

**UNIVERSIDADE DO VALE DO PARAÍBA**

INSTITUTO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO

WILL ROBSON MONTEIRO ROCHA

**MODELAGEM COMPUTACIONAL DO AMBIENTE  
CIRCUMESTELAR DE PROTOESTRELAS  
EMPREGANDO DADOS DE GELOS  
BOMBARDEADOS POR RAIOS CÓSMICOS  
SIMULADOS EM LABORATÓRIO**

São José dos Campos - SP  
Agosto/2015

**WILL ROBSON MONTEIRO ROCHA**

**MODELAGEM COMPUTACIONAL DO AMBIENTE  
CIRCUMESTELAR DE PROTOESTRELAS  
EMPREGANDO DADOS DE GELOS  
BOMBARDEADOS POR RAIOS CÓSMICOS  
SIMULADOS EM LABORATÓRIO**

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física e Astronomia, como parte do processo de avaliação para a obtenção do título de Doutor em Física e Astronomia

Orientadora: Prof. Dr. Sergio Pilling Guapyassú de Oliveira

São José dos Campos - SP  
Agosto/2015

# FICHA CATALOGRÁFICA

**UNIVERSIDADE DO VALE DO PARAÍBA**  
INSTITUTO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO

**MODELAGEM COMPUTACIONAL DO AMBIENTE CIRCUMESTELAR DE  
PROTOESTRELAS EMPREGANDO DADOS DE GELOS BOMBARDEADOS POR  
RAIOS CÓSMICOS SIMULADOS EM LABORATÓRIO**

**WILL ROBSON MONTEIRO ROCHA**

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física e Astronomia, como parte do processo de avaliação para a obtenção do título de Doutor em Física e Astronomia.

Aprovado em:

Membros da Banca:

Prof. Dr. Aléx Cavalieri Carciofi

\_\_\_\_\_  
(IAG-USP)

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Heloisa Maria Boechat-Roberty)

\_\_\_\_\_  
(OV – UFRJ)

Prof. Dr. José Williams dos Santos Vilas Boas

\_\_\_\_\_  
(INPE)

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Diana Paula Pilling Andrade

\_\_\_\_\_  
(UNIVAP)

Prof. Dr. Irapuan Rodrigues de Oliveira Filho

\_\_\_\_\_  
(UNIVAP)

Prof. Dr. Arian Ojeda Gonzalez

\_\_\_\_\_  
(UNIVAP)

Prof. Dr. Sergio Pilling Guapyassú de Oliveira

\_\_\_\_\_  
(UNIVAP) - Orientador

São José dos Campos - SP  
Agosto/2015

*À Deus toda honra e toda a glória!*

# AGRADECIMENTO

Agradeço primeiramente a Deus por ter suprido todas às minhas necessidades físicas, intelectuais e emocionais ao longo do desenvolvimento desta tese.

Agradeço também a minha amada esposa Fernanda por ter ficado sempre ao meu lado, dando incentivos e conselhos nos momentos de dificuldade e de alegria.

Quero lembrar e agradecer aos meus pais Raimundo e Hermenegilda e aos meus sogros (meus segundos pais) Rogério e Helena, onde encontrei minha segunda casa e por terem me ajudado em momentos de dificuldade, tanto financeira quanto emocionalmente durante tanto tempo.

Agradeço ao meu orientador e amigo, Dr. Sergio Pilling pelos inúmeros conselhos dados e pela paciência empregada durante minha orientação. Agradeço-lhe também pelos momentos alegres e “perigosos” durante as nossas viagens ao exterior, com as quais tive o privilégio de aprender sempre mais sobre a vida.

Quero também agradecer aos meus colegas e professores do IP&D/UNIVAP pelas várias ajudas com códigos computacionais e discussões científicas, que tanto me ajudaram a desenvolver profissionalmente, dentre eles, o Alexandre José (Mineirinho), Alexandre Bergantini, Victor Bonfim (Vitão), Fredson e Marcelo. Lembro também do pessoal de IC, com quem temos trabalhado, Rodrigo Justen e Karla Faquine.

Também agradeço de coração, à Graziela Manucio, pela grande ajuda pelas passagens de ônibus durante meu primeiro ano de doutorado, que muito me ajudou a desenvolver esta tese.

Por último, mas não menos importante, agradeço à FVE pela bolsa de doutorado entre 2012 – 2013 e à FAPESP (Processo: DR 2013/07657-5) pela bolsa de doutorado entre 2013 – 2015.



Palavras poderosas talvez prevaleçam em outras áreas da experiência humana, mas na ciência, as únicas coisas que contam são as evidências e a lógica do argumento.

Neil DeGrasse Tyson (1958 - )

# RESUMO

A distribuição espectral de energia de objetos estelares jovens, obtidos com telescópios espaciais no infravermelho, como o ISO (*Infrared Space Observatory*), têm mostrado várias bandas de absorção associadas a moléculas voláteis condensadas sobre grãos de poeira de material refratário. A combinação de estudos observacionais e experimentais mostram que as principais composições dos voláteis são  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{NH}_3$  e  $\text{CH}_4$ . No entanto gelos compostos por moléculas mais complexas, tais como o  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{H}_2\text{CO}$ ,  $\text{HCOOH}$ ,  $\text{CH}_3\text{CHO}$ ,  $\text{NH}_4^+$  e  $\text{OCN}^-$  também foram observadas, embora em abundâncias menores que gelos mais simples. A presença de gelos complexos misturados a gelos simples em regiões de formação estelar tem sido interpretada como uma evolução química do gelo simples inicial, ocasionada pelo processamento térmico e energético do campo de radiação estelar ou interestelar, tais como UV, raios-X e raios cósmicos. Nesse trabalho, portanto, é abordada a questão da evolução química de gelos astrofísicos, induzida pelo bombardeamento de raios cósmicos na fase inicial da formação estelar, onde os ventos estelares não modulam as partículas carregadas. Para desenvolver esse trabalho, a metodologia empregada é dividida em três partes: (i) parte experimental, onde são obtidos dados de absorvância de gelos virgens e bombardeados por raios cósmicos simulados em laboratório; (ii) parte computacional, quando são empregados os códigos NKABS, para calcular os índices de refração complexos dos gelos a partir do dado experimental e RADMC-3D para calcular as opacidades de absorção, espalhamento e albedo dos gelos virgens e bombardeados. Ainda nessa parte, os dados calculados, foram usados em um modelo de protoestrela para modelar computacionalmente o espectro e as imagens observadas da protoestrela de baixa massa Elias 29. A correspondência com o cenário real ocorre na (iii) parte observacional, onde os observáveis físicos simulados são comparados com os dados observados. Entre os resultados encontrados, ficou mostrado que a evolução química do ambiente circumestelar de protoestrelas não pode ser simulado ao ser adotado o cenário em que os gelos não foram processados energeticamente. Além disso, essa metodologia permite ser crítico quanto à eficiência do processamento energético de gelos simulados em laboratório.

**Palavras-chave:** gelos astrofísicos, astroquímica experimental, NKABS, RADMC-3D, Elias 29, raios cósmicos

# ABSTRACT

The spectral energy distribution of young stellar objects, obtained with ISO telescope in the infrared, has shown several absorption bands associated to volatile condensed molecules onto dust grains. The combination of observational and experimental techniques shows the main composition of volatile molecules are H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub> e CH<sub>4</sub>. However, astrophysical ices composed by complex molecules, such as CH<sub>3</sub>OH, H<sub>2</sub>CO, HCOOH, CH<sub>3</sub>CHO, NH<sub>4</sub><sup>+</sup> e OCN<sup>-</sup> also has been detected, nevertheless in abundance less than simple ices. The presence of complex ices together with simple one, in star-forming regions has been associated with the chemical evolution of the initial and simple ice, triggered by thermal and energetic processing by stellar- or interstellar radiation field, such as UV, X-rays and cosmic rays. In this thesis, it is addressed the question of chemical evolution of the ices, triggered by bombardment of cosmic rays in the young stellar objects in initial phase, where the stellar winds cannot deflect the charged particles. To develop this idea, it was employed a methodology divided in three parts: (i) experimental part, where are obtained absorbance data of unprocessed and processed ices by cosmic rays simulated in laboratory; (ii) computational part, when are employed the NKABS code to calculate the complex refractive indices of ices from a experimental data and RADMC-3D to calculate the absorption and scattering opacities, as well as the albedo of unprocessed and processed ices. In the computational part, the opacities are employed into RADMC-3D to model the spectrum and images of low-mass protostar Elias 29. The comparison with real scenario takes plays in the (iii) observational part, where the spectrum and images are compared with the observed data obtained with telescopes. Among the main results, it is clear that chemical evolution of circumstellar environment of protostars cannot be simulated adopting the hypothetical scenario in which the ices remains unprocessed. In addition, such methodology allows understand is the processing of astrophysical ices in the laboratory corresponds to real scenario in the interstellar medium.

