

**Photoionization and photodissociation  
of methyl-benzene in a  
circumstellar environment**

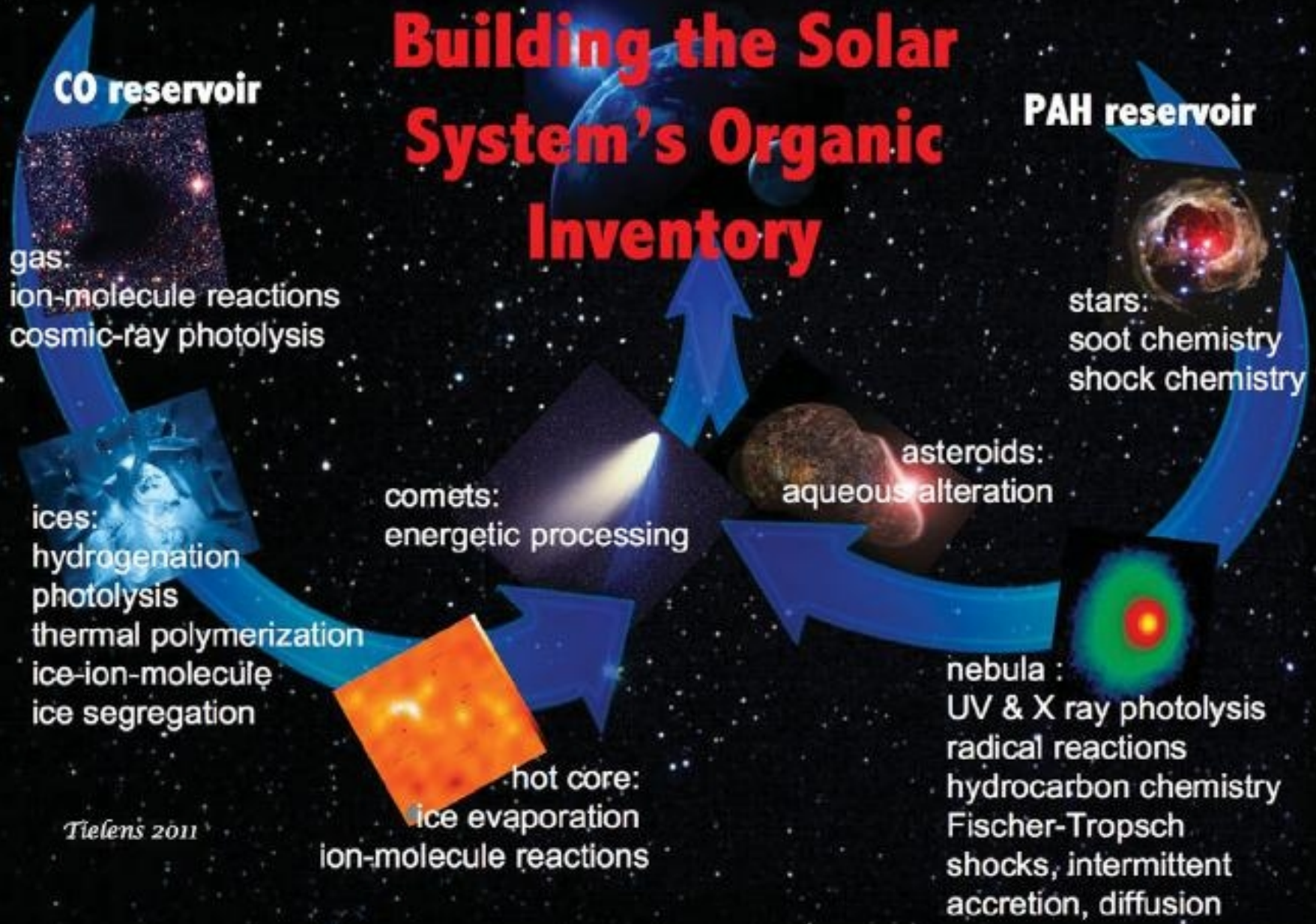
**Thiago Monfredini**  
**Profa. Dra. Heloísa Boechat-Roberty**  
**(Valongo Observatory - UFRJ)**

**INTERNATIONAL SYMPOSIUM AND  
WORKSHOP ON ASTROCHEMISTRY**

Understanding the extraterrestrial molecular complexity through  
experiments, observations and models

July 3-8, 2016 - Campinas, SP - Brazil

# Building the Solar System's Organic Inventory



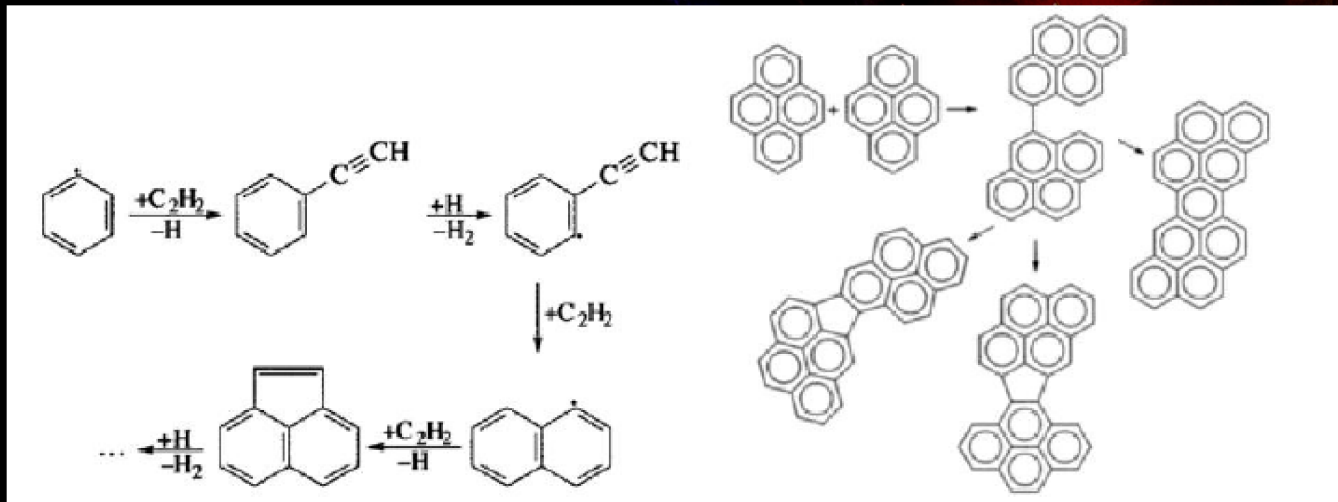
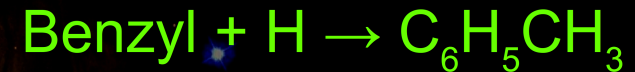
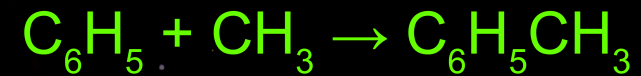
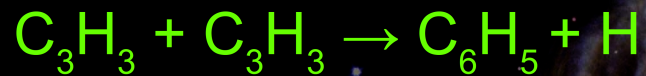
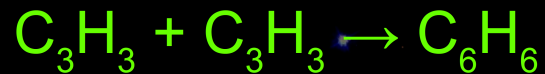
Tielens 2011

(Tielens, 2011)

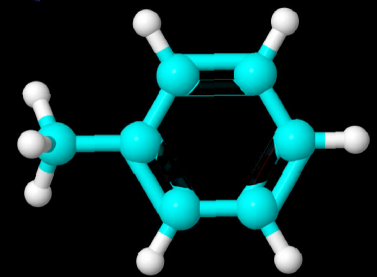
# Benzene and PAH formation

Gas Temperature: 1000 – 1500 K

Density:  $10^8 - 10^{13} \text{ cm}^{-3}$

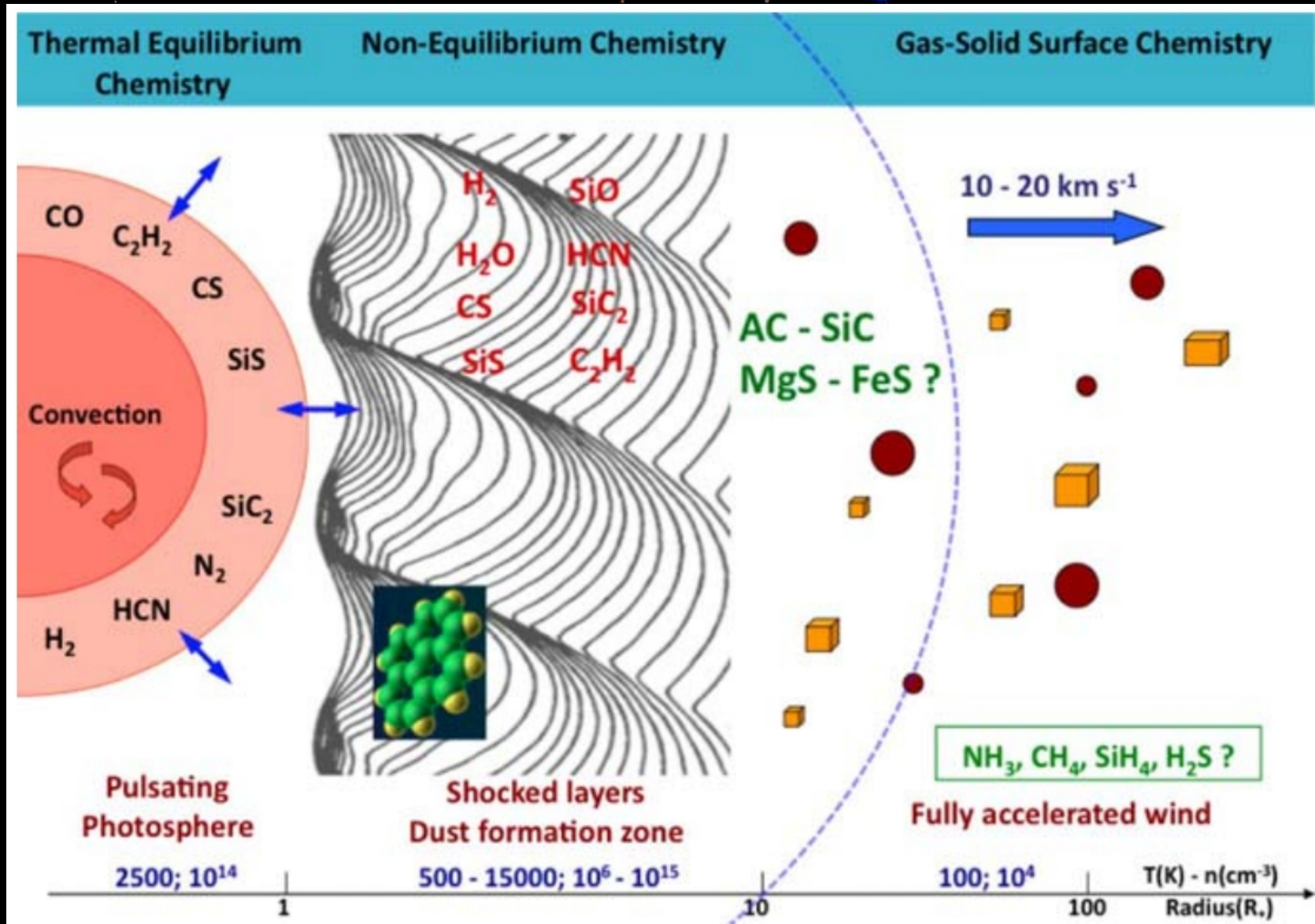


Ziegler et al. (2005)



