($P_{orbital}$), os exoplanetas são classificados como *quentes* ($P_{orbital} \lesssim 10$ dias), *aquecidos* ($10 \text{ dias} \lesssim P_{orbital} \lesssim 200$ dias), ou *frios* ($P_{orbital} \gtrsim 200$ dias) conforme a classificação no site <https://www.nasa.gov/image-feature/ames/kepler/exoplanet-populations>.

Uma estatística feita em novembro de 2017 pelo Laboratório de Habitabilidade Planetária (PHL) da Universidade de Puerto Rico em Arecibo, mostrou que 32 % do total de exoplanetas confirmados até essa data são do tipo Júpiteres, 26,5 % são Superterras e 22 % são exoplanetas tipo Netuno (phl.upr.edu/projects/habitable-exoplanets-catalog/media/pte). Além disso, a maioria dos exoplanetas detectados orbitam estrelas tipo G, representando ~ 48 % do total (ver Figura 1.8).

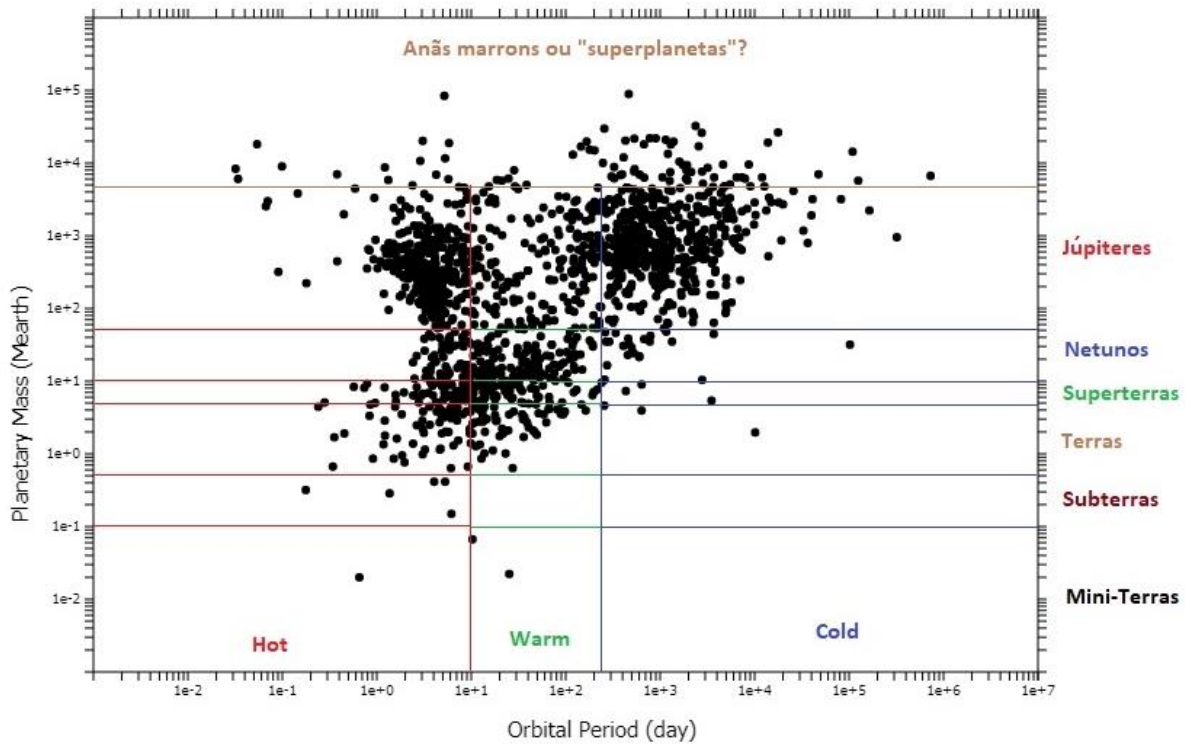


Figura 1.6. Distribuição de exoplanetas detectados em termos da massa planetária versus o período orbital mostrando as diferentes classes. A amostra tem 1585 exoplanetas. Fonte: adaptado desde o catálogo exoplanet.eu com data de 30/03/2018.

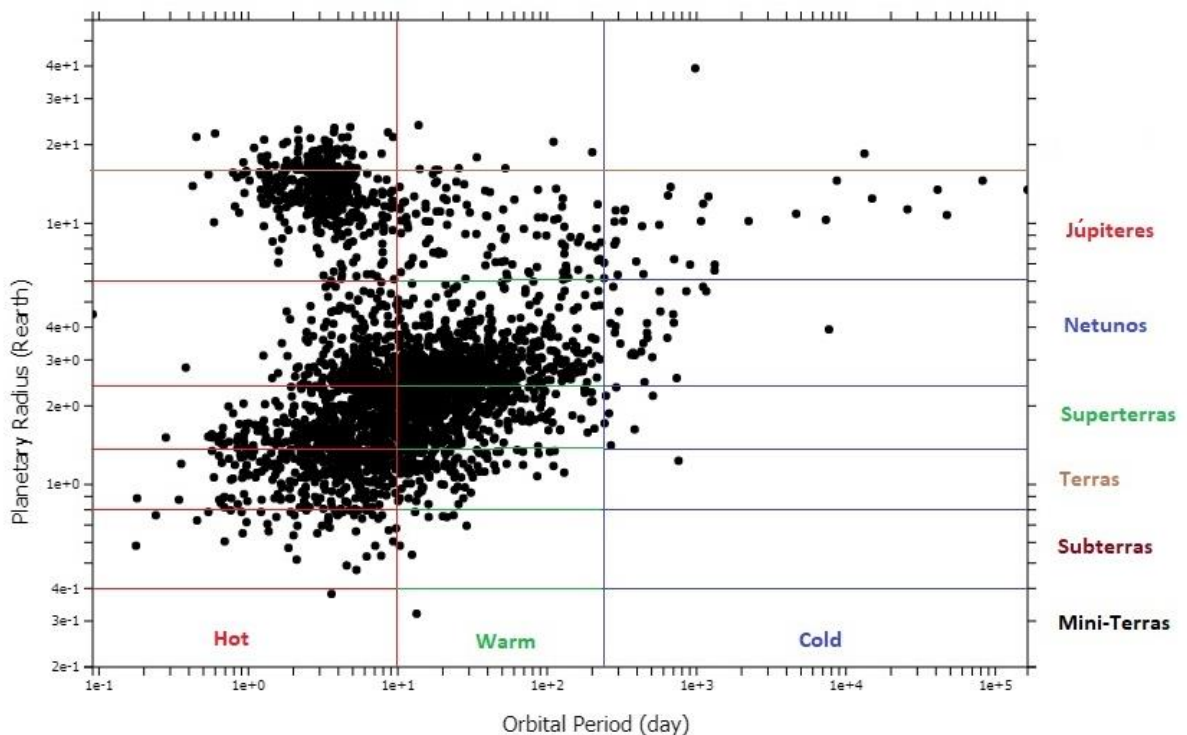


Figura 1.7. Distribuição de exoplanetas detectados em termos do raio planetário versus o período orbital mostrando as diferentes classes. A amostra tem 2891 exoplanetas. Fonte: adaptado desde o catálogo exoplanet.eu com data de 30/03/2018.

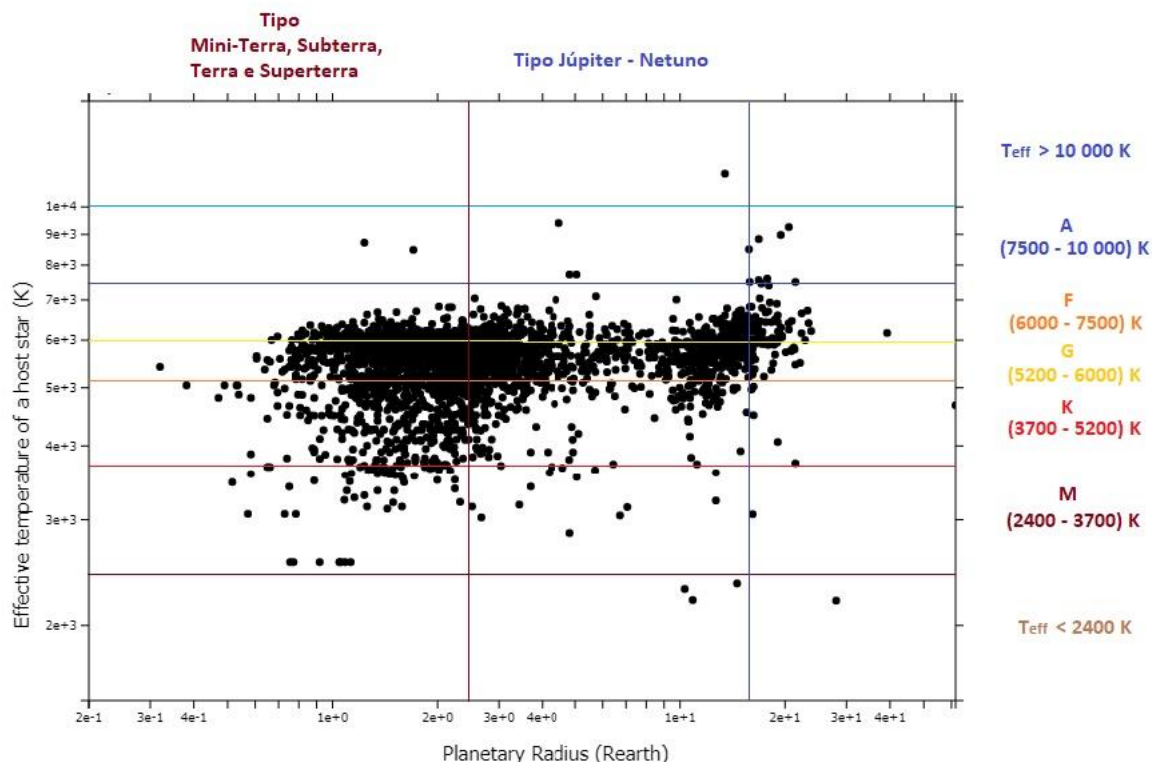


Figura 1.8. Distribuição de exoplanetas detectados em termos da temperatura efetiva da estrela hospedeira versus o raio planetário. A amostra tem 2851 exoplanetas. Fonte: adaptado desde o catálogo exoplanet.eu com data de 30/03/2018.

1.3. HD 209458b e GJ 436b

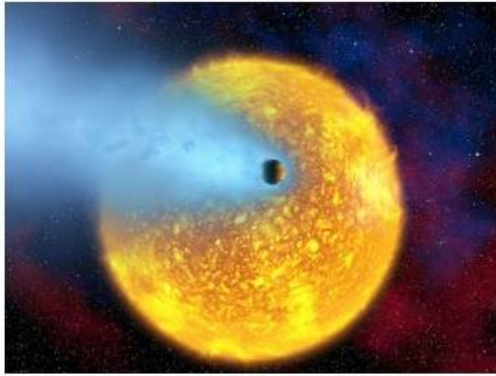
Massa, raio, distância e período orbital revelaram uma incrível diversidade das propriedades físicas exoplanetárias em relação com o conhecido no Sistema Solar. Mas o desenvolvimento da técnica de trânsito planetário permitiu o estudo químico dos exoplanetas através da caracterização de suas atmosferas (ver Tabela 2.1 do capítulo 2), usando para isso a espectroscopia de transmissão (ou espectroscopia de trânsito primário) e a espectroscopia de ocultação (ou espectroscopia de trânsito secundário), sendo um assunto de grande interesse para as novas missões (por exemplo, o JWST). Isso porque medindo a composição química e a estrutura térmica de uma atmosfera, é possível restringir a formação e a história evolutiva do planeta, o clima e até a habitabilidade.

O Júpiter quente HD 209458b, que orbita uma estrela do tipo G0 V (Figura 1.9), foi o primeiro exoplaneta detectado em trânsito, sendo encontrado simultaneamente por Henry et al. (2000) e Charbonneau et al. (2000). Essa descoberta foi logo seguida pela detecção de sua atmosfera planetária em linhas de sódio atômico (Charbonneau et al. 2002), que significou a primeira detecção de uma atmosfera exoplanetária. Um ano depois, Vidal-Madjar et al. (2003) publicaram uma detecção de absorção de $15 \pm 4\%$ (1σ) na linha Ly α do hidrogênio neutro (H I) estelar para este exoplaneta durante o trânsito primário. Isso significou a primeira detecção de perda de massa atmosférica para um exoplaneta (ver capítulo 3). Modelos e observações subsequentes foram feitas para entender a natureza do escape atmosférico neste Júpiter quente, como também em

outros poucos exoplanetas, sendo um deles o Netuno quente GJ 436b (Ehrenreich et al. 2015). O exoplaneta GJ 436b orbita uma estrela anã vermelha tipo M2.5 V (Figura 1.10) e foi o primeiro Netuno quente descoberto (Butler et al. 2004). Uma particularidade deste Netuno quente é que de acordo com resultados publicados na revista Nature, Stevenson et al. (2010) sugerem que a atmosfera diurna de GJ 436b é abundante em monóxido de carbono (CO) e deficiente em metano (CH₄) por um fator de ~ 7000. Mas o resultado foi inesperado porque com base nos modelos atuais a ~ 700 K (temperatura superficial do planeta), o carbono atmosférico deve preferir mais o CH₄ do que o CO, de acordo com a reação $\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2$.

Recentemente, Pinotti & Boechat-Roberty (2016) desenvolveram o primeiro modelo químico onde foram incluídas 53 espécies, contendo H, He, C e O, para estudar a formação molecular ao longo da perda de massa atmosférica para HD 209458b e Júpiteres quentes semelhantes. Isso foi a origem deste trabalho de mestrado, cujo objetivo principal é estudar a formação molecular ao longo da perda de massa atmosférica para o Netuno quente GJ 436b com uma versão mais completa do modelo químico de Pinotti & Boechat-Roberty (2016), além de acrescentar espécies nitrogenadas, sendo aplicado também para o Júpiter quente HD 209458b.

O modelo químico precisa de parâmetros de entrada tais como perfis de velocidade, temperatura e densidade numérica das espécies químicas envolvidas, suas abundâncias fracionárias iniciais e taxas de reação, valores de C/O, extinção no visível e metalicidade. Além disso, são necessários dados do campo de radiação UV e raios-X da estrela hospedeira. Portanto, a dissertação está dividida da seguinte forma: no capítulo 2 são apresentados os resultados obtidos na literatura sobre as espécies químicas detectadas até agora na atmosfera dos exoplanetas, valores de C/O e metalicidade. No capítulo 3 são descritas as observações e os modelos hidrodinâmicos em relação com a perda de massa atmosférica em gigantes quentes, onde são obtidos os perfis de temperatura, velocidade e densidade numérica do H I, a espécie química mais abundante nestes exoplanetas. No capítulo 4 são apresentados os dados do campo de radiação UV e raios-X das estrelas HD 209458 e GJ 436, sendo esta radiação a responsável pela dissociação e ionização das espécies químicas na atmosfera. No capítulo 5 é descrito o modelo químico para estudar a formação molecular ao longo da perda de massa atmosférica para GJ 436b e HD 209458b. No capítulo 6 é dedicado à metodologia, ou seja, a descrição sobre a implementação numérica do modelo químico. No capítulo 7 são analisados e discutidos os resultados das simulações numéricas para cada um dos dois exoplanetas. Finalmente, o capítulo 8 é dedicado às conclusões e perspectivas futuras deste trabalho.



Estrela HD 209458

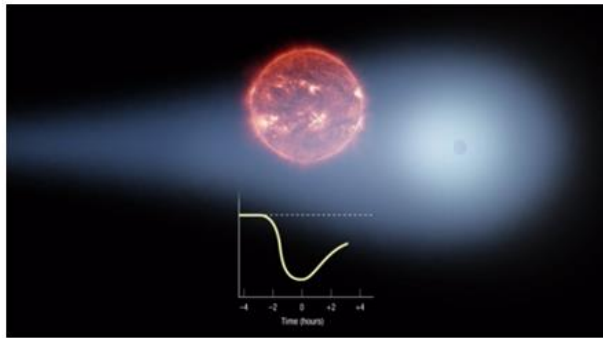
Classe espectral: G0 V (tipo solar)	(a)
Distância: (48.9 ± 0.5) pc - (159 ± 2) ano-luz	(b)
Constelação de Pégaso	
Massa: $(1.148 \pm 0.022)M_{\odot}$	(a)
Raio: $(1.203 \pm 0.061)R_{\odot}$	(a)
Temperatura efetiva: (6092 ± 103) K	(a)
Metalicidade [Fe/H]: 0.02 ± 0.05 dex	(a)
Idade: 4.0 ± 2.0 Giga – anos	(a)
Sistema planetário: 1 planeta	

Exoplaneta HD 209458b

Descoberto: 1999		Período orbital: (3.52472 ± 0.000028) dias	(a)
Massa: $(219.29 \pm 5.40)M_{\oplus}$	(a)	Excentricidade: 0.0082 ± 0.0078	(a)
Raio: $(15.14 \pm 0.20)R_{\oplus}$	(a)	Inclinação: (86.59 ± 0.05) graus	(a)
Densidade média: $(0.32 \pm 0.05)g\text{ cm}^{-3}$	(c)	Método de detecção: Trânsito primário	
Temperatura: (1459 ± 12) K	(c)	Método de detecção da massa: Velocidade radial	
Semi-eixo maior: (0.04747 ± 0.00055) UA	(a)	Taxa perda de massa atmosférica: $10^{10} g\text{ s}^{-1}$	(d)
		$\sim 10^9 - 10^{11} g\text{ s}^{-1}$	(e)

Figura 1.9. Propriedades físicas de HD 209458b e de sua estrela hospedeira. (a) Catálogo exoplanet.eu (b) Brown et al. (2016) (c) exoplanetarchive.ipac.caltech.edu (d) Vidal-Madjar et al. (2003) (e) Bourrier & Lecavelier des Etangs (2013).

Fonte ilustração artística: www.universetoday.com/15545/observing-an-evaporating-extrasolar-planet/



Estrela GJ 436

Classe espectral: M2.5V (anã vermelha)	(a)
Distância: (9.75 ± 0.03) pc - (31.80 ± 0.10) ano-luz	(b)
Constelação de Leão	
Massa: $(0.452 \pm 0.012)M_{\odot}$	(c)
Raio: $(0.464 \pm 0.011)R_{\odot}$	(c)
Temperatura efetiva: (3684 ± 55) K	(c)
Metalicidade [Fe/H]: -0.32 ± 0.12 dex	(d)
Idade: 6.0 ± 5.0 Giga – anos	(c)
$7.41 - 11.05$ Giga – anos	(e)
Sistema planetário: 1 planeta	

Exoplaneta GJ 436b

Descoberto: 2004		Período orbital: (2.643904 ± 0.000005) dias	(g)
Massa: $(23.17 \pm 0.79)M_{\oplus}$	(c)	Excentricidade: 0.150 ± 0.012	(h)
Raio: $4.22^{+0.09}_{-0.10} R_{\oplus}$	(c)	Inclinação: $85.8^{+0.21}_{-0.25}$ graus	(g)
Densidade média: $1.69^{+0.14}_{-0.12} g\text{ cm}^{-3}$	(c)	Método de detecção: Trânsito primário	
Temperatura: (717 ± 35) K	(f)	Método de detecção da massa: Velocidade radial	
Semi-eixo maior: (0.02872 ± 0.00027) UA	(c)	Taxa perda de massa atmosférica: $1.07 \times 10^{10} - 1.60 \times 10^9 g\text{ s}^{-1}$	(i)
		$10^8 - 10^9 g\text{ s}^{-1}$	(j), (k)

Figura 1.10. Propriedades físicas de GJ 436b e de sua estrela hospedeira. (a) Butler et al. (2004) (b) Brown et al. (2016) (c) Torres (2007) (d) Bean et al. (2006) (e) Saffe et al. (2006) (f) Demory et al. (2007) (g) Bean et al. (2008) (h) Drake et al. (2007) (i) Ehrenreich et al. (2011b) (j) Ehrenreich et al. (2015) (k) Parke Loyd et al. (2016)

Fonte ilustração artística: astronoteen.org/exoplanet-comet-or-both/

2. Atmosferas de exoplanetas

2.1. Introdução

Como foi dito no capítulo anterior, a caracterização da atmosfera do exoplaneta através da obtenção de sua composição química e estrutura térmica torna possível a restrição de sua formação e história evolutiva, seu clima e até sua habitabilidade; mesmo quando não seja possível resolver espacialmente o planeta de sua estrela hospedeira. A abordagem observacional para o estudo das atmosferas de exoplanetas é feito principalmente com a espectroscopia de trânsito primário ou de transmissão, e a espectroscopia de trânsito secundário ou de ocultação (Figura 2.1), usando atualmente os instrumentos STIS (Space Telescope Imaging Spectrograph) e WFC3 (Wide Field Camera 3) do telescópio espacial Hubble (HST), e IRAC (Infrared Array Camera) do telescópio espacial Spitzer. A técnica do imageamento direto também permite estudar as atmosferas de exoplanetas, mas é necessário uma alta resolução angular e um alto contraste no infravermelho (por exemplo, Janson et al. 2013).

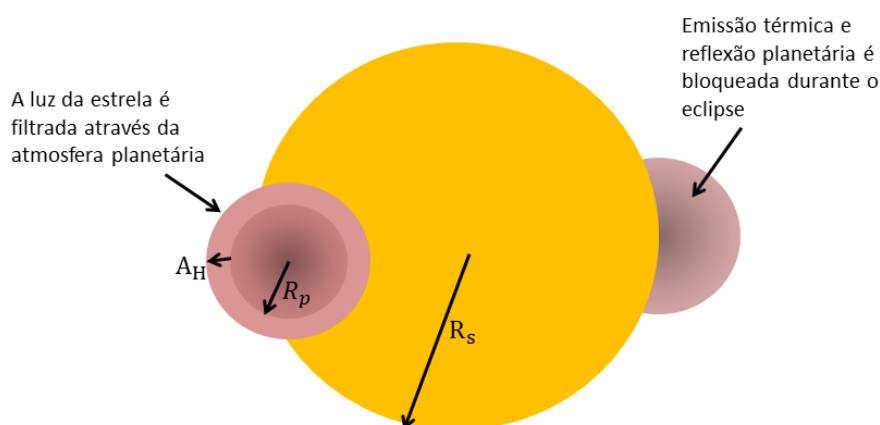


Figura 2.1. Ilustração do trânsito primário e secundário. R_p e R_s são os raios planetário e estelar, respectivamente, e A_H é a extensão radial da atmosfera do planeta.

A ideia-chave na espectroscopia de transmissão é que a profundidade do trânsito planetário, δ , é dependente do comprimento de onda, λ . Geralmente a extensão radial em que a atmosfera se torna opaca aumenta com o aumento da energia dos fótons (Figura 2.2). Na prática, para medir essas variações na profundidade do trânsito com o comprimento de onda, δ_λ , a curva de luz é agrupada em comprimentos de onda em canais espectrofotométricos e a curva de luz de cada canal é ajustada separadamente com um modelo de trânsito. Os modelos teóricos para o espectro de transmissão

requerem o cálculo da transferência radiativa através da atmosfera do planeta (Seager & Sasselov 2000).

Candidatos ideais para a espectroscopia de transmissão devem ter altas temperaturas de equilíbrio, pequenas estrelas hospedeiras, baixa gravidade superficial, e baixa massa molecular média (dominada pelo hidrogênio)³. Nesses casos, a profundidade do trânsito é apenas $\delta_\lambda \sim 0,1\%$. Para planetas tipo Terra, δ_λ esperado é de duas a três ordens de grandeza menor, dependendo do tamanho da estrela hospedeira (Seager 2010).

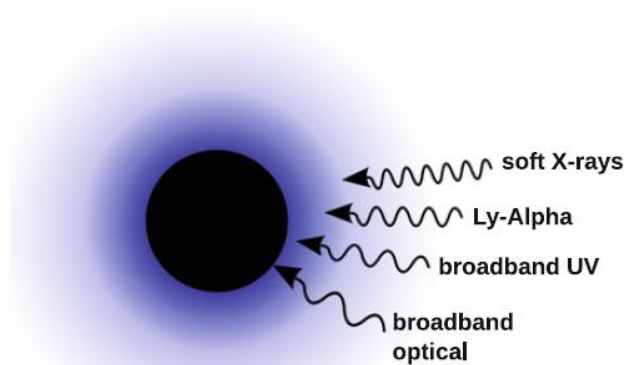


Figura 2.2. Representação esquemática das profundidades de absorção em uma atmosfera de um gigante gasoso quente. Fonte: Lammer & Khodachenko 2015.

Na espectroscopia de ocultação, o objetivo é medir a emissão térmica e o albedo do planeta. O espectro da emissão térmica é útil para conhecer a estrutura de temperatura além da composição atmosférica. Por exemplo, se a temperatura aumenta com a altitude (conhecida como inversão térmica), as características espectrais podem ser vistas em emissão em vez de absorção. O exoplaneta HD 209458b apresenta inversão térmica o que não acontece com GJ 436b (Line et al. 2014).

2.2. Composição atmosférica

A composição atmosférica pode variar muito de planeta para planeta de acordo com o que é conhecido no Sistema Solar, predominando o hidrogênio e o hélio nos gigantes, com quantidades menores de metais (os mais abundantes são oxigênio, carbono, e nitrogênio) (Lodders 2003). Esses principais elementos podem formar espécies químicas como H_2 , H_2O , CO , CO_2 , CH_4 , NH_3 , O_2 e N_2 , dependendo da temperatura, pressão e composição da atmosfera do planeta (Moses et al. 2013a). Muitas destas espécies são facilmente detectáveis devido às suas fortes absorções. Além disso, existem espécies que são menos abundantes, mas detectáveis devido às suas grandes seções de choque de absorção como são os alcalinos (Na e K), e os óxidos de titânio (TiO) e de vanádio (VO).

³ $\delta_\lambda \approx \frac{2A_H R_p}{R_s^2}$, onde $A_H \propto \frac{T_{eq}}{\mu g}$. T_{eq} e g são a temperatura de equilíbrio e a gravidade superficial do planeta, respectivamente, e μ a massa molecular média.

A primeira detecção de uma espécie química exoplanetária foi, conforme mencionado anteriormente, o duplete da linha do sódio em 589 nm no Júpiter quente HD 209458b (Charbonneau et al. 2002). Logo depois, o sódio e o potássio foram detectados em outros Júpiteres quentes (por exemplo, Sing et al. 2011a; Nikolov et al. 2014). O hidrogênio foi detectado através de observações de absorção na linha Ly α estelar com o STIS/HST, revelando extensas exosferas de hidrogênio neutro (H I) ao redor de exoplanetas quentes (por exemplo, Vidal-Madjar et al. 2003; Ehrenreich et al. 2015). Também foram detectados metais neutros e ionizados (por exemplo, O I e C II (Vidal-Madjar et al. 2004); Si III (Linsky et al. 2010); Mg I (Vidal-Madjar et al. 2013)).

A espécie molecular mais detectada é H₂O, como mostra a Tabela 2.1. A maioria das detecções vêm do WFC3/HST no infravermelho próximo (1,1 – 1,7 μ m). As moléculas com carbono são mais difíceis de detectar, principalmente devido à faixa de comprimento de onda acessível com as atuais facilidades de observação. Espera-se que os Júpiteres quentes tenham fortes características de CO no infravermelho próximo. Vários resultados do Spitzer sugerem a absorção de espécies que contêm carbono, mas é difícil identificar claramente qual espécie absorvente está presente (por exemplo, Désert et al. 2009; Stevenson et al. 2010; Madhusudhan et al. 2011; Morley et al. 2017a). As únicas detecções definitivas de CO são de espectroscopia terrestre de alta resolução (de Kok et al. 2013; Brogi et al. 2014).

Moléculas como amônia (NH₃), que é abundante nas atmosferas dos gigantes de gás no Sistema Solar, ainda não foram vistas nos espectros de transmissão de exoplanetas. O problema é que esta molécula é instável a altas temperaturas, sendo mais provável de ser vista em exoplanetas mais frios que os observados até agora. Também, não há evidência definitiva atual para TiO ou VO (por exemplo, Sing et al. 2013; Evans et al. 2016). Estas moléculas são sugeridas em exoplanetas quentes (Fortney et al. 2008).

Os resultados anteriores são para Júpiteres quentes, mas também há poucos resultados para outras classes de exoplanetas; por exemplo, características espectrais de H₂O foram inferidas no espectro de transmissão de dois exoplanetas do tipo Netuno com temperaturas de equilíbrio abaixo de 1100 K (Fraine et al. 2014; Wakeford et al. 2017). No caso de GJ 436b, sua temperatura de equilíbrio \sim 700 K permite que os modelos assumam equilíbrio termoquímico predizendo alta abundância de CH₄ e baixa abundância de CO e CO₂, o que resultaria em uma ocultação mais profunda a 4,5 μ m do que 3,6 μ m. Mas, Stevenson et al. (2010) publicaram o primeiro espectro de emissão térmica deste exoplaneta em 3,6 μ m, 4,5 μ m, 5,8 μ m, 8,0 μ m, 16 μ m, e 24 μ m, descobrindo que sua ocultação era mais profunda a 3,6 μ m do que 4,5 μ m. Eles sugeriram a redução drástica do metano devido à fotodissociação como uma explicação. Modelos consistentes que explicam os resultados de Stevenson et al. (2010) foram desenvolvidos: Madhusudhan & Seager (2011b) encontraram que a atmosfera é melhor ajustada se ela é rica em CO e CO₂, e pobre em CH₄. Line et al. (2011) usaram modelos de desequilíbrio químico, incluindo a fotoquímica, mas não reproduziram a baixa abundância de CH₄ observada. Moses et al. (2013b) descobriram que altas metalicidades atmosféricas (230-1000Z_⊙) favorecem as altas abundâncias de CO e CO₂. Agúndez et al. (2014), tendo em conta a alta excentricidade de GJ 436b, estudaram o efeito do aquecimento de maré na atmosfera e descobriram que o aquecimento e altas metalicidades atmosféricas se ajustam aos dados observacionais.

Morley et al. (2017a) com novas observações de ocultação confirmaram o alto fluxo em $3,6 \mu\text{m}$ comparado com $4,5 \mu\text{m}$. Seus modelos que mais se ajustaram às observações possuem alta metalicidade atmosférica (com melhores ajustes em centenas de vezes a metalicidade solar), aquecimento de maré aquecendo o interior do planeta com temperaturas efetivas ao redor de 300-350 K, e química de desequilíbrio. Por enquanto, não há precisão suficiente para detectar vapor de água com observações de trânsito primário de GJ 436b (Pont et al. 2009; Knutson et al. 2014). Além disso, espécies moleculares nitrogenadas abundantes como NH_3 não foram detectadas na atmosfera de GJ 436b ou sugeridas pelos modelos teóricos para caracterizar as linhas espectrais observadas como é mostrado na Tabela 2.1, mas a alta metalicidade atmosférica sugerida pelos modelos já mencionados (Moses et al. 2013b; Morley et al. 2017a), onde os autores usam modelos de química em equilíbrio contendo também espécies com nitrogênio, justifica o porquê de sua inclusão em nosso trabalho para este Netuno quente.

Tabela 2.1. Exoplanetas com espécies químicas detectadas em sua atmosfera (ou sugeridas pelos modelos). Fonte: catálogo exoplanet.eu com data de 30/03/2018.

Exoplaneta	Espécies químicas	Classe de exoplaneta	Tipo espectral da estrela	Semi-eixo maior (AU)
WASP-12 b	TiO, VO, H ₂ O, O I, CO ₂ , CH ₄ , CO, H ₂ , HCN, C I	Júpiter quente	G0	0,023
WASP-17 b	O I, Na I, C I, K I	Júpiter quente	F4	0,052
WASP-18 b	H ₂ O	Júpiter quente	F6	0,020
WASP-19 b	O I, C I, TiO	Júpiter quente	G8 V	0,016
WASP-31 b	K I	Júpiter quente	F	0,047
WASP-39 b	H ₂ O	Júpiter quente	G8	0,049
WASP-43 b	CH ₄ , NH ₃ , C I, CO, CO ₂ , H ₂ O, O I	Júpiter quente	K7 V	0,015
WASP-49 b	Na I	Júpiter quente	-----	0,038
WASP-52 b	Na I	Júpiter quente	K2 V	0,027
WASP-69 b	Na I	Júpiter quente	K5	0,045
WASP-80 b	CH ₄ , CO, Na I, K I, H ₂ O, He, H I	Júpiter quente	K7 V	0,035
WASP-98 b	TiO, VO	Júpiter quente	G7	0,036
WASP-103 b	Na I, K I	Júpiter quente	F8 V	0,020
WASP-121 b	TiO, H ₂ O, VO	Júpiter quente	F6 V	0,025
HD 189733 b	H ₂ O, O I, CO ₂ , CH ₄ , CO, Na I, H I, C I	Júpiter quente	K1-K2	0,031
HD 209458 b	TiO, O ₂ , VO, H ₂ O, O I, CO ₂ , Mg I, CH ₄ , Na I, CO, K I, H I, H ₂ , C II, HCN, NH ₃ , Si III	Júpiter quente	G0 V	0,047
HD 80606 b	K I	Júpiter quente	G5	0,449
HD 179949 b	CO, H ₂ O	Júpiter quente	F8 V	0,045
HR 8799 b	CH ₄ , H ₂ O, CO	Júpiter frio	A5 V	68,0
HAT-P-1 b	H ₂ O, O I, K I, C I	Júpiter quente	G0 V	0,056
HAT-P-11 b	H ₂ O	Netuno quente	K4	0,053
HAT-P-26 b	H ₂ O	Netuno quente	K1	0,048
GJ 436 b	CH ₄ , H I, CO ₂ , CO, H ₂ O	Netuno quente	M2.5 V	0,029
GJ 504 b	CH ₄	Júpiter frio	G0 V	43,5
GJ 1132 b	O ₂ , H ₂ , N ₂ , CO ₂	Terra quente	M3.5	0,015
XO-1 b	O I, C I	Júpiter quente	G1 V	0,049
XO-2N b	Na I, K I	Júpiter quente	K0 V	0,037
Kappa And b	H ₂ O	Júpiter frio	B9 IV	55,0
Beta Pic b	H I	Júpiter frio	A6 V	13,18
tau Boo b	H ₂ O	Júpiter quente	F6 IV	0,046
Ross 458 (AB) c	CH ₄ , H ₂ O, H ₂ , K I	Júpiter frio	M0.5	1168,0
ROXs 42B b	H ₂ O, CO, K I	Júpiter frio	M0 V	140,0
GU Psc b	CH ₄	Júpiter frio	M3	2000,0
1RXS 1609 b	CO, H ₂ O, K I	Júpiter frio	K7 V	330,0
51 Peg b	CO, H ₂ O	Júpiter quente	G2 IV	0,052
51 Eri b	CH ₄ , H ₂ O	Júpiter frio	F0 IV	14,0
55 Cnc e	HCN, H ₂ O	Superterra quente	K0 IV-V	0,015
2M2236+4751 b	H ₂ O, CO	Júpiter frio	K7	230,0
WISE 0458+6434 b	CH ₄ , H ₂ O	Júpiter frio	T8.5	5,0
TRAPPIST-1 b	H ₂ O	Terra quente	M8	0,011
TRAPPIST-1 c	H ₂ O	Terra quente	M8	0,015
TRAPPIST-1 d	H ₂ O	Subterra aquecida	M8	0,021
TRAPPIST-1 e	H ₂ O	Terra aquecida	M8	0,028
TRAPPIST-1 f	H ₂ O	Terra aquecida	M8	0,037
TRAPPIST-1 g	H ₂ O	Terra aquecida	M8	0,045
TRAPPIST-1 h	H ₂ O	Terra aquecida	M8	0,063

2.3. Razões C/O

A temperatura do disco protoplanetário cai com a distância radial desde a estrela, levando as moléculas a atingir seus pontos de congelamento, começando com H₂O e depois com CO₂ e CO, produzindo as variações nas razões de abundância para gás frente ao material sólido, sendo importantes para teorias de formação e migração planetária (por exemplo, Öberg et al. 2011; Madhusudhan et al. 2014; Ali-Dib 2016).

A razão carbono-oxigênio (C/O) é proposta para caracterizar a abundância atmosférica, já que são elementos importantes para a formação e evolução planetária (Madhusudhan 2012). Alguns estudos de Júpiteres quentes em trânsito parecem apresentar uma baixa abundância de H₂O atmosférico em relação com CO e/ou CH₄, e outros parecem ser suficientemente ricos em carbono em relação com os padrões solares (Moses et al. 2013a). Moses et al. (2013a) mostraram a partir de modelos, que a composição atmosférica dos Júpiteres quentes pode mudar drasticamente em função da razão C/O: quando C/O < 1, moléculas como H₂O e CO₂ são muito mais abundantes, e quando C/O > 1, moléculas como CH₄, C₂H₂ (acetileno), HCN (cianeto de hidrogênio) se convertem nas mais abundantes. Em ambos os casos, CO é também uma espécie abundante. Line et al. (2014) usando algoritmos de modelagem determinaram a faixa de temperaturas e abundâncias químicas que eram consistentes com as observações de trânsito secundário para 9 exoplanetas. Eles encontraram um valor de C/O = 1 para HD 209458b, GJ 436b e WASP-43b, e valores C/O ≤ 1 (melhor ajuste) nos outros Júpiteres quentes como mostra a Tabela 2.2. Brewer et al. (2017) investigaram como são as razões C/O de Júpiteres quentes comparado com as razões C/O de suas estrelas hospedeiras, encontrando valores $(C/O)_{planeta}/(C/O)_{estrela} > 1$ e valores $(C/O)_{planeta}/(C/O)_{estrela} < 1$. Para HD 209458b encontraram um valor $(C/O)_{planeta}/(C/O)_{estrela} = 2,2$.

Tabela 2.2. Razões C/O de 9 exoplanetas, onde 8 são Júpiteres quentes. Fonte: Line et al. 2014

Exoplaneta	C/O (melhor ajuste)	C/O (Intervalo de confiança de 68 %)
HD 189733b	0,85	0,47 – 0,90
HD 209458b	1,00	1,00 – 1,00
GJ 436b	1,00	0,50 – 1,00
HD 149026b	0,55	0,45 – 1,00
WASP-12b	0,51	0,30 – 1,00
WASP-19b	0,99	0,26 – 6,33
WASP-43b	1,00	0,50 – 1,00
TrES-2b	0,20	0,021 – 8,25
TrES-3b	0,22	0,0004 – 0,97

Moses et al. (2013b) estudaram uma diversidade de composições atmosféricas em Netunos quentes com o objetivo de explicar os resultados observacionais de Stevenson et al. (2010). Os autores demonstraram que usando um modelo de desequilíbrio químico assumindo metalicidade atmosférica de $300Z_{\odot}$ e C/O = 0,6, o espectro de emissão térmica sintético para GJ 436b se ajusta melhor aos dados do espectro observacional de Stevenson et al. (2010) em comparação com um modelo que assume uma composição solar.

Neste trabalho será usada uma faixa de valores de C/O nas simulações, para estudar suas implicações na formação molecular ao longo da perda de massa atmosférica de GJ 436b e HD 209458b.

2.4. Metalicidade

As atmosferas dos planetas gigantes não assumem a composição de suas estrelas hospedeiras. Por exemplo, Júpiter, Saturno, Urano e Netuno têm metalicidades $\sim 4, 10, 80,$ e 80 vezes a metalicidade solar, respectivamente (Wong et al. 2004; Fletcher et al. 2009). A determinação da metalicidade da atmosfera planetária ajuda a dar informação sobre a formação e a migração do planeta, já que esta metalicidade depende da química do disco protoplanetário, o lugar onde o planeta acretoou, a composição do gás e sólidos acretoados, as propriedades (tamanho, resistência) dos corpos acretoados como planetesimais ou pebbles, a interação entre o interior e a atmosfera do planeta, etc.

Os estudos sobre a metalicidade em estrelas com planetas não é recente. Por exemplo, Gonzalez (1997) a partir de observações espectroscópicas em estrelas hospedeiras dos primeiros quatro planetas extrassolares detectados, conclui que as metalicidades dessas quatro estrelas (ν And, τ Boo, ρ 55 Cnc, 51 Peg) não são representativas das nuvens interestelares originais a partir das quais elas se formaram, mas, sim, são o resultado de um cenário de poluição (pela ingestão de material planetário) durante o tempo inicial de formação planetária. Fisher & Valenti (2005), baseados em uma amostra de 850 estrelas dos tipos F-G-K, encontraram que para $[\text{Fe}/\text{H}] > +0,3$ dex, 25 % das estrelas observadas têm planetas gigantes gasosos. Concluem que aquelas estrelas com planetas extrassolares não possuem uma assinatura de poluição que as distingue de outras estrelas; mas provavelmente, elas simplesmente nascem em nuvens moleculares com alta metalicidade. Um estudo feito por Schlaufman & Laughlin (2011), mostrou que os planetas gigantes são mais abundantes em torno das estrelas com alta metalicidade em comparação com a solar (ver Figura 2.3); mas, a relação não ficou clara no caso de planetas pequenos ($M < 10M_{\oplus}$) ao redor de estrelas do tipo G.

Mais recentemente, Thorngren et al. (2016) encontraram, a partir de uma amostra de 47 exoplanetas gigantes ($20M_{\oplus} < M < 20M_{\text{Jupiter}}$) em trânsito, uma correlação entre a massa de metais planetária, M_z , e a massa total do planeta, M , aproximadamente da forma $M_z \propto \sqrt{M}$, de tal maneira que a metalicidade planetária, Z_p , é proporcional a $1/\sqrt{M}$, sendo consistente com o modelo de acreção de núcleo de formação planetária.

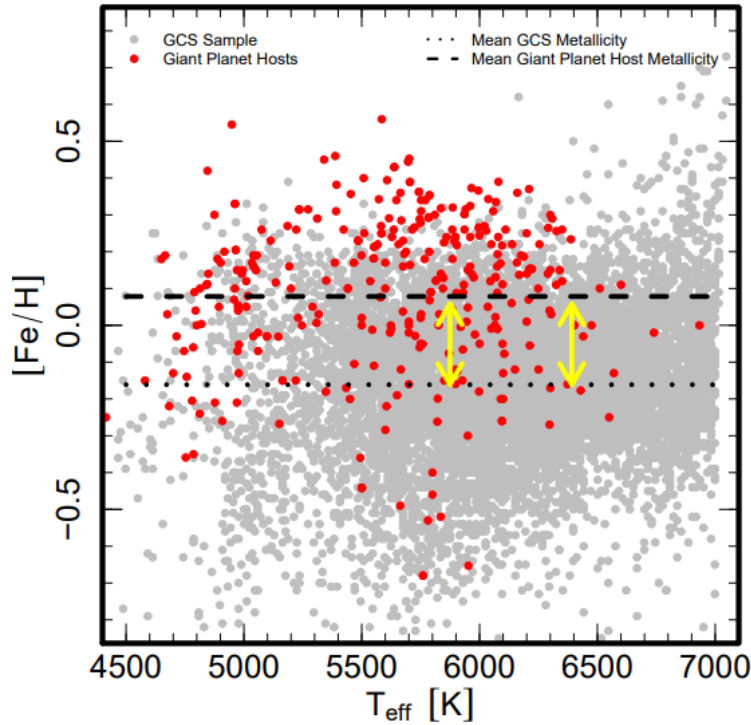


Figura 2.3. Gráfico de metalicidade vs temperatura efetiva para uma amostra de $\sim 10\,000$ estrelas ($d < 20$ pc) do GCS (Geneva-Copenhagen Survey), onde é apresentada a distribuição de estrelas hospedeiras de planetas gigantes (cor vermelho). Fonte: Schlafman & Laughlin (2011).

Como já foi dito nas seções anteriores, para explicar os resultados observacionais de Stevenson et al. (2010) sobre as altas abundâncias de CO e CO₂ na atmosfera de GJ 436b, foram desenvolvidos modelos de desequilíbrio termo-químico onde os melhores espectros sintéticos de emissão térmica correspondem à modelos assumindo metalicidade atmosférica de $300Z_{\odot}$ com C/O = 0,6 (Moses et al. 2013b), e $\sim 10Z_{\odot}$ com C/O entre $\sim 0,85$ e 1,0 (Madhusudhan & Seager 2011). Lothringer et al. (2018) usando o STIS/HST, analisaram o espectro de transmissão no óptico de GJ 436b sem encontrar evidência clara de absorção de elementos alcalinos, mas conseguiram limitar os modelos de Morley et al. (2017a) sobre as fontes de opacidade na atmosfera deste Netuno quente. Seus resultados mostraram que não é possível diferenciar entre cenários de muita alta metalicidade sem nuvens, e cenários de baixa metalicidade com nuvens. Os dois modelos de Morley et al. (2017a) que se ajustaram com as observações apresentam metalicidade $100Z_{\odot}$ (com nuvens) e $1000Z_{\odot}$ (sem nuvens).

No caso de HD 209458b, ele está bem caracterizado e tem sido alvo de vários modelos de desequilíbrio químico, tais como Liang et al. (2003), Zahnle et al. (2009), Moses et al. (2011), Venot et al. (2012), Agúndez et al. (2014b), Lavvas et al. (2014), Rimmer & Helling (2016). Todos esses modelos usaram metalicidade solar e alguns deles estudaram casos com metalicidade $0,1Z_{\odot}$, $5Z_{\odot}$, $10Z_{\odot}$ e até $25Z_{\odot}$. Além da metalicidade solar, nosso trabalho vai explorar cenários com metalicidades maiores (baseados na literatura já mencionada) para saber como é sua influência na formação molecular ao longo da perda de massa atmosférica de GJ 436b e HD 209458b.

2.5. Opacidade

A opacidade é a grandeza mais importante na atmosfera afetando a transferência de radiação. Ela descreve a dificuldade da radiação para passar através de um material, sendo dependente da densidade numérica das partículas na atmosfera, e suas propriedades de absorção, espalhamento e emissão (as quais dependem da temperatura, pressão, e comprimento de onda). Para quantificar a opacidade, são usados os coeficientes de absorção e espalhamento, cuja soma define o coeficiente de extinção (Seager 2010).

As nuvens⁴, a névoa seca (haze)⁵ e os aerossóis⁶ contribuem como fontes de opacidade nas atmosferas planetárias, sendo o espectro de transmissão sensível à presença deles, já que bloqueiam a transmissão de fluxo estelar e espalham a radiação incidente em comprimentos de onda no visível, o que introduz um aumento (em direção ao azul) na profundidade do trânsito (por exemplo, Pont et al. 2008; Lecavelier des Etangs et al. 2008a,b; Sing et al. 2011b, 2013; Dragomir et al. 2015). No momento, a composição química dessas fontes de opacidade não é conhecida nos exoplanetas. Na teoria, as possibilidades incluem nuvens de água, sais, sulfuretos, ou silicatos (dependendo da temperatura) e névoa seca ou aerossóis fotoquímicos, por exemplo, a fuligem de hidrocarbonetos formada a partir da fotólise do metano (Miller-Ricci Kempton et al. 2012; Morley et al. 2013; Wakeford et al. 2017b; Lavvas & Koskinen 2017; Ohno & Okuzumi 2018).

No caso de GJ 436b e HD 209458b, não há informação suficiente para poder dizer que as fontes anteriores de opacidade sejam as principais responsáveis pela extinção dos fótons da estrela hospedeira quando atravessam a camada atmosférica planetária em escape. O mais provável é que a auto-blindagem (self-shielding⁷) do hidrogênio neutro (a espécie mais abundante) seja a principal fonte de opacidade nesse cenário de formação molecular (além dos sinais de alta metalicidade em GJ 436b). Portanto, a estimativa da extinção no visível, A_V , será conservativa, já que uma estimativa precisa não é possível. Isso significa que seu efeito nos resultados será estudado. No cálculo de A_V será usado a seguinte relação (Wakelam et al. 2013):

$$A_V = \frac{N_{\text{HI}}}{1.6 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}} \quad (2.1)$$

com

$$N_{\text{HI}} = \int_{z_{\text{inicial}}}^{z_{\text{final}}} n_{\text{HI}} dz \quad (2.2)$$

sendo N_{HI} e n_{HI} as densidades colunar [cm^{-2}] e numérica [cm^{-3}], respectivamente, do hidrogênio neutro, e z a altitude.

⁴ Massa de partículas líquidas ou sólidas suspensas em uma atmosfera planetária.

⁵ Partículas muito pequenas e opacas suspensas na atmosfera, diminuindo a visibilidade e contribuindo para a cor. Elas são quase sempre produzidas fotoquimicamente.

⁶ Partículas suspensas na atmosfera. Inclui fumaça, poluentes, bactérias e até mesmo partículas de nuvens.

⁷ Todos os fótons que podem levar à fotodissociação são absorvidos pelo H I nas camadas externas da atmosfera em escape protegendo as espécies químicas que estão dentro daquela camada.

3. Perda de massa atmosférica em gigantes quentes

3.1. Introdução

O fato da presença de planetas gigantes (tipo Júpiter e Netuno) em distâncias orbitais menores ou iguais a 0,1 UA, onde são expostos à intensa radiação ultravioleta e raios-X que depositam quantidades significativas de energia nas camadas superiores da atmosfera planetária, deu início ao estudo sobre a estrutura das suas atmosferas superiores e à sua estabilidade contra o escape atmosférico (Guillot et al. 1996).

O escape atmosférico envolve três etapas principais: o transporte de gases desde a camada atmosférica inferior até a superior onde o escape pode acontecer, a conversão do gás atmosférico (geralmente em forma molecular) para a forma de escape (geralmente atômico ou iônico), e o próprio processo de escape que pode ser térmico (hidrostático ou hidrodinâmico) e/ou não térmico. No caso térmico, a irradiação da estrela aquece a atmosfera planetária permitindo o escape, enquanto na situação não térmica o escape dos átomos ou moléculas é devido pelas interações iônicas ou reações químicas (por exemplo, a transferência de carga, recombinação dissociativa, ou sputtering).

Lammer et al. (2003) foram os primeiros que mostraram que uma termosfera⁸ rica em hidrogênio de um Júpiter quente será aquecida a temperatura até 10 000 – 20 000 K pela influência da radiação ultravioleta extrema (EUV) e raios-X da estrela hospedeira, de modo que as condições hidrostáticas não serão mais válidas e a termosfera expandirá dinamicamente devido ao gradiente de pressão gerado, sendo suscetível a escape hidrodinâmico (também chamado “blow-off”), onde espécies contendo elementos pesados, tais como C, N, e O, e que não têm a energia cinética suficiente para o escape, podem ser arrastadas pelo fluxo do hidrogênio.

Lecavelier des Etangs et al. (2004) argumentaram que devido às altas temperaturas o nível da base da exosfera (exobase⁹) pode alcançar o lóbulo de Roche (o último equipotencial gravitacional ao redor do planeta além do qual os equipotenciais incluem

⁸ Camada da atmosfera superior onde a absorção de radiação EUV e raios-X estelar causa um aumento da temperatura com a altitude.

⁹ A altitude acima da qual a integral do produto da seção de choque colisional (σ) com a densidade numérica (N), de uma espécie em alta velocidade, é igual a um caminho livre.

a estrela). Sua localização r desde o centro do planeta corresponde aos pontos de Lagrange L_1 (entre planeta-estrela) e L_2 (mais longe da estrela do que o planeta):

$$r_{L_1, L_2} = \left(\beta \mp \frac{\beta^2}{3} \right) a_P$$

com

$$\beta = \left(\frac{M_{pl}}{3M_*} \right)^{1/3}$$

onde a_P é a distância entre o planeta e a estrela, e M_* e M_{pl} são as massas da estrela e o planeta, respectivamente (Jaritz et al. 2005).

Uma grandeza física importante no estudo do escape hidrodinâmico é a taxa de perda de massa atmosférica que pode ser expressa como (Bourrier et al. 2015b):

$$\dot{M} = \eta \frac{3}{4} \frac{F_{X/EUV}(1 \text{ UA})}{G a_P^2 \bar{\rho} K_{maré}} \quad (3.1)$$

com

$$K_{maré} = 1 - \frac{3}{2\xi} + \frac{1}{2\xi^3}$$

sendo

$$\xi = \left(\frac{M_{pl}}{3M_*} \right)^{1/3} \frac{a_P}{R_{pl}}$$

onde $\bar{\rho}$ é a densidade média do planeta, $F_{X/EUV}(1 \text{ UA})$ é o fluxo XUV (EUV + raios-X) por unidade de área a 1 UA da estrela, a_P é a distância estrela-planeta no centro do trânsito, $K_{maré}$ (sendo menor que 1) é o fator de correção produto da contribuição da força de maré estelar (Erkaev et al. 2007), e η é a eficiência do aquecimento na termosfera do exoplaneta. η especifica a fração de energia radiativa que chega a termosfera e é convertida em energia cinética, já que certa fração dessa energia é usada para ionizações e, além disso, as recombinações (dissociativa e radiativa) e as excitações colisionais causam um resfriamento radiativo que também reduz a energia disponível. η também inclui a fração da energia dos fóton-elétrons (elétrons livres com alto momento) que aquecem a termosfera. Valores de η foram assumidos dentro de $\sim 10 - 100 \%$, por exemplo, Lammer et al. (2003), Lecavelier des Etangs (2004, 2007) e Sanz-Forcada et al. (2010, 2011) assumiram um valor de 100%. As estimativas teóricas mais recentes de η estão entre 10% e 20% (por exemplo, Lammer et al. 2013; Shematovich et al. 2014; Owen & Alvarez 2016).

3.2. As observações

O Júpiter quente HD 209458b, além de ser o primeiro exoplaneta em trânsito observado, também apresentou a primeira evidência da existência de uma atmosfera

superior estendida de hidrogênio neutro (H I) que rodeia um exoplaneta (Vidal-Madjar et al. 2003). Vidal-Madjar et al. (2003) observaram o trânsito primário de HD 209458b com o instrumento STIS/HST e descobriram uma absorção na faixa 1215,15 – 1216,10 Å de $15 \pm 4\%$ (1σ) na linha Ly α do H I estelar que corresponde $\sim 4 R_p$ em um intervalo de tempo de 4 horas, sendo maior do que o esperado a priori para uma atmosfera de um planeta ocultando somente 1,5% da estrela. A Figura 3.1 mostra os perfis Ly α do H I observados de HD 209458 desse trabalho.

Embora a pequena distância (8,5 raios estelares) entre o planeta e a estrela resulte num lóbulo de Roche estendido com um limite em cerca de 2,7 raios planetários (3,6 raios de Júpiter), o preenchimento deste lóbulo dá uma absorção máxima de cerca de 10 % durante o trânsito planetário. Portanto, eles concluíram que os átomos H I devem estar escapando da atmosfera planetária com velocidades entre -130 km s^{-1} e 100 km s^{-1} . As simulações de partículas feitas por eles (onde os átomos de H I foram assumidos sensíveis à pressão de radiação estelar dentro e fora do lóbulo de Roche) mostrou uma taxa de perda de massa atmosférica de 10^{10} g s^{-1} , para explicar a intensidade da absorção observada.

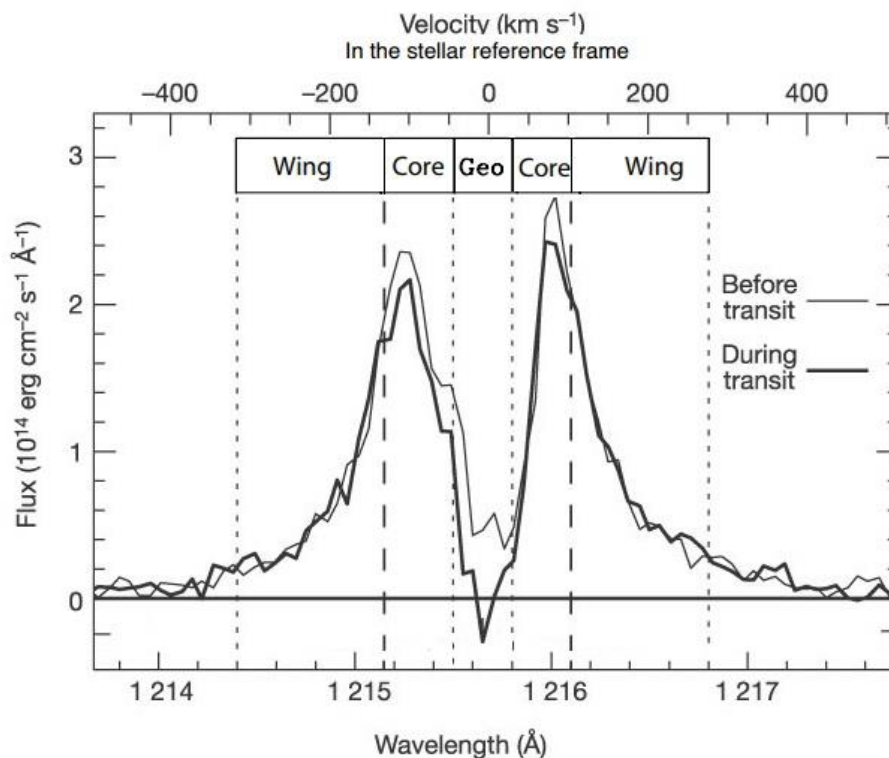


Figura 3.1. Os perfis Ly α de HD 209458 observados por Vidal-Madjar et al. (2003) antes e durante o trânsito planetário. As duas linhas tracejadas verticais definem os limites $\lambda_1 = 1215,15 \text{ \AA}$ e $\lambda_2 = 1216,10 \text{ \AA}$ onde ocorre a absorção planetária do H I. A parte central da linha (“Geo”) possivelmente perturbada pela emissão geocoronal foi omitida da análise. As asas da linha foram usadas como uma referência de fluxo para corrigir as variações intrínsecas do Ly α estelar.

Logo depois, Vidal-Madjar et al. (2004) com observações na faixa 1180 – 1710 Å usando o STIS/HST, descobriram que a atmosfera superior que envolve o planeta incluía não apenas átomos de hidrogênio, mas também as espécies O I e C II com

absorções de $13 \pm 4,5 \%$ ($2,6\sigma$) e $7,5 \pm 3,5 \%$ ($2,1\sigma$), respectivamente. As detecções anteriores forneceram informações sobre o tipo de mecanismo de escape envolvido.

Linsky et al. (2010) usando o instrumento COS (Cosmic Origins Spectrograph) no HST, encontram absorções de $7,8 \pm 1,3 \%$ e $8,2 \pm 1,4 \%$ nas linhas C II (1334,5323 Å e 1335,6854 Å) e Si III (1206,500 Å), respectivamente, na faixa de velocidade -50 km s^{-1} até 50 km s^{-1} durante o trânsito de HD 209458b. Além disso, eles concluem que a taxa de perda de massa atmosférica do exoplaneta está na faixa $(8 - 40) \times 10^{10} \text{ g s}^{-1}$, assumindo que a abundância de carbono é solar. Também o Mg I (2852,9641 Å) foi detectado (absorção de $6,2 \pm 2,9 \%$ na faixa de velocidade -62 km s^{-1} até -19 km s^{-1}) na atmosfera superior do exoplaneta a uma distância de vários raios planetários (até 7,5 raios planetários) e com uma taxa de escape estimada de $\sim 3 \times 10^7 \text{ g s}^{-1}$, sendo assumido uma abundância solar na simulação numérica (Vidal-Madjar et al. 2013). Devido ao fato de que o magnésio é muito mais pesado do que o hidrogênio, o escape desta espécie confirmou os estudos prévios de que a atmosfera do planeta HD 209458b está passando por um escape hidrodinâmico.

Entre 2007-2008, a estrela HD 189733 foi observada com o Solar Blind Camera (ACS) do HST, devido a uma falha do STIS/HST em 2004. As observações de trânsito do Júpiter quente HD 189733b mostraram uma diminuição de $5,05 \pm 0,75 \%$ ($\sim 2,5\sigma$) de toda a curva Ly α do H I estelar (Lecavelier des Etangs et al. 2010), sendo superior à redução de 2,4 % pelo disco planetário. Isso foi interpretado como o resultado do escape de H I da atmosfera superior do planeta com uma taxa de 10^{10} g s^{-1} de acordo com as simulações numéricas. No entanto, a resolução espectral limitada dos dados ACS/HST nos comprimentos de onda do ultravioleta distante (em 1215,67 Å) implicou que não poderia ser feita nenhuma conclusão sobre as velocidades radiais do gás escapando. Portanto, a detecção exigiu mais observações.

No ano 2010, o trânsito de HD 189733b foi observado com o instrumento reparado STIS/HST, mas foi detectada uma absorção não significativa de $2,9 \pm 1,4 \%$ na linha Ly α do H I (Lecavelier des Etangs et al. 2012). Então, para abordar a questão dessas variações, novas observações de trânsito do planeta foram feitas no ano 2011, onde uma forte absorção na linha Ly α de $12,3 \pm 3,7 \%$ foi encontrada entre -230 km s^{-1} até -140 km s^{-1} (Bourrier et al. 2013). Por ser HD 189733 uma estrela ativa (Sanz-Forcada et al. 2011), pode-se pensar que a atividade estelar poderia ter sido a fonte dessa variabilidade na absorção. Entretanto, para os autores esse não pode ser o motivo porque a variação foi observada apenas dentro de uma faixa de comprimento de onda muito específico, durante o trânsito do planeta. Para eles, a causa da variabilidade temporal no espectro da absorção na linha Ly α na atmosfera superior deve estar em um mecanismo de aceleração adicional (além da aceleração da pressão de radiação) nos átomos de H I, como as interações com prótons do vento estelar (Bourrier & Lecavelier des Etangs 2013). Ben-Jaffel & Ballester (2013) reportaram absorção de $\sim 6,4 \pm 1,8 \%$ na linha O I (1302 Å) e possível detecção de absorção em C II (1335 Å) durante o trânsito e pré-trânsito com os dados do COS/HST.

Existem indícios de que um fenômeno semelhante de perda de massa atmosférica acontece no exoplaneta 55 Cancri b (Ehrenreich et al. 2012), sendo o primeiro do tipo Júpiter que não está orbitando sua estrela a uma distância menor ou igual a 0,1 UA, sendo chamado de Júpiter aquecido. As observações com o STIS/HST mostraram uma

absorção Ly α estelar de $7,5 \pm 1,8 \%$ ($4,2\sigma$) na faixa entre 1215,36 Å e 1215,67 Å (ou entre $-76,5 \text{ km s}^{-1}$ e 0 km s^{-1}). A taxa de H I escapando foi estimada de 2 até 3 ordens de grandeza inferiores às conhecidas para os Júpiteres quentes HD 209458b e HD 189733b. Os autores concluem que observações adicionais em Ly α e outras linhas são necessárias para confirmar o resultado.

É claro que a abundância de hidrogênio torna a linha de emissão Ly α atraente para observar, mas a variabilidade temporal e espacial da emissão Ly α estelar é um fator que complica a análise. Por esse motivo, Fossati et al. (2010) observaram a estrela WASP-12 no UV Próximo (NUV), onde existem muitas linhas de ressonâncias (por exemplo: Na I, Al I, Sc II, Mn II, Fe I, Mg I e Co I), incluindo as fortes linhas de ressonância do Mg II, usando o COS/HST em três faixas de comprimento de onda no NUV: NUVA (2539 – 2580 Å), NUVB (2655 – 2696 Å), e NUVC (2770 – 2811 Å), durante o trânsito primário do altamente irradiado Júpiter quente WASP-12b.

Os resultados mostraram a detecção de absorção nas faixas NUVA, NUVB e NUVC, implicando um raio planetário de $2,69 \pm 0,24 R_J$, $2,18 \pm 0,18 R_J$, e $2,66 \pm 0,22 R_J$, respectivamente. Esses resultados foram evidências de que o exoplaneta WASP-12b é cercado por uma atmosfera superior estendida que enche o lóbulo de Roche do planeta, provavelmente composta por uma série de elementos e íons, incluindo possivelmente Na I, Mg I, Mg II com forte absorção, Al I, Sc II, Mn II, Fe I, e Co I. Eles também observaram que a curva de luz de trânsito do exoplaneta no NUV mostrou uma entrada antecipada quando foi comparada ao seu trânsito no óptico. Tais observações indicaram a presença de assimetrias na atmosfera superior do planeta. Vidotto et al. (2010, 2011a,b) sugeriram que essa assimetria poderia ser explicada pela presença de um choque em arco (bow shock) ao redor da magnetosfera do planeta (ver Figura 3.2). O mesmo fenômeno é sugerido por Bourrier et al. (2013) para explicar as observações na linha Si III, e na linha N V em 1242.8 Å no exoplaneta HD 189733b.

Ehrenreich & Désert (2011) compararam a energia potencial gravitacional do planeta com a energia XUV estelar depositada na atmosfera de WASP-12b e estimaram uma taxa de perda de massa atmosférica de $2,5 \times 10^{11} \text{ g s}^{-1}$. Haswell et al. (2012) detectaram absorção no Fe II (2586 Å) na atmosfera superior estendida de WASP-12b.

Além dos Júpiteres quentes e aquecidos, seus contrapartidas menos massivos (os chamados Netunos quentes e aquecidos) também proporcionam uma oportunidade para estudar as atmosferas estendidas. Kulow et al. (2014) fizeram o primeiro estudo de trânsito no UV distante de um Netuno quente, neste caso GJ 436b usando os dados do STIS/HST durante o trânsito em dezembro de 2012, na faixa de 1194 Å até 1249 Å com uma resolução espectral de cerca de 25 km s^{-1} ; detectando uma absorção na linha Ly α de $8,8 \pm 4,5 \%$ na metade do trânsito, correspondente a um disco opaco equivalente de $3,6 R_p$; ou seja, menor do que o raio do lóbulo de Roche do planeta ($\sim 6 R_p$). Além disso, detectaram uma forte absorção de $22,9 \pm 3,9 \%$ (1σ) no Ly α após o trânsito planetário. Os autores confirmaram que o resultado não era uma flutuação estatística, e mostraram que era improvável ser o produto de uma variabilidade estelar. A explicação mais provável para eles é que GJ 436b tem uma cauda (tipo cometa) de hidrogênio neutro. A taxa de perda de massa atmosférica calculada foi entre $3,7 \times 10^6 \text{ g s}^{-1}$ e $1,1 \times 10^9 \text{ g s}^{-1}$, correspondendo a um tempo de $4 \times 10^{11} - 2 \times 10^{14}$ anos para a perda completa da camada atmosférica, supondo que a

estrutura de GJ 436b seja semelhante à de Netuno, e a atmosfera entre o 5 – 15 % da massa do planeta (Guillot 1999).

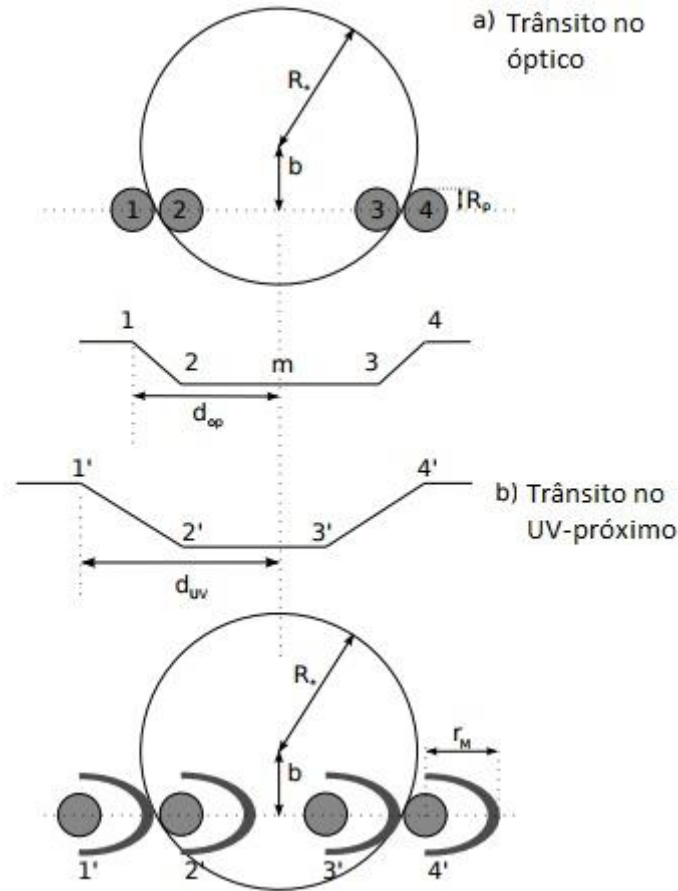


Figura 3.2. Ilustração das curvas de luz obtidas para WASP-12b de observações no a) óptico e b) UV-próximo, onde o choque em arco que rodeia a magnetosfera do planeta também é capaz de absorver radiação estelar. Fonte: Vidotto et al. (2011b).

Análises adicionais foram feitas a partir das observações de trânsito de GJ 436b obtidas nos anos 2013 e 2014 com o instrumento STIS/HST na faixa 1195 – 1248 Å e resolução espectral de $\sim 20 \text{ km s}^{-1}$ (Ehrenreich et al. 2015). Os resultados revelaram que a absorção mais notável no UV acontece entre as velocidades radiais -120 km s^{-1} até -40 km s^{-1} , antes, durante e depois do trânsito no óptico (ver Figura 3.3). Durante o trânsito a absorção foi $56,3 \pm 3,5 \%$ (1σ) que corresponde $\sim 9 R_p$, muito além da absorção de 0,69 % no trânsito óptico. Até agora, essa absorção de trânsito no UV de GJ 436b é a maior absorção em comparação com os outros exoplanetas do tipo Júpiter que apresentam perda de massa atmosférica detectada (ver Figura 3.4), e maior também que a absorção de $22,9 \pm 3,9 \%$ após do trânsito de GJ 436b relatado em Kulow et al. (2014). A simulação numérica 3D feita pelos autores, mostraram uma taxa de perda de massa atmosférica de cerca de $10^8 - 10^9 \text{ g s}^{-1}$, considerando a excentricidade orbital de GJ 436b ($e = 0,15$), fazendo que os perfis de temperatura, velocidade e densidade da atmosfera superior variem ao longo do tempo orbital.

Novas observações (uma no ano 2015 e três no ano 2016 com o STIS/HST) e análise na linha Ly α de GJ 436 foram efetuadas (Lavie et al. 2017). Os autores detectaram o trânsito de GJ 436b no UV com uma duração entre 10h a 25h, o que corresponde a uma cauda de H I com tamanho entre 5×10^6 km e 12×10^6 km. O resultado confirmou as observações de Ehrenreich et al. 2015, e sua interpretação (Bourrier et al. 2015, 2016). Além disso, detectaram absorção na linha Si III; porém, mais observações são necessárias para confirmar ou descartar seu relacionamento com a atividade estelar. Parke Loyd et al. (2017) não encontraram evidência de absorção no trânsito de GJ 436b na linha C II 1334 – 1335 Å e Si III 1206 Å com as observações feitas pelo COS/HST.