**Keywords:** astrophysical ices, experimental astrochemistry, NKABS, RADMC-3D, Elias 29, cosmic rays.

# SUMÁRIO

<b>INTRODUÇÃO - .....</b>	<b>13</b>
<b>CAPÍTULO 1 - A FÍSICO-QUÍMICA DE REGIÕES DE FORMAÇÃO ESTELAR DE BAIXA MASSA .....</b>	<b>17</b>
1.1 Formação de estrelas de baixa massa .....	17
1.1.1 Observação de gelos em torno de estrelas jovens .....	21
1.1.2 A química em discos e envelopes protoestelares .....	24
1.2 Processos físico-químicos .....	27
1.2.1 O campo de radiação ionizante .....	28
1.2.2 A química na fase gasosa .....	34
1.2.2 A química na superfície dos grãos de poeira interestelar .....	38
<b>CAPÍTULO 2 - METODOLOGIAS ADOTADAS .....</b>	<b>44</b>
2.1 Panorama das metodologias adotadas .....	44
2.2 Metodologia experimental típica .....	46
2.2.1 Vibrações moleculares e espectroscopia no IR .....	49
2.2.2 Conjunto de dados experimentais .....	51
2.3 Metodologia computacional .....	56
2.3.1 Cálculo do índice de refração complexo e o código NKABS .....	57
2.3.2 Cálculo das opacidades dos gelos e transferência radiativa usando o código RADMC-3D .....	65
2.4 Metodologia observacional .....	69
2.4.1 Distribuição espectral de energia de Elias 29 .....	70
2.4.2 Imagens no infravermelho .....	70
<b>CAPÍTULO 3 - PROPRIEDADES ÓPTICAS NO INFRAVERMELHO DOS GELOS VIRGENS E BOMBARDEADOS .....</b>	<b>72</b>
3.1 Índice de refração complexo de gelos virgens .....	72
3.2 Dados dos gelos bombardeados .....	77
3.2.1 Índice de refração complexo .....	77

3.2.2 Opacidades dos gelos bombardeados .....	80
As Figuras 30 e 31 apresentam as opacidades de espalhamento dos gelos bombardeados. É possível perceber que as variações devido ao processamento energético são irrelevantes, com exceção do painel f (H <sub>2</sub> O:HCOOH) que apresentou um comportamento diferente em todos os parâmetros calculados. ....	
3.3.3 Albedos dos gelos bombardeados .....	83
3.3.4 Modelo de opacidade de grãos de poeira típicos cobertos por mantos de gelo processados .....	86
<b>CAPÍTULO 4 - MODELAGEM DA PROTOESTRELA ELIAS 29 UTILIZANDO DADOS DE GELOS PROCESSADOS EM LABORATÓRIO .....</b>	
<b>90</b>	
4.1 Classificação espectral de Elias 29 .....	90
4.2 Apresentação do modelo e identificação de Elias 29.....	92
4.3 Parâmetros da modelagem computacional empregados no código RADMC-3D para a protoestrela Elias 29.....	94
4.3.1 Geometria do disco e do envelope .....	97
4.3.2 Distribuição espectral de energia .....	99
4.3.3 Modelo para tamanho de grãos diferentes .....	106
4.3.4 Abundâncias das espécies químicas .....	107
4.3.5 Perfis de densidade e temperatura .....	109
4.3.6 Imagens no infravermelho .....	111
<b>CONCLUSÕES -.....</b>	<b>114</b>
<b>ANEXO 1 - ARTIGO 1: CÓDIGO NKABS E CATÁLOGO DE GELOS VIRGENS.</b>	<b>118</b>
<b>ANEXO 2 - ARTIGO 2: MODELAGEM COMPUTACIONAL DE ELIAS 29.....</b>	<b>130</b>
<b>REFERÊNCIAS - .....</b>	<b>150</b>



# Introdução

---

*“Everything is theoretically impossible, until it is done”*

*Robert A. Heinlein*

O estudo das origens e distribuição de moléculas em regiões de formação estelar, principalmente em objetos estelares jovens (protoestrelas) tem sido desenvolvido ao longo das últimas décadas partir de métodos observacionais e experimentais. Os dados observacionais no infravermelho, obtidos por telescópios espaciais e terrestres têm mostrado que moléculas condensadas (a partir de agora serão chamadas de gelos astrofísicos) estão presentes em torno de estrelas em formação. Por outro lado, os experimentos simulando a existência dessas moléculas no meio interestelar, procuram entender como que tais espécies são formadas e destruídas devido às condições de densidade, temperatura e campo de radiação ao seu redor. Ao agregar essas duas metodologias de estudo, a conclusão que se chega é de que a evolução física dos objetos estelares jovens está intimamente ligada com a evolução química das moléculas em seu ambiente de formação como mostram os trabalhos de Boogert, et al., (2000, 2002, 2008), Pontoppidan, et al., (2008), Öberg, et al., (2008), Rocha, et al., (2015). Em outras palavras, isto significa que as mudanças físicas induzidas pela formação do objeto estelar, induzem mudanças químicas no ambiente ao seu redor.

Antes de seguir com a discussão de gelos em torno de protoestrelas, é justo voltar na história, e dar os créditos para quem primeiro conjecturou e documentou a possibilidade da presença de moléculas fora da Terra. A história começa com a descoberta de átomos de cálcio ionizado ( $\text{CaII}$  ou  $\text{Ca}^+$ ) na binária  $\delta$  Orionis, em 1904, por Hartmann, (1904). Este tipo de observação marcou o início da busca por entender a composição da matéria interestelar. Em

1937, um ato de grande imaginação de *Sir A. S. Eddington*, foi publicado no periódico *The Observatory*, conjecturando sobre a possibilidade de gelo de água no meio interestelar (Eddington, 1937). No final do seu artigo, Eddington mostra suas razões para imaginar tal gelo no meio interestelar:

*“... a considerable part of the cloud is now in molecular form. Then comes the further question whether the molecules will aggregate together. This involves question of vapour pressure at low temperature. In view of the high boiling-point of water compared with other likely compounds, is it not likely that this would precipitate the most freely? Atoms of iron and other elements would adhere to the ice-crystals and be dissolved by them; and we might conjecture that, on approaching the Sun, the water evaporates leaving a residue to enter our atmosphere as a meteor. Perhaps my inclination to a ‘water theory’ is influenced by the feeling that, inasmuch as the gas responsible for the mysterious light of the nebulae has turned out to be just common air, it is fitting that the mysterious dark obscuring masses in the Galaxy should turn out to be just common clouds”* Eddington, (1937).

Embora os mecanismos de formação de gelo de água no meio interestelar não sejam exatamente aqueles imaginados por Eddington, seu pensamento foi de grande valor, e demonstrou sua grande capacidade de projeção do futuro da astronomia. No entanto, a primeira molécula detectada no meio interestelar não foi a água, mas as espécies CN, CH e NaH, na fase gasosa, como mostrado no trabalho de McKellar, (1940). A detecção da água ocorreu apenas em 1973, registrada no trabalho de Gillett, et al., (1973), ao identificar a sua absorção em 3  $\mu\text{m}$  na nebulosa de Órion.

Esta tese tem como objetivo principal discutir a química induzida por raios cósmicos em gelos astrofísicos do meio interestelar e regiões de formação estelar. Para isso, este trabalho apresenta (i) dados experimentais no infravermelho de gelos bombardeados por raios cósmicos simulados em laboratório, (ii) o cálculo do índice de refração complexo dos respectivos gelos, obtidos através de um código computacional desenvolvido neste trabalho, além das suas opacidades, bem como (iii) a comparação da modelagem computacional do ambiente circumestelar de protoestrelas de baixa massa e dados observacionais no infravermelho obtidos por telescópios. Esta metodologia de agregar dados experimentais de gelos bombardeados à códigos computacionais de transferência radiativa para reproduzir as observações de astronomia está sendo, pela primeira vez apresentada em um trabalho de tese de doutorado. Um estudo similar foi apresentado no trabalho de Pontoppidan, et al., (2005), no entanto, os autores usaram dados obtidos de Ossenkopf, et al., (1994) agregados a dados de

gelos que não passaram por evolução química, e, portanto, um cenário não realista para regiões de formação estelar.

Além da metodologia adotada por esta tese para justificar a evolução química dos gelos astrofísicos com base em modelagem computacional e experimentos de laboratório, este trabalho propõe abrir uma discussão sobre a relevância dos dados de opacidade de Ossenkopf, et al., 1994 no cenário atual de dados observacionais de grande poder de resolução. Os dados de Ossenkopf, et al., 1994 mostram como variam as opacidades de grãos de poeira de silicatos e carbono cobertos por mantos de H<sub>2</sub>O. Seu trabalho têm sido de grande importância para a astrofísica levando a conclusões importantes sobre o papel da poeira e dos gelos no meio interestelar. Entretanto, seus dados não são capazes de reproduzir as absorções espectrais devido a química dos gelos induzidas por radiação ionizante e raios cósmicos, como mostra o trabalho de Pontoppidan, et al., 2005, o qual representa um cenário mais realístico de regiões de formação estelar. Baseado nisso, este trabalho propõe que os dados de Ossenkopf, et al., 1994 sejam revisitados e recalculados com base em dados de laboratório atualmente disponíveis, como os que serão apresentados neste trabalho. Os resultados teriam aplicações diretas nas mais recentes observações no infravermelho feitas com os telescópios ISO, SST e futuramente o JWST.