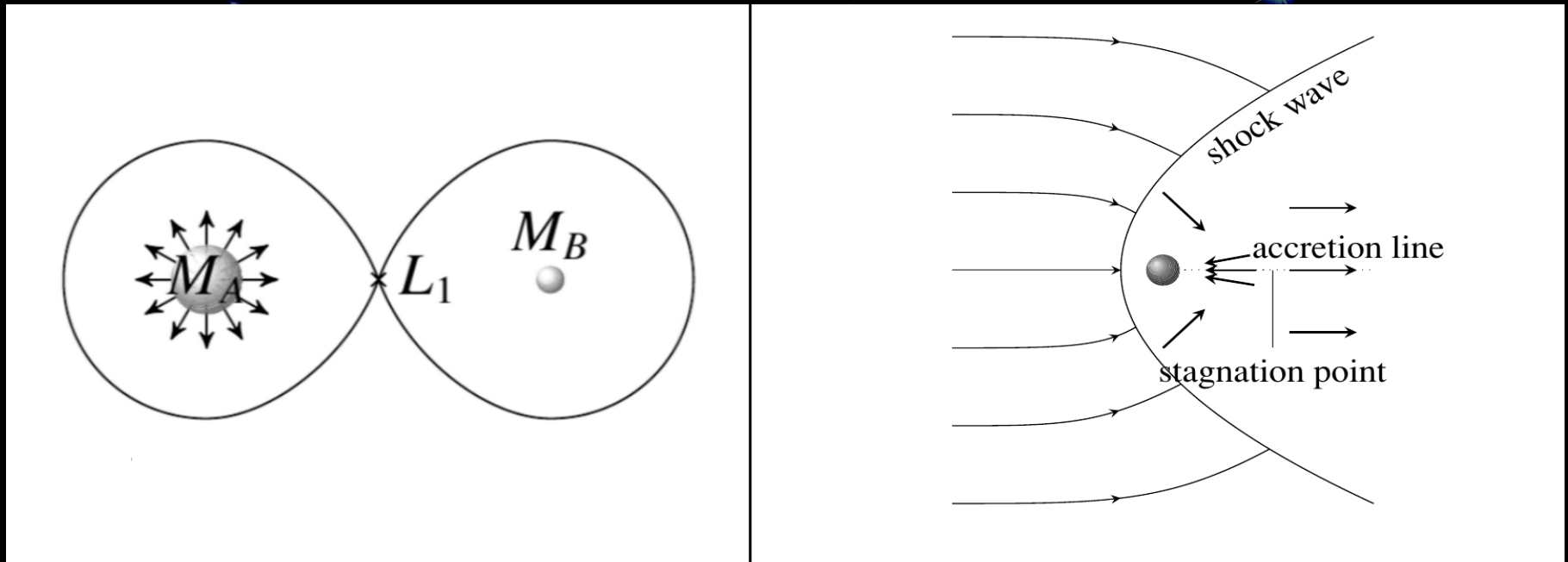
Cherchneff (2011)

# The envelope of carbon-rich AGB stars



Cherchneff (2011)

## But if we had a binary system?



de Val-Borro et al. 2009, ApJ

$$L_x = 3 \times 10^{30} - 3 \times 10^{32} \text{ erg s}^{-1}$$

T Dra AGB star -  $L_x = 3.2 \times 10^{31} \text{ erg s}^{-1}$  (Ramstedt et al. 2012, A&A)

**Aliphatic and Aromatic Hydrocarbons: how they are affected?**

# X-ray photon-molecule interaction ( $C_6H_5CH_3$ )

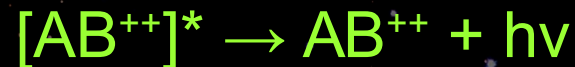
Electronic excitation of the inner shell - C1s

- Photoabsorption:  $AB + h\nu \rightarrow [AB]^*$
- Photoionization:  $AB + h\nu \rightarrow AB^+ + e^-$

## - Simple ionization/dissociation:

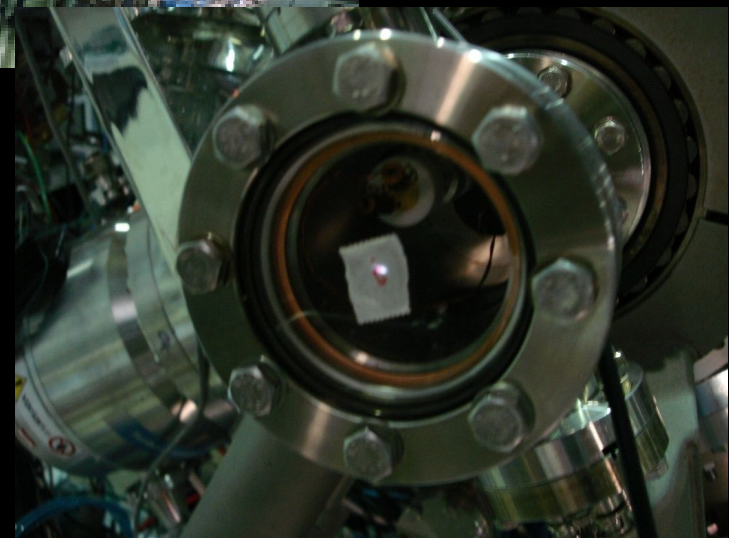
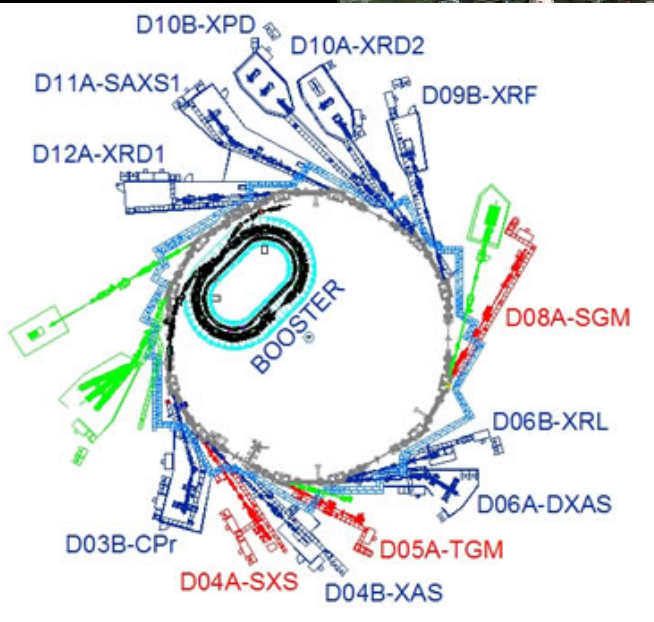