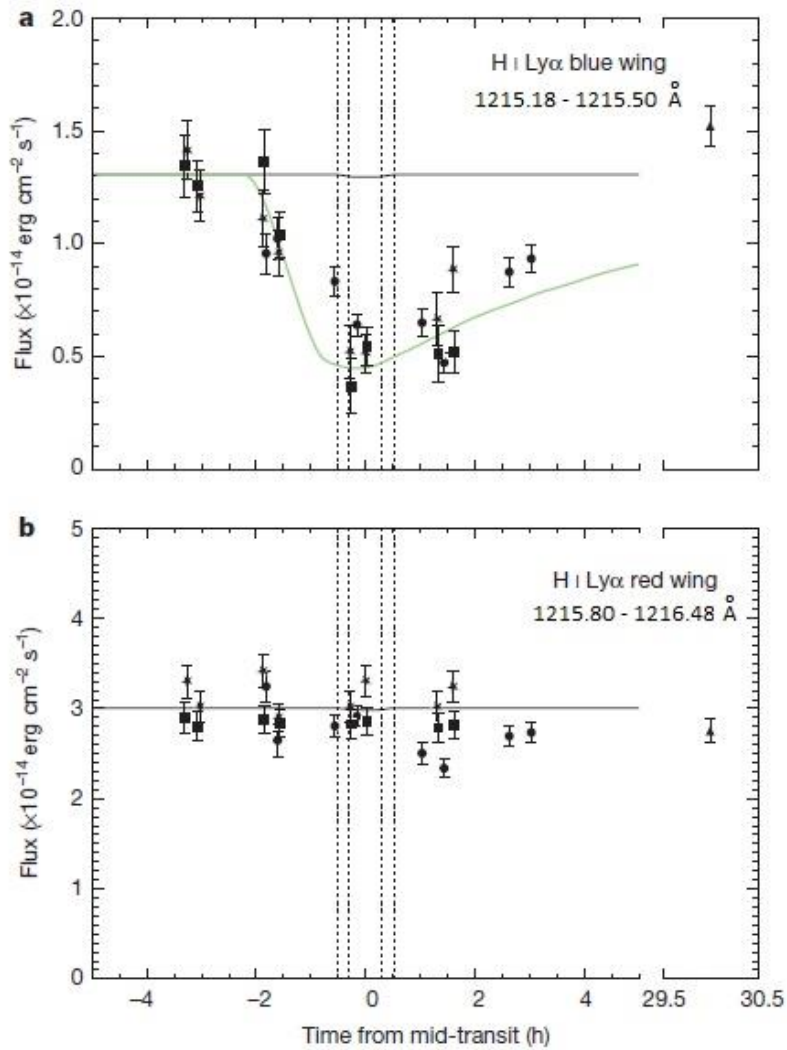


Figura 3.3. Curvas de luz Ly α do trânsito de GJ 436b. Os dados nos gráficos **a** e **b** são observações feitas no ano 2012 (Kulow et al. 2014) (círculos), 2013 (estrelas), 2014 (quadrados) e 2010 (triângulos). Todas as incertezas são 1σ . **a)** A linha Ly α é integrada na faixa $[-120, -40]$ km s $^{-1}$ e mostra significantes sinais de absorção de $17,6 \pm 5,2\%$ (pré-trânsito), $56,2 \pm 3,6\%$ (em-trânsito) e $47,2 \pm 4,1\%$ (pós-trânsito). **b)** A linha é integrada na faixa $[+30, +200]$ km s $^{-1}$ e não apresenta sinais de absorção notáveis: $0,7 \pm 3,6\%$ (pré-trânsito), $1,7 \pm 3,5\%$ (em-trânsito) e $8,0 \pm 3,1\%$ (pós-trânsito). A curva de luz (verde) é produto da simulação numérica 3D feita pelos autores. As observações revelaram a presença de uma atmosfera superior estendida de H I que transita a estrela por mais de 5 horas. As diferentes fases da curva de luz no óptico ($\delta = 0,69\%$) são mostradas (linhas pontilhadas). Fonte: Ehrenreich et al. 2015.

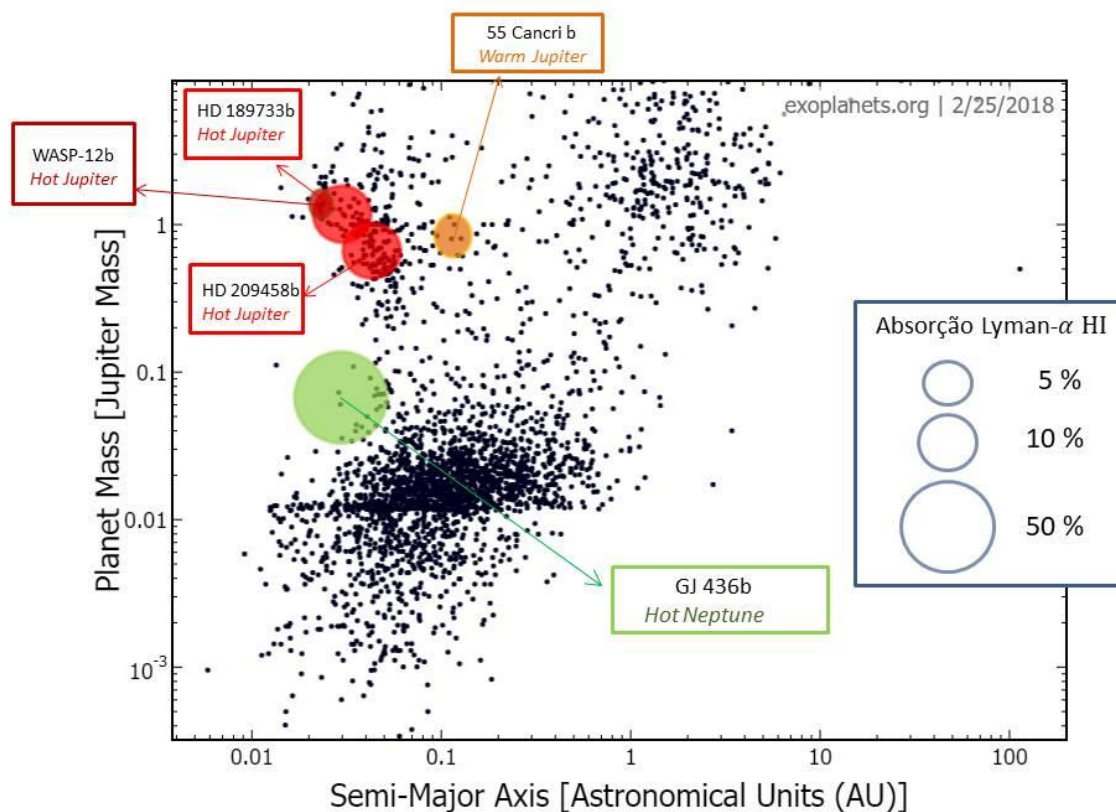


Figura 3.4. Gráfico ilustrativo apresentando os exoplanetas com perda de massa atmosférica detectada até a data de 25/02/2018, e a porcentagem de absorção na linha $Ly\alpha$ do H I (círculos). Fonte: Adaptado de http://www.laeff.cab.intacsic.es/users/barrado/0_CHEOPS2015/Bourrier_Evaporating_CHEOPS_Madrid2015.pdf

3.3. A teoria

As observações de trânsito em alta resolução no UV forneceram uma oportunidade única para testar modelos de exosferas estendidas, revelando que ela é formada pela interação com a estrela hospedeira por meio da fotoionização, pressão de radiação e interação do vento estelar (por exemplo, Holmström et al. 2008; Ekenbäck et al. 2010; Bourrier & Lecavelier des Etangs 2013; Ben-Jaffel & Ballester 2013; Bourrier et al. 2014; Kislyakova et al. 2014a; Guo & Ben-Jaffel 2016; Schneiter et al. 2016; Bourrier et al. 2016; Chadney et al. 2017; Cherenkov et al. 2018, Villarreal et al. 2018). Além disso, os modelos também estudaram os processos não térmicos (geralmente se referem a processos de colisão entre espécies carregadas que produzem átomos energéticos) que podem afetar o escape atmosférico, por exemplo, as reações envolvendo elétrons supratérmicos¹⁰ (por exemplo, Ionov et al. 2017), as reações de troca de carga¹¹ (por exemplo, Tremblin & Chiang 2013; Christie et al. 2016), e o escape de íons pela interação com o campo magnético planetário (por exemplo, Tanaka et al. 2014; Khodachenko et al. 2015; Arakcheev et al. 2017), já que na presença de um campo

¹⁰ O fóton-elétron com excesso de energia cinética (elétron supratérmico) participa em reações que levam à ionização e excitação de outras espécies.

¹¹ Envolve uma colisão entre um íon e um átomo, onde o excesso de energia do íon é transferido para o átomo.

magnético, a turbulência do gás pode excitar as ondas magnetohidrodinâmicas que se dissipam na exosfera e conduzir o escape (Suzuki & Inutsuka 2005, 2006). As interações magnéticas entre o planeta e sua estrela hospedeira podem desempenhar um papel na topologia da exosfera estendida planetária (Vidotto et al. 2011a; Matsakos et al. 2015).

Outro fator importante na modelagem de exosferas estendidas é a força de maré estelar que pode aumentar a taxa de perda de massa atmosférica (equação 3.1) por uma ou duas ordens de grandeza (Lecavelier des Etangs et al. 2004). A situação atual é que nenhum dos modelos considerou todos os fatores mencionados, pela complexidade na modelagem e a falta de informação observacional mais detalhada, por exemplo, o campo magnético do exoplaneta e a variabilidade do vento estelar.

De forma independente, vários grupos de pesquisa desenvolveram modelos teóricos da termosfera de HD 209458b para entender o escape hidrodinâmico nos Júpiteres quentes (Yelle 2004; Tian et al. 2005b; Garcia Muñoz 2007; Penz et al. 2008; Holmström et al. 2008; Stone & Proga 2009; Murray Clay et al. 2009; Guo 2011; Trammell et al. 2011; Koskinen et al. 2013a,b; Shaikhislamov et al. 2014). Em todos esses estudos, um sistema unidimensional de equações dinâmicas de gás (equações de conservação da massa, momento e energia) foi resolvido numericamente para obter perfis radiais de temperatura, velocidade e densidade numérica das espécies químicas envolvidas, sem a presença de campos magnéticos (exceto para Trammell et al. 2011). Além das diferenças nos detalhes do método de solução numérica, as condições de fronteira e a eficiência de aquecimento usado por cada autor, diferentes suposições quanto à composição da atmosfera e fotoquímica foram adotados. Por exemplo, Yelle (2004) assumiu uma termosfera composta pelas espécies H₂ I, He I, H I, H II, H₂ II, H₃ II, He II, e HeH II, usando uma rede de 20 reações químicas entre essas espécies. O modelo mostrou que o aquecimento estelar leva a temperaturas de ~ 10 000 K na atmosfera superior, e previu uma taxa de perda de massa atmosférica de $4,7 \times 10^{10} \text{ g s}^{-1}$.

Garcia-Muñoz (2007) desenvolveu um modelo semelhante a Yelle (2004), mas incluindo átomos e moléculas (neutras e ionizadas) constituídas por C, O, N, e D (deutério), e uma rede de 223 reações químicas. A taxa de perda de massa atmosférica estimada, \dot{M} , foi entre $6,10 \times 10^{10} \text{ g s}^{-1}$ e $1,52 \times 10^{11} \text{ g s}^{-1}$, o que leva um tempo para a completa “evaporação” do planeta, $\sim M_{\text{planeta}}/\dot{M}$, da ordem de centenas de giga-anos.

Koskinen et al. (2013a,b) elaboraram o modelo mais completo até agora para a termosfera de HD 209458b. O modelo considerou a fotoionização, ionização térmica e troca de carga de H, He, C, N, O, Si, e seus íons, incluindo 33 reações químicas. A taxa média de perda de massa atmosférica calculada pelos autores foi de $5 \times 10^{10} \text{ g s}^{-1}$, sendo um valor próximo daqueles determinados por Yelle (2004), Tian et al. (2005b), Garcia Muñoz (2007) e Shaikhislamov et al. (2014), mas seis vezes maior do que o valor determinado por Murray-Clay et al. (2009). Eles mostraram que **(a)** a presença das espécies Mg I, Mg II, Na I, Na II, K I, K II, S I e S II não afeta significativamente os perfis de densidade de H I, O I, C II, ou Si III; **(b)** H e O permanecem neutros até aproximadamente $3 R_p$, explicando a absorção observada nas linhas O I e Ly α do H I (Vidal-Madjar et al. 2003, 2004); **(c)** C é ionizado a baixa altitude, explicando a observação de C II (Vidal-Madjar et al. 2004); e **(d)** o Si II é a espécie de silício

dominante em altitudes menores a $5 R_p$, e Si III pode ser formado através da troca de carga com H II, explicando a observação de íons do Si (Linsky et al. 2010).

Poucos modelos foram desenvolvidos para interpretar diretamente as observações e estimar as condições físicas na atmosfera de HD 209458b, ajustando os dados. Schneider et al. (2007) desenvolveram um modelo 3D da interação hidrodinâmica entre o gás que escapa desde HD 209458b e o vento estelar, desprezando a fotoionização do H I. Tremblin & Chiang (2013) exploraram o processo de troca de carga através da interação dos ventos planetário e estelar, usando um modelo hidrodinâmico 2D. O problema com os modelos anteriores é que subestimaram o efeito da pressão de radiação estelar.

Bourrier & Lecavelier des Etangs (2013) modelaram o escape de hidrogênio de HD 209458b com um modelo 3D de partículas (ver Figura 3.5) levando em conta a pressão de radiação, ionização, auto-blindagem e interação com o vento estelar, para comparar a linha de absorção Ly α teórica com as observações de absorção durante o trânsito. As velocidades observadas do vento planetário de 130 km s^{-1} foram consistentes com a aceleração da pressão de radiação por efeito do fluxo EUV estelar (três vezes o fluxo solar). As taxas de escape do H I obtidas foram $\sim 10^9 - 10^{11} \text{ g s}^{-1}$. Bourrier et al. (2014) revisaram o modelo anterior para estudar o escape de magnésio desde HD 209458b e compararam os seus cálculos com as observações de Vidal-Madjar et al. (2013). Concluíram que o melhor ajuste com as observações exige que a exobase fique perto do lóbulo de Roche e os átomos de magnésio precisam de uma velocidade radial de 25 km s^{-1} no nível da exobase para poder escapar.

Também são poucos os modelos feitos para explicar as observações da absorção na linha Ly α estelar durante o trânsito do Netuno quente GJ 436b. Ehrenreich et al. (2015) utilizando o modelo 3D de partículas de Bourrier & Lecavelier des Etangs (2013) calculam a estrutura da nuvem de gás escapando, sua faixa de velocidade radial correspondente com os sinais de absorção, e a curva de luz integrada. De acordo com a simulação, a baixa pressão de radiação estelar em GJ 436b permite a formação de uma grande cauda de átomos escapando com raio de curvatura pronunciado, como mostra a Figura 3.6. Além disso, encontraram que uma família de modelos com parâmetros na faixa de $10^8 - 10^9 \text{ g s}^{-1}$ e taxa de fotoionização de átomos de hidrogênio, $\alpha_{EUV} \approx 8 \times 10^{-7} - 3 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ forneceram bons ajustes como os dados.

Um estudo complementar em relação ao papel desempenhado pela pressão de radiação estelar sobre a estrutura exoesférica de GJ 436b e seu espectro de transmissão foram realizados por Bourrier et al. (2015). Por ser a estrela hospedeira de GJ 436b uma anã tipo M, a pressão de radiação é muito baixa para superar a gravidade estelar e repelir os átomos de hidrogênio da exosfera desde a estrela; mas é suficientemente alta para frear o desvio gravitacional dos átomos em direção à estrela, permitindo a sua dispersão dentro de um grande volume ao redor do planeta. O efeito é conhecido como frenagem radiativa (radiative braking) e explica o tamanho da coma e a faixa de velocidades deslocada ao azul da absorção observada até aproximadamente -120 km s^{-1} . O problema com a frenagem radiativa é que ela não explica as variações na profundidade e duração da absorção nas diferentes fases do trânsito. Bourrier et al. (2016) investigaram os efeitos acoplados das interações do vento estelar e a pressão de radiação na exosfera de GJ 436b usando simulações numéricas para as observações feitas nos anos 2013 e 2014. Os resultados mostraram que as fortes absorções pré-

trânsito observadas nessas épocas provêm da abrasão da coma planetário pelo vento estelar, e o espectro pós-trânsito observado pode ser produzido por uma cauda formada pelos átomos e íons que escaparam da atmosfera superior do planeta e os prótons criados pela troca de carga com o vento estelar. A taxa de escape calculada foi $\sim 2,5 \times 10^8 \text{ g s}^{-1}$. Para os autores, as altas velocidades do gás escapando ($\sim 50 - 60 \text{ km s}^{-1}$) podem indicar a presença de ondas magnetohidrodinâmicas que se dissipam na atmosfera superior do planeta e conduzem o escape.

No momento, somente um modelo hidrodinâmico-fotoquímico unidimensional da termosfera de GJ 436b foi desenvolvido que prediz o escape de H, He, C, e O (Parke Loyd et al. 2017). O modelo é a versão do modelo de escape 1D de Koskinen et al. (2013a,b), mas considerando ionização, recombinação e fotoquímica das espécies $\text{H}_2 \text{ I}$, H I , He I , C I , O I , H II , $\text{H}_2 \text{ II}$, $\text{H}_3 \text{ II}$, HeH II , C II , O II e elétrons. A simulação previu densidades de H I capazes de produzir aproximadamente mais de 50 % do trânsito observado em Ehrenreich et al. (2015) e uma taxa de escape de $3,1 \times 10^9 \text{ g s}^{-1}$ para todas as espécies com uma eficiência de aquecimento do 11 %. As Tabelas 3.1 e 3.2 apresentam os parâmetros dos modelos da literatura já mencionados para HD 209458b e GJ 436b, respectivamente.

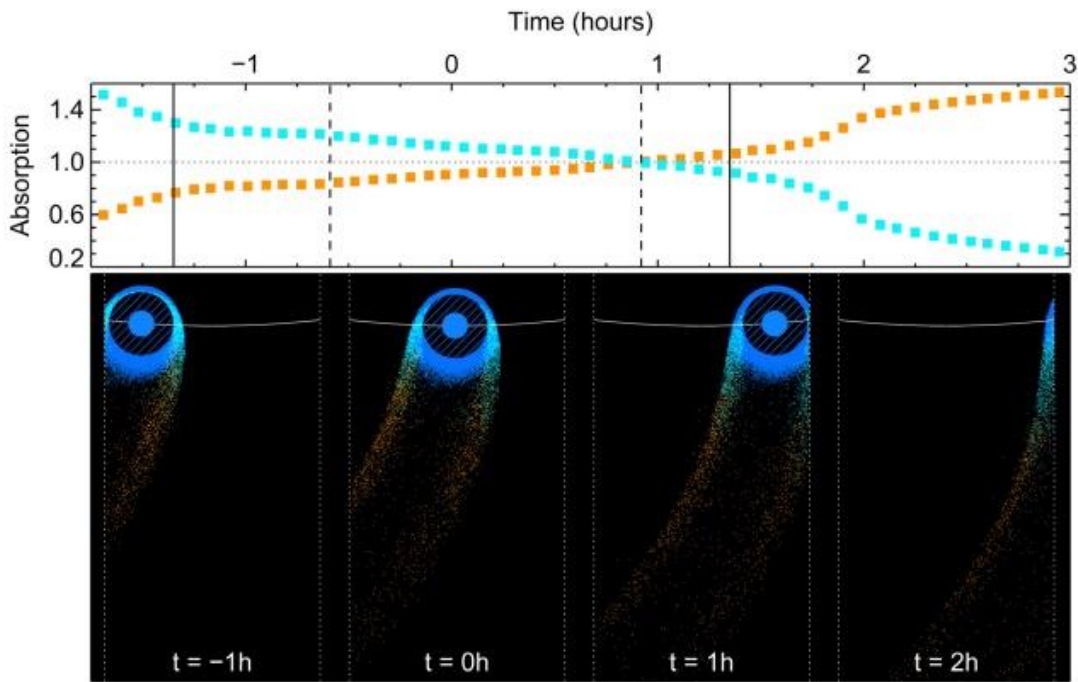


Figura 3.5. *Gráfico superior:* absorção na faixa -130 km s^{-1} até -85 km s^{-1} (símbolo laranja) e -85 km s^{-1} até -40 km s^{-1} (símbolo azul), normalizado pela absorção em todo o intervalo de velocidades, o que corresponde ao intervalo de absorção detectado por Vidal-Madjar et al. (2003). As velocidades são as projeções na linha de visada estrela-Terra. Cada ponto corresponde a um passo de tempo em uma simulação de escape atmosférico desde HD 209458b. As linhas sólidas verticais mostram o início e o fim do trânsito, e as linhas tracejadas verticais mostram o início e o final das observações de trânsito com o STIS/HST. *Gráfico inferior:* Vista do gás no plano orbital com velocidades nos intervalos descritos no gráfico superior (laranja e azul claro), e abaixo $\pm 40 \text{ km s}^{-1}$ (azul escuro). Durante e após do trânsito, diferentes áreas da nuvem se cruzam em frente ao disco estelar, e como resultado, a absorção relativa em baixas e altas velocidades diminui e aumenta com o tempo, respectivamente. Fonte: Bourrier & Lecavelier des Etangs (2013).

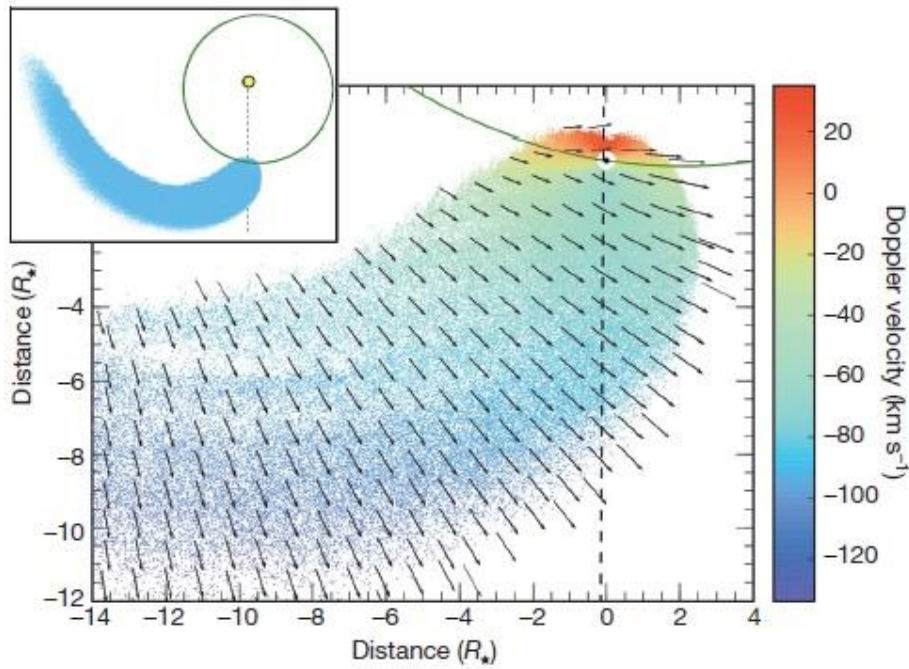


Figura 3.6. Mapa 2D do campo de velocidade do H I escapando desde GJ 436b no sistema de referência da estrela. $R_* \approx 0,44R_\odot$. Fonte: Ehrenreich et al. (2015).

Tabela 3.1. Parâmetros dos modelos da literatura para a perda de massa atmosférica de HD 209458b. R_p é o raio do planeta. Fonte: Adaptado de Pinotti & Boechat-Roberty (2016)

Referência	Perfil de velocidade do H I (km s^{-1})	Perfil de temperatura (K)	Perfil de densidade do H I (cm^{-3})
Shaikhislamov et al. (2014)	4,1 em $3 R_p$ até 9,3 em $10 R_p$	$6,5 \times 10^3$ em $3R_p$ até $2,5 \times 10^3$ em $10 R_p$	1×10^7 em $3 R_p$ até 3×10^5 em $10 R_p$
Bourrier & Lecavelier des Etangs (2013)	0 a 130 em 10 horas		$1,3 \times 10^6$ em $2,8 R_p$ até 10 em $20 R_p$
Tremblin & Chiang (2013)	12 em $4 R_p$	7×10^3 em $4 R_p$	$3,9 \times 10^6$ em $4 R_p$
Koskinen et al. (2013a,b)	10 em $5 R_p$ até 30 em $20 R_p$	8×10^3 em $4R_p$ até 3×10^3 em $11 R_p$	1×10^7 em $3R_p$ até 1×10^6 em $5 R_p$
Guo (2011)	0 em $1 R_p$ até 18 em $5 R_p$	$6,3 \times 10^3$ em $3,5 R_p$ até 5×10^3 em $5 R_p$	$1,6 \times 10^6$ em $3 R_p$ até 2×10^5 em $5 R_p$
Murray Clay et al. (2009)	0 em $1 R_p$ até 15 em $5 R_p$	5×10^3 em $3,5 R_p$ até $3,4 \times 10^3$ em $5 R_p$	$1,2 \times 10^6$ em $3 R_p$ até $1,6 \times 10^5$ em $5 R_p$
Penz et al. (2008)	3 em $3 R_p$ até 8 em $5 R_p$	$4,1 \times 10^3$ em $3 R_p$ até $2,5 \times 10^3$ em $5 R_p$	1×10^7 em $3 R_p$ até 7×10^5 em $5 R_p$
Holmström et al. (2008)	< 50 em $2.1 R_p$	7×10^3 em $2.1 R_p$	1×10^8 em $2.1 R_p$
Garcia Muñoz (2007)	10 em $5 R_p$ até 20 em $15 R_p$	6×10^3 em $5 R_p$ até 3×10^3 em $15 R_p$	5×10^6 em $3 R_p$ até 5×10^5 em $5 R_p$
Schneider et al. (2007)	60 (a velocidade de escape) em $1 R_p$		6×10^6 em $1 R_p$ até 6×10^3 em $10 R_p$
Tian et al. (2005b)	10 em $3 R_p$ até 50 em $10 R_p$	2×10^4 em $3 R_p$ até 1×10^5 em $10 R_p$	3×10^6 em $3 R_p$ até 5×10^4 em $10 R_p$
Yelle (2004)	0,1 em $1,1 R_p$ até 0,25 em $3 R_p$	$7,5 \times 10^3$ em $1,1 R_p$ até 1×10^4 em $3 R_p$	1×10^9 em $1,1 R_p$ até 8×10^5 em $3 R_p$

Tabela 3.2. Parâmetros dos modelos da literatura para a perda de massa atmosférica de GJ 436b. R_p é o raio do planeta. * comunicação privada.

Referência	Perfil de velocidade do H I (km s^{-1})	Perfil de temperatura (K)	Perfil de densidade do H I (cm^{-3})
Parke Loyd et al. (2017)	6 em $5,8 R_p$ até 10 em $8 R_p$	$2,3 \times 10^3$ em $5,8 R_p$ até $2,1 \times 10^3$ em $8 R_p$	8×10^5 em $5,8 R_p$ até 4×10^5 em $8 R_p$
Bourrier et al. (2016) *	55 em $\sim 5,8 R_p$ até 100 em $\sim 79 R_p$		$2,7 \times 10^3$ em $\sim 5,8 R_p$ até 3×10^1 em $\sim 79 R_p$
Bourrier et al. (2015)	0 a 120 em ~ 25 horas		0,4 em $4 R_p$
Ehrenreich et al. (2015)	0 a 120 em ~ 20 horas		

4. Campo de radiação UV e raios-X estelar

4.1. Introdução

Os planetas gigantes com períodos orbitais da ordem de dias recebem altos níveis de radiação de suas estrelas hospedeiras, sendo a porção de radiação estelar de alta energia (UV e raios-X) absorvida na atmosfera superior do planeta, regulando sua composição, estrutura e espessura. Esta emissão estelar depende do tipo de estrela e idade (a emissão não térmica decai com o tempo à medida que a rotação estelar diminui (Skumanich 1972)), os quais são fatores importantes na compreensão do comportamento das atmosferas exoplanetárias. Para as estrelas do tipo M e estrelas ativas mais quentes, a emissão UV estelar apresenta significativa variabilidade com o tempo (Lang et al. 2014; Ribas et al. 2005).

O espectro ultravioleta estelar, incluindo sua linha de emissão característica $H I Ly\alpha$, é formado sobre uma ampla faixa de temperaturas em diferentes alturas na atmosfera da estrela. Ele contém várias faixas de comprimento de onda como é resumido na Tabela 4.1. Abaixo de 100 Å e acima de 5 Å (124 eV – 2,5 KeV) é a região dos raios-X.

Tabela 4.1. Divisão em faixas de comprimento de onda e energia dos fótons do espectro ultravioleta estelar. Fonte: Lammer & Khodachenko (2015).

Nome	Abreviação	Faixa do comprimento de onda (Å)	Energia dos fótons (eV)
Ultravioleta Próximo	NUV	1700 - 3200	3,9 – 7,3
Ultravioleta Distante	FUV	912 - 1700	7,3 – 13,6
Lyman- α Hidrogênio neutro	H I Ly α	1215,67	10,2
Ultravioleta Extremo	EUV	100 - 912	13,6 - 124

A divisão entre NUV e FUV em 1700 Å é porque a emissão fotosférica geralmente domina acima deste comprimento de onda, enquanto a emissão cromosférica estelar domina abaixo deste comprimento de onda. Portanto, a emissão FUV depende da taxa de aquecimento magnético mais do que da temperatura efetiva estelar. Além disso, as

radiações NUV e FUV têm a capacidade de fotodissociar espécies moleculares; por exemplo, a radiação NUV é importante para a fotoquímica do O_2 e O_3 , enquanto a fotoquímica de moléculas importantes como H_2O , CO , CO_2 , e CH_4 é controlada principalmente pela radiação com comprimento de onda abaixo de 1700 \AA (Heays et al., 2017). A fotoionização do hidrogênio ocorre em comprimentos de onda abaixo de 912 \AA , portanto é usual definir a faixa EUV no comprimento de onda citado na Tabela 4.1.

4.2. A linha de emissão estelar $H I Ly\alpha$

A linha de emissão $H I Ly\alpha$ domina o espectro FUV das estrelas do tipo F a M, mas a absorção do HI no meio interestelar (ISM) atenua a maior parte do fluxo que atinge a Terra, como mostra a Figura 4.1.

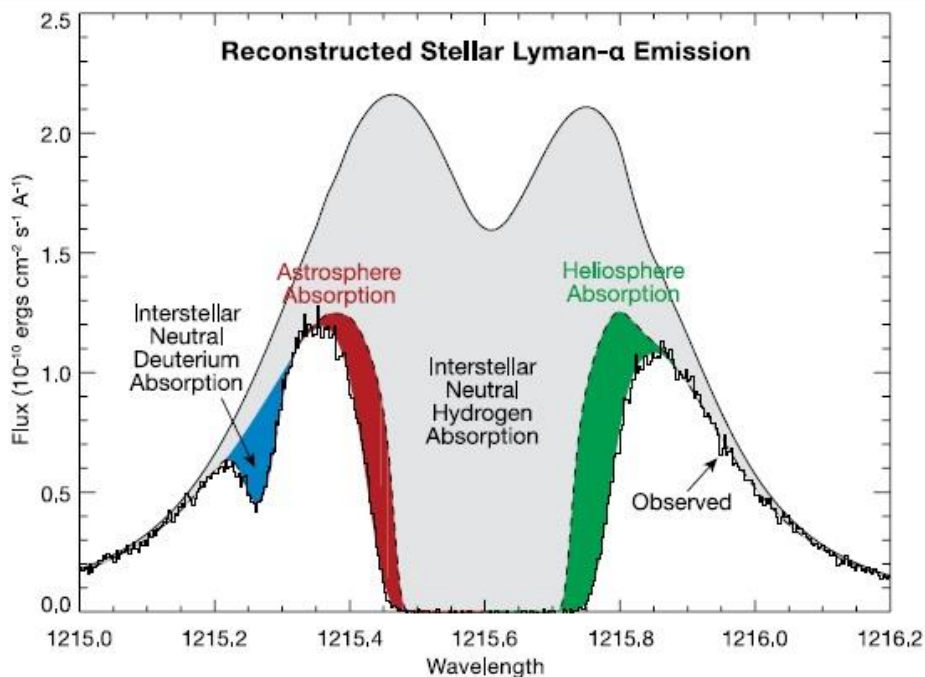


Figura 4.1. A linha de $H I Ly\alpha$ da estrela α Centauri B (linha grossa) observada com o Goddard High Resolution Spectrograph (GHRS), a primeira geração de instrumentos do telescópio Hubble. A linha de emissão de $H I Ly\alpha$ não observada emitida pela cromosfera estelar (linha fina) foi reconstruída a partir da linha de absorção do deutério interestelar, da relação de D/H atual, e de informações cinemáticas sobre o meio interestelar a partir de íons pesados. O sombreado cinza claro indica a absorção pelo hidrogênio interestelar, e o sombreado azul centrado em $1215,3 \text{ \AA}$ é a absorção pelo deutério interestelar. Outras absorções (verde e vermelho) são produzidas pelo hidrogênio na heliosfera e astrosfera. Fonte: <https://blogs.stsci.edu/newsletter/files/2016/01/Linsky.pdf>

Wood et al. (2005) desenvolveram uma técnica para reconstruir a linha de $H I Ly\alpha$ intrínseca usando informações sobre a densidade colunar e a velocidade do hidrogênio interestelar obtidas a partir da linha de $Ly\alpha$ do deutério e outras linhas de absorção interestelar. France et al. (2013) geraram uma técnica alternativa de reconstrução onde as larguras e intensidades de uma ou duas linhas em emissão gaussiana representando o

H I Ly α , e as características nas velocidades e densidades colunares da absorção interestelar são iterativamente variadas até obter uma solução que melhor se ajuste às asas da linha de H I Ly α observada. Ambas as técnicas requerem espectros de alta resolução com bom sinal/ruído (neste caso com o STIS/HST), e mínima contaminação pela emissão de Ly α geocoronal.

Linsky et al. (2013) mostraram que quando não há espectro disponível de alta resolução da linha de H I Ly α para servir como base para sua reconstrução, pode-se estimar o seu fluxo intrínseco com uma incerteza um pouco maior do que os métodos anteriores, a partir dos fluxos de outras linhas de emissão que não são afetadas pela absorção interestelar ou mesmo do tipo espectral estelar e alguma medida de atividade, como a taxa de rotação estelar.

O fluxo da linha de emissão de H I Ly α desempenha um papel muito importante para a fotoquímica nas camadas superiores das atmosferas exoplanetárias, porque a linha é muito intensa e as seções de choque de fotodissociação do H₂O, CO₂, CH₄, C₂H₂, e outras moléculas importantes em atmosferas de exoplanetas são altas no FUV (Ribas et al., 2010).

4.3. Radiação EUV e raios-X estelar

A radiação com comprimento de onda menor que 912 Å pode ionizar átomos de hidrogênio, que é o principal componente das atmosferas de planetas gigantes. Quando a radiação EUV e raios-X (XUV) atinge a camada superior da atmosfera do planeta, ioniza os átomos produzindo um fluxo de elétrons livres com alto momento que deposita parte de sua energia nas ionizações, excitações, e dissociações das espécies atômicas e moleculares. As colisões que são produzidas pelos elétrons livres levam ao aquecimento da atmosfera superior, sua expansão e eventual perda de massa atmosférica (Cecchi-Pestellini et al., 2009).

As estrelas na faixa espectral F a M são caracterizadas por ter temperaturas coronais da ordem de grandeza $\sim 10^6$ K, excedendo 10^7 K nos casos mais ativos (Robrade & Schmitt, 2005; Johnstone & Güdel, 2015). A alta temperatura na região de transição ($\sim 1 \times 10^4 - 6 \times 10^5$ K) e coroa estelar ($\sim 6 \times 10^5 - 6 \times 10^7$ K) permite a emissão abundante de radiação XUV. O incremento na rotação estelar aumenta a temperatura na coroa, resultando em um maior fluxo XUV. No entanto, a absorção interestelar impede a medição da radiação de 400 Å a 912 Å, mesmo para estrelas próximas, exceto o Sol. Abaixo de 400 Å, a diminuição da opacidade do hidrogênio e do hélio interestelar permite observações espectrais das estrelas próximas.

Vários autores utilizaram os espectros disponíveis para estimar a emissão EUV de estrelas em função da idade e da taxa de rotação. Por exemplo, Ribas et al. (2005) usando os dados do HST, FUSE (Far Ultraviolet Spectroscopic Explorer), EUVE (Extreme Ultraviolet Explorer), e espectros de raios-X de seis estrelas do tipo solar com idades entre 0,1 – 6,7 Giga-anos na faixa espectral G0 – G2 e o Sol atual, mostraram que esses espectros podem ser ajustados com uma lei de potência da forma $F = \alpha\tau^{-\beta}$, onde F é o fluxo na faixa de comprimento de onda, τ é a idade estelar em Giga-anos, e

α e β são parâmetros que dependem do intervalo de comprimento de onda. Para prever a emissão de estrelas com diferentes temperaturas efetivas que a do Sol, Sanz-Forcada et al. (2011) realizaram a análise das linhas de emissão coronal estelar em raios-X obtidas com os telescópios XMM-Newton e Chandra, e calcularam o espectro EUV de 82 estrelas com exoplanetas, incluindo HD 209458 e GJ 436. Os autores descobriram que as luminosidades EUV de estrelas com tipos espectrais F7 a M3 podem ser ajustadas com uma relação log-log:

$$\log(L_{EUV}) = (4,80 \pm 1,99) + (0,860 \pm 0,073)\log(L_X)$$

onde L_X e L_{EUV} são as luminosidades de raios-X e EUV, em erg s^{-1} , respectivamente.

Linsky et al. (2014) desenvolveram uma abordagem diferente para prever as emissões EUV desde o fluxo de H I Ly α estelar reconstruído. Os autores descobriram, para estrelas com tipos espectrais F5 – M5, uma relação de ajuste da forma:

$$\log[F(\Delta\lambda)/F(\text{Ly}\alpha)] = a + b \log[F(\text{Ly}\alpha)]$$

onde $F(\Delta\lambda)$ e $F(\text{Ly}\alpha)$ são os fluxos na faixa EUV e H I Ly α reconstruído, respectivamente. Os parâmetros a e b dependem do intervalo de comprimento de onda. Quando as medições do fluxo de H I Ly α não estão disponíveis, esta pode ser estimada a partir de outras linhas de emissão ou taxas de rotação estelar (Linsky et al., 2013).

4.4. Campo de radiação UV e raios-X de HD 209458 e GJ 436

Como os fluxos UV e raios-X das estrelas HD 209458 e GJ 436 são parâmetros essenciais na formação molecular ao longo da perda de massa atmosférica de HD 209458b e GJ 436b, respectivamente, é importante ter um resumo dos resultados obtidos na literatura, como mostram as Tabelas 4.2 e 4.3.

Como já foi dito anteriormente, o fluxo EUV estelar pode ser estimado a partir do fluxo de raios-X ou do fluxo de H I Ly α reconstruído. Medições do fluxo de raios-X de HD 209458 e GJ 436 foram feitas (Penz et al., 2008b; Kashyap et al., 2008; Poppenhaeger et al., 2011; Sanz-Forcada et al., 2011; Ehrenreich et al., 2015; Czesla et al., 2017), e relações de ajuste entre os fluxos de raios-X e EUV foram estimadas (Sanz-Forcada et al., 2011; Louden et al., 2017). Alternativamente, a partir do fluxo de H I Ly α reconstruído (Woods et al., 2005; Ehrenreich et al., 2011b; France et al., 2013; Bourrier et al., 2015) foi estimado o fluxo EUV a partir de relações de ajuste entre eles (Linsky et al., 2014; Ehrenreich et al., 2015; Youngblood et al., 2016).

Das Tabelas 4.2 e 4.3, foram obtidos valores médios aproximados do fluxo estelar em cada uma das faixas do espectro UV consideradas na Tabela 4.1, e raios-X na distância do respectivo exoplaneta (ver Tabela 4.4). No caso da estrela HD 209458 pela falta de dados nas faixas NUV e FUV (excluindo H I Ly α), foi utilizado um modelo de corpo negro para essas regiões.

Ao estudar a formação molecular ao longo da perda de massa atmosférica de HD 209458b e GJ 436b, a equação de continuidade para espécies químicas precisa da

constante da taxa de reação para cada uma das fotorreações a serem consideradas, as quais foram estimadas para o campo de radiação interestelar (McElroy et al. 2013). Portanto, elas devem ser corrigidas para o ambiente de Júpiteres quentes e Netunos quentes, onde os campos de radiação UV são muitas ordens de grandeza superior. Por conseguinte, a nossa correção consistiu em usar um fator multiplicativo, P , para a constante da taxa de reação fotoquímica, sendo este fator multiplicativo a razão entre o fluxo estelar (UV e raios-X) incidente sobre o exoplaneta e o fluxo do meio interestelar. Nós usamos o fluxo de 10^8 fótons $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ (Boechat-Roberty et al. 2009) como valor do fluxo do meio interestelar. Os resultados obtidos para HD 209458b e GJ 436b foram $P \sim 10^9$ e $P \sim 10^5$, respectivamente, como é mostrado na Tabela 4.4.

Tabela 4.2. Dados obtidos na literatura sobre o campo de radiação UV e raios-X da estrela HD 209458.

Referência	Woods et al. (2005)	Kashyap et al. (2008)	Penz et al. (2008b)	Sanz-Forcada et al. (2011)	Linsky et al. (2014)	Czesla et al. (2017)	Louden et al. (2017)
Observações	STIS/HST	XMM-Newton	XMM-Newton	XMM-Newton Chandra	STIS/HST	Chandra	XMM-Newton
F_X ($\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)		$(3,9 \pm 1,8) \times 10^{-15}$ $\lambda(5 - 100)\text{\AA}$				$(6,0_{-1,4}^{+1,9}) \times 10^{-15}$ $\lambda(5 - 100)\text{\AA}$	
$\log[L_X(\text{erg s}^{-1})]$		$27,02 \pm 0,20$	$27,04$ $\lambda(5 - 100)\text{\AA}$	$< 26,40$ $\lambda(5 - 100)\text{\AA}$		$27,20 \pm 0,12$	$27,08 \pm 0,07$ $\lambda(5 - 100)\text{\AA}$
$F_{X-0.05 \text{ UA}}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) (b)		$(1,48_{-0,54}^{+0,86}) \times 10^2$	$1,55 \times 10^2$			$(2,24_{-0,54}^{+0,72}) \times 10^2$	
$\log[L_{EUV}(\text{erg s}^{-1})]$				$< 27,74$ $\lambda(100 - 920)\text{\AA}$			$28,26 \pm 0,05$ $\lambda(100 - 920)\text{\AA}$
$F_{EUV-0.05 \text{ UA}}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) (b)					$2,10 \times 10^3$ $\lambda(100 - 912)\text{\AA}$		
$F_{XUV-0.05 \text{ UA}}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) (b)				$< 0,91 \times 10^3$ $\lambda(5 - 920)\text{\AA}$			$(3,16 \pm 0,39) \times 10^3$ $\lambda(5 - 920)\text{\AA}$
$F_{H I Ly\alpha \text{ intrinseco}}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	$1,5 \times 10^{-13}$ $\lambda(1210 - 1222)\text{\AA}$						
$F_{H I Ly\alpha -0.05 \text{ UA}}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) (b)	$5,6 \times 10^3$				$6,28 \times 10^3$ $\lambda(1210 - 1222)\text{\AA}$		

(b) Fluxo incidente sobre o Júpiter quente HD 209458b.

Tabela 4.3. Dados obtidos na literatura sobre o campo de radiação UV e raios-X da estrela GJ 436.

Referência	Poppenhaeger et al. (2011)	Sanz–Forcada et al. (2011)	Ehrenreich et al. (2011b)	France et al. et al. (2013)	Ehrenreich et al. (2015)	Bourrier et al. (2015)	Youngblood et al. (2016)
Observações	ROSAT	XMM-Newton Chandra	STIS/HST	COS/HST STIS/HST	STIS/HST Chandra	STIS/HST	COS/HST STIS/HST
$\log[L_X(\text{erg s}^{-1})]$	$27,16 \pm 0,34$ $\lambda(5,2 - 124,2)\text{\AA}$	25,96 $\lambda(5 - 100)\text{\AA}$			26,76 $\lambda(5 - 100)\text{\AA}$		
$F_{X-0.03 \text{ UA}}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$) (c)	$(5,68_{-3.08}^{+6.75}) \times 10^2$	$3,89 \times 10^1$			$2,26 \times 10^2$		
$\log[L_{EUV}(\text{erg s}^{-1})]$		$26,87_{-0.40}^{+0.45}$					27,42 $\lambda(100 - 1215,53)\text{\AA}$
$F_{EUV-0.03 \text{ UA}}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$) (c)		$(2,91_{-1.75}^{+5.31}) \times 10^2$ $\lambda(100 - 920)\text{\AA}$			$1,2 \times 10^3$ $\lambda(124 - 912)\text{\AA}$		$1,0 \times 10^3$
$F_{H I Ly\alpha \text{ intrínseco}}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$)			$(2,7 \pm 0,7) \times 10^{-13}$ $\lambda(1214,40 - 1217,00)\text{\AA}$	$3,5 \times 10^{-13}$ $\lambda(1210 - 1222)\text{\AA}$ 15% -30% de incerteza		$2,05 \times 10^{-13}$ $\lambda(1214,68 - 1216,54)\text{\AA}$	$(2,1 \pm 0,3) \times 10^{-13}$ $\lambda(1210 - 1222)\text{\AA}$
$F_{H I Ly\alpha -0.03 \text{ UA}}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$) (c)			$1,3 \times 10^3$	$1,8 \times 10^3$		$1,0 \times 10^3$	$1,0 \times 10^3$
$F_{FUV-0.03 \text{ UA}}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$) Excluindo H I Ly α				$1,6 \times 10^2$ $\lambda(1160 - 1690)\text{\AA}$			
$F_{NUV-0.03 \text{ UA}}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$) (c)				$1,4 \times 10^3$ $\lambda(2300 - 3050)\text{\AA}$			

(c) Fluxo incidente sobre o Netuno quente GJ 436b.

Tabela 4.4. Valores médios aproximados do fluxo UV e raios-X estelar incidente sobre o exoplaneta, com seu fator de correção multiplicativo P correspondente.

Exoplaneta	HD 209458b	GJ 436b
$\bar{F}_{X-incidente}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) $\lambda(5 - 100)\text{\AA}$	$\sim 1,7 \times 10^2$	$\sim 2,0 \times 10^2$
$\bar{F}_{X-incidente}$ (fótons $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) $\bar{E}_{fóton} = 1312 \text{ eV}$	$\sim 8,0 \times 10^{10}$	$\sim 1,0 \times 10^{11}$
$\bar{F}_{EUV-incidente}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) $\lambda(100 - 912)\text{\AA}$	$\sim 1,8 \times 10^3$	$\sim 8,3 \times 10^2$
$\bar{F}_{EUV-incidente}$ (fótons $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) $\bar{E}_{fóton} = 68,8 \text{ eV}$	$\sim 2 \times 10^{13}$	$\sim 8 \times 10^{12}$
$\bar{F}_{H I Ly\alpha-incidente}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) $\lambda(1210 - 1222)\text{\AA}$	$\sim 5,9 \times 10^3$	$\sim 1,2 \times 10^3$
$\bar{F}_{H I Ly\alpha-incidente}$ (fótons $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) $\bar{E}_{fóton} = 10,2 \text{ eV}$	$\sim 4,0 \times 10^{14}$	$\sim 8,0 \times 10^{13}$
$\bar{F}_{FUV-incidente}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) $\lambda(912 - 1700)\text{\AA}$ Excluindo H I Ly α	$\sim 5,0 \times 10^5$	$\sim 1,6 \times 10^2$
$\bar{F}_{FUV-incidente}$ (fótons $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) $\bar{E}_{fóton} = 8,5 \text{ eV}$	$\sim 4,0 \times 10^{16}$	$\sim 1,0 \times 10^{13}$
$\bar{F}_{NUV-incidente}$ ($\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) $\lambda(1700 - 3200)\text{\AA}$	$\sim 1,0 \times 10^7$	$\sim 1,4 \times 10^3$
$\bar{F}_{NUV-incidente}$ (fótons $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) $\bar{E}_{fóton} = 5,6 \text{ eV}$	$\sim 1,0 \times 10^{18}$	$\sim 2,0 \times 10^{14}$
$\bar{F}_{total-incidente}$ (fótons $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) $\lambda(5 - 3200)\text{\AA}$	$\sim 1,0 \times 10^{18}$	$\sim 3,0 \times 10^{14}$
Fator de correção multiplicativo P	$\sim 10^9$	$\sim 10^5$

5. Modelo químico para a exosfera

5.1. Introdução

Na prática, os modelos de atmosferas de exoplanetas tendem a se concentrar em alguns aspectos particulares. Por exemplo, os modelos de estrutura vertical de temperatura se concentram em resolver a transferência radiativa e equilíbrio térmico na direção vertical da atmosfera (por exemplo, Guillot 2010), resultando em um perfil de pressão-temperatura (P-T); enquanto os modelos 3D de estrutura termal estão focados na circulação atmosférica (por exemplo, Showman et al. 2009; Lewis et al. 2010; Showman et al. 2013). Outros tipos de modelos estão concentrados na química atmosférica (por exemplo, Hu et al. 2012; Koskinen et al. 2013a; Rimmer & Helling 2016), descrevendo como são distribuídas as abundâncias das espécies químicas envolvidas, geralmente na direção vertical.

A construção de um modelo químico de uma atmosfera planetária envolve cinco parâmetros básicos: gravidade, composição elementar, irradiação UV e raios-X, estrutura térmica, e o tipo de transporte; sendo este último relacionado com os processos de advecção (deslocamento de massa atmosférica), difusão (processo aleatório de mistura) e movimentos turbulentos que podem acontecer em diferentes escalas, gerando mistura de material químico entre as diferentes camadas da atmosfera.

Esses processos de transporte são uma fonte importante de desequilíbrio químico, e são geralmente parametrizados através dos coeficientes de difusão turbulenta (K_z) e molecular (D). No caso de planetas extra-solares, a informação sobre a intensidade do transporte pode ser obtida a partir de modelos teóricos como os modelos de circulação atmosférica (Parmentier et al. 2013).

Um ponto que deve ficar claro é que a mistura de material químico nas diferentes camadas da atmosfera pode ser dominada pela convecção ou a fotoquímica. A convecção (advecção vertical) acontece nas camadas mais profundas da atmosfera. Na troposfera, a termoquímica (não envolve fótons como reagentes) domina e a composição química converge ao equilíbrio químico; enquanto na estratosfera a difusão turbulenta (movimento aleatório do fluido atmosférico) é quem domina, fazendo com que a composição química fique fora do equilíbrio químico. A difusão molecular (movimento aleatório das moléculas no fluido atmosférico) é importante na camada superior atmosférica ou termosfera, mas não é um mecanismo de mistura significativo nas camadas onde a fotoquímica (um processo de não equilíbrio e que envolve fótons UV como reagentes) é relevante.

Como o objetivo da dissertação é o estudo da formação molecular ao longo da perda de massa atmosférica de HD 209458b e GJ 436b, na região da exosfera, é necessário derivar uma equação de continuidade para espécies químicas, para obter os perfis de abundância fracionária das espécies envolvidas.

5.2. A equação de continuidade para espécies químicas

Para um sistema de i espécies interagindo quimicamente, temos:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{F}_i + P_i - L_i$$

onde P_i [$cm^{-3} s^{-1}$] e L_i [$cm^{-3} s^{-1}$] são as taxas de produção e destruição local da espécie i , respectivamente, n_i [cm^{-3}] sua densidade numérica, e \vec{F}_i [$cm^{-2} s^{-1}$] seu fluxo.

O fluxo \vec{F}_i inclui contribuições do transporte movido pelo vento (o que é chamado de advecção) e a difusão molecular:

$$\vec{F}_i = \vec{F}_{adv\ i} + \vec{F}_{dif\ i}$$

O fluxo advectivo $\vec{F}_{adv\ i}$ é dado por $n_i \vec{V}_i$, onde \vec{V}_i é a velocidade do vento local. O fluxo de difusão molecular $\vec{F}_{dif\ i}$ é dado pela lei de Fick: $\vec{F}_{dif\ i} = -D_i \vec{\nabla} n_i$, sendo D_i [$cm^2 s^{-1}$] o coeficiente de difusão molecular para a espécie i .

Portanto:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (n_i \vec{V}_i - D_i \vec{\nabla} n_i) + P_i - L_i$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (n_i \vec{V}_i) + \vec{\nabla} \cdot (D_i \vec{\nabla} n_i) + P_i - L_i$$

Será considerado um modelo 1D estacionário (só na direção vertical):

$$0 = -\frac{\partial(n_i V_i)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_i \frac{\partial n_i}{\partial z} \right) + P_i - L_i$$

Além disso, o cenário envolvido (escape hidrodinâmico da atmosfera superior de gigantes quentes) permite que o fluxo de espécies seja principalmente dominado pelo fluxo advectivo. Ou seja,

$$0 = -\frac{d(n_i V_i)}{dz} + P_i - L_i \quad (5.1)$$

onde as taxas de produção e destruição local vão levar em conta as reações fotoquímicas, por raios cósmicos e reações químicas de dois corpos, na fase gasosa. Assim, P_i e L_i podem ser escritos da seguinte forma (Kwok 2007):

$$P_i = \sum_l \sum_m n_l n_m k(l + m \rightarrow i + j) + \sum_l n_l R(l + hv_f \rightarrow i + j)$$

Termo associado com a formação das espécies i e j devido a reação entre as espécies l e m a taxa k [$cm^3 s^{-1}$] na altitude z .

Termo associado com a formação da espécie i e j como resultado da dissociação e ionização da espécie l por fótons do tipo f a taxa R [s^{-1}] na altitude z .

$$L_i = n_i \sum_j n_j k(i + j \rightarrow l + m) + n_i \sum_f R(i + hv_f \rightarrow l + m)$$

Termo associado com a destruição espécie i devido a reação com a espécie j a taxa k [$cm^3 s^{-1}$] na altitude z .

Termo associado com a destruição da espécie i como resultado da dissociação e ionização por fótons do tipo f a taxa R [s^{-1}] na altitude z .

Escrevemos a densidade numérica da espécie química i em relação com a espécie dominante, neste caso, H I. Portanto:

$$\frac{n_i}{n_{HI}} = x_i \Rightarrow n_i = n_{HI} x_i$$

sendo x_i a abundância fracionária da espécie i .

Reescrevemos a equação diferencial de primeiro grau (5.1) em termos de $n_{HI} x_i$:

$$0 = -\frac{d(n_{HI} x_i V_i)}{dz} + P_i - L_i$$

Ou seja:

$$0 = -n_{HI} x_i \frac{dV_i}{dz} - V_i n_{HI} \frac{dx_i}{dz} - V_i x_i \frac{dn_{HI}}{dz} + P_i - L_i$$

$$P_i = n_{HI}^2 \sum_l \sum_m x_l x_m k(l + m \rightarrow i + j) + n_{HI} \sum_l x_l R(l + hv_f \rightarrow i + j)$$

$$L_i = n_{HI}^2 x_i \sum_j x_j k(i + j \rightarrow l + m) + n_{HI} x_i \sum_f R(i + hv_f \rightarrow l + m)$$

Fatorizando n_{HI} e reorganizando:

$$V_i \frac{dx_i}{dz} + x_i \frac{dV_i}{dz} + V_i x_i \frac{1}{n_{HI}} \frac{dn_{HI}}{dz} - \frac{P_i}{n_{HI}} + \frac{L_i}{n_{HI}} = 0 \quad (5.2)$$

$$\frac{P_i}{n_{HI}} = n_{HI} \sum_l \sum_m x_l x_m k(l + m \rightarrow i + j) + \sum_l x_l R(l + hv_f \rightarrow i + j)$$

$$\frac{L_i}{n_{HI}} = n_{HI} x_i \sum_j x_j k(i + j \rightarrow l + m) + x_i \sum_f R(i + hv_f \rightarrow l + m)$$

A equação (5.2) será usada para obter os perfis de abundância fracionária de espécies químicas ao longo da perda de massa atmosférica de HD 209458b e GJ 436b.

5.3. As constantes da taxa de reação k e R

Para as reações químicas de dois corpos, a constante de taxa de reação é dada pela equação de Kooij (Kooij 1893):

$$k = \alpha \left(\frac{T(z)}{300 \text{ K}} \right)^\beta e^{-\gamma/T(z)} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$$

onde $T(z)$ [K] é a temperatura do gás, sendo neste caso função da altitude z . α , β , e γ são constantes caracterizando a reação.

Para ionizações diretas e fotorreações induzidas por raios cósmicos, as constantes de taxa de reações são, respectivamente (McElroy et al. 2013):

$$R_{CR-\text{próton}} = \alpha \text{ s}^{-1}$$

$$R_{CR-\text{fóton}} = \alpha \left(\frac{T(z)}{300 \text{ K}} \right)^\beta \frac{\gamma}{1 - \omega} \text{ s}^{-1}$$

onde α é a taxa de ionização por raios cósmicos, γ sua eficiência, e ω o albedo de grãos de poeira no ultravioleta distante (normalmente 0,4 – 0,6 em 1500 Å).

Para fotorreações interestelares, a constante da taxa de reação é dada pela fórmula:

$$R_{\text{fóton}} = \alpha e^{-\gamma A_V} \text{ s}^{-1}$$

onde α representa a constante de reação num ambiente sem proteção do campo de radiação UV interestelar, A_V é a extinção da poeira no visível e γ é o parâmetro usado para levar em conta o aumento da extinção de poeira no ultravioleta (McElroy et al. 2013).

As constantes da taxa de reação k e R para cada uma das 972 reações consideradas neste estudo foram obtidas do banco de dados para Astroquímica UMIST, versão 2012 (udfa.ajmarkwick.net).

As constantes das taxas de reações para as fotorreações interestelares do UMIST deverão ser corrigidas segundo o fator P estimado na seção 4.4, ou seja:

$$R_{fóton} = \alpha e^{-\gamma A_V} P \text{ s}^{-1} \quad (5.3)$$

Mas, ao decair o campo de radiação da estrela com o quadrado da distância, e as reações acontecendo ao longo de uma distância z considerável (da ordem de 10^6 Km para HD 209458b) em uma região próxima da estrela, P será uma variável com a altitude z :

$$R_{fóton} = \alpha e^{-\gamma A_V} P(z) \text{ s}^{-1} \quad (5.4)$$

5.4. Processos químicos

A astroquímica, também conhecida como astrofísica molecular, é o estudo da formação, destruição e excitação de moléculas em ambientes astronômicos e a sua influência na estrutura, dinâmica e evolução dos objetos astronômicos (Van Dishoeck 2017).

Atualmente, mais de 200 diferentes moléculas foram detectadas no meio interestelar e circumstelar, além das identificadas nos cometas, planetas, exoplanetas e atmosferas de estrelas e anãs marrons (ver Figura 5.1).

Há uma variedade de processos que podem levar à formação de moléculas nos cenários mencionados anteriormente, os quais podem ser separados em duas classes: reações que ocorrem na fase gasosa e na superfície de pequenos grãos de poeira (Tielens 2005).

No presente estudo foram considerados processos de dois corpos na fase gasosa (ver Tabela 5.1), que podem ser divididos em processos de formação (associação radiativa e separação associativa), que ligam átomos em espécies simples ou mais complexas; processos de destruição como a fotodissociação e recombinação dissociativa, onde espécies são fragmentadas em espécies menores; e processos de rearranjo (íon-molécula, transferência de carga, neutralização mútua e reações neutro-neutro), onde são transferidas partes de um reagente químico para outro.

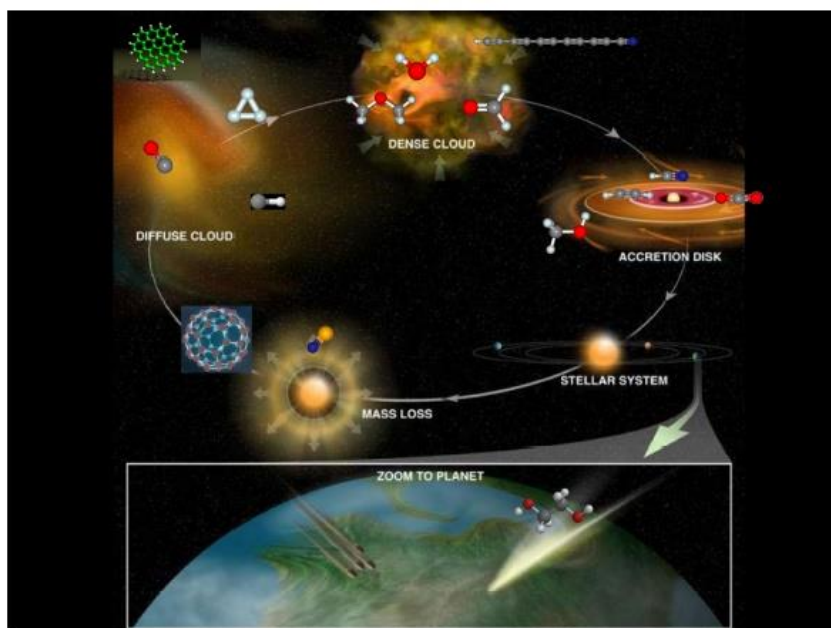


Figura 5.1. Ciclo de vida do gás e a poeira no meio interestelar. Algumas moléculas características (por exemplo, C_{60} , CO , H_2O , $C_2H_6O_2$, C_2H_2 , CH , PAHs) são indicadas. O site www.astrochymist.org contém uma lista de moléculas detectadas no espaço. Fonte: Van Dishoeck 2017.

Tabela 5.1. Reações de dois corpos em fase gasosa e suas taxas.

Reação	Representação	Taxa	Unidade	Observação	Exemplo
Fotodissociação	$AB + h\nu \rightarrow A + B$	10^{-9}	s^{-1}	(a)	$C_2N + h\nu \rightarrow CN + C$
Neutro-Neutro	$A + B \rightarrow C + D$	4×10^{-11}	$cm^3 s^{-1}$	(b)	$N + CH_2 \rightarrow HNC + H$
Íon-Molécula	$A^+ + B \rightarrow C^+ + D$	2×10^{-9}	$cm^3 s^{-1}$	(c)	$NH^+ + NH \rightarrow NH_2^+ + N$
Transferência de carga	$A^+ + B \rightarrow A + B^+$	10^{-9}	$cm^3 s^{-1}$	(c)	$H_2^+ + CN \rightarrow CN^+ + H_2$
Associação Radiativa	$A + B \rightarrow AB + h\nu$			(d)	$C^+ + N \rightarrow CN^+ + h\nu$
Recombinação Dissociativa	$A^+ + e^- \rightarrow C + D$	10^{-7}	$cm^3 s^{-1}$		$C_2N^+ + e^- \rightarrow CN + C$
Separação Associativa	$A^- + B \rightarrow AB + e^-$	10^{-9}	$cm^3 s^{-1}$	(c)	$H^- + NH \rightarrow NH_2 + e^-$
Neutralização Mútua	$A^- + B^+ \rightarrow A + B$		$cm^3 s^{-1}$		$OH^- + CNC^+ \rightarrow OH + C_2N$

(a) Taxa no campo de radiação sem proteção. (b) Taxa na direção exotérmica e assumindo não haver barreira de ativação (não há energia de ativação para a reação acontecer). (c) Taxa na direção exotérmica (com liberação de energia na forma de calor). (d) Taxa varia muito com a reação específica. Fonte: adaptado de Tielens 2005.

5.5. Modelo químico da atmosfera superior de HD 209458b e GJ 436b

O desenvolvimento da equação (5.2) precisa dos perfis de velocidade, densidade e temperatura das espécies químicas envolvidas, sendo obtidos de Bourrier & Lecavelier des Etangs (2013) e Koskinen et al. (2013a) no caso de HD 209458b, e de Bourrier et al. (2016) e Parke Loyd et al. (2017) no caso de GJ 436b. Também, são necessárias as abundâncias fracionárias iniciais das espécies químicas consideradas no presente estudo para cada exoplaneta (ver seção da metodologia) que, no caso das espécies atômicas, vieram das referências Koskinen et al. (2013a) e Parke Loyd et al. (2017).

O modelo 1D da termosfera de HD 209458b de Koskinen et al. (2013a) é o mais completo até agora. Neste modelo foram considerados a fotoionização, ionização térmica e troca de carga das espécies H, He, C, N, O, Si, e seus íons, incluindo 33 reações químicas. Para o exoplaneta GJ 436b, apenas um modelo unidimensional de sua termosfera foi desenvolvido (Parke Loyd et al. 2017), considerando ionização, recombinação e fotoquímica das espécies $H_2 I$, $H I$, $He I$, $C I$, $O I$, $H II$, $H_2 II$, $H_3 II$, $HeH II$, $C II$, $O II$ e elétrons. Os dois modelos não consideraram a presença de campos magnéticos e as abundâncias iniciais em suas simulações foram baseadas na composição solar. As Figuras 5.2 e 5.3 mostram os perfis de densidade numérica na atmosfera superior de HD 209458b e GJ 436b, respectivamente, da literatura já mencionada.

No caso de HD 209458b, a Figura 5.2 mostra que as transições $H I/H II$ e $O I/O II$ acontecem em uma altitude aproximada de $3R_p$ (acima do lóbulo de Roche). Em contraste, as transições $He I/He II$ e $C I/C II$ ocorrem abaixo do lóbulo de Roche, sendo $C II$ a espécie de carbono dominante na termosfera. Os átomos pesados neutros e ionizados são arrastados pelo escape das espécies $H I$ e $H II$. A situação é diferente para GJ 436b de acordo com a Figura 5.3, já que as espécies neutras são as dominantes em relação às espécies ionizadas para altitudes abaixo e acima do lóbulo de Roche. Destaca-se a abundância de $H_2 I$ com respeito à abundância das espécies $C I$, $O I$, $C II$, e $O II$ na exosfera de GJ 436b.

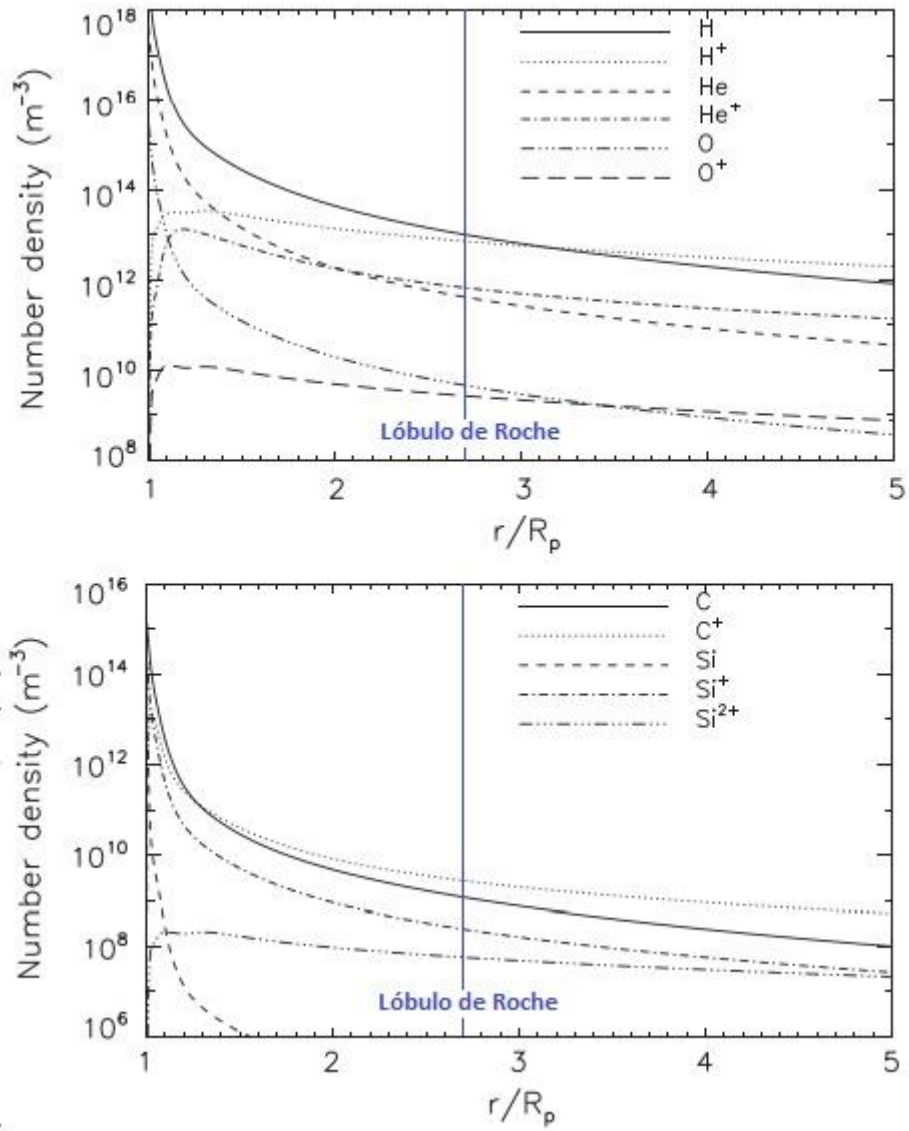


Figura 5.2. Perfis de densidade numérica na atmosfera superior de HD 209458b obtidas por Koskinen et al. (2013a).

