

7 - Evolução química de regiões de formação estelar e discos protoplanetários

1. Introdução

Modelos astrofísicos e observações astronômicas mostram que as estrelas são formadas no interior de nuvens moleculares densas, dados os seus variados tipos como mostrado no capítulo 3. Baseado nisto, muitos trabalhos que determinam parâmetros físicos, como pressão, massa, temperatura, campo magnético, bem como processos de turbulência têm sido investigados para entender melhor como que o equilíbrio de uma nuvem molecular é afetado. Tal estudo é importante porque é a partir disto que uma protoestrela é formada. Trabalhos importantes podem ser usados como bibliografia para um leitor mais interessado, como Shu ^[1,2], Bate ^[3], Bodenheimer ^[4].

Contudo, neste trabalho vamos enfatizar os processos químicos envolvidos na formação estelar, e particularmente no disco protoplanetário, que é o disco de matéria formado em torno de estrelas jovens de baixa massa (em torno de 2 massas solares). No capítulo 3 foram mostrados os mecanismos pelos quais ocorre a química na fase gasosa e na fase sólida e neste trabalho vamos aplicar tais conceitos à região de formação estelar.

2. Regiões de Formação estelar

As regiões de formação estelar estão interagindo fortemente com o campo de radiação das estrelas jovens das as variações dos seus diferentes estágios de evolução, como mostrado na Figura 7.1.

O principal agente ionizante na fase de protoestrela é a radiação ultravioleta de origem térmica, embora os raios cósmicos também possam interagir com a nuvem em que o objeto está imerso. No estágio de classe II (também conhecido como T-Tauri), radiação UV e raio-X de origem não-térmica também se tornam importante devido à choques e à aceleração de cargas pelo campo magnético. Todos estes processos aquecem a nuvem molecular na região de formação, induzindo processos físico-químicos que levam à quebra de ligações moleculares, como também induzem a formação de novas espécies mais complexas.

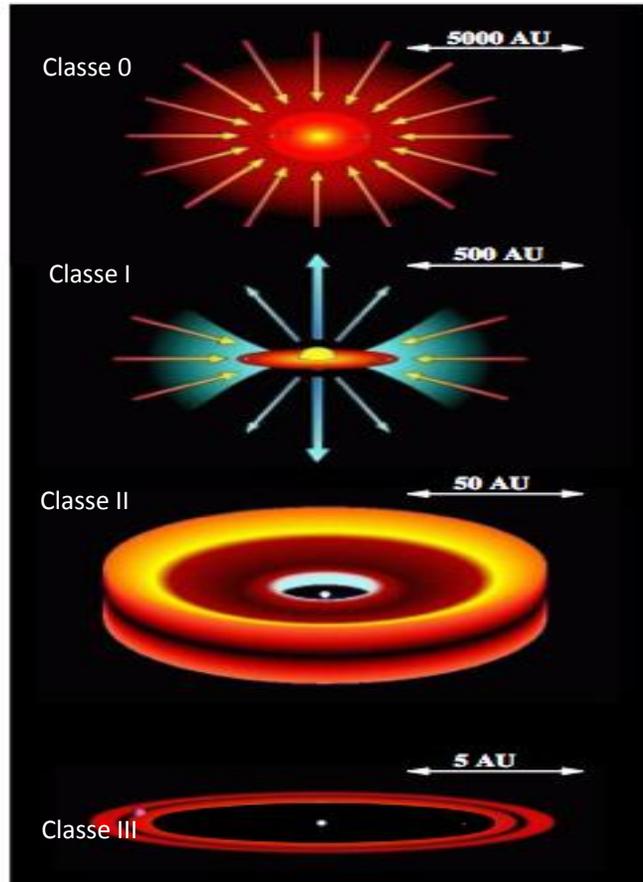


Figura 7.1 – Ilustração da geometria das protoestrelas de acordo com seu estágio evolutivo, dado em classes. A classe 0 é o seu estágio inicial e a classe III seu estágio final como protoestrela. Fonte: <https://ismlandmarks.wordpress.com/protostars/>.

2.1 Moléculas em regiões de formação estelar

Como mostrado no capítulo 3, muitas moléculas já foram identificadas no meio interestelar e em regiões de formação estelar. A Figura 7.2 mostra um espectro (distribuição de energia ou grandeza equivalente, em função do comprimento de onda ou frequência) da região da nuvem de Órion, destacando as moléculas que foram identificadas devido às suas excitações rotacionais.