## - Double ionization/dissociation:

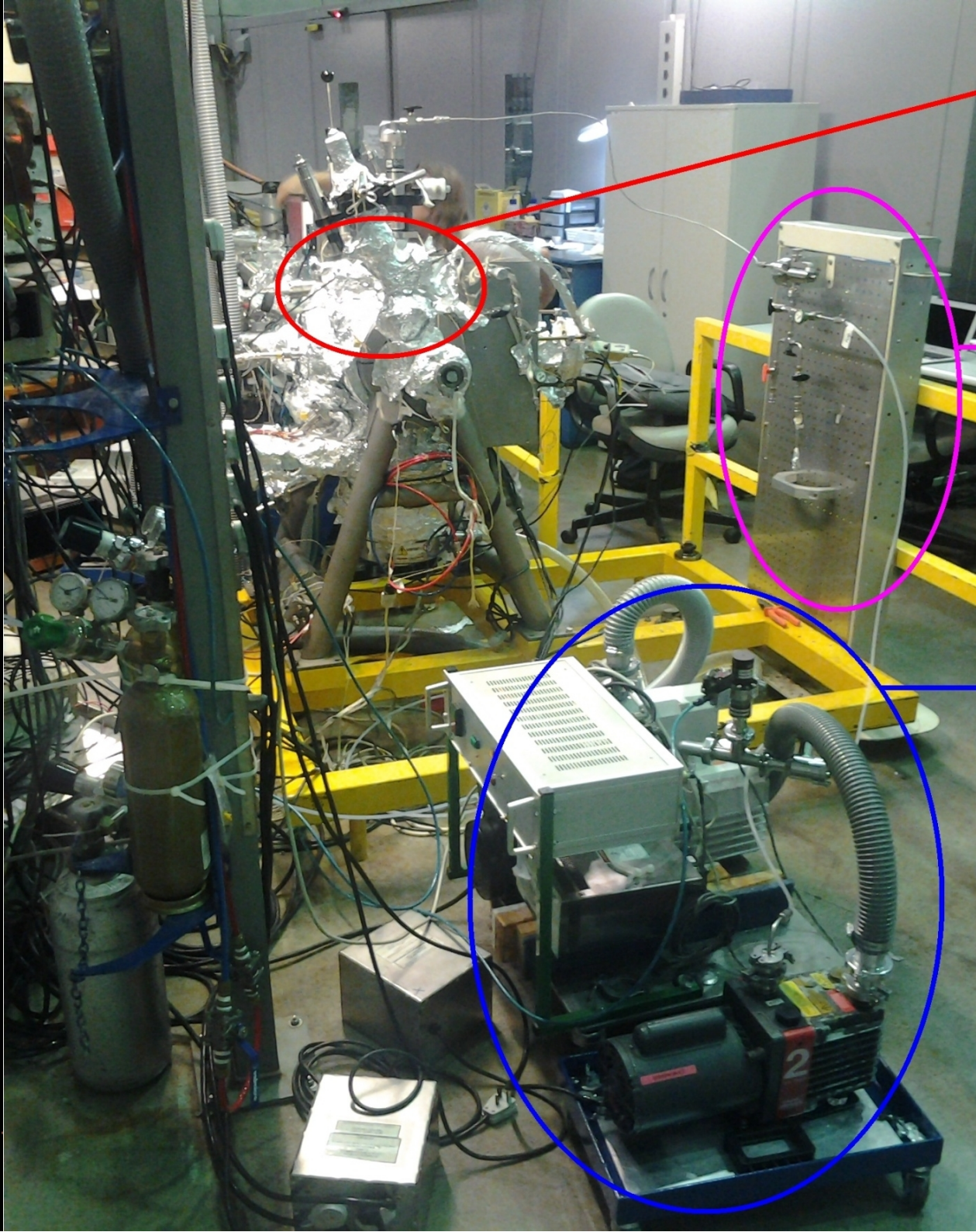


# Experiments

## Brazilian Synchrotron Light Laboratory



**TGM and SGM: 280 eV to 300 eV**



**Vacuum Chamber**

**Sample**

**Pumping System**



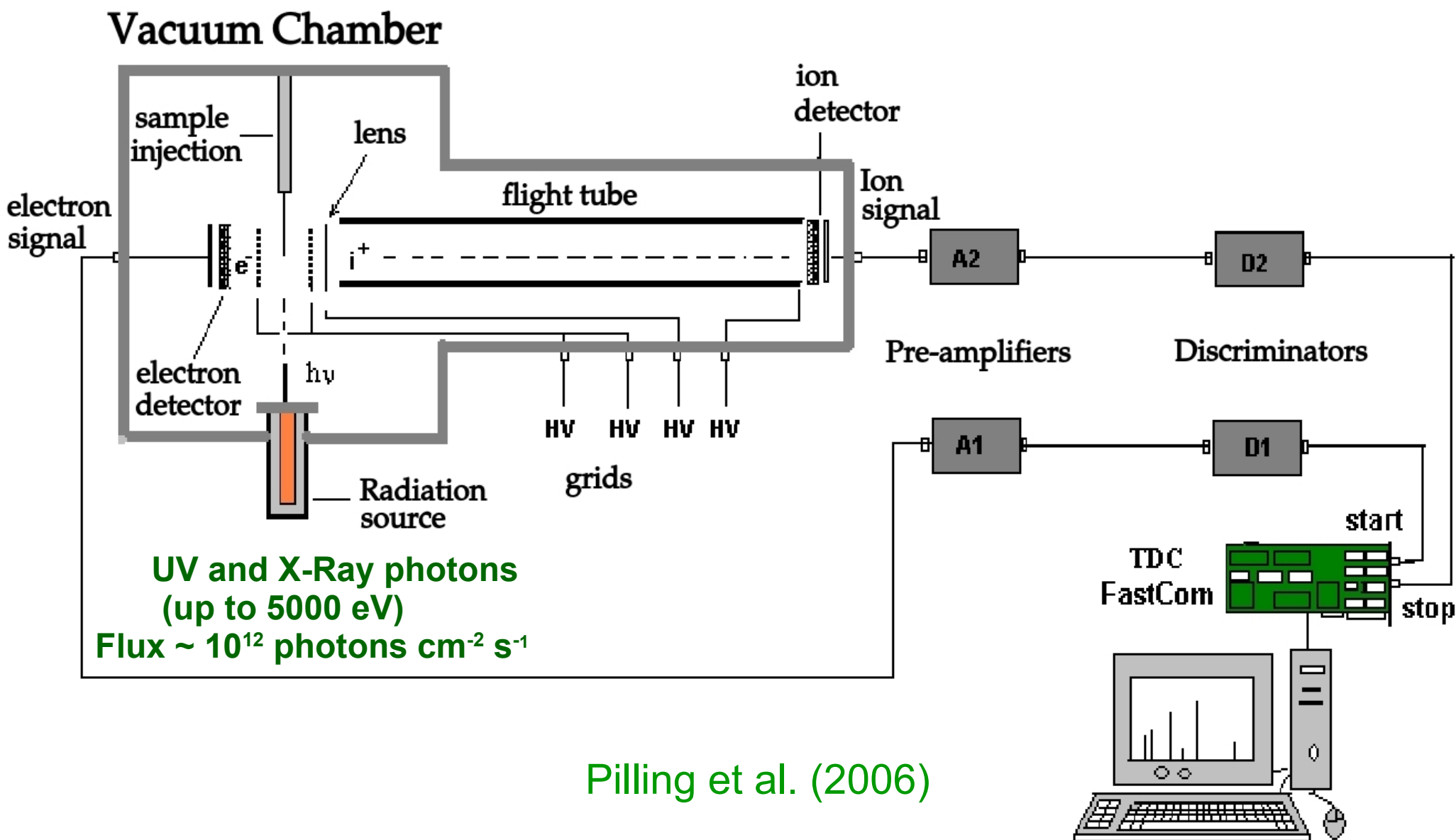
Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón  
**DO8A - SGM**  
**Monocromador de Grade**  
**Estérica**  
Spherical Grating Monochromator



# Destruction of molecules – gas phase

## Time of Flight Mass-Spectrometry

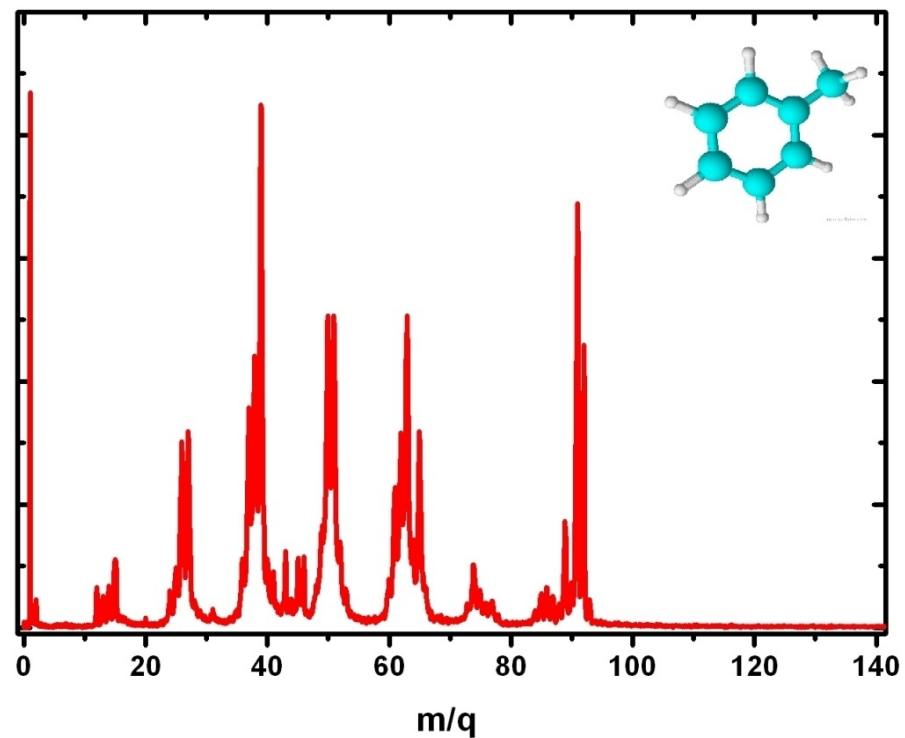
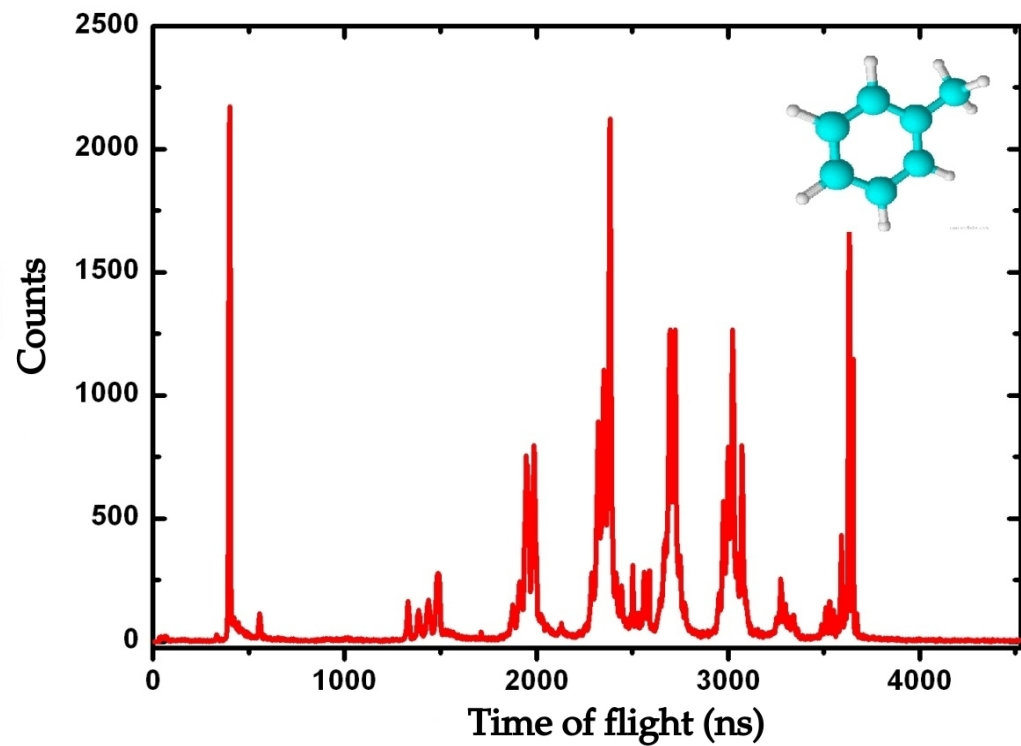
### Photoelectron-Photoion Coincidence - PEPICO



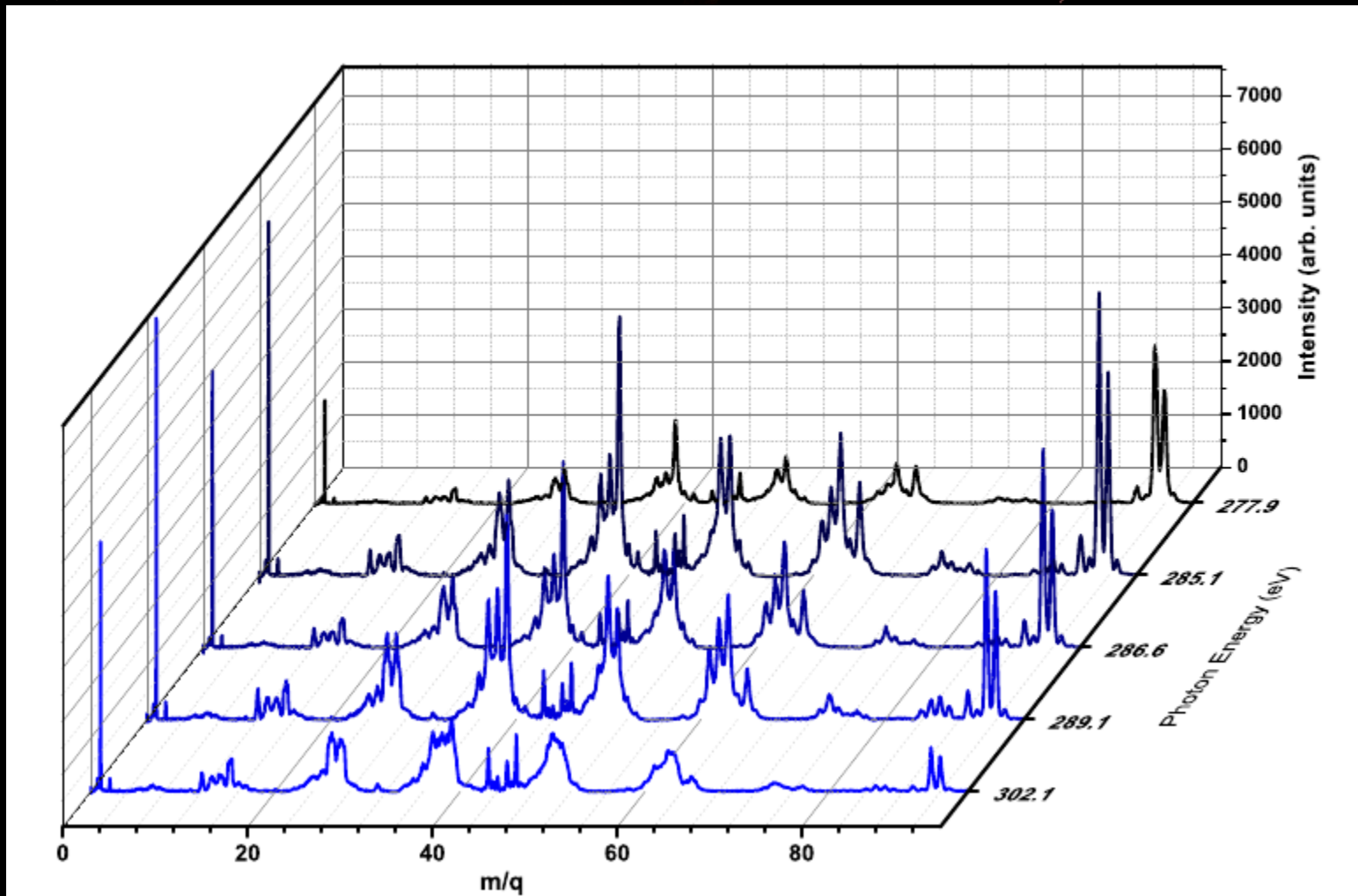
Pilling et al. (2006)