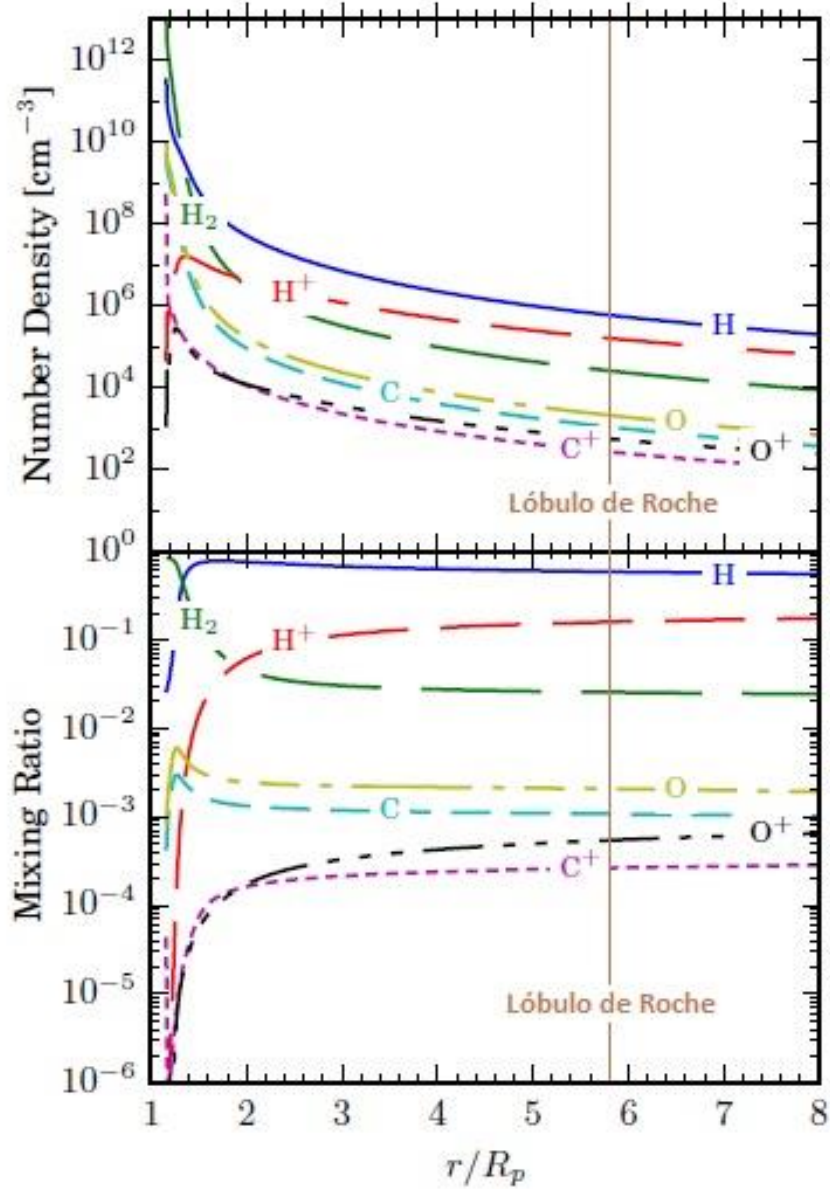


Figura 5.3. Perfis de densidade numérica e razão de mistura na atmosfera superior de GJ 436b obtidas por Parke Loyd et al. (2017).

6. Metodologia

6.1. Os programas AstroReactions e ReactionEquations

As espécies químicas consideradas no modelo químico para estudar a formação molecular na região da perda de massa atmosférica de GJ 436b e HD 209458b são aquelas que aparecem na Tabela 6.1. No total, são 84 espécies químicas (neutras e íons) contendo os átomos H, He, C, O e N, onde 71 são espécies moleculares. O número de reações químicas e fotoquímicas envolvidas no modelo é de 972, usando o banco de dados UMIST. O modelo químico foi construído considerando uma região da perda de massa atmosférica onde a temperatura é de aproximadamente 2000 K, o limite onde a molécula de água pode sofrer dissociação térmica. Nós assumimos que **(a)** as espécies químicas consideradas no modelo têm o mesmo perfil de velocidade do H I, a espécie mais abundante; **(b)** as órbitas para os dois exoplanetas são circulares. Além disso, o modelo não considera a presença do campo magnético planetário, um fator que afeta consideravelmente os resultados obtidos neste estudo.

Tabela 6.1. Espécies consideradas no modelo químico.

H, H ⁺ , H ⁻ , He, He ⁺ , C, C ⁺ , C ⁻ , O, O ⁺ , O ⁻ , N, N ⁺ , e ⁻
H ₂ , H ₂ ⁺ , H ₃ ⁺ , OH, OH ⁺ , OH ⁻ , H ₂ O, H ₂ O ⁺ , H ₃ O ⁺ , CO, CO ⁺ , CO ₂ , CO ₂ ⁺ , HCO, HCO ⁺ , H ₂ CO, CN, CN ⁺ , CN ⁻ , N ₂ , N ₂ ⁺ , NH, NH ⁺ , NO, NO ⁺ , C ₂ N, C ₂ N ⁺ , CNC ⁺ , HNC, HNO, HNO ⁺ , N ₂ H ⁺ , NO ₂ , NO ₂ ⁺ , HCN, HCN ⁺ , N ₂ O, N ₂ O ⁺ , NH ₂ , NH ₂ ⁺ , OCN, OCN ⁺ , CH, CH ⁺ , CH ⁻ , CH ₂ , CH ₂ ⁺ , CH ₃ , CH ₃ ⁺ , CH ₄ , CH ₄ ⁺ , C ₂ H, C ₂ H ⁺ , C ₂ H ⁻ , C ₂ H ₂ , C ₂ H ₂ ⁺ , C ₂ H ₃ , C ₂ H ₃ ⁺ , C ₂ H ₄ , C ₂ H ₄ ⁺ , C ₃ H ₂ , C ₃ H ₃ , C ₃ H ₃ ⁺ , C ₃ H ₄ ⁺ , C ₄ H ₂ ⁺ , C ₄ H ₃ ⁺ , C ₅ H ₃ ⁺ , C ₆ H ₅ ⁺ , C ₆ H ₆ , C ₆ H ₆ ⁺ , C ₆ H ₇ ⁺

Para resolver numericamente a equação (5.2) e, portanto obter os perfis de abundância fracionária das espécies moleculares ao longo da perda de massa atmosférica de GJ 436b e HD 209458b, foi necessário a implementação do pacote DASSLC (Differential Algebraic System Solver in C) adaptado para o programa MATLAB (Secchi 2010) para solucionar um sistema de 81 equações diferenciais de primeiro grau acopladas. Os perfis de H, H₂, He e elétrons são dados de entrada.

O algoritmo de integração usado em DASSLC é uma extensão do código DASSL de Petzold (1983). DASSL resolve numericamente um sistema de equações diferenciais algébricas da forma:

$$F\left(t, y, \frac{dy}{dt}\right) = 0$$

onde F , y , e $\frac{dy}{dt}$ são vetores, e valores iniciais para y e $\frac{dy}{dt}$ devem ser dados.

DASSL aproxima $\frac{dy}{dt}$ através da fórmula de diferenciação regressiva (Backward Differentiation Formula – BDF), e o sistema não linear resultante em cada iteração é resolvido pelo método de Newton.

Para a implementação correta do DASSLC no MATLAB neste trabalho, foi necessário a construção dos programas AstroReactions e ReactionEquations, cujas estruturas são apresentadas no apêndice A.3. O AstroReactions é o programa principal e contém os valores iniciais de abundância fracionária das espécies químicas para um determinado valor de metalicidade e C/O; os valores inicial e final dos perfis de temperatura, densidade e velocidade do H I para cada um dos cenários envolvidos neste estudo, e a execução do DASSLC sobre o programa ReactionEquations. O programa ReactionEquations contém os perfis de densidade, temperatura e velocidade para H I; os perfis de abundância fracionária de H₂, He e elétrons; o fator de correção multiplicativo; as 972 constantes da taxa de reação química e fotoquímica, e as 81 equações de continuidade.

6.2. Os perfis para GJ 436b e HD 209458b

No caso de GJ 436b, a partir dos resultados de Bourrier et al. (2016) foram obtidos os perfis de densidade e velocidade do H I. Inicialmente, foi desenvolvido um programa (ver programa densidade no apêndice A.1) que calculou a densidade nos pontos de posição das metapartículas de H I (1 metapartícula = $6,27 \times 10^{30}$ átomos) fornecidas por Bourrier et al. (2016) em comunicação privada. Para obter o perfil de velocidade, foi feito o programa caminho (ver apêndice A.2) que define a trajetória de uma metapartícula de H I no campo de velocidade 3D também proporcionado por Bourrier et al. (2016) em comunicação privada. Para obter o perfil de velocidade, várias trajetórias foram analisadas, sendo escolhida a de menor curvatura, com ponto inicial em (0,00092; 0,0; 0,0) UA perto da exobase do planeta, como mostram as Figuras 6.1 e 6.2.

Uma vez obtida a trajetória, foram realizados os ajustes potencial e linear do perfil de densidade e velocidade do H I ao longo deste caminho, respectivamente (ver Figuras 6.3 e 6.4). Os valores encontrados em 0,00092 UA foram 2864 cm^{-3} e 55 km s^{-1} , sendo consistentes com as indicações de Bourrier et al. (2016). Os perfis foram limitados até 0,011 UA, o que corresponde aos valores 48 cm^{-3} e 85 km s^{-1} . Além do perfil de velocidade linear, foi incluído o caso de velocidade constante (55 km s^{-1}), pois não temos certeza de que as moléculas e átomos pesados irão interagir o suficiente com o H I para adquirirem o perfil de velocidade linear.

Usando os resultados de Parke Loyd et al. (2017) foi realizado o ajuste potencial para o perfil de temperatura como mostra a Figura 6.5, obtendo os valores de 2365 K e 612

K em 0,00092 UA e 0,011 UA, respectivamente. Nós assumimos um perfil de temperatura radialmente isotrópico, já que o perfil de temperatura de Parke Loyd et al. (2017) não foi calculado na mesma trajetória da Figura 6.2. Como o caminho escolhido para obter os perfis de densidade e velocidade do H I não é paralelo à linha estrela/planeta, nós usamos um fator de correção P constante - para ser mais conservativo - e não um fator de correção que diminui com a lei do quadrado da distância. Portanto, as constantes da taxa para as fotorreações interestelares do UMIST serão dadas pela relação (5.3).

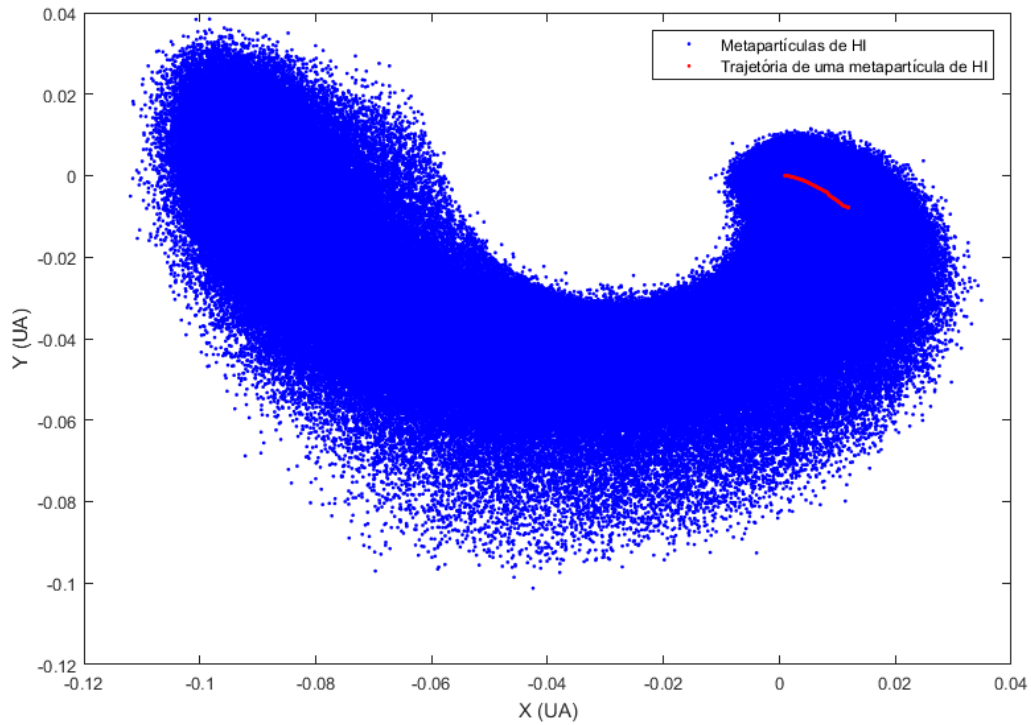


Figura 6.1. Projeção no plano orbital de GJ 436b da nuvem 3D de metapartículas de H I escapando, no referencial do planeta. Resultados de Bourrier et al. (2016). A linha vermelha representa a trajetória de uma metapartícula de H I no campo de velocidade 3D da nuvem. A posição da estrela hospedeira é (-0,0306; -0,0001) UA. 1 metapartícula = $6,27 \times 10^{30}$ átomos.

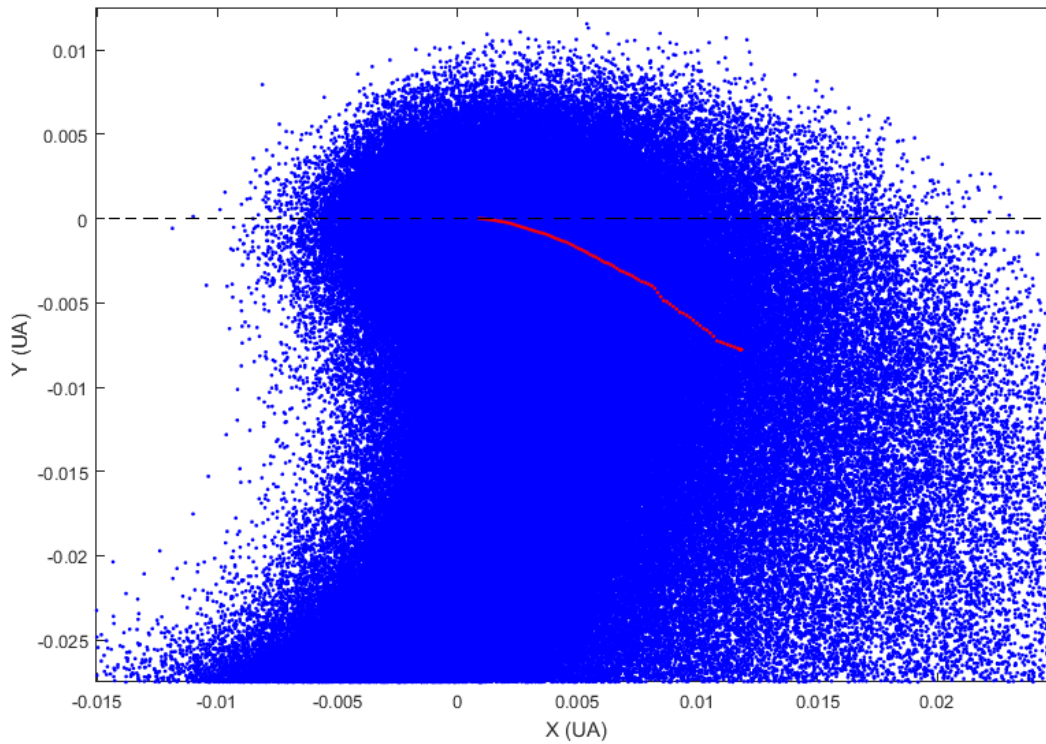


Figura 6.2. Aumento da Figura 6.1 mostrando o comportamento não paralelo à linha estrela/planeta (linha tracejada) da trajetória de uma metapartícula de H I no campo de velocidade 3D da nuvem.

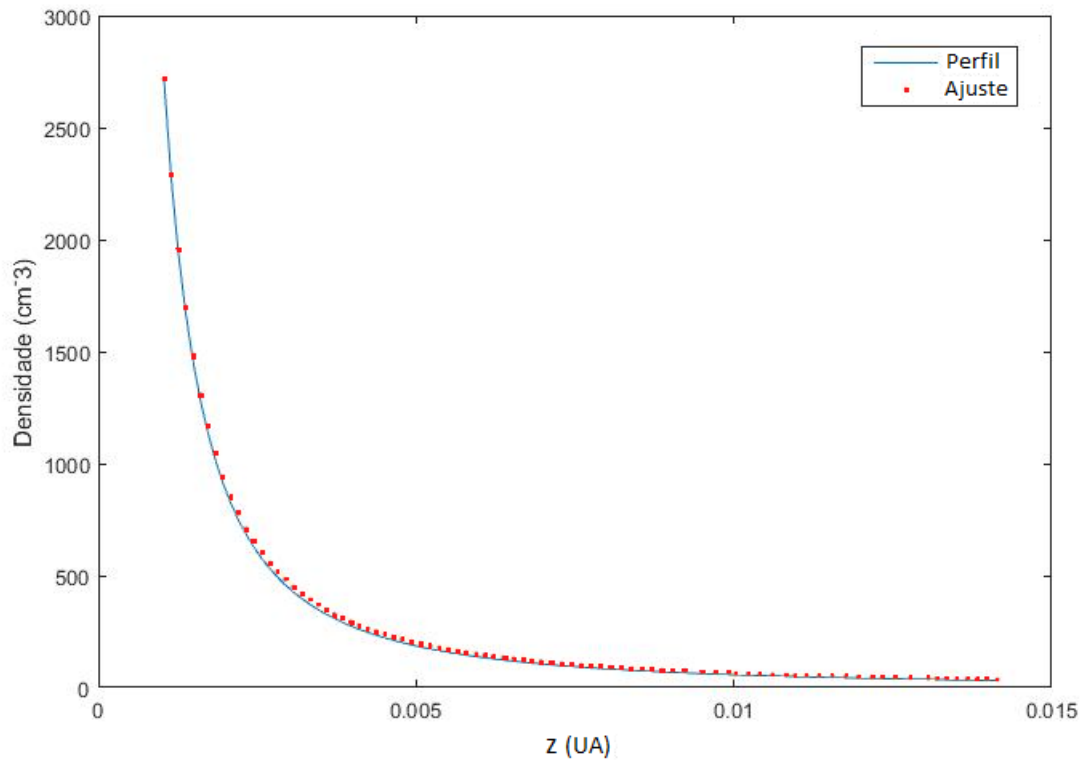


Figura 6.3. Ajuste potencial (pontos em vermelho) do perfil de densidade do H I ao longo da trajetória mostrada na Figura 6.2. z representa a altitude planetária.

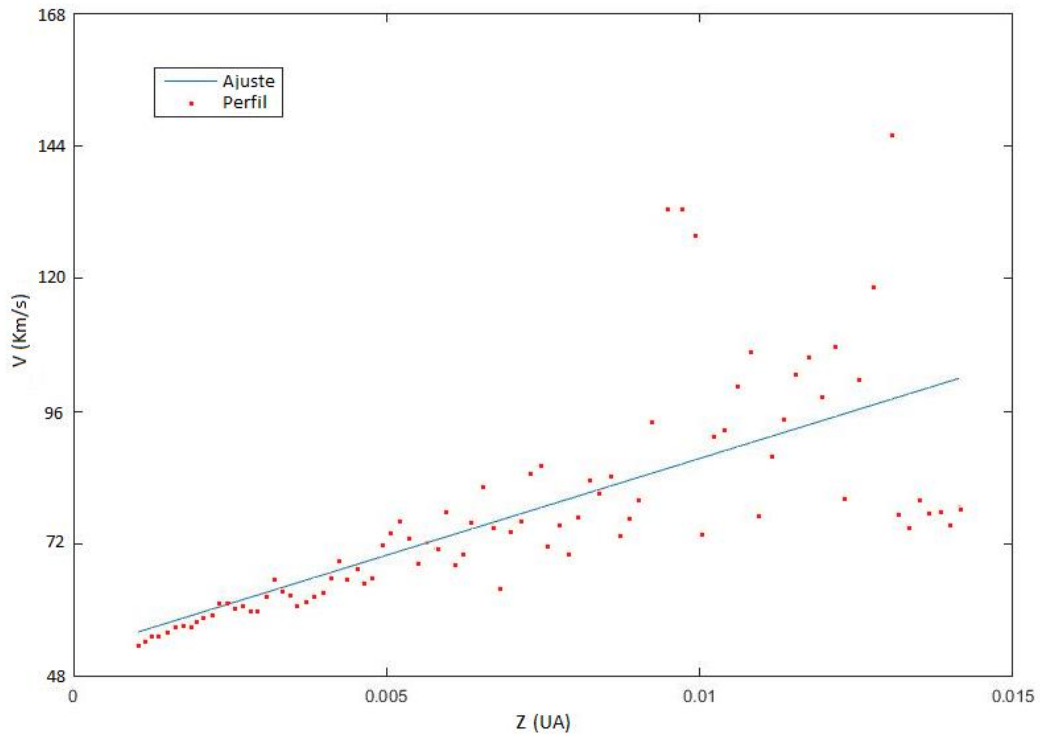


Figura 6.4. Ajuste linear (linha azul) do perfil de velocidade do H I ao longo da trajetória mostrada na Figura 6.2. Z representa a altitude planetária. O referencial é o planeta.

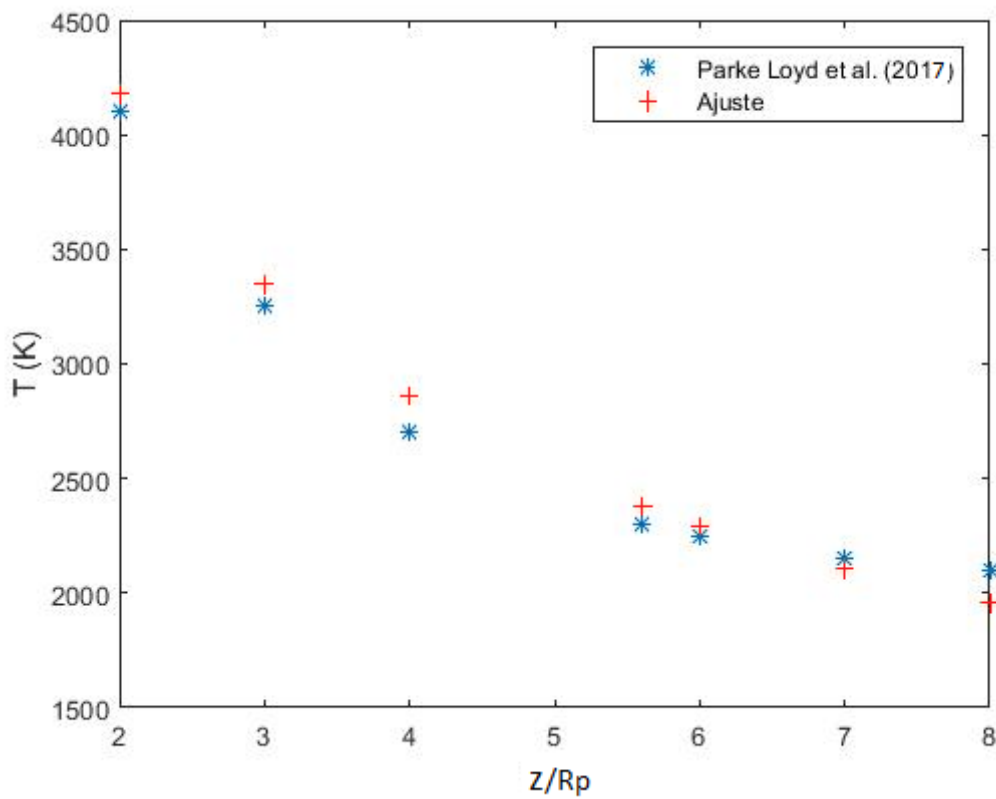


Figura 6.5. Ajuste potencial (cruzes em vermelho) do perfil de temperatura do H I de Parke Loyd et al. (2017). Z e R_p representam a altitude e o raio planetário ($4.22R_\oplus$), respectivamente.

Para HD 209458b, as informações dos perfis neste estudo são as mesmas usadas no trabalho de Pinotti & Boechat-Roberty (2016). Eles obtiveram o perfil de densidade do H I de Bourrier & Lecavelier des Etangs (2013), já que é a única simulação 3D feita especificamente para a exosfera; o perfil de velocidade de Vidal-Madjar et al. (2003) e o de temperatura através de extrapolação dos modelos hidrodinâmicos de Garcia-Muñoz (2007), Penz et al. (2008), Murray-Clay et al. (2009), Guo (2011), e Koskinen et al. (2013a) que estão na Tabela 3.1. A região considerada no estudo está a uma distância aproximada de 0,0045 UA do planeta, onde a temperatura fica em torno de 2000 K, com valores iniciais de densidade e velocidade de 5000 cm^{-3} e 40 km s^{-1} , respectivamente. O alto fluxo de fótons XUV estelar em comparação com GJ 436 ($\sim 10^3$ vezes maior) o que leva a uma alta pressão de radiação (mecanismo para acelerar os átomos de H I), e a alta densidade inicial do H I permitem assumir um perfil de velocidade linear (comportamento que concorda com os modelos teóricos, por exemplo, Koskinen et al. 2013a), em vez de velocidade constante, obtendo como valor final 130 km s^{-1} a uma distância aproximada de 0,0181 UA do planeta, onde a densidade do H I é baixa (da ordem de 10 cm^{-3}). Também foi assumido um perfil de temperatura radialmente isotrópico.

Tal como acontece com GJ 436b, a cauda gerada pela perda de massa atmosférica em HD 209458b não é paralela à linha estrela/planeta como mostra a Figura 6.6, mas a posição da região considerada no caso de HD 209458b - não sendo nas proximidades do planeta - e sua curvatura menor em comparação com GJ 436b, nos permite assumir um fator de correção P que diminui com a lei do quadrado da distância. Nessa situação as constantes da taxa para as fotorreações interestelares do UMIST serão dadas pela relação (5.4).

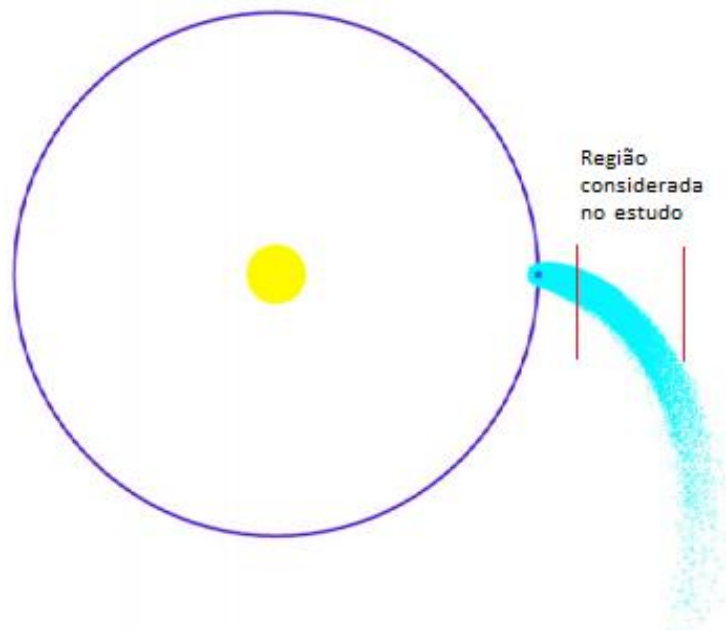


Figura 6.6. Vista de cima do sistema planetário HD 209458 mostrando a região considerada neste estudo, a partir de $6,9 R_p$ até $27,5 R_p$, onde R_p é o raio do planeta. Os pontos azuis claros representam os átomos de H I escapando de HD 209458b (ponto azul). Fonte: adaptado de Bourrier & Lecavelier des Etangs (2013).

Os resultados geralmente mostram que a abundância do hidrogênio molecular, H_2 , cai fortemente quando a pressão é da ordem de $10^{-6} - 10^{-7}$ bar (por exemplo, Koskinen et al. 2013a; Parke Loyd et al. 2017). Há evidência observacional da existência de uma camada de poeira opticamente fina na atmosfera exterior de HD 209458b (Richardson et al. 2007, Burrows et al. 2008) e possíveis cenários de alta metalicidade em GJ 436b (Lothringer et al. 2018) que poderiam blindar as moléculas de H_2 da radiação estelar, estendendo sua sobrevivência à termosfera e exosfera com uma abundância fracionária significativa. Portanto, nós assumimos neste estudo a abundância de H_2 em relação ao H I como um parâmetro de entrada com um comportamento linear em seu perfil, com valores entre $10^{-1} - 10^{-2}$ (caso padrão) para os dois exoplanetas. As Tabelas 6.2 e 6.3 mostram as informações sobre os perfis de temperatura, densidade de H I, velocidade, e abundância de H_2 usados na modelagem para GJ 436b e HD 209458b, respectivamente.

Tabela 6.2. Perfis de temperatura, densidade de H I, velocidade, e abundância de H_2 usados na modelagem para GJ 436b. $1 R_p = 4,22R_{\oplus} = 26\,850\text{ km}$. * Valores padrão.

Variável	Valor em 5, 14 R_p $1,38 \times 10^5\text{ km}$	Valor em 61 R_p $1,64 \times 10^6\text{ km}$	Comportamento do perfil
Temperatura (K)	2365	612	Lei de potência com expoente -0,546
Densidade HI (cm^{-3})	2864	48	Lei de potência com expoente -1,65
Velocidade (km s^{-1})	55	55	Constante
$H_2/H\text{ I}^*$	1×10^{-1}	1×10^{-2}	Linear

Tabela 6.3. Perfis de temperatura, densidade de H I, velocidade, e abundância de H_2 usados na modelagem para HD 209458b. $1 R_p = 15,5R_{\oplus} = 98\,735\text{ km}$. * Valores padrão.

Variável	Valor em 6, 9 R_p $6,81 \times 10^5\text{ km}$	Valor em 27, 5 R_p $2,71 \times 10^6\text{ km}$	Comportamento do perfil
Temperatura (K)	2000	500	Lei de potência com expoente -1,0
Densidade HI (cm^{-3})	5000	10	Lei de potência com expoente -2,8
Velocidade (km s^{-1})	40	130	Linear
$H_2/H\text{ I}^*$	1×10^{-1}	1×10^{-2}	Linear

6.3. Abundâncias iniciais e valores de A_V para GJ 436b e HD 209458b

Além dos perfis, é necessário conhecer as abundâncias fracionárias iniciais das espécies químicas para resolver numericamente as 81 equações de continuidade acopladas no programa ReactionEquations. Para HD 209458b, esses valores foram obtidos de Koskinen et al. (2013a) como é mostrado na Figura 5.2, tendo como referência os valores em 5 R_p . No caso de GJ 436b, as abundâncias iniciais foram obtidas de Parke Loyd et al. (2017) (ver Figura 5.3) usando os valores no lóbulo de Roche ($\sim 6 R_p$). Nesses dois modelos, os autores usaram abundância solar. Nas Tabelas 6.4 e 6.5 são mostrados os valores de abundância fracionária inicial das espécies atômicas – sendo zero para espécies moleculares- para razões C/O diferentes da solar, onde as abundâncias das espécies C, C⁺, O e O⁺ foram corrigidas de forma proporcional.

O valor da abundância eletrônica para HD 209458b foi fixada em um valor consistente com cálculos de densidade eletrônica na atmosfera superior de acordo com Koskinen et al. (2014). Mas a estimativa da abundância eletrônica para GJ 436b de acordo com Parke Loyd et al. (2017) foi considerada exagerada para o nosso estudo (da ordem de 10^{-1}) se é comparada com a abundância eletrônica para HD 209458b (da ordem de 10^{-3}), já que o campo de radiação ionizante da estrela HD 209458 é bem maior do que a da estrela GJ 436. Portanto, nós usamos um valor padrão conservativo (da ordem de 10^{-7}) que é o resultado da multiplicação entre a abundância eletrônica para HD 209458b e o fator $10^5/10^9=10^{-4}$, que é o fator de redução no campo de radiação. O cenário com abundância eletrônica de 10^{-1} foi estudado para ver a sensibilidade dos resultados.

Usando o perfil de densidade numérica do H I entre 1 R_p e 6,9 R_p de Bourrier & Lecavelier des Etangs (2013) para HD 209458b e a densidade de coluna de Ehrenreich et al. (2015) para GJ 436b, foi calculado o valor de A_V para cada exoplaneta com a relação (2.2), obtendo como resultados $\sim 10^{-3}$ e $\sim 10^{-7}$ magnitudes, respectivamente. Esses valores podem ser aumentados, já que a alta metalicidade (no caso de GJ 436b) e a possibilidade da presença de poeira (no caso de HD 209458b) tornaria a atmosfera mais opaca. Portanto, para mostrar a sensibilidade dos resultados variando A_V , nós consideramos valores como 0,1; 0,5; 1,0 (padrão); 1,5 e 2,0 magnitudes.

Tabela 6.4. Abundâncias fracionárias usadas como ponto de partida na modelagem para GJ 436b. Metalicidade Solar.

C/O ^a	0,43 ^b	0,54 (solar)	0,75	1,00	1,25	1,50	2,00
C	$2,50 \times 10^{-3}$	$2,92 \times 10^{-3}$	$3,58 \times 10^{-3}$	$4,16 \times 10^{-3}$	$4,64 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-3}$	$5,55 \times 10^{-3}$
C ⁺	$5,00 \times 10^{-4}$	$5,84 \times 10^{-4}$	$7,15 \times 10^{-4}$	$8,33 \times 10^{-4}$	$9,27 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-3}$	$1,11 \times 10^{-3}$
O	$6,00 \times 10^{-3}$	$5,56 \times 10^{-3}$	$4,90 \times 10^{-3}$	$4,28 \times 10^{-3}$	$3,80 \times 10^{-3}$	$3,43 \times 10^{-3}$	$2,86 \times 10^{-3}$
O ⁺	$1,00 \times 10^{-3}$	$9,27 \times 10^{-4}$	$8,16 \times 10^{-4}$	$7,14 \times 10^{-4}$	$6,34 \times 10^{-4}$	$5,71 \times 10^{-4}$	$4,76 \times 10^{-4}$

^a Para cada um dos valores de C/O foram consideradas como abundâncias fracionárias iniciais:

H⁺ = $3,00 \times 10^{-1}$; He = $6,00 \times 10^{-2}$; He⁺ = $2,00 \times 10^{-2}$; N = $7,00 \times 10^{-5}$; N⁺ = $2,00 \times 10^{-5}$; e⁻ = $3,00 \times 10^{-7}$. N e N⁺ baseados na composição solar. ^b Valores obtidos de Parke Loyd et al. (2017). H⁺, He e He⁺ também foram obtidos dessa referência.

Tabela 6.5. Abundâncias fracionárias usadas como ponto de partida na modelagem para HD 209458b. Metalicidade Solar.

C/O^c	0,54 (solar)	0,68^d	0,75	1,00	1,25	1,50	2,00
C	$1,75 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-4}$	$2,14 \times 10^{-4}$	$2,50 \times 10^{-4}$	$2,78 \times 10^{-4}$	$3,00 \times 10^{-4}$	$3,33 \times 10^{-4}$
C ⁺	$7,00 \times 10^{-4}$	$8,00 \times 10^{-4}$	$8,55 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-3}$	$1,11 \times 10^{-3}$	$1,20 \times 10^{-3}$	$1,33 \times 10^{-3}$
O	$5,40 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-4}$	$4,79 \times 10^{-4}$	$4,17 \times 10^{-4}$	$3,70 \times 10^{-4}$	$3,33 \times 10^{-4}$	$2,78 \times 10^{-4}$
O ⁺	$1,08 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-3}$	$9,58 \times 10^{-4}$	$8,34 \times 10^{-4}$	$7,40 \times 10^{-4}$	$6,66 \times 10^{-4}$	$5,56 \times 10^{-4}$

^c Para cada um dos valores de C/O foram consideradas como abundâncias fracionárias iniciais:

$H^+ = 1,50 \times 10^0$; $He = 5,00 \times 10^{-2}$; $He^+ = 2,00 \times 10^{-1}$; $N = 1,69 \times 10^{-5}$; $N^+ = 5,08 \times 10^{-4}$;

$e^- = 1,00 \times 10^{-3}$. ^d Valores obtidos de Koskinen et al. (2013a). H^+ , He, He^+ , N e N^+ também foram obtidos dessa referência.

7. Resultados

7.1. GJ 436b e HD 209458b com parâmetros padrão

Usando como parâmetros padrão os valores de $C/O=1,0$ (ver Tabelas 6.4 e 6.5), a extinção no visível $A_V=1,0$, os perfis das Tabelas 6.2 e 6.3, e os valores calculados para o fator de correção multiplicativo P da Tabela 4.4, foram obtidos os perfis de abundância fracionária das espécies moleculares ao longo da perda de massa atmosférica de GJ 436b e HD 209458b, como é mostrado no apêndice C. Para GJ 436b, os gráficos mostram que todas as espécies moleculares têm um perfil onde a abundância fracionária aumenta com a distância ao longo da região de simulação, atingindo valores máximos em 10^{11} cm (10^6 km). Essa situação não acontece completamente com HD 209458b, onde determinadas espécies moleculares atingem seus valores máximos de abundância a distâncias inferiores a 10^{11} cm. Por exemplo, as espécies CH^+ e OH da Figura 7.2 têm perfis de abundância com valores máximos atingidos a uma distância de 10^9 cm (10^4 km) do planeta. Isso é devido à diferença entre o aumento das abundâncias das espécies envolvidas na taxa de destruição de CH^+ e OH , e o aumento das abundâncias das espécies que participam de sua taxa de formação. Em GJ 436b acontece o caso inverso com a espécie CO^+ (ver Figura 7.1), onde a partir de certa distância ($\sim 10^{10}$ cm) começa a ser significativamente maior o aumento das abundâncias das espécies que participam de sua taxa de formação em comparação com o aumento das abundâncias das espécies envolvidas na taxa de destruição.

Determinadas espécies moleculares para GJ 436b e HD 209458b no apêndice C apresentaram irregularidades em partes específicas de seus perfis de abundância fracionária (variações bruscas da curva de perfil). Essas irregularidades são o produto de instabilidades numéricas, sendo proporcionais ao tamanho do passo utilizado no programa AstroReactions.

Os resultados das Tabelas B.1.1 e B.2.1 no apêndice B indicam que não há formação de espécies com cadeias de carbono (mais de 2 átomos) nas regiões próximas a GJ 436b e HD 209458b. Apenas espécies moleculares simples contendo um átomo de oxigênio ou carbono (além do hidrogênio) são as mais abundantes em cada uma das duas regiões estudadas com abundâncias fracionárias máximas da ordem de grandeza entre 10^{-5} – 10^{-8} (no caso de GJ 436b) e 10^{-6} – 10^{-11} (no caso de HD 209458b) como aparecem nos gráficos das Figuras 7.1 e 7.2, respectivamente. Nos dois casos, as espécies moleculares dominantes são de natureza iônica, sendo a mais dominante o íon OH^+ com

uma abundância máxima da ordem de 10^{-5} e 10^{-6} , e densidades de coluna¹² de 10^8 cm^{-2} para GJ 436b e HD 209458b, respectivamente. Destacam-se o íon H_2O^+ , a única espécie molecular com mais de dois átomos com abundância fracionária significativa, e a presença do íon CO^+ em GJ 436b. As espécies neutras são mais favorecidas no ambiente de GJ 436b como mostra a Tabela 7.1 em comparação com HD 209458b (Tabela 7.2). A espécie molecular nitrogenada mais abundante na exosfera de GJ 436b é NH com uma abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, da ordem de $\sim 10^{-10}$, e para a exosfera de HD 209458b o íon NO^+ é a espécie molecular com nitrogênio mais abundante com $x_{m\acute{a}xima} \sim 10^{-11}$.

Tabela 7.1. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, com sua respectiva densidade numérica, n , para as espécies moleculares mais abundantes na exosfera de GJ 436b, usando parâmetros padrão. N é a densidade de coluna total.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	n [cm^{-3}]	N [cm^{-2}]
OH^+	$5,27 \times 10^{-5}$	$2,50 \times 10^{-3}$	$3,26 \times 10^8$
OH	$1,09 \times 10^{-6}$	$9,60 \times 10^{-5}$	$8,20 \times 10^6$
CH^+	$2,48 \times 10^{-7}$	$2,20 \times 10^{-5}$	$1,65 \times 10^6$
CH	$1,08 \times 10^{-7}$	$1,00 \times 10^{-5}$	$1,01 \times 10^6$
CO^+	$4,69 \times 10^{-8}$	$4,00 \times 10^{-6}$	$1,07 \times 10^5$
H_2O^+	$1,68 \times 10^{-8}$	$2,00 \times 10^{-6}$	$9,42 \times 10^4$

Tabela 7.2. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, com sua respectiva densidade numérica, n , para as espécies moleculares mais abundantes na exosfera de HD 209458b, usando parâmetros padrão. N é a densidade de coluna total.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	n [cm^{-3}]	N [cm^{-2}]
OH^+	$4,32 \times 10^{-6}$	$7,00 \times 10^{-4}$	$3,48 \times 10^8$
H_2O^+	$9,40 \times 10^{-9}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$2,48 \times 10^5$
CH^+	$3,80 \times 10^{-10}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$3,62 \times 10^4$
OH	$5,98 \times 10^{-11}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$4,63 \times 10^3$

¹² Neste trabalho as densidades de coluna calculadas não ficam ao longo da linha de visada em relação à Terra.

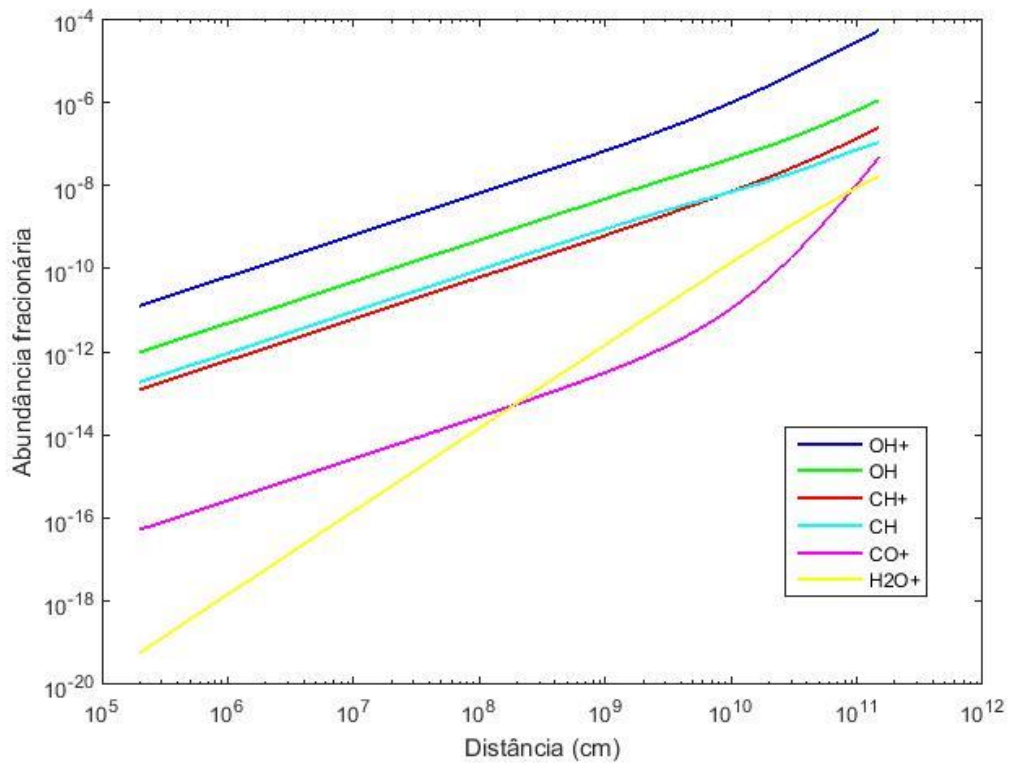


Figura 7.1. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares mais abundantes ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b. Parâmetros padrão: $C/O = 1,0$; Z_{\odot} ; $x(H_2_{inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2_{final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

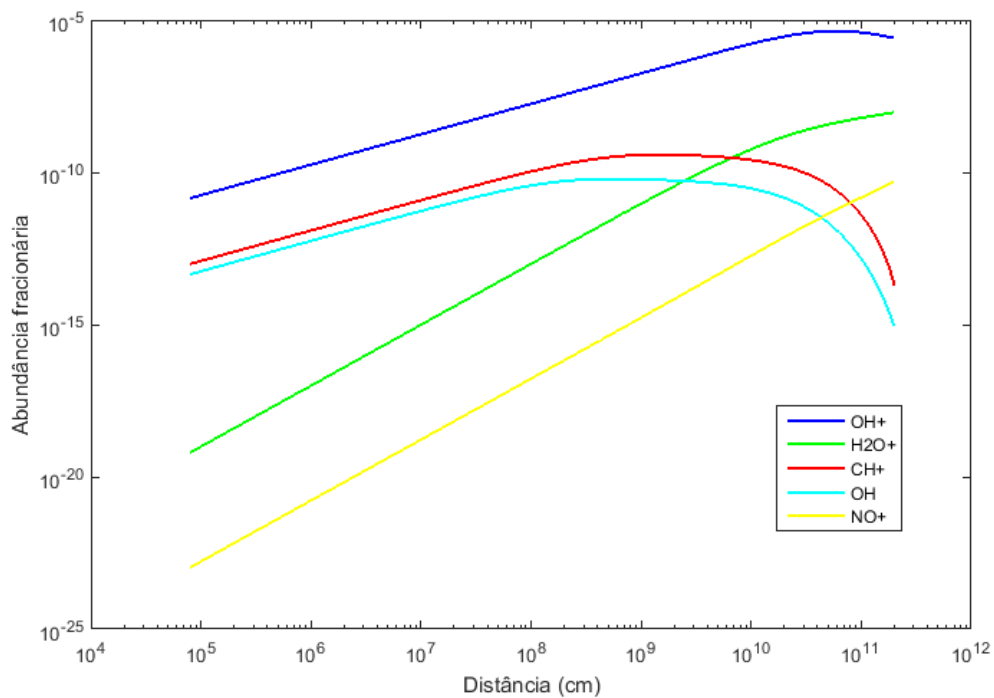


Figura 7.2. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares mais abundantes ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Parâmetros padrão: $C/O = 1,0$; Z_{\odot} ; $x(H_2_{inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2_{final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $P = 1 \times 10^9$.

7.2. Resultados variando a relação C/O

O efeito de variar a relação C/O para valores menores e maiores a 1, como mostram as Tabelas 6.4 e 6.5, levou a variações não tão significativas nas abundâncias relativas ao H I das espécies com oxigênio ou carbono nos dois ambientes considerados neste estudo, como evidenciam os resultados das Tabelas B.1.4 até B.1.9 e B.2.2 até B.2.7. Em termos de ordem de grandeza, a maioria das espécies moleculares não sofrem mudanças em suas abundâncias máximas. Por exemplo, para as espécies da Tabela 7.1 temos que os íons CH^+ , CO^+ e H_2O^+ tiveram suas abundâncias máximas entre $1,52 \times 10^{-7}$ - $3,25 \times 10^{-7}$, $3,95 \times 10^{-8}$ - $4,18 \times 10^{-8}$, e $2,36 \times 10^{-8}$ - $1,12 \times 10^{-8}$, respectivamente, para valores de C/O entre 0,43 e 2,0. No caso da Tabela 7.2, as espécies CH^+ e OH^+ mostraram variações em suas abundâncias máximas entre os valores $3,04 \times 10^{-10}$ - $5,06 \times 10^{-10}$ e $7,16 \times 10^{-11}$ - $3,98 \times 10^{-11}$, respectivamente, para os valores de C/O entre 0,68 e 2,0.

As Figuras 7.3 e 7.4 mostram os perfis de abundância fracionária da espécie OH^+ ao variar os valores de C/O para GJ 436b e HD 209458b, nessa ordem. Os resultados indicam que a variação da relação C/O tem pouco efeito sobre a abundância máxima desta espécie molecular, já que não aconteceram mudanças na ordem de grandeza como constata as Tabelas 7.3 e 7.4. Para GJ 436b, os resultados ficaram entre $7,38 \times 10^{-5}$ - $3,51 \times 10^{-5}$ para relações C/O entre 0,43 e 2,0. No caso de HD 209458b, as abundâncias máximas foram entre $5,60 \times 10^{-6}$ - $2,88 \times 10^{-6}$ para C/O entre 0,54 e 2,0. Com respeito à espécie nitrogenada mais abundante em cada exosfera, a espécie NH permaneceu inalterada (no caso de GJ 436b), e o íon NO^+ apresentou uma variação entre $6,54 \times 10^{-11}$ - $3,37 \times 10^{-11}$ para HD 209458b.

Tabela 7.3. Resultados de abundância máxima, $x_{\text{máxima}}$, com sua respectiva densidade numérica, n , para a espécie molecular mais abundante na exosfera de GJ 436b, OH^+ , ao variarmos a relação C/O. N é a densidade de coluna total.

Espécie molecular	C/O	$x_{\text{máxima}}$	n [cm^{-3}]	N [cm^{-2}]
OH^+	0,43	$7,38 \times 10^{-5}$	$3,57 \times 10^{-3}$	$4,56 \times 10^8$
	0,54	$6,84 \times 10^{-5}$	$3,30 \times 10^{-3}$	$4,23 \times 10^8$
	0,75	$6,03 \times 10^{-5}$	$2,90 \times 10^{-3}$	$3,72 \times 10^8$
	1,25	$4,68 \times 10^{-5}$	$2,26 \times 10^{-3}$	$2,89 \times 10^8$
	1,50	$4,22 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-3}$	$2,60 \times 10^8$
	2,00	$3,51 \times 10^{-5}$	$1,70 \times 10^{-3}$	$2,17 \times 10^8$

Tabela 7.4. Resultados de abundância máxima, $x_{\text{máxima}}$, com sua respectiva densidade numérica, n , para a espécie molecular mais abundante na exosfera de HD 209458b, OH^+ , ao variarmos a relação C/O. N é a densidade de coluna total.

Espécie molecular	C/O	$x_{\text{máxima}}$	n [cm^{-3}]	N [cm^{-2}]
OH^+	0,54	$5,60 \times 10^{-6}$	$9,10 \times 10^{-4}$	$4,50 \times 10^8$
	0,68	$5,18 \times 10^{-6}$	$8,42 \times 10^{-4}$	$4,17 \times 10^8$
	0,75	$4,96 \times 10^{-6}$	$8,06 \times 10^{-4}$	$3,99 \times 10^8$
	1,25	$3,84 \times 10^{-6}$	$6,24 \times 10^{-4}$	$3,08 \times 10^8$
	1,50	$3,45 \times 10^{-6}$	$5,60 \times 10^{-4}$	$2,78 \times 10^8$
	2,00	$2,88 \times 10^{-6}$	$4,68 \times 10^{-4}$	$2,32 \times 10^8$

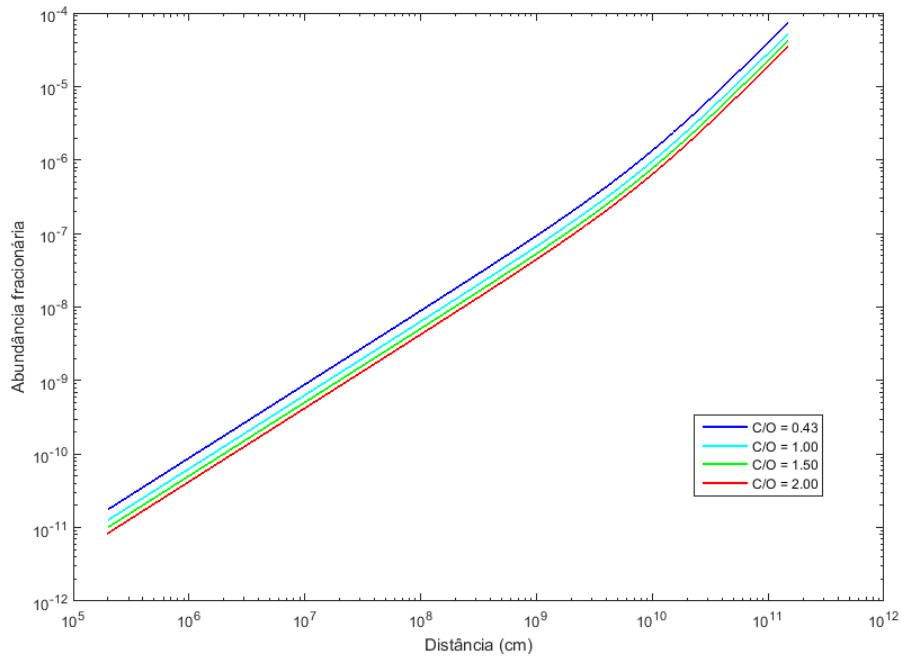


Figura 7.3. Perfis de abundância fracionária do OH^+ , a espécie molecular mais abundante ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b para diferentes valores de C/O. Parâmetros: Z_{\odot} ; $x(\text{H}_2 \text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(\text{H}_2 \text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $P = 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

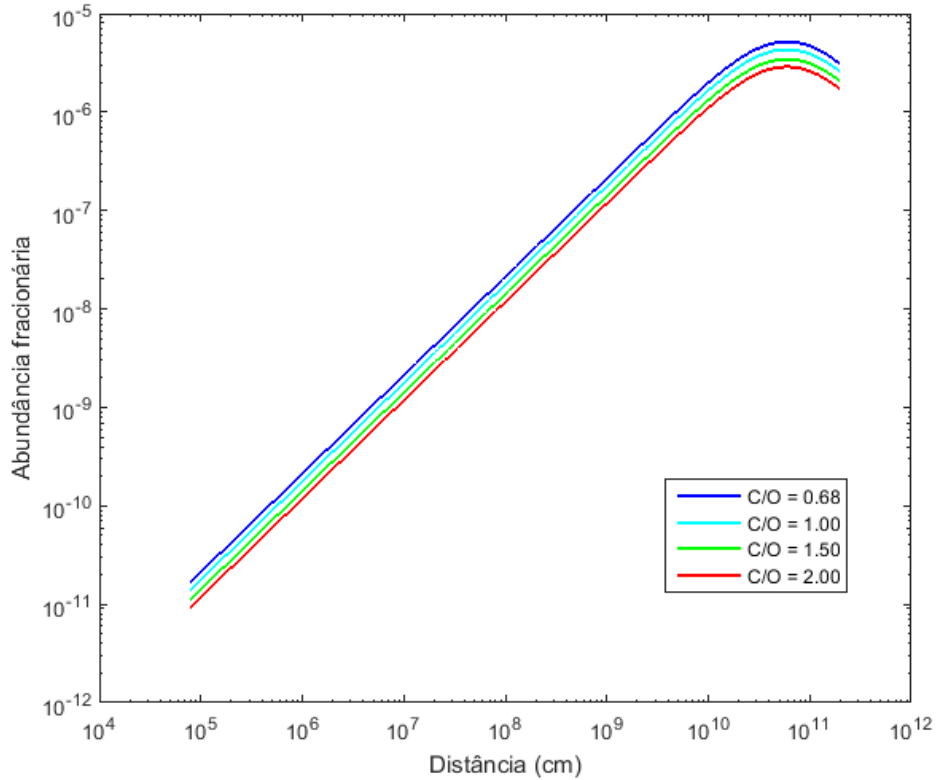


Figura 7.4. Perfis de abundância fracionária do OH^+ , a espécie molecular mais abundante ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b para diferentes valores de C/O. Parâmetros: Z_{\odot} ; $x(\text{H}_2 \text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(\text{H}_2 \text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $P = 10^9$.

7.3. Resultados para perfis diferentes de H₂

Com relação ao perfil de H₂ padrão, ao aumentar ou diminuir seus valores inicial e final, aconteceram mudanças de ordens de grandeza na abundância e densidade de coluna total para a maioria das espécies moleculares nos dois exoplanetas estudados, como mostram os resultados das Tabelas B.1.10 – B.1.11 e B.2.8 – B.2.9. Em cada caso, com apenas o aumento ou diminuição de 5 vezes os valores de abundância de H₂ padrão, ocorreram alterações entre uma e duas ordens de grandeza na abundância máxima e na densidade de coluna da maioria das espécies, sendo claramente favorável em cenários onde os valores de H₂ padrão foi aumentado, como indicam as Tabelas 7.5 e 7.6. Destacam-se a maior presença de espécies mais abundantes em GJ 436b comparado com HD 20958b nas duas situações de perfil H₂, e o favorecimento para o íon H₃O⁺ no ambiente de HD 209458b com o aumento da abundância do hidrogênio molecular.

As Figuras 7.5 e 7.6 evidenciam a sensibilidade no perfil de abundância da espécie molecular mais abundante com a alteração do perfil H₂ no ambiente de GJ 436b e HD 209458b, respectivamente. Isto significa que uma possível detecção espectroscópica de OH⁺ ao longo da perda de massa atmosférica de GJ 436b e HD 209458b, pode levar a fortes indicações da presença de H₂ em abundâncias significativas nesses dois ambientes.

Tabela 7.5. Resultados de abundância máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, com sua respectiva densidade numérica, n , para as espécies moleculares mais abundantes na exosfera de GJ 436b ao variarmos o perfil de H₂ padrão. N é a densidade de coluna total.

Perfil de H ₂	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	n [cm ⁻³]	N [cm ⁻²]
H ₂ inicial = 2×10^{-2} H ₂ final = 2×10^{-3}	OH+	$1,06 \times 10^{-5}$	$5,10 \times 10^{-4}$	$6,52 \times 10^7$
	OH	$2,19 \times 10^{-7}$	$1,00 \times 10^{-5}$	$1,64 \times 10^6$
	CH+	$4,97 \times 10^{-8}$	$2,20 \times 10^{-5}$	$3,30 \times 10^5$
	CO+	$4,69 \times 10^{-8}$	$2,00 \times 10^{-6}$	$1,07 \times 10^5$
	CH	$2,17 \times 10^{-8}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$2,03 \times 10^5$
H ₂ inicial = 5×10^{-1} H ₂ final = 5×10^{-2}	OH+	$2,63 \times 10^{-4}$	$1,27 \times 10^{-2}$	$1,62 \times 10^9$
	OH	$5,47 \times 10^{-6}$	$2,64 \times 10^{-4}$	$4,10 \times 10^7$
	CH+	$1,24 \times 10^{-6}$	$6,00 \times 10^{-5}$	$8,23 \times 10^6$
	CH	$5,41 \times 10^{-7}$	$2,60 \times 10^{-5}$	$5,07 \times 10^6$
	H ₂ O+	$4,19 \times 10^{-7}$	$2,00 \times 10^{-5}$	$2,35 \times 10^6$
	H ₂ + CO+	$5,36 \times 10^{-8}$ $4,70 \times 10^{-8}$	$3,00 \times 10^{-6}$ $2,00 \times 10^{-6}$	$3,53 \times 10^5$ $1,07 \times 10^5$

Tabela 7.6. Resultados de abundância máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, com sua respectiva densidade numérica, n , para as espécies moleculares mais abundantes na exosfera de HD 209458b ao variarmos o perfil de H₂ padrão. N é a densidade de coluna total.

Perfil de H ₂	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	n [cm ⁻³]	N [cm ⁻²]
H ₂ inicial = 2×10^{-2} H ₂ final = 2×10^{-3}	OH+	$8,65 \times 10^{-7}$	$1,40 \times 10^{-4}$	$6,95 \times 10^7$
H ₂ inicial = 5×10^{-1} H ₂ final = 5×10^{-2}	OH+	$2,16 \times 10^{-5}$	$3,50 \times 10^{-3}$	$1,73 \times 10^9$
	H ₂ O+	$2,34 \times 10^{-7}$	$3,00 \times 10^{-6}$	$6,18 \times 10^6$
	CH+	$1,90 \times 10^{-9}$	$5,00 \times 10^{-6}$	$1,81 \times 10^5$
	H ₃ O+	$1,14 \times 10^{-9}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$8,81 \times 10^3$

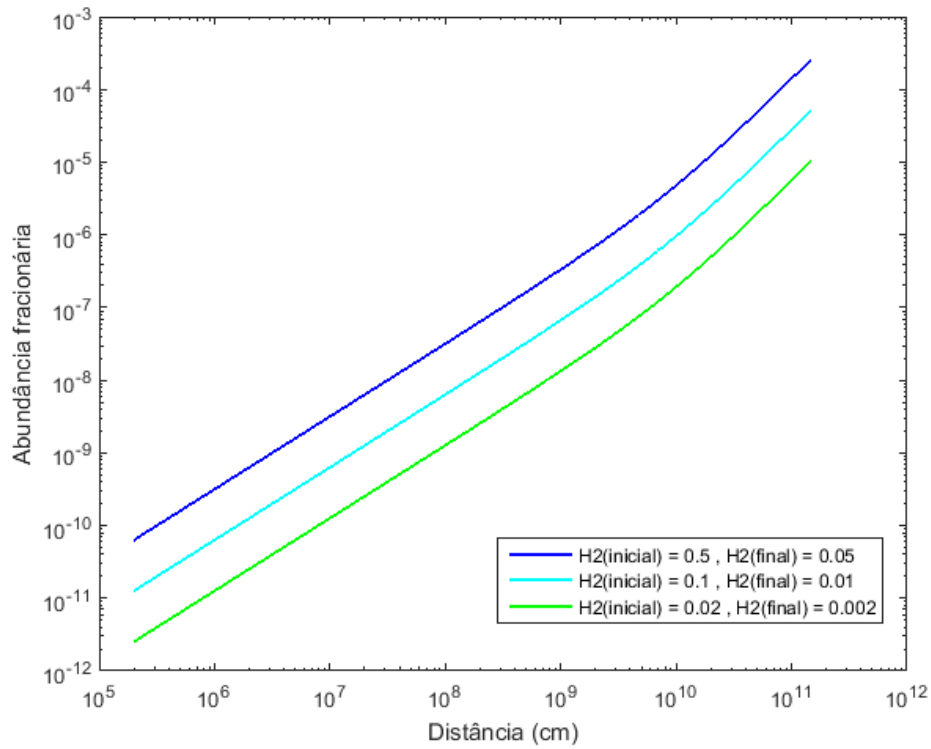


Figura 7.5. Perfis de abundância fracionária do OH^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b para perfis diferentes de H_2 . Parâmetros: $C/O = 1,0$; Z_{\odot} ; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1,0$; $P = 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

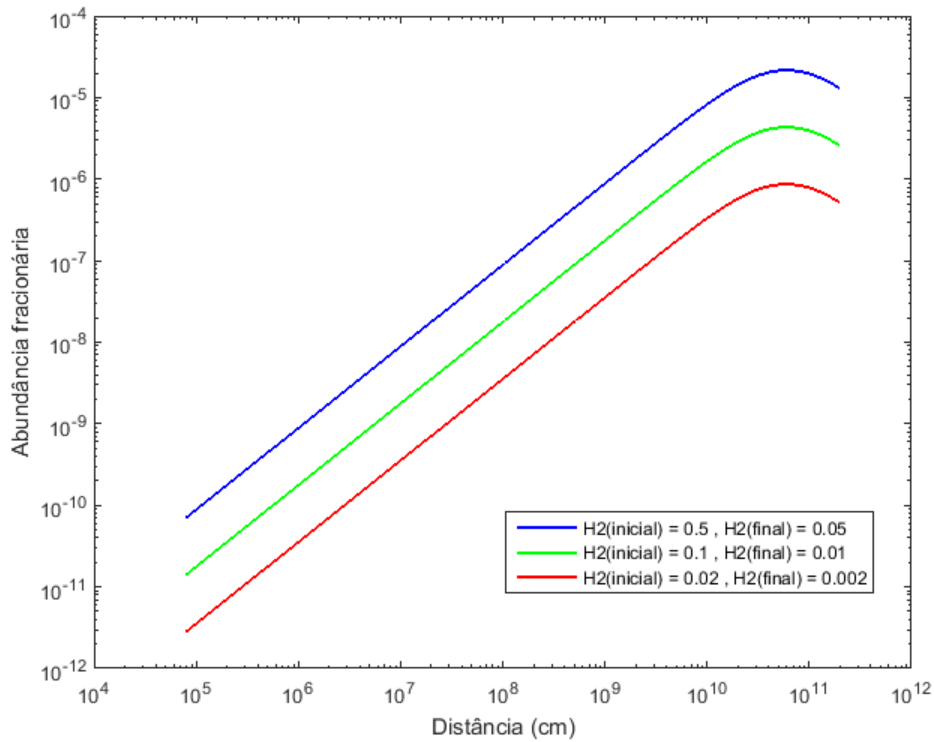


Figura 7.6. Perfis de abundância fracionária do OH^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b para perfis diferentes de H_2 . Parâmetros: $C/O = 1,0$; Z_{\odot} ; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$; $P = 10^9$.

7.4. Resultados variando a metalicidade

Baseados na literatura mencionada na seção 2.4, nós estudamos cenários de formação molecular com metalicidades de 10 a 1000 vezes e de 5 a 25 vezes a metalicidade solar, para GJ 436b e HD 209458b, respectivamente. Os resultados são apresentados nas Tabelas B.1.12-B.1.14 e B.2.10-B.2.12.

Para GJ 436b, os resultados de abundância máxima, densidade numérica e colunar total das espécies moleculares mais abundantes, como mostra a Tabela 7.7, leva às seguintes observações gerais:

1. Para a maioria das espécies moleculares neutras e ionizadas da forma AB, onde A é um átomo diferente do hidrogênio, têm que suas abundâncias aumentam proporcionalmente 1, 2, e 3 ordens de grandeza, em comparação com os resultados Z_{\odot} , ao aumentar a metalicidade 1, 2, e 3 ordens de grandeza o valor solar.
2. Espécies moleculares neutras e ionizadas da forma AB, onde A e B são átomos diferentes do hidrogênio, têm que suas abundâncias aumentam 2, 4, e 6 ordens de grandeza, em comparação com os resultados Z_{\odot} , ao aumentar a metalicidade 10^1 , 10^2 , e 10^3 vezes a solar. Isso explica o porquê as espécies CO^+ e NO^+ terem abundâncias significativas com metalicidades 100 e 1000 vezes a solar.

No caso de HD 209458b, cenários com metalicidade maior que a solar também levam à aumentos graduais (quase linear) nas abundâncias e densidades das espécies moleculares, como revelam os resultados da Tabela 7.8. Destaca-se o valor na abundância do íon OH^+ em comparação com as outras espécies, para os diferentes valores de metalicidade usados na literatura.

Portanto, como indicam as Figuras 7.7 e 7.8, a intensidade da linha OH^+ detectada (além de CO^+ , para GJ 436b) poderia ser um forte indicador para se estimar o valor de metalicidade da atmosfera em cada um dos exoplanetas estudados.

Tabela 7.7. Resultados de abundância máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, com sua respectiva densidade numérica, n , para as espécies moleculares mais abundantes na exosfera de GJ 436b ao variarmos a metalicidade. N é a densidade colunar total.

Metalicidade	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	n [cm ⁻³]	N [cm ⁻²]
Z_{\odot}	OH+	$5,27 \times 10^{-5}$	$2,50 \times 10^{-3}$	$3,26 \times 10^8$
	OH	$1,09 \times 10^{-6}$	$9,60 \times 10^{-5}$	$8,20 \times 10^6$
	CH+	$2,48 \times 10^{-7}$	$2,20 \times 10^{-5}$	$1,65 \times 10^6$
	CH	$1,08 \times 10^{-7}$	$1,00 \times 10^{-5}$	$1,01 \times 10^6$
	CO+	$4,69 \times 10^{-8}$	$4,00 \times 10^{-6}$	$1,07 \times 10^5$
$10Z_{\odot}$	OH+	$5,26 \times 10^{-4}$	$2,50 \times 10^{-2}$	$3,25 \times 10^9$
	OH	$1,09 \times 10^{-5}$	$5,26 \times 10^{-4}$	$8,19 \times 10^7$
	CO+	$4,69 \times 10^{-6}$	$2,27 \times 10^{-4}$	$1,07 \times 10^7$
	CH+	$3,66 \times 10^{-6}$	$1,77 \times 10^{-4}$	$2,04 \times 10^7$
	CH	$1,08 \times 10^{-6}$	$5,18 \times 10^{-5}$	$2,04 \times 10^7$
$100Z_{\odot}$	OH+	$5,10 \times 10^{-3}$	$2,46 \times 10^{-1}$	$3,21 \times 10^{10}$
	CO+	$4,69 \times 10^{-4}$	$2,27 \times 10^{-2}$	$1,07 \times 10^9$
	CH+	$1,52 \times 10^{-4}$	$7,34 \times 10^{-3}$	$5,90 \times 10^8$
	OH	$1,09 \times 10^{-4}$	$5,27 \times 10^{-3}$	$8,18 \times 10^8$
	CH	$1,08 \times 10^{-5}$	$5,22 \times 10^{-4}$	$1,01 \times 10^8$
	NO+	$2,16 \times 10^{-6}$	$1,00 \times 10^{-4}$	$6,96 \times 10^6$
$1000Z_{\odot}$	CO+	$4,62 \times 10^{-2}$	$2,23 \times 10^0$	$1,06 \times 10^{11}$
	OH+	$4,08 \times 10^{-2}$	$1,97 \times 10^0$	$2,85 \times 10^{11}$
	CH+	$1,11 \times 10^{-2}$	$5,36 \times 10^{-1}$	$3,99 \times 10^{10}$
	CO	$1,10 \times 10^{-3}$	$5,32 \times 10^{-2}$	$1,89 \times 10^9$
	OH	$1,00 \times 10^{-3}$	$4,83 \times 10^{-2}$	$8,03 \times 10^9$
	NO+	$1,91 \times 10^{-4}$	$9,23 \times 10^{-3}$	$6,40 \times 10^8$
	CH	$1,03 \times 10^{-4}$	$4,98 \times 10^{-3}$	$9,94 \times 10^8$
	H ₂ O+	$1,32 \times 10^{-5}$	$6,38 \times 10^{-4}$	$8,17 \times 10^7$
CN+	$5,68 \times 10^{-6}$	$2,74 \times 10^{-4}$	$1,35 \times 10^7$	

Tabela 7.8. Resultados de abundância máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, com sua respectiva densidade numérica, n , para as espécies moleculares mais abundantes na exosfera de HD 209458b ao variarmos a metalicidade. N é a densidade colunar total.