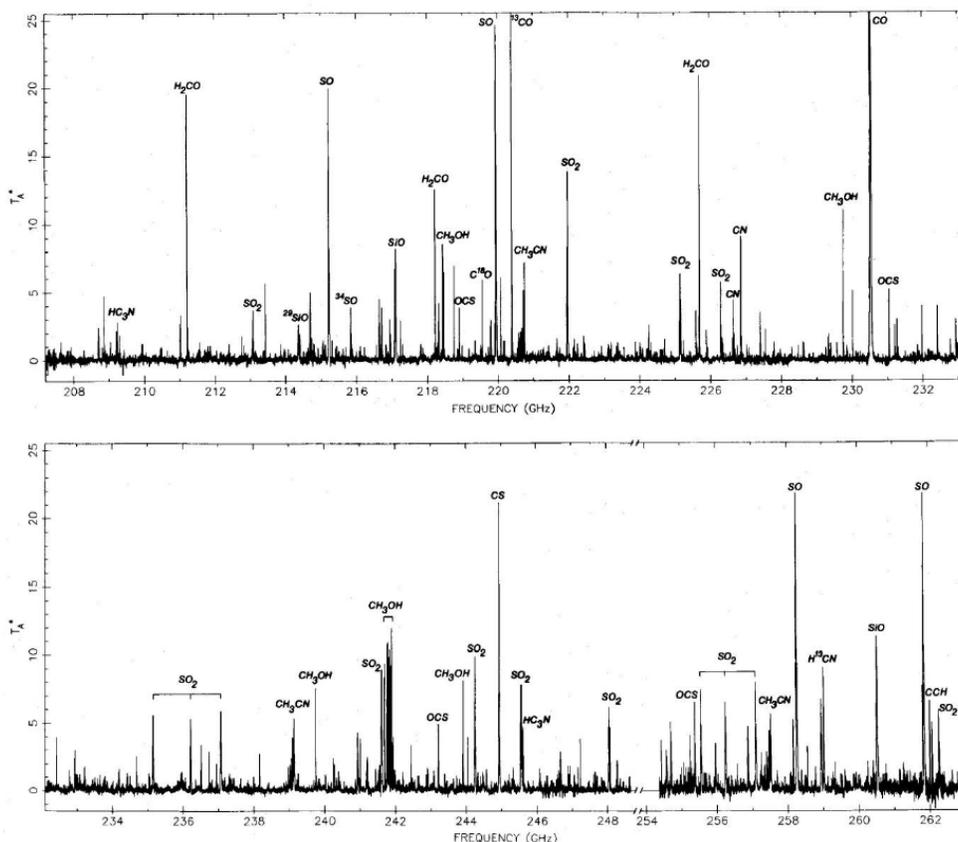


Figura 7.2 – Espectro da região de Órion, mostrando moléculas identificadas na frequência de GHz (transições rotacionais). Fonte: Blake ^[5].

As moléculas em regiões de formação estelar podem estar na fase gasosa ou condensada e são identificadas por espectroscopia, porém em regimes de frequência ou comprimentos de onda diferentes. No entanto, uma vez detectadas elas fornecem informações sobre o local onde foram observadas. A Tabela 7.1 mostra quais parâmetros físicos, as moléculas ajudam a estudar.

Tabela 7.1 – Moléculas traçadores de grandezas físicas e químicas em regiões de formação estelar. Fonte: Adaptado de <http://www.mpia.de/~semenov/Lectures/Lectures.html>.

Traçador	Propriedades	Grandeza física ou química
^{12}CO	Linhas opticamente espessas	Temperatura
H_2, NH_3	Espécies simétricas	
$^{13}\text{CO}, \text{C}^{18}\text{O}, \text{CS}, \text{CCS}, \text{H}_2\text{CO}$	Grande momento de dipolo	Densidade
$\text{HCO}^+, \text{H}^{13}\text{CO}, \text{N}_2\text{H}^+, \text{C}, \text{C}^+$	Espécies carregadas	Ionização
H_2CO , moléculas orgânicas	Espécies complexas	Processos de superfície
$\text{HDCS}, \text{D}_2\text{CS}, \text{DCO}^+, \text{DCN}, \text{H}_2\text{D}^+$	Espécies deuteradas	Fração deuterada

Geralmente a observações de uma dada região de formação estelar mostra várias assinaturas de espécies moleculares, que ajudam a traçar sua química. Regiões mais quentes, têm baixas densidades, uma vez que a radiação é pouco absorvida e espalhada. Pode ocorrer, então, que a radiação seja intensa o suficiente para aquecer a região, bem como quebrar ligação e promover ionização no local. Neste caso, tal região hipotética poderia apresentar linhas de ^{12}CO , ^{13}CO e HCO^+ , que são espécies mais simples. Por outro lado, se forem observadas moléculas de formaldeído (H_2CO) e outras espécies orgânicas como o metanol (CH_3OH), pode-se inferir que ocorreu uma química mais complexa, possibilitada pela presença de um grão de poeira. Além disso, espécies deuteradas, ajudam a entender a química de espécies mais pesadas.

2.2 Química na região da nuvem molecular de Taurus

A nuvem molecular de Taurus fica a 140 pc de distância e está localizada na constelação de Taurus. Esta região é conhecido por possuir moléculas complexas os cianopolinos (HC_nN), onde $n = 3, 5, 7$ e 9 [6]. Moléculas mais simples como o ^{12}CO e o ^{13}CO também foram observadas nesta nuvem e ajudam a entender sua densidade e temperatura. A Figura 7.3 mostra duas imagens de uma mesma região da nuvem molecular de Taurus, observadas pela transição rotacional das moléculas ^{12}CO e ^{13}CO , respectivamente.