# Time of flight to mass spectra of the ionic fragments

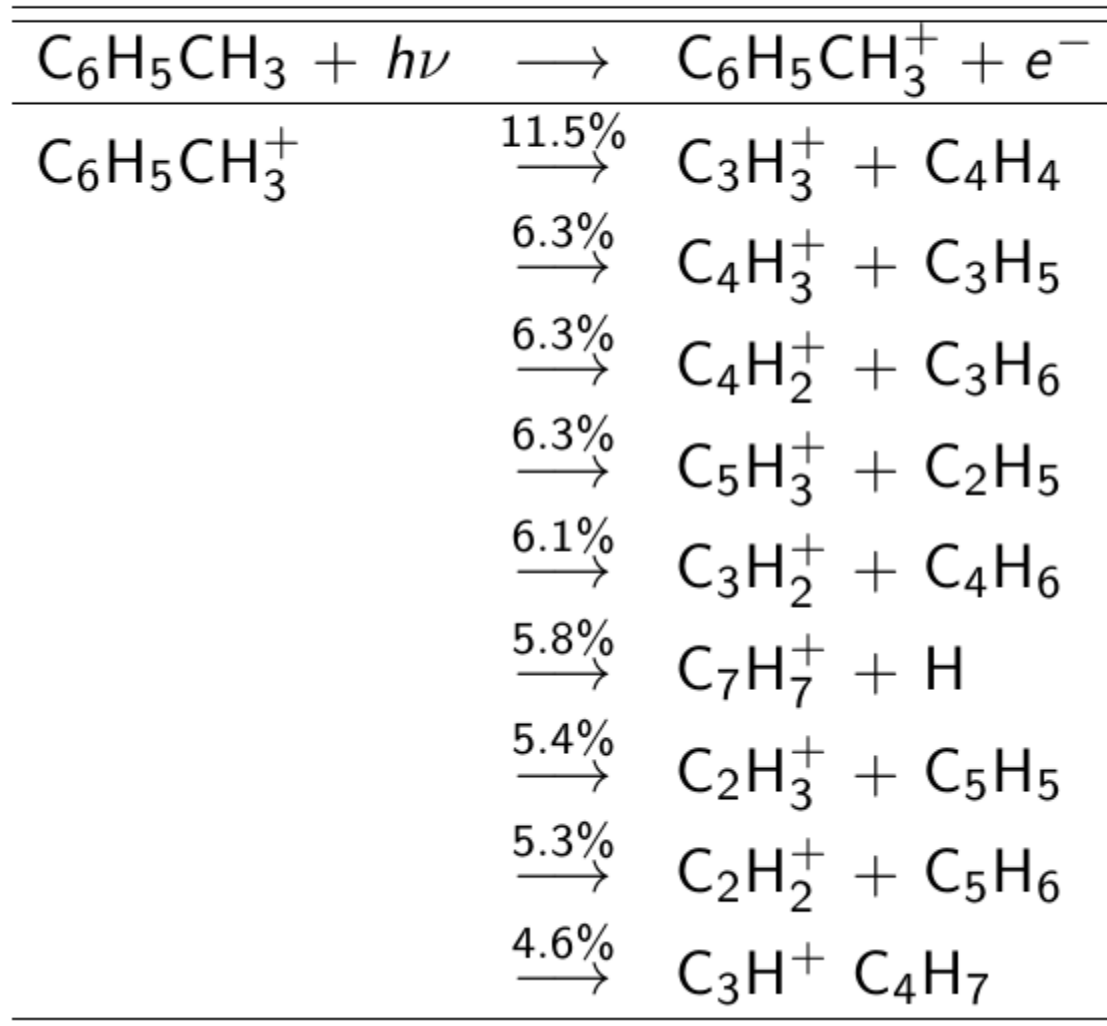
Methyl-benzene  
285 eV



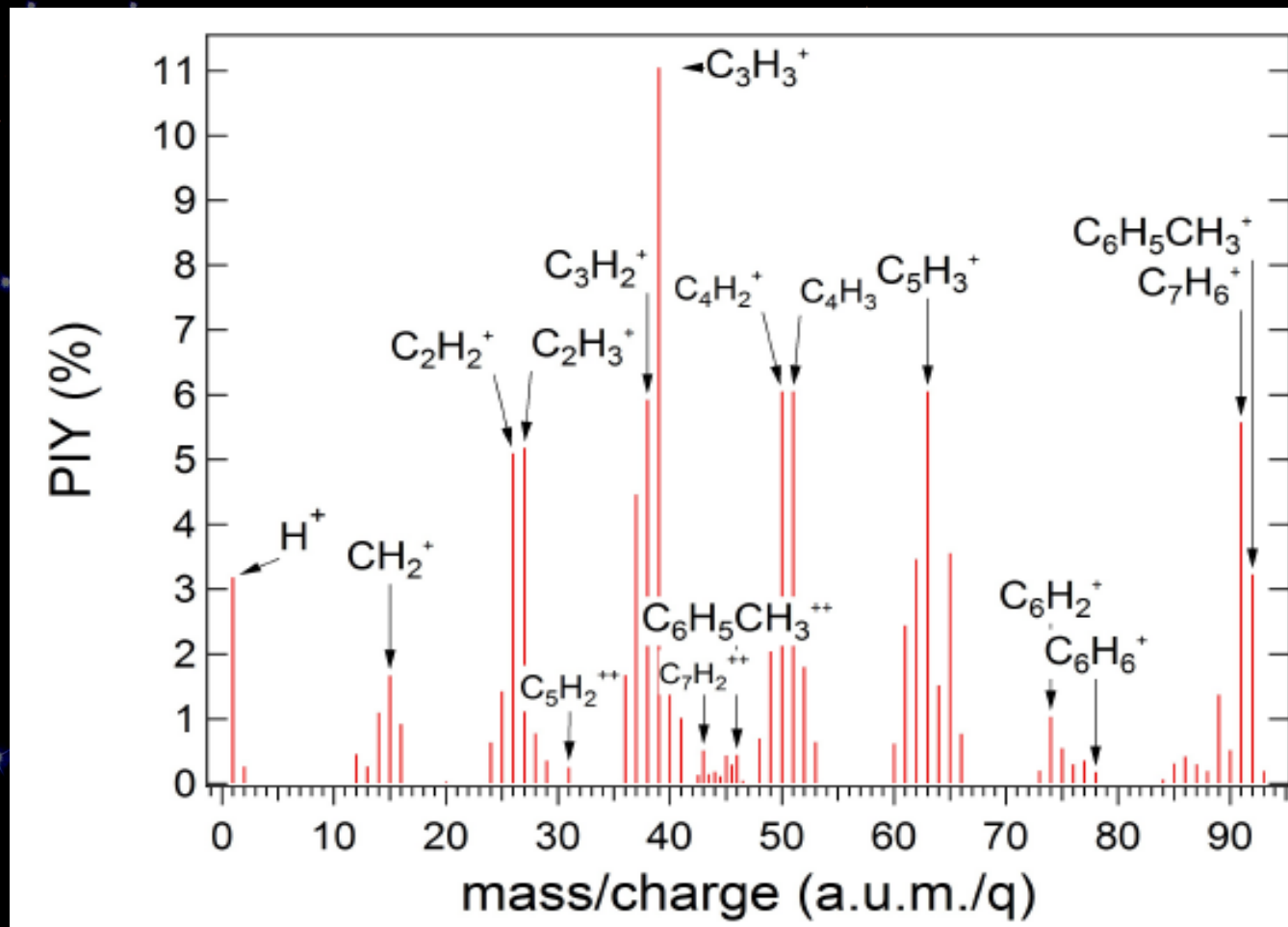
**Methyl-benzene (toluene) -  $C_6H_5CH_3$ :**  
**278 – 302 eV**



Main Pathways of photodissociation due to soft X-ray photons



# Partial Ion Yield of methyl-benzene with photons of 285 eV



Boechat-Roberty et al. (2005)

$$PIY_i = \left( \frac{A_i^+}{A_t^+} \right) \times 100\% \pm \Delta PIY_i,$$

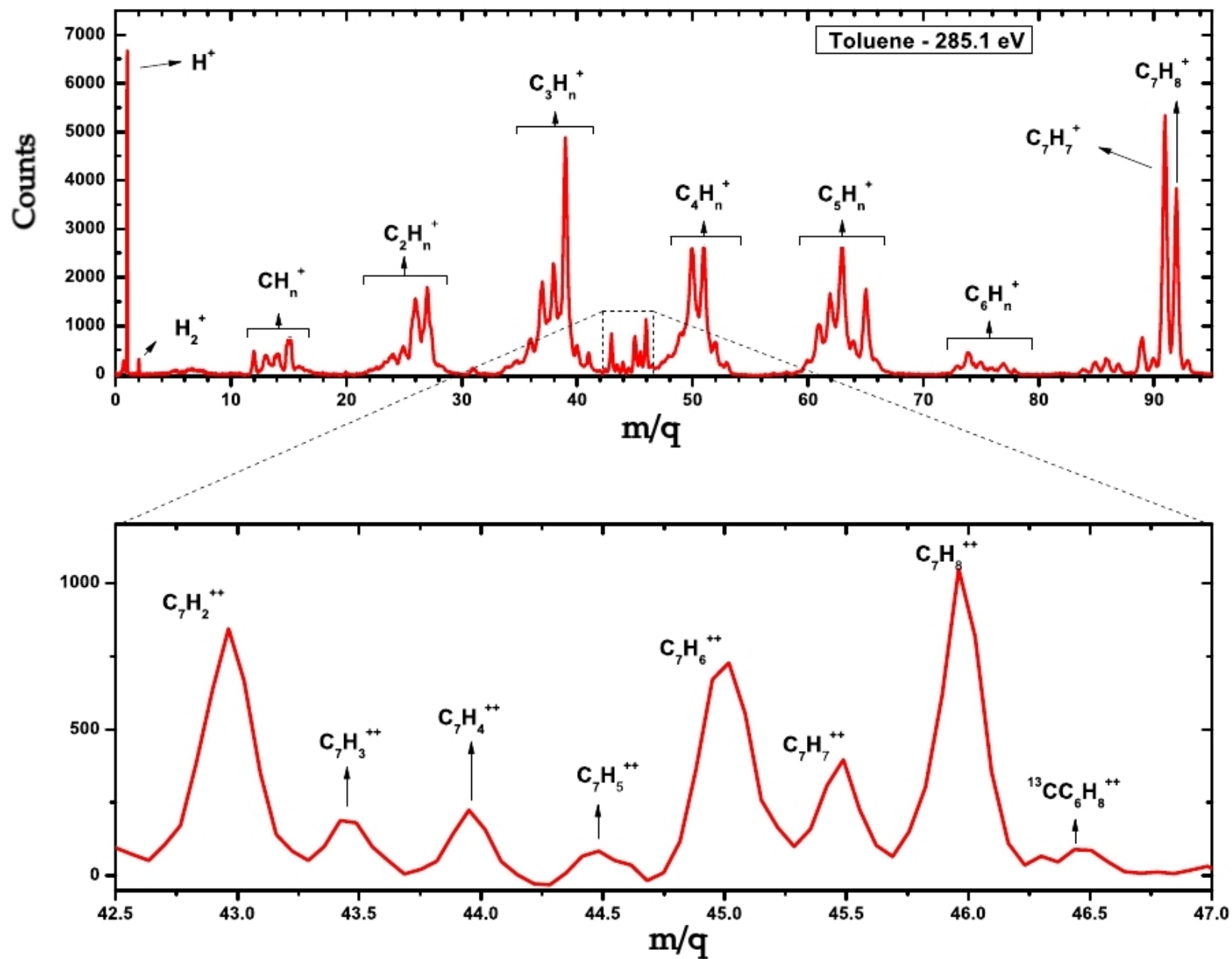
$$\Delta PIY_i = PIY_i \times \sqrt{\left( \frac{\Delta A_i}{A_i^+} \right)^2 + \left( \frac{\Delta A_t}{A_t^+} \right)^2}$$