Metalicidade	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	n [cm ⁻³]	N [cm ⁻²]
Z_{\odot}	OH+	$4,32 \times 10^{-6}$	$7,00 \times 10^{-4}$	$3,48 \times 10^8$
	H ₂ O+	$9,40 \times 10^{-9}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$2,48 \times 10^5$
	CH+	$3,80 \times 10^{-10}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$3,62 \times 10^4$
$5Z_{\odot}$	OH+	$2,16 \times 10^{-5}$	$3,50 \times 10^{-3}$	$1,74 \times 10^9$
	H ₂ O+	$4,70 \times 10^{-8}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$1,24 \times 10^6$
	CH+	$1,90 \times 10^{-9}$	$6,00 \times 10^{-6}$	$1,87 \times 10^5$
$10Z_{\odot}$	OH+	$4,32 \times 10^{-5}$	$7,00 \times 10^{-3}$	$3,47 \times 10^9$
	H ₂ O+	$9,40 \times 10^{-8}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$2,48 \times 10^6$
	CH+	$3,80 \times 10^{-9}$	$1,00 \times 10^{-5}$	$3,62 \times 10^5$
$25Z_{\odot}$	OH+	$1,08 \times 10^{-4}$	$1,75 \times 10^{-2}$	$8,69 \times 10^9$
	H ₂ O+	$2,35 \times 10^{-7}$	$3,00 \times 10^{-6}$	$6,20 \times 10^6$
	NO+	$3,16 \times 10^{-8}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$2,28 \times 10^5$
	CH+	$9,51 \times 10^{-9}$	$3,10 \times 10^{-5}$	$9,04 \times 10^5$
	OH	$1,49 \times 10^{-9}$	$6,00 \times 10^{-6}$	$1,16 \times 10^5$

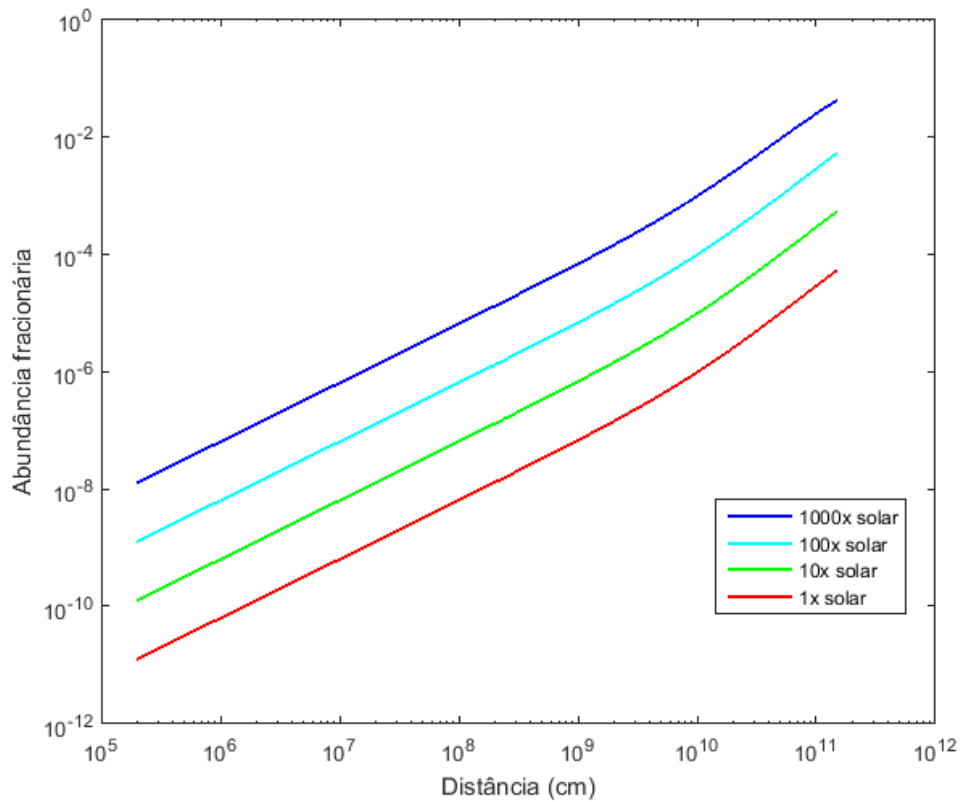


Figura 7.7. Perfis de abundância fracionária do OH⁺ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b para diferentes valores de metalicidade. Parâmetros: $C/O = 1,0$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $x(H_2 \text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2 \text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $A_V = 1,0$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

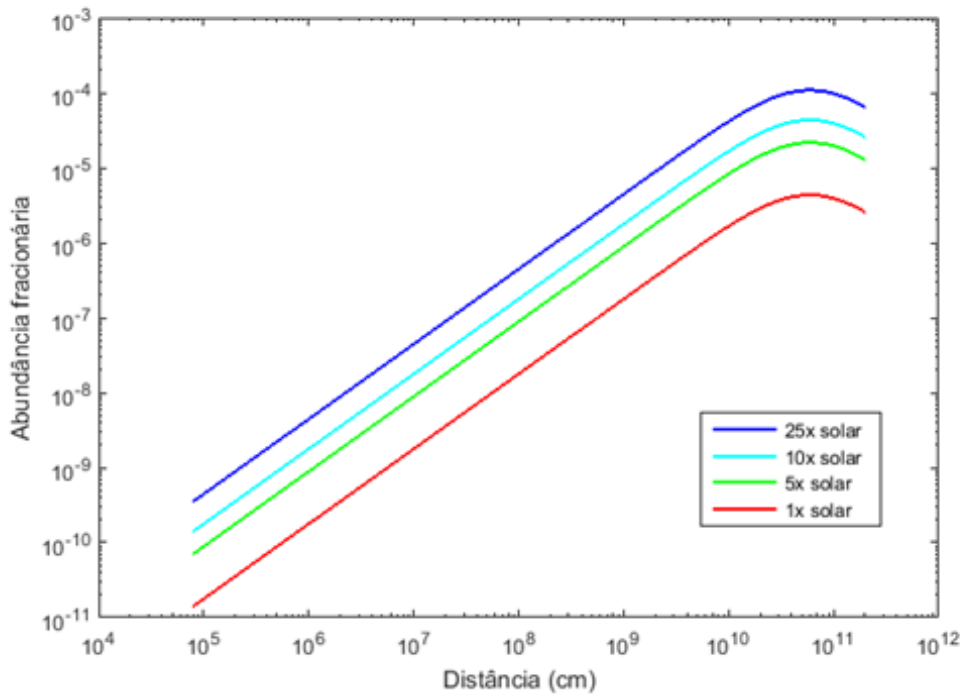


Figura 7.8. Perfis de abundância fracionária do OH⁺ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b para diferentes valores de metalicidade. Parâmetros: $C/O = 1,0$; $x(H_2 \text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2 \text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $P = 1 \times 10^9$; $A_V = 1,0$.

7.5. Resultados variando o fator de correção P

O cálculo do fator de correção P (ver Tabela 4.4) para cada exoplaneta é aproximado. Portanto, valores de P com uma ordem de grandeza maior ou menor que os calculados na Tabela 4.4, podem ser considerados fatores de correção possíveis.

Os resultados para GJ 436b (Tabelas B.1.15 e B.1.16) mostram que a maioria das espécies moleculares não sofre variações de ordens de grandeza com um aumento ou diminuição do fator P padrão. Situação diferente é para HD 209458b, onde a maioria das espécies sofrem variações entre 1 e 2 ordens de grandeza ao aumentar ou diminuir o fator de correção padrão, de acordo com os resultados das Tabelas B.2.13 e B.2.14. Comparando a Tabela 7.1 com os resultados para as espécies mais abundantes em GJ 436b (ver Tabela 7.9), apenas a espécie CH teve mudanças significativas ao aumentar o fator P. No caso de HD 209458b, um ambiente com um fator de correção P menor que o valor padrão, leva a um aumento significativo na abundância e densidade colunar das espécies mais abundantes, confrontando os resultados da Tabela 7.10 com a Tabela 7.2.

As Figuras 7.9 e 7.10 indicam que para a espécie mais abundante, a sensibilidade no perfil de abundância é mais notável em HD 209458b com a variação de P. Os gráficos evidenciam que é maior a região (em termos de distância) em HD 209458b onde os perfis de abundância do íon OH⁺ são significativamente diferenciáveis.

Tabela 7.9. Resultados de abundância máxima, $x_{máxima}$, com sua respectiva densidade numérica, n , para as espécies moleculares mais abundantes na exosfera de GJ 436b, variando o fator de correção P. N é a densidade colunar total.

Fator de correção P	Espécie molecular	$x_{máxima}$	n [cm ⁻³]	N [cm ⁻²]
1×10^4	OH+	$5,28 \times 10^{-5}$	$2,55 \times 10^{-3}$	$3,26 \times 10^8$
	OH	$1,21 \times 10^{-6}$	$5,80 \times 10^{-5}$	$8,62 \times 10^6$
	CH+	$2,48 \times 10^{-7}$	$1,20 \times 10^{-5}$	$1,64 \times 10^6$
	CH	$1,73 \times 10^{-7}$	$8,00 \times 10^{-6}$	$1,27 \times 10^6$
	CO+	$4,82 \times 10^{-8}$	$2,00 \times 10^{-6}$	$1,09 \times 10^5$
	H ₂ O+	$1,68 \times 10^{-8}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$9,42 \times 10^4$
1×10^6	OH+	$5,23 \times 10^{-5}$	$2,50 \times 10^{-3}$	$3,24 \times 10^8$
	OH	$3,94 \times 10^{-7}$	$1,90 \times 10^{-5}$	$5,19 \times 10^6$
	CH+	$1,84 \times 10^{-7}$	$9,00 \times 10^{-6}$	$1,52 \times 10^6$
	CO+	$3,63 \times 10^{-8}$	$2,00 \times 10^{-6}$	$8,82 \times 10^4$
	H ₂ O+	$1,68 \times 10^{-8}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$9,40 \times 10^4$
	CH	$8,31 \times 10^{-9}$	$3,00 \times 10^{-6}$	$2,47 \times 10^5$

Tabela 7.10. Resultados de abundância máxima, $x_{máxima}$, com sua respectiva densidade numérica, n , para as espécies moleculares mais abundantes na exosfera de HD 209458b, variando o fator de correção P. N é a densidade colunar total.

Fator de correção P	Espécie molecular	$x_{máxima}$	n [cm ⁻³]	N [cm ⁻²]
1×10^8	OH+	$1,44 \times 10^{-4}$	$1,53 \times 10^{-3}$	$1,53 \times 10^9$
	H ₂ O+	$1,06 \times 10^{-7}$	$2,44 \times 10^{-4}$	$9,13 \times 10^5$
	CH+	$3,30 \times 10^{-9}$	$6,00 \times 10^{-6}$	$3,38 \times 10^5$
	OH	$5,34 \times 10^{-10}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$4,63 \times 10^4$
	H ₂ +	$3,34 \times 10^{-10}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$4,39 \times 10^4$
1×10^{10}	OH+	$2,63 \times 10^{-7}$	$7,20 \times 10^{-4}$	$3,41 \times 10^7$

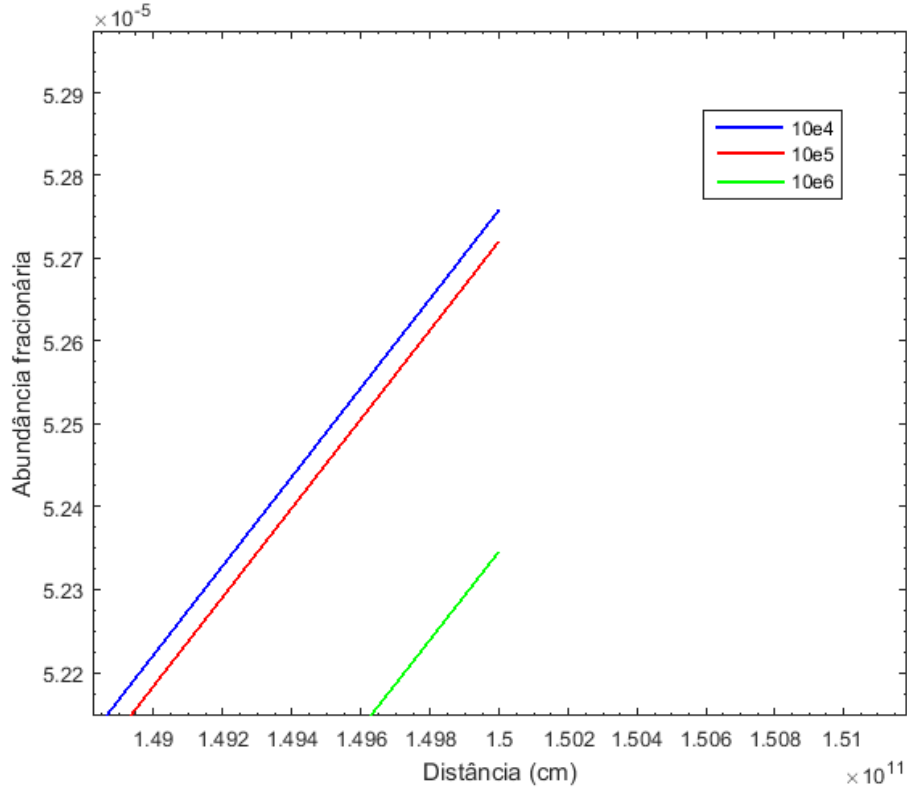


Figura 7.9. Perfis de abundância fracionária do OH^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b para diferentes valores do fator de correção P . A escolha da escala é para ter resolução nos perfis. Parâmetros: $C/O = 1,0$; Z_{\odot} ; $x(H_2 \text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2 \text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; Z_{\odot} ; $A_V = 1,0$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

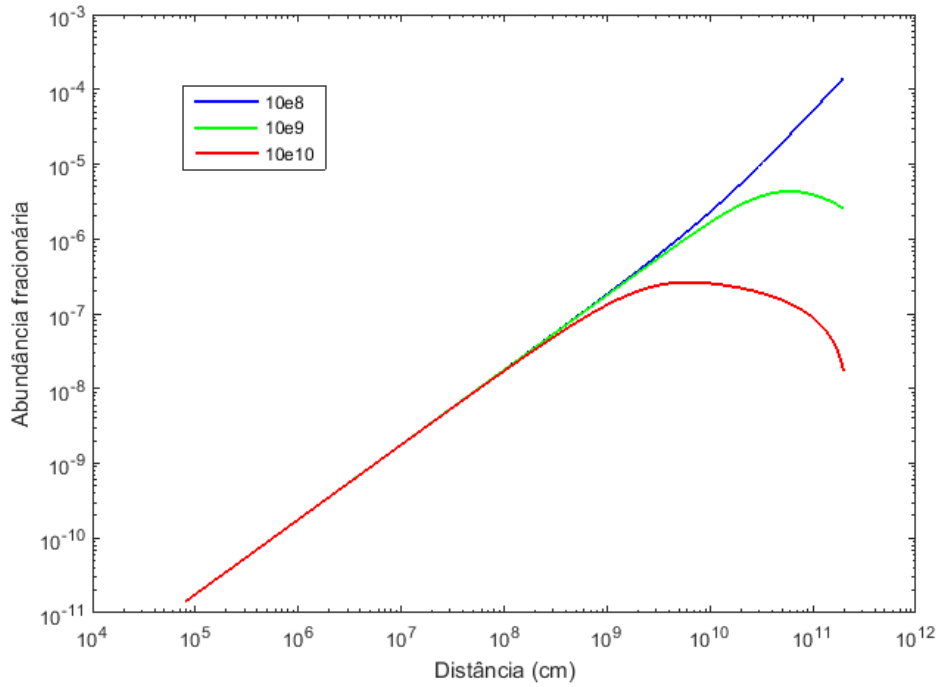


Figura 7.10. Perfis de abundância fracionária do OH^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b para diferentes valores do fator de correção P . Parâmetros: $C/O = 1,0$; Z_{\odot} ; $x(H_2 \text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2 \text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1,0$.

7.6. Resultados variando o valor de extinção A_V

O efeito de alterar o valor de extinção A_V entre 0,1 e 2,0 magnitudes, não levaram a mudanças importantes nos perfis de abundância fracionária em GJ 436b (ver Tabelas B.1.17 – B.1.20) em comparação com os resultados em HD 209458b (Tabelas B.2.15–B.2.18). Em geral, para GJ 436b não aconteceram variações de ordem de grandeza com a mudança de A_V . As abundâncias máximas e densidades de coluna para as espécies moleculares mais abundantes ficaram entre $10^{-5} - 10^{-7}$ e $10^8 - 10^6 \text{ cm}^{-2}$, respectivamente, como mostra a Tabela 7.11. No caso de HD 209458b, ao alterar o parâmetro de extinção, as variações na abundância foram entre uma e dois ordens de grandeza com relação com o resultado padrão (Tabela B.2.1). Os valores de abundância fracionária e densidade de coluna das espécies mais abundantes tiveram valores entre $10^{-4} - 10^{-10}$ e $10^9 - 10^4 \text{ cm}^{-2}$, respectivamente (Tabela 7.12).

As Figuras 7.11 e 7.12 mostram como os perfis para a espécie OH^+ variam com a alteração do valor da extinção. Como aconteceu com os resultados para diferentes valores do fator de correção P, o perfil do OH^+ é mais sensível em HD 209458b, sendo o caso mais favorável com $A_V=2,0$, onde o pico de abundância chega a 10^{-4} , e a densidade de coluna total estimada é da ordem de 10^9 cm^{-2} . Os gráficos mostram que também é maior a região em distância para HD 209458b, onde os perfis de abundância fracionária do OH^+ mudam significativamente.

A diferença nos resultados entre GJ 436b e HD 209458b está relacionada com o comportamento escolhido para o fator de correção P em cada cenário (equações (5.3) e (5.4)). Um fator que cai com o quadrado da distância vai levar a uma diminuição considerável na constante da taxa de reação fotoquímica ao longo da perda de massa atmosférica em comparação com o caso de um fator constante.

Tabela 7.11. Resultados de abundância máxima, $x_{\text{máxima}}$, com sua respectiva densidade numérica, n , para as espécies moleculares mais abundantes na exosfera de GJ 436b, variando o valor A_V . N é a densidade de coluna total.

A_V	Espécie molecular	$x_{\text{máxima}}$	$n [\text{cm}^{-3}]$	$N [\text{cm}^{-2}]$
0,1	OH+	$5,18 \times 10^{-5}$	$2,50 \times 10^{-3}$	$3,23 \times 10^8$
	OH	$5,38 \times 10^{-7}$	$2,60 \times 10^{-5}$	$5,91 \times 10^6$
	CH+	$1,95 \times 10^{-7}$	$9,00 \times 10^{-6}$	$1,67 \times 10^6$
0,5	OH+	$5,25 \times 10^{-5}$	$2,54 \times 10^{-3}$	$3,25 \times 10^8$
	OH	$8,71 \times 10^{-7}$	$4,20 \times 10^{-5}$	$7,35 \times 10^6$
	CH+	$2,44 \times 10^{-7}$	$1,20 \times 10^{-5}$	$1,69 \times 10^6$
1,5	OH+	$5,28 \times 10^{-5}$	$2,55 \times 10^{-3}$	$3,26 \times 10^8$
	OH	$1,18 \times 10^{-6}$	$5,70 \times 10^{-5}$	$8,51 \times 10^6$
	CH+	$2,48 \times 10^{-7}$	$1,20 \times 10^{-5}$	$1,64 \times 10^6$
2,0	CH	$1,49 \times 10^{-7}$	$7,00 \times 10^{-6}$	$1,18 \times 10^6$
	OH+	$5,28 \times 10^{-5}$	$2,55 \times 10^{-3}$	$3,26 \times 10^8$
	OH	$1,21 \times 10^{-6}$	$5,80 \times 10^{-5}$	$8,61 \times 10^6$
	CH+	$2,48 \times 10^{-7}$	$1,20 \times 10^{-5}$	$1,64 \times 10^6$
	CH	$1,68 \times 10^{-7}$	$8,00 \times 10^{-6}$	$1,25 \times 10^6$

Tabela 7.12. Resultados de abundância máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, com sua respectiva densidade numérica, n , para as esp\ecies moleculares mais abundantes na exosfera de HD 209458b, variando o valor A_V . N \u00e9 a densidade de coluna total.

A_V	Esp\ecie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	n [cm^{-3}]	N [cm^{-2}]
0,1	OH+	$1,10 \times 10^{-7}$	$3,30 \times 10^{-4}$	$1,46 \times 10^7$
0,5	OH+	$4,75 \times 10^{-7}$	$9,26 \times 10^{-4}$	$5,97 \times 10^7$
1,5	OH+	$9,83 \times 10^{-5}$	$1,05 \times 10^{-3}$	$1,28 \times 10^9$
	H ₂ O+	$5,91 \times 10^{-8}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$6,65 \times 10^5$
	CH+	$1,48 \times 10^{-9}$	$5,00 \times 10^{-6}$	$1,48 \times 10^5$
2,0	OH+	$2,06 \times 10^{-4}$	$2,19 \times 10^{-3}$	$1,85 \times 10^9$
	H ₂ O+	$1,05 \times 10^{-7}$	$1,00 \times 10^{-6}$	$9,24 \times 10^5$
	CH+	$5,62 \times 10^{-9}$	$1,10 \times 10^{-5}$	$5,84 \times 10^5$
	OH	$4,85 \times 10^{-10}$	$2,00 \times 10^{-6}$	$4,18 \times 10^4$

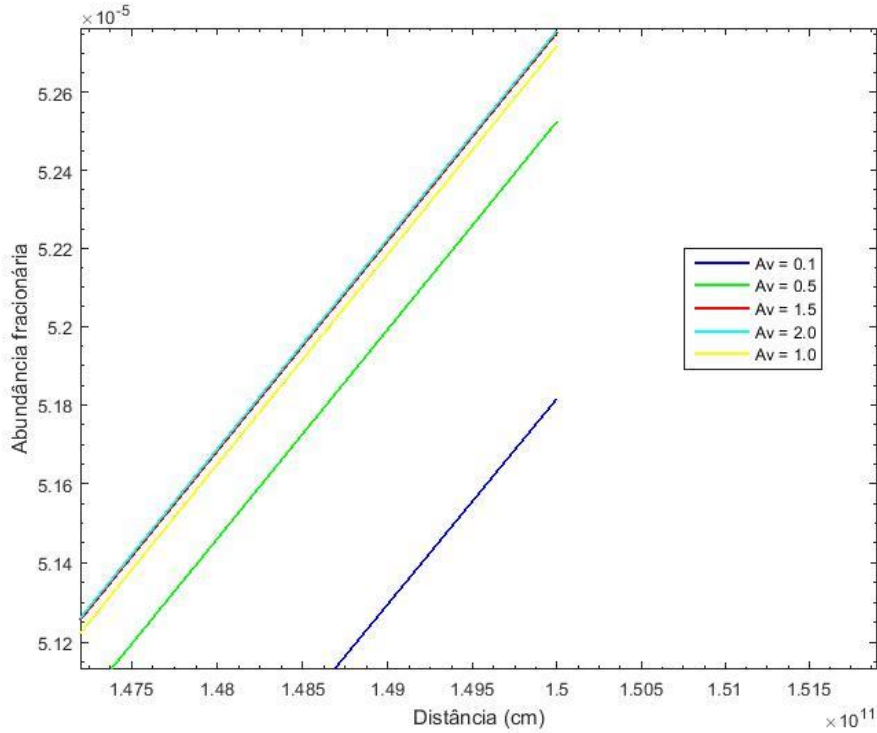


Figura 7.11. Perfis de abund\u00e2ncia fracion\u00e1ria do OH⁺ ao longo da perda de massa atmosf\u00e9rica do Netuno quente GJ 436b para diferentes valores da extin\u00e7\u00e3o no vis\u00edvel, A_V . A escolha da escala \u00e9 para ter resolu\u00e7\u00e3o nos perfis. Par\u00e2metros: $C/O = 1.0$; Z_{\odot} ; $x(H_2 \text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2 \text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

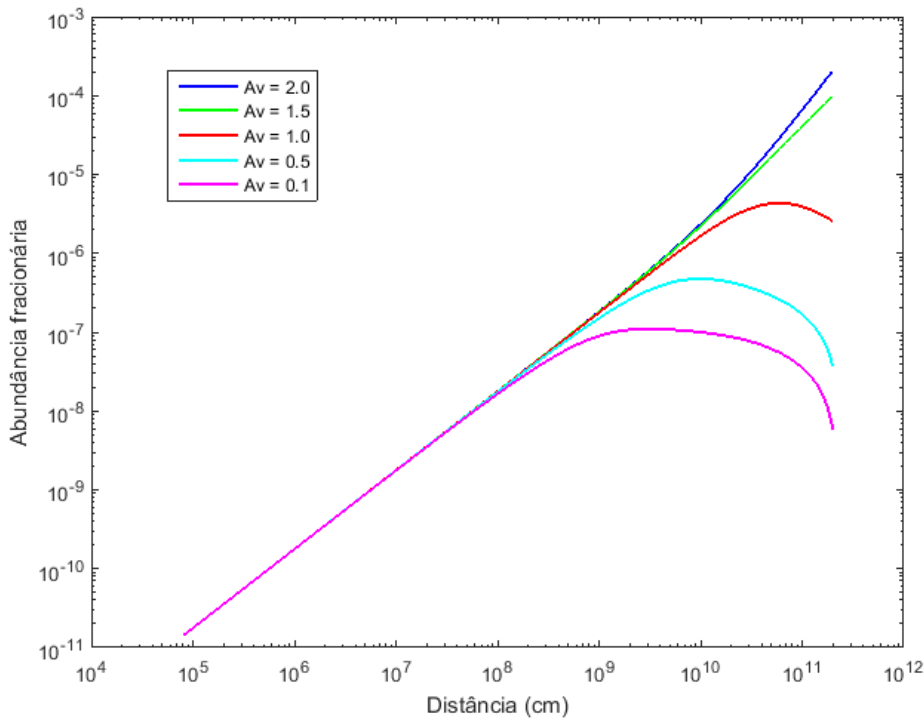


Figura 7.12. Perfis de abundância fracionária do OH^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b para diferentes valores da extinção no visível, A_V . Parâmetros: $C/O = 1.0$; Z_{\odot} ; $x(\text{H}_2 \text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(\text{H}_2 \text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $P = 1 \times 10^9$.

7.7. Outros resultados para GJ 436b e HD 209458b

Para GJ 436b, ao considerarmos os casos de abundância eletrônica de Parke Loyd et al. (2017) e o perfil de velocidade linear, os resultados mostraram que não há mudanças significativas nos valores de abundância máxima e densidade de coluna das espécies moleculares, ao compararmos com os resultados obtidos com parâmetros de entrada padrão. Quando a abundância eletrônica mudou de 10^{-7} a 10^{-2} , as espécies mais abundantes não sofreram alterações de ordens de grandeza, como indicam os resultados da Tabela B.1.2. Os resultados padrão foram mais sensíveis com a mudança do perfil de velocidade, como mostra a Tabela B.1.3. O cenário com perfil de velocidade linear é menos favorável para a formação de moléculas em comparação com o cenário com perfil de velocidade constante, já que a maioria das espécies moleculares mais abundantes tiveram uma diminuição em uma ordem de grandeza em seus valores de abundância máxima e densidade colunar.

Alternativamente, nós estudamos o cenário de formação molecular usando a equação de continuidade de Pinotti & Boechat-Roberty (2016), ou seja, sem levar em consideração os termos da derivada do perfil de velocidade e densidade numérica do H I na equação de continuidade (5.2). O efeito é mais relevante no ambiente de GJ 436b em comparação com HD 209458b (ver Tabelas B.1.21 e B.2.20), onde os valores de abundância fracionária máxima e densidade de coluna das espécies mais abundantes são duas ordens de grandeza menores em comparação com os resultados da Tabela 7.1. A Figura 7.13 mostra que a partir de uma distância menor a 10^{11} cm, os perfis das espécies moleculares mais abundantes se estabilizam; situação que não acontece no

ambiente de HD 209458b (ver Figura 7.14), onde os perfis de abundância caem antes de chegar a 10^{11} cm. Só acrescentando espécies nitrogenadas, a espécie mais abundante de Pinotti & Bochat-Roberty (2016) aumentou uma ordem de grandeza em seu valor de abundância máxima e densidade de coluna. A Figura 7.15 mostra os perfis de abundâncias obtidas nesse estudo.

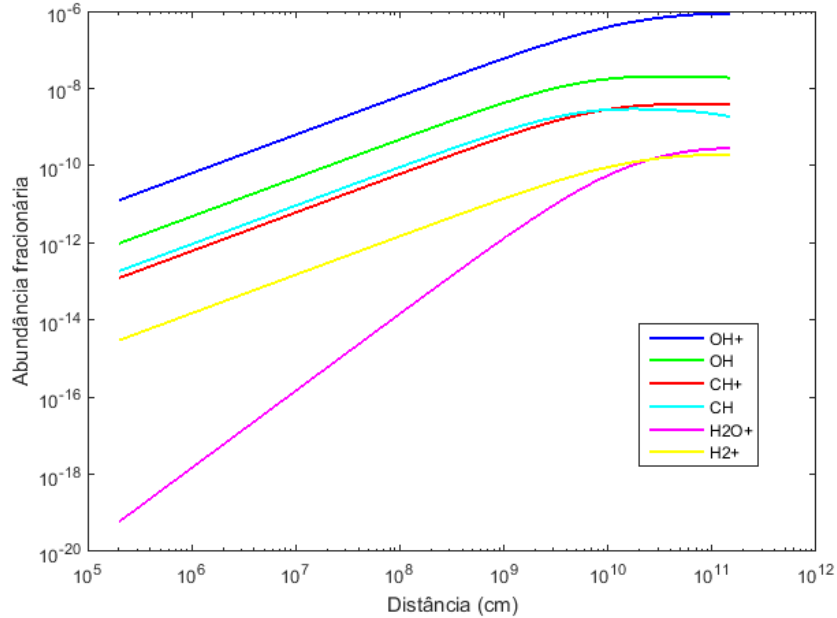


Figura 7.13. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares mais abundantes ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b sem levar em conta os termos da derivada dos perfis de velocidade e densidade do H I. Parâmetros padrão: $C/O = 1,0$; Z_{\odot} ; $x(e^{-}) = 3 \times 10^{-7}$; $x(H_2 \text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2 \text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $A_V = 1,0$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

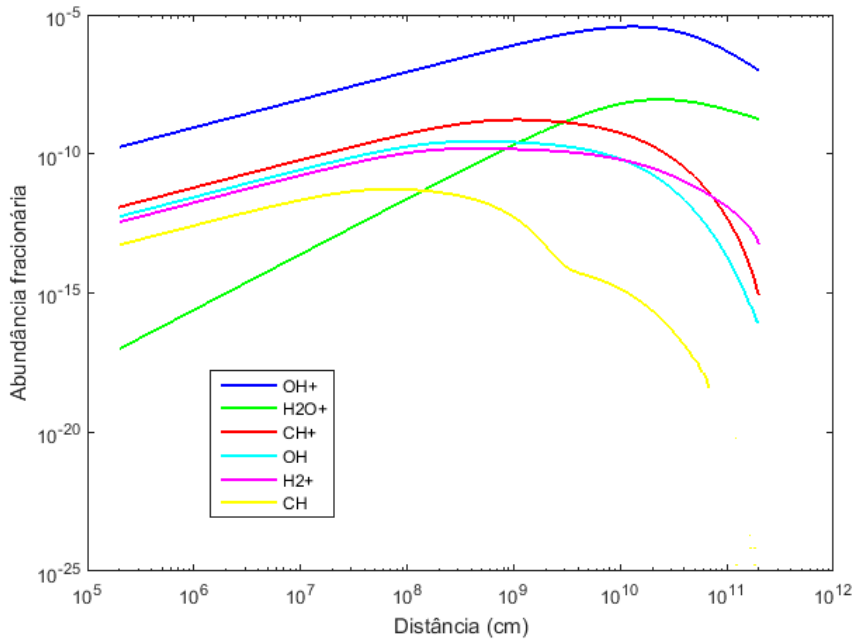


Figura 7.14. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares mais abundantes ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b sem levar em conta os termos da derivada dos perfis de velocidade e densidade do H I. Parâmetros padrão: $C/O = 1,0$; Z_{\odot} ; $x(H_2 \text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2 \text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^{-}) = 1 \times 10^{-3}$; $P = 1 \times 10^9$; $A_V = 1,0$.

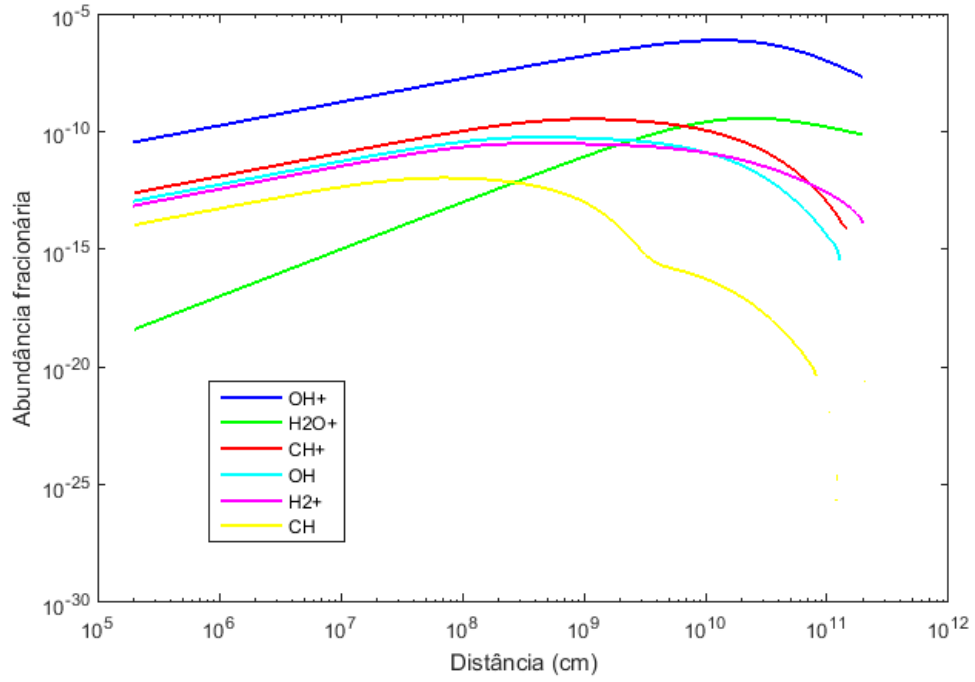


Figura 7.15. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares mais abundantes ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b. Resultados de Pinotti & Boechat-Roberty (2016). Parâmetros padrão: $C/O = 1,0$; Z_{\odot} ; $x(H_2 \text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2 \text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $P = 1 \times 10^9$; $A_V = 1,0$.

8. Conclusões e perspectivas futuras

Os resultados obtidos com o nosso modelo estacionário 1D de reações químicas e fotoquímicas ao longo da perda de massa atmosférica de GJ 436b e HD 209458b, sugerem que pequenas moléculas neutras e ionizadas contendo oxigênio e carbono, são formadas com abundâncias e densidades de coluna significativas em uma região onde a temperatura é inferior a 2000 K e a densidade numérica de H I ainda é alta. Para o Netuno quente GJ 436b, as espécies moleculares OH^+ , H_2O^+ , OH, CH^+ , CH, CO^+ são as mais abundantes, com valores de abundância fracionária e densidade de coluna da ordem de 10^{-5} - 10^{-8} e 10^8 - 10^5 cm^{-2} , respectivamente. No Júpiter quente HD 209458b, os resultados indicam um cenário menos favorável para a formação molecular, devido ao campo de radiação estelar mais intenso, sendo que as espécies OH^+ , H_2O^+ , CH^+ , OH foram as mais abundantes, com valores entre 10^{-6} - 10^{-11} e densidades de coluna entre 10^8 - 10^3 cm^{-2} .

Os gráficos para GJ 436b mostraram que todas as espécies moleculares têm um perfil de abundância fracionária que aumenta com a distância ao longo da região de simulação, com valores máximos em 10^{11} cm . Em HD 209458b, determinadas espécies moleculares formadas foram dissociadas rapidamente, já que tiveram seus valores máximos de abundância fracionária a distâncias inferiores a 10^{11} cm . Isso é devido à diferença entre o aumento das abundâncias das espécies envolvidas em suas taxas de destruição, e o aumento das abundâncias das espécies que participam de suas taxas de formação, sendo essa diferença dependente do fator de correção P. Nos dois cenários simulados, as espécies moleculares ionizadas foram as mais abundantes, sendo o íon OH^+ o mais abundante, com valores de abundância máxima entre 10^{-5} - 10^{-6} , e densidades de coluna de 10^8 cm^{-2} . Esses valores podem ser aumentados se a metalicidade da atmosfera ou a abundância de H_2 na exosfera aumentam. Só para HD 209458b, o efeito de aumentar o valor da extinção A_V ou diminuir o fator de correção P, levou a mudanças significativas de ordens de grandeza nos valores de abundância e densidade de coluna para a espécie OH^+ e também para as outras moléculas.

Os resultados evidenciam que a formação de espécies com cadeias de carbono nas regiões próximas a GJ 436b e HD 209458b não é significativa, mesmo com altos valores de razões C/O e metalicidade. Em relação às espécies nitrogenadas, nosso modelo químico sugere que a espécie neutra NH é a mais abundante na exosfera de GJ 436b, com valores de abundância máxima e densidade de coluna de 10^{-10} e 10^3 cm^{-2} , respectivamente. No caso de HD 209458b, o íon NO^+ é a espécie nitrogenada mais abundante, com valor máximo na abundância de 10^{-11} e densidade de coluna de 10^2 cm^{-2} .

Nosso modelo 1D é uma aproximação ao ambiente real de perda de massa atmosférica de GJ 436b e HD 209458b, já que o modelo usou perfis de temperatura, velocidade e densidade numérica de simulações disponíveis na literatura que não consideraram a presença do campo magnético planetário. A presença de uma magnetosfera no planeta, teoricamente geraria uma redução na perda de massa atmosférica (por exemplo, Trammell et al. 2011, Owen & Adams 2014, Arakcheev et al. 2017), afetando à formação molecular na exosfera.

É pretendido investigar de que maneira a presença da força de maré afeta a taxa de produção de moléculas nas exosferas de planetas gasosos que apresentam escape atmosférico hidrodinâmico. Um cenário específico é no caso de um satélite orbitando o planeta gigante. Devido à limitação observacional, a existência de exoluas orbitando planetas gasosos quentes ainda se restringe ao cenário teórico. Mas, a detecção através da variação no tempo do trânsito (TTV) do planeta gigante é uma das possibilidades (Kipping 2009). Isso precisa de instrumentação muito sensível (alta resolução temporal). Ainda, diversos trabalhos têm abordado a questão da estabilidade orbital de exoluas ao redor de planetas quentes (Barnes & O'Brien 2002, Heller 2012, Heller & Barnes 2013, Zollinger et al. 2017). Serão considerados sistemas análogos ao sistema Júpiter-Io, em que a interação de maré origina uma intensa atividade vulcânica na lua galileana, provocando a emissão de enxofre e dióxido de enxofre. Isso vai levar ao estudo da formação molecular ao longo da perda de massa atmosférica acrescentando espécies com enxofre. O enxofre pode ter uma influência significativa na fotoquímica já que a maioria das espécies contendo enxofre são fotolizadas de forma relativamente fácil por fótons UV com comprimento de onda maior a 2000 Å. Portanto, a fotoquímica do enxofre torna-se uma importante fonte de radicais livres que pode catalisar outras espécies químicas (Zahnle et al. 2016).

A importância deste trabalho no estudo dos exoplanetas está no fato de ser uma das primeiras contribuições focada na modelagem químico nas exosferas de gigantes gasosos que apresentam escape atmosférico hidrodinâmico, complementando os estudos já feitos nas outras camadas atmosféricas. No momento, devido as limitações na instrumentação, não há detecção de espécies moleculares na exosfera de algum exoplaneta, mas a próxima geração de telescópios destinados a estudá-las (por exemplo, JWST) farão avanços nesse assunto. Nossos resultados podem ser usados como um guia para entender o que esperar e como uma referência para futuras observações da exosfera estendida de GJ 436b e HD 209458b.

A. Apêndice A – Programas MATLAB/DASSLC

A.1. Programa densidade

```
% Programa densidade - calcula a densidade nos pontos de posição das
% metapartículas fornecidas por Bourrier et al. (2016)

% w é o número de pontos da matriz fornecida
w = 1099812;

dens = zeros(1,w);

% N é o número de átomos de H em cada ponto
N = 6.27e30;

% C é o raio de ação para fazer a média (em UA)
C = 0.0018;

dx = C;
dy = C;
dz = C;

for n=1:w

    for i=1:w

        if ( y_pos(1,i) < (y_pos(1, n) + dx) ) && ( y_pos(1,i) >
            (y_pos(1,n) - dx) ) && ( y_pos(2,i) < (y_pos(2,n) + dy) ) && (
            y_pos(2,i) > (y_pos(2,n) - dy) ) && ( y_pos(3,i) < (y_pos(3,n)
            + dz) ) && ( y_pos(3,i) > (y_pos(3,n) - dz) )

            dens(1,n) = dens(1,n) + 1;

        end

    end

end

dens = [(1.5e13)^-3]*dens*N/(8*C^3);
```

A.2. Programa caminho

```
% Programa caminho - define a trajetória de uma partícula no campo de
% velocidade 3D fornecido por Bourrier et al. (2016)

% C=dx=dy=dz em UA
C = 0.00025;

%dt é o passo de tempo
dt= 0.00001;

% Vetores de posição (UA), velocidade (UA/ano) e densidade (cm-3)
% médios - considerados 1000 passos de dt
x=zeros(1,1000);
y=zeros(1,1000);
z=zeros(1,1000);
s=zeros(1,1000);
denspath=zeros(1,1000);
velpath=zeros(1,1000);

% Mudando a referência para o planeta como 0,0,0 UA
y_pos(1,:)=y_pos(1,:)-pl_pos(1,1);
y_pos(2,:)=y_pos(2,:)-pl_pos(2,1);
y_pos(3,:)=y_pos(3,:)-pl_pos(3,1);
y_vel(1,:)=y_vel(1,:)-pl_vel(1,1);
y_vel(2,:)=y_vel(2,:)-pl_vel(2,1);
y_vel(3,:)=y_vel(3,:)-pl_vel(3,1);

% Valores iniciais de x, y e z em UA
x(1)=0.00092;
y(1)=0.00;
z(1)=0.00;

% w = número de colunas de posição(pos)
w=1099812;

for i=1:1000
    sum_vx = 0;
    sum_vy = 0;
    sum_vz=0;
    sum_dens = 0;
    p =0.001;

    for n=1:w

        if (y_pos(1,n) < (x(1,i)+ C)) && (y_pos(1,n) > (x(1,i)- C)) &&
            (y_pos(2,n) < (y(1,i)+C)) && (y_pos(2,n) > (y(1,i)- C)) &&
            (y_pos(3,n) < (z(1,i)+ C)) && (y_pos(3,n) > (z(1,i) - C))

            sum_dens = sum_dens + dens(n);
            sum_vx = sum_vx + y_vel(1,n);
            sum_vy = sum_vy + y_vel(2,n);
            sum_vz = sum_vz + y_vel(3,n);
            p = p+1;

        end
    end
end
```

```

vavgx = sum_vx/p;
vavgy = sum_vy/p;
vavgz = sum_vz/p;
densavg = sum_dens/p;

x(1,i+1)= x(1,i) + vavgx*dt;
y(1,i+1)= y(1,i) + vavgy*dt;
z(1,i+1)= z(1,i) + vavgz*dt;
s(1,i+1)= ( (x(1,i))^2 + (y(1,i))^2 + (z(1,i))^2 )^0.5 +
( (x(1,i+1) - x(1,i))^2 + (y(1,i+1) - y(1,i))^2 + (z(1,i+1)
- z(1,i))^2 )^0.5;

denspath(1,i+1)= densavg;
velpath(1,i+1)= [ (vavgx)^2 + (vavgy)^2 + (vavgz)^2 ]^0.5;

    end
end

plot(y_pos(1,:),y_pos(2,:), 'b.',x,y, 'r.')
```

A.3. Programa de reações químicas e fotoquímicas ao longo da perda de massa atmosférica de GJ 436b e HD 209458b

Observação: O objetivo é mostrar a estrutura do programa, portanto, a lista das constantes da taxa de reação k foi abreviada até k_{10} , e a lista de equações de continuidade para espécies químicas até $y(5)$, para não haver folhas impressas demais.

```
% Programa AstroReactions

% Calculates the fractional abundance profile of several species along
% the mass loss of Hot Neptune GJ 436b and Hot Jupiter HD 209458b

% Uses the UMIST Rate12 database (udfa.ajmarkwick.net)

% Units according to UMIST (s, #, cm)

% Requires file ReactionEquations.m

Length = input('Entrar a dimensão da região de reação, em km ');

% Transformation Length in cm:

Length = Length*1e5;

y0 = zeros(1,81)';

% C6H6      --> y(1)      % CH3+      --> y(28)      % C2N+      --> y(55)
% C6H7+    --> y(2)      % H3+       --> y(29)      % CNC+      --> y(56)
% C6H5+    --> y(3)      % C4H2+    --> y(30)      % HNC       --> y(57)
% C4H3+    --> y(4)      % C2H3     --> y(31)      % HNO       --> y(58)
% C2H2     --> y(5)      % C2H+     --> y(32)      % HNO+      --> y(59)
% C2H3+    --> y(6)      % C        --> y(33)      % N2H+     --> y(60)
% HCO+     --> y(7)      % C3H4+    --> y(34)      % N2O       --> y(61)
% CO       --> y(8)      % C3H3     --> y(35)      % N2O+      --> y(62)
% HCO      --> y(9)      % O+       --> y(36)      % NH2       --> y(63)
% H2+      --> y(10)     % CO2      --> y(37)      % NH2+      --> y(64)
% H+       --> y(11)     % CO2+     --> y(38)      % NO2       --> y(65)
% C0+      --> y(12)     % C-       --> y(39)      % NO2+      --> y(66)
% C2H2+    --> y(13)     % CH2      --> y(40)      % OCN       --> y(67)
% H2O      --> y(14)     % H-       --> y(41)      % OCN+      --> y(68)
% H2O+     --> y(15)     % C2H      --> y(42)      % HCN       --> y(69)
% OH       --> y(16)     % C2H-     --> y(43)      % HCN+      --> y(70)
% O        --> y(17)     % O-       --> y(44)      % CN+       --> y(71)
% C3H3+    --> Y(18)     % OH-      --> y(45)      % CN-       --> y(72)
% OH+      --> Y(19)     % C5H3+    --> y(46)      % CN-       --> y(72)
% He+      --> y(20)     % CH-      --> Y(47)      % N2        --> y(73)
% CH4      --> y(21)     % CH       --> Y(48)      % N2+       --> y(74)
% CH4+     --> y(22)     % C3H2     --> Y(49)      % NH        --> y(75)
% C+       --> y(23)     % CH+      --> Y(50)      % NH+       --> y(76)
% H2CO     --> y(24)     % H3O+     --> Y(51)      % NH+       --> y(76)
% CH3      --> y(25)     % CH2+     --> y(52)      % NO        --> y(77)
% C2H4     --> y(26)     % C6H6+    --> y(53)      % NO+       --> y(78)
% C2H4+    --> y(27)     % C2N      --> y(54)      % N         --> y(79)
```



```

% N+ --> y(80)    % CN --> y(81)

% Initial values of abundances for the main components:
% Metallicity factor M (x solar)
M = 1;

-----

% Hot Neptune GJ 436b
% C/O = 1.0

% O
y0(17) = M*4.28e-3
% C
y0(33) = M*4.16e-3
% C+
y0(23) = M*8.33e-4
% O+
y0(36) = M*7.14e-4
% H+
y0(11) = 3.0e-1
% He+
y0(20) = 2.0e-2
% N
y0(79) = M*7.0e-5
% N+
y0(80) = M*2.0e-5

% Initial and final values for temperature (in K), density (in cm-3)
% and velocity (in Km/s) of the escaping hydrogen flux

Tini = 2364;
Tfini = 612;

Denini = 2.9e3;
Denfini = 4.8e1;

Vini = 55;
Vfini = 55;

% Initial and final values for velocity in cm/s

Vini = Vini*1e5;
Vfini = Vfini*1e5;

-----

% Hot Jupiter HD 209458b
% C/O = 1.0

% O
y0(17) = M*4.17e-4
% C
y0(33) = M*2.5e-4
% C+

```

```

y0(23) = M*1.0e-3
% O+
y0(36) = M*8.34e-4
% H+
y0(11) = 1.5
% He+
y0(20) = 2e-1
% N
y0(79) = M*1.69e-5
% N+
y0(80) = M*5.08e-4

% Initial and final values for temperature (in K), density (in cm-3)
% and velocity (in Km/s) of the escaping hydrogen flux

Tini = 2000;
Tfini = 500;

Denini = 5.0e3;
Denfini = 1e1;

Vini = 40;
Vfini = 130;

% Initial and final values for velocity in cm/s

Vini = Vini*1e5;
Vfini = Vfini*1e5;

-----

% Definition of the step for the integration of the differential
% equations

tspan = [0:2e5:Length];

%rtol = 1e-6;
%atol = 1e-10;

rpar = [ Tini  Tfini  Denini  Denfini  Vini  Vfini  Length ];

[t,y] = dasslc('ReactionEquations',tspan,y0,[],rpar);

loglog(t,y(:,19),'b',t,y(:,16),'g',t,y(:,50),'r',t,y(:,48),'c',t,y(:,1
5),'m',t,y(:,10),'y')

```

```

% Programa ReactionEquations

function[res,ires]= ReactionEquations(t,y,yp,rpar)

% Os perfis:

-----

% Hot Neptune GJ 436b

% Criando um perfil nao linear para a densidade:
DENS = 2.8e-2./[[ t/1.5e13 + 9.2e-4 ].^1.65];
% Criando o termo -(derivada DENS)/DENS = NDENS :
NDENS = 1.1e-13./[[ t/1.5e13 + 9.2e-4 ].^1.0];
% Criando um perfil linear para a velocidade:
VEL = rpar(5) + [ (rpar(6) - rpar(5))/rpar(7) ]*t;
% Criando a derivada da velocidade:
DVEL = [rpar(6) - rpar(5)]/rpar(7);
% Criando um perfil nao linear para temperatura:
TEMP = 52./[[t/1.5e13 + 9.2e-4].^0.546];
% Abundâncias fracionárias de elétrons, HI, e He
eletr = 3e-7;
H = 1;
He = 0.06;

% Fazendo uma gradação linear para H2:
H2ini = 1e-1;
H2fini = 1e-2;
H2 = H2ini + [ (H2fini - H2ini)/rpar(7) ]*t;

% Fator multiplicativo para as reações fotoquímicas devido a
% proximidade com a estrela
P = 1e5;
F = P;
%F corrige para aprox. 6Rp até 61Rp

-----

% Hot Jupiter HD 209458b

% Criando um perfil nao linear para a densidade:
DENS = 5e3./[ [ t*8/2.0e11 + ones(size(t)) ].^2.8 ];
% Criando o termo -(derivada DENS)/DENS = NDENS :

```

```

NDENS = 1.1e-10./[[t*8/2.0e11 + ones(size(t))].^1.0];

% Criando um perfil linear para a velocidade:
VEL = rpar(5) + [ (rpar(6) - rpar(5))/rpar(7) ]*t;

% Criando a derivada da velocidade:
DVEL = [rpar(6) - rpar(5)]/rpar(7);

% Criando um perfil nao linear para temperatura:
X=(1/3)*2.0e11;
TEMP = 2000*X./[t + X*ones(size(t))];

% Abundâncias fracionárias de elétrons, HI, e He
eletr = 1e-3;
H = 1;
He = 0.05;

% Fazendo uma gradação linear para H2:
H2ini = 1e-1;
H2fini = 1e-2;
H2 = H2ini + [ (H2fini - H2ini)/rpar(7) ]*t;

% Fator multiplicativo para as reações fotoquímicas devido a
% proximidade com a estrela
P = 1e9;

% P é para a distancia estrela/planeta, e não para estrela/região do
% inicio da simulação

% Criando um vetor multiplicativo que cai com o quadrado da distância:
F0 = P*0.841;

% O valor de 0.841 corrige para a distância do inicio da simulação em
% 9 Rp
AU = 1.5e13;
% Valor de 1 AU em cm
F = F0*[0.0518./(0.0518 + t./AU)].^2;
% F corrige para 9 Rp até 20 Rp

-----

% As constantes da taxa de reação química e fotoquímica

a1= 5e-7;
b1=-0.5;
g1=0;
k1 = a1*(TEMP./300).^b1.*exp(-g1./TEMP);

```

```

a2= 6e-11;
b2= 0;
g2= 0;
k2 = a2*(TEMP./300).^b2.*exp(-g2./TEMP);

a3= 2e-10;
b3= 0;
g3= 0;
k3 = a3*(TEMP./300).^b3.*exp(-g3./TEMP);

a4= 7.2e-10;
b4= 0;
g4= 0;
k4 = a4*(TEMP./300).^b4.*exp(-g4./TEMP);

a5= 1.4e-9
b5= 0;
g5= 0;
k5 = a5*(TEMP./300).^b5.*exp(-g5./TEMP);

a6= 1e-9;
b6= -0.5;
g6= 0;
k6 = a6*(TEMP./300).^b6.*exp(-g6./TEMP);

a7= 9.4e-10;
b7= -0.5;
g7= 0;
k7 = a7*(TEMP./300).^b7.*exp(-g7./TEMP);

a8= 7.4e-10;
b8= -0.5;
g8= 0;
k8 = a8*(TEMP./300).^b8.*exp(-g8./TEMP);

a9= 5e-10;
b9= -0.5;
g9= 0;
k9 = a9*(TEMP./300).^b9.*exp(-g9./TEMP);

a10= 2.8e-10;
b10= -0.5;
g10= 0;
k10 = a10*(TEMP./300).^b10.*exp(-g10./TEMP);

```

```

-----
-----
-----

```

```

%-----
```

```

% Equações de continuidade:
```

```

% acúmulo de C6H6 --> y(1)

res(1) = VEL*yp(1) + DVEL*y(1) - VEL*NDENS*y(1) - k1.*DENS*y(2)*eletr
+ k96.*DENS*y(29)*y(1) + k97.*DENS*y(1)*y(20) + k151.*DENS*y(1)*y(6) +
k203.*DENS*y(1)*y(23) + k523.*y(1) + k609.*y(1)+ k697.*DENS*y(60)*y(1)

% acúmulo de c-C6H7+ --> y(2)

res(2) = VEL*yp(2) + DVEL*y(2) - VEL*NDENS*y(2) + k1.*DENS*y(2)*eletr
- k2.*DENS*y(3)*H2 - k95.*DENS*y(3)*y(26) - k96.*DENS*y(29)*y(1) -
k151.*DENS*y(1)*y(6) - k697.*DENS*y(60)*y(1)

% acumulo de C6H5+ --> y(3)

res(3) = VEL*yp(3) + DVEL*y(3) - VEL*NDENS*y(3) + k2.*DENS*y(3)*H2 -
k3.*DENS*y(4)*y(5) + k95.*DENS*y(3)*y(26) - k97.*DENS*y(1)*y(20) -
k98.*DENS*y(26)*y(30) - k99.*DENS*y(31)*y(4) - k610.*DENS*y(53)*H

% acumulo de C4H3+ --> y(4)

res(4) = VEL*yp(4) + DVEL*y(4) - VEL*NDENS*y(4) + k3.*DENS*y(4)*y(5) -
k4.*DENS*y(6)*y(5) - k85.*DENS*y(13)*y(5) - k86.*DENS*y(28)*y(5) +
k99.*DENS*y(31)*y(4) - k136.*DENS*y(13)*y(31) - k137.*DENS*y(5)*y(6) -
k138.*DENS*y(30)*H - k139.*DENS*y(33)*(34) - k329.*DENS*y(6)*y(42) -
k330.*DENS*y(27)*y(42) - k449.*DENS*y(28)*y(49)

% acumulo de C2H2 --> y(5)

res(5) = VEL*yp(5) + DVEL*y(5) - VEL*NDENS*y(5) + k3.*DENS*y(4)*y(5) +
k4.*DENS*y(6)*y(5) + k5.*DENS*y(7)*y(5) - k9.*DENS*y(9)*y(13) -
k15.*DENS*y(18)*y(17) + k33.*DENS*y(5)*y(22) + k34.*DENS*y(5)*y(11) +
k35.*DENS*y(5)*y(10) + k48.*DENS*y(7)*y(5) + k49.*DENS*y(5)*y(22) +
k50.*DENS*y(5)*y(10) + k66.*DENS*y(5)*y(27) - k77.*DENS*y(26)*y(6) +
k85.*DENS*y(13)*y(5) + k86.*DENS*y(28)*y(5) - k91.*DENS*y(14)*y(6) -
k92.*DENS*y(6)*eletr - k93.*DENS*y(13)*y(26) - k95.*DENS*y(3)*y(26) +
k103.*DENS*y(5)*y(32) + k104.*DENS*y(5)*y(13) + k109.*DENS*y(5)*y(20)
-k128.*DENS*y(35)*y(6) - k133.*DENS*y(35)*y(6) + k137.*DENS*y(5)*y(6)
- k141.*DENS*y(13)*y(31)+k145.*DENS*y(5)*y(29) - k150.*DENS*y(6)*eletr
- k151.*DENS*y(1)*y(6) + k167.*DENS*y(5)*y(15) + k168.*DENS*y(5)*y(20)
+ k169.*DENS*y(5)*y(36)+ k184.*DENS*y(5)*y(38)- k188.*DENS*y(39)*y(40)
- k189.*DENS*y(41)*y(42) - k190.*DENS*y(43)*H -k191.*DENS*y(39)*y(13)-
k192.*DENS*y(41)*y(13)-k193.*DENS*y(44)*y(13)-k194.*DENS*y(45)*y(13)-
k195.*DENS*y(33)*y(25)- k196.*DENS*y(40)*y(40)- k197.*DENS*y(40)*y(40)
- k198.*DENS*y(25)*y(31) - k199.*DENS*y(42)*H2 - k200.*DENS*H*y(31) -
k201.*DENS*y(31)*y(16) - k217.*DENS*y(29)*y(42)- k219.*DENS*y(47)*y(13)
+ k234.*DENS*y(5)*y(17) + k241.*DENS*y(5)*H + k325.*DENS*y(5)*y(16) +
k326.*DENS*y(5)*y(16) - k331.*DENS*y(13)*y(43) + k381.*DENS*y(16)*y(5)
+ k466.*DENS*y(33)*y(6) - k469.*DENS*y(11)*y(31) + k524*y(5) +
k525*y(5) + k526.*y(5) + k527.*y(5) - k571*y(26) - k573.*y(26) -
k575*y(31)-k577.*y(31)-3*k611.*DENS*y(53)*eletr +k690.*DENS*y(60)*y(5)
+ k800.*DENS*y(5)*y(70)+k806.*DENS*y(5)*y(77)- k881.*DENS*y(72)*y(13)
- k971.*DENS*y(13)*y(77)
-----
-----
ires = 0;

```

B. Apêndice B – Resultados de abundância fracionária máxima e densidade de coluna total das espécies moleculares consideradas no modelo químico.

B.1. Resultados GJ 436b

Tabela B.1.1. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{máxima}$, e densidade de coluna, N , com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{máxima}$	$N [\text{cm}^{-2}]$	Espécie molecular	$x_{máxima}$	$N [\text{cm}^{-2}]$
OH+	5.27×10^{-5}	3.26×10^8	OH-	1.07×10^{-21}	1.65×10^{-8}
OH	1.09×10^{-6}	8.20×10^6	NO ₂ +	1.06×10^{-21}	2.18×10^{-9}
CH+	2.48×10^{-7}	1.65×10^6	CO ₂	8.54×10^{-22}	2.19×10^{-9}
CH	1.08×10^{-7}	1.01×10^6	H ₂ CO	4.35×10^{-22}	1.73×10^{-9}
CO+	4.69×10^{-8}	1.07×10^5	C ₂ H ₂	6.07×10^{-23}	2.48×10^{-10}
H ₂ O+	1.68×10^{-8}	9.42×10^4	C ₂ H	3.08×10^{-23}	7.60×10^{-11}
H ₂ +	1.08×10^{-8}	7.11×10^4	NH ₂	1.04×10^{-23}	7.29×10^{-11}
NH	3.80×10^{-10}	2.94×10^3	C ₂ H ₃ +	2.15×10^{-24}	9.05×10^{-12}
NO+	2.19×10^{-10}	7.03×10^2	CNC+	1.91×10^{-24}	3.73×10^{-12}
CH ₂ +	1.39×10^{-10}	8.13×10^2	OCN	7.95×10^{-25}	2.01×10^{-12}
NH+	6.61×10^{-11}	2.39×10^2	OCN+	3.51×10^{-25}	5.35×10^{-13}
CO	2.80×10^{-11}	7.34×10^1	CH ₄	2.79×10^{-25}	2.22×10^{-12}
H ₃ +	8.62×10^{-12}	4.86×10^1	CO ₂ +	5.71×10^{-26}	1.04×10^{-13}
CH ₂	8.42×10^{-12}	7.01×10^1	CH ₄ +	1.13×10^{-26}	4.03×10^{-14}
H ₂ O	3.86×10^{-12}	3.00×10^1	N ₂ O	1.51×10^{-27}	3.44×10^{-15}
H ₃ O+	1.32×10^{-12}	6.56×10^0	C ₆ H ₅ +	5.28×10^{-28}	1.23×10^{-15}
HCO+	3.13×10^{-13}	1.02×10^0	C ₄ H ₂ +	3.02×10^{-28}	7.37×10^{-16}
CN+	2.94×10^{-13}	1.00×10^0	N ₂ O+	2.45×10^{-29}	4.17×10^{-17}
NO	2.77×10^{-13}	9.94×10^{-1}	NO ₂	1.13×10^{-30}	9.32×10^{-18}
CH ₃ +	4.65×10^{-14}	2.94×10^{-1}	C ₆ H ₇ +	9.19×10^{-34}	2.92×10^{-21}
C ₂ H+	3.35×10^{-14}	1.06×10^{-1}	CN-	4.94×10^{-34}	2.61×10^{-21}
NH ₂ +	8.43×10^{-15}	3.90×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	6.15×10^{-36}	2.11×10^{-23}
HNO+	7.81×10^{-15}	2.33×10^{-2}	C ₆ H ₆	9.20×10^{-41}	2.38×10^{-28}
CN	1.16×10^{-15}	4.58×10^{-3}	C ₂ H-	6.84×10^{-41}	1.28×10^{-28}
N ₂ +	4.01×10^{-16}	1.13×10^{-3}	C ₂ H ₃	1.70×10^{-41}	5.34×10^{-29}
HCN+	1.59×10^{-16}	5.22×10^{-4}	C ₂ N	6.80×10^{-42}	1.33×10^{-29}
N ₂	1.10×10^{-16}	4.02×10^{-4}	C ₆ H ₆ +	1.48×10^{-42}	2.62×10^{-30}
HCO	9.24×10^{-17}	4.00×10^{-4}	C ₂ H ₄	1.24×10^{-42}	1.16×10^{-29}
CH ₃	3.74×10^{-18}	2.71×10^{-5}	C ₃ H ₄ +	7.80×10^{-43}	1.76×10^{-30}
C ₂ H ₂ +	2.32×10^{-18}	9.42×10^{-6}	C ₅ H ₃ +	9.36×10^{-46}	1.64×10^{-33}
HNC	1.99×10^{-18}	8.00×10^{-6}	C ₃ H ₂	5.23×10^{-46}	1.01×10^{-33}
N ₂ H+	4.79×10^{-20}	1.96×10^{-7}	CH-	5.05×10^{-46}	8.68×10^{-34}
HCN	3.21×10^{-20}	9.52×10^{-8}	C ₃ H ₃ +	1.31×10^{-46}	3.05×10^{-34}
HNO	1.71×10^{-20}	6.61×10^{-8}	C ₃ H ₃	1.62×10^{-47}	2.84×10^{-35}
C ₂ N+	8.14×10^{-21}	1.74×10^{-8}			

Tabela B.1.2. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_2_{inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2_{final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 2 \times 10^{-1}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	5.27×10^{-5}	3.26×10^8	HNO	1.71×10^{-20}	6.61×10^{-8}
OH	1.09×10^{-6}	8.20×10^6	C ₂ H	7.66×10^{-21}	4.35×10^{-8}
CH+	2.48×10^{-7}	1.65×10^6	C ₂ N+	6.93×10^{-21}	1.51×10^{-8}
CH	1.08×10^{-7}	1.01×10^6	NO ₂ +	9.26×10^{-22}	1.92×10^{-9}
CO+	4.61×10^{-8}	1.05×10^5	H ₂ CO	4.35×10^{-22}	1.73×10^{-9}
H ₂ O+	1.45×10^{-8}	8.42×10^4	C ₂ H ₂	6.08×10^{-23}	2.49×10^{-10}
H ₂ +	1.08×10^{-8}	7.11×10^4	NH ₂	1.55×10^{-23}	1.14×10^{-10}
NH	3.80×10^{-10}	2.94×10^3	CO ₂ +	1.25×10^{-23}	2.44×10^{-11}
NO+	2.19×10^{-10}	7.03×10^2	C ₂ H ₃ +	1.92×10^{-24}	8.19×10^{-12}
CH ₂ +	1.08×10^{-10}	6.77×10^2	CNC+	1.84×10^{-24}	3.62×10^{-12}
NH+	6.61×10^{-11}	2.59×10^2	OCN	7.98×10^{-25}	2.02×10^{-12}
CO	2.74×10^{-11}	7.20×10^1	OCN+	3.39×10^{-25}	5.17×10^{-13}
H ₃ +	8.48×10^{-12}	4.80×10^1	CH ₄	2.79×10^{-25}	2.22×10^{-12}
CH ₂	8.42×10^{-12}	7.00×10^1	CH ₄ +	1.13×10^{-26}	4.03×10^{-14}
H ₂ O	3.96×10^{-12}	3.06×10^1	N ₂ O	1.52×10^{-27}	3.45×10^{-15}
H ₃ O+	1.09×10^{-12}	5.61×10^0	C ₆ H ₅ +	5.29×10^{-28}	1.23×10^{-15}
HCO+	3.05×10^{-13}	1.00×10^0	CN-	3.32×10^{-28}	1.76×10^{-15}
CN+	2.94×10^{-13}	1.00×10^0	C ₄ H ₂ +	2.73×10^{-28}	6.73×10^{-16}
NO	2.78×10^{-13}	1.00×10^0	N ₂ O+	2.45×10^{-29}	4.18×10^{-17}
CH ₃ +	4.29×10^{-14}	2.71×10^{-1}	NO ₂	1.13×10^{-30}	9.34×10^{-18}
C ₂ H+	2.80×10^{-14}	9.10×10^{-2}	C ₂ H-	1.81×10^{-32}	6.48×10^{-20}
HCO	1.39×10^{-14}	7.86×10^{-2}	C ₆ H ₇ +	8.63×10^{-34}	2.78×10^{-21}
NH ₂ +	8.01×10^{-15}	3.75×10^{-2}	C ₆ H ₆	5.86×10^{-35}	1.53×10^{-22}
HNO+	6.71×10^{-15}	2.03×10^{-2}	C ₂ H ₃	1.02×10^{-35}	3.26×10^{-23}
CN	1.18×10^{-15}	4.73×10^{-3}	C ₂ H ₄ +	6.15×10^{-36}	2.11×10^{-23}
OH-	7.13×10^{-16}	1.10×10^{-2}	C ₂ N	4.41×10^{-36}	8.70×10^{-24}
N ₂ +	4.01×10^{-16}	1.13×10^{-3}	C ₆ H ₆ +	8.63×10^{-37}	1.54×10^{-24}
HCN+	1.37×10^{-16}	4.62×10^{-4}	CH-	1.58×10^{-37}	5.07×10^{-25}
N ₂	1.09×10^{-16}	4.02×10^{-4}	C ₅ H ₃ +	6.00×10^{-40}	1.05×10^{-27}
CH ₃	3.74×10^{-18}	2.71×10^{-5}	C ₃ H ₂	3.19×10^{-40}	6.23×10^{-28}
C ₂ H ₂ +	2.06×10^{-18}	8.49×10^{-6}	C ₂ H ₄	1.24×10^{-42}	1.16×10^{-29}
HNC	1.99×10^{-18}	8.00×10^{-6}	C ₃ H ₄ +	6.71×10^{-43}	1.54×10^{-30}
CO ₂	1.66×10^{-19}	4.80×10^{-7}	C ₃ H ₃ +	1.15×10^{-46}	2.73×10^{-34}
N ₂ H+	4.58×10^{-20}	1.90×10^{-7}	C ₃ H ₃	1.43×10^{-47}	2.54×10^{-35}
HCN	3.16×10^{-20}	9.43×10^{-8}			