Este trabalho de tese está estruturado da seguinte forma:

- **Capítulo 1:** Capítulo introdutório versando sobre o mecanismo de formação de estrelas de baixa massa e seus estágios evolutivos iniciais, bem como os processos pelos quais ocorre a química na fase gasosa e condensada em regiões de formação estelar. Neste capítulo é apresentado também o papel dos raios cósmicos na química de objetos estelares jovens;
- **Capítulo 2:** São apresentadas as metodologias adotadas durante este trabalho, que são divididas em: (i) experimental - onde são apresentados os dados de laboratório no infravermelho de 67 gelos astrofísicos, (ii) computacional - onde são apresentados os códigos NKABS para o cálculo do índice de refração complexo e RADMC-3D, que simula a transferência radiativa, (iii) observacional - mostrando como foram obtidos as Distribuições Espectrais de Energia (DEE) e imagens no infravermelho de Elias 29;

- **Capítulo 3:** Apresentam as propriedades ópticas e parâmetros astrofísicos dos gelos bombardeados por íons pesados. São apresentados os valores de índice de refração complexo, opacidades de absorção e espalhamento e albedo em diferentes fluências.
- **Capítulo 4:** Mostramos a modelagem computacional da protoestrela Elias 29, apresentando os resultados de espectros e imagens no infravermelho e cálculo de abundâncias dos gelos e distribuição de temperatura no disco e no envelope;
- **Conclusões e perspectivas:** Apresentamos as conclusões com base nos dados obtidos nesta tese e as perspectivas de trabalhos futuros, como a reprodução dessa metodologia em protoestrelas de baixa massa;
- **Apêndice 1:** Artigo do código NKABS para o cálculo do índice de refração complexo de gelos astrofísicos e catálogo de gelos virgens;
- **Apêndice 2:** Artigo apresentando a modelagem computacional do espectro e imagens no infravermelho da protoestrela de baixa massa Elias 29.

# Capítulo 1

## A FÍSICO-QUÍMICA DE REGIÕES DE FORMAÇÃO ESTELAR DE BAIXA MASSA

---

*Este capítulo apresenta uma revisão bibliográfica sobre alguns princípios de formação de estrelas de baixa massa e sobre a teoria envolvida da formação de mantos de gelos sobre grãos de poeira no meio interestelar.*

### 1.1 Formação de estrelas de baixa massa

Estrelas se formam do colapso gravitacional de nuvens moleculares densas e magnetizadas, quando estas têm seu equilíbrio magnetohidrodinâmico perturbado (Shu, 1977, Shu, et al., 1994, 1997, Krumholz, 2011). No caso das estrelas de baixa massa (massas  $< 2$  massas solares), uma vez desencadeado o colapso, estes objetos são classificados em quatro categorias (Classe 0, I, II e III), associadas a uma evolução temporal, de acordo com o seu índice espectral  $\alpha = d\log(\lambda F_\lambda)/d\log(F_\lambda)$  (Adams, et al., 1987; Greene, et al., 1994), que por sua vez está associado à morfologia do sistema. Sendo assim, os objetos com  $\alpha \leq 0,3$  são conhecidos como Classe I,  $-1,6 \leq \alpha < 0,3$  Classe II, e  $\alpha < -1,6$  Classe III. O intervalo  $-0,3 \leq \alpha < 0,3$  tem sido associado à mudança de Classe I para Classe II (Greene, et al., 1994). Cabe aqui salientar que o índice espectral  $\alpha$  não tem correspondência em objetos Classe 0, uma vez que os valores estimados são muito duvidosos (André, et al., 1993). A Figura 1 mostra um diagrama esquemático da evolução em classes de estrelas jovens, bem como imagens e suas distribuições espectrais de energia.

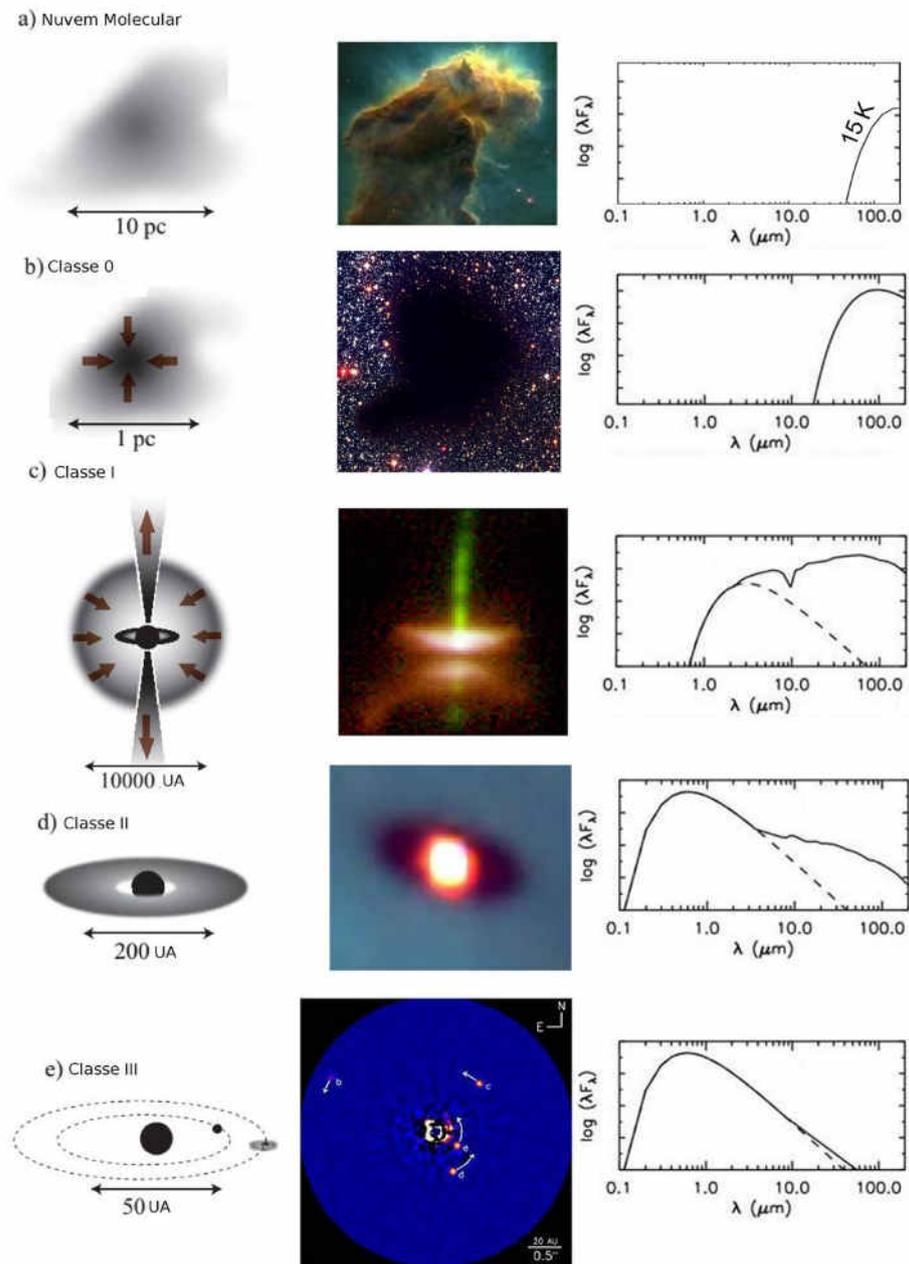


Figura 1: Diagrama evolutivo de protoestrelas de baixa massa. A primeira coluna mostra a estrutura esquemática de cada classe. A coluna central apresenta imagens reais observadas com telescópio, associadas à cada classe evolutiva. A terceira coluna apresenta as distribuições espectrais de energia dos objetos em cada classe. a) Nuvem molecular em equilíbrio magnetohidrodinâmico. b) Colapso gravitacional da nuvem molecular. Essa figura ilustra objetos de classe 0, extremamente embebidos pelo gás e poeira. c) Objetos classe I, contendo um envelope esférico que colapsa formando um disco protoestelar e jatos de matéria pelas cavidades do envelope. d) Objetos classe II, classificados como T-Tauri. e) Objetos classe III, com um disco difuso e possivelmente planetas. Figura adaptada de Öberg, (2009).

Nuvens moleculares são regiões do meio interestelar que contêm uma grande parcela do gás na sua forma neutra (principalmente  $\text{H}_2$  e átomos de H), bem como grãos de poeira

interestelar ricos em silicatos ( $\text{SiO}_4$ ) ou em carbono (ex. grafite). Além disso, dependendo da temperatura/campo de radiação, partes dessas nuvens podem ainda apresentar regiões com hidrogênio ionizado (conhecida como regiões HII). Essas nuvens possuem uma variedade de propriedades físicas, que determinam sub-categorias. A Tabela 1, apresenta os tipos de classificações conforme suas propriedades físicas.

Tabela 1: Classificação de nuvens moleculares de acordo com suas propriedades. Carroll, et al., (2006), Whittet, (2003).