$$\sigma_{ph-i} = \sigma^+ \frac{PIY_{C_7H_8^+}}{100}$$

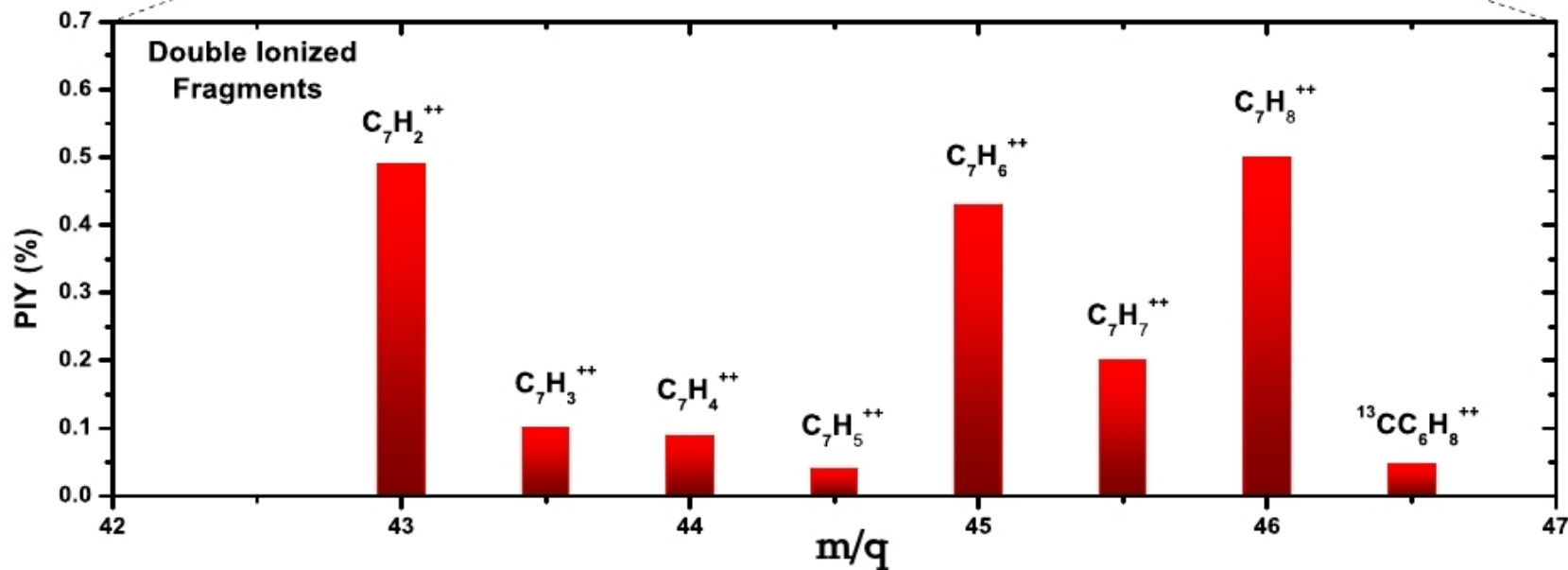
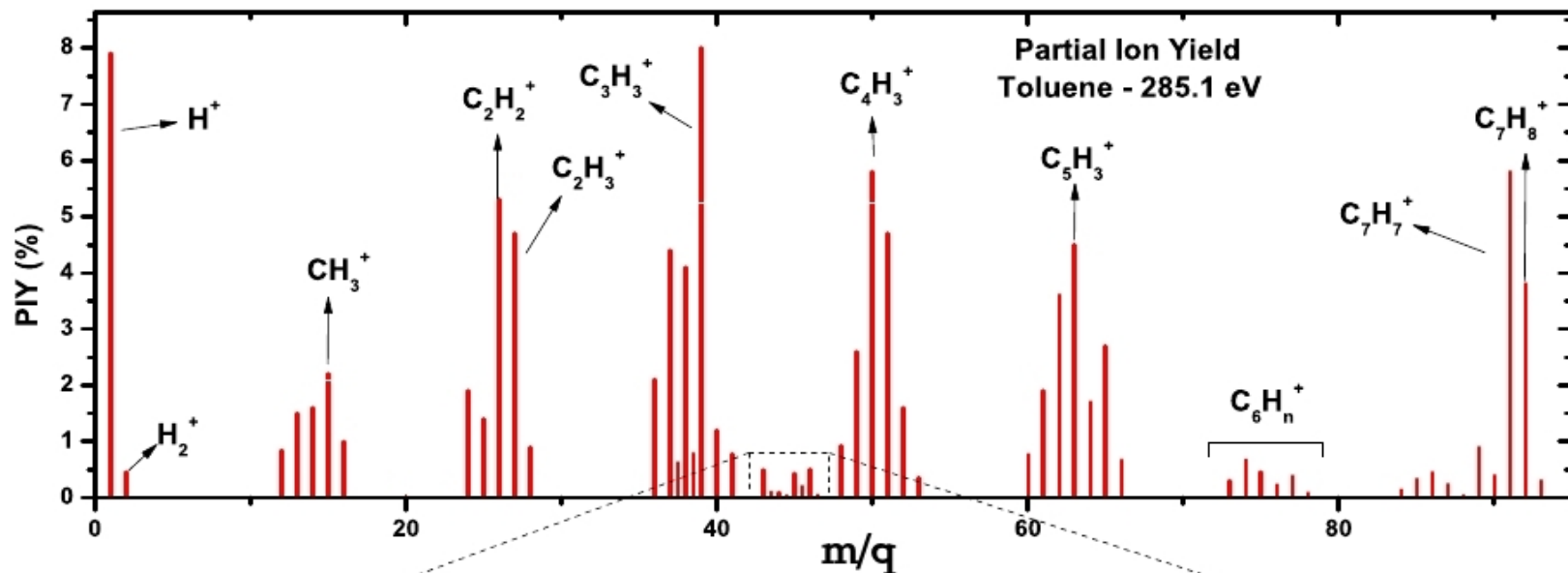
$$\sigma_{ph-d} = \sigma^+ \left( 1 - \frac{PIY_{C_7H_8^+}}{100} \right)$$

# Mass spectrum of toluene at 285 eV

## Double ionization in detail

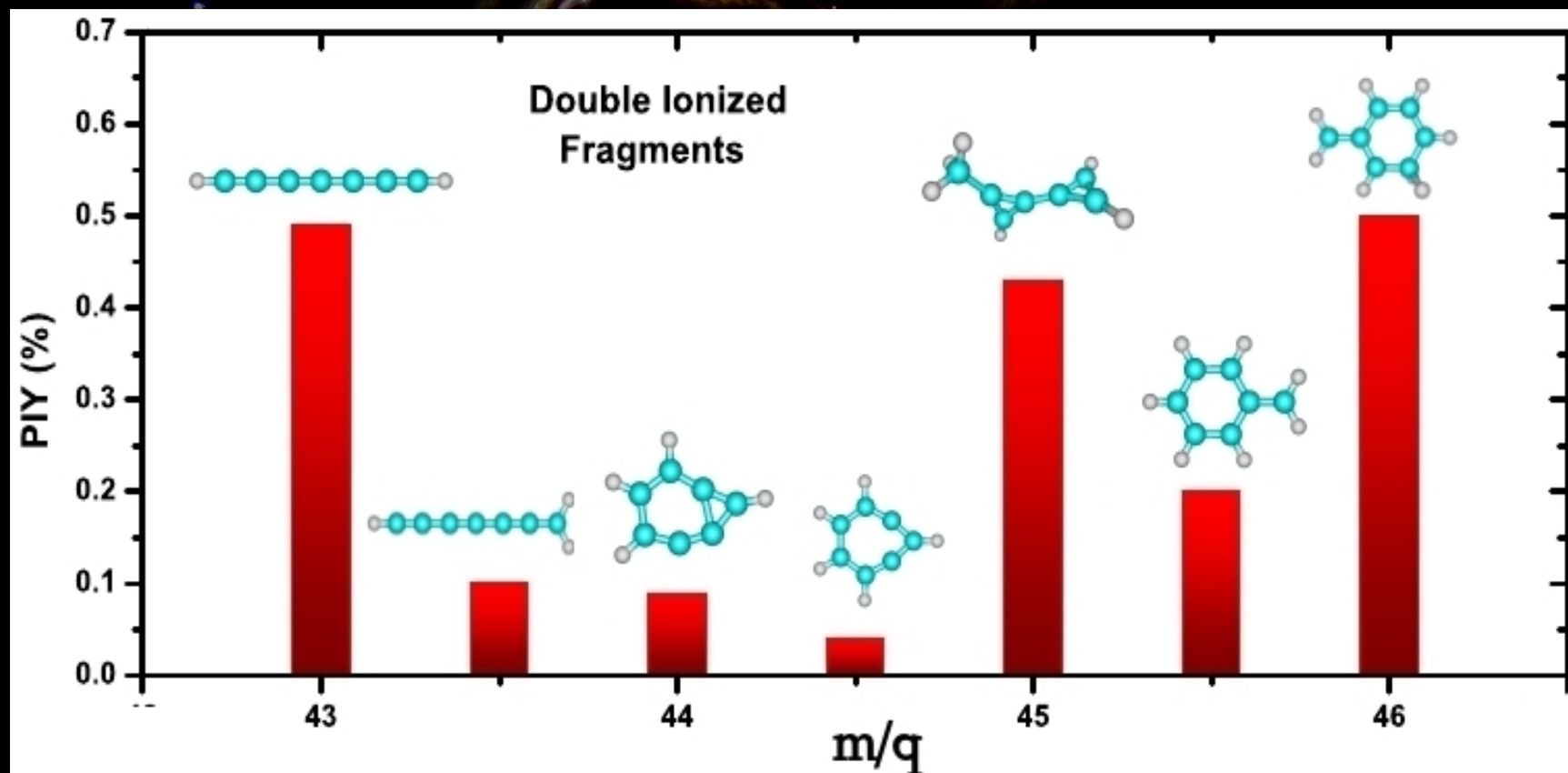


# Partial Ion Yield (PIY) of toluene at photon energy of 285 eV





# STRUCTURE AND STABILITY OF DOUBLE IONIZED MOLECULES BY X-RAYS PHOTONS – METHYL-BENZENE



Felipe Fantuzzi e M. A. Chaer – IQ-UFRJ

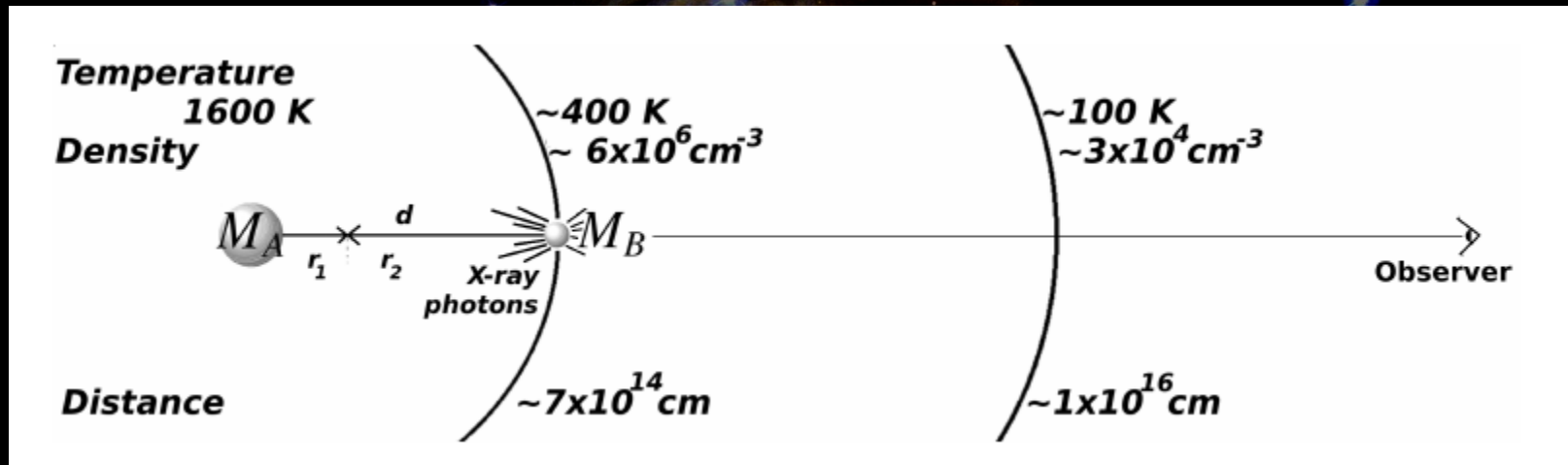
Fantuzzi, et al. 2016 (in preparation)