Tabela B.1.3. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = 55 \text{ km s}^{-1}$, $v_f = 85 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	3.17×10^{-5}	2.39×10^8	OH-	9.46×10^{-22}	1.44×10^{-8}
OH	7.18×10^{-7}	6.47×10^6	CO ₂	2.34×10^{-22}	7.83×10^{-10}
CH+	1.53×10^{-7}	1.25×10^6	NO ₂ +	2.27×10^{-22}	6.28×10^{-10}
CH	7.76×10^{-8}	8.37×10^5	H ₂ CO	1.84×10^{-22}	9.08×10^{-10}
CO+	1.66×10^{-8}	4.83×10^4	C ₂ H ₂	2.58×10^{-23}	1.32×10^{-10}
H ₂ O+	9.46×10^{-9}	6.44×10^4	C ₂ H	1.06×10^{-23}	3.25×10^{-11}
H ₂ +	6.70×10^{-9}	5.31×10^4	NH ₂	6.03×10^{-24}	5.03×10^{-11}
NH	2.53×10^{-10}	2.36×10^3	C ₂ H ₃ +	8.52×10^{-25}	4.40×10^{-12}
NO+	8.20×10^{-11}	3.45×10^2	CNC+	3.78×10^{-25}	1.05×10^{-12}
CH ₂ +	8.03×10^{-11}	5.71×10^2	OCN	2.21×10^{-25}	7.41×10^{-13}
NH+	3.31×10^{-11}	1.48×10^2	CH ₄	1.82×10^{-25}	1.67×10^{-12}
CO	9.31×10^{-12}	3.27×10^1	OCN+	5.50×10^{-26}	1.14×10^{-13}
CH ₂	5.75×10^{-12}	5.46×10^1	CO ₂ +	9.58×10^{-27}	2.36×10^{-14}
H ₃ +	4.88×10^{-12}	3.34×10^1	CH ₄ +	4.46×10^{-27}	2.02×10^{-14}
H ₂ O	2.57×10^{-12}	2.32×10^1	N ₂ O	3.94×10^{-28}	1.19×10^{-15}
H ₃ O+	6.80×10^{-13}	4.10×10^0	C ₆ H ₅ +	1.26×10^{-28}	3.86×10^{-16}
CN+	1.17×10^{-13}	5.22×10^{-1}	C ₄ H ₂ +	7.34×10^{-29}	2.32×10^{-16}
HCO+	1.16×10^{-13}	4.86×10^{-1}	N ₂ O+	4.23×10^{-30}	9.71×10^{-18}
NO	1.14×10^{-13}	5.32×10^{-1}	NO ₂	6.71×10^{-31}	6.37×10^{-18}
CH ₃ +	2.59×10^{-14}	1.95×10^{-1}	C ₆ H ₇ +	2.42×10^{-34}	9.81×10^{-22}
C ₂ H+	1.23×10^{-14}	5.00×10^{-2}	CN-	2.15×10^{-34}	1.40×10^{-21}
NH ₂ +	4.15×10^{-15}	2.36×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	2.29×10^{-36}	1.00×10^{-23}
HNO+	2.68×10^{-15}	1.04×10^{-2}	C ₆ H ₆	2.22×10^{-41}	7.33×10^{-29}
CN	5.03×10^{-16}	2.62×10^{-3}	C ₂ H-	2.17×10^{-41}	4.80×10^{-29}
N ₂ +	1.38×10^{-16}	5.27×10^{-4}	C ₂ H ₃	5.23×10^{-42}	1.96×10^{-29}
HCN+	5.86×10^{-17}	2.50×10^{-4}	C ₂ N	1.22×10^{-42}	3.21×10^{-30}
N ₂	4.61×10^{-17}	2.21×10^{-4}	C ₂ H ₄	7.34×10^{-43}	7.43×10^{-30}
HCO	4.10×10^{-17}	2.20×10^{-4}	C ₆ H ₆ +	2.94×10^{-43}	6.53×10^{-31}
CH ₃	2.38×10^{-18}	2.03×10^{-5}	C ₃ H ₄ +	1.74×10^{-43}	5.18×10^{-31}
C ₂ H ₂ +	9.14×10^{-19}	4.65×10^{-6}	C ₅ H ₃ +	1.32×10^{-46}	3.07×10^{-34}
HNC	8.53×10^{-19}	4.29×10^{-6}	CH-	1.05×10^{-46}	2.23×10^{-34}
N ₂ H+	1.95×10^{-20}	1.03×10^{-7}	C ₃ H ₂	8.93×10^{-47}	2.24×10^{-34}
HCN	9.82×10^{-21}	4.08×10^{-8}	C ₃ H ₃ +	2.83×10^{-47}	8.73×10^{-35}
HNO	7.32×10^{-21}	3.61×10^{-8}	C ₃ H ₃	2.34×10^{-48}	5.86×10^{-36}
C ₂ N+	1.85×10^{-21}	5.34×10^{-9}			

Tabela B.1.4. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 0.43$; $x(H_2\text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2\text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	7.38×10^{-5}	4.56×10^8	NO ₂ +	2.08×10^{-21}	4.28×10^{-9}
OH	1.53×10^{-6}	1.15×10^7	OH-	1.50×10^{-21}	2.31×10^{-8}
CH+	1.52×10^{-7}	1.00×10^6	CO ₂	1.01×10^{-21}	2.59×10^{-9}
CH	6.51×10^{-8}	6.10×10^5	H ₂ CO	3.66×10^{-22}	1.46×10^{-9}
CO+	3.95×10^{-8}	9.00×10^4	C ₂ H ₂	2.19×10^{-23}	8.95×10^{-11}
H ₂ O+	2.36×10^{-8}	1.32×10^5	NH ₂	1.42×10^{-23}	1.00×10^{-10}
H ₂ +	1.08×10^{-8}	7.11×10^4	C ₂ H	1.11×10^{-23}	2.75×10^{-11}
NH	3.80×10^{-10}	2.94×10^3	C ₂ H ₃ +	7.78×10^{-25}	3.27×10^{-12}
NO+	3.06×10^{-10}	9.84×10^2	CNC+	6.89×10^{-25}	1.35×10^{-12}
CH ₂ +	8.35×10^{-11}	4.89×10^2	OCN	6.69×10^{-25}	1.69×10^{-12}
NH+	6.61×10^{-11}	2.39×10^2	OCN+	2.96×10^{-25}	4.52×10^{-13}
CO	2.36×10^{-11}	6.20×10^1	CH ₄	1.68×10^{-25}	1.33×10^{-12}
H ₃ +	8.63×10^{-12}	4.86×10^1	CO ₂ +	6.74×10^{-26}	1.23×10^{-13}
H ₂ O	5.42×10^{-12}	4.20×10^1	CH ₄ +	6.80×10^{-27}	2.42×10^{-14}
CH ₂	5.06×10^{-12}	4.21×10^1	N ₂ O	2.12×10^{-27}	4.82×10^{-15}
H ₃ O+	1.85×10^{-12}	9.19×10^0	C ₆ H ₅ +	1.15×10^{-28}	2.67×10^{-16}
NO	3.89×10^{-13}	1.39×10^0	C ₄ H ₂ +	6.55×10^{-29}	1.60×10^{-16}
HCO+	2.63×10^{-13}	8.60×10^{-1}	N ₂ O+	3.43×10^{-29}	5.85×10^{-17}
CN+	1.78×10^{-13}	6.06×10^{-1}	NO ₂	2.21×10^{-30}	1.83×10^{-17}
CH ₃ +	2.80×10^{-14}	1.77×10^{-1}	CN-	4.16×10^{-34}	2.20×10^{-21}
C ₂ H+	1.21×10^{-14}	3.83×10^{-2}	C ₆ H ₇ +	1.99×10^{-34}	6.33×10^{-22}
HNO+	1.09×10^{-14}	3.26×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	2.24×10^{-36}	7.66×10^{-24}
NH ₂ +	8.43×10^{-15}	3.90×10^{-2}	C ₂ H-	2.47×10^{-41}	4.64×10^{-29}
CN	6.95×10^{-16}	2.75×10^{-3}	C ₆ H ₆	2.00×10^{-41}	5.18×10^{-29}
N ₂ +	4.00×10^{-16}	1.12×10^{-3}	C ₂ H ₃	8.43×10^{-42}	2.63×10^{-29}
N ₂	1.10×10^{-16}	4.00×10^{-4}	C ₂ N	3.40×10^{-42}	6.62×10^{-30}
HCN+	9.59×10^{-17}	3.14×10^{-4}	C ₂ H ₄	4.46×10^{-43}	4.20×10^{-30}
HCO	7.79×10^{-17}	3.37×10^{-4}	C ₆ H ₆ +	3.20×10^{-43}	5.69×10^{-31}
CH ₃	2.25×10^{-18}	1.63×10^{-5}	C ₃ H ₄ +	1.69×10^{-43}	3.81×10^{-31}
HNC	1.20×10^{-18}	4.81×10^{-6}	CH-	2.56×10^{-46}	4.40×10^{-34}
C ₂ H ₂ +	8.37×10^{-19}	3.40×10^{-6}	C ₃ H ₂	1.54×10^{-46}	2.98×10^{-34}
N ₂ H+	4.79×10^{-20}	1.96×10^{-7}	C ₅ H ₃ +	1.22×10^{-46}	2.13×10^{-34}
HNO	2.39×10^{-20}	9.26×10^{-8}	C ₃ H ₃ +	2.84×10^{-47}	6.61×10^{-35}
HCN	1.93×10^{-20}	5.72×10^{-8}	C ₃ H ₃	5.02×10^{-48}	9.02×10^{-36}
C ₂ N+	2.94×10^{-21}	6.30×10^{-9}			

Tabela B.1.5. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 0.54$; $x(H_2_{inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2_{final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	6.84×10^{-5}	4.23×10^8	NO ₂ +	1.79×10^{-21}	3.67×10^{-9}
OH	1.42×10^{-6}	1.06×10^7	OH-	1.39×10^{-21}	2.14×10^{-8}
CH+	1.77×10^{-7}	1.17×10^6	CO ₂	1.01×10^{-21}	2.60×10^{-9}
CH	7.60×10^{-8}	7.12×10^5	H ₂ CO	3.97×10^{-22}	1.58×10^{-9}
CO+	4.28×10^{-8}	9.74×10^4	C ₂ H ₂	2.99×10^{-23}	1.22×10^{-10}
H ₂ O+	2.18×10^{-8}	1.22×10^5	C ₂ H	1.52×10^{-23}	3.75×10^{-11}
H ₂ +	1.08×10^{-8}	7.11×10^4	NH ₂	1.32×10^{-23}	9.34×10^{-11}
NH	3.80×10^{-10}	2.94×10^3	C ₂ H ₃ +	1.06×10^{-24}	4.46×10^{-12}
NO+	2.84×10^{-10}	9.12×10^2	CNC+	9.40×10^{-25}	1.84×10^{-12}
CH ₂ +	9.74×10^{-11}	5.71×10^2	OCN	7.25×10^{-25}	1.83×10^{-12}
NH+	6.61×10^{-11}	2.39×10^2	OCN+	3.21×10^{-25}	4.89×10^{-13}
CO	2.56×10^{-11}	6.71×10^1	CH ₄	1.96×10^{-25}	1.56×10^{-12}
H ₃ +	8.63×10^{-12}	4.86×10^1	CO ₂ +	6.76×10^{-26}	1.23×10^{-13}
CH ₂	5.91×10^{-12}	4.92×10^1	CH ₄ +	7.94×10^{-27}	2.83×10^{-14}
H ₂ O	5.02×10^{-12}	3.89×10^1	N ₂ O	1.96×10^{-27}	4.47×10^{-15}
H ₃ O+	1.71×10^{-12}	8.52×10^0	C ₆ H ₅ +	1.83×10^{-28}	4.25×10^{-16}
NO	3.60×10^{-13}	1.29×10^0	C ₄ H ₂ +	1.04×10^{-28}	2.55×10^{-16}
HCO+	2.85×10^{-13}	9.32×10^{-1}	N ₂ O+	3.18×10^{-29}	5.42×10^{-17}
CN+	2.07×10^{-13}	7.07×10^{-1}	NO ₂	1.90×10^{-30}	1.57×10^{-17}
CH ₃ +	3.27×10^{-14}	2.07×10^{-1}	CN-	4.50×10^{-34}	2.38×10^{-21}
C ₂ H+	1.65×10^{-14}	5.22×10^{-2}	C ₆ H ₇ +	3.18×10^{-34}	1.01×10^{-21}
HNO+	1.01×10^{-14}	3.02×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	3.05×10^{-36}	1.04×10^{-23}
NH ₂ +	8.43×10^{-15}	3.90×10^{-2}	C ₂ H-	3.37×10^{-41}	6.33×10^{-29}
CN	8.11×10^{-16}	3.21×10^{-3}	C ₆ H ₆	3.18×10^{-41}	8.25×10^{-29}
N ₂ +	4.00×10^{-16}	1.13×10^{-3}	C ₂ H ₃	1.07×10^{-41}	3.34×10^{-29}
HCN+	1.12×10^{-16}	3.67×10^{-4}	C ₂ N	4.31×10^{-42}	8.39×10^{-30}
N ₂	1.10×10^{-16}	4.02×10^{-4}	C ₂ H ₄	6.09×10^{-43}	5.73×10^{-30}
HCO	8.43×10^{-17}	3.65×10^{-4}	C ₆ H ₆ +	5.10×10^{-43}	9.07×10^{-31}
CH ₃	2.63×10^{-18}	1.90×10^{-5}	C ₃ H ₄ +	2.70×10^{-43}	6.08×10^{-31}
HNC	1.40×10^{-18}	5.61×10^{-6}	CH-	3.24×10^{-46}	5.56×10^{-34}
C ₂ H ₂ +	1.14×10^{-18}	4.64×10^{-6}	C ₃ H ₂	2.29×10^{-46}	4.43×10^{-34}
N ₂ H+	4.79×10^{-20}	1.96×10^{-7}	C ₅ H ₃ +	2.27×10^{-46}	3.97×10^{-34}
HCN	2.26×10^{-20}	6.68×10^{-8}	C ₃ H ₃ +	4.52×10^{-47}	1.05×10^{-34}
HNO	2.22×10^{-20}	8.58×10^{-8}	C ₃ H ₃	7.37×10^{-48}	1.31×10^{-35}
C ₂ N+	4.01×10^{-21}	8.59×10^{-9}			

Tabela B.1.6. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{máxima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 0.75$; $x(H_2_{inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2_{final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm⁻²]
OH+	6.03×10^{-5}	3.72×10^8	NO ₂ +	1.39×10^{-21}	2.85×10^{-9}
OH	1.25×10^{-6}	9.38×10^6	OH-	1.22×10^{-21}	1.89×10^{-8}
CH+	2.15×10^{-7}	1.42×10^6	CO ₂	9.63×10^{-22}	2.47×10^{-9}
CH	9.32×10^{-8}	8.73×10^5	H ₂ CO	4.29×10^{-22}	1.71×10^{-9}
CO+	4.62×10^{-8}	1.05×10^5	C ₂ H ₂	4.49×10^{-23}	1.84×10^{-10}
H ₂ O+	1.92×10^{-8}	1.08×10^5	C ₂ H	2.28×10^{-23}	5.63×10^{-11}
H ₂ +	1.08×10^{-8}	7.11×10^4	NH ₂	1.18×10^{-23}	8.29×10^{-11}
NH	3.80×10^{-10}	2.94×10^3	C ₂ H ₃ +	1.59×10^{-24}	6.69×10^{-12}
NO+	2.50×10^{-10}	8.03×10^2	CNC+	1.41×10^{-24}	2.75×10^{-12}
CH ₂ +	1.19×10^{-10}	6.99×10^2	OCN	7.83×10^{-25}	1.98×10^{-12}
NH+	6.61×10^{-11}	2.39×10^2	OCN+	3.46×10^{-25}	5.27×10^{-13}
CO	2.75×10^{-11}	7.23×10^1	CH ₄	2.40×10^{-25}	1.91×10^{-12}
H ₃ +	8.62×10^{-12}	4.86×10^1	CO ₂ +	6.44×10^{-26}	1.17×10^{-13}
CH ₂	7.24×10^{-12}	6.03×10^1	CH ₄ +	9.74×10^{-27}	3.47×10^{-14}
H ₂ O	4.42×10^{-12}	3.43×10^1	N ₂ O	1.73×10^{-27}	3.94×10^{-15}
H ₃ O+	1.51×10^{-12}	7.50×10^0	C ₆ H ₅ +	3.36×10^{-28}	7.83×10^{-16}
NO	3.18×10^{-13}	1.14×10^0	C ₄ H ₂ +	1.92×10^{-28}	4.68×10^{-16}
HCO+	3.08×10^{-13}	1.00×10^0	N ₂ O+	2.80×10^{-29}	4.78×10^{-17}
CN+	2.53×10^{-13}	8.64×10^{-1}	NO ₂	1.48×10^{-30}	1.22×10^{-17}
CH ₃ +	4.00×10^{-14}	2.53×10^{-1}	C ₆ H ₇ +	5.86×10^{-34}	1.86×10^{-21}
C ₂ H+	2.48×10^{-14}	7.83×10^{-2}	CN-	4.86×10^{-34}	2.57×10^{-21}
HNO+	8.93×10^{-15}	2.66×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	4.56×10^{-36}	1.56×10^{-23}
NH ₂ +	8.43×10^{-15}	3.90×10^{-2}	C ₆ H ₆	5.86×10^{-41}	1.52×10^{-28}
CN	9.94×10^{-16}	3.94×10^{-3}	C ₂ H-	5.06×10^{-41}	9.50×10^{-29}
N ₂ +	4.01×10^{-16}	1.13×10^{-3}	C ₂ H ₃	1.42×10^{-41}	4.46×10^{-29}
HCN+	1.37×10^{-16}	4.49×10^{-4}	C ₂ N	5.72×10^{-42}	1.12×10^{-29}
N ₂	1.10×10^{-16}	4.02×10^{-4}	C ₆ H ₆ +	9.40×10^{-43}	1.67×10^{-30}
HCO	9.11×10^{-17}	3.94×10^{-4}	C ₂ H ₄	9.15×10^{-43}	8.61×10^{-30}
CH ₃	3.22×10^{-18}	2.33×10^{-5}	C ₃ H ₄ +	4.96×10^{-43}	1.11×10^{-30}
HNC	1.72×10^{-18}	6.88×10^{-6}	C ₅ H ₃ +	5.12×10^{-46}	8.96×10^{-34}
C ₂ H ₂ +	1.71×10^{-18}	6.96×10^{-6}	CH-	4.28×10^{-46}	7.36×10^{-34}
N ₂ H+	4.79×10^{-20}	1.96×10^{-7}	C ₃ H ₂	3.75×10^{-46}	7.26×10^{-34}
HCN	2.76×10^{-20}	8.19×10^{-8}	C ₃ H ₃ +	8.31×10^{-47}	1.94×10^{-34}
HNO	1.96×10^{-20}	7.56×10^{-8}	C ₃ H ₃	1.19×10^{-47}	2.09×10^{-35}
C ₂ N+	6.02×10^{-21}	1.29×10^{-8}			

Tabela B.1.7. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.25$; $x(H_2_{inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2_{final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	4.68×10^{-5}	2.89×10^8	OH-	9.49×10^{-22}	1.46×10^{-8}
OH	9.71×10^{-7}	7.28×10^6	NO ₂ +	8.35×10^{-22}	1.72×10^{-9}
CH+	2.75×10^{-7}	1.83×10^6	CO ₂	7.50×10^{-22}	1.93×10^{-9}
CH	1.21×10^{-7}	1.13×10^6	H ₂ CO	4.31×10^{-22}	1.71×10^{-9}
CO+	4.65×10^{-8}	1.06×10^5	C ₂ H ₂	7.55×10^{-23}	3.08×10^{-10}
H ₂ O+	1.49×10^{-8}	8.36×10^4	C ₂ H	3.83×10^{-23}	9.46×10^{-11}
H ₂ +	1.08×10^{-8}	7.11×10^4	NH ₂	9.34×10^{-24}	6.52×10^{-11}
NH	3.80×10^{-10}	2.94×10^3	C ₂ H ₃ +	2.67×10^{-24}	1.12×10^{-11}
NO+	1.94×10^{-10}	6.24×10^2	CNC+	2.37×10^{-24}	4.62×10^{-12}
CH ₂ +	1.54×10^{-10}	9.05×10^2	OCN	7.87×10^{-25}	1.99×10^{-12}
NH+	6.61×10^{-11}	2.39×10^2	OCN+	3.47×10^{-25}	5.30×10^{-13}
CO	2.76×10^{-11}	7.26×10^1	CH ₄	3.11×10^{-25}	2.47×10^{-12}
CH ₂	9.39×10^{-12}	7.81×10^1	CO ₂ +	5.02×10^{-26}	9.15×10^{-14}
H ₃ +	8.62×10^{-12}	4.86×10^1	CH ₄ +	1.26×10^{-26}	4.50×10^{-14}
H ₂ O	3.43×10^{-12}	2.66×10^1	N ₂ O	1.34×10^{-27}	3.05×10^{-15}
H ₃ O+	1.17×10^{-12}	5.83×10^0	C ₆ H ₅ +	7.33×10^{-28}	1.70×10^{-15}
CN+	3.26×10^{-13}	1.12×10^0	C ₄ H ₂ +	4.18×10^{-28}	1.02×10^{-15}
HCO+	3.10×10^{-13}	1.01×10^0	N ₂ O+	2.17×10^{-29}	3.70×10^{-17}
NO	2.46×10^{-13}	8.82×10^{-1}	NO ₂	8.87×10^{-31}	7.35×10^{-18}
CH ₃ +	5.18×10^{-14}	3.28×10^{-1}	C ₆ H ₇ +	1.28×10^{-33}	4.05×10^{-21}
C ₂ H+	4.16×10^{-14}	1.31×10^{-1}	CN-	4.89×10^{-34}	2.59×10^{-21}
NH ₂ +	8.43×10^{-15}	3.90×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	7.62×10^{-36}	2.61×10^{-23}
HNO+	6.94×10^{-15}	2.06×10^{-2}	C ₆ H ₆	1.28×10^{-40}	3.31×10^{-28}
CN	1.29×10^{-15}	5.10×10^{-3}	C ₂ H-	8.50×10^{-41}	1.60×10^{-28}
N ₂ +	4.01×10^{-16}	1.13×10^{-3}	C ₂ H ₃	1.88×10^{-41}	5.95×10^{-29}
HCN+	1.77×10^{-16}	5.81×10^{-4}	C ₂ N	7.54×10^{-42}	1.48×10^{-29}
N ₂	1.10×10^{-16}	4.02×10^{-4}	C ₆ H ₆ +	2.05×10^{-42}	3.64×10^{-30}
HCO	9.16×10^{-17}	3.96×10^{-4}	C ₂ H ₄	1.54×10^{-42}	1.45×10^{-29}
CH ₃	4.18×10^{-18}	3.02×10^{-5}	C ₃ H ₄ +	1.08×10^{-42}	2.43×10^{-30}
C ₂ H ₂ +	2.87×10^{-18}	1.17×10^{-5}	C ₅ H ₃ +	1.45×10^{-45}	2.53×10^{-33}
HNC	2.22×10^{-18}	8.92×10^{-6}	C ₃ H ₂	6.48×10^{-46}	1.26×10^{-33}
N ₂ H+	4.79×10^{-20}	1.96×10^{-7}	CH-	5.58×10^{-46}	9.58×10^{-34}
HCN	3.58×10^{-20}	1.06×10^{-7}	C ₃ H ₃ +	1.81×10^{-46}	4.22×10^{-34}
HNO	1.52×10^{-20}	5.86×10^{-8}	C ₃ H ₃	1.99×10^{-47}	3.47×10^{-35}
C ₂ N+	1.01×10^{-20}	2.16×10^{-8}			

Tabela B.1.8. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.50$; $x(H_2_{inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2_{final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	4.22×10^{-5}	2.60×10^8	OH-	8.57×10^{-22}	1.32×10^{-8}
OH	8.76×10^{-7}	6.57×10^6	NO ₂ +	6.79×10^{-22}	1.40×10^{-9}
CH+	2.95×10^{-7}	1.97×10^6	CO ₂	6.59×10^{-22}	1.69×10^{-9}
CH	1.30×10^{-7}	1.22×10^6	H ₂ CO	4.19×10^{-22}	1.67×10^{-9}
CO+	4.51×10^{-8}	1.03×10^5	C ₂ H ₂	8.77×10^{-23}	3.58×10^{-10}
H ₂ O+	1.34×10^{-8}	7.53×10^4	C ₂ H	4.45×10^{-23}	1.10×10^{-10}
H ₂ +	1.08×10^{-8}	7.11×10^4	NH ₂	8.53×10^{-24}	5.93×10^{-11}
NH	3.80×10^{-10}	2.94×10^3	C ₂ H ₃ +	3.11×10^{-24}	1.31×10^{-11}
NO+	1.75×10^{-10}	5.62×10^2	CNC+	2.75×10^{-24}	5.38×10^{-12}
CH ₂ +	1.66×10^{-10}	9.75×10^2	OCN	7.65×10^{-25}	1.94×10^{-12}
NH+	6.61×10^{-11}	2.39×10^2	OCN+	3.37×10^{-25}	5.14×10^{-13}
CO	2.68×10^{-11}	7.05×10^1	CH ₄	3.35×10^{-25}	2.66×10^{-12}
CH ₂	1.01×10^{-11}	8.42×10^1	CO ₂ +	4.40×10^{-26}	8.04×10^{-14}
H ₃ +	8.62×10^{-12}	4.86×10^1	CH ₄ +	1.36×10^{-26}	4.85×10^{-14}
H ₂ O	3.10×10^{-12}	2.40×10^1	N ₂ O	1.21×10^{-27}	2.76×10^{-15}
H ₃ O+	1.05×10^{-12}	5.24×10^0	C ₆ H ₅ +	9.17×10^{-28}	2.13×10^{-15}
CN+	3.51×10^{-13}	1.20×10^0	C ₄ H ₂ +	5.24×10^{-28}	1.28×10^{-15}
HCO+	3.01×10^{-13}	9.83×10^{-1}	N ₂ O+	1.96×10^{-29}	3.34×10^{-17}
NO	2.22×10^{-13}	7.96×10^{-1}	NO ₂	7.23×10^{-31}	5.99×10^{-18}
CH ₃ +	5.56×10^{-14}	3.53×10^{-1}	C ₆ H ₇ +	1.60×10^{-33}	5.06×10^{-21}
C ₂ H+	4.83×10^{-14}	1.53×10^{-1}	CN-	4.75×10^{-34}	2.52×10^{-21}
NH ₂ +	8.42×10^{-15}	3.90×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	8.83×10^{-36}	3.03×10^{-23}
HNO+	6.25×10^{-15}	1.86×10^{-2}	C ₆ H ₆	1.60×10^{-40}	4.14×10^{-28}
CN	1.39×10^{-15}	5.49×10^{-3}	C ₂ H-	9.87×10^{-41}	1.85×10^{-28}
N ₂ +	4.01×10^{-16}	1.13×10^{-3}	C ₂ H ₃	1.99×10^{-41}	6.32×10^{-29}
HCN+	1.91×10^{-16}	6.26×10^{-4}	C ₂ N	7.95×10^{-42}	1.56×10^{-29}
N ₂	1.09×10^{-16}	4.02×10^{-4}	C ₆ H ₆ +	2.56×10^{-42}	4.55×10^{-30}
HCO	8.90×10^{-17}	3.85×10^{-4}	C ₂ H ₄	1.78×10^{-42}	1.68×10^{-29}
CH ₃	4.50×10^{-18}	3.25×10^{-5}	C ₃ H ₄ +	1.35×10^{-42}	3.04×10^{-30}
C ₂ H ₂ +	3.34×10^{-18}	1.36×10^{-5}	C ₅ H ₃ +	1.95×10^{-45}	3.41×10^{-33}
HNC	2.40×10^{-18}	9.61×10^{-6}	C ₃ H ₂	7.42×10^{-46}	1.45×10^{-33}
N ₂ H+	4.79×10^{-20}	1.96×10^{-7}	CH-	5.85×10^{-46}	1.00×10^{-33}
HCN	3.86×10^{-20}	1.14×10^{-7}	C ₃ H ₃ +	2.26×10^{-46}	5.28×10^{-34}
HNO	1.37×10^{-20}	5.29×10^{-8}	C ₃ H ₃	2.25×10^{-47}	3.91×10^{-35}
C ₂ N+	1.17×10^{-20}	2.51×10^{-8}			

Tabela B.1.9. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 2.0$; $x(H_2_{inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2_{final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	3.51×10^{-5}	2.17×10^8	OH-	7.14×10^{-22}	1.10×10^{-8}
OH	7.31×10^{-7}	5.48×10^6	CO ₂	5.08×10^{-22}	1.31×10^{-9}
CH+	3.25×10^{-7}	2.18×10^6	NO ₂ +	4.72×10^{-22}	9.70×10^{-10}
CH	1.44×10^{-7}	1.35×10^6	H ₂ CO	3.88×10^{-22}	1.54×10^{-9}
CO+	4.18×10^{-8}	9.51×10^4	C ₂ H ₂	1.08×10^{-22}	4.41×10^{-10}
H ₂ O+	1.12×10^{-8}	6.28×10^4	C ₂ H	5.48×10^{-23}	1.35×10^{-10}
H ₂ +	1.08×10^{-8}	7.11×10^4	NH ₂	7.27×10^{-24}	5.02×10^{-11}
NH	3.80×10^{-10}	2.94×10^3	C ₂ H ₃ +	3.83×10^{-24}	1.61×10^{-11}
CH ₂ +	1.84×10^{-10}	1.08×10^3	CNC+	3.39×10^{-24}	6.62×10^{-12}
NO+	1.46×10^{-10}	4.68×10^2	OCN	7.08×10^{-25}	1.79×10^{-12}
NH+	6.61×10^{-11}	2.39×10^2	CH ₄	3.72×10^{-25}	2.96×10^{-12}
CO	2.48×10^{-11}	6.51×10^1	OCN+	3.11×10^{-25}	4.75×10^{-13}
CH ₂	1.12×10^{-11}	9.35×10^1	CO ₂ +	3.40×10^{-26}	6.20×10^{-14}
H ₃ +	8.62×10^{-12}	4.86×10^1	CH ₄ +	1.51×10^{-26}	5.38×10^{-14}
H ₂ O	2.58×10^{-12}	2.00×10^1	C ₆ H ₅ +	1.25×10^{-27}	2.92×10^{-15}
H ₃ O+	8.79×10^{-13}	4.37×10^0	N ₂ O	1.01×10^{-27}	2.30×10^{-15}
CN+	3.89×10^{-13}	1.33×10^0	C ₄ H ₂ +	7.16×10^{-28}	1.75×10^{-15}
HCO+	2.78×10^{-13}	9.09×10^{-1}	N ₂ O+	1.64×10^{-29}	2.79×10^{-17}
NO	1.85×10^{-13}	6.64×10^{-1}	NO ₂	5.03×10^{-31}	4.16×10^{-18}
CH ₃ +	6.20×10^{-14}	3.92×10^{-1}	C ₆ H ₇ +	2.18×10^{-33}	6.93×10^{-21}
C ₂ H+	5.95×10^{-14}	1.88×10^{-1}	CN-	4.40×10^{-34}	2.33×10^{-21}
NH ₂ +	8.42×10^{-15}	3.90×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	1.08×10^{-35}	3.73×10^{-23}
HNO+	5.21×10^{-15}	1.55×10^{-2}	C ₆ H ₆	2.18×10^{-40}	5.66×10^{-28}
CN	1.54×10^{-15}	6.10×10^{-3}	C ₂ H-	1.22×10^{-40}	2.28×10^{-28}
N ₂ +	4.01×10^{-16}	1.13×10^{-3}	C ₂ H ₃	2.08×10^{-41}	6.63×10^{-29}
HCN+	2.12×10^{-16}	6.95×10^{-4}	C ₂ N	8.25×10^{-42}	1.63×10^{-29}
N ₂	1.09×10^{-16}	4.02×10^{-4}	C ₆ H ₆ +	3.50×10^{-42}	6.23×10^{-30}
HCO	8.24×10^{-17}	3.57×10^{-4}	C ₂ H ₄	2.20×10^{-42}	2.07×10^{-29}
CH ₃	5.00×10^{-18}	3.61×10^{-5}	C ₃ H ₄ +	1.85×10^{-42}	4.16×10^{-30}
C ₂ H ₂ +	4.11×10^{-18}	1.67×10^{-5}	C ₅ H ₃ +	2.96×10^{-45}	5.18×10^{-33}
HNC	2.66×10^{-18}	1.07×10^{-5}	C ₃ H ₂	8.65×10^{-46}	1.70×10^{-33}
N ₂ H+	4.79×10^{-20}	1.96×10^{-7}	CH-	6.01×10^{-46}	1.03×10^{-33}
HCN	4.28×10^{-20}	1.27×10^{-7}	C ₃ H ₃ +	3.09×10^{-46}	7.22×10^{-34}
C ₂ N+	1.44×10^{-20}	3.10×10^{-8}	C ₃ H ₃	2.56×10^{-47}	4.43×10^{-35}
HNO	1.14×10^{-20}	4.41×10^{-8}			

Tabela B.1.10. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{máxima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 2 \times 10^{-2}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 2 \times 10^{-3}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm⁻²]
OH+	1.06×10^{-5}	6.52×10^7	OH-	2.14×10^{-22}	3.30×10^{-9}
OH	2.19×10^{-7}	1.64×10^6	NO ₂ +	4.24×10^{-23}	8.72×10^{-11}
CH+	4.97×10^{-8}	3.30×10^5	CO ₂	3.49×10^{-23}	8.95×10^{-11}
CO+	4.69×10^{-8}	1.07×10^5	H ₂ CO	3.48×10^{-24}	1.39×10^{-11}
CH	2.17×10^{-8}	2.03×10^5	C ₂ H ₂	4.86×10^{-25}	1.98×10^{-12}
H ₂ +	2.23×10^{-9}	1.46×10^4	NH ₂	4.10×10^{-25}	2.90×10^{-12}
H ₂ O+	6.73×10^{-10}	3.77×10^3	C ₂ H	2.48×10^{-25}	6.21×10^{-13}
NH	7.60×10^{-11}	5.88×10^2	CNC+	1.16×10^{-25}	2.64×10^{-13}
NO+	4.38×10^{-11}	1.40×10^2	OCN+	7.01×10^{-26}	1.07×10^{-13}
CO	2.79×10^{-11}	7.33×10^1	OCN	4.01×10^{-26}	1.02×10^{-13}
NH+	1.32×10^{-11}	4.79×10^1	C ₂ H ₃ +	3.45×10^{-27}	1.45×10^{-14}
CH ₂ +	5.55×10^{-12}	3.26×10^1	CO ₂ +	2.33×10^{-27}	4.24×10^{-15}
H ₃ +	3.53×10^{-13}	1.99×10^0	CH ₄	4.46×10^{-28}	3.55×10^{-15}
CH ₂	3.37×10^{-13}	2.80×10^0	N ₂ O	6.05×10^{-29}	1.38×10^{-16}
H ₂ O	1.55×10^{-13}	1.20×10^0	CH ₄ +	1.81×10^{-29}	6.46×10^{-17}
CN+	5.90×10^{-14}	2.02×10^{-1}	C ₆ H ₅ +	4.22×10^{-30}	9.83×10^{-18}
HCO+	5.80×10^{-14}	1.90×10^{-1}	N ₂ O+	9.80×10^{-31}	1.67×10^{-18}
NO	5.55×10^{-14}	1.99×10^{-1}	C ₄ H ₂ +	4.83×10^{-31}	1.18×10^{-18}
H ₃ O+	1.06×10^{-14}	5.25×10^{-2}	NO ₂	4.50×10^{-32}	3.73×10^{-19}
C ₂ H+	1.34×10^{-15}	4.20×10^{-3}	CN-	1.65×10^{-34}	8.11×10^{-22}
CN	9.23×10^{-16}	3.70×10^{-3}	C ₆ H ₇ +	1.47×10^{-36}	4.67×10^{-24}
CH ₃ +	8.95×10^{-16}	4.50×10^{-3}	C ₂ H ₄ +	1.97×10^{-39}	6.75×10^{-27}
NH ₂ +	3.37×10^{-16}	1.60×10^{-3}	C ₂ H-	5.55×10^{-43}	1.05×10^{-30}
HNO+	3.13×10^{-16}	9.31×10^{-4}	C ₂ N	5.00×10^{-43}	1.13×10^{-30}
N ₂ +	1.05×10^{-16}	3.20×10^{-4}	C ₆ H ₆	1.47×10^{-43}	3.82×10^{-31}
N ₂	2.19×10^{-17}	8.04×10^{-5}	C ₂ H ₃	2.71×10^{-44}	8.55×10^{-32}
HCN+	6.38×10^{-18}	2.09×10^{-5}	C ₆ H ₆ +	2.36×10^{-45}	4.20×10^{-33}
HCO	3.72×10^{-18}	1.61×10^{-5}	C ₂ H ₄	7.91×10^{-47}	7.44×10^{-34}
HNC	7.98×10^{-20}	3.20×10^{-7}	C ₃ H ₄ +	4.99×10^{-47}	1.12×10^{-34}
CH ₃	3.00×10^{-20}	2.17×10^{-7}	CH-	4.11×10^{-48}	7.16×10^{-36}
C ₂ H ₂ +	1.85×10^{-20}	7.54×10^{-8}	C ₅ H ₃ +	1.50×10^{-48}	2.62×10^{-36}
N ₂ H+	3.07×10^{-21}	1.35×10^{-8}	C ₃ H ₂	8.36×10^{-49}	1.62×10^{-36}
HCN	1.53×10^{-21}	5.57×10^{-9}	C ₃ H ₃ +	8.36×10^{-51}	1.95×10^{-38}
HNO	6.83×10^{-22}	2.64×10^{-9}	C ₃ H ₃	1.04×10^{-51}	1.82×10^{-39}
C ₂ N+	3.26×10^{-22}	6.98×10^{-10}			

Tabela B.1.11. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_2_{inicial}) = 5 \times 10^{-1}$, $x(H_2_{final}) = 5 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	2.63×10^{-4}	1.62×10^9	H ₂ CO	5.44×10^{-20}	2.16×10^{-7}
OH	5.47×10^{-6}	4.10×10^7	NO ₂ +	2.64×10^{-20}	5.43×10^{-8}
CH+	1.24×10^{-6}	8.23×10^6	CO ₂	2.13×10^{-20}	5.47×10^{-8}
CH	5.41×10^{-7}	5.07×10^6	C ₂ H ₂	7.59×10^{-21}	3.10×10^{-8}
H ₂ O+	4.19×10^{-7}	2.35×10^6	OH-	5.34×10^{-21}	8.24×10^{-8}
H ₂ +	5.36×10^{-8}	3.53×10^5	C ₂ H	3.85×10^{-21}	9.51×10^{-9}
CO+	4.70×10^{-8}	1.07×10^5	C ₂ H ₃ +	1.35×10^{-21}	5.66×10^{-9}
CH ₂ +	3.46×10^{-9}	2.03×10^4	NH ₂	2.78×10^{-22}	1.87×10^{-9}
NH	1.90×10^{-9}	1.47×10^4	CH ₄	1.74×10^{-22}	1.39×10^{-9}
NO+	1.09×10^{-9}	3.50×10^3	CNC+	4.28×10^{-23}	7.88×10^{-11}
NH+	3.30×10^{-10}	1.20×10^3	OCN	1.88×10^{-23}	4.75×10^{-11}
H ₃ +	2.14×10^{-10}	1.21×10^3	CH ₄ +	7.07×10^{-24}	2.52×10^{-11}
CH ₂	2.10×10^{-10}	1.75×10^3	OCN+	1.77×10^{-24}	2.70×10^{-12}
H ₃ O+	1.64×10^{-10}	8.18×10^2	CO ₂ +	1.42×10^{-24}	2.60×10^{-12}
H ₂ O	9.66×10^{-11}	7.49×10^2	C ₄ H ₂ +	1.89×10^{-25}	4.60×10^{-13}
CO	2.81×10^{-11}	7.41×10^1	C ₆ H ₅ +	6.60×10^{-26}	1.54×10^{-13}
CH ₃ +	4.18×10^{-12}	2.99×10^1	N ₂ O	3.78×10^{-26}	8.60×10^{-14}
HCO+	2.13×10^{-12}	6.88×10^0	N ₂ O+	6.12×10^{-28}	1.04×10^{-15}
CN+	1.46×10^{-12}	5.00×10^0	NO ₂	2.81×10^{-29}	2.33×10^{-16}
NO	1.39×10^{-12}	4.97×10^0	C ₆ H ₇ +	5.75×10^{-31}	1.82×10^{-18}
C ₂ H+	8.37×10^{-13}	2.64×10^0	C ₂ H ₄ +	1.92×10^{-32}	6.58×10^{-20}
NH ₂ +	2.10×10^{-13}	9.75×10^{-1}	CN-	2.14×10^{-33}	1.16×10^{-20}
HNO+	1.95×10^{-13}	5.80×10^{-1}	C ₆ H ₆	5.75×10^{-38}	1.49×10^{-25}
HCN+	3.97×10^{-15}	1.30×10^{-2}	C ₂ H ₄	1.93×10^{-38}	1.82×10^{-25}
CN	2.33×10^{-15}	8.70×10^{-3}	C ₃ H ₄ +	1.22×10^{-38}	2.74×10^{-26}
HCO	2.31×10^{-15}	1.00×10^{-2}	C ₂ H ₃	1.06×10^{-38}	3.34×10^{-26}
N ₂ +	1.88×10^{-15}	5.20×10^{-3}	C ₂ H-	8.55×10^{-39}	1.60×10^{-26}
N ₂	5.48×10^{-16}	2.00×10^{-3}	C ₆ H ₆ +	9.23×10^{-40}	1.64×10^{-27}
CH ₃	4.68×10^{-16}	3.40×10^{-3}	C ₂ N	1.42×10^{-40}	2.58×10^{-28}
C ₂ H ₂ +	2.89×10^{-16}	1.20×10^{-3}	C ₃ H ₃ +	2.04×10^{-42}	4.76×10^{-30}
HNC	4.98×10^{-17}	2.00×10^{-4}	C ₅ H ₃ +	5.85×10^{-43}	1.02×10^{-30}
N ₂ H+	1.05×10^{-18}	4.20×10^{-6}	C ₃ H ₂	3.26×10^{-43}	6.84×10^{-31}
HCN	7.72×10^{-19}	2.16×10^{-6}	C ₃ H ₃	2.54×10^{-43}	4.44×10^{-31}
HNO	4.27×10^{-19}	1.65×10^{-6}	CH-	6.31×10^{-44}	1.08×10^{-31}
C ₂ N+	2.03×10^{-19}	4.34×10^{-7}			

Tabela B.1.12. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_2_{inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2_{final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; $10Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	5.26×10^{-4}	3.25×10^9	NO ₂ +	1.06×10^{-18}	2.18×10^{-6}
OH	1.09×10^{-5}	8.19×10^7	CO ₂	8.54×10^{-19}	2.19×10^{-6}
CO+	4.69×10^{-6}	1.07×10^7	H ₂ CO	4.34×10^{-20}	1.73×10^{-7}
CH+	3.66×10^{-6}	2.04×10^7	OH-	1.04×10^{-20}	1.62×10^{-7}
CH	1.08×10^{-6}	1.02×10^7	C ₂ H ₂	6.06×10^{-21}	2.48×10^{-8}
H ₂ O+	1.68×10^{-7}	9.41×10^5	C ₂ H	3.08×10^{-21}	7.60×10^{-9}
NO+	2.18×10^{-8}	7.02×10^4	CNC+	1.95×10^{-21}	3.80×10^{-9}
H ₂ +	1.07×10^{-8}	7.08×10^4	NH ₂	1.04×10^{-21}	7.29×10^{-9}
NH	3.80×10^{-9}	2.94×10^4	OCN	7.97×10^{-22}	2.02×10^{-9}
CO	3.72×10^{-9}	8.98×10^3	OCN+	4.36×10^{-22}	6.36×10^{-10}
CH ₂ +	1.48×10^{-9}	8.57×10^3	C ₂ H ₃ +	2.19×10^{-22}	9.20×10^{-10}
NH+	6.59×10^{-10}	2.39×10^3	CO ₂ +	6.02×10^{-23}	1.10×10^{-10}
CH ₂	8.41×10^{-11}	7.00×10^2	CH ₄	2.79×10^{-24}	2.22×10^{-11}
H ₂ O	3.86×10^{-11}	2.99×10^2	N ₂ O	1.51×10^{-24}	3.44×10^{-12}
CN+	3.50×10^{-11}	1.13×10^2	C ₆ H ₅ +	5.28×10^{-25}	1.23×10^{-12}
HCO+	3.14×10^{-11}	1.02×10^2	C ₄ H ₂ +	3.07×10^{-25}	7.47×10^{-13}
NO	2.77×10^{-11}	9.93×10^1	CH ₄ +	1.13×10^{-25}	4.03×10^{-13}
H ₃ O+	1.32×10^{-11}	6.56×10^1	N ₂ O+	2.46×10^{-26}	4.19×10^{-14}
H ₃ +	8.57×10^{-12}	4.80×10^1	NO ₂	1.13×10^{-27}	9.33×10^{-15}
C ₂ H +	3.53×10^{-12}	1.10×10^1	C ₆ H ₇ +	9.19×10^{-31}	2.92×10^{-18}
HNO+	7.80×10^{-13}	2.32×10^0	CN-	4.87×10^{-31}	2.59×10^{-18}
CH ₃ +	4.74×10^{-13}	3.00×10^0	C ₂ H ₄ +	7.59×10^{-34}	2.45×10^{-21}
CN	1.26×10^{-13}	4.83×10^{-1}	C ₆ H ₆	9.19×10^{-38}	2.38×10^{-25}
NH ₂ +	8.47×10^{-14}	3.91×10^{-1}	C ₂ N	6.67×10^{-38}	1.29×10^{-25}
N ₂ +	4.05×10^{-14}	1.14×10^{-1}	C ₂ H ₃	1.64×10^{-38}	5.07×10^{-26}
HCN+	1.68×10^{-14}	5.45×10^{-2}	C ₂ H-	6.76×10^{-39}	1.27×10^{-26}
N ₂	1.10×10^{-14}	4.03×10^{-2}	C ₆ H ₆ +	1.47×10^{-39}	2.62×10^{-27}
HCO	9.24×10^{-15}	4.00×10^{-2}	C ₃ H ₄ +	8.10×10^{-40}	1.81×10^{-27}
C ₂ H ₂ +	2.38×10^{-16}	9.64×10^{-4}	C ₂ H ₄	1.23×10^{-40}	1.16×10^{-27}
HNC	1.99×10^{-16}	7.99×10^{-4}	C ₅ H ₃ +	9.36×10^{-42}	1.64×10^{-29}
CH ₃	3.74×10^{-17}	2.70×10^{-4}	C ₃ H ₂	4.97×10^{-42}	9.45×10^{-30}
C ₂ N+	8.48×10^{-18}	1.81×10^{-5}	CH-	4.97×10^{-43}	8.56×10^{-31}
N ₂ H+	4.81×10^{-18}	1.97×10^{-5}	C ₃ H ₃	1.64×10^{-43}	2.76×10^{-31}
HCN	3.24×10^{-18}	9.59×10^{-6}	C ₃ H ₃ +	1.35×10^{-43}	3.12×10^{-31}
HNO	1.71×10^{-18}	6.60×10^{-6}			

Tabela B.1.13. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_2_{inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2_{final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; $100Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	5.10×10^{-3}	3.21×10^{10}	HCN	3.46×10^{-16}	1.03×10^{-3}
CO+	4.69×10^{-4}	1.07×10^9	HNO	1.70×10^{-16}	6.59×10^{-4}
CH+	1.52×10^{-4}	5.90×10^8	H ₂ CO	4.28×10^{-18}	1.71×10^{-5}
OH	1.09×10^{-4}	8.18×10^8	CNC+	2.62×10^{-18}	4.84×10^{-6}
CH	1.08×10^{-5}	1.01×10^8	OCN+	1.26×10^{-18}	1.63×10^{-6}
NO+	2.16×10^{-6}	6.96×10^6	OCN	8.42×10^{-19}	2.09×10^{-6}
H ₂ O+	1.64×10^{-6}	9.29×10^6	C ₂ H ₂	5.99×10^{-19}	2.46×10^{-6}
CO	1.30×10^{-6}	2.54×10^6	C ₂ H	3.05×10^{-19}	7.55×10^{-7}
NH	3.78×10^{-8}	2.94×10^5	NH ₂	1.03×10^{-19}	7.26×10^{-7}
CH ₂ +	2.43×10^{-8}	1.28×10^5	CO ₂ +	9.22×10^{-20}	1.68×10^{-7}
H ₂ +	9.86×10^{-9}	6.78×10^4	OH-	8.28×10^{-20}	1.38×10^{-7}
CN+	9.01×10^{-9}	2.37×10^4	C ₂ H ₃ +	2.59×10^{-20}	1.07×10^{-7}
NH+	6.40×10^{-9}	2.35×10^4	N ₂ O	1.50×10^{-21}	3.42×10^{-9}
HCO+	3.26×10^{-9}	1.06×10^4	C ₆ H ₅ +	5.24×10^{-22}	1.22×10^{-9}
NO	2.76×10^{-9}	9.90×10^3	C ₄ H ₂ +	3.56×10^{-22}	8.55×10^{-10}
CH ₂	8.36×10^{-10}	6.98×10^3	CH ₄	2.76×10^{-23}	2.21×10^{-10}
C ₂ H +	5.21×10^{-10}	1.54×10^3	N ₂ O+	2.57×10^{-23}	4.40×10^{-11}
H ₂ O	3.83×10^{-10}	2.99×10^3	NO ₂	1.13×10^{-24}	9.32×10^{-12}
H ₃ O +	1.31×10^{-10}	6.52×10^2	CH ₄ +	1.10×10^{-24}	3.95×10^{-12}
HNO +	7.63×10^{-11}	2.29×10^2	C ₆ H ₇ +	9.15×10^{-28}	2.91×10^{-15}
CN	3.14×10^{-11}	8.70×10^1	CN-	4.45×10^{-28}	2.42×10^{-15}
H ₃ +	8.02×10^{-12}	4.66×10^1	C ₂ H ₄ +	2.17×10^{-31}	5.79×10^{-19}
CH ₃ +	5.62×10^{-12}	3.55×10^1	C ₂ N	6.74×10^{-34}	1.31×10^{-21}
N ₂ +	5.05×10^{-12}	1.34×10^1	C ₆ H ₆	9.16×10^{-35}	2.38×10^{-22}
HCN+	2.52×10^{-12}	7.71×10^0	C ₂ H ₃	1.58×10^{-35}	5.00×10^{-23}
N ₂	1.12×10^{-12}	4.08×10^0	C ₆ H ₆ +	1.47×10^{-36}	2.61×10^{-24}
HCO	9.18×10^{-13}	3.98×10^0	C ₃ H ₄ +	1.10×10^{-36}	2.37×10^{-24}
NH ₂ +	8.85×10^{-13}	4.03×10^0	C ₂ H-	6.07×10^{-37}	1.17×10^{-24}
C ₂ H ₂ +	3.06×10^{-14}	1.20×10^{-1}	C ₅ H ₃ +	9.33×10^{-38}	1.63×10^{-25}
HNC	1.97×10^{-14}	7.95×10^{-2}	C ₃ H ₂	4.90×10^{-38}	9.43×10^{-26}
C ₂ N+	1.18×10^{-14}	2.41×10^{-2}	C ₂ H ₄	1.22×10^{-38}	1.15×10^{-25}
NO ₂ +	1.04×10^{-15}	2.10×10^{-3}	C ₃ H ₃	2.15×10^{-39}	3.49×10^{-27}
CO ₂	8.55×10^{-16}	2.20×10^{-3}	CH-	4.23×10^{-40}	7.48×10^{-28}
N ₂ H+	5.18×10^{-16}	2.10×10^{-3}	C ₃ H ₃ +	1.71×10^{-40}	3.87×10^{-28}
CH ₃	3.67×10^{-16}	2.70×10^{-3}			

Tabela B.1.14. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{máxima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; $1000Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm⁻²]
CO+	4.62×10^{-2}	1.06×10^{11}	HCN	5.44×10^{-14}	1.74×10^{-1}
OH+	4.08×10^{-2}	2.85×10^{11}	HNO	1.64×10^{-14}	6.47×10^{-2}
CH+	1.11×10^{-2}	3.99×10^{10}	OCN+	7.78×10^{-15}	9.80×10^{-3}
CO	1.10×10^{-3}	1.89×10^9	CH ₃	3.06×10^{-15}	2.45×10^{-2}
OH	1.00×10^{-3}	8.03×10^9	OCN	2.87×10^{-15}	5.10×10^{-3}
NO+	1.91×10^{-4}	6.40×10^8	CO ₂ +	4.22×10^{-16}	7.58×10^{-4}
CH	1.03×10^{-4}	9.94×10^8	H ₂ CO	3.71×10^{-16}	1.60×10^{-3}
H ₂ O+	1.32×10^{-5}	8.17×10^7	C ₂ H ₂	5.33×10^{-17}	2.28×10^{-4}
CN+	5.68×10^{-6}	1.35×10^7	C ₂ H	2.96×10^{-17}	7.34×10^{-5}
CH ₂ +	8.71×10^{-7}	4.63×10^6	NH ₂	9.51×10^{-18}	6.99×10^{-5}
HCO+	4.35×10^{-7}	1.34×10^6	C ₂ H ₃ +	6.24×10^{-18}	2.43×10^{-5}
NH	3.59×10^{-7}	2.89×10^6	N ₂ O	1.38×10^{-18}	3.22×10^{-6}
NO	2.64×10^{-7}	9.63×10^5	C ₄ H ₂ +	8.08×10^{-19}	1.86×10^{-6}
C ₂ H +	1.79×10^{-7}	5.10×10^5	C ₆ H ₅ +	4.85×10^{-19}	1.15×10^{-6}
CN	9.26×10^{-8}	1.72×10^5	OH-	2.31×10^{-19}	4.62×10^{-6}
NH+	4.86×10^{-8}	1.99×10^5	N ₂ O+	3.64×10^{-20}	6.36×10^{-8}
CH ₂	7.80×10^{-9}	6.75×10^4	NO ₂	1.12×10^{-21}	9.28×10^{-9}
N ₂ +	6.47×10^{-9}	1.19×10^4	CH ₄	2.52×10^{-22}	2.10×10^{-9}
HNO +	6.14×10^{-9}	1.95×10^4	CH ₄ +	1.03×10^{-23}	3.74×10^{-11}
H ₂ +	4.34×10^{-9}	4.56×10^4	C ₆ H ₇ +	8.78×10^{-25}	2.81×10^{-12}
H ₂ O	3.57×10^{-9}	2.89×10^4	CN-	3.30×10^{-25}	1.75×10^{-12}
H ₃ O+	1.26×10^{-9}	6.26×10^3	C ₂ H ₄ +	1.35×10^{-28}	3.41×10^{-16}
HCN+	8.64×10^{-10}	2.57×10^3	C ₂ N	3.56×10^{-29}	5.20×10^{-17}
N ₂	1.95×10^{-10}	5.47×10^2	C ₆ H ₆	8.81×10^{-32}	2.30×10^{-19}
CH ₃ +	1.13×10^{-10}	7.83×10^2	C ₂ H ₃	1.06×10^{-32}	3.84×10^{-20}
HCO	8.58×10^{-11}	3.82×10^2	C ₃ H ₄ +	2.76×10^{-33}	6.05×10^{-21}
C ₂ N+	3.86×10^{-11}	7.53×10^1	C ₆ H ₆ +	1.42×10^{-33}	2.55×10^{-21}
NH ₂ +	1.20×10^{-11}	5.09×10^1	C ₅ H ₃ +	9.04×10^{-34}	1.59×10^{-21}
C ₂ H ₂ +	8.86×10^{-12}	3.26×10^1	C ₃ H ₂	3.75×10^{-34}	7.89×10^{-22}
H ₃ +	4.16×10^{-12}	3.20×10^1	C ₃ H ₃	5.48×10^{-35}	8.84×10^{-23}
HNC	1.80×10^{-12}	7.51×10^0	C ₂ H-	2.89×10^{-35}	6.29×10^{-23}
NO ₂ +	8.92×10^{-13}	1.90×10^0	C ₂ H ₄	1.06×10^{-36}	1.06×10^{-23}
CO ₂	8.70×10^{-13}	2.20×10^0	C ₃ H ₃ +	4.02×10^{-37}	9.02×10^{-25}
N ₂ H+	2.27×10^{-13}	7.02×10^{-1}	CH-	1.28×10^{-37}	2.65×10^{-25}
CNC+	1.05×10^{-13}	1.27×10^{-1}			

Tabela B.1.15. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_2_{inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2_{final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^4$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	5.28×10^{-5}	3.26×10^8	OH-	3.09×10^{-21}	3.01×10^{-8}
OH	1.21×10^{-6}	8.62×10^6	CO ₂	1.42×10^{-21}	3.22×10^{-9}
CH+	2.48×10^{-7}	1.64×10^6	NO ₂ +	1.06×10^{-21}	2.18×10^{-9}
CH	1.73×10^{-7}	1.27×10^6	H ₂ CO	7.19×10^{-22}	2.43×10^{-9}
CO+	4.82×10^{-8}	1.09×10^5	C ₂ H ₂	9.67×10^{-23}	3.40×10^{-10}
H ₂ O+	1.68×10^{-8}	9.42×10^4	NH ₂	1.34×10^{-23}	8.38×10^{-11}
H ₂ +	1.20×10^{-8}	7.52×10^4	C ₂ H	4.34×10^{-24}	1.03×10^{-11}
NH	4.30×10^{-10}	3.13×10^3	CNC+	2.20×10^{-24}	4.13×10^{-12}
NO+	2.19×10^{-10}	7.03×10^2	C ₂ H ₃ +	2.16×10^{-24}	9.06×10^{-12}
CH ₂ +	1.40×10^{-10}	8.13×10^2	OCN	1.16×10^{-24}	2.67×10^{-12}
CO	2.84×10^{-11}	7.43×10^1	CH ₄	3.60×10^{-25}	2.53×10^{-12}
NH+	1.82×10^{-11}	6.16×10^1	OCN+	9.41×10^{-26}	1.39×10^{-13}
CH ₂	1.30×10^{-11}	8.79×10^1	CO ₂ +	8.37×10^{-26}	1.42×10^{-13}
H ₃ +	8.80×10^{-12}	4.94×10^1	CH ₄ +	1.31×10^{-26}	4.46×10^{-14}
H ₂ O	4.75×10^{-12}	3.32×10^1	N ₂ O	2.06×10^{-27}	4.35×10^{-15}
H ₃ O+	1.32×10^{-12}	6.56×10^0	C ₆ H ₅ +	7.33×10^{-28}	1.59×10^{-15}
HCO+	3.29×10^{-13}	1.05×10^0	C ₄ H ₂ +	3.08×10^{-28}	7.48×10^{-16}
NO	3.18×10^{-13}	1.09×10^0	N ₂ O+	2.59×10^{-29}	4.22×10^{-17}
CN+	3.04×10^{-13}	1.03×10^0	NO ₂	1.70×10^{-30}	1.15×10^{-17}
CH ₃ +	8.76×10^{-14}	4.16×10^{-1}	CN-	7.68×10^{-33}	3.73×10^{-20}
C ₂ H+	3.41×10^{-14}	1.07×10^{-1}	C ₆ H ₇ +	1.12×10^{-33}	3.42×10^{-21}
HNO+	7.82×10^{-15}	2.33×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	7.01×10^{-36}	2.31×10^{-23}
NH ₂ +	2.00×10^{-15}	9.00×10^{-3}	C ₆ H ₆	1.08×10^{-40}	2.72×10^{-28}
CN	1.18×10^{-15}	4.60×10^{-3}	C ₂ H ₃	5.45×10^{-41}	1.77×10^{-28}
N ₂ +	2.36×10^{-16}	7.29×10^{-4}	C ₂ N	1.98×10^{-41}	3.76×10^{-29}
HCO	1.87×10^{-16}	6.38×10^{-4}	C ₂ H-	1.11×10^{-41}	2.00×10^{-29}
HCN+	1.60×10^{-16}	5.22×10^{-4}	C ₂ H ₄	2.82×10^{-42}	1.78×10^{-29}
N ₂	1.18×10^{-16}	4.22×10^{-4}	C ₃ H ₄ +	9.42×10^{-43}	2.03×10^{-30}
CH ₃	4.25×10^{-18}	2.92×10^{-5}	C ₆ H ₆ +	1.70×10^{-43}	2.97×10^{-31}
HNC	3.10×10^{-18}	1.08×10^{-5}	C ₃ H ₂	1.60×10^{-45}	3.45×10^{-33}
C ₂ H ₂ +	2.33×10^{-18}	9.45×10^{-6}	C ₅ H ₃ +	9.88×10^{-46}	1.72×10^{-33}
HCN	4.44×10^{-20}	1.18×10^{-7}	CH-	1.73×10^{-46}	2.65×10^{-34}
N ₂ H+	3.42×10^{-20}	1.50×10^{-7}	C ₃ H ₃ +	1.49×10^{-46}	3.37×10^{-34}
HNO	2.16×10^{-20}	7.72×10^{-8}	C ₃ H ₃	1.89×10^{-47}	3.22×10^{-35}
C ₂ N+	8.26×10^{-21}	1.76×10^{-8}			

Tabela B.1.16. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^6$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	5.23×10^{-5}	3.24×10^8	NO ₂ +	1.06×10^{-21}	2.18×10^{-9}
OH	3.94×10^{-7}	5.19×10^6	OH-	5.35×10^{-23}	1.18×10^{-9}
CH+	1.84×10^{-7}	1.52×10^6	C ₂ H	3.69×10^{-23}	1.38×10^{-10}
CO+	3.63×10^{-8}	8.82×10^4	CO ₂	2.10×10^{-23}	1.44×10^{-10}
H ₂ O+	1.68×10^{-8}	9.40×10^4	H ₂ CO	1.03×10^{-23}	1.55×10^{-10}
CH	8.31×10^{-9}	2.47×10^5	C ₂ H ₂	2.49×10^{-24}	3.03×10^{-11}
H ₂ +	3.78×10^{-9}	4.33×10^4	C ₂ H ₃ +	2.09×10^{-24}	8.87×10^{-12}
NH+	2.77×10^{-10}	1.29×10^3	OCN+	1.52×10^{-24}	2.63×10^{-12}
NO+	2.18×10^{-10}	7.01×10^2	NH ₂	1.19×10^{-24}	2.28×10^{-11}
NH	1.10×10^{-10}	1.72×10^3	CNC+	6.78×10^{-25}	1.77×10^{-12}
CH ₂ +	1.06×10^{-10}	7.30×10^2	OCN	7.44×10^{-26}	3.13×10^{-13}
CO	2.37×10^{-11}	6.52×10^1	CH ₄	3.45×10^{-26}	7.49×10^{-13}
H ₃ +	7.19×10^{-12}	4.22×10^1	CO ₂ +	3.74×10^{-27}	1.09×10^{-14}
H ₃ O+	1.32×10^{-12}	6.55×10^0	CH ₄ +	3.07×10^{-27}	1.68×10^{-14}
H ₂ O	6.38×10^{-13}	1.27×10^1	C ₄ H ₂ +	2.46×10^{-28}	6.28×10^{-16}
CH ₂	5.96×10^{-13}	1.42×10^1	N ₂ O	7.63×10^{-29}	4.19×10^{-16}
HCO+	2.46×10^{-13}	8.56×10^{-1}	C ₆ H ₅ +	5.75×10^{-29}	2.01×10^{-16}
CN+	2.36×10^{-13}	8.74×10^{-1}	N ₂ O+	7.87×10^{-30}	2.05×10^{-17}
NO	7.30×10^{-14}	4.29×10^{-1}	NO ₂	1.02×10^{-31}	2.18×10^{-18}
NH ₂ +	5.76×10^{-14}	2.83×10^{-1}	C ₆ H ₇ +	2.27×10^{-34}	8.75×10^{-22}
C ₂ H+	2.59×10^{-14}	8.98×10^{-2}	CN-	3.60×10^{-36}	5.36×10^{-23}
HNO+	7.80×10^{-15}	2.32×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	1.95×10^{-36}	9.24×10^{-24}
CH ₃ +	2.63×10^{-15}	4.74×10^{-2}	C ₆ H ₆	2.53×10^{-41}	8.04×10^{-29}
N ₂ +	1.37×10^{-15}	3.80×10^{-3}	C ₂ H-	3.15×10^{-41}	9.71×10^{-29}
CN	9.13×10^{-16}	3.90×10^{-3}	C ₆ H ₆ +	4.46×10^{-42}	9.20×10^{-30}
HCN+	1.44×10^{-16}	4.96×10^{-4}	C ₂ H ₃	2.85×10^{-43}	1.98×10^{-30}
N ₂	5.56×10^{-17}	2.58×10^{-4}	C ₃ H ₄ +	1.40×10^{-43}	4.68×10^{-31}
C ₂ H ₂ +	2.13×10^{-18}	8.90×10^{-6}	C ₂ N	1.33×10^{-43}	4.54×10^{-31}
HCO	1.12×10^{-18}	1.97×10^{-5}	C ₂ H ₄	6.19×10^{-44}	1.06×10^{-30}
CH ₃	1.10×10^{-18}	1.34×10^{-5}	C ₅ H ₃ +	5.22×10^{-46}	9.71×10^{-34}
N ₂ H+	1.54×10^{-19}	5.76×10^{-7}	C ₃ H ₃ +	4.13×10^{-47}	1.21×10^{-34}
HNC	4.99×10^{-20}	7.60×10^{-7}	CH-	3.53×10^{-47}	1.07×10^{-34}
C ₂ N+	6.79×10^{-21}	1.53×10^{-8}	C ₃ H ₂	3.00×10^{-47}	7.97×10^{-35}
HCN	3.31×10^{-21}	2.22×10^{-8}	C ₃ H ₃	4.31×10^{-48}	9.34×10^{-36}
HNO	1.63×10^{-21}	1.66×10^{-8}			

Tabela B.1.17. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 0.1$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	5.18×10^{-5}	3.23×10^8	NO ₂ +	1.06×10^{-21}	2.17×10^{-9}
OH	5.38×10^{-7}	5.91×10^6	OH-	4.72×10^{-22}	8.87×10^{-9}
CH+	1.95×10^{-7}	1.67×10^6	CO ₂	7.80×10^{-23}	4.04×10^{-10}
CO+	2.99×10^{-8}	7.63×10^4	C ₂ H	3.67×10^{-23}	1.34×10^{-10}
H ₂ O+	1.67×10^{-8}	9.39×10^4	H ₂ CO	3.15×10^{-23}	3.27×10^{-10}
CH	1.26×10^{-8}	3.52×10^5	C ₂ H ₂	3.26×10^{-24}	3.77×10^{-11}
H ₂ +	4.40×10^{-9}	4.63×10^4	C ₂ H ₃ +	2.12×10^{-24}	9.01×10^{-12}
NH+	2.75×10^{-10}	1.18×10^3	NH ₂	2.12×10^{-24}	3.30×10^{-11}
NO+	2.17×10^{-10}	6.99×10^2	OCN+	1.30×10^{-24}	2.23×10^{-12}
NH	1.47×10^{-10}	1.93×10^3	CNC+	9.89×10^{-25}	2.46×10^{-12}
CH ₂ +	1.26×10^{-10}	8.25×10^2	OCN	1.20×10^{-25}	4.75×10^{-13}
CO	2.10×10^{-11}	5.96×10^1	CH ₄	3.51×10^{-26}	7.66×10^{-13}
H ₃ +	7.37×10^{-12}	4.30×10^1	CO ₂ +	1.05×10^{-26}	2.67×10^{-14}
H ₃ O +	1.32×10^{-12}	6.55×10^0	CH ₄ +	3.63×10^{-27}	2.05×10^{-14}
CH ₂	9.56×10^{-13}	2.12×10^1	C ₄ H ₂ +	2.07×10^{-28}	5.50×10^{-16}
H ₂ O	9.33×10^{-13}	1.58×10^1	N ₂ O	1.36×10^{-28}	6.08×10^{-16}
CN+	2.68×10^{-13}	9.85×10^{-1}	C ₆ H ₅ +	6.97×10^{-29}	2.39×10^{-16}
HCO+	2.32×10^{-13}	8.20×10^{-1}	N ₂ O+	2.99×10^{-29}	7.19×10^{-17}
NO	1.02×10^{-13}	5.25×10^{-1}	NO ₂	1.51×10^{-31}	3.14×10^{-18}
NH ₂ +	4.93×10^{-14}	2.38×10^{-1}	C ₆ H ₇ +	2.63×10^{-34}	1.00×10^{-21}
C ₂ H+	2.50×10^{-14}	8.87×10^{-2}	CN-	4.36×10^{-35}	5.01×10^{-22}
HNO+	7.79×10^{-15}	2.32×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	2.21×10^{-36}	1.05×10^{-23}
CH ₃ +	7.36×10^{-15}	1.08×10^{-1}	C ₂ H-	4.59×10^{-41}	1.32×10^{-28}
N ₂ +	1.28×10^{-15}	3.47×10^{-3}	C ₆ H ₆	3.05×10^{-41}	9.38×10^{-29}
CN	7.23×10^{-16}	3.41×10^{-3}	C ₂ H ₃	5.35×10^{-42}	2.41×10^{-29}
HCN+	1.62×10^{-16}	5.47×10^{-4}	C ₆ H ₆ +	3.89×10^{-42}	7.83×10^{-30}
N ₂	4.56×10^{-17}	2.30×10^{-4}	C ₂ N	2.43×10^{-42}	6.29×10^{-30}
HCO	6.44×10^{-18}	7.93×10^{-5}	C ₃ H ₄ +	1.41×10^{-43}	4.80×10^{-31}
C ₂ H ₂ +	2.14×10^{-18}	8.98×10^{-6}	C ₂ H ₄	1.04×10^{-43}	1.30×10^{-30}
CH ₃	1.55×10^{-18}	1.62×10^{-5}	C ₅ H ₃ +	8.18×10^{-46}	1.47×10^{-33}
N ₂ H+	1.36×10^{-19}	5.06×10^{-7}	C ₃ H ₂	5.10×10^{-46}	1.07×10^{-33}
HNC	1.28×10^{-19}	1.52×10^{-6}	CH-	1.26×10^{-46}	3.49×10^{-34}
HNO	7.42×10^{-21}	3.83×10^{-8}	C ₃ H ₃ +	4.27×10^{-47}	1.26×10^{-34}
C ₂ N+	6.74×10^{-21}	1.53×10^{-8}	C ₃ H ₃	4.45×10^{-48}	9.85×10^{-36}
HCN	3.94×10^{-21}	2.48×10^{-8}			