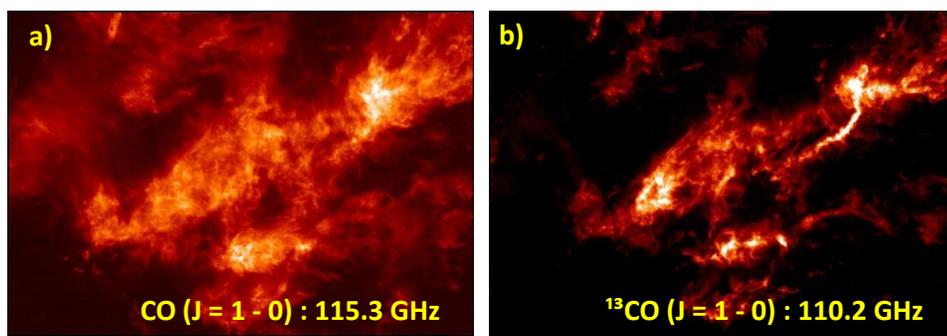


Figura 7.3 – Região da nuvem molecular de Taurus observadas em duas frequências distintas com o telescópio FCRAO de 14 m. (a) Mapa de temperatura da nuvem de Taurus, observada em 115.3 GHz, devido à transição rotacional do ^{12}CO ($J = 1 - 0$). (b) Mapa de densidade da nuvem de Taurus, observada em 110.2 GHz, devido à transição rotacional do ^{13}CO ($J = 1 - 0$). Fonte: Pineda et al. [7].

Ainda na região de Taurus, foi identificada a molécula de CCS (Thioxoethenyldiene), como mostrado na Figura 7.4. Essa molécula foi observada na frequência de 22.3 GHz ($J = 2_1 - 1_0$).

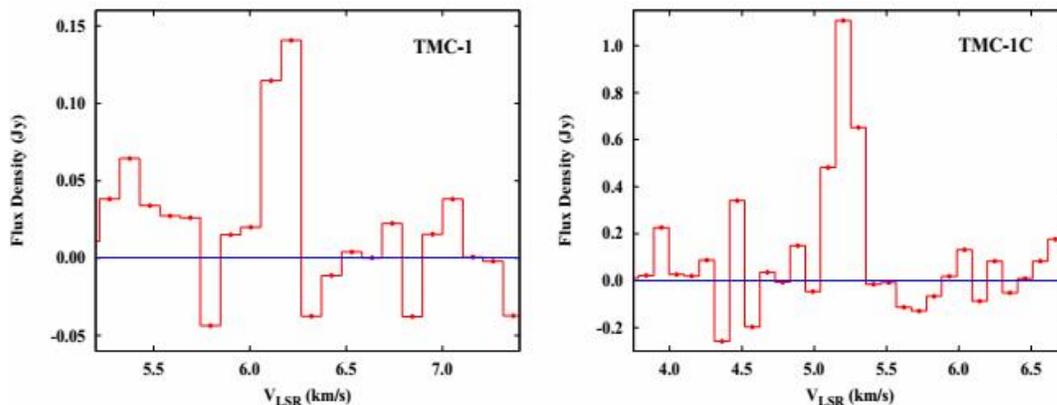
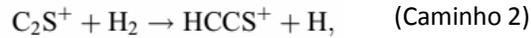
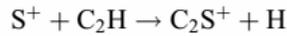
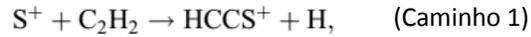


Figura 7.4 – Espectro mostrando a transição molecular em 22.3 GHz da molécula CCS, observada na nuvem molecular de Taurus. Fonte: Roy et al. [8].

O melhor caminho que leva à formação de uma molécula em regiões de formação estelar depende de parâmetros, como a abundância das moléculas ou átomos nas condições iniciais. O trabalho de Sakai et al. [9] mostra os caminhos de produção da molécula de CCS. Segundo o seu trabalho, uma reação do tipo íon-molécula ou neutro-neutro pode levar à formação de CCS, como mostrado nos processos 1 e 2, respectivamente.

Processo 1



onde o íon de $HCCS^+$ é recombinado com um elétron, produzindo CCS.

Processo 2



3. Discos protoplanetários

Durante ao processo de colapso gravitacional de uma nuvem molecular, para formar as protoestrelas e estrelas de baixa massa, o momento angular do sistema é conservado. Esse mecanismo de conservação faz com que a matéria que é agregada ao núcleo denso central, caia espiralando, e conseqüentemente, leva à formação de um disco de matéria. Adotando o potencial de que um sistema estelar possa formar planetas em seu entorno, um disco no estágio avançado (Ex. classe II e III) pode ser chamado de disco protoplanetário, que é o termo usual atualmente. A existência dos discos de matéria já foi confirmada observacionalmente, como mostra a Figura 7.5.