- Photoabsorption, photoionization and photodissociation cross sections of toluene,

- Double ionization of toluene and dicationic production

Energy (eV)	Cross-sections (cm <sup>2</sup> )				
	$\sigma_{\text{ph-abs}}$	$\sigma_{\text{ph-i}}$	$\sigma_{\text{ph-d}}$	$\sigma_{\text{ph-ii}}$	$\sigma_{++}$
Toluene					
277.9	$6.2 \times 10^{-20}$	$4.8 \times 10^{-21}$	$5.7 \times 10^{-20}$	$5.7 \times 10^{-22}$	$1.3 \times 10^{-21}$
285.1	$1.9 \times 10^{-17}$	$7.3 \times 10^{-19}$	$1.8 \times 10^{-17}$	$9.6 \times 10^{-20}$	$3.6 \times 10^{-19}$
286.6	$1.8 \times 10^{-18}$	$6.4 \times 10^{-20}$	$1.7 \times 10^{-18}$	$9.9 \times 10^{-21}$	$3.5 \times 10^{-20}$
289.1	$7.3 \times 10^{-18}$	$1.8 \times 10^{-19}$	$7.1 \times 10^{-18}$	$3.4 \times 10^{-20}$	$1.3 \times 10^{-19}$
302.7	$9.5 \times 10^{-18}$	$1.0 \times 10^{-19}$	$9.4 \times 10^{-18}$	$7.0 \times 10^{-20}$	$2.4 \times 10^{-19}$
Benzene (Boechat-Roberty et al. 2009)					
285.1	$4.2 \times 10^{-18}$	$1.7 \times 10^{-19}$	$3.7 \times 10^{-18}$	...	...

**T Dra AGB star -  $L_x = 3.2 \times 10^{31} \text{ erg s}^{-1}$  (Ramstedt et al. A&A, 2012)**

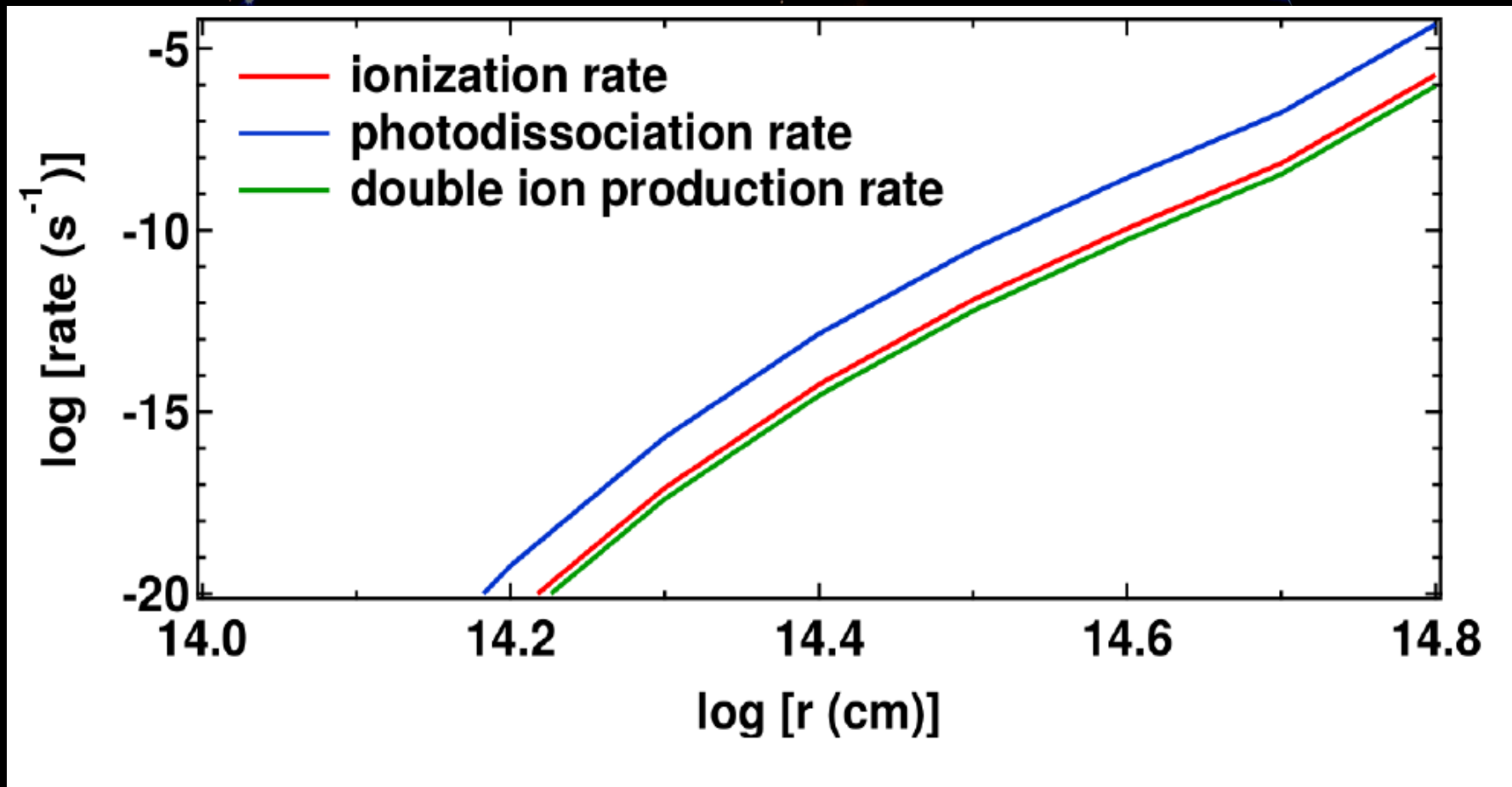


$$F_X(E) = \frac{L_X}{4\pi r_2^2 h\nu} e^{-\tau}$$

$$\tau = \sigma_X N_H$$

$$N_H(r_1) = 2,67 \times 10^{36} \left[ \frac{1}{d} - \frac{1}{r_1} \right] \text{ cm}^{-2}$$

# Photoionization, photodissociation and double ionization profile at T Dra AGB.



$$k_{ph-d} = \sigma_{ph-d}(E) F_X(E)$$

$$\zeta_i = \sigma_i(E) F_X(E)$$



## SINGLE AND DOUBLE PHOTOIONIZATION AND PHOTODISSOCIATION OF TOLUENE BY SOFT X-RAYS IN A CIRCUMSTELLAR ENVIRONMENT

T. MONFREDINI<sup>1</sup>, F. FANTUZZI<sup>2</sup>, M. A. C. NASCIMENTO<sup>2</sup>, W. WOLFF<sup>3</sup>, AND H. M. BOECHAT-ROBERTY<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Observatório do Valongo, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Ladeira Pedro Antonio, 43, Rio de Janeiro, Brazil; [helois@astro.ufrj.br](mailto:helois@astro.ufrj.br)

<sup>2</sup> Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Av. Athos da Silveira Ramos, 149, Rio de Janeiro, Brazil

<sup>3</sup> Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Av. Athos da Silveira Ramos, 149, Rio de Janeiro, Brazil

*Received 2015 October 30; accepted 2016 January 20; published 2016 April 1*

Thiago Monfredini  
Heloísa Boechat-Roberty  
(Valongo Observatory)

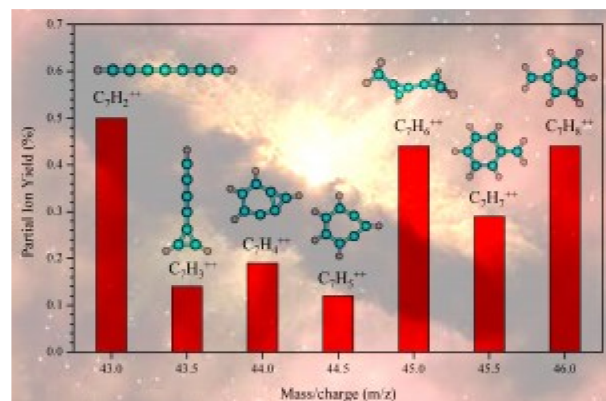
Felipe Fantuzzi  
Marco A. C. Nascimento  
(Chemistry Institute – UFRJ)

Wania Wolff  
(Physics Institute – UFRJ)

## Informações Gerais do Instituto de Física

### Moléculas duplamente carregadas em ambientes astrofísicos

2 DE JUNE DE 2016



A formação dos hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs) e PAHs metilados ocorre principalmente nos envoltórios de estrelas já nos estágios finais da sua evolução, na fase AGB (*Asymptotic Giant Branch*). Estas moléculas são submetidas a fótons provenientes da estrela central que induzem aos processos de ionização e dissociação. Estudou-se experimentalmente a interação da radiação síncrotron na faixa de raios-X moles com o composto tolueno (C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CH<sub>3</sub>), precursor de PAHs metilados. Espectros de massa revelaram a presença de íons duplamente ionizados tanto do próprio tolueno como de vários fragmentos contendo sete átomos de carbono. Cálculos *Ab Initio* elucidaram a estrutura química e a estabilidade destas espécies duplamente ionizadas. A sobrevivência relativamente alta dessas espécies, sujeitas a ionização da camada interna do carbono, sugerem

que podem ser observadas no meio circunstelar e interestelar, em regiões onde os PAHs são detectados. A partir das seções de choque medidas, foram determinadas as taxas de ionização e de destruição do tolueno no envoltório da estrela T Dra, uma AGB rica em carbono.

Este trabalho foi parte da tese de doutorado de Thiago Monfredini orientado pela professora Heloisa M. Boechat-Roberty do Observatório do Valongo-UFRJ, e contou com a participação dos pesquisadores teóricos Felipe Fantuzzi e Marco Antonio Chaer do Nascimento do Instituto de Química-UFRJ e experimental Wania Wolff do Instituto de Física -UFRJ.