Tipo	L (pc)	M ( $M_{\odot}$ )	$\rho$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	T (K)	$A_V$ (mag)
Difusas	> 50	3 – 100	100 – 500	30 – 100	0,2 – 2
Gigantes	~ 50	$10^5$ – $10^6$	~ $10^4$	10 – 50	5 – 10
Gigantes complexas	~ 10	$10^4$	~ $10^3$	10	5
Gigantes com núcleos densos	~ 0,1	$10^4$	~ $10^5$	10	> 10
Gigantes com núcleos quentes	0,05 – 0,1	$10$ – $10^3$	$10^7$ – $10^9$	100 – 300	~ 50
Glóbulos de Bok	< 1	$1$ – $10^3$	> $10^4$	10	~ 10

Outros elementos, como campo magnético e rotação também estão presentes nas nuvens moleculares e são importantes em modelos de colapso gravitacional. Diversos trabalhos na literatura estimam que a razão  $J/M$  (momento angular por massa) em nuvens moleculares é da ordem de  $10^{21-22} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$  (Goodman, et al., 1993, Belloche, 2013). O campo magnético por sua vez, tem sido estimado entre 16 - 19.000  $\mu\text{G}$ , utilizando técnicas de polarimetria linear e efeito Zeeman (Chandrasekhar, et al., 1953; Wolf, et al., 2003; Rocha, 2012).

Diversos fatores podem induzir o colapso gravitacional em nuvens moleculares, e conseqüentemente a formação estelar. No entanto, estima-se que a taxa de formação estelar observada ( $\sim 1 M_{\odot} \text{ ano}^{-1}$ ) está abaixo bem abaixo do previsto pelos modelos hidrodinâmicos que deveria ser da ordem de  $250 M_{\odot} \text{ ano}^{-1}$  (Krumholz, 2014) na Via Láctea. A divergência nos valores apresentadas está ligada a processos turbulentos durante o colapso e à pressão magnética que tende a suportar a nuvem contra o efeito gravitacional. Se modelos magnetohidrodinâmicos são utilizados para simular a contração gravitacional de nuvens moleculares, a ordem de grandeza da taxa de formação estelar é atingida (Krumholz, 2014). Trabalhos de Ballesteros-Paredes, et al., (2006), sugerem que a turbulência dissipa a energia cinética do colapso em escala global, e em escala local tem a função de contribuir para a fragmentação da nuvem. Além disso, o campo magnético induz uma pressão magnética que atua contra o colapso, atrasando ou até evitando a formação de estrelas. Nesse caso, o

mecanismo de difusão ambipolar explica o atraso e a forma pela qual o gás colapsa (Mouscovias, et al., 2006).

Uma vez vencidos os obstáculos que impedem o colapso gravitacional, e os critérios de instabilidade são satisfeitos, tais como equilíbrio virial (Bodenheimer, 2011) e critério de Bonnor-Ebert (Ebert, 1955; Bonnor, 1956; Bodenheimer, 2011), a nuvem colapsa conservando o seu momento angular. Um dos modelos que aborda este tipo de problema, usando uma solução analítica aproximada, é conhecida como solução Terebey-Shu-Cassen (TSC) proposta em (Terebey, et al., 1984). Este método utiliza algumas simplificações em sua formulação, dentre elas uma esfera que colapsa (envelope) de raio  $R_e$  e velocidade angular uniforme  $\Omega$ . Conforme a solução TSC, o colapso inicia de dentro para fora, e a matéria é agregada sobre um objeto de massa  $M$ , a uma taxa constante. O modelo ainda define um raio centrífugo  $R_{ct}$ , onde o material que vem do equador (com momento angular  $j = \Omega R_e^2$ ) atinge um equilíbrio entre efeito gravitacional e centrífugo, que é dado por (Bodenheimer, 2011)

$$R_{ct} = \frac{\Omega^2 R_e^4}{GM}, \quad (1)$$

onde  $G$  é a constante de gravitação universal.

Se o material está em outras posições e com um ângulo inicial  $\theta_0$  entre o vetor raio e o eixo de rotação, seu momento angular é baixo e ele cai no plano equatorial a pequenas distâncias do objeto central. Assumindo um ângulo instantâneo  $\theta$  e uma densidade  $\rho_0$  no raio  $R_e$ , então a distribuição de densidade do envelope esférico é dada em coordenadas polares por

$$\rho(r, \theta) = \rho_0 \left(\frac{R_{ct}}{r}\right)^{3/2} \left(1 + \frac{\cos \theta}{\cos \theta_0}\right)^{-1/2} \left(\frac{\cos \theta}{2 \cos \theta_0} + \frac{R_{ct}}{r} \cos \theta\right)^{-1} \quad (2)$$

Portanto, o material com ângulo inicial  $\theta_0$  chega ao plano equatorial e encontra a partícula do outro plano, devido à geometria esférica. Esse choque reduz a componente da velocidade perpendicular ao equador, e um agregado de matéria é formado, dando origem a um disco protoestelar. O material do disco é acrescido na protoestrela devido à perda de energia cinética por causa da viscosidade do próprio material. No momento da acreção é somado à luminosidade natural do objeto a então chamada luminosidade de acreção. Essa radiação emitida por unidade de tempo (definição de luminosidade) é espalhada e/ou absorvida no disco protoestelar pelo gás e poeira. A radiação é, dessa forma, reprocessada e

emitida em comprimentos de onda do infravermelho distante e submilimétrico. Se o objeto encontra-se completamente embebido na nuvem molecular, seu índice espectral o classifica como Classe 0.

Uma vez que grande parte do material foi agregado pelo objeto central, o livre caminho médio dos fótons aumenta no ambiente circumestelar. Isso revela o corpo negro da protoestrela (ver Figura 1). Nesse estágio, dados observacionais revelaram a presença de jatos de matéria em direções bipolares e altamente colimados (Snell, et al., 1980; Gómez, et al., 2003; Huélamo, et al., 2006; Zhang, et al., 2013). No entanto, o mecanismo de formação dos jatos ainda não é bem entendido, embora sua presença sempre esteja associado à discos de acreção. Objetos jovens com estas características têm sido associados como classe I, embora objetos mais embebidos como os de classe 0 também apresente jatos. Os objetos de Classe II são frequentemente chamados de objetos T-Tauri. Estes objetos possuem fortes linhas de emissão no óptico, tais como  $H\alpha$ , que revelam a presença de material colapsante. Além disso, apresentam um excesso de emissão no infravermelho, que provém do reprocessamento da radiação pelo disco. Os objetos da Classe III tem índice espectral negativo, indicando pouco ou nenhum excesso no infravermelho. Isto significa que há pouco processamento da radiação no disco nos estágios finais de formação estelar. É esperado, no entanto, que parte do disco tenha evoluído para a formação de planetas e outros corpos menores, como luas, asteroides e cometas.

### 1.1.1 Observação de gelos em torno de estrelas jovens

Como comentado no início deste capítulo, as observações de gelos astrofísicos tiveram início por volta de 1973, quando (Gillett, et al., 1973) detectaram gelo de água pela primeira vez na nebulosa de Órion, utilizando um espectrógrafo com poder de resolução  $R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = 100 - 200$ . No entanto, os grandes avanços na detecção de gelos astrofísicos vieram através das observações do telescópio espacial ISO (*Infrared Space Observatory*), cujo poder de resolução  $R = 400$  no intervalo entre 2,3 - 45,0  $\mu\text{m}$ . Um dos primeiros trabalhos sobre as observações de gelos com o ISO reportou a detecção das espécies condensadas  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $^{13}\text{CO}$  e  $\text{CH}_4$  na direção da protoestrela RAFGL 7009S (D'Hendecourt, et al., 1996). Em outro trabalho de igual importância, os autores (Whittet, et al., 1996) estudaram a protoestrela de alta massa NGC 7538 IRS9, e reportaram a detecção de espécies mais complexas do que aquelas observadas em RAFGL 7009S. Dentre elas estão os gelos de  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{HCOOH}$  e

XCN ( $\text{OCN}^-$ ), além de  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $^{13}\text{CO}$ ,  $^{13}\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_4$ . Desde então, muitas outras protoestrelas foram estudadas com base nas observações do telescópio ISO (Boogert, et al., 2000, 2002; Gibb, et al., 2000; Rocha, et al., 2015). A Figura 2 mostra um conjunto de quatro espectros de protoestrelas observados com o telescópio ISO.