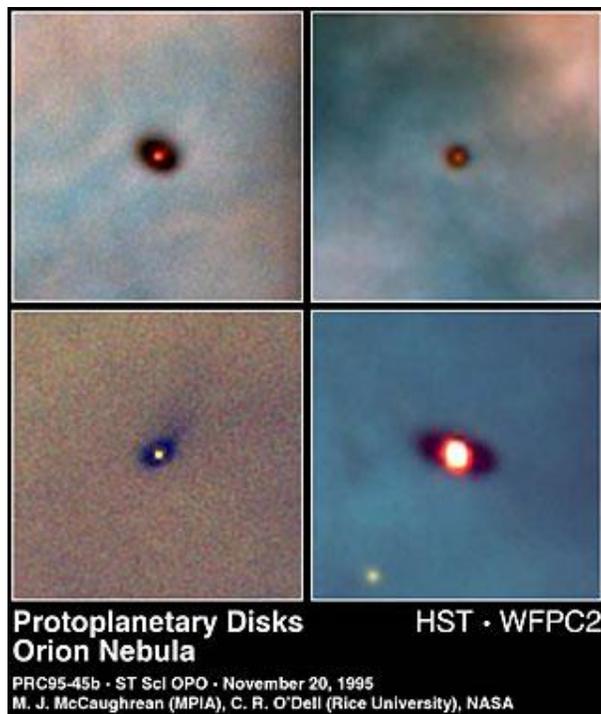


Figura 7.5 – Imagens de discos de matéria (também chamados de discos de acreção) em protoestrelas na nuvem de Órion. Fonte: <http://spacetelescope.org/images/opo9545b/>.

Uma vez formados, os discos protoplanetários apresentam uma distribuição de densidade, bem como de temperatura, sendo que este último parâmetro depende da incidência de radiação neste disco. A Figura 7.6 é bem ilustrativa, e mostra como que varia a temperatura de um disco, bem como alguns processos físicos que ocorrem em sua distribuição em função da radiação UV e raio-X de origem térmica.

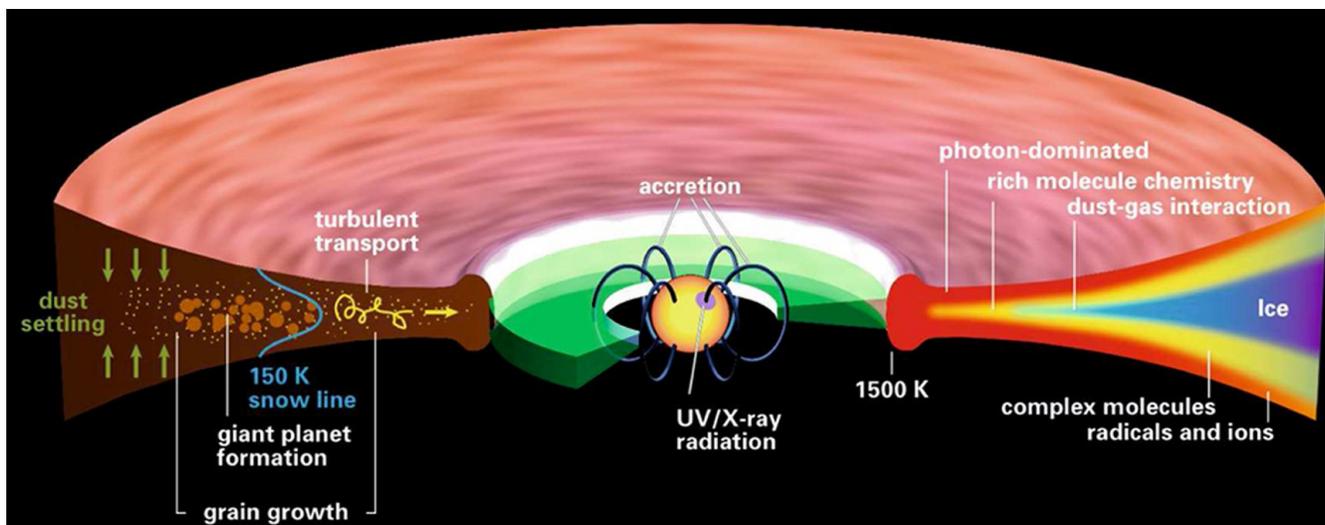


Figura 7.6 – Processos físicos e químicos que ocorrem no disco protoplanetário. O disco possui uma região livre de poeira (verde), dominado por gás e outra combinado de poeira e gás, limitada pela temperatura de sublimação da poeira. (a) Este lado ilustra que existem grãos de poeira pequenos e grandes nos discos, bem como transporte turbulento de matéria na direção central. O termo *snow line* representa um limite, definido pela temperatura de sublimação de um gelo de água no meio interestelar. (b) Processos químicos e camadas de temperatura em função da radiação UV e raio-X que interage com o disco. Camadas mais externas (*photon-dominated*) é dominada pela radiação UV. Regiões mais frias no interior do disco permitem a formação de gelos de diferentes espécies. Fonte: Henning & Semenov ^[10].