Tabela B.1.18. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{máxima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 0.5$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm⁻²]
OH+	5.25×10^{-5}	3.25×10^8	NO ₂ +	1.06×10^{-21}	2.18×10^{-9}
OH	8.71×10^{-7}	7.35×10^6	OH-	6.97×10^{-22}	1.21×10^{-8}
CH+	2.44×10^{-7}	1.69×10^6	CO ₂	3.90×10^{-22}	1.23×10^{-9}
CH	4.31×10^{-8}	6.88×10^5	H ₂ CO	1.67×10^{-22}	9.30×10^{-10}
CO+	4.22×10^{-8}	9.86×10^4	C ₂ H	4.91×10^{-23}	1.41×10^{-10}
H ₂ O+	1.68×10^{-8}	9.41×10^4	C ₂ H ₂	2.17×10^{-23}	1.26×10^{-10}
H ₂ +	8.21×10^{-9}	6.19×10^4	NH ₂	6.10×10^{-24}	5.53×10^{-11}
NH	2.83×10^{-10}	2.56×10^3	C ₂ H ₃ +	2.15×10^{-24}	9.05×10^{-12}
NO+	2.18×10^{-10}	7.02×10^2	CNC+	1.53×10^{-24}	3.23×10^{-12}
NH+	1.57×10^{-10}	6.05×10^2	OCN+	8.21×10^{-25}	1.30×10^{-12}
CH ₂ +	1.36×10^{-10}	8.19×10^2	OCN	3.97×10^{-25}	1.19×10^{-12}
CO	2.61×10^{-11}	6.98×10^1	CH ₄	1.32×10^{-25}	1.56×10^{-12}
H ₃ +	8.20×10^{-12}	4.68×10^1	CO ₂ +	3.20×10^{-26}	6.52×10^{-14}
CH ₂	3.29×10^{-12}	4.51×10^1	CH ₄ +	7.76×10^{-27}	3.17×10^{-14}
H ₂ O	2.42×10^{-12}	2.40×10^1	N ₂ O	7.15×10^{-28}	1.96×10^{-15}
H ₃ O+	1.32×10^{-12}	6.56×10^0	C ₄ H ₂ +	2.77×10^{-28}	6.89×10^{-16}
CN+	2.85×10^{-13}	9.93×10^{-1}	C ₆ H ₅ +	2.57×10^{-28}	6.94×10^{-16}
HCO+	2.84×10^{-13}	9.56×10^{-1}	N ₂ O+	2.93×10^{-29}	5.56×10^{-17}
NO	2.03×10^{-13}	8.08×10^{-1}	NO ₂	4.66×10^{-31}	6.23×10^{-18}
C ₂ H+	3.13×10^{-14}	1.02×10^{-1}	C ₆ H ₇ +	5.96×10^{-34}	2.03×10^{-21}
NH ₂ +	2.27×10^{-14}	1.07×10^{-1}	CN-	1.91×10^{-34}	1.33×10^{-21}
CH ₃ +	1.84×10^{-14}	1.88×10^{-1}	C ₂ H ₄ +	4.39×10^{-36}	1.68×10^{-23}
HNO+	7.81×10^{-15}	2.32×10^{-2}	C ₂ H-	8.84×10^{-41}	1.95×10^{-28}
CN	1.04×10^{-15}	4.28×10^{-3}	C ₆ H ₆	6.37×10^{-41}	1.75×10^{-28}
N ₂ +	7.40×10^{-16}	1.99×10^{-3}	C ₂ H ₃	1.04×10^{-41}	3.78×10^{-29}
HCN+	1.60×10^{-16}	5.29×10^{-4}	C ₂ N	4.43×10^{-42}	9.60×10^{-30}
N ₂	8.78×10^{-17}	3.45×10^{-4}	C ₆ H ₆ +	3.18×10^{-42}	5.91×10^{-30}
HCO	3.43×10^{-17}	2.16×10^{-4}	C ₃ H ₄ +	4.60×10^{-43}	1.17×10^{-30}
CH ₃	2.83×10^{-18}	2.29×10^{-5}	C ₂ H ₄	3.43×10^{-43}	5.45×10^{-30}
C ₂ H ₂ +	2.28×10^{-18}	9.34×10^{-6}	C ₅ H ₃ +	9.17×10^{-46}	1.60×10^{-33}
HNC	7.88×10^{-19}	4.44×10^{-6}	C ₃ H ₂	4.87×10^{-46}	9.70×10^{-34}
N ₂ H+	7.83×10^{-20}	3.02×10^{-7}	CH-	3.96×10^{-46}	8.24×10^{-34}
HCN	1.54×10^{-20}	5.88×10^{-8}	C ₃ H ₃ +	9.19×10^{-47}	2.32×10^{-34}
HNO	1.27×10^{-20}	5.43×10^{-8}	C ₃ H ₃	1.08×10^{-47}	2.04×10^{-35}
C ₂ N+	7.79×10^{-21}	1.69×10^{-8}			

Tabela B.1.19. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.5$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	5.28×10^{-5}	3.26×10^8	OH-	1.52×10^{-21}	2.05×10^{-8}
OH	1.18×10^{-6}	8.51×10^6	CO ₂	1.15×10^{-21}	2.76×10^{-9}
CH+	2.48×10^{-7}	1.64×10^6	NO ₂ +	1.06×10^{-21}	2.18×10^{-9}
CH	1.49×10^{-7}	1.18×10^6	H ₂ CO	6.19×10^{-22}	2.20×10^{-9}
CO+	4.80×10^{-8}	1.09×10^5	C ₂ H ₂	8.63×10^{-23}	3.14×10^{-10}
H ₂ O+	1.68×10^{-8}	9.42×10^4	NH ₂	1.25×10^{-23}	8.06×10^{-11}
H ₂ +	1.18×10^{-8}	7.42×10^4	C ₂ H	1.24×10^{-23}	2.90×10^{-11}
NH	4.17×10^{-10}	3.08×10^3	C ₂ H ₃ +	2.16×10^{-24}	9.06×10^{-12}
NO+	2.19×10^{-10}	7.02×10^2	CNC+	2.10×10^{-24}	3.99×10^{-12}
CH ₂ +	1.39×10^{-10}	8.12×10^2	OCN	1.03×10^{-24}	2.44×10^{-12}
NH+	3.04×10^{-11}	1.06×10^2	CH ₄	3.42×10^{-25}	2.46×10^{-12}
CO	2.84×10^{-11}	7.42×10^1	OCN+	1.59×10^{-25}	2.39×10^{-13}
CH ₂	1.16×10^{-11}	8.25×10^1	CO ₂ +	7.17×10^{-26}	1.25×10^{-13}
H ₃ +	8.76×10^{-12}	4.92×10^1	CH ₄ +	1.27×10^{-26}	4.36×10^{-14}
H ₂ O	4.51×10^{-12}	3.24×10^1	N ₂ O	1.91×10^{-27}	4.11×10^{-15}
H ₃ O+	1.32×10^{-12}	6.56×10^0	C ₆ H ₅ +	6.76×10^{-28}	1.49×10^{-15}
HCO+	3.24×10^{-13}	1.04×10^0	C ₄ H ₂ +	3.07×10^{-28}	7.46×10^{-16}
NO	3.07×10^{-13}	1.06×10^0	N ₂ O+	2.47×10^{-29}	4.07×10^{-17}
CN+	3.00×10^{-13}	1.02×10^0	NO ₂	1.52×10^{-30}	1.08×10^{-17}
CH ₃ +	6.98×10^{-14}	3.66×10^{-1}	C ₆ H ₇ +	1.06×10^{-33}	3.29×10^{-21}
C ₂ H+	3.40×10^{-14}	1.07×10^{-1}	CN-	8.13×10^{-34}	3.92×10^{-21}
HNO+	7.82×10^{-15}	2.33×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	6.81×10^{-36}	2.26×10^{-23}
NH ₂ +	3.58×10^{-15}	1.63×10^{-2}	C ₆ H ₆	1.04×10^{-40}	2.64×10^{-28}
CN	1.18×10^{-15}	4.64×10^{-3}	C ₂ H-	2.99×10^{-41}	5.30×10^{-29}
N ₂ +	2.77×10^{-16}	8.28×10^{-4}	C ₂ H ₃	2.25×10^{-41}	6.61×10^{-29}
HCN+	1.59×10^{-16}	5.21×10^{-4}	C ₂ N	8.95×10^{-42}	1.66×10^{-29}
HCO	1.39×10^{-16}	5.23×10^{-4}	C ₂ H ₄	2.25×10^{-42}	1.57×10^{-29}
N ₂	1.16×10^{-16}	4.18×10^{-4}	C ₃ H ₄ +	9.06×10^{-43}	1.97×10^{-30}
CH ₃	4.11×10^{-18}	2.86×10^{-5}	C ₆ H ₆ +	5.47×10^{-43}	9.58×10^{-31}
HNC	2.74×10^{-18}	9.89×10^{-6}	C ₅ H ₃ +	9.64×10^{-46}	1.68×10^{-33}
C ₂ H ₂ +	2.32×10^{-18}	9.44×10^{-6}	C ₃ H ₂	6.04×10^{-46}	1.15×10^{-33}
HCN	4.09×10^{-20}	1.12×10^{-7}	CH-	3.17×10^{-46}	4.98×10^{-34}
N ₂ H+	3.75×10^{-20}	1.61×10^{-7}	C ₃ H ₃ +	1.45×10^{-46}	3.30×10^{-34}
HNO	1.92×10^{-20}	7.14×10^{-8}	C ₃ H ₃	1.83×10^{-47}	3.14×10^{-35}
C ₂ N+	8.23×10^{-21}	1.76×10^{-8}			

Tabela B.1.20. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 2.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	5.28×10^{-5}	3.26×10^8	OH-	1.98×10^{-21}	2.38×10^{-8}
OH	1.21×10^{-6}	8.61×10^6	CO ₂	1.32×10^{-21}	3.04×10^{-9}
CH+	2.48×10^{-7}	1.64×10^6	NO ₂ +	1.06×10^{-21}	2.18×10^{-9}
CH	1.68×10^{-7}	1.25×10^6	H ₂ CO	7.05×10^{-22}	2.40×10^{-9}
CO+	4.82×10^{-8}	1.09×10^5	C ₂ H ₂	9.68×10^{-23}	3.40×10^{-10}
H ₂ O+	1.68×10^{-8}	9.42×10^4	NH ₂	1.33×10^{-23}	8.35×10^{-11}
H ₂ +	1.21×10^{-8}	7.52×10^4	C ₂ H	4.25×10^{-24}	9.83×10^{-12}
NH	4.30×10^{-10}	3.13×10^3	CNC+	2.19×10^{-24}	4.10×10^{-12}
NO+	2.19×10^{-10}	7.03×10^2	C ₂ H ₃ +	2.16×10^{-24}	9.06×10^{-12}
CH ₂ +	1.40×10^{-10}	8.12×10^2	OCN	1.14×10^{-24}	2.63×10^{-12}
CO	2.84×10^{-11}	7.44×10^1	CH ₄	3.63×10^{-25}	2.54×10^{-12}
NH+	1.82×10^{-11}	6.16×10^1	OCN+	9.42×10^{-26}	1.39×10^{-13}
CH ₂	1.29×10^{-11}	8.74×10^1	CO ₂ +	7.92×10^{-26}	1.36×10^{-13}
H ₃ +	8.81×10^{-12}	4.94×10^1	CH ₄ +	1.32×10^{-26}	4.47×10^{-14}
H ₂ O	4.74×10^{-12}	3.32×10^1	N ₂ O	2.06×10^{-27}	4.35×10^{-15}
H ₃ O+	1.32×10^{-12}	6.56×10^0	C ₆ H ₅ +	7.33×10^{-28}	1.59×10^{-15}
HCO+	3.28×10^{-13}	1.05×10^0	C ₄ H ₂ +	3.08×10^{-28}	7.48×10^{-16}
NO	3.17×10^{-13}	1.09×10^0	N ₂ O+	2.54×10^{-29}	4.15×10^{-17}
CN+	3.03×10^{-13}	1.02×10^0	NO ₂	1.68×10^{-30}	1.14×10^{-17}
CH ₃ +	8.30×10^{-14}	4.03×10^{-1}	CN-	1.13×10^{-33}	5.32×10^{-21}
C ₂ H+	3.41×10^{-14}	1.07×10^{-1}	C ₆ H ₇ +	1.11×10^{-33}	3.42×10^{-21}
HNO+	7.82×10^{-15}	2.00×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	7.02×10^{-36}	2.31×10^{-23}
NH ₂ +	2.00×10^{-15}	9.00×10^{-3}	C ₆ H ₆	1.08×10^{-40}	2.72×10^{-28}
CN	1.18×10^{-15}	4.70×10^{-3}	C ₂ H ₃	2.69×10^{-41}	7.65×10^{-29}
N ₂ +	2.36×10^{-16}	7.29×10^{-4}	C ₂ N	1.08×10^{-41}	1.94×10^{-29}
HCO	1.67×10^{-16}	5.92×10^{-4}	C ₂ H-	1.05×10^{-41}	1.86×10^{-29}
HCN+	1.59×10^{-16}	5.22×10^{-4}	C ₂ H ₄	2.77×10^{-42}	1.76×10^{-29}
N ₂	1.18×10^{-16}	4.22×10^{-4}	C ₃ H ₄ +	9.46×10^{-43}	2.04×10^{-30}
CH ₃	4.24×10^{-18}	2.92×10^{-5}	C ₆ H ₆ +	1.88×10^{-43}	3.29×10^{-31}
HNC	3.06×10^{-18}	1.07×10^{-5}	C ₅ H ₃ +	9.81×10^{-46}	1.71×10^{-33}
C ₂ H ₂ +	2.33×10^{-18}	9.45×10^{-6}	C ₃ H ₂	6.89×10^{-46}	1.30×10^{-33}
HCN	4.43×10^{-20}	1.18×10^{-7}	C ₃ H ₃ +	1.49×10^{-46}	3.38×10^{-34}
N ₂ H+	3.42×10^{-20}	1.50×10^{-7}	CH-	1.42×10^{-46}	2.15×10^{-34}
HNO	2.02×10^{-20}	7.38×10^{-8}	C ₃ H ₃	1.89×10^{-47}	3.23×10^{-35}
C ₂ N+	8.26×10^{-21}	1.76×10^{-8}			

Tabela B.1.21. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N , sem levar em consideração a derivada do perfil de velocidade e densidade numérica do H I na equação de continuidade. Parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $v_i = v_f = 55 \text{ km s}^{-1}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	$N [\text{cm}^{-2}]$	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	$N [\text{cm}^{-2}]$
OH+	8.78×10^{-7}	2.41×10^7	C ₂ N+	7.31×10^{-25}	7.96×10^{-12}
OH	2.05×10^{-8}	7.99×10^5	H ₂ CO	5.83×10^{-25}	1.18×10^{-11}
CH+	3.96×10^{-9}	1.41×10^5	CO ₂	1.11×10^{-25}	1.57×10^{-12}
CH	2.93×10^{-9}	1.15×10^5	C ₂ H ₂	8.34×10^{-26}	1.82×10^{-12}
H ₂ O+	2.83×10^{-10}	5.63×10^3	NO ₂ +	8.00×10^{-26}	8.05×10^{-13}
H ₂ +	1.87×10^{-10}	5.46×10^3	NH ₂	6.59×10^{-26}	2.06×10^{-12}
CO+	3.29×10^{-11}	3.60×10^2	C ₂ H	6.11×10^{-26}	4.08×10^{-13}
NH	7.43×10^{-12}	3.12×10^2	C ₂ H ₃ +	1.02×10^{-26}	1.24×10^{-13}
CH ₂ +	2.32×10^{-12}	518×10^1	CH ₄	6.21×10^{-27}	1.86×10^{-13}
NH+	9.50×10^{-13}	9.32×10^0	CNC+	2.44×10^{-28}	3.04×10^{-15}
NO+	2.73×10^{-13}	4.57×10^0	OCN	1.42×10^{-28}	2.05×10^{-15}
CH ₂	1.96×10^{-13}	5.98×10^0	OCN+	2.44×10^{-29}	1.35×10^{-16}
H ₃ +	1.46×10^{-13}	2.93×10^0	CH ₄ +	1.77×10^{-29}	2.80×10^{-16}
H ₂ O	8.09×10^{-14}	2.57×10^0	CO ₂ +	6.88×10^{-31}	6.79×10^{-18}
CO	4.99×10^{-14}	5.65×10^{-1}	N ₂ O	1.66×10^{-31}	2.34×10^{-18}
H ₃ O+	2.22×10^{-14}	3.26×10^{-1}	C ₆ H ₅ +	5.43×10^{-32}	5.91×10^{-19}
CH ₃ +	6.92×10^{-16}	1.45×10^{-2}	C ₄ H ₂ +	7.21×10^{-32}	6.30×10^{-19}
HCO+	6.41×10^{-16}	8.41×10^{-3}	NO ₂	5.61×10^{-33}	1.74×10^{-19}
CN+	4.30×10^{-16}	8.31×10^{-3}	N ₂ O+	1.27×10^{-33}	7.66×10^{-21}
NO	4.08×10^{-16}	8.93×10^{-3}	C ₆ H ₇ +	3.57×10^{-37}	3.78×10^{-24}
NH ₂ +	1.27×10^{-16}	1.68×10^{-3}	CN-	5.02×10^{-37}	1.33×10^{-23}
C ₂ H+	3.81×10^{-17}	5.61×10^{-4}	C ₂ H ₄ +	7.90×10^{-39}	1.20×10^{-25}
HNO+	7.88×10^{-18}	1.03×10^{-4}	C ₂ H-	2.09×10^{-43}	7.26×10^{-31}
CN	3.12×10^{-18}	7.36×10^{-5}	C ₆ H ₆	5.91×10^{-44}	4.06×10^{-31}
N ₂ +	4.20×10^{-19}	7.14×10^{-6}	C ₂ H ₃	9.18×10^{-45}	1.22×10^{-31}
HCN+	2.46×10^{-19}	3.70×10^{-6}	C ₂ H ₄	8.87×10^{-45}	2.11×10^{-31}
N ₂	1.94×10^{-19}	4.32×10^{-6}	C ₆ H ₆ +	1.22×10^{-45}	4.18×10^{-33}
HCO	1.36×10^{-19}	3.08×10^{-6}	C ₂ N	2.97×10^{-46}	4.64×10^{-33}
CH ₃	7.24×10^{-20}	2.17×10^{-6}	C ₃ H ₄ +	7.49×10^{-47}	7.74×10^{-34}
C ₂ H ₂ +	6.95×10^{-21}	9.54×10^{-8}	CH-	3.73×10^{-50}	2.10×10^{-37}
HNC	2.90×10^{-21}	6.23×10^{-8}	C ₃ H ₃ +	3.38×10^{-50}	2.67×10^{-37}
N ₂ H+	1.74×10^{-22}	2.92×10^{-9}	C ₅ H ₃ +	2.64×10^{-50}	1.49×10^{-37}
OH-	7.29×10^{-23}	1.89×10^{-9}	C ₃ H ₂	1.96×10^{-50}	1.67×10^{-37}
HCN	4.06×10^{-23}	8.86×10^{-10}	C ₃ H ₃	3.89×10^{-52}	6.53×10^{-39}
HNO	2.71×10^{-23}	6.12×10^{-10}			

B.2. Resultados HD 209458b

Tabela B.2.1. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N , com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm^{-2}]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm^{-2}]
OH+	4.32×10^{-6}	3.48×10^8	C ₂ H ₃ +	8.39×10^{-28}	6.41×10^{-15}
H ₂ O+	9.40×10^{-9}	2.48×10^5	CNC+	1.97×10^{-29}	1.42×10^{-16}
CH+	3.80×10^{-10}	3.62×10^4	HNC	1.94×10^{-29}	1.15×10^{-16}
OH	5.98×10^{-11}	4.63×10^3	HNO	4.00×10^{-30}	1.30×10^{-16}
NO+	5.05×10^{-11}	3.65×10^2	OCN+	7.65×10^{-31}	6.94×10^{-18}
H ₂ +	3.27×10^{-11}	4.38×10^3	NH ₂	2.15×10^{-32}	6.35×10^{-19}
H ₃ O+	9.14×10^{-12}	7.07×10^1	C ₂ H	2.84×10^{-33}	6.87×10^{-14}
H ₃ +	4.97×10^{-12}	4.51×10^1	CH ₄	1.16×10^{-34}	8.66×10^{-22}
CH	1.09×10^{-12}	6.19×10^0	H ₂ CO	4.70×10^{-35}	3.42×10^{-22}
NH+	1.55×10^{-13}	9.06×10^0	OCN	3.79×10^{-35}	3.48×10^{-21}
NH	3.71×10^{-14}	1.97×10^0	CO ₂	2.67×10^{-35}	1.91×10^{-21}
CH ₂ +	1.51×10^{-14}	8.95×10^{-1}	C ₂ H ₂	9.01×10^{-36}	3.62×10^{-22}
CO+	1.47×10^{-14}	2.41×10^{-1}	CH ₄ +	6.73×10^{-37}	6.87×10^{-24}
NH ₂ +	1.01×10^{-14}	9.22×10^{-2}	CO ₂ +	5.69×10^{-37}	5.12×10^{-24}
HNO+	3.87×10^{-15}	2.40×10^{-2}	C ₄ H ₂ +	7.59×10^{-38}	7.07×10^{-25}
CN+	1.61×10^{-15}	1.35×10^{-2}	N ₂ O+	1.18×10^{-38}	1.09×10^{-25}
N ₂ +	4.08×10^{-16}	2.43×10^{-3}	N ₂ O	4.84×10^{-41}	1.58×10^{-27}
CO	1.07×10^{-16}	5.94×10^{-3}	NO ₂	1.69×10^{-41}	4.99×10^{-28}
H ₂ O	5.37×10^{-18}	2.42×10^{-4}	C ₆ H ₅ +	2.65×10^{-42}	1.81×10^{-29}
HCN+	1.20×10^{-18}	9.39×10^{-6}	CN-	1.57×10^{-43}	1.59×10^{-29}
HCO+	9.34×10^{-19}	7.90×10^{-5}	C ₂ H ₄ +	1.92×10^{-46}	1.83×10^{-33}
CH ₂	6.44×10^{-19}	3.70×10^{-6}	C ₆ H ₇ +	4.93×10^{-47}	3.52×10^{-34}
N ₂ H+	2.22×10^{-19}	1.60×10^{-6}	C ₂ H ₃	5.34×10^{-50}	5.26×10^{-36}
C ₂ H+	1.01×10^{-19}	9.48×10^{-7}	C ₂ H-	2.10×10^{-50}	4.70×10^{-37}
CH ₃ +	3.36×10^{-20}	1.50×10^{-6}	C ₂ N	2.30×10^{-51}	2.22×10^{-37}
CN	3.89×10^{-21}	4.71×10^{-7}	C ₃ H ₂	6.99×10^{-53}	5.55×10^{-40}
NO	3.46×10^{-21}	2.63×10^{-7}	C ₆ H ₆ +	2.12×10^{-53}	1.23×10^{-39}
C ₂ H ₂ +	1.36×10^{-22}	1.12×10^{-9}	C ₆ H ₆	2.10×10^{-53}	1.23×10^{-39}
NO ₂ +	6.18×10^{-23}	2.53×10^{-10}	C ₅ H ₃ +	5.59×10^{-57}	3.79×10^{-44}
N ₂	1.76×10^{-23}	1.03×10^{-9}	C ₃ H ₄ +	3.36×10^{-58}	3.41×10^{-45}
OH-	1.90×10^{-25}	1.17×10^{-11}	CH-	7.53×10^{-59}	8.42×10^{-47}
CH ₃	2.03×10^{-26}	1.52×10^{-13}	C ₂ H ₄	1.83×10^{-59}	8.93×10^{-47}
C ₂ N+	1.23×10^{-26}	6.87×10^{-14}	C ₃ H ₃ +	1.11×10^{-60}	9.60×10^{-48}
HCN	1.20×10^{-26}	1.13×10^{-12}	C ₃ H ₃	2.57×10^{-63}	1.47×10^{-50}
HCO	9.52×10^{-27}	5.11×10^{-14}			

Tabela B.2.2. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{máxima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 0.54$; $x(H_2\text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2\text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm ⁻²]	Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm ⁻²]
OH+	5.60×10^{-6}	4.50×10^8	C ₂ H ₃ +	4.11×10^{-28}	3.14×10^{-15}
H ₂ O+	1.22×10^{-8}	3.21×10^5	HNC	1.21×10^{-28}	3.15×10^{-17}
CH+	2.66×10^{-10}	2.53×10^4	CNC+	9.67×10^{-30}	6.96×10^{-17}
OH	7.74×10^{-11}	6.00×10^3	HNO	5.18×10^{-30}	1.68×10^{-16}
NO+	6.54×10^{-11}	4.73×10^2	OCN+	6.94×10^{-31}	6.29×10^{-18}
H ₂ +	3.27×10^{-11}	4.38×10^3	NH ₂	2.76×10^{-32}	8.16×10^{-19}
H ₃ O+	1.18×10^{-11}	9.16×10^1	H ₂ CO	9.56×10^{-33}	3.97×10^{-21}
H ₃ +	4.97×10^{-12}	4.51×10^1	C ₂ H	1.39×10^{-33}	9.84×10^{-20}
CH	7.60×10^{-13}	4.32×10^0	CO ₂	4.82×10^{-34}	2.05×10^{-21}
NH+	1.55×10^{-13}	9.06×10^0	CH ₄	8.08×10^{-35}	6.15×10^{-22}
NH	3.71×10^{-14}	1.97×10^0	OCN	3.44×10^{-35}	3.16×10^{-21}
CO+	1.33×10^{-14}	2.18×10^{-1}	C ₂ H ₂	5.24×10^{-36}	1.77×10^{-22}
CH ₂ +	1.06×10^{-14}	6.26×10^{-1}	CO ₂ +	1.30×10^{-36}	6.97×10^{-24}
NH ₂ +	1.01×10^{-14}	9.22×10^{-2}	CH ₄ +	4.62×10^{-37}	4.71×10^{-24}
HNO+	5.01×10^{-15}	3.10×10^{-2}	C ₄ H ₂ +	2.71×10^{-38}	2.49×10^{-25}
CN+	1.13×10^{-15}	9.43×10^{-3}	N ₂ O+	1.53×10^{-38}	1.42×10^{-25}
N ₂ +	4.08×10^{-16}	2.43×10^{-3}	N ₂ O	6.26×10^{-41}	2.04×10^{-27}
CO	9.70×10^{-17}	5.39×10^{-3}	NO ₂	2.84×10^{-41}	8.36×10^{-28}
H ₂ O	6.96×10^{-18}	3.14×10^{-4}	C ₆ H ₅ +	8.83×10^{-43}	6.12×10^{-30}
HCO+	8.47×10^{-19}	7.16×10^{-5}	CN-	2.43×10^{-43}	1.45×10^{-29}
HCN+	8.39×10^{-19}	6.58×10^{-6}	C ₂ H ₄ +	1.34×10^{-46}	1.13×10^{-33}
CH ₂	4.53×10^{-19}	2.57×10^{-6}	C ₆ H ₇ +	1.65×10^{-47}	1.18×10^{-34}
N ₂ H+	2.22×10^{-19}	1.60×10^{-6}	C ₂ H ₃	7.16×10^{-48}	6.51×10^{-37}
C ₂ H+	4.93×10^{-20}	4.64×10^{-7}	C ₂ H-	1.70×10^{-48}	6.28×10^{-37}
CH ₃ +	2.35×10^{-20}	1.05×10^{-6}	C ₂ N	2.23×10^{-49}	4.19×10^{-38}
NO	4.49×10^{-21}	3.40×10^{-7}	C ₃ H ₂	1.25×10^{-52}	3.03×10^{-40}
CN	2.72×10^{-21}	3.30×10^{-7}	C ₆ H ₆ +	7.12×10^{-54}	4.09×10^{-40}
NO ₂ +	1.04×10^{-22}	4.25×10^{-10}	C ₆ H ₆	7.03×10^{-54}	4.08×10^{-40}
N ₂	1.76×10^{-23}	1.03×10^{-9}	CH-	6.32×10^{-56}	1.68×10^{-44}
C ₂ H ₂ +	6.67×10^{-23}	5.51×10^{-10}	C ₅ H ₃ +	1.29×10^{-57}	8.73×10^{-45}
OH-	2.47×10^{-25}	1.51×10^{-11}	C ₃ H ₄ +	7.11×10^{-58}	5.02×10^{-45}
CH ₃	1.40×10^{-26}	1.06×10^{-13}	C ₂ H ₄	8.91×10^{-60}	4.23×10^{-47}
HCO	8.63×10^{-27}	4.29×10^{-14}	C ₃ H ₃ +	2.15×10^{-60}	1.35×10^{-47}
HCN	8.41×10^{-27}	7.89×10^{-13}	C ₃ H ₃	6.75×10^{-64}	2.23×10^{-51}
C ₂ N+	6.01×10^{-27}	3.37×10^{-14}			

Tabela B.2.3. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{máxima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 0.68$; $x(H_2\text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2\text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm ⁻²]	Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm ⁻²]
OH+	5.18×10^{-6}	4.17×10^8	C ₂ H	4.03×10^{-27}	1.56×10^{-13}
H ₂ O+	1.13×10^{-8}	2.98×10^5	C ₂ H ₃ +	5.37×10^{-28}	4.10×10^{-15}
CH+	3.04×10^{-10}	2.89×10^4	NH ₂	2.06×10^{-29}	3.59×10^{-17}
OH	7.16×10^{-11}	5.55×10^3	HNC	1.57×10^{-29}	9.16×10^{-17}
NO+	6.06×10^{-11}	4.38×10^2	CNC+	1.26×10^{-29}	9.10×10^{-17}
H ₂ +	3.27×10^{-11}	2.39×10^2	HNO	4.79×10^{-30}	1.56×10^{-17}
H ₃ O+	1.10×10^{-11}	8.48×10^1	OCN+	7.33×10^{-31}	6.65×10^{-18}
H ₃ +	4.97×10^{-12}	4.51×10^1	C ₂ H ₂	9.09×10^{-34}	1.32×10^{-20}
CH	8.69×10^{-13}	4.95×10^0	CH ₄	9.25×10^{-35}	6.79×10^{-22}
NH+	1.55×10^{-13}	9.06×10^0	H ₂ CO	7.50×10^{-35}	2.42×10^{-22}
NH	3.71×10^{-14}	1.97×10^0	OCN	3.58×10^{-35}	3.22×10^{-21}
CO+	1.41×10^{-14}	2.31×10^{-1}	CO ₂	3.36×10^{-35}	2.19×10^{-21}
CH ₂ +	1.21×10^{-14}	7.16×10^{-1}	CO ₂ +	6.52×10^{-37}	5.87×10^{-24}
NH ₂ +	1.01×10^{-14}	9.22×10^{-2}	CH ₄ +	5.29×10^{-37}	5.50×10^{-24}
HNO+	4.64×10^{-15}	2.87×10^{-2}	CN-	1.19×10^{-37}	1.23×10^{-25}
CN+	1.29×10^{-15}	1.08×10^{-2}	C ₄ H ₂ +	3.89×10^{-38}	3.62×10^{-25}
N ₂ +	4.08×10^{-16}	2.43×10^{-3}	N ₂ O+	1.42×10^{-38}	1.31×10^{-25}
CO	1.02×10^{-16}	5.68×10^{-3}	N ₂ O	5.80×10^{-41}	1.89×10^{-27}
H ₂ O	6.44×10^{-18}	2.91×10^{-4}	NO ₂	2.43×10^{-41}	7.18×10^{-28}
HCN+	9.59×10^{-19}	7.52×10^{-6}	C ₆ H ₅ +	4.80×10^{-43}	9.43×10^{-28}
HCO+	8.96×10^{-19}	7.57×10^{-5}	C ₂ H ₃	2.21×10^{-44}	4.73×10^{-32}
CH ₂	5.18×10^{-19}	2.96×10^{-6}	C ₂ H-	1.66×10^{-44}	3.77×10^{-31}
N ₂ H+	2.22×10^{-19}	1.60×10^{-6}	C ₂ N	4.11×10^{-46}	1.72×10^{-33}
C ₂ H+	6.44×10^{-20}	6.07×10^{-7}	C ₂ H ₄ +	8.15×10^{-47}	7.71×10^{-34}
CH ₃ +	2.69×10^{-20}	1.20×10^{-6}	C ₆ H ₇ +	1.97×10^{-48}	3.18×10^{-32}
NO	4.15×10^{-21}	3.15×10^{-7}	C ₃ H ₂	3.20×10^{-51}	9.33×10^{-36}
CN	3.11×10^{-21}	3.67×10^{-7}	CH-	1.72×10^{-52}	2.27×10^{-40}
NO ₂ +	8.89×10^{-23}	3.64×10^{-10}	C ₆ H ₆	8.95×10^{-53}	1.11×10^{-37}
C ₂ H ₂ +	8.72×10^{-23}	7.19×10^{-10}	C ₆ H ₆ +	8.56×10^{-53}	1.10×10^{-37}
N ₂	1.77×10^{-23}	1.03×10^{-9}	C ₅ H ₃ +	6.72×10^{-58}	1.52×10^{-42}
OH-	2.28×10^{-25}	1.40×10^{-11}	C ₃ H ₄ +	1.16×10^{-58}	9.31×10^{-46}
CH ₃	1.60×10^{-26}	1.21×10^{-13}	C ₂ H ₄	1.16×10^{-59}	5.69×10^{-47}
HCN	9.60×10^{-27}	9.00×10^{-13}	C ₃ H ₃ +	3.22×10^{-61}	2.50×10^{-48}
HCO	9.13×10^{-27}	4.83×10^{-14}	C ₃ H ₃	5.69×10^{-64}	3.47×10^{-51}
C ₂ N+	7.84×10^{-27}	4.40×10^{-14}			

Tabela B.2.4. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 0.75$; $x(H_2\text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2\text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	4.96×10^{-6}	3.99×10^8	C ₂ N+	8.97×10^{-27}	5.03×10^{-14}
H ₂ O+	1.08×10^{-8}	2.85×10^5	C ₂ H ₃ +	6.14×10^{-28}	4.69×10^{-15}
CH+	3.25×10^{-10}	3.09×10^4	NH ₂	4.29×10^{-29}	6.28×10^{-17}
OH	6.86×10^{-11}	5.32×10^3	HNC	1.66×10^{-29}	9.85×10^{-17}
NO+	5.80×10^{-11}	4.20×10^2	CNC+	1.27×10^{-29}	9.45×10^{-17}
H ₂ +	3.27×10^{-11}	4.38×10^3	HNO	4.59×10^{-30}	1.49×10^{-16}
H ₃ O+	1.05×10^{-11}	8.12×10^1	OCN+	7.55×10^{-31}	6.84×10^{-18}
H ₃ +	4.97×10^{-12}	4.51×10^1	C ₂ H ₂	6.03×10^{-33}	3.17×10^{-20}
CH	9.31×10^{-13}	5.30×10^0	H ₂ CO	1.56×10^{-34}	5.05×10^{-22}
NH+	1.55×10^{-13}	9.06×10^0	CH ₄	1.00×10^{-34}	7.35×10^{-22}
NH	3.71×10^{-14}	1.97×10^0	CO ₂	5.16×10^{-35}	2.23×10^{-21}
CO+	1.44×10^{-14}	2.36×10^{-1}	OCN	3.59×10^{-35}	3.34×10^{-21}
CH ₂ +	1.29×10^{-14}	7.65×10^{-1}	CO ₂ +	6.60×10^{-37}	5.76×10^{-24}
NH ₂ +	1.01×10^{-14}	9.22×10^{-2}	CH ₄ +	5.84×10^{-37}	5.88×10^{-24}
HNO+	4.45×10^{-15}	2.75×10^{-2}	CN-	2.97×10^{-37}	3.16×10^{-25}
CN+	1.38×10^{-15}	1.15×10^{-2}	C ₄ H ₂ +	4.75×10^{-38}	4.43×10^{-25}
N ₂ +	4.08×10^{-16}	2.43×10^{-3}	N ₂ O+	1.36×10^{-38}	1.26×10^{-25}
CO	1.06×10^{-16}	5.88×10^{-3}	N ₂ O	5.56×10^{-41}	1.81×10^{-27}
H ₂ O	6.17×10^{-18}	2.78×10^{-4}	NO ₂	2.23×10^{-41}	6.59×10^{-28}
HCN+	1.02×10^{-18}	8.03×10^{-6}	C ₆ H ₅ +	1.45×10^{-42}	2.54×10^{-26}
HCO+	9.18×10^{-19}	7.76×10^{-5}	C ₂ H-	3.26×10^{-43}	1.17×10^{-30}
CH ₂	5.52×10^{-19}	3.16×10^{-6}	C ₂ H ₃	2.39×10^{-43}	3.16×10^{-31}
N ₂ H+	2.22×10^{-19}	1.60×10^{-6}	C ₂ N	4.43×10^{-45}	6.44×10^{-33}
C ₂ H+	7.36×10^{-20}	6.94×10^{-7}	C ₂ H ₄ +	8.91×10^{-47}	8.48×10^{-34}
CH ₃ +	2.87×10^{-20}	1.28×10^{-6}	C ₃ H ₂	3.25×10^{-47}	1.94×10^{-34}
CN	4.70×10^{-21}	4.28×10^{-7}	C ₆ H ₇ +	1.57×10^{-47}	1.46×10^{-31}
NO	3.98×10^{-21}	3.02×10^{-7}	CH-	8.37×10^{-50}	3.53×10^{-38}
C ₂ H ₂ +	9.97×10^{-23}	8.23×10^{-10}	C ₆ H ₆	5.74×10^{-51}	5.64×10^{-37}
NO ₂ +	8.16×10^{-23}	3.34×10^{-10}	C ₆ H ₆ +	4.88×10^{-51}	5.58×10^{-37}
N ₂	1.76×10^{-23}	1.03×10^{-9}	C ₅ H ₃ +	1.41×10^{-55}	3.20×10^{-43}
OH-	6.08×10^{-24}	1.32×10^{-11}	C ₃ H ₄ +	1.08×10^{-57}	5.84×10^{-45}
CH ₃	1.75×10^{-26}	1.31×10^{-13}	C ₂ H ₄	1.76×10^{-59}	6.53×10^{-47}
HCN	1.06×10^{-26}	9.68×10^{-13}	C ₃ H ₃ +	1.73×10^{-60}	9.86×10^{-48}
C ₂ H	9.68×10^{-27}	3.22×10^{-13}	C ₃ H ₃	2.02×10^{-63}	1.04×10^{-50}
HCO	9.36×10^{-27}	5.28×10^{-14}			

Tabela B.2.5. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.25$; $x(H_2\text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2\text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm ⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm ⁻²]
OH+	3.84×10^{-6}	3.08×10^8	C ₂ H ₃ +	1.04×10^{-27}	7.91×10^{-15}
H ₂ O+	8.34×10^{-9}	2.20×10^5	HNC	2.15×10^{-29}	1.27×10^{-16}
CH+	4.22×10^{-10}	4.01×10^4	CNC+	2.43×10^{-29}	1.75×10^{-16}
OH	5.30×10^{-11}	4.11×10^3	HNO	3.55×10^{-30}	1.15×10^{-16}
NO+	4.48×10^{-11}	3.24×10^2	OCN+	7.55×10^{-31}	6.85×10^{-18}
H ₂ +	3.27×10^{-11}	4.38×10^3	NH ₂	1.92×10^{-32}	5.66×10^{-19}
H ₃ O+	8.11×10^{-12}	6.27×10^1	C ₂ H	3.50×10^{-33}	1.75×10^{-19}
H ₃ +	4.97×10^{-12}	4.51×10^1	CH ₄	1.30×10^{-34}	9.56×10^{-22}
CH	1.21×10^{-12}	6.88×10^0	H ₂ CO	4.63×10^{-35}	3.36×10^{-22}
NH+	1.55×10^{-13}	9.06×10^0	OCN	3.73×10^{-35}	1.43×10^{-22}
NH	3.71×10^{-14}	1.97×10^0	CO ₂	2.34×10^{-35}	1.04×10^{-22}
CH ₂ +	1.67×10^{-14}	9.94×10^{-1}	C ₂ H ₂	1.11×10^{-35}	1.00×10^{-22}
CO+	1.45×10^{-14}	2.37×10^{-1}	CH ₄ +	7.52×10^{-37}	7.61×10^{-24}
NH ₂ +	1.01×10^{-14}	9.22×10^{-2}	CO ₂ +	4.97×10^{-37}	4.47×10^{-24}
HNO+	3.43×10^{-15}	2.12×10^{-2}	C ₄ H ₂ +	1.04×10^{-37}	9.71×10^{-25}
CN+	1.79×10^{-15}	1.50×10^{-2}	N ₂ O+	1.05×10^{-38}	9.72×10^{-26}
N ₂ +	4.08×10^{-16}	2.43×10^{-3}	N ₂ O	4.30×10^{-41}	1.40×10^{-27}
CO	1.06×10^{-16}	5.86×10^{-3}	NO ₂	1.33×10^{-41}	3.93×10^{-28}
H ₂ O	4.77×10^{-18}	2.15×10^{-4}	C ₆ H ₅ +	3.65×10^{-42}	2.49×10^{-29}
HCN+	1.33×10^{-18}	1.04×10^{-5}	CN-	1.55×10^{-43}	1.56×10^{-29}
HCO+	9.21×10^{-19}	7.79×10^{-5}	C ₂ H ₄ +	2.45×10^{-46}	2.31×10^{-33}
CH ₂	7.16×10^{-19}	4.11×10^{-6}	C ₆ H ₇ +	6.85×10^{-47}	4.89×10^{-34}
N ₂ H+	2.22×10^{-19}	1.60×10^{-6}	C ₂ H ₃	6.42×10^{-50}	6.28×10^{-36}
C ₂ H+	1.24×10^{-19}	1.17×10^{-6}	C ₂ H-	2.51×10^{-50}	5.50×10^{-37}
CH ₃ +	3.73×10^{-20}	1.66×10^{-6}	C ₂ N	2.75×10^{-51}	2.64×10^{-37}
CN	4.32×10^{-21}	5.23×10^{-7}	C ₃ H ₂	9.29×10^{-53}	7.40×10^{-40}
NO	3.07×10^{-21}	2.33×10^{-7}	C ₆ H ₆ +	2.95×10^{-53}	1.73×10^{-39}
C ₂ H ₂ +	1.68×10^{-22}	1.39×10^{-9}	C ₆ H ₆	2.91×10^{-53}	1.73×10^{-39}
NO ₂ +	4.87×10^{-23}	2.00×10^{-10}	C ₅ H ₃ +	8.70×10^{-57}	5.90×10^{-44}
N ₂	1.76×10^{-23}	1.03×10^{-9}	C ₃ H ₄ +	6.29×10^{-58}	5.88×10^{-45}
OH-	1.69×10^{-25}	1.04×10^{-11}	C ₂ H ₄	2.26×10^{-59}	1.11×10^{-46}
CH ₃	2.26×10^{-26}	1.68×10^{-13}	CH-	1.76×10^{-59}	9.35×10^{-47}
C ₂ N+	1.51×10^{-26}	8.49×10^{-14}	C ₃ H ₃ +	1.92×10^{-60}	1.55×10^{-47}
HCN	1.33×10^{-26}	1.25×10^{-13}	C ₃ H ₃	3.04×10^{-63}	1.73×10^{-50}
HCO	9.40×10^{-27}	5.04×10^{-14}			

Tabela B.2.6. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.50$; $x(H_2\text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2\text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	3.45×10^{-6}	2.78×10^8	C ₂ H	1.35×10^{-26}	8.68×10^{-15}
H ₂ O+	7.50×10^{-9}	1.98×10^5	HNC	2.42×10^{-27}	2.27×10^{-15}
CH+	4.56×10^{-10}	4.34×10^4	C ₂ H ₃ +	1.20×10^{-27}	9.20×10^{-15}
OH	4.77×10^{-11}	3.70×10^3	CNC+	1.68×10^{-28}	9.13×10^{-16}
NO+	4.03×10^{-11}	2.92×10^2	NH ₂	4.48×10^{-29}	5.69×10^{-17}
H ₂ +	3.27×10^{-11}	4.38×10^3	HNO	3.19×10^{-30}	1.04×10^{-16}
H ₃ O+	7.30×10^{-12}	5.65×10^1	OCN+	7.27×10^{-31}	6.62×10^{-18}
H ₃ +	4.97×10^{-12}	4.51×10^1	C ₂ H ₂	2.27×10^{-31}	1.09×10^{-19}
CH	1.30×10^{-12}	7.44×10^0	H ₂ CO	1.48×10^{-31}	8.75×10^{-20}
NH+	1.55×10^{-13}	9.06×10^0	CH ₄	2.59×10^{-32}	2.46×10^{-20}
NH	3.71×10^{-14}	1.97×10^0	CO ₂	5.42×10^{-33}	1.31×10^{-20}
CH ₂ +	1.81×10^{-14}	1.07×10^0	CO ₂ +	1.18×10^{-33}	5.99×10^{-21}
CO+	1.41×10^{-14}	2.31×10^{-1}	OCN	1.48×10^{-34}	3.38×10^{-21}
NH ₂ +	1.01×10^{-14}	9.22×10^{-2}	CH ₄ +	3.17×10^{-35}	2.44×10^{-23}
HNO+	3.09×10^{-15}	1.91×10^{-2}	CN-	6.61×10^{-37}	3.17×10^{-26}
CN+	1.93×10^{-15}	1.62×10^{-2}	C ₄ H ₂ +	1.33×10^{-37}	1.23×10^{-24}
N ₂ +	4.08×10^{-16}	2.43×10^{-3}	N ₂ O+	9.46×10^{-39}	8.74×10^{-26}
CO	1.25×10^{-16}	5.96×10^{-3}	C ₆ H ₅ +	9.50×10^{-40}	1.13×10^{-24}
H ₂ O	4.29×10^{-18}	1.94×10^{-4}	C ₂ H ₃	1.31×10^{-40}	1.42×10^{-28}
HCN+	1.44×10^{-18}	1.13×10^{-5}	N ₂ O	3.86×10^{-41}	1.26×10^{-27}
HCO+	8.96×10^{-19}	7.57×10^{-5}	C ₆ H ₇ +	1.44×10^{-41}	7.39×10^{-29}
CH ₂	7.72×10^{-19}	3.87×10^{-6}	C ₂ H-	1.33×10^{-41}	1.17×10^{-29}
N ₂ H+	2.22×10^{-19}	1.60×10^{-6}	NO ₂	1.08×10^{-41}	3.18×10^{-28}
C ₂ H+	1.47×10^{-19}	1.38×10^{-6}	C ₂ N	6.65×10^{-42}	8.60×10^{-30}
CH ₃ +	4.03×10^{-20}	1.80×10^{-6}	C ₂ H ₄ +	1.70×10^{-45}	3.26×10^{-30}
CN	1.43×10^{-20}	5.47×10^{-7}	C ₃ H ₂	1.57×10^{-46}	3.47×10^{-31}
NO	2.77×10^{-21}	2.10×10^{-7}	C ₆ H ₆ +	8.62×10^{-48}	8.66×10^{-35}
OH-	1.20×10^{-21}	9.40×10^{-10}	C ₆ H ₆	7.10×10^{-48}	8.46×10^{-35}
C ₂ H ₂ +	1.98×10^{-22}	1.63×10^{-9}	CH-	6.06×10^{-50}	1.53×10^{-37}
NO ₂ +	3.94×10^{-23}	1.62×10^{-10}	C ₅ H ₃ +	2.96×10^{-50}	1.50×10^{-37}
N ₂	1.76×10^{-23}	1.03×10^{-9}	C ₃ H ₄ +	8.32×10^{-56}	1.43×10^{-40}
HCO	3.81×10^{-25}	1.66×10^{-13}	C ₂ H ₄	3.03×10^{-56}	1.13×10^{-46}
HCN	1.08×10^{-25}	1.46×10^{-12}	C ₃ H ₃ +	1.02×10^{-58}	3.38×10^{-47}
CH ₃	2.44×10^{-26}	1.96×10^{-13}	C ₃ H ₃	7.23×10^{-59}	4.89×10^{-48}
C ₂ N+	1.75×10^{-26}	9.80×10^{-14}			

Tabela B.2.7. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 2.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm ⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm ⁻²]
OH+	2.88×10^{-6}	2.32×10^8	C ₂ H	2.77×10^{-27}	1.04×10^{-13}
H ₂ O+	6.26×10^{-9}	1.65×10^5	C ₂ H ₃ +	1.49×10^{-27}	1.14×10^{-14}
CH+	5.06×10^{-10}	4.81×10^4	NH ₂	4.01×10^{-29}	4.06×10^{-17}
OH	3.98×10^{-11}	3.09×10^3	CNC+	3.49×10^{-29}	2.50×10^{-16}
NO+	3.37×10^{-11}	2.44×10^2	HNC	2.58×10^{-29}	1.62×10^{-16}
H ₂ +	3.27×10^{-11}	4.39×10^3	HNO	2.66×10^{-30}	8.65×10^{-17}
H ₃ O+	6.09×10^{-12}	4.71×10^1	OCN+	6.80×10^{-31}	6.17×10^{-18}
H ₃ +	4.97×10^{-12}	4.51×10^1	C ₂ H ₂	1.57×10^{-33}	8.99×10^{-21}
CH	1.45×10^{-12}	8.24×10^0	CH ₄	5.28×10^{-34}	1.01×10^{-21}
NH+	1.55×10^{-13}	9.06×10^0	H ₂ CO	1.09×10^{-34}	3.87×10^{-22}
NH	3.71×10^{-14}	1.97×10^0	OCN	3.35×10^{-35}	3.03×10^{-21}
CH ₂ +	2.01×10^{-14}	1.19×10^0	CO ₂	2.99×10^{-35}	1.16×10^{-21}
CO+	1.30×10^{-14}	2.14×10^{-1}	CH ₄ +	9.51×10^{-37}	6.29×10^{-24}
NH ₂ +	1.01×10^{-14}	9.22×10^{-2}	CO ₂ +	3.46×10^{-37}	3.26×10^{-24}
HNO+	2.58×10^{-15}	1.60×10^{-2}	C ₄ H ₂ +	1.79×10^{-37}	1.67×10^{-24}
CN+	2.14×10^{-15}	1.79×10^{-2}	CN-	1.62×10^{-37}	1.19×10^{-25}
N ₂ +	4.08×10^{-16}	2.43×10^{-3}	N ₂ O+	8.00×10^{-39}	7.30×10^{-26}
CO	9.52×10^{-17}	5.28×10^{-3}	N ₂ O	3.22×10^{-41}	1.05×10^{-27}
H ₂ O	3.58×10^{-18}	1.62×10^{-4}	NO ₂	7.51×10^{-42}	2.22×10^{-28}
HCN+	1.59×10^{-18}	1.25×10^{-5}	C ₂ H ₃	6.31×10^{-44}	8.19×10^{-32}
CH ₂	8.57×10^{-19}	4.95×10^{-6}	C ₂ H-	2.97×10^{-44}	2.33×10^{-31}
HCO+	8.29×10^{-19}	7.01×10^{-5}	C ₆ H ₅ +	2.28×10^{-44}	5.50×10^{-32}
N ₂ H+	2.22×10^{-19}	1.60×10^{-6}	C ₂ N	1.56×10^{-45}	1.98×10^{-33}
C ₂ H+	1.78×10^{-19}	1.68×10^{-6}	C ₂ H ₄ +	2.45×10^{-47}	4.43×10^{-34}
CH ₃ +	4.47×10^{-20}	1.99×10^{-6}	C ₆ H ₇ +	1.07×10^{-49}	3.37×10^{-31}
CN	5.18×10^{-21}	6.37×10^{-7}	C ₃ H ₂	1.10×10^{-50}	9.97×10^{-35}
NO	2.31×10^{-21}	1.75×10^{-7}	CH-	1.84×10^{-52}	4.21×10^{-41}
C ₂ H ₂ +	2.41×10^{-22}	1.99×10^{-9}	C ₆ H ₆	1.39×10^{-54}	1.51×10^{-36}
NO ₂ +	2.75×10^{-23}	1.13×10^{-10}	C ₆ H ₆ +	1.22×10^{-54}	1.52×10^{-36}
N ₂	1.76×10^{-23}	1.02×10^{-9}	C ₂ H ₄	3.24×10^{-59}	1.89×10^{-46}
OH-	1.27×10^{-25}	7.81×10^{-12}	C ₃ H ₄ +	1.73×10^{-59}	1.37×10^{-44}
CH ₃	2.71×10^{-26}	1.94×10^{-13}	C ₅ H ₃ +	1.61×10^{-60}	3.36×10^{-41}
C ₂ N+	2.17×10^{-26}	1.22×10^{-13}	C ₃ H ₃ +	2.79×10^{-63}	3.30×10^{-47}
HCN	1.60×10^{-26}	1.50×10^{-12}	C ₃ H ₃	3.12×10^{-64}	5.14×10^{-51}
HCO	8.45×10^{-27}	4.58×10^{-14}			

Tabela B.2.8. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{máxima}$, e densidade de coluna, N , com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 2 \times 10^{-2}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 2 \times 10^{-3}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm^{-2}]	Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm^{-2}]
OH+	8.65×10^{-7}	6.95×10^7	C_2H_3+	1.34×10^{-30}	1.02×10^{-17}
$\text{H}_2\text{O}+$	3.76×10^{-10}	9.94×10^3	CNC+	9.13×10^{-31}	6.58×10^{-18}
CH+	7.60×10^{-11}	7.23×10^3	HNC	7.76×10^{-31}	4.59×10^{-18}
OH	1.20×10^{-11}	9.26×10^2	HNO	1.60×10^{-31}	5.19×10^{-18}
NO+	1.01×10^{-11}	7.31×10^1	OCN+	1.52×10^{-31}	1.38×10^{-18}
H_2+	6.61×10^{-12}	8.88×10^2	NH_2	8.63×10^{-34}	2.55×10^{-20}
CH	2.18×10^{-13}	1.23×10^0	C_2H	2.06×10^{-34}	1.08×10^{-20}
H_3+	2.01×10^{-13}	1.82×10^0	CO_2	1.80×10^{-35}	4.94×10^{-22}
$\text{H}_3\text{O}+$	7.32×10^{-14}	5.66×10^{-1}	OCN	1.80×10^{-36}	2.00×10^{-22}
NH+	3.09×10^{-14}	1.81×10^0	H_2CO	3.76×10^{-37}	2.74×10^{-24}
CO+	1.47×10^{-14}	2.37×10^{-1}	CH_4	1.86×10^{-37}	1.38×10^{-24}
NH	7.41×10^{-15}	3.94×10^{-1}	CO_2+	1.49×10^{-37}	1.35×10^{-24}
CH_2+	6.03×10^{-16}	3.58×10^{-2}	C_2H_2	4.18×10^{-38}	7.39×10^{-25}
CN+	5.04×10^{-16}	3.74×10^{-3}	CH_4+	1.08×10^{-39}	1.10×10^{-26}
N_2+	4.05×10^{-16}	2.40×10^{-3}	$\text{N}_2\text{O}+$	4.73×10^{-40}	4.37×10^{-27}
NH_2+	4.02×10^{-16}	3.69×10^{-3}	C_4H_2+	1.20×10^{-40}	1.12×10^{-27}
HNO+	1.55×10^{-16}	9.59×10^{-4}	N_2O	1.94×10^{-42}	6.30×10^{-29}
CO	1.06×10^{-16}	5.89×10^{-3}	NO_2	6.77×10^{-43}	2.00×10^{-29}
H_2O	2.15×10^{-19}	9.42×10^{-6}	CN-	1.25×10^{-43}	5.01×10^{-30}
HCO+	1.67×10^{-19}	1.44×10^{-5}	C_6H_5+	5.17×10^{-45}	3.77×10^{-32}
HCN+	5.69×10^{-20}	4.40×10^{-7}	C_2H_4+	6.15×10^{-50}	5.85×10^{-37}
$\text{N}_2\text{H}+$	4.29×10^{-20}	3.09×10^{-7}	C_6H_7+	2.99×10^{-50}	2.29×10^{-37}
CH_2	2.58×10^{-20}	1.48×10^{-7}	$\text{C}_2\text{H}-$	4.75×10^{-52}	2.57×10^{-38}
$\text{C}_2\text{H}+$	4.03×10^{-21}	3.80×10^{-8}	C_2N	1.06×10^{-52}	1.10×10^{-38}
CN	1.08×10^{-21}	1.26×10^{-7}	C_2H_3	8.55×10^{-53}	8.42×10^{-39}
NO	6.93×10^{-22}	5.09×10^{-8}	C_3H_2	1.12×10^{-55}	8.88×10^{-43}
CH_3+	2.69×10^{-22}	1.20×10^{-8}	C_6H_6+	1.28×10^{-56}	1.00×10^{-42}
N_2	3.53×10^{-24}	2.08×10^{-10}	C_6H_6	1.27×10^{-56}	1.00×10^{-42}
NO_2+	2.48×10^{-24}	1.01×10^{-11}	CH-	1.50×10^{-59}	5.95×10^{-48}
C_2H_2+	1.09×10^{-24}	8.99×10^{-12}	C_5H_3+	4.78×10^{-60}	3.44×10^{-47}
OH-	3.80×10^{-26}	2.34×10^{-12}	C_3H_4+	2.14×10^{-62}	2.17×10^{-49}
HCO	9.41×10^{-27}	5.01×10^{-14}	C_2H_4	1.17×10^{-63}	5.72×10^{-51}
HCN	5.58×10^{-28}	5.21×10^{-14}	C_3H_3+	7.07×10^{-65}	6.13×10^{-52}
$\text{C}_2\text{N}+$	4.90×10^{-28}	2.75×10^{-15}	C_3H_3	1.65×10^{-67}	9.44×10^{-55}
CH_3	1.62×10^{-28}	1.22×10^{-15}			

Tabela B.2.9. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 5 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 5 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm ⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm ⁻²]
OH+	2.16×10^{-5}	1.73×10^9	HCO	1.29×10^{-26}	7.65×10^{-14}
H ₂ O+	2.34×10^{-7}	6.18×10^6	HNC	4.85×10^{-28}	2.90×10^{-15}
CH+	1.90×10^{-9}	1.81×10^5	CNC+	4.77×10^{-28}	3.44×10^{-15}
H ₃ O+	1.14×10^{-9}	8.81×10^3	HNO	1.00×10^{-28}	3.25×10^{-15}
OH	2.99×10^{-10}	2.32×10^4	OCN+	3.92×10^{-30}	3.55×10^{-17}
NO+	2.52×10^{-10}	1.82×10^3	C ₂ H	1.77×10^{-30}	5.93×10^{-17}
H ₂ +	1.63×10^{-10}	2.19×10^4	NH ₂	5.39×10^{-31}	1.59×10^{-17}
H ₃ +	1.24×10^{-10}	1.13×10^3	CH ₄	7.28×10^{-32}	5.44×10^{-19}
CH	5.44×10^{-12}	3.14×10^1	H ₂ CO	5.87×10^{-33}	4.30×10^{-20}
NH+	7.73×10^{-13}	4.53×10^1	C ₂ H ₂	5.62×10^{-33}	2.13×10^{-19}
CH ₂ +	3.77×10^{-13}	2.24×10^1	OCN	9.12×10^{-34}	7.95×10^{-20}
NH ₂ +	2.51×10^{-13}	2.30×10^0	CH ₄ +	4.21×10^{-34}	4.31×10^{-21}
NH	1.85×10^{-13}	9.85×10^0	CO ₂	1.34×10^{-34}	9.27×10^{-21}
HNO+	9.65×10^{-14}	5.97×10^{-1}	C ₄ H ₂ +	4.97×10^{-35}	4.60×10^{-22}
CO+	1.48×10^{-14}	2.59×10^{-1}	CO ₂ +	2.81×10^{-36}	2.52×10^{-23}
CN+	7.12×10^{-15}	6.20×10^{-2}	N ₂ O+	2.98×10^{-37}	2.75×10^{-24}
N ₂ +	4.24×10^{-16}	2.58×10^{-3}	C ₆ H ₅ +	1.58×10^{-39}	1.06×10^{-26}
H ₂ O	1.34×10^{-16}	6.92×10^{-3}	N ₂ O	1.21×10^{-39}	3.96×10^{-26}
CO	1.13×10^{-16}	6.21×10^{-3}	NO ₂	4.23×10^{-40}	1.25×10^{-26}
HCN+	2.88×10^{-17}	2.26×10^{-4}	CN-	7.66×10^{-43}	7.00×10^{-29}
CH ₂	1.61×10^{-17}	9.34×10^{-5}	C ₂ H ₄ +	6.04×10^{-43}	5.74×10^{-30}
HCO+	7.13×10^{-18}	5.73×10^{-4}	C ₆ H ₇ +	1.27×10^{-43}	8.70×10^{-31}
CH ₃ +	4.20×10^{-18}	1.87×10^{-4}	C ₂ H ₃	3.33×10^{-47}	3.28×10^{-33}
C ₂ H+	2.50×10^{-18}	2.36×10^{-5}	C ₂ H-	1.27×10^{-47}	2.08×10^{-34}
N ₂ H+	1.29×10^{-18}	9.38×10^{-6}	C ₂ N	5.56×10^{-50}	5.30×10^{-36}
CN	1.86×10^{-20}	2.19×10^{-6}	C ₆ H ₆ +	5.44×10^{-50}	2.68×10^{-36}
NO	1.73×10^{-20}	1.52×10^{-6}	C ₆ H ₆	5.38×10^{-50}	2.68×10^{-36}
C ₂ H ₂ +	1.70×10^{-20}	1.40×10^{-7}	C ₃ H ₂	4.36×10^{-50}	3.46×10^{-37}
NO ₂ +	1.54×10^{-21}	6.32×10^{-9}	C ₅ H ₃ +	1.16×10^{-53}	7.47×10^{-41}
N ₂	8.82×10^{-23}	5.12×10^{-9}	C ₃ H ₄ +	5.37×10^{-54}	5.40×10^{-41}
CH ₃	2.54×10^{-24}	1.91×10^{-11}	C ₂ H ₄	2.86×10^{-55}	1.40×10^{-42}
OH-	9.51×10^{-25}	5.84×10^{-11}	C ₃ H ₃ +	1.77×10^{-56}	1.52×10^{-43}
C ₂ H ₃ +	5.23×10^{-25}	4.00×10^{-12}	CH-	1.40×10^{-57}	3.28×10^{-44}
C ₂ N+	3.06×10^{-25}	1.72×10^{-12}	C ₃ H ₃	4.00×10^{-59}	2.31×10^{-46}
HCN	2.90×10^{-25}	2.73×10^{-11}			

Tabela B.2.10. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; $5Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	2.16×10^{-5}	1.74×10^9	C ₂ H ₃ +	2.10×10^{-26}	1.60×10^{-13}
H ₂ O+	4.70×10^{-8}	1.24×10^6	CNC+	2.47×10^{-27}	1.78×10^{-14}
CH+	1.90×10^{-9}	1.87×10^5	HNC	4.84×10^{-28}	2.85×10^{-15}
NO+	1.26×10^{-9}	9.14×10^3	HNO	9.99×10^{-29}	3.25×10^{-15}
OH	2.99×10^{-10}	2.32×10^4	OCN+	9.57×10^{-29}	8.68×10^{-16}
H ₃ O+	4.57×10^{-11}	3.53×10^2	NH ₂	5.38×10^{-31}	1.59×10^{-17}
H ₂ +	3.27×10^{-11}	4.38×10^3	C ₂ H	7.09×10^{-32}	3.83×10^{-18}
CH	5.42×10^{-12}	3.01×10^1	OCN	4.74×10^{-33}	4.36×10^{-19}
H ₃ +	4.97×10^{-12}	4.51×10^1	CO ₂	3.34×10^{-33}	2.39×10^{-19}
NH+	7.74×10^{-13}	4.53×10^1	H ₂ CO	1.20×10^{-33}	8.41×10^{-21}
CO+	3.67×10^{-13}	6.01×10^0	CH ₄	6.11×10^{-34}	4.29×10^{-21}
NH	1.85×10^{-13}	9.85×10^0	C ₂ H ₂	2.25×10^{-34}	9.05×10^{-21}
HNO+	9.68×10^{-14}	5.99×10^{-1}	CO ₂ +	7.52×10^{-35}	6.77×10^{-22}
CH ₂ +	7.54×10^{-14}	4.47×10^0	C ₄ H ₂ +	9.51×10^{-36}	8.85×10^{-23}
NH ₂ +	5.03×10^{-14}	4.61×10^{-1}	CH ₄ +	3.34×10^{-36}	3.43×10^{-23}
CN+	4.02×10^{-14}	3.37×10^{-1}	N ₂ O+	1.48×10^{-36}	1.37×10^{-23}
N ₂ +	1.02×10^{-14}	6.08×10^{-2}	N ₂ O	6.05×10^{-39}	1.97×10^{-25}
CO	2.68×10^{-15}	1.49×10^{-1}	NO ₂	2.12×10^{-39}	6.24×10^{-26}
HCN+	3.00×10^{-17}	2.35×10^{-4}	C ₆ H ₅ +	3.30×10^{-40}	2.24×10^{-27}
H ₂ O	2.69×10^{-17}	1.21×10^{-3}	CN-	1.96×10^{-41}	1.98×10^{-27}
HCO+	2.33×10^{-17}	1.97×10^{-3}	C ₆ H ₇ +	6.06×10^{-45}	4.31×10^{-32}
N ₂ H+	5.54×10^{-18}	4.01×10^{-5}	C ₂ H ₄ +	4.73×10^{-45}	4.46×10^{-32}
CH ₂	3.21×10^{-18}	1.85×10^{-5}	C ₂ H ₃	2.80×10^{-48}	2.84×10^{-34}
C ₂ H+	2.51×10^{-18}	2.37×10^{-5}	C ₂ N	6.66×10^{-49}	6.26×10^{-35}
CH ₃ +	1.68×10^{-19}	7.50×10^{-6}	C ₂ H-	4.95×10^{-49}	1.18×10^{-35}
CN	9.74×10^{-20}	1.18×10^{-5}	C ₃ H ₂	1.80×10^{-50}	1.36×10^{-37}
NO	8.66×10^{-20}	6.57×10^{-6}	C ₆ H ₆ +	2.61×10^{-51}	1.50×10^{-37}
NO ₂ +	7.73×10^{-21}	3.17×10^{-8}	C ₆ H ₆	2.58×10^{-51}	1.50×10^{-37}
C ₂ H ₂ +	3.41×10^{-21}	2.81×10^{-8}	C ₅ H ₃ +	3.38×10^{-54}	2.28×10^{-41}
N ₂	4.41×10^{-22}	2.60×10^{-8}	C ₃ H ₄ +	5.01×10^{-56}	4.71×10^{-43}
C ₂ N+	1.53×10^{-24}	8.59×10^{-12}	CH-	5.29×10^{-57}	8.45×10^{-45}
OH-	9.30×10^{-25}	5.84×10^{-11}	C ₂ H ₄	5.21×10^{-58}	2.24×10^{-45}
HCN	3.00×10^{-25}	2.82×10^{-11}	C ₃ H ₃ +	1.61×10^{-58}	1.30×10^{-45}
HCO	2.30×10^{-25}	1.28×10^{-12}	C ₃ H ₃	1.37×10^{-60}	7.94×10^{-48}
CH ₃	1.01×10^{-25}	7.58×10^{-13}			

Tabela B.2.11. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; $10Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	4.32×10^{-5}	3.47×10^9	C ₂ H	9.79×10^{-26}	3.09×10^{-12}
H ₂ O+	9.40×10^{-8}	2.48×10^6	C ₂ H ₃ +	8.39×10^{-26}	6.41×10^{-13}
NO+	5.05×10^{-9}	3.65×10^4	CNC+	1.97×10^{-26}	1.42×10^{-13}
CH+	3.80×10^{-9}	3.62×10^5	HNC	1.94×10^{-27}	1.14×10^{-14}
OH	5.98×10^{-10}	4.63×10^4	OCN+	7.66×10^{-28}	6.95×10^{-15}
H ₃ O+	9.14×10^{-11}	7.07×10^2	HNO	4.00×10^{-28}	1.30×10^{-14}
H ₂ +	3.27×10^{-11}	4.38×10^3	NH ₂	1.91×10^{-28}	3.77×10^{-16}
CH	1.09×10^{-11}	6.19×10^1	OCN	3.80×10^{-32}	3.51×10^{-18}
H ₃ +	4.97×10^{-12}	4.51×10^1	CO ₂	2.67×10^{-32}	1.91×10^{-18}
NH+	1.55×10^{-12}	9.06×10^1	C ₂ H ₂	1.97×10^{-32}	4.13×10^{-19}
CO+	1.47×10^{-12}	2.41×10^1	H ₂ CO	5.31×10^{-33}	3.56×10^{-20}
HNO+	3.87×10^{-13}	2.40×10^0	CH ₄	1.17×10^{-33}	8.49×10^{-21}
NH	3.71×10^{-13}	1.97×10^1	CO ₂ +	6.46×10^{-34}	5.81×10^{-21}
CN+	1.61×10^{-13}	1.35×10^0	C ₄ H ₂ +	7.58×10^{-35}	7.07×10^{-22}
CH ₂ +	1.51×10^{-13}	8.95×10^0	CN-	3.47×10^{-35}	2.31×10^{-23}
NH ₂ +	1.01×10^{-13}	9.22×10^{-1}	N ₂ O+	1.18×10^{-35}	1.09×10^{-22}
N ₂ +	4.08×10^{-14}	2.43×10^{-1}	CH ₄ +	6.63×10^{-36}	6.79×10^{-23}
CO	1.07×10^{-14}	5.95×10^{-1}	N ₂ O	4.84×10^{-38}	1.58×10^{-24}
HCN+	1.20×10^{-16}	9.39×10^{-4}	C ₆ H ₅ +	4.07×10^{-38}	3.68×10^{-25}
HCO+	9.34×10^{-17}	7.90×10^{-3}	NO ₂	1.69×10^{-38}	4.99×10^{-25}
H ₂ O	5.37×10^{-17}	2.42×10^{-3}	C ₆ H ₇ +	2.38×10^{-42}	1.91×10^{-29}
N ₂ H+	2.22×10^{-17}	1.60×10^{-4}	C ₂ H-	2.59×10^{-43}	7.25×10^{-30}
C ₂ H+	1.01×10^{-17}	9.48×10^{-5}	C ₂ H ₃	1.28×10^{-43}	3.36×10^{-32}
CH ₂	6.42×10^{-18}	3.70×10^{-5}	C ₂ N	9.12×10^{-44}	1.17×10^{-31}
CN	3.90×10^{-19}	4.74×10^{-5}	C ₂ H ₄ +	1.89×10^{-44}	1.79×10^{-31}
NO	3.46×10^{-19}	2.63×10^{-5}	C ₆ H ₆ +	1.02×10^{-48}	8.82×10^{-35}
CH ₃ +	3.36×10^{-19}	1.50×10^{-5}	C ₆ H ₆	1.01×10^{-48}	8.82×10^{-35}
NO ₂ +	6.18×10^{-20}	2.53×10^{-7}	C ₃ H ₂	2.55×10^{-50}	1.87×10^{-35}
C ₂ H ₂ +	1.36×10^{-20}	1.12×10^{-7}	C ₅ H ₃ +	4.24×10^{-51}	3.06×10^{-38}
N ₂	1.76×10^{-21}	1.06×10^{-7}	CH-	1.98×10^{-51}	1.66×10^{-38}
C ₂ N+	1.22×10^{-23}	6.87×10^{-11}	C ₃ H ₄ +	4.00×10^{-55}	3.76×10^{-42}
OH-	1.86×10^{-24}	1.17×10^{-10}	C ₂ H ₄	1.85×10^{-57}	8.69×10^{-45}
HCN	1.20×10^{-24}	1.13×10^{-10}	C ₃ H ₃ +	1.28×10^{-57}	1.03×10^{-44}
HCO	9.37×10^{-25}	5.13×10^{-12}	C ₃ H ₃	2.18×10^{-59}	1.26×10^{-46}
CH ₃	2.04×10^{-25}	1.51×10^{-12}			