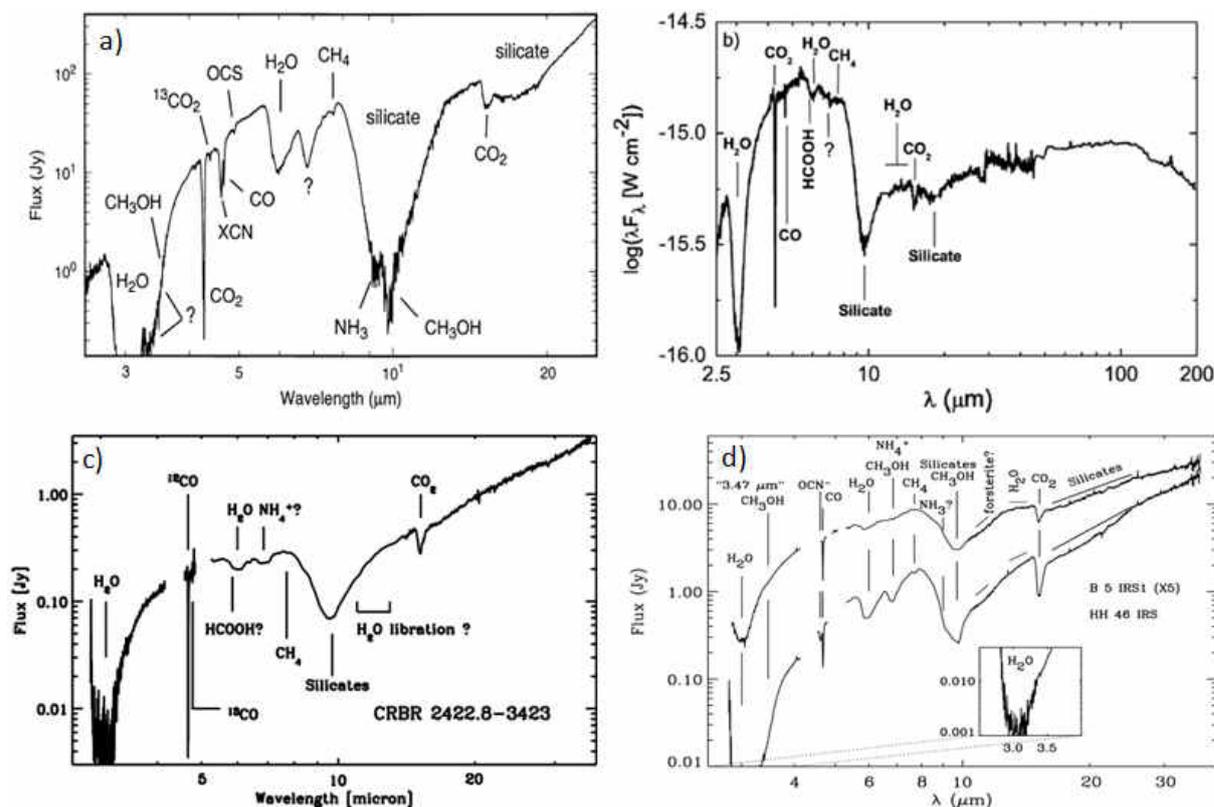


Figura 2: Espectros de protoestrelas observados com o telescópio ISO, onde são mostradas as atribuições químicas das bandas de absorção. (a) W33A - Gibb, et al., (2000). (b) Elias 29 - Rocha, et al., (2015). (c) CRBR 2422.8-3423 - Pontoppidan, et al., (2005). (d) B 5 IRS1 (X5) (cima) e HH 46 IRS (baixo) - Boogert, et al., (2004).

O telescópio espacial Spitzer, também desempenhou um papel importante na detecção de gelos astrofísicos em torno de protoestrelas. Durante o programa “c2d” (*From molecular Cores to Planet-forming Disks*) do qual participou o telescópio Spitzer, foram observadas mais de 50 protoestrelas de baixa massa no intervalo espectral entre 5 - 30  $\mu\text{m}$  com o instrumento IRS (*Infrared Spectrograph*) com poder de resolução entre 100 - 600. O maior problema deste instrumento é sua faixa de detecção, que começa em 5  $\mu\text{m}$ . Isto resulta na perda de detecções de alguns modos vibracionais de moléculas, tais como  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{OCN}^-$  e  $\text{CH}_3\text{OH}$ . No entanto, a faixa espectral não observada pelo telescópio Spitzer tem sido complementada com dados dos telescópios ISO, VLT (*Very Large Telescope* - (McLean, et al., 1998)) e telescópio Keck (Moorwood, 1997), quando disponíveis.

Os resultados destes dois telescópios espaciais, complementados com dados de telescópios de solo, confirmaram a existência de moléculas condensadas em regiões de formação estelar. No entanto, nenhum estudo estatístico ainda tinha sido feito até 2011 com o objetivo de determinar parâmetros que indicassem tendências na presença dos gelos em protoestrelas. Contudo esse trabalho, com base em dados observacionais foi realizado por (Öberg, et al., 2011), utilizando técnicas estatísticas complementares. A amostra utilizada foi de 55 protoestrelas de baixa massa e 8 protoestrelas de alta massa, totalizando 63 objetos. Abaixo estão sumarizadas algumas conclusões de (Öberg, 2009; Öberg, et al., 2011):

- A formação de gelos ocorre na superfície de grãos de poeira e em regiões adequadas, que reúnam condições de temperatura e densidade;
- a primeira “onda” de formação de gelos ocorre na nuvem molecular, quando ocorre a hidrogenação de átomos, levando à formação de  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2:\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$  e  $\text{NH}_3$ ;
- a segunda “onda” é devida a condensação de  $\text{CO}$  e ao processamento energético dos gelos por fótons UV, raios-X e/ou raios cósmicos na nuvem molecular, levando a formação de  $\text{CO}_2:\text{CO}$ ,  $\text{CO}:\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{OCN}^-$  e  $\text{CH}_3\text{OH}$ ;
- as abundâncias médias de algumas espécies em relação à água para protoestrelas de baixa massa são:  $\text{CO}$  (29 %),  $\text{CO}_2$  (29 %),  $\text{NH}_3$  (5 %),  $\text{CH}_4$  (5 %),  $\text{CH}_3\text{OH}$  (3 %),  $\text{OCN}^-$  (0,3 %);
- as abundâncias médias de algumas espécies em relação à água para protoestrelas de alta massa são:  $\text{CO}$  (13 %),  $\text{CO}_2$  (13 %),  $\text{NH}_3$  (5 %),  $\text{CH}_4$  (2 %),  $\text{CH}_3\text{OH}$  (4 %),  $\text{OCN}^-$  (0,6 %);
- as variações de abundâncias são mais severas para espécies mais voláteis como o  $\text{CO}$ ,  $\text{CH}_4$  e  $\text{CO}_2$ , que têm temperaturas de dessorção de 20 K, 30 K e 75 K, respectivamente (Collings, et al., 2004; Tielens, 2005);
- as variações de abundância podem ser causadas por: (i) abundância de átomos inicial diferente, (ii) tempo de colapso diferente, fazendo o sistema interagir mais ou menos com o campo de radiação da protoestrela ou do meio interestelar, (iii) dessorção de moléculas ao interagir com a radiação ionizante;

- há indícios de correlação entre a abundância de  $\text{OCN}^-$  com as abundâncias de mistura de gelo de  $\text{CO}_2:\text{CO}$  e  $\text{CO}:\text{H}_2\text{O}$ ;
- parece haver uma fácil conversão da molécula  $\text{NH}_3$  para o íon  $\text{NH}_4^+$ , uma vez que a abundância média do íon é maior que a abundância da molécula.

### 1.1.2 A química em discos e envelopes protoestelares

Como comentado na seção 1.1, protoestrelas de baixa massa na fase inicial do processo de evolução apresentam um disco e um envelope em torno do objeto central. Nesta seção serão apresentadas algumas informações sobre a química dessas regiões dado o entendimento atual apresentado na literatura. Mais detalhes sobre os processos químicos de nuvens moleculares e durante o processo de colapso podem ser obtidos em Aikawa, (2013). Nos estágios mais evoluídos, que se trata de objetos classe II, o trabalho de Henning, et al., 2013 fornecem dados importantes sobre a química dos discos protoplanetários. A estrutura e a química do envelope protoestelar pode ser representada pela Figura 3.

A Figura 3 mostra uma representação esquemática do envelope e do disco protoestelar, bem como a química envolvida durante o processo de formação de uma protoestrela de baixa massa. Os estágios “0” ilustra a formação de mantos de gelo de  $\text{H}_2\text{O}$  devido a hidrogenação do meio no estágio pré-estelar (nuvem molecular), como mostrado na Seção 1.1. Ainda no estágio pré-estelar, o número “1” sugere que camadas de CO sejam formadas sobre as moléculas condensadas de  $\text{H}_2\text{O}$ . Como átomos de C e H são agora abundantes na superfície dos grãos de poeira, é possível que haja a formação de moléculas como o  $\text{CH}_4$ . O estágio transitório de “1” para “2” ocorre quando a temperatura do meio é elevada para valores equivalentes a 30 K devido aos choques das espécies presentes no envelope. Nesse cenário, moléculas mais voláteis como o CO e  $\text{CH}_4$ , evaporam do gelo, porque duas temperaturas de sublimação são de 20 K e 30 K, respectivamente. Este mecanismo de evaporação dos gelos faz com que as moléculas tenham que se deslocar na superfície do grão de poeira, levando, em alguns casos, à formação da primeira geração de moléculas orgânicas como o  $\text{CH}_3\text{OH}$  e outros radicais, que caracteriza o estágio “2”. Depois disso, parte das moléculas orgânicas que compõem os gelos, bem como outras espécies voláteis podem ser dessorvidas do grão à medida que se aproximam de regiões mais próximas à fonte central, onde a temperatura é bem mais alta. Contudo, durante a formação de uma