3.1 A química de discos protoplanetários induzida por radiação

Neste texto vamos focar no lado (b) da Figura 7.6, que é a química do disco protoplanetário. É importante observar que a radiação tem penetrabilidades diferentes na matéria de acordo com sua natureza, ou seja, sua energia. Dadas certas condições, a penetrabilidade da radiação UV é menor que 0.01 g/cm^2 , enquanto que os raios-X penetram até 0.1 g/cm^2 (Henning & Semenov ^[10]). Desta forma, os raios UV desencadeiam uma química na região interna do disco e na sua superfície (*photon-dominated*). Nessas regiões as temperaturas variam de $100 - 5000 \text{ K}$ e a densidade chega a 10^{12} cm^3 na região mais interna sendo redistribuído para densidades menores ao longo da superfície. Nos locais de alta densidade, é provável que ocorram reações envolvendo três corpos. Na camada inferior (*rich molecule chemistry*) as densidades e baixas temperaturas ($250 - 3500 \text{ K}$) permitem a formação de moléculas, e consequentemente a química entre elas. Essa região é mais acessada por raios-X do que por radiação UV. Esse tipo de interação ioniza parte das moléculas e induz a química do tipo íon-molécula, neutro-neutro, recombinação dissociativa entre outras. Contudo, numa região mais afastada da protoestrela e na camada central, as temperaturas são baixas o suficiente para a química de átomos e moléculas na superfície dos grãos de poeira, levando à formação de mantos de gelos. Em suma, a química em discos protoplanetários ocorre para átomos em regiões muito quentes, verificadas através de emissões atômicas (OI – $63 \mu\text{m}$, CII – $157 \mu\text{m}$), para moléculas na fase gasosa, dadas por transições rotacionais, observadas em longos comprimentos de onda, bem como na fase sólida, dada a presença de gelos.

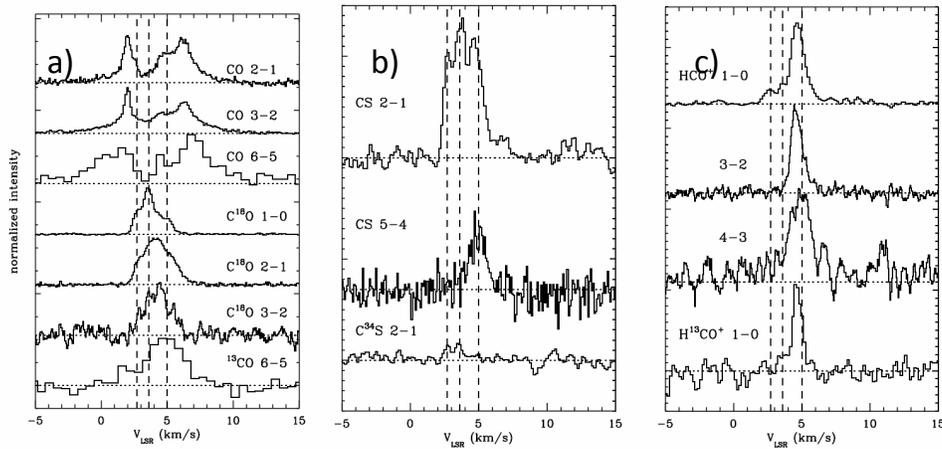


Figura 7.7 – Emissões rotacionais de moléculas na fase gasosa na direção de Elias 29. (a) Emissões das moléculas de CO e $C^{18}O$. (b) emissões de CS e $C^{34}S$. (c) Emissões de HCO^+ e $H^{13}CO^+$. Fonte: Boogert et al. ^[12].

O estudo da química de discos precisa ser desenvolvido com cuidado, uma vez que durante o estágio de formação estelar, a protoestrela está embebida em sua nuvem primordial. Geralmente as evidências observacionais mostram a química na direção de uma protoestrela. Ilustramos isso para o caso da protoestrela Elias 29. Este objeto está localizado na nuvem molecular ρ Ophiuchi, à 125 pc de distância (Rocha & Pilling ^[11]). Boogert et al ^[12] mostra dados de emissão de moléculas na fase gasosa na direção de Elias 29, mostrados na Figura 7.7. Transições rotacionais mais baixas (Ex: 2 – 1) ocorrem com mais frequência, do que transições entre 6 – 5 (Figura 7.7a). Esse resultado mostra que a região de moléculas de mais alta excitação está submetida a processos mais energéticos, e podem, por exemplo, estar próximo a fonte central.

Além da química na fase gasosa, espécies moleculares condensadas também podem estar presentes no entorno de protoestrelas. Como mostrado no capítulo 3, a química de gelos ocorre na presença de grãos de poeira, cuja temperatura local é baixa o suficiente para permitir a condensação de moléculas em sua superfície. A Figura 7.8 mostra o espectro de Elias 29, obtido no infravermelho com o telescópio espacial ISO, destacando as absorções e a natureza dos gelos.

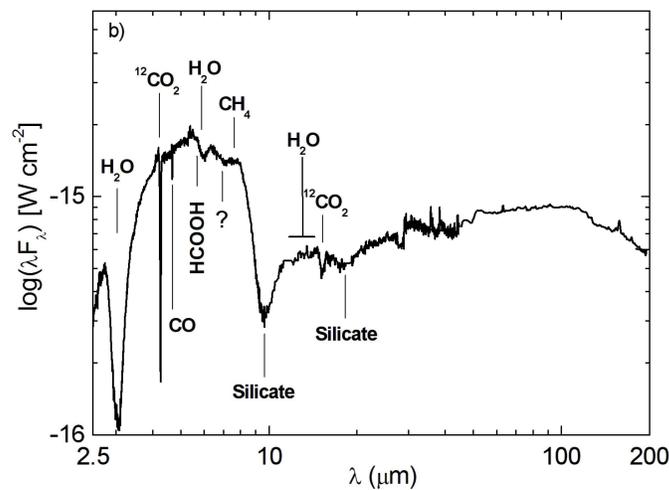


Figura 7.8 – Espectro no infravermelho da protoestrela Elias 29. As absorções são associadas com moléculas na fase condensada de gelos (Ex. H_2O , CO e CO_2) e poeira (silicatos). Fonte: Rocha & Pilling ^[11].