Tabela B.2.12. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; $25Z_{\odot}$; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	1.08×10^{-4}	8.69×10^9	C ₂ H ₃ +	5.24×10^{-25}	4.01×10^{-12}
H ₂ O+	2.35×10^{-7}	6.20×10^6	CH ₃	5.10×10^{-25}	3.79×10^{-12}
NO+	3.16×10^{-8}	2.28×10^5	CNC+	3.08×10^{-25}	2.22×10^{-12}
CH+	9.51×10^{-9}	9.04×10^5	HNC	1.21×10^{-26}	7.17×10^{-14}
OH	1.49×10^{-9}	1.16×10^5	OCN+	1.19×10^{-26}	1.08×10^{-13}
H ₃ O+	2.28×10^{-10}	1.77×10^3	HNO	2.50×10^{-27}	8.11×10^{-14}
H ₂ +	3.27×10^{-11}	4.38×10^3	NH ₂	2.33×10^{-29}	3.59×10^{-16}
CH	2.72×10^{-11}	1.55×10^2	C ₂ H ₂	5.65×10^{-30}	2.65×10^{-17}
CO+	9.18×10^{-12}	1.50×10^2	CO ₂	9.28×10^{-31}	2.94×10^{-17}
H ₃ +	4.97×10^{-12}	4.51×10^1	OCN	5.65×10^{-31}	5.00×10^{-17}
NH+	3.87×10^{-12}	2.27×10^2	H ₂ CO	3.20×10^{-31}	1.02×10^{-19}
HNO+	2.42×10^{-12}	1.50×10^1	CN-	1.48×10^{-32}	1.31×10^{-20}
CN+	1.01×10^{-12}	8.42×10^0	CO ₂ +	1.15×10^{-32}	1.04×10^{-19}
NH	9.27×10^{-13}	4.92×10^1	CH ₄	2.92×10^{-33}	2.13×10^{-20}
CH ₂ +	3.77×10^{-13}	2.24×10^1	C ₄ H ₂ +	1.18×10^{-33}	1.10×10^{-20}
N ₂ +	2.55×10^{-13}	1.52×10^0	N ₂ O+	1.85×10^{-34}	1.71×10^{-21}
NH ₂ +	2.51×10^{-13}	2.30×10^0	CH ₄ +	1.66×10^{-35}	1.70×10^{-22}
CO	6.62×10^{-14}	3.68×10^0	N ₂ O	7.56×10^{-37}	2.46×10^{-23}
HCN+	7.50×10^{-16}	5.87×10^{-3}	NO ₂	2.64×10^{-37}	7.80×10^{-24}
HCO+	5.84×10^{-16}	4.94×10^{-2}	C ₆ H ₅ +	6.74×10^{-38}	5.96×10^{-23}
N ₂ H+	1.38×10^{-16}	1.00×10^{-3}	C ₂ H-	1.45×10^{-40}	8.40×10^{-28}
H ₂ O	1.34×10^{-16}	6.06×10^{-3}	C ₂ H ₃	8.97×10^{-41}	8.88×10^{-29}
C ₂ H+	6.29×10^{-17}	5.92×10^{-4}	C ₂ N	4.58×10^{-41}	1.22×10^{-28}
CH ₂	1.61×10^{-17}	9.24×10^{-5}	C ₆ H ₇ +	2.00×10^{-43}	2.04×10^{-27}
CN	3.19×10^{-18}	2.63×10^{-4}	C ₂ H ₄ +	1.18×10^{-43}	1.12×10^{-30}
NO	2.16×10^{-18}	1.64×10^{-4}	C ₃ H ₂	4.11×10^{-46}	8.10×10^{-31}
NO ₂ +	9.66×10^{-19}	3.96×10^{-6}	CH-	3.43×10^{-47}	3.35×10^{-35}
CH ₃ +	8.40×10^{-19}	3.75×10^{-5}	C ₆ H ₆ +	7.24×10^{-48}	7.12×10^{-33}
C ₂ H ₂ +	8.51×10^{-20}	7.02×10^{-7}	C ₆ H ₆	7.17×10^{-48}	7.11×10^{-33}
N ₂	1.10×10^{-20}	6.99×10^{-7}	C ₅ H ₃ +	3.12×10^{-52}	5.05×10^{-36}
C ₂ N+	1.92×10^{-22}	1.07×10^{-9}	C ₃ H ₄ +	6.18×10^{-54}	5.82×10^{-41}
HCN	7.50×10^{-24}	7.01×10^{-10}	C ₂ H ₄	1.15×10^{-56}	5.52×10^{-44}
HCO	5.86×10^{-24}	2.78×10^{-11}	C ₃ H ₃ +	5.50×10^{-57}	9.90×10^{-44}
OH-	4.62×10^{-24}	2.92×10^{-10}	C ₃ H ₃	8.49×10^{-58}	4.91×10^{-45}
C ₂ H	1.37×10^{-24}	3.88×10^{-10}			

Tabela B.2.13. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^8$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	1.44×10^{-4}	1.53×10^9	C ₂ H ₃ +	1.65×10^{-25}	1.20×10^{-12}
H ₂ O+	1.06×10^{-7}	9.13×10^5	HNC	1.68×10^{-26}	5.05×10^{-13}
CH+	3.30×10^{-9}	3.38×10^5	HNO	2.34×10^{-27}	1.07×10^{-13}
OH	5.34×10^{-10}	4.63×10^4	CNC+	1.99×10^{-27}	1.43×10^{-14}
H ₂ +	3.34×10^{-10}	4.39×10^4	OCN+	2.83×10^{-28}	2.38×10^{-15}
NO+	1.73×10^{-10}	9.35×10^2	C ₂ H	2.44×10^{-29}	6.00×10^{-16}
H ₃ +	4.70×10^{-11}	4.19×10^2	NH ₂	1.16×10^{-29}	5.00×10^{-16}
H ₃ O+	1.68×10^{-11}	1.21×10^2	CH ₄	5.96×10^{-31}	1.95×10^{-17}
CH	1.05×10^{-11}	3.47×10^2	H ₂ CO	3.20×10^{-31}	1.10×10^{-17}
NH+	1.09×10^{-12}	9.11×10^1	OCN	2.52×10^{-31}	7.18×10^{-18}
CH ₂ +	8.40×10^{-13}	6.70×10^1	CO ₂	7.50×10^{-32}	6.53×10^{-18}
NH	3.04×10^{-13}	1.97×10^1	C ₂ H ₂	3.75×10^{-32}	1.65×10^{-18}
CO+	2.55×10^{-13}	2.51×10^1	C ₄ H ₂ +	7.06×10^{-33}	5.91×10^{-20}
CO	7.84×10^{-14}	8.02×10^{-1}	CH ₄ +	5.65×10^{-33}	2.84×10^{-19}
NH ₂ +	6.76×10^{-14}	5.97×10^{-1}	CO ₂ +	1.83×10^{-33}	1.57×10^{-20}
CN+	1.30×10^{-14}	1.11×10^{-1}	N ₂ O+	9.56×10^{-36}	8.67×10^{-23}
HNO+	1.20×10^{-14}	5.84×10^{-2}	N ₂ O	2.70×10^{-37}	1.22×10^{-23}
HCO+	1.30×10^{-15}	1.34×10^{-2}	NO ₂	7.80×10^{-38}	3.32×10^{-24}
N ₂ +	4.46×10^{-16}	2.76×10^{-3}	C ₆ H ₅ +	6.95×10^{-38}	5.62×10^{-25}
H ₂ O	3.60×10^{-16}	2.06×10^{-2}	CN-	8.16×10^{-40}	7.18×10^{-26}
CH ₂	5.70×10^{-17}	1.66×10^{-3}	C ₂ H ₄ +	2.59×10^{-41}	2.39×10^{-28}
C ₂ H+	3.83×10^{-17}	3.45×10^{-4}	C ₆ H ₇ +	2.96×10^{-42}	2.32×10^{-29}
HCN+	1.15×10^{-17}	9.04×10^{-5}	C ₂ H-	1.74×10^{-45}	2.11×10^{-32}
CH ₃ +	1.07×10^{-17}	7.42×10^{-4}	C ₂ H ₃	8.18×10^{-46}	6.89×10^{-32}
CN	4.46×10^{-19}	3.59×10^{-5}	C ₂ N	2.37×10^{-47}	2.02×10^{-33}
NO	3.11×10^{-19}	2.53×10^{-5}	C ₆ H ₆ +	1.60×10^{-47}	1.01×10^{-33}
N ₂ H+	2.83×10^{-19}	2.06×10^{-6}	C ₆ H ₆	1.40×10^{-47}	1.01×10^{-33}
C ₂ H ₂ +	3.64×10^{-20}	2.86×10^{-7}	C ₃ H ₂	8.50×10^{-49}	6.42×10^{-36}
N ₂	1.17×10^{-21}	1.02×10^{-7}	C ₅ H ₃ +	5.25×10^{-51}	3.54×10^{-38}
NO ₂ +	1.42×10^{-22}	5.13×10^{-10}	C ₃ H ₄ +	2.48×10^{-51}	2.27×10^{-38}
OH-	1.76×10^{-23}	1.15×10^{-9}	C ₂ H ₄	6.90×10^{-53}	1.67×10^{-39}
CH ₃	1.42×10^{-23}	5.26×10^{-10}	C ₃ H ₃ +	6.03×10^{-54}	4.69×10^{-41}
C ₂ N+	4.33×10^{-24}	2.31×10^{-11}	CH-	1.70×10^{-54}	3.31×10^{-41}
HCN	1.22×10^{-24}	1.14×10^{-10}	C ₃ H ₃	1.33×10^{-56}	7.44×10^{-44}
HCO	1.02×10^{-24}	3.77×10^{-11}			

Tabela B.2.14. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^{10}$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	2.63×10^{-7}	3.41×10^7	C ₂ H ₃ +	1.09×10^{-30}	8.42×10^{-18}
H ₂ O+	6.16×10^{-11}	5.34×10^3	CNC+	2.51×10^{-31}	1.78×10^{-18}
CH+	3.98×10^{-11}	3.66×10^3	HNC	1.98×10^{-32}	1.31×10^{-20}
OH	6.13×10^{-12}	4.63×10^2	HNO	4.48×10^{-33}	1.33×10^{-19}
NO+	5.72×10^{-12}	4.76×10^1	OCN+	5.71×10^{-34}	5.32×10^{-21}
H ₂ +	3.27×10^{-12}	4.38×10^2	NH ₂	2.45×10^{-35}	6.53×10^{-22}
H ₃ O+	7.59×10^{-13}	6.65×10^0	C ₂ H	1.07×10^{-36}	1.88×10^{-23}
H ₃ +	3.88×10^{-13}	3.99×10^0	OCN	2.79×10^{-38}	2.59×10^{-24}
CH	1.09×10^{-13}	6.74×10^{-2}	CO ₂	1.81×10^{-38}	1.26×10^{-25}
NH+	1.74×10^{-14}	9.06×10^{-1}	CH ₄	1.28×10^{-38}	1.12×10^{-26}
NH	3.87×10^{-15}	1.97×10^{-1}	H ₂ CO	4.91×10^{-39}	4.14×10^{-27}
CO+	1.40×10^{-15}	2.48×10^{-3}	C ₂ H ₂	1.17×10^{-39}	4.58×10^{-26}
NH ₂ +	1.06×10^{-15}	9.73×10^{-3}	CH ₄ +	6.78×10^{-41}	8.06×10^{-29}
N ₂ +	4.05×10^{-16}	2.40×10^{-3}	CO ₂ +	3.97×10^{-41}	3.67×10^{-28}
CN+	3.68×10^{-16}	2.55×10^{-3}	N ₂ O+	1.22×10^{-41}	1.13×10^{-28}
CH ₂ +	1.77×10^{-16}	9.33×10^{-3}	C ₄ H ₂ +	2.17×10^{-43}	1.93×10^{-30}
HNO+	1.16×10^{-16}	9.85×10^{-4}	N ₂ O	5.47×10^{-45}	1.63×10^{-31}
N ₂ H+	2.13×10^{-19}	1.54×10^{-6}	NO ₂	1.98×10^{-45}	5.24×10^{-32}
CO	2.10×10^{-19}	8.22×10^{-6}	CN-	1.26×10^{-46}	2.24×10^{-33}
HCN+	1.71×10^{-19}	1.31×10^{-6}	C ₆ H ₅ +	3.62×10^{-47}	2.44×10^{-34}
H ₂ O	5.84×10^{-20}	2.49×10^{-6}	C ₂ H ₄ +	1.25×10^{-51}	7.95×10^{-39}
CH ₂	6.56×10^{-21}	4.22×10^{-9}	C ₆ H ₇ +	5.99×10^{-52}	4.13×10^{-39}
HCO+	2.36×10^{-21}	8.52×10^{-8}	C ₂ H ₃	7.34×10^{-55}	7.52×10^{-41}
C ₂ H+	1.16×10^{-22}	1.11×10^{-9}	C ₂ N	2.68×10^{-55}	2.51×10^{-41}
CN	1.03×10^{-22}	7.04×10^{-9}	C ₂ H-	2.44×10^{-55}	5.69×10^{-42}
CH ₃ +	4.50×10^{-23}	1.66×10^{-9}	C ₃ H ₂	1.01×10^{-57}	8.12×10^{-45}
NO	3.56×10^{-23}	2.60×10^{-9}	C ₆ H ₆ +	2.52×10^{-59}	1.27×10^{-45}
NO ₂ +	2.85×10^{-24}	1.45×10^{-11}	C ₆ H ₆	2.52×10^{-59}	1.27×10^{-45}
N ₂	2.04×10^{-25}	1.09×10^{-11}	C ₅ H ₃ +	5.79×10^{-63}	3.71×10^{-50}
C ₂ H ₂ +	1.67×10^{-25}	1.39×10^{-12}	C ₃ H ₄ +	1.47×10^{-64}	8.62×10^{-52}
OH-	1.87×10^{-27}	1.17×10^{-13}	CH-	4.53×10^{-65}	9.76×10^{-53}
HCN	1.64×10^{-28}	1.44×10^{-14}	C ₂ H ₄	2.13×10^{-66}	1.14×10^{-54}
HCO	9.31×10^{-29}	5.32×10^{-17}	C ₃ H ₃ +	5.65×10^{-67}	3.29×10^{-68}
CH ₃	2.12×10^{-29}	1.83×10^{-17}	C ₃ H ₃	2.23×10^{-71}	4.11×10^{-57}
C ₂ N+	1.44×10^{-29}	8.11×10^{-17}			

Tabela B.2.15. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 0.1$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	1.10×10^{-7}	1.46×10^7	C ₂ H ₃ +	2.90×10^{-31}	2.23×10^{-18}
H ₂ O+	4.18×10^{-11}	4.08×10^3	CNC+	1.79×10^{-31}	1.26×10^{-18}
CH+	2.94×10^{-11}	2.69×10^3	HNO	4.87×10^{-32}	1.48×10^{-18}
OH	8.44×10^{-12}	6.38×10^2	HNC	4.67×10^{-32}	1.90×10^{-20}
H ₂ +	3.77×10^{-12}	5.06×10^2	OCN+	4.01×10^{-34}	3.76×10^{-21}
NO+	2.47×10^{-12}	2.08×10^1	NH ₂	6.51×10^{-35}	1.75×10^{-21}
H ₃ O+	5.30×10^{-13}	4.62×10^0	C ₂ H	3.84×10^{-36}	3.32×10^{-23}
H ₃ +	5.15×10^{-13}	4.95×10^0	CO ₂	1.60×10^{-37}	1.09×10^{-25}
CH	1.40×10^{-13}	3.12×10^0	OCN	3.27×10^{-38}	2.94×10^{-24}
NH+	4.05×10^{-14}	2.16×10^0	CH ₄	2.30×10^{-38}	1.14×10^{-26}
NH	4.91×10^{-15}	2.50×10^{-1}	H ₂ CO	1.54×10^{-38}	4.97×10^{-27}
NH ₂ +	2.50×10^{-15}	2.30×10^{-2}	C ₂ H ₂	7.65×10^{-40}	1.47×10^{-26}
CO+	9.51×10^{-16}	1.40×10^{-3}	CH ₄ +	3.54×10^{-40}	3.51×10^{-28}
N ₂ +	4.05×10^{-16}	2.40×10^{-3}	N ₂ O+	9.64×10^{-41}	8.93×10^{-28}
CN+	3.31×10^{-16}	2.23×10^{-3}	CO ₂ +	4.63×10^{-41}	3.40×10^{-28}
CH ₂ +	1.80×10^{-16}	9.50×10^{-3}	N ₂ O	2.03×10^{-44}	3.88×10^{-31}
HNO+	8.60×10^{-17}	7.23×10^{-4}	C ₄ H ₂ +	1.97×10^{-44}	1.64×10^{-31}
N ₂ H+	2.14×10^{-19}	1.55×10^{-6}	NO ₂	6.58×10^{-45}	1.76×10^{-31}
HCN+	1.42×10^{-19}	1.08×10^{-6}	CN-	6.16×10^{-46}	7.95×10^{-33}
H ₂ O	1.08×10^{-19}	4.50×10^{-6}	C ₆ H ₅ +	6.02×10^{-48}	4.08×10^{-35}
CO	1.04×10^{-19}	1.90×10^{-6}	C ₂ H ₄ +	2.82×10^{-52}	2.68×10^{-39}
CH ₂	1.07×10^{-20}	4.52×10^{-9}	C ₂ N	2.27×10^{-52}	2.76×10^{-40}
HCO+	1.20×10^{-21}	2.60×10^{-8}	C ₂ H ₃	2.03×10^{-52}	2.81×10^{-40}
NO	1.07×10^{-22}	4.42×10^{-9}	C ₆ H ₇ +	1.05×10^{-52}	7.33×10^{-40}
CH ₃ +	9.91×10^{-23}	3.66×10^{-9}	C ₂ H-	6.41×10^{-54}	1.17×10^{-41}
CN	4.86×10^{-23}	2.49×10^{-9}	C ₃ H ₂	2.35×10^{-57}	2.34×10^{-44}
C ₂ H+	3.07×10^{-23}	2.91×10^{-10}	C ₆ H ₆ +	7.38×10^{-60}	3.42×10^{-46}
NO ₂ +	2.09×10^{-24}	1.06×10^{-11}	C ₆ H ₆	6.46×10^{-60}	3.42×10^{-46}
N ₂	2.50×10^{-25}	4.12×10^{-12}	CH-	5.86×10^{-62}	7.63×10^{-51}
OH-	4.79×10^{-26}	3.03×10^{-12}	C ₅ H ₃ +	1.52×10^{-63}	1.00×10^{-50}
C ₂ H ₂ +	4.43×10^{-26}	3.68×10^{-13}	C ₃ H ₄ +	3.36×10^{-65}	5.07×10^{-53}
HCO	1.02×10^{-27}	4.35×10^{-16}	C ₂ H ₄	1.03×10^{-65}	4.57×10^{-54}
HCN	1.19×10^{-28}	1.03×10^{-14}	C ₃ H ₃ +	1.08×10^{-68}	7.83×10^{-56}
CH ₃	4.01×10^{-29}	2.62×10^{-17}	C ₃ H ₃	1.91×10^{-71}	8.95×10^{-59}
C ₂ N+	3.79×10^{-30}	2.14×10^{-17}			

Tabela B.2.16. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 0.5$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm ⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm ⁻²]
OH+	4.75×10^{-7}	5.94×10^7	C ₂ H ₃ +	1.12×10^{-29}	8.61×10^{-17}
H ₂ O+	3.34×10^{-10}	3.20×10^4	CNC+	1.31×10^{-30}	9.34×10^{-18}
CH+	9.27×10^{-11}	8.57×10^3	HNC	7.29×10^{-31}	1.04×10^{-18}
OH	2.02×10^{-11}	1.54×10^3	HNO	3.53×10^{-31}	1.08×10^{-17}
NO+	9.88×10^{-12}	8.11×10^2	OCN+	1.54×10^{-32}	1.42×10^{-19}
H ₂ +	9.85×10^{-12}	1.32×10^3	NH ₂	8.80×10^{-34}	2.42×10^{-20}
H ₃ O+	2.58×10^{-12}	2.16×10^1	C ₂ H	5.15×10^{-35}	1.44×10^{-21}
H ₃ +	1.44×10^{-12}	1.34×10^1	H ₂ CO	5.54×10^{-36}	5.58×10^{-24}
CH	3.60×10^{-13}	4.66×10^0	CH ₄	2.11×10^{-36}	7.14×10^{-25}
NH+	7.42×10^{-14}	4.09×10^0	CO ₂	1.45×10^{-36}	7.52×10^{-24}
NH	1.21×10^{-14}	6.26×10^{-1}	OCN	6.09×10^{-37}	5.58×10^{-23}
NH ₂ +	4.67×10^{-15}	4.30×10^{-2}	C ₂ H ₂	4.34×10^{-38}	1.48×10^{-24}
CO+	3.20×10^{-15}	1.35×10^{-2}	CH ₄ +	1.67×10^{-38}	5.21×10^{-26}
CH ₂ +	1.33×10^{-15}	7.25×10^{-2}	N ₂ O+	8.38×10^{-40}	7.77×10^{-27}
HNO+	5.99×10^{-16}	4.62×10^{-3}	CO ₂ +	2.42×10^{-40}	8.56×10^{-27}
CN+	5.56×10^{-16}	4.21×10^{-3}	C ₄ H ₂ +	1.03×10^{-42}	9.77×10^{-30}
N ₂ +	4.06×10^{-16}	2.41×10^{-3}	N ₂ O	5.21×10^{-43}	1.60×10^{-29}
CO	9.89×10^{-19}	6.69×10^{-5}	NO ₂	2.26×10^{-43}	6.20×10^{-30}
H ₂ O	6.24×10^{-19}	2.70×10^{-5}	CN-	6.66×10^{-45}	2.20×10^{-31}
HCN+	3.27×10^{-19}	2.54×10^{-6}	C ₆ H ₅ +	2.23×10^{-45}	1.52×10^{-32}
N ₂ H+	2.16×10^{-19}	1.56×10^{-6}	C ₆ H ₇ +	4.02×10^{-50}	2.83×10^{-37}
CH ₂	7.06×10^{-20}	9.80×10^{-8}	C ₂ H ₄ +	1.62×10^{-50}	2.96×10^{-36}
HCO+	1.32×10^{-20}	9.28×10^{-7}	C ₂ H ₃	2.36×10^{-52}	2.41×10^{-38}
CH ₃ +	1.40×10^{-21}	5.44×10^{-8}	C ₂ H-	9.89×10^{-53}	1.47×10^{-39}
C ₂ H+	1.21×10^{-21}	1.15×10^{-8}	C ₂ N	4.82×10^{-53}	4.55×10^{-39}
NO	3.73×10^{-22}	2.76×10^{-8}	C ₃ H ₂	3.32×10^{-55}	2.64×10^{-42}
CN	1.90×10^{-22}	2.29×10^{-8}	C ₆ H ₆ +	5.79×10^{-57}	3.24×10^{-43}
NO ₂ +	1.30×10^{-23}	6.15×10^{-11}	C ₆ H ₆	5.77×10^{-57}	3.24×10^{-43}
C ₂ H ₂ +	1.73×10^{-24}	1.43×10^{-11}	C ₅ H ₃ +	1.48×10^{-60}	9.82×10^{-48}
N ₂	9.11×10^{-25}	4.71×10^{-11}	CH-	9.97×10^{-61}	1.35×10^{-48}
OH-	8.72×10^{-26}	5.52×10^{-12}	C ₃ H ₄ +	1.42×10^{-62}	1.34×10^{-47}
HCO	3.08×10^{-27}	3.93×10^{-15}	C ₂ H ₄	7.45×10^{-63}	9.75×10^{-51}
HCN	8.32×10^{-28}	7.53×10^{-14}	C ₃ H ₃ +	1.19×10^{-65}	2.45×10^{-50}
CH ₃	6.96×10^{-28}	1.38×10^{-15}	C ₃ H ₃	1.12×10^{-67}	1.24×10^{-53}
C ₂ N+	1.49×10^{-28}	8.41×10^{-16}			

Tabela B.2.17. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{máxima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.5$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm ⁻²]	Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm ⁻²]
OH+	9.83×10^{-5}	1.28×10^9	HCO	2.44×10^{-26}	5.51×10^{-13}
H ₂ O+	5.91×10^{-8}	6.65×10^5	HNC	4.58×10^{-28}	8.42×10^{-15}
CH+	1.48×10^{-9}	1.48×10^5	CNC+	3.16×10^{-28}	2.31×10^{-15}
OH	1.73×10^{-10}	1.39×10^4	HNO	4.10×10^{-29}	1.50×10^{-15}
NO+	1.49×10^{-10}	8.40×10^3	OCN+	1.78×10^{-29}	1.58×10^{-16}
H ₂ +	1.09×10^{-10}	1.46×10^4	NH ₂	4.66×10^{-31}	1.59×10^{-17}
H ₃ +	1.64×10^{-11}	1.48×10^2	C ₂ H	3.71×10^{-31}	1.25×10^{-17}
H ₃ O+	1.48×10^{-11}	1.09×10^2	CH ₄	1.21×10^{-32}	1.86×10^{-19}
CH	2.93×10^{-12}	5.96×10^1	H ₂ CO	3.77×10^{-33}	6.04×10^{-20}
NH+	3.13×10^{-13}	2.01×10^1	CO ₂	3.38×10^{-33}	2.70×10^{-19}
CH ₂ +	1.44×10^{-13}	1.00×10^1	OCN	3.14×10^{-33}	2.64×10^{-19}
NH	1.09×10^{-13}	6.20×10^0	C ₂ H ₂	1.10×10^{-33}	4.54×10^{-20}
CO+	7.53×10^{-14}	4.38×10^0	C ₄ H ₂ +	3.03×10^{-34}	2.68×10^{-21}
NH ₂ +	2.07×10^{-14}	1.89×10^{-1}	CO ₂ +	7.73×10^{-35}	6.72×10^{-22}
CO	1.68×10^{-14}	2.00×10^{-1}	CH ₄ +	4.60×10^{-35}	1.24×10^{-21}
HNO+	9.14×10^{-15}	4.79×10^{-2}	N ₂ O+	1.58×10^{-37}	1.45×10^{-24}
CN+	5.84×10^{-15}	5.02×10^{-2}	N ₂ O	3.91×10^{-39}	1.44×10^{-25}
N ₂ +	4.15×10^{-16}	2.49×10^{-3}	C ₆ H ₅ +	1.44×10^{-39}	1.01×10^{-26}
HCO+	2.32×10^{-16}	2.96×10^{-3}	NO ₂	1.08×10^{-39}	3.63×10^{-26}
H ₂ O	4.29×10^{-17}	2.09×10^{-3}	CN-	9.72×10^{-42}	8.96×10^{-28}
C ₂ H+	5.29×10^{-18}	4.88×10^{-5}	C ₂ H ₄ +	1.17×10^{-43}	1.10×10^{-30}
CH ₂	5.07×10^{-18}	9.26×10^{-5}	C ₆ H ₇ +	3.40×10^{-44}	2.53×10^{-31}
HCN+	4.64×10^{-18}	3.64×10^{-5}	C ₂ H ₃	5.53×10^{-48}	5.02×10^{-34}
CH ₃ +	6.05×10^{-19}	3.40×10^{-5}	C ₂ H-	7.22×10^{-48}	1.17×10^{-34}
N ₂ H+	2.35×10^{-19}	1.70×10^{-6}	C ₂ N	1.18×10^{-49}	1.12×10^{-35}
CN	1.02×10^{-19}	1.00×10^{-5}	C ₆ H ₆ +	4.48×10^{-50}	2.92×10^{-36}
NO	3.07×10^{-20}	2.37×10^{-6}	C ₆ H ₆	4.31×10^{-50}	2.92×10^{-36}
C ₂ H ₂ +	6.04×10^{-21}	4.86×10^{-8}	C ₃ H ₂	6.39×10^{-51}	4.97×10^{-38}
N ₂	2.74×10^{-22}	2.26×10^{-8}	C ₅ H ₃ +	1.33×10^{-53}	9.25×10^{-41}
NO ₂ +	1.18×10^{-22}	4.43×10^{-10}	C ₃ H ₄ +	2.62×10^{-54}	2.43×10^{-41}
C ₂ N+	6.23×10^{-25}	3.41×10^{-12}	C ₂ H ₄	6.96×10^{-56}	5.00×10^{-43}
CH ₃	5.34×10^{-25}	1.05×10^{-11}	C ₃ H ₃ +	7.46×10^{-57}	5.90×10^{-44}
OH-	3.90×10^{-25}	2.47×10^{-11}	CH-	1.52×10^{-57}	3.99×10^{-44}
HCN	1.82×10^{-25}	1.79×10^{-11}	C ₃ H ₃	1.40×10^{-59}	8.00×10^{-47}
C ₂ H ₃ +	3.19×10^{-26}	2.38×10^{-13}			

Tabela B.2.18. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, com parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\text{ inicial}}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\text{ final}}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 2.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	2.06×10^{-4}	1.85×10^9	C ₂ H ₃ +	3.69×10^{-25}	2.63×10^{-12}
H ₂ O+	1.05×10^{-7}	9.24×10^5	HNC	8.90×10^{-27}	2.97×10^{-13}
CH+	5.62×10^{-9}	5.84×10^5	HNO	7.56×10^{-27}	1.60×10^{-14}
OH	4.85×10^{-10}	4.18×10^4	CNC+	4.13×10^{-27}	2.96×10^{-14}
H ₂ +	3.70×10^{-10}	4.84×10^4	CO ₂	4.65×10^{-28}	7.30×10^{-16}
NO+	2.02×10^{-10}	1.04×10^3	OCN+	1.82×10^{-28}	1.56×10^{-15}
H ₃ +	5.14×10^{-11}	4.57×10^2	C ₂ H	2.76×10^{-29}	4.42×10^{-16}
H ₃ O+	1.71×10^{-11}	1.23×10^2	NH ₂	8.44×10^{-30}	3.54×10^{-16}
CH	7.36×10^{-12}	3.20×10^2	CO ₂ +	4.06×10^{-30}	4.31×10^{-18}
CH ₂ +	1.10×10^{-12}	9.00×10^1	CH ₄	4.89×10^{-31}	1.66×10^{-17}
CO+	1.09×10^{-12}	1.05×10^2	OCN	2.42×10^{-31}	1.05×10^{-17}
NH+	6.16×10^{-13}	4.46×10^1	C ₄ H ₂ +	1.44×10^{-31}	1.05×10^{-18}
NH	3.00×10^{-13}	1.94×10^1	H ₂ CO	1.30×10^{-31}	4.72×10^{-18}
CO	2.16×10^{-13}	1.91×10^0	C ₂ H ₂	4.05×10^{-32}	2.21×10^{-18}
NH ₂ +	3.90×10^{-14}	3.50×10^{-1}	CH ₄ +	3.61×10^{-33}	2.20×10^{-19}
CN+	2.16×10^{-14}	1.80×10^{-1}	CN-	1.47×10^{-34}	7.39×10^{-24}
HNO+	1.22×10^{-14}	5.95×10^{-2}	N ₂ O+	2.12×10^{-36}	1.92×10^{-23}
HCO+	3.47×10^{-15}	3.07×10^{-2}	N ₂ O	2.58×10^{-37}	1.15×10^{-23}
N ₂ +	4.34×10^{-16}	2.66×10^{-3}	C ₆ H ₅ +	1.26×10^{-37}	1.03×10^{-24}
H ₂ O	3.06×10^{-16}	1.72×10^{-2}	NO ₂	5.21×10^{-38}	2.16×10^{-24}
C ₂ H+	1.15×10^{-16}	1.00×10^{-3}	C ₂ H ₃	4.84×10^{-41}	1.33×10^{-30}
CH ₂	3.53×10^{-17}	1.21×10^{-3}	C ₂ H ₄ +	2.94×10^{-41}	2.65×10^{-28}
HCN+	1.63×10^{-17}	1.26×10^{-4}	C ₆ H ₇ +	3.10×10^{-42}	2.91×10^{-29}
CH ₃ +	7.05×10^{-18}	5.10×10^{-4}	C ₂ N	9.93×10^{-44}	3.44×10^{-32}
CN	4.63×10^{-18}	1.77×10^{-4}	C ₂ H-	3.28×10^{-45}	1.19×10^{-32}
N ₂ H+	2.66×10^{-19}	1.94×10^{-6}	C ₃ H ₂	1.19×10^{-45}	1.56×10^{-32}
OH-	2.66×10^{-19}	9.37×10^{-6}	C ₆ H ₆ +	5.12×10^{-47}	1.08×10^{-33}
NO	2.60×10^{-19}	2.11×10^{-5}	C ₆ H ₆	2.63×10^{-47}	1.11×10^{-33}
C ₂ H ₂ +	9.21×10^{-20}	7.07×10^{-7}	CH-	1.01×10^{-49}	2.91×10^{-39}
N ₂	7.69×10^{-21}	4.96×10^{-7}	C ₅ H ₃ +	2.90×10^{-50}	6.50×10^{-38}
HCO	6.54×10^{-21}	3.77×10^{-10}	C ₃ H ₄ +	3.87×10^{-51}	3.34×10^{-38}
NO ₂ +	1.44×10^{-22}	5.22×10^{-10}	C ₂ H ₄	3.76×10^{-53}	4.78×10^{-40}
C ₂ N+	1.25×10^{-23}	6.48×10^{-11}	C ₃ H ₃ +	5.71×10^{-54}	5.25×10^{-41}
CH ₃	8.92×10^{-24}	3.40×10^{-10}	C ₃ H ₃	2.17×10^{-56}	1.18×10^{-43}
HCN	2.69×10^{-24}	2.40×10^{-10}			

Tabela B.2.19. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{máxima}$, e densidade de coluna, N, de Pinotti & Boechat-Roberty (2016). Parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_2 \text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2 \text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{máxima}$	N [cm⁻²]
OH+	7.50×10^{-7}	3.31×10^7	CH ₄	1.23×10^{-34}	3.29×10^{-22}
H ₂ O+	3.64×10^{-10}	1.39×10^4	H ₂ CO	4.44×10^{-35}	1.21×10^{-22}
CH+	3.38×10^{-10}	8.44×10^3	CO ₂	2.10×10^{-35}	3.64×10^{-22}
OH	5.70×10^{-11}	1.18×10^3	C ₂ H ₂	5.09×10^{-36}	3.18×10^{-23}
H ₂ +	3.12×10^{-11}	8.70×10^2	CH ₄ +	6.56×10^{-37}	2.56×10^{-24}
CH	1.07×10^{-12}	2.38×10^0	CO ₂ +	2.12×10^{-39}	1.19×10^{-25}
H ₃ O+	7.05×10^{-14}	1.91×10^0	C ₄ H ₂ +	4.80×10^{-40}	2.92×10^{-26}
H ₃ +	3.89×10^{-14}	1.96×10^0	C ₆ H ₅ +	4.55×10^{-45}	1.61×10^{-31}
CO+	1.37×10^{-14}	8.32×10^{-2}	C ₂ H ₄ +	1.50×10^{-48}	9.45×10^{-35}
CH ₂ +	1.32×10^{-14}	2.44×10^{-1}	C ₆ H ₇ +	1.59×10^{-49}	4.42×10^{-36}
CO	1.45×10^{-17}	6.47×10^{-4}	C ₂ H ₃	1.83×10^{-50}	5.74×10^{-37}
H ₂ O	5.13×10^{-18}	7.14×10^{-5}	C ₂ H-	2.33×10^{-51}	5.38×10^{-38}
CH ₂	6.39×10^{-19}	1.42×10^{-6}	C ₆ H ₆	1.32×10^{-54}	5.56×10^{-41}
HCO+	2.11×10^{-19}	9.07×10^{-6}	C ₆ H ₆ +	1.31×10^{-54}	5.45×10^{-41}
CH ₃ +	2.98×10^{-20}	4.45×10^{-7}	C ₃ H ₂	1.60×10^{-55}	6.10×10^{-42}
C ₂ H+	7.25×10^{-22}	4.70×10^{-8}	C ₂ H ₄	2.09×10^{-59}	3.40×10^{-47}
C ₂ H ₂ +	9.83×10^{-25}	3.66×10^{-11}	C ₅ H ₃ +	5.86×10^{-60}	1.94×10^{-46}
OH-	1.84×10^{-25}	3.15×10^{-12}	C ₃ H ₄ +	3.67×10^{-60}	2.18×10^{-46}
CH ₃	1.98×10^{-26}	5.74×10^{-14}	CH-	7.73×10^{-61}	7.82×10^{-48}
HCO	9.24×10^{-27}	1.90×10^{-14}	C ₃ H ₃ +	1.07×10^{-62}	3.61×10^{-49}
C ₂ H ₃ +	6.07×10^{-30}	1.66×10^{-16}	C ₃ H ₃	3.72×10^{-66}	1.26×10^{-52}
C ₂ H	1.02×10^{-33}	2.18×10^{-20}			

Tabela B.2.20. Resultados de abundância fracionária máxima, $x_{m\acute{a}xima}$, e densidade de coluna, N, sem levar em consideração a derivada do perfil de velocidade e densidade numérica do H I na equação de continuidade. Parâmetros de entrada: $C/O = 1.0$; $x(H_{2\ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_{2\ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; $A_V = 1.0$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$.

Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]	Espécie molecular	$x_{m\acute{a}xima}$	N [cm⁻²]
OH+	3.73×10^{-6}	1.65×10^8	HNC	4.74×10^{-28}	1.08×10^{-15}
H ₂ O+	9.07×10^{-9}	3.47×10^5	C ₂ N+	4.23×10^{-28}	1.50×10^{-14}
CH+	1.69×10^{-9}	4.23×10^4	HNO	9.18×10^{-29}	8.72×10^{-16}
OH	2.85×10^{-10}	5.92×10^3	CNC+	7.87×10^{-31}	2.72×10^{-17}
H ₂ +	1.56×10^{-10}	4.34×10^3	NH ₂	4.96×10^{-31}	4.41×10^{-18}
H ₃ O+	8.79×10^{-12}	2.39×10^2	C ₂ H	9.89×10^{-32}	3.52×10^{-18}
CH	5.42×10^{-12}	1.22×10^1	CH ₄	7.15×10^{-32}	2.06×10^{-19}
H ₃ +	9.72×10^{-13}	4.89×10^1	OCN+	2.05×10^{-32}	1.10×10^{-18}
NH+	6.83×10^{-13}	1.26×10^1	H ₂ CO	5.66×10^{-33}	1.57×10^{-20}
NO+	5.32×10^{-13}	1.85×10^1	C ₂ H ₂	6.38×10^{-34}	1.55×10^{-20}
CH ₂ +	3.29×10^{-13}	6.10×10^0	CH ₄ +	3.96×10^{-34}	1.60×10^{-21}
NH	1.79×10^{-13}	2.86×10^0	OCN	1.93×10^{-34}	5.65×10^{-21}
CO+	1.39×10^{-14}	8.75×10^{-2}	CO ₂	9.30×10^{-35}	1.67×10^{-21}
NH ₂ +	1.94×10^{-15}	1.06×10^{-1}	C ₄ H ₂ +	3.30×10^{-37}	1.99×10^{-23}
HNO+	1.29×10^{-16}	3.49×10^{-3}	CO ₂ +	9.80×10^{-39}	5.38×10^{-25}
H ₂ O	1.28×10^{-16}	1.85×10^{-3}	N ₂ O +	1.54×10^{-39}	9.25×10^{-26}
CN+	3.26×10^{-17}	1.68×10^{-3}	N ₂ O	1.06×10^{-39}	8.99×10^{-27}
CH ₂	1.59×10^{-17}	3.63×10^{-5}	NO ₂	3.71×10^{-40}	2.97×10^{-27}
CO	1.50×10^{-17}	6.75×10^{-4}	C ₆ H ₅ +	2.62×10^{-42}	8.17×10^{-29}
CH ₃ +	3.73×10^{-18}	5.58×10^{-5}	CN-	2.82×10^{-43}	7.11×10^{-30}
HCO+	1.30×10^{-18}	5.89×10^{-5}	C ₂ H ₄ +	4.50×10^{-45}	2.91×10^{-31}
N ₂ +	7.83×10^{-19}	3.20×10^{-5}	C ₆ H ₇ +	3.81×10^{-46}	9.03×10^{-33}
HCN+	1.56×10^{-19}	5.06×10^{-6}	C ₂ H ₃	1.17×10^{-47}	3.68×10^{-34}
C ₂ H+	1.86×10^{-20}	1.20×10^{-6}	C ₂ H-	2.79×10^{-49}	9.93×10^{-36}
NO	1.57×10^{-20}	2.45×10^{-7}	C ₂ N	9.12×10^{-51}	2.77×10^{-37}
CN	5.63×10^{-21}	2.13×10^{-7}	C ₆ H ₆	2.60×10^{-51}	9.27×10^{-38}
N ₂ H+	5.51×10^{-21}	1.62×10^{-7}	C ₆ H ₆ +	2.60×10^{-51}	9.09×10^{-38}
C ₂ H ₂ +	1.26×10^{-22}	4.69×10^{-9}	C ₃ H ₂	1.03×10^{-52}	3.92×10^{-39}
N ₂	7.11×10^{-23}	1.11×10^{-9}	C ₂ H ₄	2.78×10^{-55}	5.25×10^{-43}
CH ₃	2.51×10^{-24}	7.38×10^{-12}	C ₃ H ₄ +	4.90×10^{-56}	3.00×10^{-42}
OH-	9.21×10^{-25}	1.57×10^{-11}	C ₅ H ₃ +	9.47×10^{-57}	2.71×10^{-43}
NO ₂ +	2.61×10^{-25}	5.06×10^{-12}	C ₃ H ₃ +	1.45×10^{-58}	5.18×10^{-45}
HCN	5.53×10^{-26}	2.19×10^{-12}	CH	1.52×10^{-59}	5.87×10^{-46}
HCO	1.27×10^{-26}	2.87×10^{-14}	C ₃ H ₃	5.58×10^{-62}	1.87×10^{-48}
C ₂ H ₃ +	3.89×10^{-27}	1.06×10^{-13}			

C. Apêndice C – Perfis de abundância fracionária molecular

Nesta seção são mostrados os perfis de abundância fracionária obtidas das espécies moleculares envolvidas em nosso modelo químico ao longo da perda de massa atmosférica de GJ 436b e HD 209458b, usando os parâmetros de entrada B.1.1 e B.2.1, respectivamente.

C.1. Perfis GJ 436b

Parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $x(H_2 \text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2 \text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 3 \times 10^{-7}$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^5$; $A_V = 1,0$.

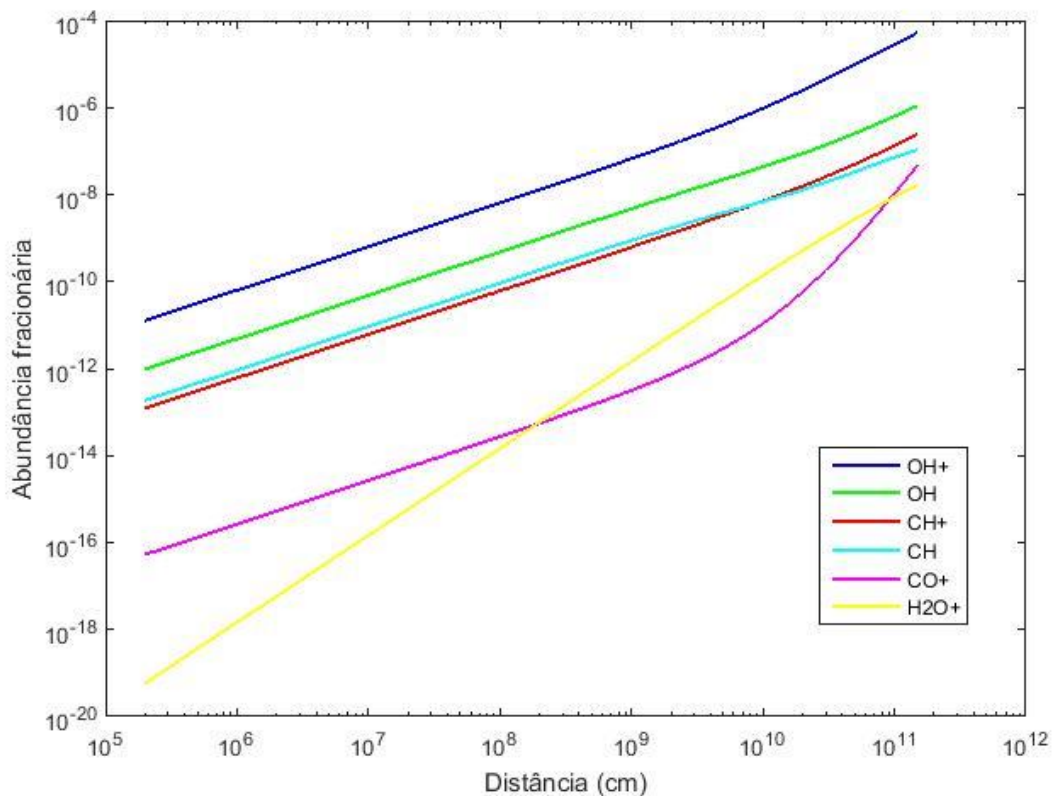


Figura C.1. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares OH^+ , OH , CH^+ , CH , CO^+ , e H_2O^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b.

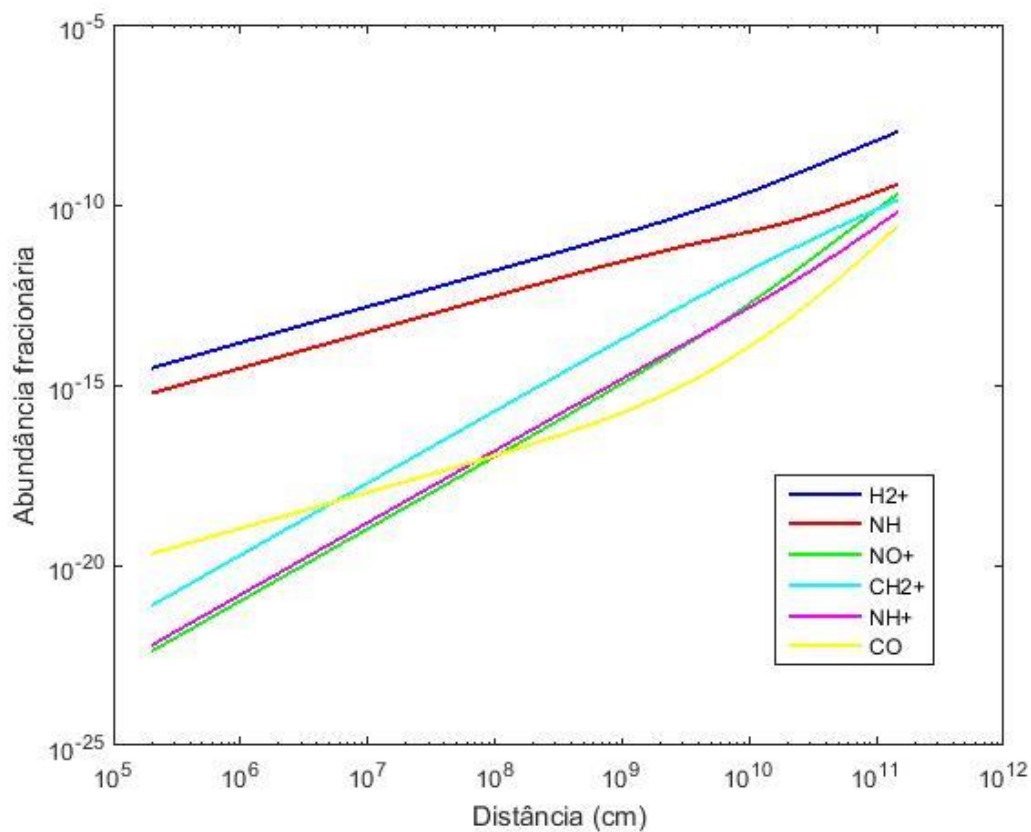


Figura C.2. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares H_2^+ , NH , NO^+ , CH_2^+ , NH^+ , e CO ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b.

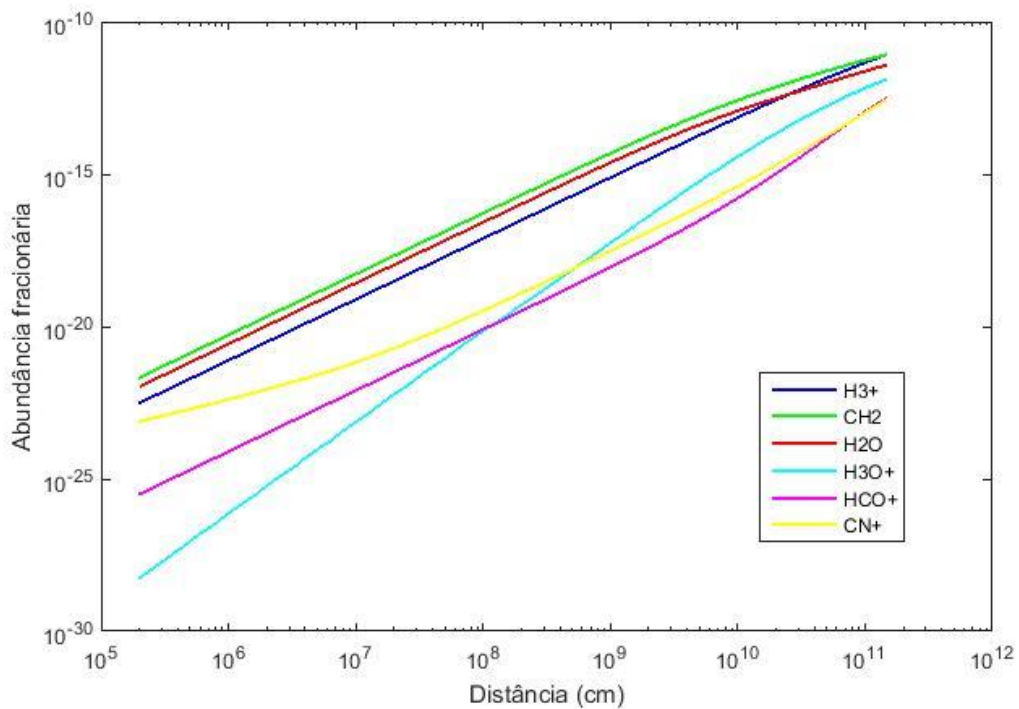


Figura C.3. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares H_3^+ , CH_2 , H_2O , H_3O^+ , HCO^+ , e CN^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b.

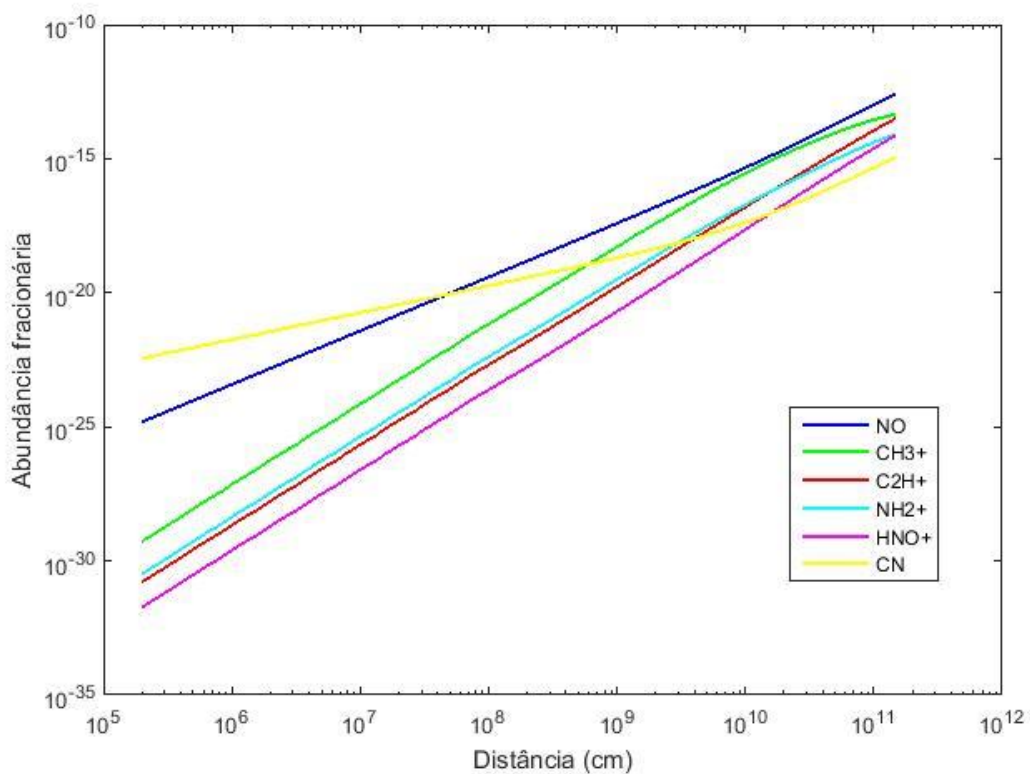


Figura C.4. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares NO , CH_3^+ , C_2H^+ , NH_2^+ , HNO^+ , e CN ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b.

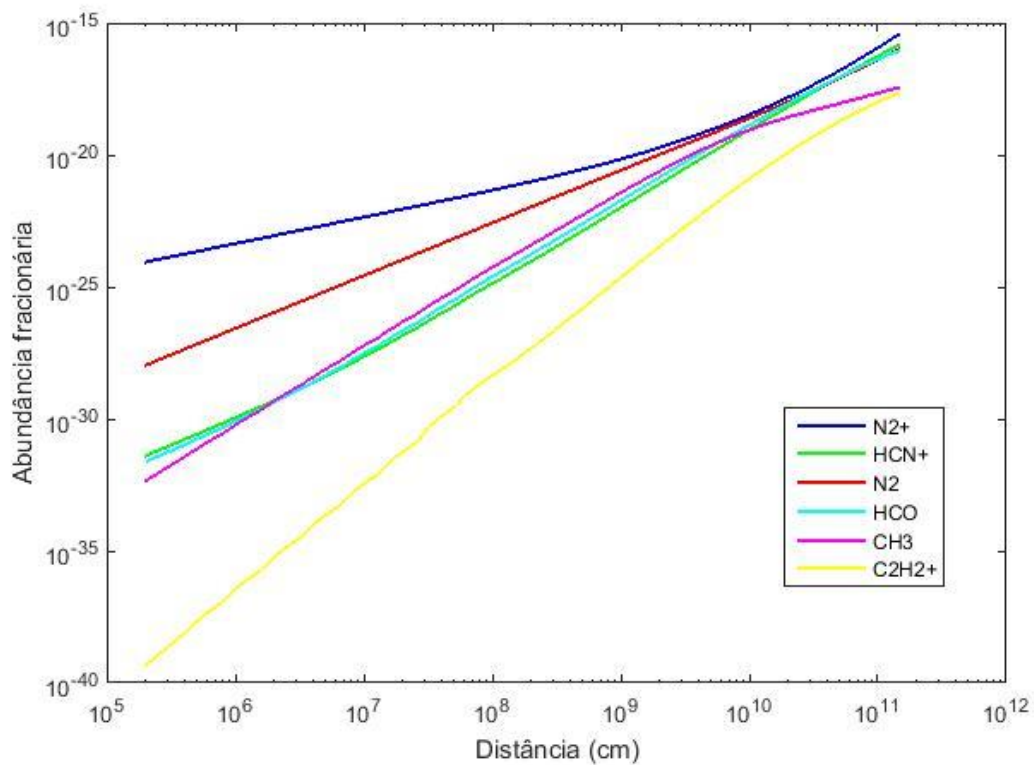


Figura C.5. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares N_2^+ , HCN^+ , N_2 , HCO , CH_3 , e $C_2H_2^+$ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b.

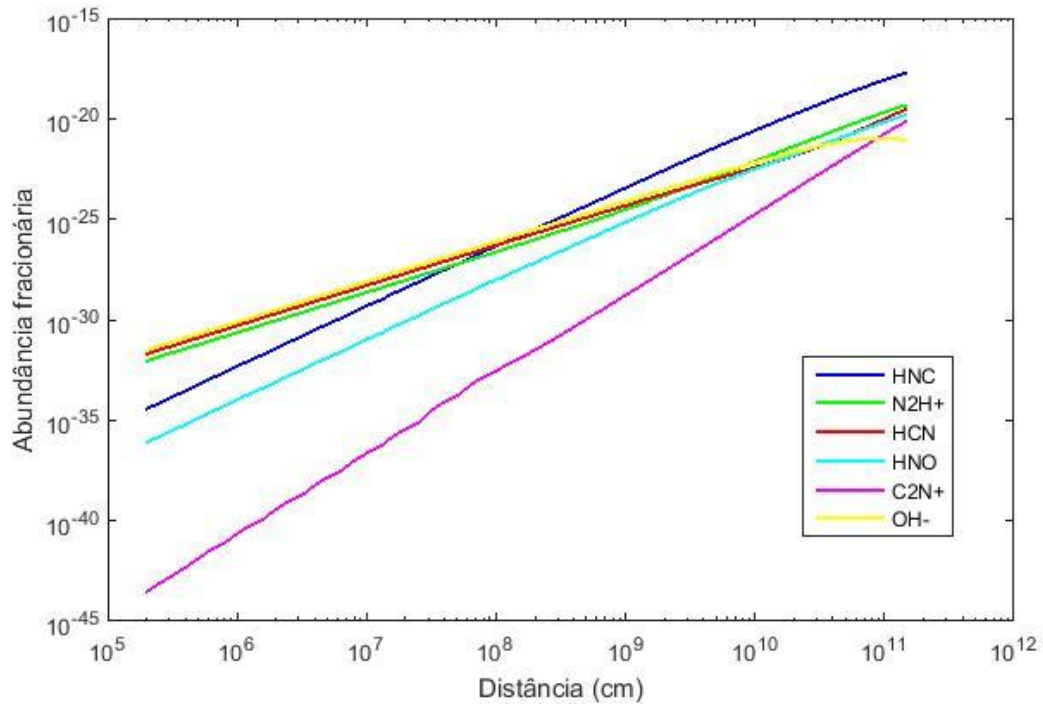


Figura C.6. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares HNC , N_2H^+ , HCN , HNO , C_2N^+ , e OH^- ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b.

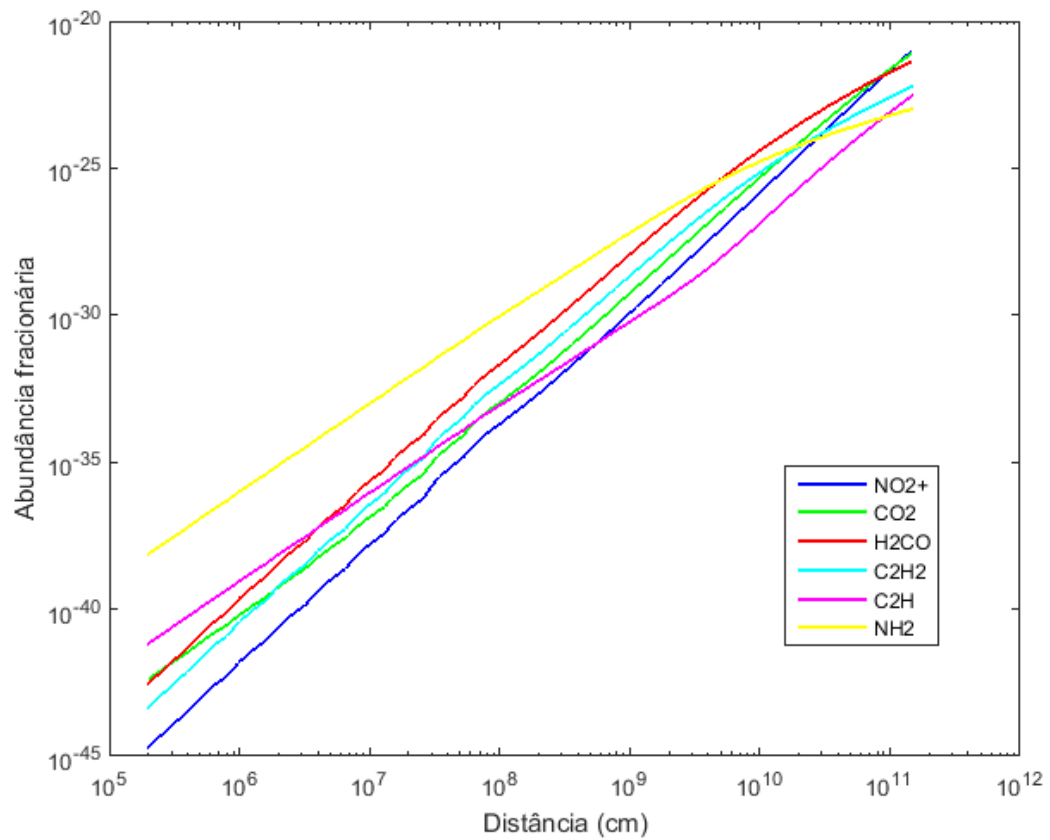


Figura C.7. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares NO_2^+ , CO_2 , H_2CO , C_2H_2 , C_2H , e NH_2 ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b.

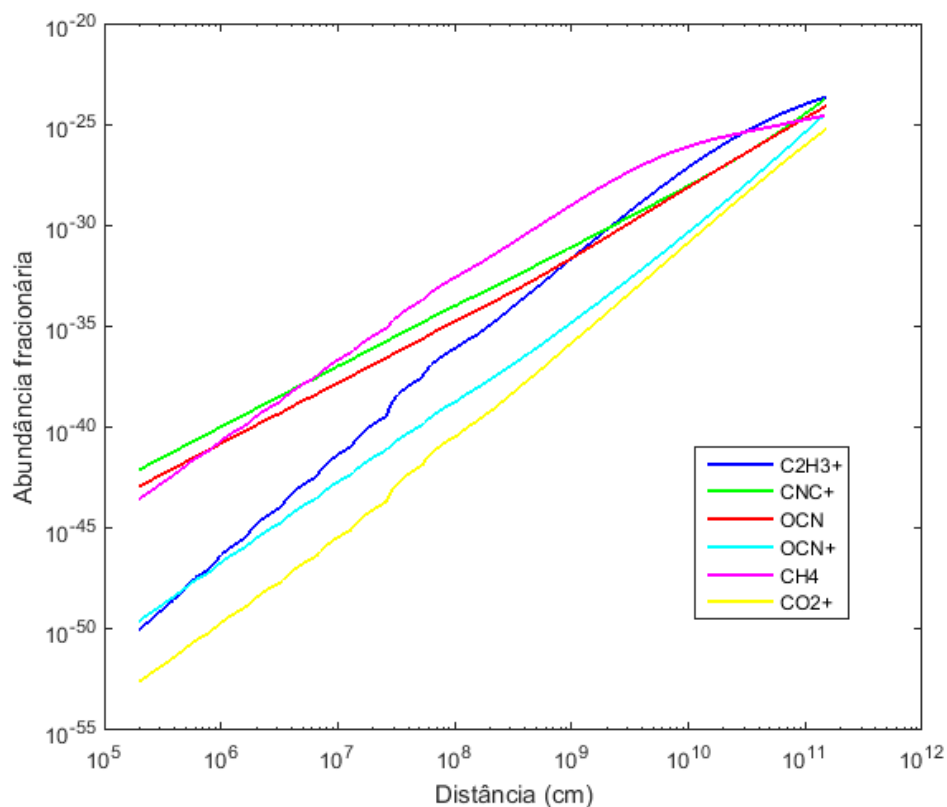


Figura C.8. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares $C_2H_3^+$, CNC^+ , OCN , OCN^+ , CH_4 , e CO_2^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b.

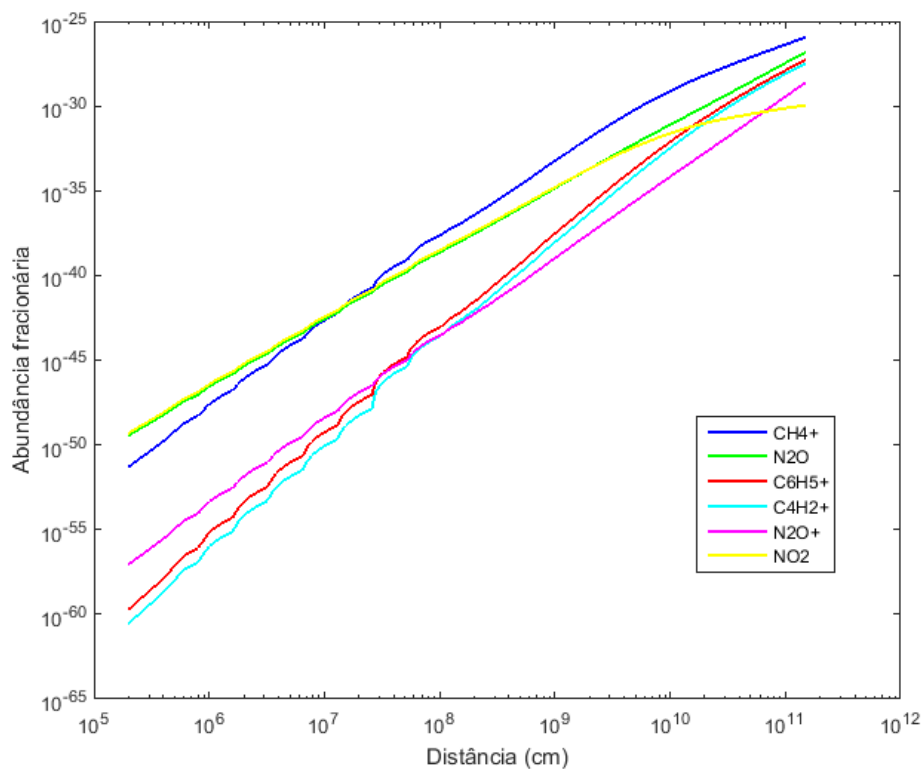


Figura C.9. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CH_4^+ , N_2O , $C_6H_5^+$, $C_4H_2^+$, N_2O^+ , e NO_2 ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b.

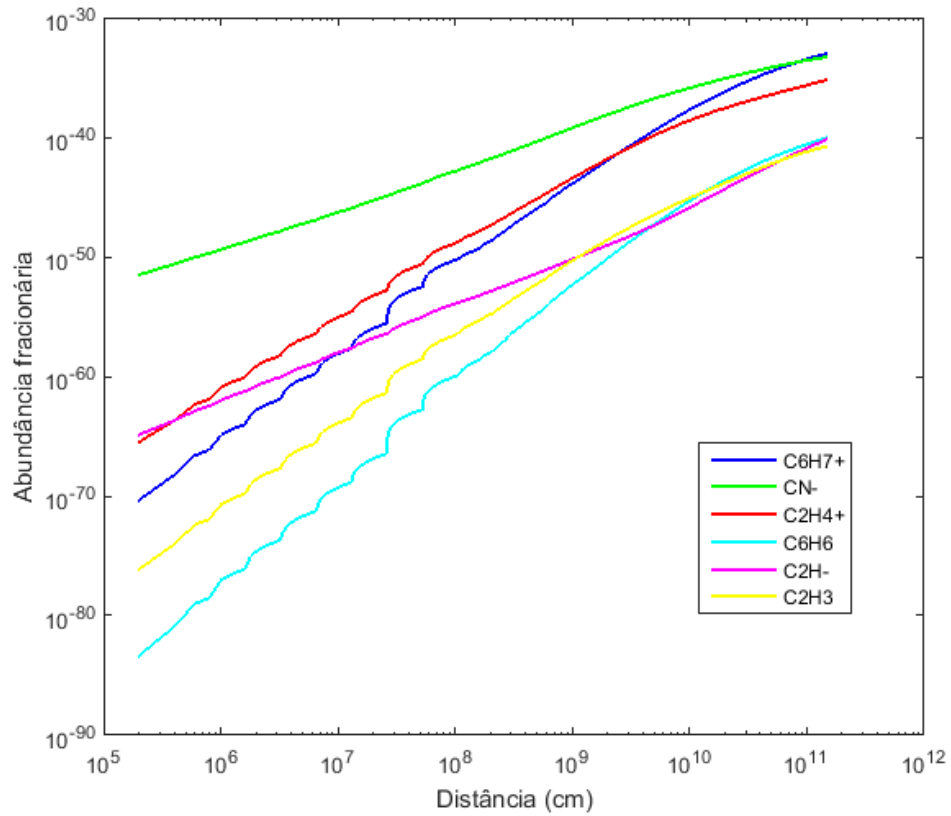


Figura C.10. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares $C_6H_7^+$, CN^- , $C_2H_4^+$, C_6H_6 , C_2H^- , e C_2H_3 ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b.

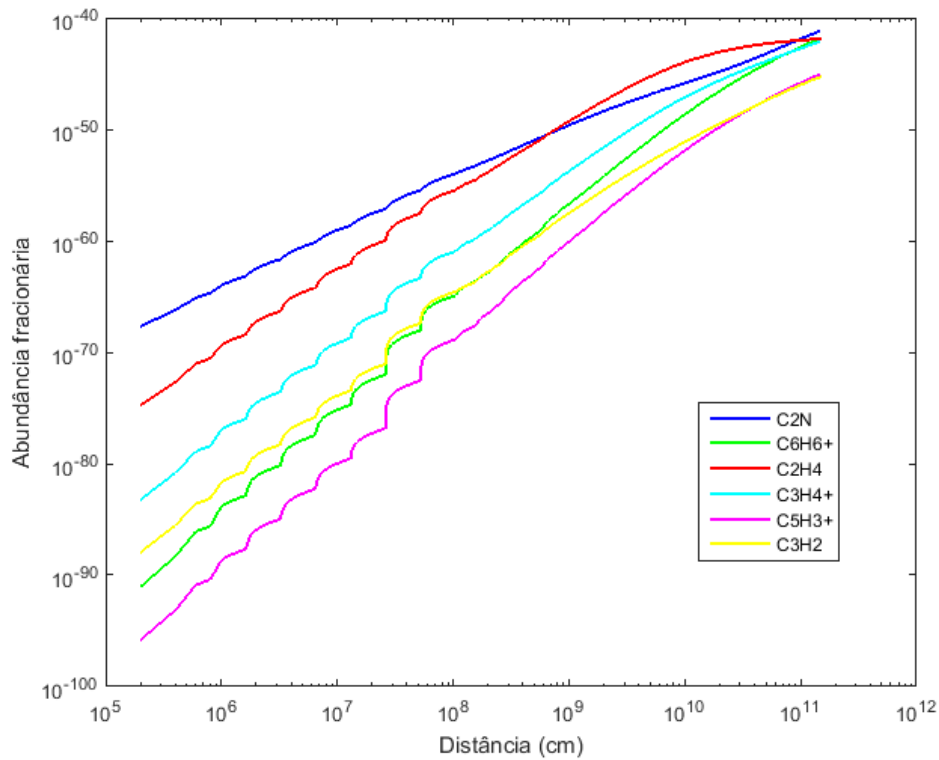


Figura C.11. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares C_2N , $C_6H_6^+$, C_2H_4 , $C_3H_4^+$, $C_5H_3^+$, e C_3H_2 ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b.