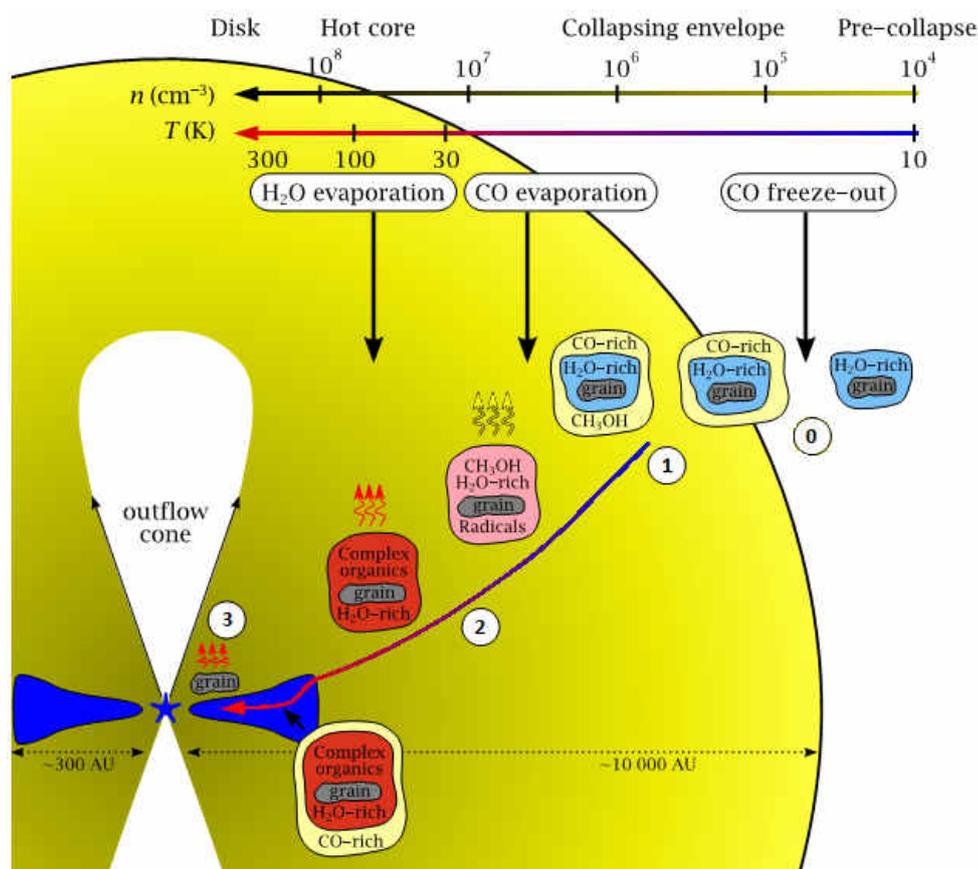


Figura 3: Representação esquemática da formação de uma estrela de baixa massa e da dinâmica química dos gelos astrofísicos. Os processos ilustram a formação do manto de água (0), a condensação de mantos de CO (1), a formação de espécies complexas (2) e finalmente a dessorção de todo o manto a altas temperaturas (3). Fonte: Visser, (2009)

protoestrela de baixa massa, um disco é criado na região equatorial devido à lei de conservação do momento angular. Dessa forma, quando as moléculas da fase gasosa, que foram dessorvidas ao longo do processo de colapso gravitacional podem, novamente, ser adsorvidas na superfície do grão de poeira, levando ao estágio “3”. Porém quando as espécies formadas migram do disco para a fonte central, elas são dessorvidas novamente no estágio “4”, levando à dessorção de todo o gelo, porque as temperaturas são da ordem de 1500 K.

No cenário específico do disco protoestelar, a química presente em seu interior está ilustrada na Figura 4. O disco protoestelar é composto principalmente por hidrogênio molecular ( $\text{H}_2$ ), atômico (HI) e ionizado (HII), como também por poeira (silicato e carbonáceos). Regiões próximas ao objeto central estão livres de poeira e são compostos apenas por gás ionizado, devido às altas temperaturas. O limite dessa região na fronteira com o disco de poeira é definido pela temperatura de sublimação do silicato, que é da ordem de

1500 K (Gail, 2010). O lado (a) da Figura 4 mostra que os grãos de poeira nos discos são caracterizados por uma distribuição de tamanhos, variando de tamanhos “micrométricos” a seixos de minerais (milimétricos), e possivelmente planetas. Estes grãos protegem a região equatorial do disco contra a incidência direta do material com o campo de radiação estelar, levando a uma estrutura de camadas mais quentes e frias como mostrado no lado (b) da Figura 4.

O cenário de radiação ionizante que interage com o disco pode ser de origem térmica, como UV e raio-X, como também de origem não térmica, tal como radiação síncrotron devido à aceleração de elétrons pelo campo magnético. Além disso, raios cósmicos de alta energia podem interagir com o disco e desencadear reações químicas, como mostrado na Seção 1.2.1.

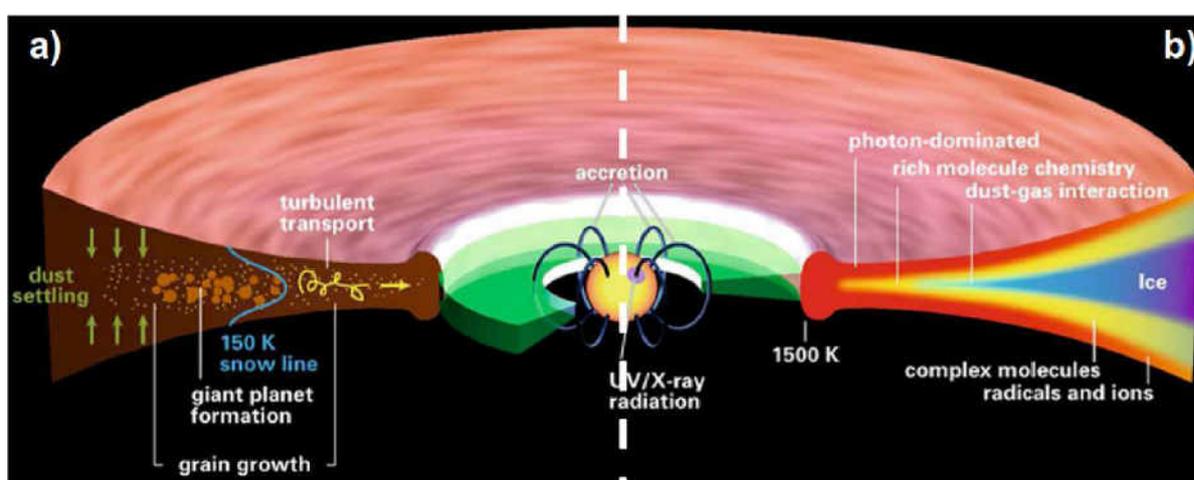


Figura 4: Diagrama esquemático da físico-química presente em um disco protoestelar. O lado “a” destaca processos físicos como coagulação e transporte dos grãos devido à turbulência. O lado “b” enfatiza as camadas do disco com química diferente. Fonte: Henning, et al., (2013).

Em relação ao gradiente de temperatura observado no disco protoestelar, a região mais externa do disco é também chamada de atmosfera, com altas temperaturas (1000 - 5000 K). Nessa região a química é devida à fotodissociação e fotoionização de moléculas, gerando uma PDR (*Photodissociation Dominated Region*), onde predomina a incidência de fótons UV e moléculas como HCN, H<sub>2</sub>O, CO e H<sub>2</sub> são fotodissociadas. Na camada abaixo, a fonte ionizante é principalmente os raios-X, devido ao seu livre caminho médio, que é maior que dos fótons UV. A química induzida por esses fótons no gás leva à ionização de moléculas,

bem como a formação de radicais, aumentando a complexidade química dessa região. A camada subsequente predomina a química de espécies moleculares, ou neutro-neutro, uma vez que as temperaturas são suficientemente altas (100 - 1000 K) para que as moléculas vençam a barreira de ativação envolvida na reação.

Nas camadas mais internas do disco protoestelar, o gás pode condensar na superfície dos grãos de poeira para formar mantos de gelo de H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, entre outros. A química nessas regiões não depende dos fótons UV do campo de radiação da protoestrela, uma vez que eles são absorvidos ao longo do caminho óptico. No entanto, fótons de alta energia, como raios-X, de origem térmica e não-térmica podem ser suficientemente energéticos para penetrar em regiões densas do disco protoestelar ( $n > 10^7 \text{ cm}^{-3}$ ) e desencadear a formação de espécies complexas, ao interagir com as moléculas condensadas formadas na parte superior da camada de gelo. Contudo, as espécies formadas no plano equatorial do disco são acessados apenas por raios cósmicos de alta energia que podem penetrar o suficiente no disco.

Como mostrado na seção 1.2.3 os raios cósmicos são extremamente importantes para a química de discos protoplanetários, porque eles penetram no disco e aumentam o grau de ionização em regiões densas. A Figura 5 mostra dois cenários envolvendo tipos diferentes de radiação ionizante. O primeiro deles, mostrado na Figura 5a, considera como fontes de ionização, o campo de radiação estelar, decaimento radiativos no disco e raios cósmicos, enquanto que o segundo, mostrado na Figura 5b, considera que os ventos estelares defletem os raios cósmicos. Os resultados para o grau de ionização do H<sub>2</sub> do disco são completamente diferentes, como mostrado nas Figura 5c e Figura 5d.