Como comentado anteriormente, quando a radiação interage com as moléculas, pode ocorrer apenas a excitação molecular, como também a quebra de ligações químicas. Todos esses processos são

importantes, uma vez que está sendo fornecida energia para um conjunto de moléculas, que por sua vez, podem reagir entre si, levando à formação de novas moléculas. O trabalho de Rocha & Pilling^[11], faz a modelagem do espectro da protoestrela Elias 29, utilizando dados de gelos astrofísicos que foram previamente bombardeados por partículas análogas à raios cósmicos de alta energia (52 MeV), em laboratório. Neste trabalho, os autores mostram que a formação de moléculas de HCOOH, CH₄, bem como várias outras moléculas representadas pelo símbolo ‘?’ da Figura 7.8, podem ser justificadas pelo processamento radiativo dos gelos.

3.2 A química de discos protoplanetários induzida por temperatura

Os discos protoplanetários também apresentam evolução química quando submetidos à temperaturas altas, uma vez que está sendo fornecida energia suficiente para as moléculas se reorganizarem, mudando do estado amorfo para o cristalino, por exemplo. A Figura 7.9 mostra como varia a morfologia dos picos em 15.2 μm das moléculas de CO₂ em diferentes protoestrelas, e consequentemente, submetidas a diferentes temperaturas.

A explicação do perfil dividido em 15.2 μm vem do fato de que os gelos em ambientes frios do meio interestelar, encontram-se misturados, como por exemplo H₂O:CO₂. Esses dois gelos possuem propriedades de polaridade diferentes, sendo que o H₂O é uma molécula polar, enquanto que o CO₂ é uma molécula apolar. Resultados dos experimentos de laboratório realizados por Ehrenfreund et al.^[13] mostram que à baixas temperaturas, a mistura “mascara” o pico dividido em 15.2 μm , enquanto que se há energia disponível suficiente, ocorre a segregação da mistura, levando a formação de uma camada de gelo apenas polar e outra apenas apolar. Neste caso, o pico dividido, que é natural da molécula de CO₂ pura, aparece. Contudo, é mostrado em Rocha & Pilling^[11] que a energia de interação de um raio cósmico, pode ser depositada no gelo astrofísico, levando ao aumento de temperatura, e consequentemente, a segregação da mistura.

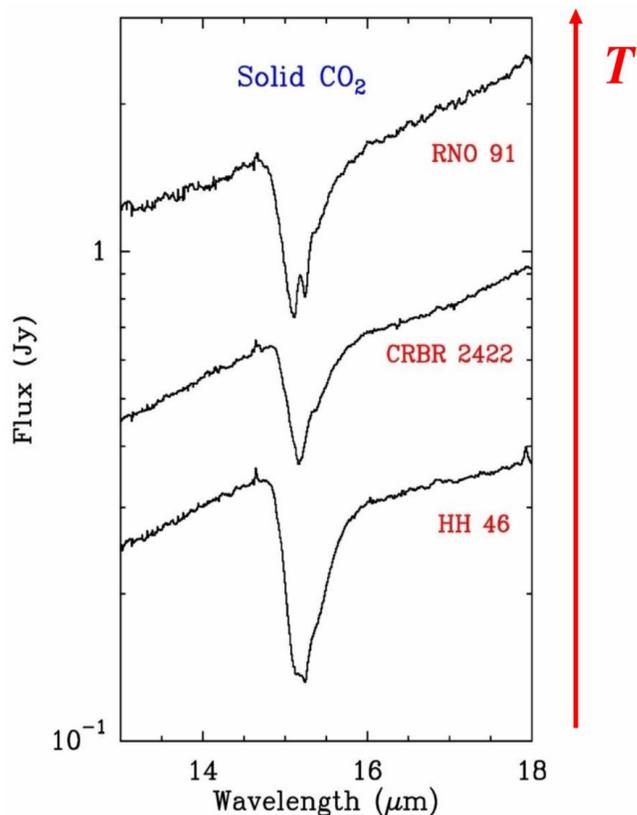


Figura 7.9 – Espectros de protoestrelas enfocando a absorção da molécula de CO₂ em 15.2 μm . A morfologia do pico varia com o aumento da temperatura. Fonte: Pontoppidan et al.^[14].

4. Modelos de discos protoplanetários (RADMC3D e Prodimio)

A modelagem computacional de discos protoplanetários combinada à dados observacionais é importante para ajudar a compreender a físico-química de regiões de formação estelar. Os códigos computacionais simulam o processo de interação da radiação com a matéria usando equações de transferência radiativa. Neste processo, é simulado como que a radiação é absorvida, reemitida ou espalhada por um meio com gás e poeira. Como ferramenta computacional, a maioria dos códigos utiliza o método de Monte Carlo, para simular os processos de interação. Contudo, novas ferramentas computacionais estão sendo desenvolvidas para simular também a química de discos protoplanetários.