#### Conheça mais sobre o IF

[Sobre o Instituto](#)

[Institucional](#)

[Biblioteca IF](#)

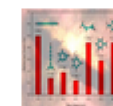
[Notícias do IF](#)

[Destaques do IF](#)

[Estágio Probatório](#)

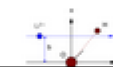
#### Destaques em Pesquisa

02/06/2016



**Moléculas duplamente carregadas em ambientes astrofísicos**

24/05/2016



**Impacto de íons pesados**



Informações

Graduação

Pós-graduação

Extensão

Pesquisa

Corpo Social

Museu Virtual

Contato

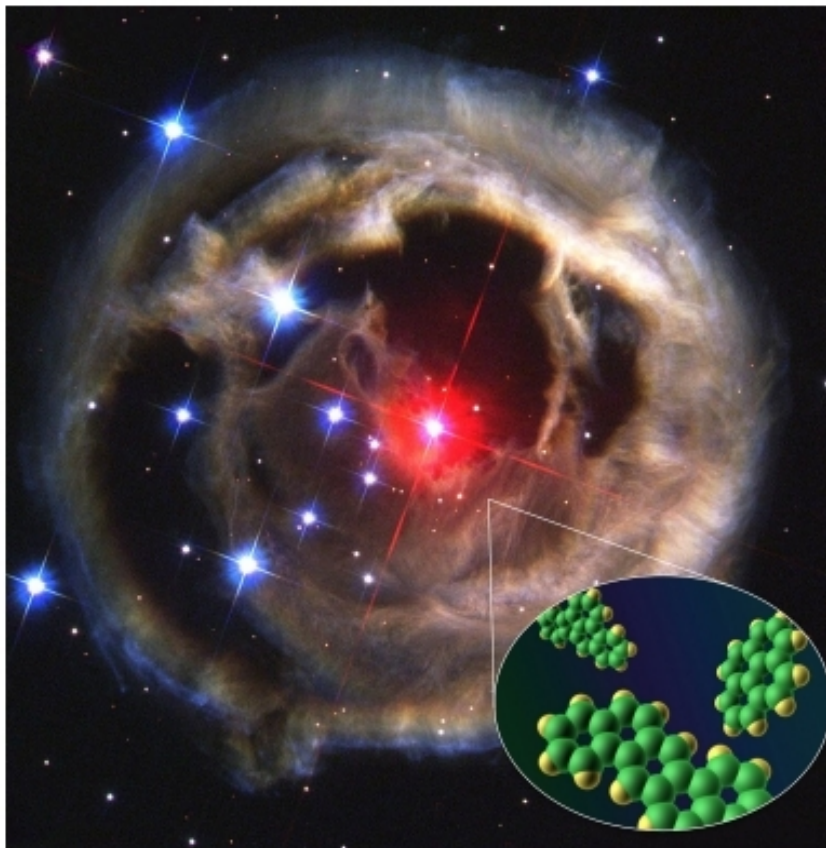
Intranet

Português

## Os ingredientes da vida na poeira estelar

22/06/2016

Astrônomos da UFRJ reproduzem em laboratório a formação e destruição de moléculas orgânicas ao redor de estrelas



Qual a origem de moléculas orgânicas? Será que elas se formam a partir da poeira ou gás interestelar? Para testar esta hipótese, o Dr. Thiago Montedini e sua supervisora Dra. Heloisa Boechat-Roberty, astrônomos do Observatório do Valongo, da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), estudaram em laboratório as reações químicas que levam à formação dos componentes básicos da vida e podem acontecer no espaço.

Algumas teorias indicam que essas moléculas podem se formar ao final da vida estelar. As estrelas têm um tempo de vida de bilhões de anos, mas eventualmente "morrem". Isso significa que o combustível para a produção de energia acaba, e durante seu período final o objeto expõe grande parte de suas camadas exteriores. Uma enorme quantidade de poeira interestelar, assim como diversas moléculas orgânicas, consideradas os blocos fundamentais para a existência de vida, é formada a partir desta ejeção de matéria.

Para estudar o processamento de moléculas orgânicas nestes ambientes, os cientistas do Observatório do Valongo utilizaram raios-X emitidos por partículas aceleradas do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), em Campinas, numa tentativa de simular o ambiente ao redor destas estrelas. O LNLS é um dos laboratórios científicos mais sofisticados em território

Press release – 22/06/2016

Valongo Observatory  
Website

## Moléculas na poeira estelar resistem milhões de anos e podem gerar vida

COMENTE

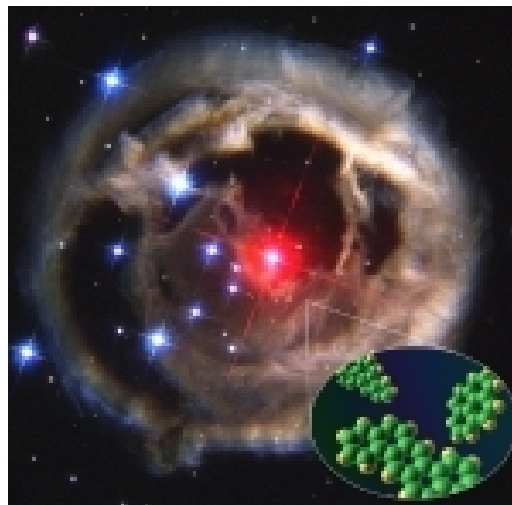
Mirthyani Bezerra  
Da UOL, em São Paulo 23/06/2016 | 08h00

f t p in ✉ Ouvir texto Imprimir Comunicar erro

Na poeira ao redor das estrelas que nascem ou morrem há inúmeras reações químicas acontecendo, nelas são geradas moléculas orgânicas, ingrediente básico para a existência de vida. Apesar do ambiente instável, sujeito à intensa radiação, essas moléculas podem "sobreviver" a mais de um milhão de anos.

Um estudo feito por pesquisadores do Observatório do Valongo, da UFRJ (Universidade Federal do Rio de Janeiro) mostrou que moléculas orgânicas, como o metilbenzeno, podem durar mais de um milhão de anos, tempo suficiente para que elas se tornem mais complexas e possam criar vida em diferentes regiões do Universo.

Os astrónomos Thiago Manfredini e Heloisa Boechat-Roberly reproduziram em laboratório as condições encontradas próximas à estrela T Dra, da constelação do Dragão, estrela que se aproxima da "morte". Os resultados foram publicados no Astrophysical Journal.



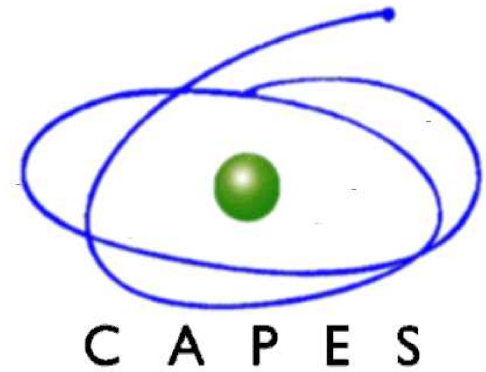
In the media  
(23/06/2016)



Thank you



Laboratório Nacional  
de Luz Síncrotron

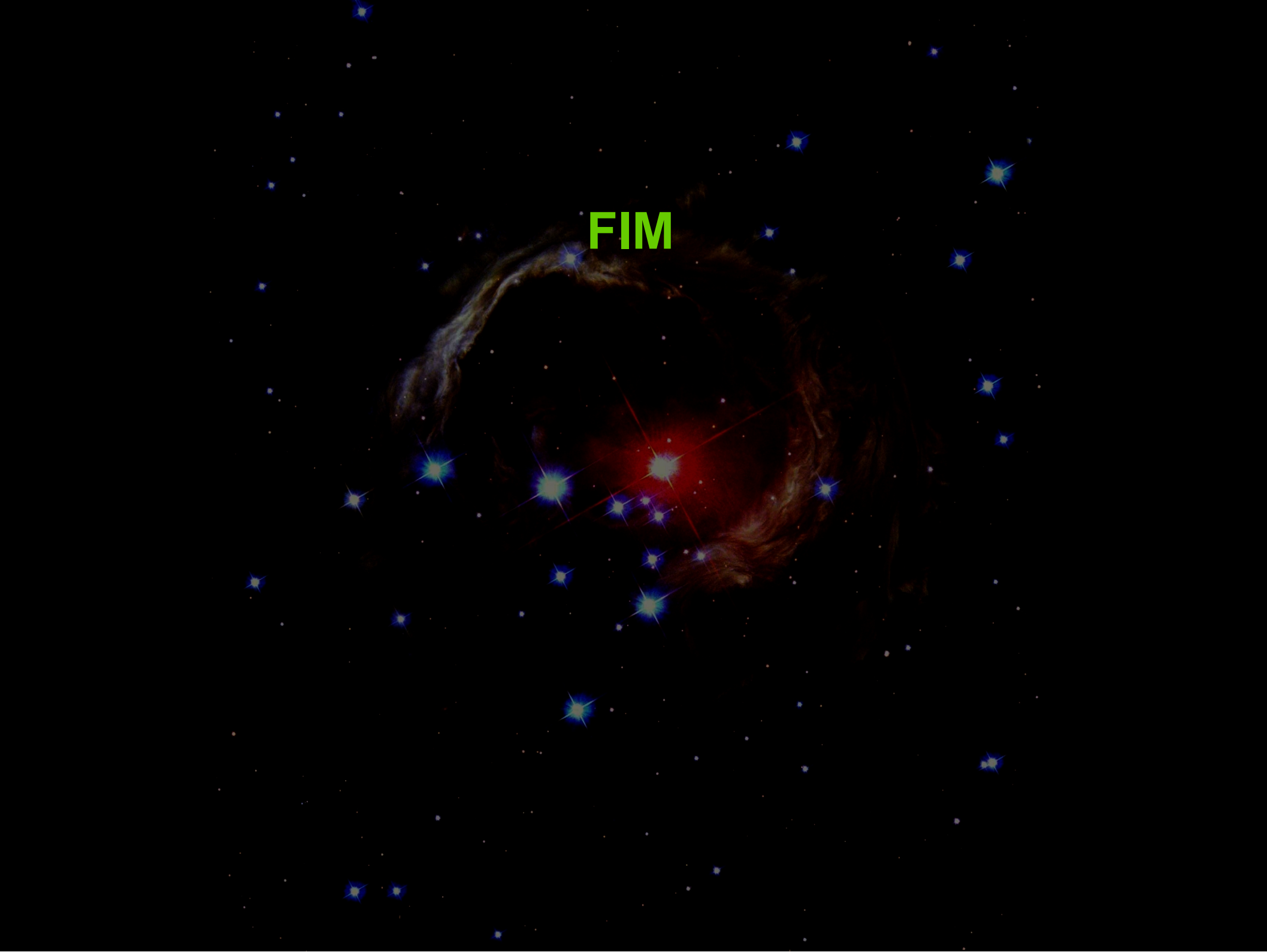


UFRJ

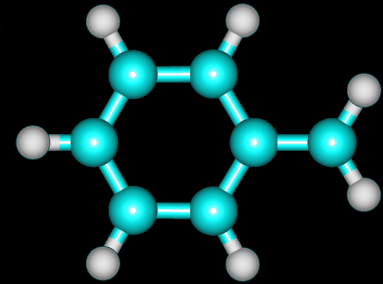
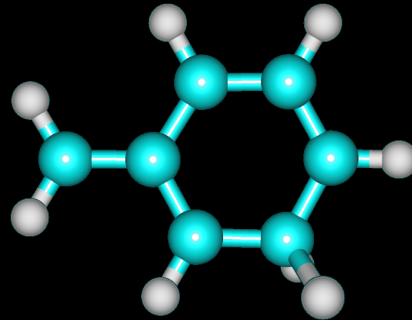
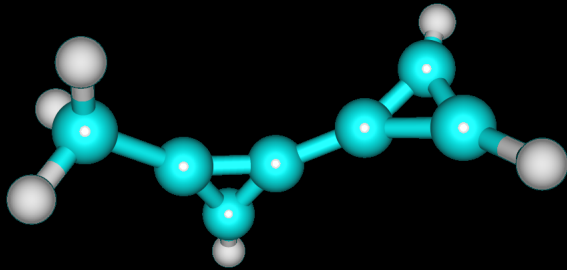
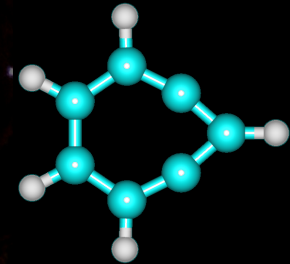
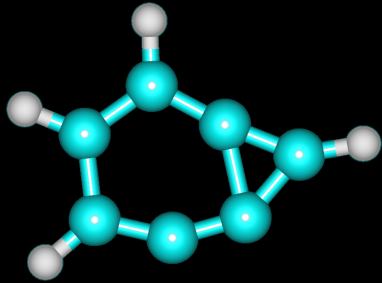
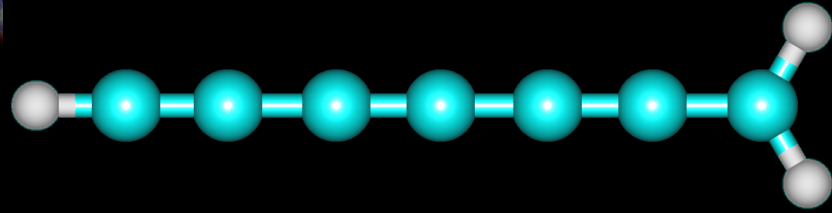
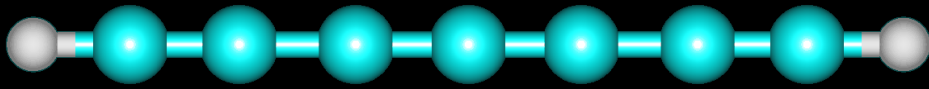