## 1.2 Processos físico-químicos

Os processos físico-químicos estão presentes desde o colapso da nuvem molecular até a formação das estrelas e prováveis planetas. Durante o colapso gravitacional, mencionamos na Seção 1.1 que o atraso do colapso está, também, relacionado com a presença do campo magnético. A relação está no fato de que durante o colapso, o fluxo de espécies neutras colide com os íons presos às linhas de campo magnético. Consequentemente, se a taxa de recombinação de elétrons é baixa, quanto maior for a ionização maior será o atraso. Contudo,

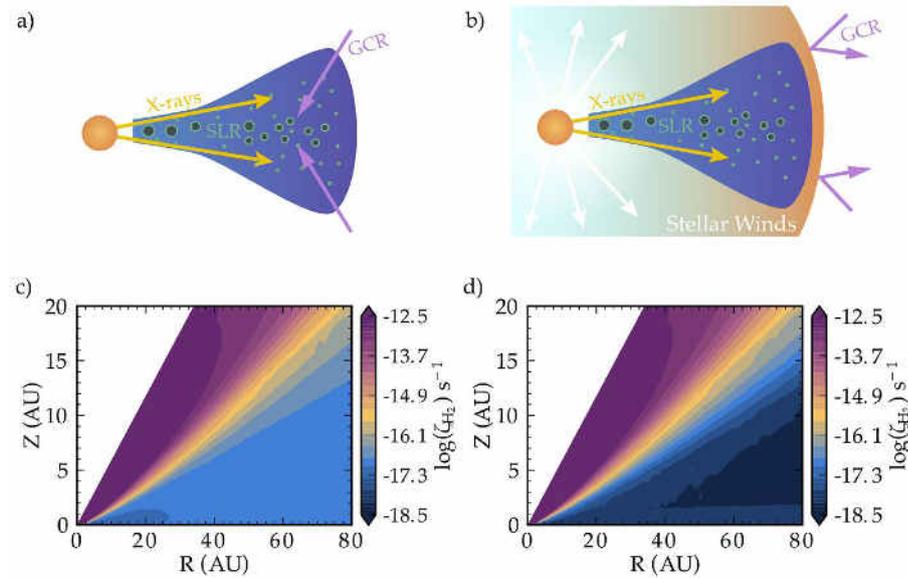


Figura 5: Diferentes cenários de ionização do disco e grau de ionização do  $\text{H}_2$ . Os painéis são: **(a)** Modelo de ionização considerando o campo de radiação estelar, decaimento radiativo e raios cósmicos. **(b)** Modelo de ionização, a situação em que ventos estelares refletem as partículas de raios cósmicos. **(c)** Grau de ionização calculado para o cenário do painel **(a)**. **(d)** Grau de ionização calculado para o cenário do painel **(b)**. Fonte: Cleeves, et al., (2014).

o grau de ionização está ligado com a natureza e a intensidade do campo de radiação ionizante do ambiente circumestelar, tais como UV e raios-X e raios cósmicos. Além disso, o campo de radiação cria um gradiente de temperatura em seu envoltório, e, portanto, determina a química na fase gasosa e na fase condensada, como mostraremos a seguir.

### 1.2.1 O campo de radiação ionizante

O campo de radiação do meio interestelar é composto de fótons de várias energias e criados por mecanismos diferentes, e que pode ser subdividida nas seguintes categorias: (i) radiação síncrotron Galáctica oriunda da deflexão de elétrons relativísticos pelo campo magnético Galáctico; (ii) Radiação cósmica de fundos em micro-ondas, cuja temperatura de corpo negro associada é de 2,7 K; (iii) Radiação no infravermelho distante proveniente da emissão de grãos de poeira interestelares aquecidos; (iv) Radiação provenientes de estrelas da sequência principal e de protoestrelas, como o ultravioleta e (v) emissões de raios-X de origem não térmica (síncrotron), devido à aceleração de elétrons livres pelo campo magnético estelar ou protoestelar, bem como de origem térmica, onde os fótons são formados em regiões

de plasma quentes, como por exemplo, em supernovas. Todos esses mecanismos estão descritos em detalhes em Draine, 2011.

Dentre os campo de radiação apresentados, aqueles que têm interesse astroquímico são chamados de radiação ionizante, que é definida para o tipo de radiação com energia maior do que 10 eV, ou seja, associada a primeira energia de ionização do átomo de oxigênio. A energia dos fótons UV varia entre 3 – 124 eV, correspondendo à variação de 320 – 100 nm em comprimentos de onda. Esse intervalo de energia tem grande interesse astroquímico, uma vez que a fotoquímica induzida por radiação ultravioleta é sensível a este domínio de radiação. Por exemplo, fótons Lyman- $\alpha$  (10,2 eV) pode dissociar moléculas de HCN e H<sub>2</sub>O, enquanto que outras espécies como o CO e H<sub>2</sub> são apenas dissociados pelo ultravioleta distante (~ 120 eV), como descrito em Henning, et al., (2013). Além dos efeitos de dissociação, o ultravioleta distante pode ejetar elétrons dos grãos de poeira pelo efeito fotoelétrico, bem como fotoionizar elementos pesados como o Oxigênio e o Carbono, que têm energia de ionização de 13,62 e 11,26 respectivamente (Shaw, 2006).

Os fótons de raios-X por outro lado, corresponde ao intervalo de energia entre 120 –  $120 \times 10^3$  eV. Do mesmo modo que os fótons UV, os raios-X são importantes para a astroquímica por causa das suas propriedades de ionização. No caso de discos protoplanetários, os raios-X podem ionizar o átomo de He, que tem alta energia de ionização (24,6 eV), produzindo regiões ativas de He<sup>+</sup>. Devido sua alta afinidade eletrônica, o hélio ionizado pode destruir fortes ligações como da molécula de CO, fazendo com o que meio seja enriquecido novamente com átomos de C e O. Além disso, o campo de radiação de raios-X pode interagir com os gelos formados em regiões densas do meio interestelar, alterando a composição inicial das moléculas do gelo e formando espécies mais complexas.

Os raios cósmicos é outra fonte de ionização no meio interestelar e consistem principalmente de prótons (87 %), partículas alfa (12 %) e íons pesados (1 %) com energias principalmente concentradas entre MeV e GeV (Cleeves, 2014), embora energias muito mais altas também tenham sido observadas. Essas partículas carregadas se propagam através do meio interestelar, e em algumas circunstâncias, no meio intergalático. Dentre alguns dos seus efeitos na matéria estão: a excitação e ionização de espécies atômicas e nucleares, a excitação de estados nucleares, bem como a produção de píons neutros ( $\pi^0$ ) através de colisões inelásticas e espalhamento Compton inverso. Estes efeitos, por sua vez, deixam assinaturas

mensuráveis de sua presença, que podem ser o aumento da abundância de íons ( $\text{H}_3^+$ ,  $\text{OH}^+$ ,  $\text{HCO}^+$ , etc); emissão de raios gama de 4,44 MeV e 6,14 MeV, devida a desexcitação nuclear do  $^{12}\text{C}$  e do  $^{16}\text{O}$ , respectivamente; aumento do fluxo de raios gama, devido ao decaimento dos píons neutros.

A taxa de ionização induzida por raios cósmicos é importante devido aos efeitos que ela causa como será mostrado em mais detalhes adiante. A taxa de um processo particular conforme (Indriolo, et al., 2013) é dada por:

$$k_{RC} = 4\pi G_x \int j(E) \sigma_x(E) dE \quad [\text{s}^{-1}] \quad (12)$$

onde  $j(E)$  é o fluxo (partículas por unidade de área, por unidade de tempo, por unidade de ângulo sólido) com energia no intervalo  $dE$ ,  $\sigma_x(E)$  é a seção de choque para o processo  $x$  com energia  $E$ , e  $G_x$  é um coeficiente associada a cada processo.