Dentre os vários códigos, podemos citar o RADMC-3D (<http://www.ita.uni-heidelberg.de/~dullemond/software/radmc-3d/>), desenvolvido pelo Prof. Dr. C. P. Dullemond, da Universidade de Heidelberg – Alemanha e o código ProDiMo (<http://www-star.st-and.ac.uk/~pw31/ProDiMo.html>), do Prof. P. Woitke da Universidade de St. Andrews, ambos com outros colaboradores.

O código RADMC-3D simula apenas processos de transferência radiativa de um meio com gás e/ou poeira, podendo conter gelos astrofísicos. A Figura 7.10 ilustra um modelo de disco protoplanetário e seu espectro produzido com o RADMC-3D.

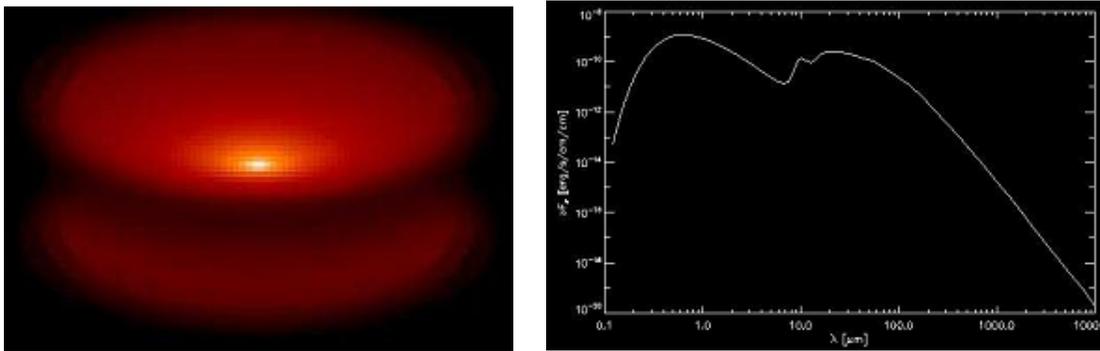


Figura 7.10 – (a) Ilustração de um disco protoplanetário. (b) Modelo de espectro de um disco protoplanetário. Fonte: http://www.ita.uni-heidelberg.de/~dullemond/software/radmc-3d/radmc-3d_v0.35.pdf.

Por outro lado, o código ProDiMo simula a transferência radiativa e processos físico-químicos como taxa de aquecimento e resfriamento do gás. A Figura 7.11 ilustra um modelo de disco protoplanetário e os processos químicos, calculados com o ProDiMo.