Conselho Nacional de Desenvolvimento  
Científico e Tecnológico

**FIM**

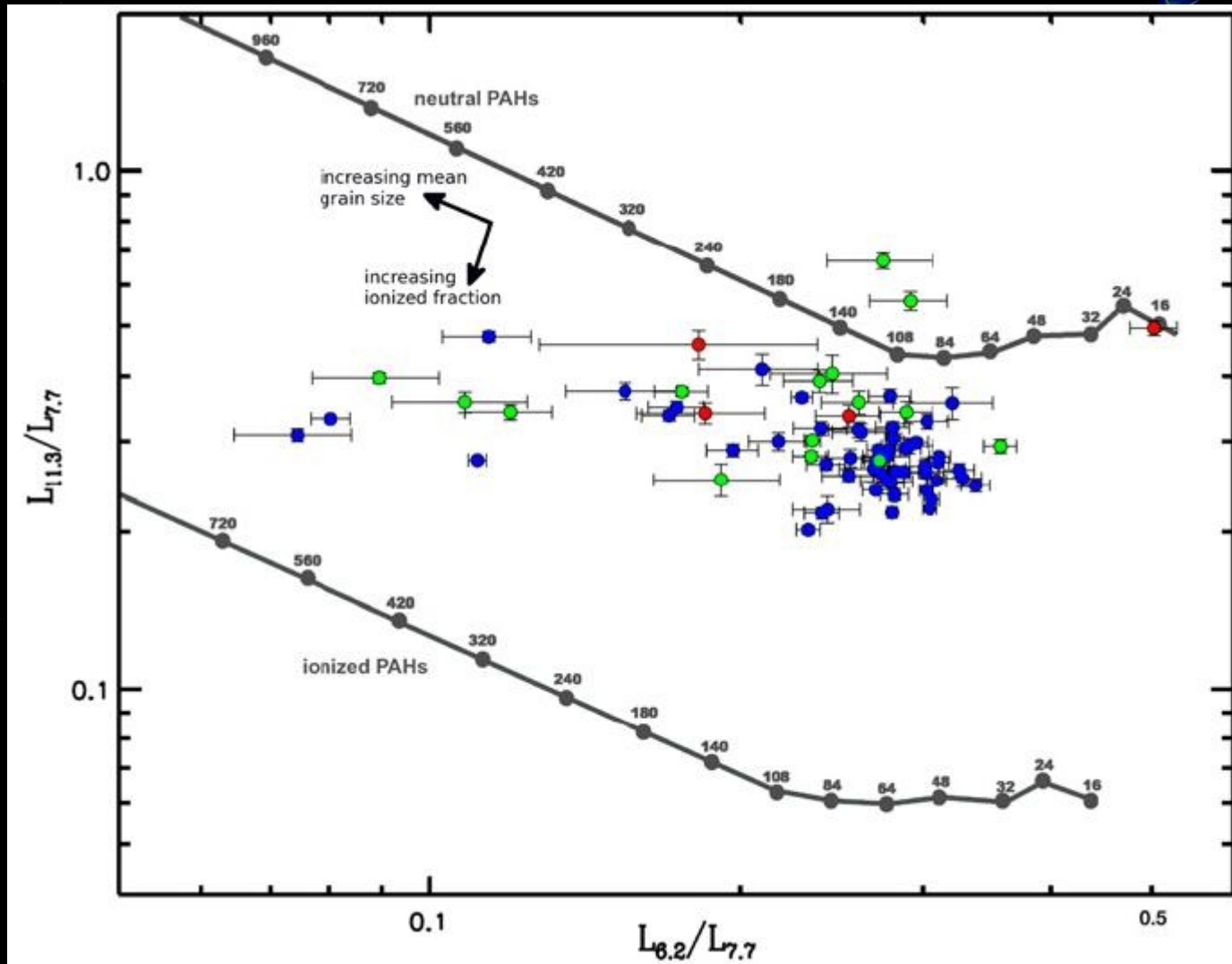


# $C_7H_n^{++}$ Stability

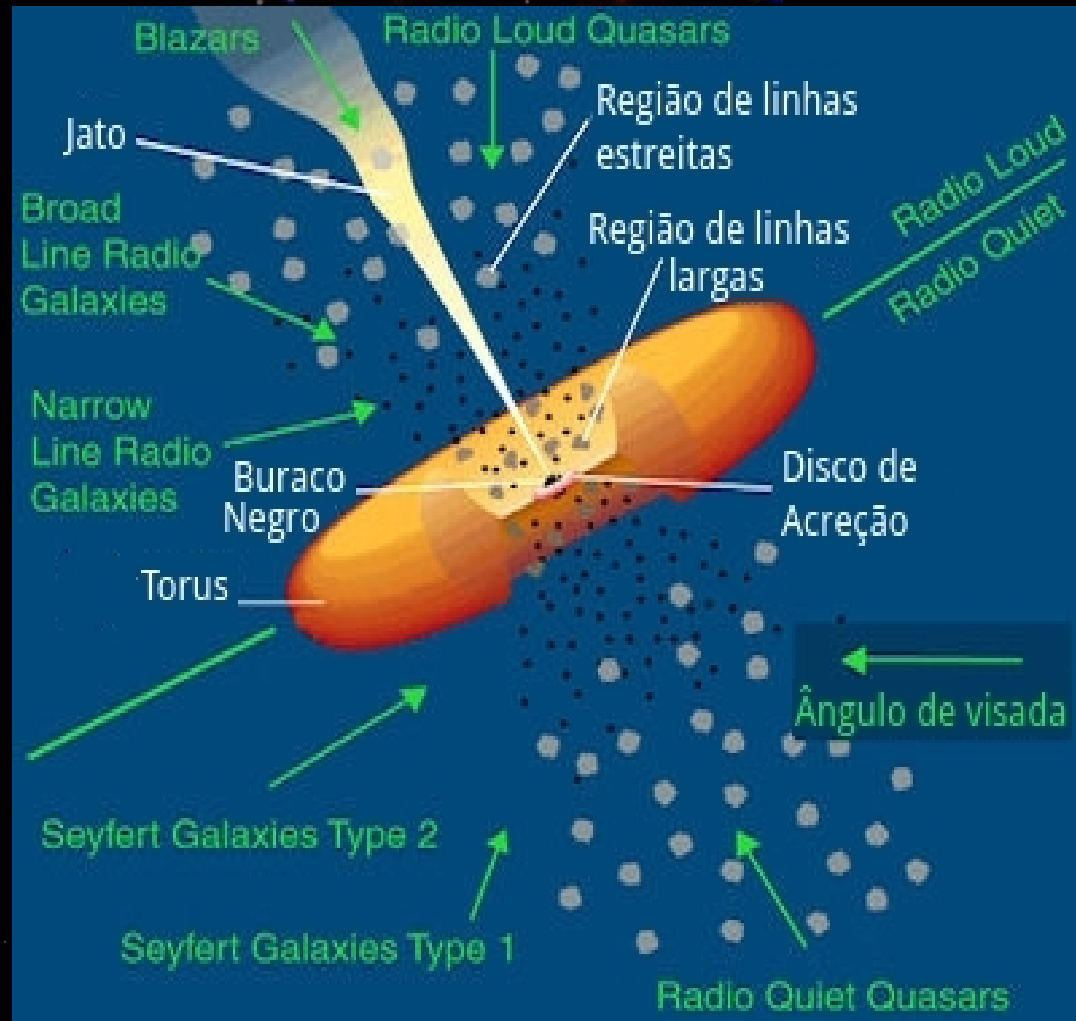




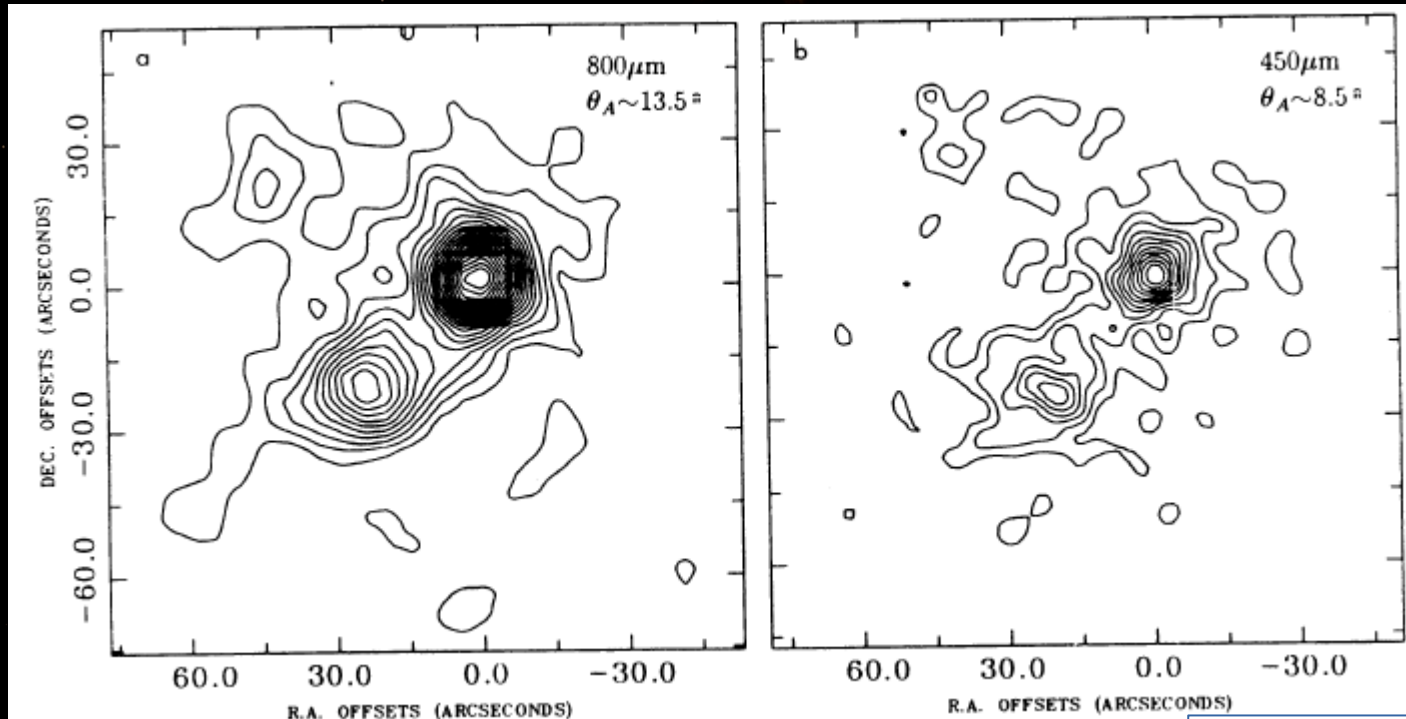
# Band ratio of PAHs detected at AGNs



# Active Galactic Nuclei (AGNs)



# NGC 1333 IRAS4A



**Class 0**

**D = 235 pc**

**L = 21  $L_{\odot}$**

**M = 9  $M_{\odot}$**