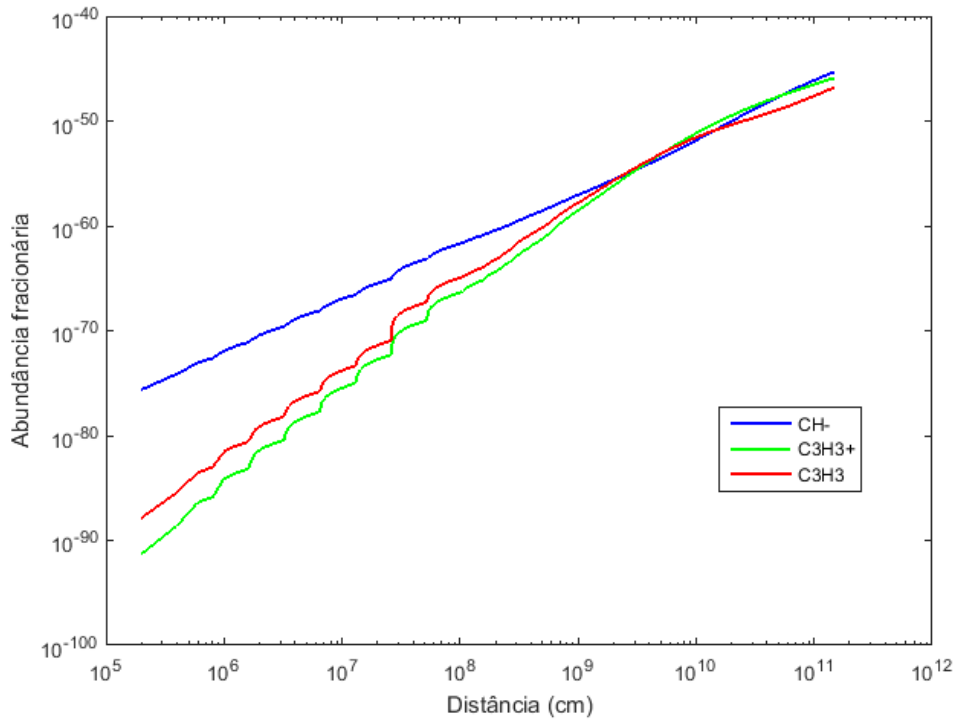


Figura C.12. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CH^- , $C_3H_3^+$, e C_3H_3 ao longo da perda de massa atmosférica do Netuno quente GJ 436b.

C.2. Perfis HD 209458b

Parâmetros de entrada: $C/O = 1,0$; $x(H_2\text{ inicial}) = 1 \times 10^{-1}$, $x(H_2\text{ final}) = 1 \times 10^{-2}$; $x(e^-) = 1 \times 10^{-3}$; Z_{\odot} ; $P = 1 \times 10^9$; $A_V = 1,0$.

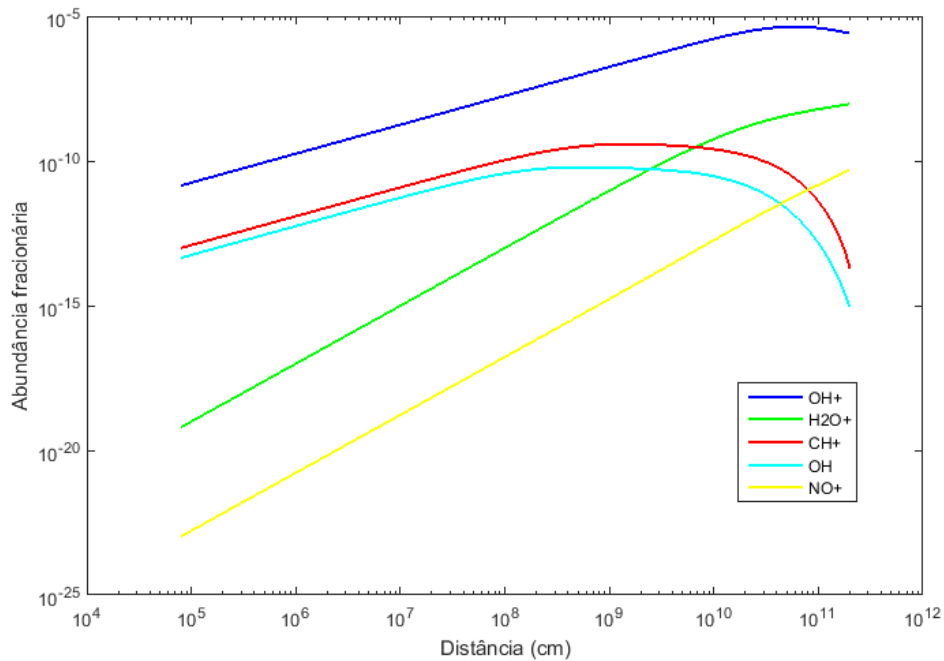


Figura C.13. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares OH^+ , H_2O^+ , CH^+ , OH , e NO^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b.

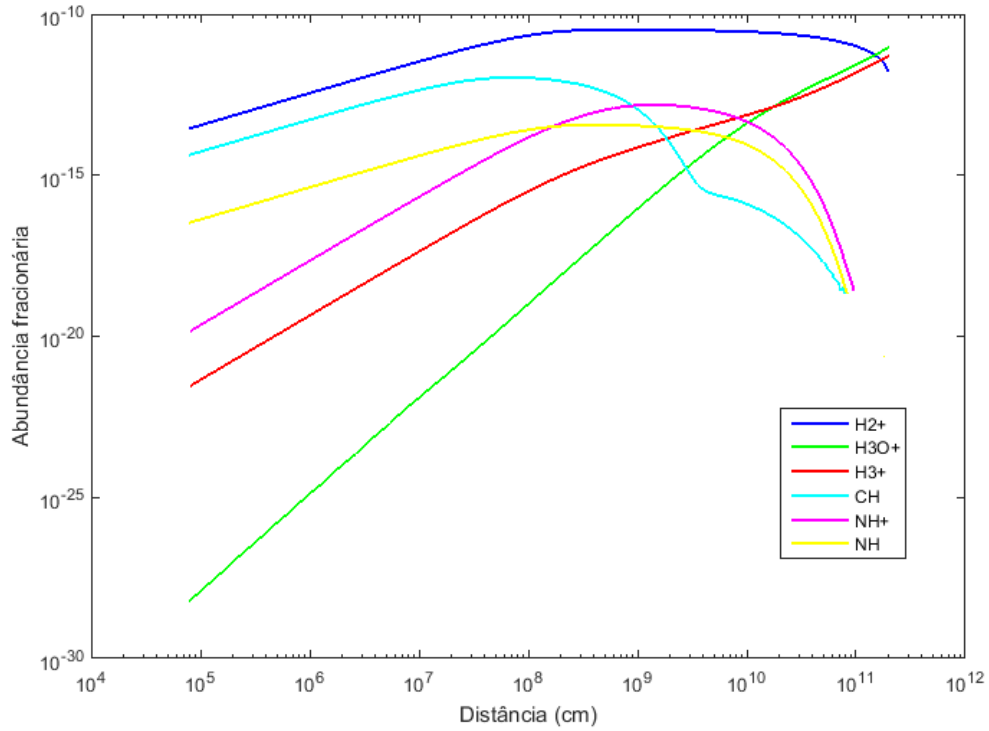


Figura C.14. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares H_2^+ , H_3O^+ , H_3^+ , CH , NH^+ , e NH ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b.

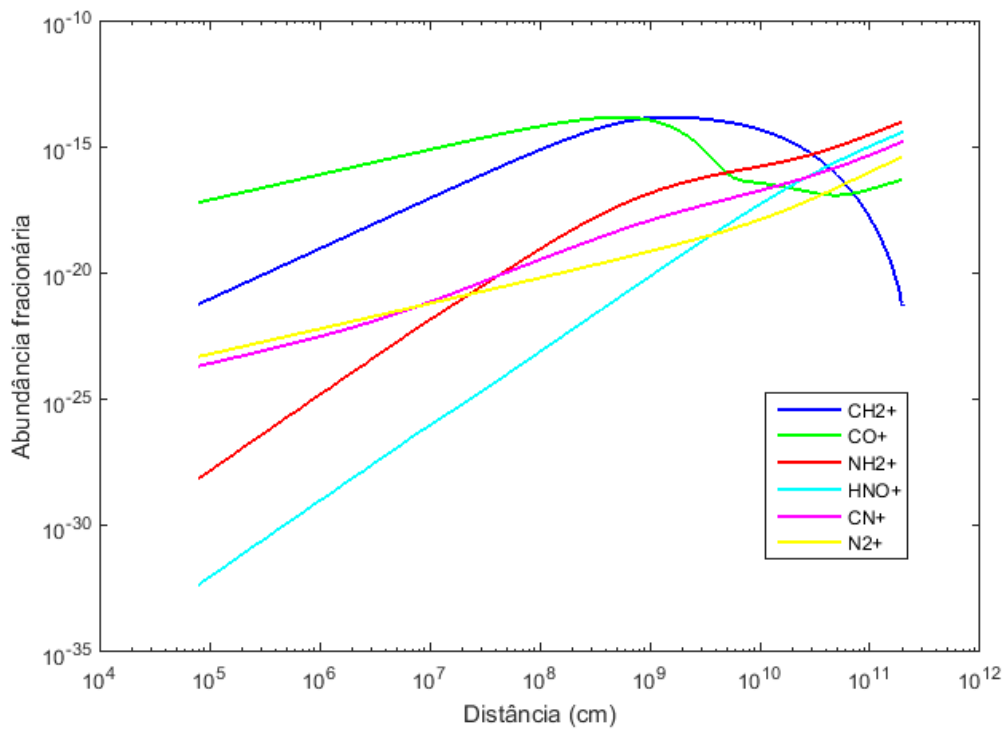


Figura C.15. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CH_2^+ , CO^+ , NH_2^+ , HNO^+ , CN^+ , e N_2^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b.

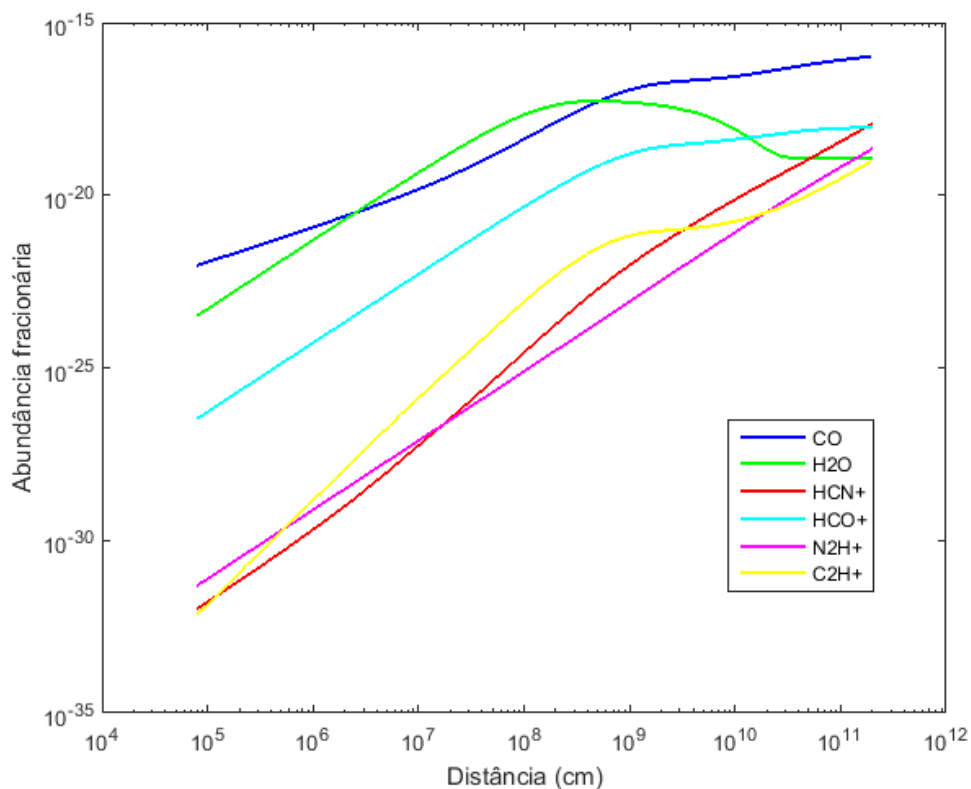


Figura C.16. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CO , H_2O , HCN^+ , HCO^+ , N_2H^+ , e C_2H^+ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b.

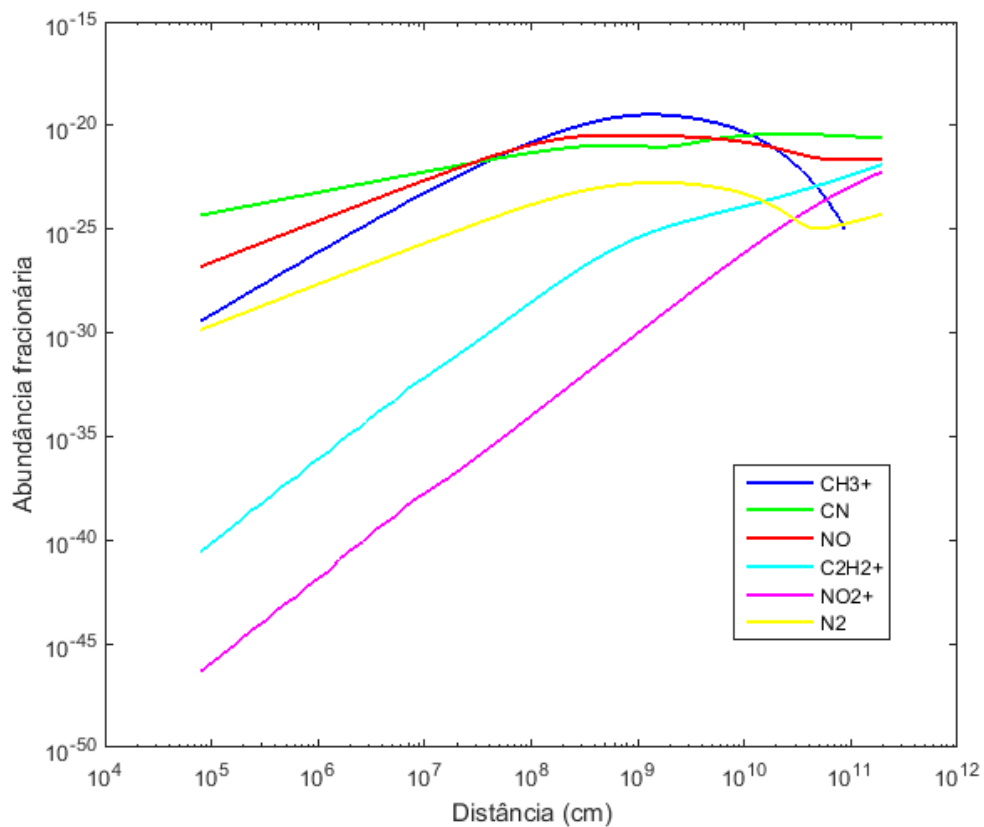


Figura C.17. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CH_3^+ , CN , NO , $C_2H_2^+$, NO_2^+ , e N_2 ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b.

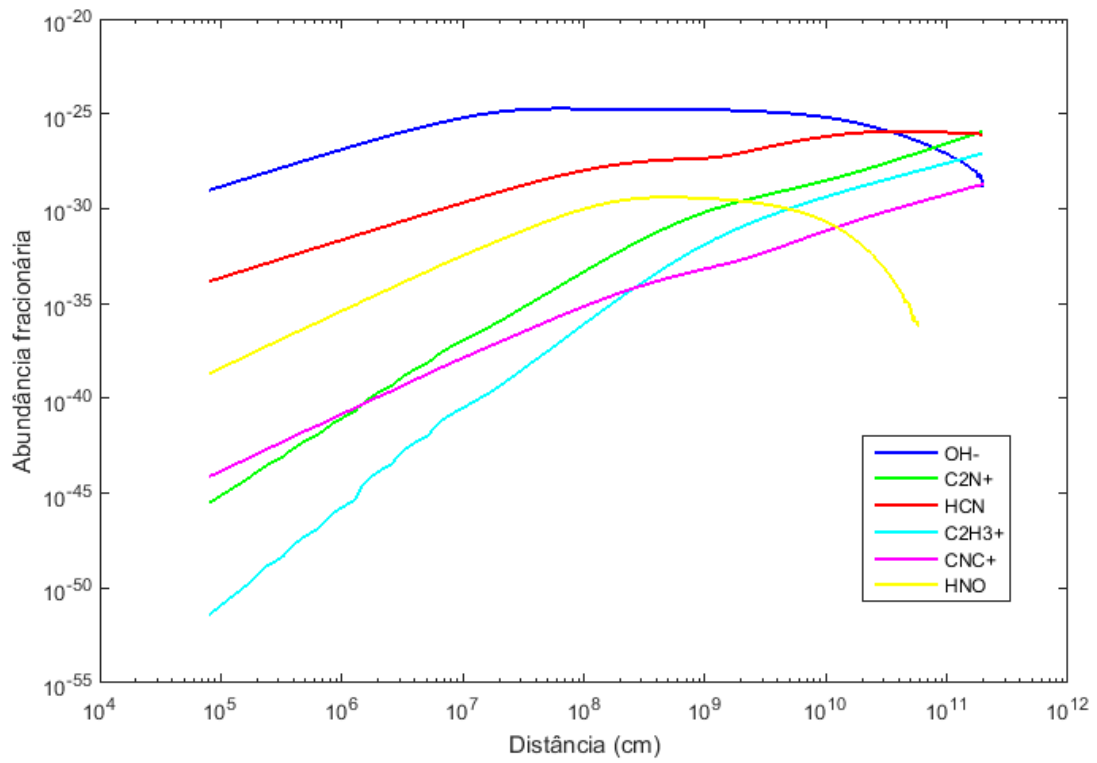


Figura C.18. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares OH^- , C_2N^+ , HCN , $C_2H_3^+$, CNC^+ , e HNO ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b.

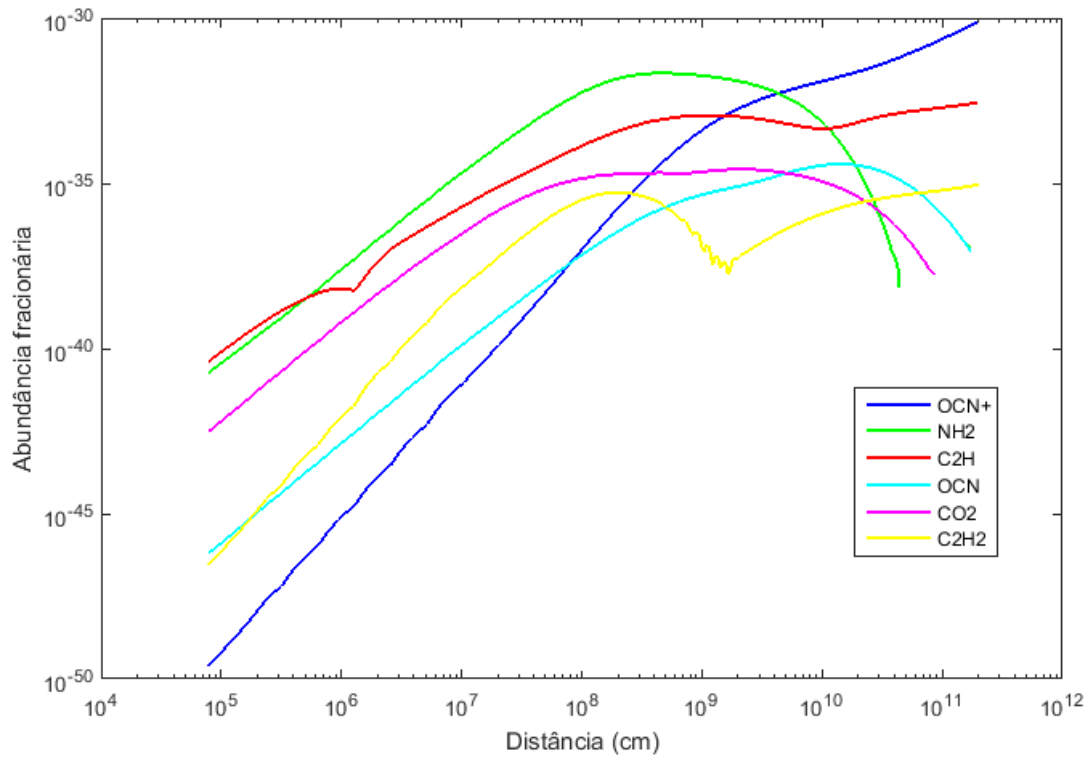


Figura C.19. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares OCN^+ , NH_2 , C_2H , OCN , CO_2 , e C_2H_2 ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b.

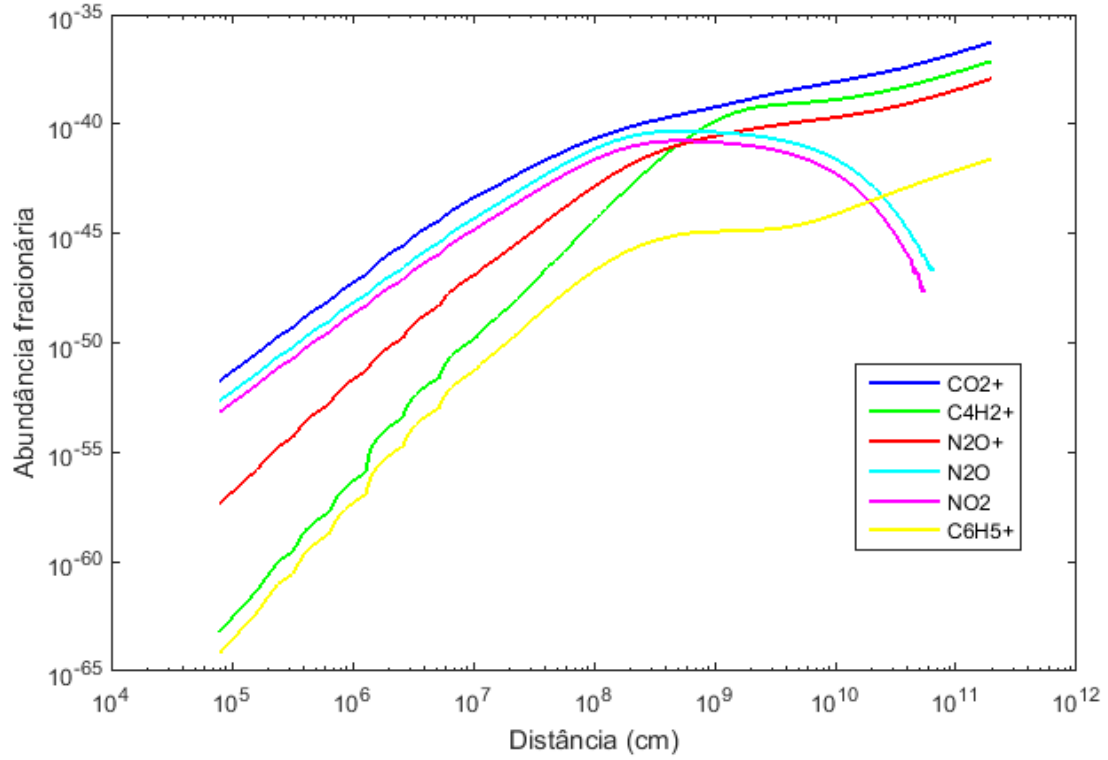


Figura C.20. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CO_2^+ , $C_4H_2^+$, N_2O^+ , N_2O , NO_2 , e $C_6H_5^+$ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b.

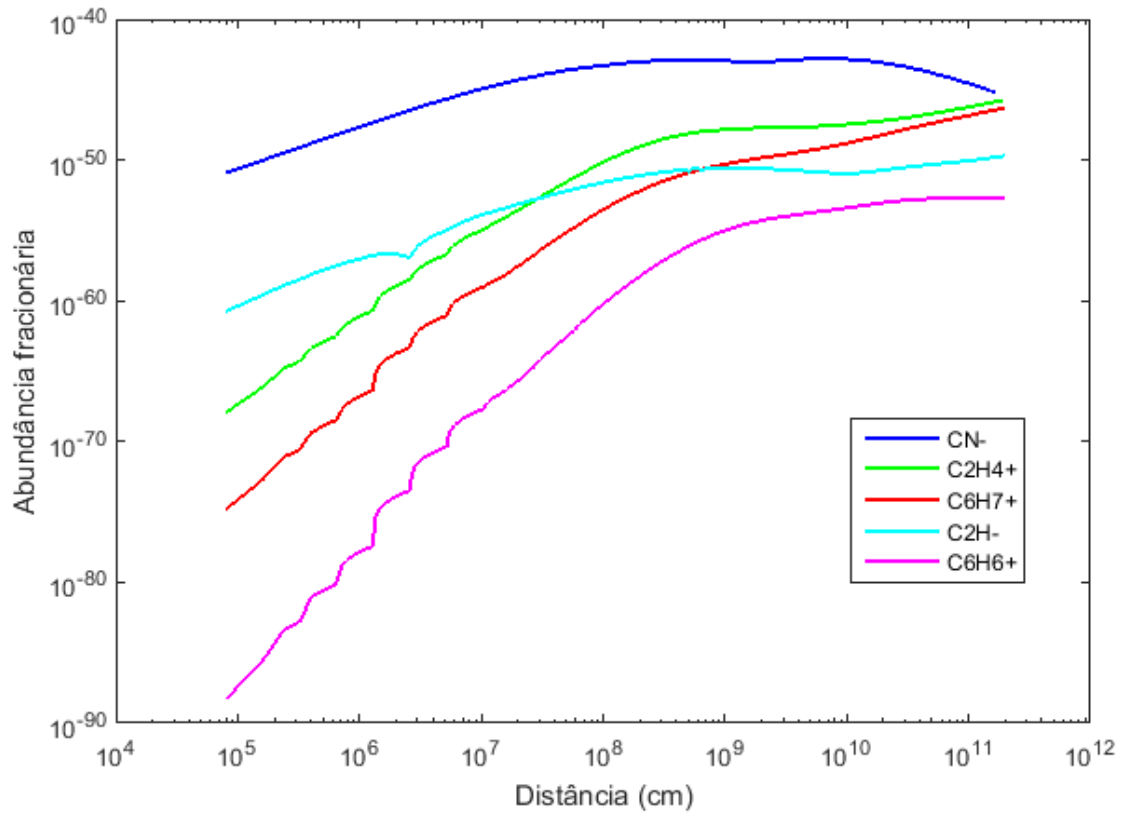


Figura C.21. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares CN^- , $C_2H_4^+$, $C_6H_7^+$, C_2H^- , e $C_6H_6^+$ ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b.

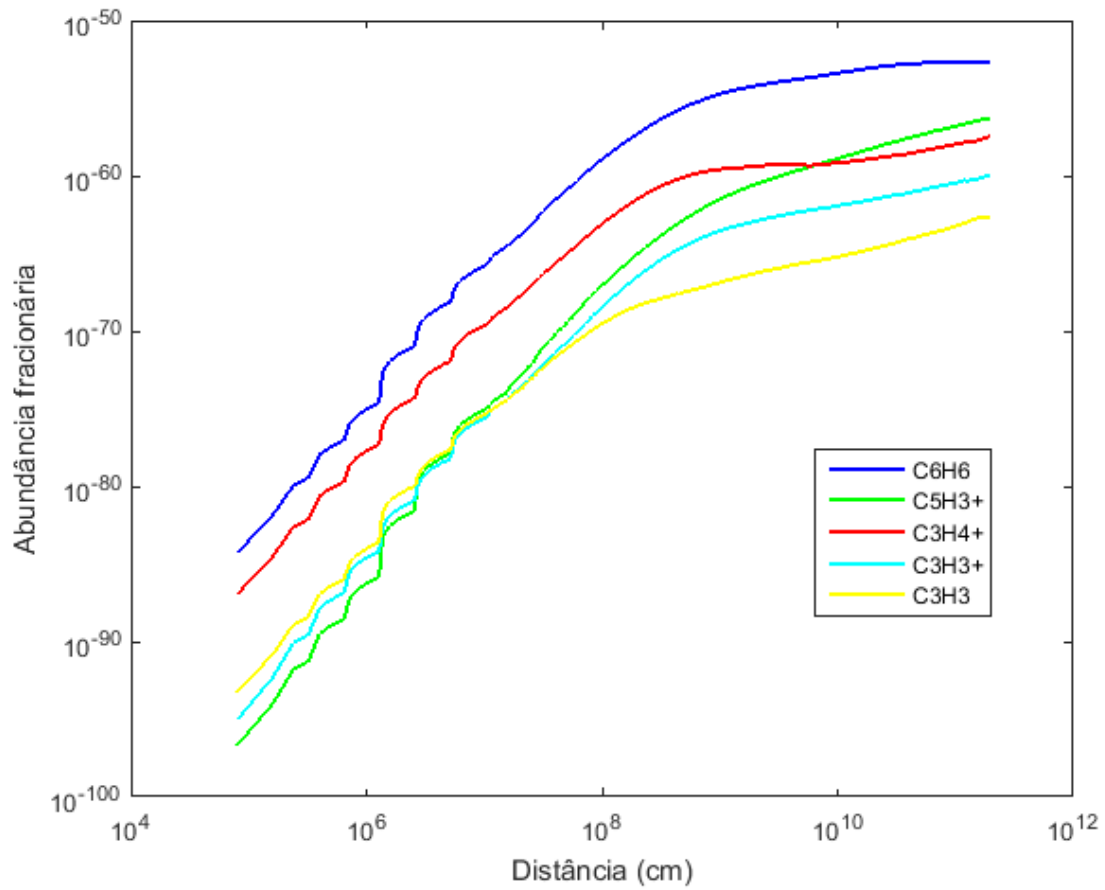


Figura C.22. Perfis de abundância fracionária das espécies moleculares C_6H_6 , $C_5H_3^+$, $C_3H_4^+$, $C_3H_3^+$, e C_3H_3 ao longo da perda de massa atmosférica do Júpiter quente HD 209458b.

Referências

Agúndez, M.; Venot, O.; Selsis, F.; Iro, N. The puzzling chemical composition of GJ 436b's atmosphere: influence of tidal heating on the chemistry. *The Astrophysical Journal*, v. 781, p. 68, 2014.

Agúndez, M.; Parmentier, V.; Venot, O.; Hersant, F.; Selsis, F. Pseudo 2D chemical model of hot Jupiter atmospheres: application to HD 209458b and HD 189733b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 564, A73, 2014b.

Ali-Dib, M. Disentangling Hot Jupiters formation location from their chemical composition. *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, v. 467, p. 2845, 2017.

Anglada-Escudé, G.; et al. A terrestrial planet candidate in a temperate orbita round Proxima Centauri. *Nature*, v. 536, p. 437, 2016.

Arakcheev, A. S.; Zhilkin, A. G.; Kaigorodov, P. V.; Bisikalo, D. V.; Kosovichev, A. G. Reduction of mass loss by the hot Jupiter WASP-12b due to its magnetic field. *Astronomy Reports*, v. 61, p. 932, 2017.

Bailey, C. *Epicurus. The extant remains. Letter to Heredotus*, p. 25. Oxford at the Clarendon Press, 1926. <https://archive.org>

Barnes, J. W.; O'Brien, D. P. Stability of satellites around close-in extrasolar giant planets. *The Astrophysical Journal*, v. 575, p. 1087, 2002.

Bean, J. L.; Benedict, G. F.; Endl, M. Metallicities of M dwarf planet hosts from spectral synthesis. *The Astrophysical Journal*, v. 653, L65, 2006.

Bean, J. L.; et al. A Hubble Space Telescope transit lightcurve for GJ 436b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 486, p. 1039, 2008.

Ben-Jaffel, L.; Ballester, G. E. Hubble Space Telescope detection of oxygen in the atmosphere of exoplanet HD 189733b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 553, A52, 2013.

Biller, B. *Detecting and Characterizing Exoplanets with Direct Imaging: Past, Present, and Future*. Proceedings of the International Astronomical Union, IAU Symposium, Volume 299, pp. 1-11, 2014.

- Boechat-Roberty, H. M.; Neves, R.; Pilling, S.; Lago, A. F.; de Souza, G. G. B. Dissociation of the benzene molecule by ultraviolet and soft X-ray in circumstellar environment. *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, v. 394, p. 810, 2009.
- Bourrier, V.; Lecavelier des Etangs, A.; Dupuy, H.; Ehrenreich, D.; Vidal-Madjar, A.; et al. Atmospheric escape from HD 189733b observed in HI Lyman- α : detailed analysis of HST/STIS september 2011 observations. *Astronomy & Astrophysics*, v. 551, A63, 2013.
- Bourrier, V.; Lecavelier des Etangs, A. 3D model of hydrogen atmospheric escape from HD 209458b and HD 189733b: radiative blow-out and stellar wind interactions. *Astronomy & Astrophysics*, v. 557, A124, 2013.
- Bourrier, V.; Lecavelier des Etangs, A.; Vidal-Madjar, A. Modeling magnesium escape from HD 209458b atmosphere. *Astronomy & Astrophysics*, v. 565, A105, 2014.
- Bourrier, V.; Lecavelier des Etangs, A.; Vidal-Madjar, A. The MgI line: a new probe of the atmospheres of evaporating exoplanets. *Astronomy & Astrophysics*, v. 573, A11, 2015b.
- Bourrier, V.; Ehrenreich, D.; Lecavelier des Etangs, A. Radiative braking in the extended exosphere of GJ 436b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 582, A65, 2015.
- Bourrier, V.; Lecavelier des Etangs, A.; Ehrenreich, D.; Tanaka, Y. A.; Vidotto, A. A. An evaporating planet in the wind: stellar wind interactions with the radiatively braked exosphere of GJ 436b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 591, A121, 2016.
- Brewer, J. M.; Fischer, D. A.; Madhusudhan, N. C/O and O/H ratios suggest some hot Jupiters originate beyond the snow line. *The Astronomical Journal*, v. 153, p. 83, 2017.
- Brogi, M.; de Kok, R. J.; et al. Carbon monoxide and water vapor in the atmosphere of the non-transiting exoplanet HD 179949b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 565, A124, 2014.
- Brown, A. G. A.; et al. Gaia data release 1. Summary of the astrometric, photometric and survey properties. *Astronomy & Astrophysics*, v. 595, A2, 2016.
- Bruno, G. *De L'infinito Universo E mondi*, 1584.
- Burrows, A.; Ibgui, L.; Hubeny, I. Optical albedo theory of strongly irradiated giant planets: the case of HD 209458b. *The Astrophysical Journal*, v. 682, p.1277, 2008.
- Butler, P. R.; Vogt, S. S.; Marcy, G. W.; et al. A Neptune-mass planet orbiting the nearby M dwarf GJ 436. *The Astrophysical Journal*, v. 617, p. 580, 2004.
- Cecchi-Pestellini, C.; Ciaravella, A.; Micela, G.; Penz, T. The relative role of EUV radiation and X-ray in the heating of hydrogen-rich exoplanet atmospheres. *Astronomy & Astrophysics*, v. 496, p. 863, 2009.

- Charbonneau, D.; Brown, T. M.; Latham, D. W.; Mayor, M. Detection of planetary transits across a Sun-like star. *The Astrophysical Journal*, v. 529, L45, 2000.
- Charbonneau, D.; Brown, T. M.; Noyes, R. W.; Gilliland, R. L. Detection of an extrasolar planet atmosphere. *The Astrophysical Journal*, v. 568, p. 377, 2002.
- Chauvin, G.; et al. Giant planet companion to 2MASSWJ1207334-393254. *Astronomy & Astrophysics*, v. 438, L25, 2005.
- Chadney, J. M.; Koskinen, T. T.; Galand, M.; Unruh, Y. C.; Sanz-Forcada, J. Effect of stellar flares on the upper atmospheres of HD 189733b and HD 209458b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 608, A75, 2017.
- Cherenkov, A. A.; Bisikalo, D. V.; Kosovichev, A. G. Influence of stellar radiation pressure on flow structure in the envelope of hot-Jupiter HD 209458b. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v.475, p. 605, 2018.
- Christie, D.; Arras, P.; Li, Z. Y. Axisymmetric simulations of hot Jupiter-stellar wind hydrodynamic interaction. *The Astrophysical Journal*, v. 820, p. 3, 2016.
- Cochran, W. D.; Hatzes, A. P.; Hancock, T. J. Constraints on the companion object to HD 114762. *The Astrophysical Journal*, v. 380, L35, 1991.
- Czesla, S.; Salz, M.; et al. Coronal X-ray emission and planetary irradiation in HD 209458. *Astronomy & Astrophysics*, v. 607, A101, 2017.
- de Kok, R. J.; Brogi, M.; et al. Detection of carbon monoxide in the high-resolution day-side spectrum of the exoplanet HD 189733b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 554, A82, 2013.
- Demory, B. O.; Gillon, M.; et al. Characterization of the hot Neptune GJ 436b with Spitzer and ground-based observations. *Astronomy & Astrophysics*, v. 475, p. 1125, 2007.
- Désert, J. M.; Lecavelier des Etangs, A.; et al. Search for carbon monoxide in the atmosphere of the transiting exoplanet HD 189733b. *The Astrophysical Journal*, v. 699, p. 478, 2009.
- Dragomir, D.; Benneke, B.; Pearson, K. A.; et al. Rayleigh scattering in the atmosphere of the warm exo-neptune GJ 3470b. *The Astrophysical Journal*, v. 814, p. 102, 2015.
- Drake, D.; et al. Spitzer transit and secondary eclipse photometry of GJ 436b. *The Astrophysical Journal*, v. 667, L199, 2007.
- Ehrenreich, D.; Désert, J. M. Mass-loss rates for transiting exoplanets. *Astronomy & Astrophysics*, v. 529, A136, 2011.
- Ehrenreich, D.; Lecavelier des Etangs, A.; Delfosse, X. HST/STIS Lyman- α observations of the quiet M dwarf GJ 436. Predictions for the exospheric transit signature of the hot neptune GJ 436b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 529, A80, 2011b.

Ehrenreich, D.; Bourrier, V.; Bonfils, X.; Lecavelier des Etangs, A.; et al. Hint of a transiting extended atmosphere on 55 Cancri b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 547, A18, 2012.

Ehrenreich, D.; Bourrier, V.; Wheatley, P. J.; Lecavelier des Etangs, A.; et al. A giant comet-like cloud of hydrogen escaping the warm Neptune-mass exoplanet GJ 436b. *Nature*, v. 522, p. 459, 2015.

Ekenbäck, A.; Holmström, M.; Wurz, P.; et al. Energetic neutral atoms around HD 209458b: estimations of magnetospheric properties. *The Astrophysical Journal*, v. 709, p. 670, 2010.

Erkaev, N. V.; Kulikov, Y. N.; Lammer, H. Roche lobe effects on the atmospheric loss from “Hot Jupiters”. *Astronomy & Astrophysics*, v. 472, p. 329, 2007.

Evans, T. M.; Sing, D. K.; Wakeford, H. R.; et al. Detection of H₂O and evidence for TiO/VO in an ultra-hot exoplanet atmosphere. *The Astrophysical Journal*, v. 822, L4, 2016.

Fisher, D. A.; Valenti, J. The Planet-Metallicity Correlation. *The Astrophysical Journal*, v. 622, p. 1102, 2005.

Fletcher, L. N.; et al. Methane and its isotopologues on Saturn from Cassini/CIRS observations. *Icarus*, v. 199, p. 351, 2009.

Fortney, J. J.; et al. A unified theory for the atmosphere of the Hot and Very Hot Jupiters: two classes of irradiated atmospheres. *The Astrophysical Journal*, v. 678, p. 1419, 2008.

Fossati, L.; Haswell, C. A.; Froning, C. S.; et al. Metals in the exosphere of the highly irradiated planet WASP-12b. *The Astrophysical Journal Letters*, v. 714, L222, 2010.

Fraine, J.; Deming, D.; Benneke, B.; et al. Water vapour absorption in the clear atmosphere of a Neptune-sized exoplanet. *Nature*, v. 513, p. 526, 2014.

France, K.; Froning, C. S.; Linsky, J. L.; Roberge, A.; et al. The ultraviolet radiation environment around M dwarf exoplanet host stars. *The Astrophysical Journal*, v. 763, p. 149, 2013.

Fruchter, A. S.; Stinebring, D. R.; Taylor, J. H. A millisecond pulsar in an eclipsing binary. *Nature*, v. 333, p. 237, 1988.

Garcia Muñoz, A. Physical and chemical aeronomy of HD 209458b. *Planetary Space Science*, v. 55, p. 1426, 2007.

Gonzalez, G. The stellar metallicity-giant planet connection. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 285, p. 403, 1997.

Guillot, T.; Burrows, A.; Hubbard, W. B.; et al. Giant planets at small orbital distances. *The Astrophysical Journal Letters*, v. 459, L35, 1996.

- Guillot, T. Interiors of giant planets inside and outside the Solar System. *Science*, v. 286, p. 72, 1999.
- Guillot, T. On the radiative equilibrium of irradiated planetary atmospheres. *Astronomy & Astrophysics*, v. 520, A27, 2010.
- Guo, J. H. Escaping particle fluxes in the atmospheres of close-in exoplanets. I. Model of hydrogen. *The Astrophysical Journal*, v. 733, p. 98, 2011.
- Guo, J. H.; Ben-Jaffel, L. The influence of the extreme ultraviolet spectral energy distribution on the structure and composition of the upper atmosphere of exoplanets. *The Astrophysical Journal*, v. 818, p. 107, 2016.
- Hallinan, G.; et al. Magnetospherically driven optical and radio aurorae at the end of the stellar main sequence. *Nature*, v. 523, p. 568, 2015.
- Haswell, C. A.; et al. Near-Ultraviolet absorption, chromospheric activity, and star-planet interactions in the WASP-12 system. *The Astrophysical Journal*, v. 760, p. 79, 2012.
- Hatzes, A. P.; Rauer, H. A definition for giant planets based on the mass-density relationship. *The Astrophysical Journal*, v. 810, L25, 2015.
- Heays, A. N.; Bosman, A. D.; Van Dishoeck, E. F. Photodissociation and photoionisation of atoms and molecules of astrophysical interest. *Astronomy & Astrophysics*, v. 602, A105, 2017.
- Heller, R. Exomoon habitability constrained by energy flux and orbital stability. *Astronomy & Astrophysics*, v. 545, L8, 2012.
- Heller, R.; Barnes, R. Exomoon habitability constrained by illumination and tidal heating. *Astrobiology*, v. 13, p. 18, 2013.
- Henry, G. W.; Marcy, G. W.; Butler, P. R.; Voght, S. S. A transiting “51 Peg-like” planet. *The Astrophysical Journal*, v. 529, L41, 2000.
- Holmström, M.; Ekenbäck, A.; Selsis, F.; et al. Energetic neutral atoms as the explanation for the high-velocity hydrogen around HD 209458b. *Nature*, v. 451, p. 970, 2008.
- Hu, R.; Seager, S.; Bains, W. Photochemistry in terrestrial exoplanet atmospheres. I. Photochemistry model and benchmark cases. *The Astrophysical Journal*, v. 761, p. 166, 2012.
- Ionov, D. E.; Shematovich, V. I.; Pavlyuchenkov, Ya. N. Influence of photoelectrons on the structure and dynamics of the upper atmosphere of a hot Jupiter. *Astronomy Reports*, v. 61, p. 387, 2017.
- Jacob, W. S. On certain anomalies presented by the binary star 70 Ophiuchi. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 15, p. 228, 1855.

- Janson, M.; Brandt, T. D.; Kuzuhara, M.; et al. Direct imaging detection of methane in the atmosphere of GJ 504b. *The Astrophysical Journal Letters*, v. 778, L4, 2013.
- Jaritz, G. F.; Endler, S.; et al. Roche lobe effects on expanded upper atmospheres of short-periodic giant exoplanets. *Astronomy & Astrophysics*, v. 439, p. 771, 2005.
- Johnstone, C. P.; Güdel, M. The coronal temperatures of low-mass main-sequence stars. *Astronomy & Astrophysics*, v. 578, A129, 2015.
- Kane, S. R.; Gelino, D. M. Distinguishing between stellar and planetary companions with phase monitoring. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v.424, p. 779, 2012.
- Kashyap, V. L.; Drake, J. J.; Saar, S. H. Extrasolar giant planets and X-ray activity. *The Astrophysical Journal*, v. 687, p. 1339, 2008.
- Kipping, D. M. Transit timing effects due to an exomoon. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 392, p. 181, 2009.
- Kislyakova, K. G.; Holmström, M.; Lammer, H.; Odert, P.; Khodachenko, M. L. Magnetic moment and plasma environment of HD 209458b as determined from Ly α observations. *Science*, v. 346, p. 981, 2014a.
- Khodachenko, M. L.; Shaikhislamov, I. F.; Lammer, H.; Prokopov, P. A. Atmosphere expansion and mass loss of close-orbit giant exoplanets heated by stellar XUV. II. Effects of planetary magnetic field; structuring of inner magnetosphere. *The Astrophysical Journal*, v. 813, p. 50, 2015.
- Knutson, H. A.; et al. A map of the day-night contrast of the extra-solar planet HD 189733b. *Nature*, v. 447, p. 183, 2007.
- Knutson, H. A.; Benneke, B.; Deming, D.; Homeier, D. A featureless transmission spectrum for the Neptune-mass exoplanet GJ 436b. *Nature*, v. 505, p. 66, 2014.
- Kooij, D. M. Über die zersetzung des gasförmigen phosphorwasserstoffs. *Zeitschrift für physikalische chemie*, v. 12, p. 155, 1893.
- Koskinen, T. T.; Harris, M. J.; Yelle, R. V.; Lavvas, P. The escape of heavy atoms from the ionosphere of HD 209458b. I. A photochemical-dynamical model of the thermosphere. *Icarus*, v. 226, p. 1678, 2013a.
- Koskinen, T. T.; Harris, M. J.; Yelle, R. V.; Lavvas, P. The escape of heavy atoms from the ionosphere of HD 209458b. II. Interpretation of the observations: *Icarus*, v. 226, p. 1695, 2013b.
- Koskinen, T.T.; Yelle, R. V.; Lavvas, P.; Cho, Y-K. Electrodynamics on extrasolar giant planets. *The Astrophysical Journal*, v. 796, p. 16, 2014.

- Kulow, J. R.; France, K.; Linsky, J.; Parke Loyd, R. O. Lyman- α transit spectroscopy and the neutral hydrogen tail of the Hot Neptune GJ 436b. *The Astrophysical Journal*, v. 786, p. 132, 2014.
- Lammer, H.; Selsis, F.; Ribas, I.; et al. Atmospheric loss of exoplanets resulting from stellar x-ray and extreme-ultraviolet heating. *The Astrophysical Journal*, v. 598, L121, 2003.
- Lammer, H.; Erkaev, N. V.; et al. Probing the blow-off criteria of hydrogen-rich 'Super-Earths'. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 430, p. 1247, 2013.
- Lammer, H.; Khodachenko, M. *Characterizing stellar and exoplanetary environments*. Springer International, Switzerland, p. 4, 2015.
- Lang, P.; Jardine, M.; Morin, J.; Donati, J. F.; Jeffers, S.; Vidotto, A. A.; Fares, R. Modelling the hidden magnetic field of low-mass stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 439, p. 2122, 2014.
- Latham, D. W. ; Stefanik, R. P.; Mazeh, T.; Mayor, M.; Burki, G. The unseen companion of HD 114762 – a probable brown dwarf. *Nature*, v. 339, p. 38, 1989.
- Lavie, B.; Ehrenreich, D.; Bourrier, V.; Lecavelier des Etangs, A.; Vidal-Madjar, A.; et al. The long egress of GJ 436b's giant exosphere. *Astronomy & Astrophysics*, v. 605, L7, 2017.
- Lavvas, P.; Koskinen, T.; Yelle, R. V. Electron densities and alkali atoms in exoplanet atmospheres. *The Astrophysical Journal*, v. 796, p. 15, 2014.
- Lavvas, P.; Koskinen, T. Aerosol properties of the atmospheres of extrasolar giant planets. *The Astrophysical Journal*, v. 847, p. 32, 2017.
- Lecavelier des Etangs, A.; Vidal-Madjar, A.; et al. Atmospheric escape from hot Jupiters. *Astronomy & Astrophysics*, v. 418, L1, 2004.
- Lecavelier des Etangs, A. A diagram to determine the evaporation status of extrasolar planets. *Astronomy & Astrophysics*, v. 461, p. 1185, 2007.
- Lecavelier des Etangs, A.; Pont, F.; Vidal-Madjar, A.; Sing, D. Rayleigh scattering in the transit spectrum of HD 189733b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 481, L83, 2008a.
- Lecavelier des Etangs, A.; Vidal-Madjar, A.; Désert, J. M.; Sing, D. Rayleigh scattering by H₂ in the extrasolar planet HD 209458b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 485, p. 865, 2008b.
- Lecavelier des Etangs, A.; Ehrenreich, D.; Vidal-Madjar, A.; et al. Evaporation of the planet HD 189733b observed in HI Lyman- α . *Astronomy & Astrophysics*, v. 514, A72, 2010.

- Lecavelier des Etangs, A.; Bourrier, V.; Wheatley, P. J.; Dupuy, H.; Ehrenreich, D.; Vidal-Madjar, A.; et al. Temporal variations in the evaporating atmosphere of the exoplanet HD 189733b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 543, L4, 2012.
- Lewis, N. K.; et al. Atmospheric circulation of eccentric hot Neptune GJ 436b. *The Astrophysical Journal*, v. 720, p. 344, 2010.
- Liang, M. C.; et al. Source of atomic hydrogen in the atmosphere of HD 209458b. *The Astrophysical Journal*, v. 596, L247, 2003.
- Line, M. R.; Vasisht, G.; et al. Thermochemical and photochemical kinetics in cooler hydrogen-dominated extrasolar planets: a methane-poor GJ 436b?. *The Astrophysical Journal*, v. 738, p. 32, 2011.
- Line, M. R.; Knutson, H.; Wolf, A. S.; Yung, Y. L. A systematic retrieval analysis of secondary eclipse spectra. II. A uniform analysis of nine planets and their C to O ratios. *The Astrophysical Journal*, v. 783, p. 70, 2014.
- Linsky, J. L.; Yang, H.; France, K.; Froning, C. S.; Green, J. C.; et al. Observations of mass loss from the transiting exoplanet HD 209458b. *The Astrophysical Journal*, v. 717, p. 1291, 2010.
- Linsky, J. L.; France, K.; Ayres, T. R. Computing intrinsic Ly α fluxes of F5 V to M5 V stars. *The Astrophysical Journal*, v. 766, p. 69, 2013.
- Linsky, J. L.; Fontenla, J.; France, K. The intrinsic extreme ultraviolet fluxes of F5 V to M5 V stars. *The Astrophysical Journal*, v. 780, p. 61, 2014.
- Lodders, K. Solar system abundances and condensation temperatures of the elements. *The Astrophysical Journal*, v. 591, p. 1220, 2003.
- Lothringer, J. D.; Benneke, B.; Crossfield, I. J. M.; Henry, G. W.; Morley, C.; et al. An HST/STIS optical transmission spectrum of warm Neptune GJ 436b. *The Astronomical Journal*, v. 155, p. 66, 2018.
- Louden, T.; Wheatley, P. J.; Briggs, K. Reconstructing the high energy irradiation of the evaporating hot Jupiter HD 209458b. *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, v. 464, p. 2396, 2017.
- Madhusudhan, N.; Harrington, J.; et al. A high C/O ratio and weak thermal inversion in the atmosphere of exoplanet WASP-12b. *Nature*, v. 469, p. 64, 2011.
- Madhusudhan, N.; Seager, S. High metallicity and non-equilibrium chemistry in the dayside atmosphere of hot-Neptune GJ 436b. *The Astrophysical Journal*, v.729, p. 41, 2011b.
- Madhusudhan, N. C/O ratio as a dimension for characterizing exoplanetary atmospheres. *The Astrophysical Journal*, v. 758, p. 36, 2012.

- Madhusudhan, N.; Amin, M. A.; Kennedy, G. M. Toward chemical constraints on Hot Jupiter migration. *The Astrophysical Journal*, v. 794, L12, 2014.
- Marois, C.; et al. Direct imaging of multiple planets orbiting the star HR 8799. *Science*, v. 322, p. 1348, 2008.
- Matsakos, T.; Uribe, A.; Königl, A. Classification of magnetized star-planet interactions: bow shocks, tails, and inspiraling flows. *Astronomy & Astrophysics*, v. 578, A6, 2015.
- Mayor, M.; Queloz, D. A Jupiter-mass companion to a solar-type star. *Nature*, v. 378, p. 355, 1995.
- McElroy, D.; Walsh, C.; Markwick, A. J.; Cordiner, M. A.; Smith, K.; Millar, T. J. The UMIST database for astrochemistry 2012. *Astronomy & Astrophysics*, v. 550, A36, 2013.
- Miller-Ricci Kempton, E.; Zahnle, K.; Fortney, J. J. The atmospheric chemistry of GJ 1214b: photochemistry and clouds. *The Astrophysical Journal*, v. 745, p. 3, 2012.
- Mordasini, C.; Alibert, B.; Naef, D.; et al. Giant planet formation by core accretion. arXiv: 0710.5667v1
- Morley, C. V.; Fortney, J. J.; Kempton, E. M. R.; et al. Quantitatively assessing the role of clouds in the transmission spectrum of GJ 1214b. *The Astrophysical Journal*, v. 775, p. 33, 2013.
- Morley, C. V.; Knutson, H.; Line, M.; et al. Forward and inverse modeling of the emission and transmission spectrum of GJ 436b: investigating metal enrichment, tidal heating, and clouds. *Astronomy Journal*, v. 153, p. 86, 2017a.
- Moses, J. I.; Visscher, C.; Fortney, J. J.; et al. Disequilibrium carbon, oxygen, and nitrogen chemistry in the atmospheres of HD 189733b and HD 209458b. *The Astrophysical Journal*, v. 737, p. 15, 2011.
- Moses, J. I.; Madhusudhan, N.; et al. Chemical consequences of the C/O ratio on Hot Jupiters: examples from WASP-12b, CoRoT-2b, XO-1b, and HD 189733b. *The Astrophysical Journal*, v. 763, p. 25, 2013a.
- Moses, J. I.; Line, M. R.; et al. Compositional diversity in the atmospheres of Hot Neptunes, with application to GJ 436b. *The Astrophysical Journal*, v. 777, p. 34, 2013b.
- Moulton, F. R. The limits of temporary stability of satellite motion, with an application to the question of the existence of an unseen body in the binary system 70 Ophiuchi. *Astronomical Journal*, v. 20, p. 33, 1899.
- Murray-Clay, R. A.; Chiang, E. I.; Murray, N. Atmospheric escape from hot Jupiters. *The Astrophysical Journal*, v. 693, p. 23, 2009.

- Nikolov, N.; Sing, D. K.; et al. Hubble Space Telescope hot Jupiter transmission spectral survey: a detection of Na and strong optical absorption in HAT-P-1b. *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, v. 437, p. 46, 2014.
- Öberg, K. I.; Murray-Clay, R.; Bergin, E. A. The effects of snowlines on C/O in planetary atmospheres. *The Astrophysical Journal*, v. 743, L16, 2011.
- Ohno, K.; Okuzumi, S. Microphysical modeling of mineral clouds in GJ 1214b and GJ 436b: predicting upper limits on the cloud-top height. *The Astrophysical Journal*, v. 859, p. 34, 2018.
- Owen, J. E.; Adams, F. C. Magnetically controlled mass-loss from extrasolar planets in close orbits. *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, v. 444, p. 3761, 2014.
- Owen, J. E.; Alvarez, M. A. UV driven evaporation of close-in planets: energy-limited, recombination-limited, and photon-limited flows. *The Astrophysical Journal*, v. 816, p. 34, 2016.
- Parke Loyd, R. O.; Koskinen, T.T.; France, K.; Schneider, C.; Redfield, S. Ultraviolet C II and Si III transit spectroscopy and modeling of the evaporating atmosphere of GJ 436b. *The Astrophysical Journal Letters*, v. 834, L17, 2017.
- Parmentier, V.; et al. 3D mixing in hot Jupiters atmospheres. I. Application to the day/night cold trap in HD 209458b. *Astronomy & Astrophysics*, v. 558, p. 91, 2013.
- Penz, T.; Erkaev, N. V.; Kulikov, Y. N.; Langmayr, D.; Lammer, H.; et al. Mass loss from “hot Jupiters” – implications for COROT discoveries. Part II. Long time termal atmospheric evaporation modeling. *Planetary Space Science*, v. 56, p. 1260, 2008.
- Penz, T.; Micela, G.; Lammer, H. Influence of the evolving stellar X-ray luminosity distribution on exoplanetary mass loss. *Astronomy & Astrophysics*, v. 477, p. 309, 2008b.
- Petzold, L. R. DASSL: Differential algebraic system solver. Technical Report Category #D2A2, Sandia National Laboratories, Livermore, California, 1983.
- Pinotti, R.; Boechat-Roberty, H. M. Molecular formation along the atmospheric mass loss of HD 209458b and similar Hot Jupiters. *Planetary and Space Science*, v. 121, p. 83, 2016.
- Pont, F.; Knutson, H.; Gilliland, R. L.; Moutou, C.; Charbonneau, D. Detection of atmospheric haze on an extrasolar planet: the 0.55-1.05 μm transmission spectrum of HD 189733b with the Hubble Space Telescope. *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, v. 385, p. 109, 2008.
- Pont, F.; Gilliland, R. L.; Knutson, H.; Holman, M.; Charbonneau, D. Transit infrared spectroscopy of the hot Neptune around GJ 436 with the Hubble Space Telescope. *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, v. 393, L6, 2009.

- Poppenhaeger, K.; Robrade, J.; Schmitt, J. H. M. M. Coronal properties of planet-bearing stars (corrigendum). *Astronomy & Astrophysics*, v. 529, C1, 2011.
- Ribas, I.; Guinan, E. F.; Güdel, M.; Audard, M. Evolution of the solar activity over time and effects on planetary atmospheres. I. High-energy irradiances (1-1700 Å). *The Astrophysical Journal*, v. 622, p. 680, 2005.
- Ribas, I.; Porto de Mello, G. F.; Ferreira, L. D.; et al. Evolution of the solar activity over time and effects on planetary atmospheres. II. κ Ceti, an analog of the Sun when life arose on Earth. *The Astrophysical Journal*, v. 714, p. 384, 2010.
- Richardson, L.J.; Deming, D.; Horning, K.; Seager, S.; Harrington, J. A spectrum of an extrasolar planet. *Nature*, v. 445, p. 892, 2007.
- Rimmer, P. B.; Helling, Ch. A chemical kinetics network for lightning and life in planetary atmospheres. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 224, p. 9, 2016.
- Robrade, J.; Schmitt, H. M. M. X-ray properties of active M dwarfs as observed by XMM-Newton. *Astronomy & Astrophysics*, v. 435, p. 1073, 2005.
- Saffe, C.; Gómez, M.; Chavero, C. On the ages of exoplanet host stars. *Astronomy & Astrophysics*, v. 443, p. 609, 2006.
- Sahu, K.; et al. Transiting extrasolar planetary candidates in the galactic bulge. *Nature*, v. 443, p. 534, 2006.
- Sanz-Forcada, J.; et al. A scenario of planet erosion by coronal radiation. *Astronomy & Astrophysics*, v. 511, L8, 2010.
- Sanz-Forcada, J.; et al. Estimation of the XUV radiation onto close planets and their evaporation. *Astronomy & Astrophysics*, v. 532, A6, 2011.
- Saumon, D.; et al. A theory of extrasolar giant planets. *The Astrophysical Journal*, v. 460, p. 993, 1996.
- Seager, S.; Sasselov, D. D. Theoretical transmission spectra during extrasolar giant planet transit. *The Astrophysical Journal*, v. 537, p. 916, 2000.
- Seager, S. *Exoplanet atmosphere: physical processes*. Princeton University Press, 2010.
- Secchi, A. R. DASSLC: User's Manual Version 3.7. PEQ/COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil, 2010. <http://www.enq.ufrgs.br/enqlib/numeric/numeric.html>
- Shaikhislamov, I. F.; Khodachenko, M. L.; Sasunov, Yu. L.; Lammer, H.; Kislyakova, K. G.; Erkaev, N. V. Atmosphere expansion and mass loss of close-orbit giant exoplanets heated by stellar XUV. I. Modeling of hydrodynamic escape of upper atmospheric material. *The Astrophysical Journal*, v. 795, p. 132, 2014.

- Schlaufman, K. C.; Laughlin, G. Kepler exoplanet candidate host stars are preferentially metal rich. *The Astrophysical Journal*, v. 738, p. 177, 2011.
- Schneider, E. M.; Velázquez, P. F.; Esquivel, A.; Rage, A. C. Three-dimensional hydrodynamical simulation of the exoplanet HD 209458b. *The Astrophysical Journal Letters*, v. 671, L57, 2007.
- Schneider, E. M.; Esquivel, A.; D'Angelo, C. S. V.; et al. Photoionization of planetary winds: case study HD 209458b. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 457, p. 1666, 2016.
- Shallue, C.; Vanderburg, A. Identifying exoplanets with Deep Learning: a five-planet resonant chain around Kepler-80 and eighth planet around Kepler-90. *The Astronomical Journal*, v. 155, p. 94, 2018.
- Shematovich, V. I.; Ionov, D. E.; Lammer, H. Heating efficiency in hydrogen-dominated upper atmospheres. *Astronomy & Astrophysics*, v. 571, A94, 2014.
- Showman, A. P.; et al. Atmospheric circulation of hot Jupiters: coupled radiative-dynamical general circulation model simulations of HD 189733b and HD 209458b. *The Astrophysical Journal*, v. 699, p. 564, 2009.
- Showman, A. P.; et al. Atmospheric circulation of terrestrial exoplanets. *Comparative climatology of terrestrial planets*, editor Mackwell, S. J.; et al., p. 277-326, 2013.
- Sing, D. K.; Désert, J. M.; Fortney, J. J.; et al. Gran Telescopio Canarias OSIRIS transiting exoplanet atmospheric survey: detection of potassium in XO-2b from narrowband spectrophotometry. *Astronomy & Astrophysics*, v. 527, A73, 2011a.
- Sing, D. K.; Pont, F.; et al. Hubble Space Telescope transmission spectroscopy of the exoplanet HD 189733b: high-altitude atmospheric haze in the optical and near-ultraviolet with STIS. *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, v. 416, p. 1443, 2011b.
- Sing, D. K.; Lecavelier des Etangs, A.; Fortney, J. J.; et al. HST hot-Jupiter transmission spectral survey: evidence for aerosols and lack of TiO in the atmosphere of WASP-12b. *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, v. 436, p. 2956, 2013.
- Skumanich, A. Time Scales for Ca II Emission Decay, Rotational Braking, and Lithium Depletion. *The Astrophysical Journal*, v. 171, p. 565, 1972.
- Stevenson, K. B.; Harrington, J.; Nymeyer, S.; et al. Possible thermochemical disequilibrium in the atmosphere of the exoplanet GJ 436b. *Nature*, v. 464, p. 1161, 2010.
- Stone, J. M.; Proga, D. Anisotropic winds from close-in extrasolar planets. *The Astrophysical Journal*, v. 694, p. 205, 2009.
- Struve, O. Proposal for a project of high-precision stellar radial velocity work. *The Observatory*, v. 72, p. 199, 1952.

- Sun Kwok. *Physics and chemistry of the interstellar medium*. University Science Books, p. 413, 2007.
- Suzuki, T. K.; Inutsuka, S. I. Making the corona and the fast solar wind: a self-consistent simulation for the low-frequency Alfvén waves from the photosphere to 0.3 AU. *The Astrophysical Journal*, v. 632, L49, 2005.
- Suzuki, T. K.; Inutsuka, S. I. Solar winds driven by nonlinear low-frequency Alfvén waves from the photosphere: parametric study for fast/slow winds and disappearance of solar winds. *Journal of Geophysical Research (Space Physics)*, v. 111, p. 6101, 2006.
- Tanaka, Y. A.; Suzuki, T. K.; Inutsuka, S. I. Atmospheric escape by magnetically driven wind from gaseous planets. *The Astrophysical Journal*, v. 792, p. 18, 2014.
- Thorngren, D. P.; Fortney, J. J.; Murray-Clay, R. A.; Lopez, E. D. The mass-metallicity relation for giant planets. *The Astrophysical Journal*, v. 831, p. 64, 2016.
- Tian, F.; Toon, O. B.; Pavlov, A. A.; Desterck, H. Transonic hydrodynamic escape of hydrogen from extra-solar planetary atmospheres. *The Astrophysical Journal*, v. 621, p. 1049, 2005b.
- Tielens, A. G. G. M. *The physics and chemistry of the interstellar medium*. Cambridge University Press, p. 85, 2005.
- Torres, G. The transiting exoplanet host star GJ 436: a test of stellar evolution models in the lower main sequence, and revised planetary parameters. *The Astrophysical Journal*, v. 671, L65, 2007.
- Trammell, G. B.; Arras, P.; Li, Z. Y. Hot Jupiter magnetospheres. *The Astrophysical Journal*, v. 728, p. 152, 2011.
- Tremblin, P.; Chiang, E. Colliding planetary and stellar winds: charge Exchange and transit spectroscopy in neutral hydrogen. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 428, p. 2565, 2013.
- Udry, S.; Mayor, M.; Naef, D.; Pepe, F.; Queloz, D.; et al. The CORALIE survey for southern extra-solar planets. VIII. The very low-mass companions of HD 141937, HD 162020, HD 168443, HD 202206: Brown dwarfs or “superplanets”? *Astronomy & Astrophysics*, v. 390, p. 267, 2002.
- Van Dishoeck, E. F. Astrochemistry: overview and challenges. IAU symposium 332 “Astrochemistry VII: Through the cosmos from galaxies to planets”, eds. M. Cunningham, T. J. Millar, Y. Aikawa, 2017. arXiv: 1710.05940
- Venot, O.; Hébrard, E.; Agúndez, M.; et al. A chemical model for the atmosphere of the Hot Jupiters. *Astronomy & Astrophysics*, v. 546, A43, 2012.
- Vidal-Madjar, A.; Lecavelier des Etangs, A.; Désert, J. M.; Ballester, G. E.; Ferlet, R.; et al. An extended upper atmosphere around the extrasolar giant planet HD 209458b. *Nature*, v. 422, p. 143, 2003.

- Vidal-Madjar, A.; Désert, J. M.; Lecavelier des Etangs, A.; Hébrard, G.; Ballester, G. E.; et al. Detection of oxygen and carbon in the hydrodynamically escaping atmosphere of the extrasolar planet HD 209458b. *The Astrophysical Journal Letters*, v. 604, L69, 2004.
- Vidal-Madjar, A.; Huitson, C. M.; Bourrier, V.; Désert, J. M.; Ballester, G.; et al. Magnesium in the atmosphere of the planet HD 209458b: observations of the thermosphere-exosphere transition region. *Astronomy & Astrophysics*, v. 560, A54, 2013.
- Vidotto, A. A.; Jardine, M.; Helling, Ch. Early UV ingress in WASP-12b: measuring planetary magnetic fields. *The Astrophysical Journal Letters*, v. 722, L168, 2010.
- Vidotto, A. A.; Jardine, M.; Helling, Ch. Prospects for detection of exoplanet magnetic fields through bow-shock observations during transits. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society Letters*, v. 411, L46, 2011a.
- Vidotto, A. A.; Jardine, M.; Helling, Ch. Transit variability in bow shock-hosting planets. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 414, p. 1573, 2011.
- Villarreal D'Angelo, C.; Esquivel, A.; Schneider, M.; Sgró, M. A. Magnetized winds and their influence in the escaping upper atmosphere of HD 209458b. *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, v. 479, p. 3115, 2018.
- Wakeford, H. R.; et al. HAT-P-26b: a Neptune-mass exoplanet with a well-constrained heavy element abundance. *Science*, v. 356, p. 628, 2017.
- Wakeford, H. R.; Visscher, C.; Lewis, N. K.; et al. High-temperature condensate clouds in super-hot Jupiter atmospheres. *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, v. 464, p. 4247, 2017b.
- Wakelam, V.; Cuppen, H. M.; Herbst, E. Astrochemistry: synthesis and modelling. [arXiv: 1309.7792](https://arxiv.org/abs/1309.7792)
- Wolszczan, A.; Frail, D. A planetary system around the millisecond pulsar PSR1257+12. *Nature*, v. 355, p. 145, 1992.
- Wong, M. H.; et al. Updated Galileo probe mass spectrometer measurements of carbon, oxygen, nitrogen, and sulfur on Jupiter. *Icarus*, v. 171, p. 153, 2004.
- Woods, B. E.; Redfield, S.; Linsky, J. L.; Müller, H. R.; Zank, G. P. Stellar Ly α emission lines in the Hubble Space Telescope archive: intrinsic line fluxes and absorption from the heliosphere and astrospheres. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 159, p. 118, 2005.
- Yelle, R. V. Aeronomy of extra-solar giant planets at small orbital distances. *Icarus*, v. 170, p. 167, 2004.

Youngblood, A.; France, K.; Parke Loyd, O.; Linsky, J. L.; et al. The MUSCLES treasury survey. II. Intrinsic Ly- α and extreme ultraviolet spectra of K and M dwarfs with exoplanets. *The Astrophysical Journal*, v. 824, p. 101, 2016.

Zahnle, K.; et al. Atmospheric sulfur photochemistry on Hot Jupiters. *The Astrophysical Journal*, v. 701, L20, 2009.

Zahnle, K.; et al. Photolytic hazes in the atmosphere of 51 Eri b. *The Astrophysical Journal*, v. 824, p. 137, 2016.

Zollinger, R. R.; Armstrong, J. C.; Heller, R. Exomoon habitability and tidal evolution in low-mass star systems. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 472, p. 8, 2017.