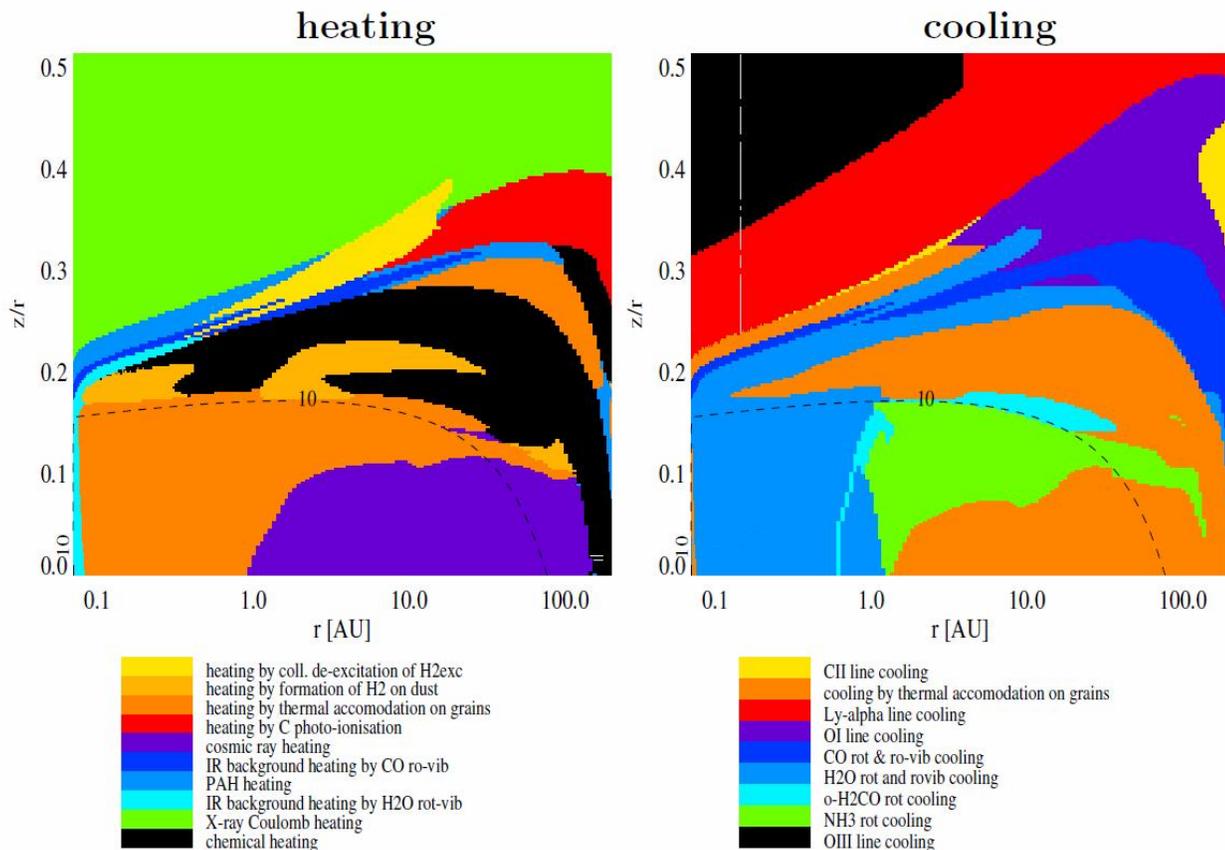


Figura 7.11 – Distribuição de um disco protoplanetário dadas as escalas de altura relativa (z/r) e raio (r) em unidades astronômicas mostrando os processos de aquecimento e resfriamento. (a) Aquecimento de diferentes naturezas de um disco protoplanetário. (b) Processos de resfriamento via mecanismos diferentes de um disco protoplanetário. Fonte: <http://www-star.st-and.ac.uk/~pw31/TypicalModel.html>.

5. Conclusões

Foi mostrado neste trabalho, que a química em regiões de formação estelar e discos protoplanetários é dependente do campo de radiação e da temperatura. Uma vez que o sistema que envolve a protoestrela evolui dinamicamente, ocorre a própria evolução química do ambiente de formação estelar. Deste processo, muitas moléculas mais complexas podem ser formadas de moléculas mais simples. Isto enriquece quimicamente o ambiente de formação, cujo material pode ser agregado posteriormente a um planeta formado, caso haja condições propícias.

Pode-se concluir também, que a modelagem computacional de discos protoplanetários é importante para entender quais e como os processos físico-químicos ocorrem nessas regiões. Nesse sentido, os códigos RADMC-3D e ProDiMo se mostram ferramentas importantes no estudo de simulações computacionais que envolvem a química de ambientes de estrelas jovens.

6. Referências:

- [1] Shu, F. H. – **Self-similar collapse of isothermal spheres and star formation**. 1977, ApJ, Vol. 214, pp. 488.
- [2] Shu, F. H., Adams, F. C., Lizano, S. – **Star formation in molecular clouds - Observation and theory**. 1987, ARA&A, Vol. 25, pp. 23.

- [3] Bate, M. R. – **Stellar, brown dwarf, and multiple star properties from hydrodynamical simulations of star cluster formation.** 2009, MNRAS, Vol. 392, pp. 590.
- [4] Bodenheimer, P. H. – **Principles of Star Formation.** Ed. Springer-Verlag: USA, 2011.
- [5] Blake, G. A., Anicich, V. G., Huntress, W. T. Jr. – **Chemistry of chlorine in dense interstellar clouds.** 1986, ApJ, Vol. 300, pp. 415.
- [6] Taurus Molecular Cloud 1. http://en.wikipedia.org/wiki/Taurus_Molecular_Cloud_1, acessado em 15 de fevereiro de 2015.
- [7] Pineda, J. L., Goldsmith, P. F., Chapman, N. – **The Relation Between Gas and Dust in the Taurus Molecular Cloud.** 2010, ApJ, Vol. 721, pp. 686.
- [8] Roy, N., Datta, A., Momjiam, E. et al. – **Imaging of the CCS 22.3 GHz emission in the Taurus molecular cloud complex.** 2011, ApJ, Vol 739, pp. L4.
- [9] Sakai, N., Ikeda, M., Morita, M. et al. – **Production Pathways of CCS and CCCS Inferred from Their ¹³C Isotopic Species.** 2007, ApJ, Vol. 663, pp. 1174.
- [10] Henning, Th. & Semenov, D. – **Chemistry in Protoplanetary Disks.** 2013, Chem. Rev., Vol. 113, pp. 9016.
- [11]] Rocha, W. R. M. & Pilling, S. – **Computational modeling of the class I low-mass protostar Elias 29 applying optical constants of ices processed by high energy cosmic ray analogs.** Aceito em janeiro/2015, ApJ.
- [12] Boogert, A. C. A., Hogerheijde, M. R., Ceccarelli, C. et al. – **The Environment and Nature of the Class I Protostar Elias 29: Molecular Gas Observations and the Location of Ices.** 2002, ApJ, Vol. 570, pp. 708.
- [13] Ehrenfreund, P., Boogert, A. C. A., Gerakines, P. A. – **Infrared spectroscopy of interstellar apolar ice analogs.** 2007, A&A, Vol. 328, pp. 649.
- [14] Pontoppidan, K. M., Boogert, A. C. A., Fraser, H. J. – **The c2d Spitzer Spectroscopic Survey of Ices around Low-Mass Young Stellar Objects. II. CO₂.** 2008, ApJ, Vol. 678, pp. 1005.