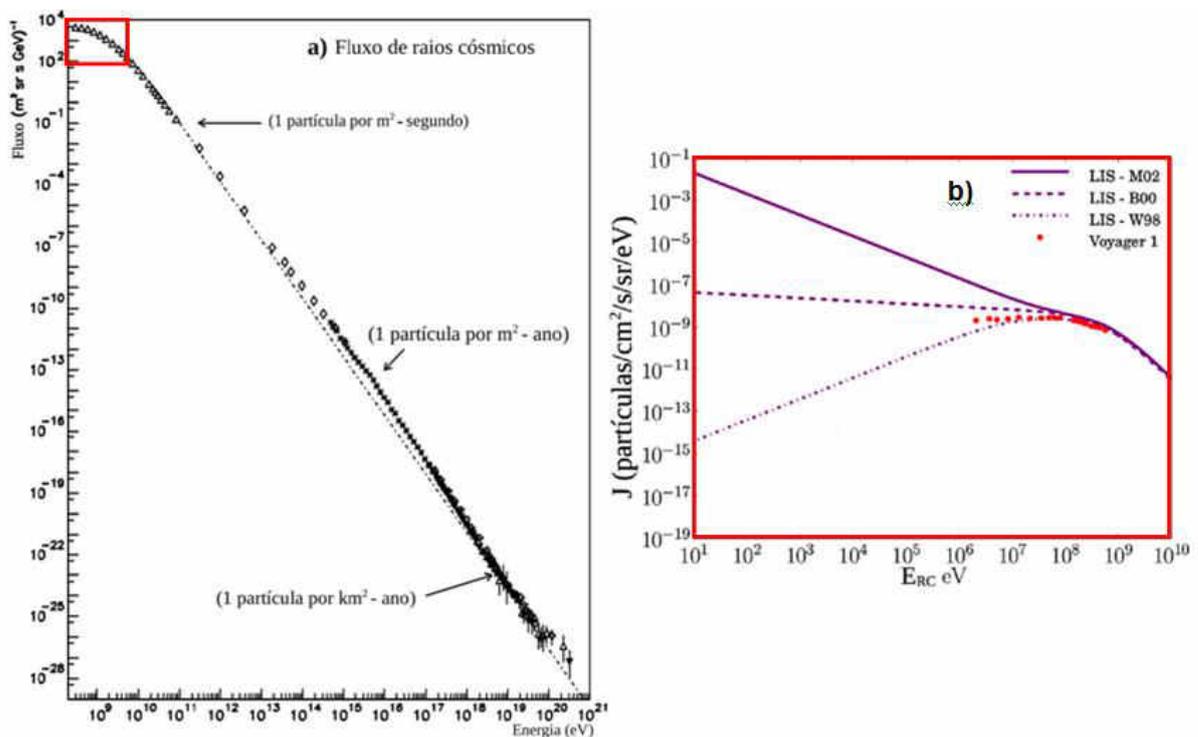


Figura 6: Variação do fluxo de raios cósmicos e da seção de choque de alguns processos com a energia em eV. (a) Espectro de energia de raios cósmicos baseado em dados observados (símbolos) e modelados (curva tracejada) no intervalo de energia de  $10^8$  e  $10^{21}$  eV. (b) Variação da seção de choque de formação para algumas reações envolvendo raios cósmicos. Figuras adaptadas de Indriolo, et al., (2013) e Cleeves, et al., (2014).

A Figura 6a mostra o espectro de energia dos raios cósmicos medidos no Sistema Solar, para energias entre  $10^8 - 10^{21}$  eV, porém sem fazer distinção entre as suas massas atômicas. Esse espectro pode ser bem ajustado por uma lei de potência dada por  $\varphi \propto E^{-2,7}$  (Indriolo, et al., 2013), no intervalo de energia apresentado. A inclinação observada para energias da ordem de  $10^9$  eV está relacionada a prótons e núcleos pesados (Ex.: O, Ni, Fe), sugerindo que sua formação e aceleração tem origem comum (Ahn, et al., 2009). Porém, para energias abaixo de  $10^8$  eV, o fluxo de raios cósmicos se torna difícil de medir, por que partículas com energia menores do que essas defletidas pelo campo magnético acoplado aos ventos solares, em um processo conhecido como modulação. No entanto, sondas como a *Voyager* que está a grandes distâncias do Sol e dos efeitos do vento solar, têm feito medidas para raios cósmicos abaixo de  $10^8$  eV (Webber, 1998) e (Stone, et al., 2013). O quadro vermelho na Figura 6a apresenta um intervalo de fluxo mostrado na Figura 6b.

Para energias menores que  $10^8$  eV, alguns modelos (M02, B00, W98), que são apresentados na Figura 6b têm tentado prever como seria o fluxo de raios cósmicos no Sistema Solar. No entanto, os dados obtidos pela sonda *Voyager* tem mostrado concordância com o modelo apresentado por W98, para a região chamada de LIS<sup>1</sup> (*Local InterStellar medium*). Além disso, é importante mencionar que a inclinação do espectro para baixas energias têm concordância com os modelos propostos por Shen et al. (2004) para o fluxo de núcleos pesados, como aqueles são utilizados neste trabalho (Ver Seção 2.2).

A Figura 7 complementa as Figuras 6a e 6b porque mostra as abundâncias de raios cósmicos galácticos, solares e a razão entre eles em função do número atômico  $Z$  das partículas. As abundâncias são dadas em relação ao hidrogênio atômico H, assumido ser  $H = 10^6$ . Nessas Figuras os números atômicos dos íons de Ni e de O são marcados pelas setas vermelhas, porque foram as espécies usadas para bombardear os gelos apresentados neste trabalho. Essa Figura mostra também que abundância de raios cósmicos de baixa massa atômica (Ex.: H) é várias ordens de grandeza maiores do que espécies com núcleos pesados como o  $^{58}\text{Ni}$  ou maiores.

Os raios cósmicos galácticos são produzidos por diversos processos no meio interestelar e interagem diretamente com protoestrelas em seus estágios iniciais de formação

---

<sup>1</sup> LIS refere-se a uma nuvem interestelar difusa em torno do Sistema Solar com extensão de 30 pc (Cox, et al., 1987). Mais detalhes podem ser encontrados em (Whittet, 2003).

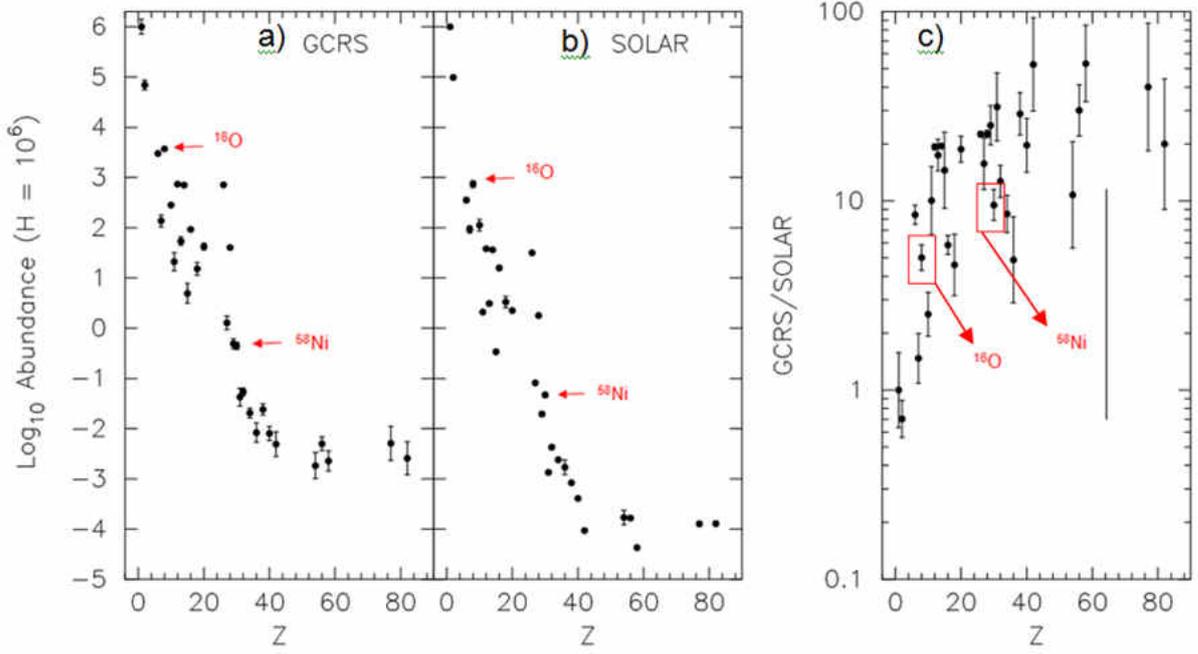


Figura 7: Abundância em escala logarítmica em função da massa atômica. A massa atômica  $Z$  para os íons de  $^{58}\text{Ni}$  e  $^{16}\text{O}$  estão indicadas. Fonte: Drury, et al., (2009).

(Classe 0 e Classe I). Porém os raios cósmicos de origem solar também são importantes no processamento dos gelos astrofísicos nos estágios de Classe II e Classe III. Nesses estágios a protoestrela já apresenta fortes ventos estelares, que modula a incidência de raios cósmicos galácticos. Dessa forma, tais partículas interagem com o material do disco protoplanetário. (Ver Seção 1.2.1)

A taxa de ionização total do meio, portanto, geralmente é calculada em função da ionização do H e do  $\text{H}_2$ , que é dada pelos seguintes processos: (i) taxa de ionização primária ( $\zeta_p$ ), que é a taxa de ionização do hidrogênio atômico, devido apenas a partículas de raios cósmicos (prótons e núcleos pesados); (ii) a taxa de ionização total do hidrogênio atômico ( $\zeta_H$ ), devido aos raios cósmicos e elétrons energéticos secundários por causa dos processos de ionização; e (iii) taxa de ionização total do hidrogênio molecular  $\zeta_2$  devido aos raios cósmicos e elétrons secundários gerados com através da ionização. A relação entre essas taxas é dada por como sendo  $\zeta_H = 1,5\zeta_p$  e  $\zeta_2 = 2,3\zeta_p$ , de acordo com Indriolo, et al., (2013). Do ponto de vista observacional, as taxas de ionização são calculadas através da razão de densidades de coluna, associados com determinados íons, como por exemplo:

$$\zeta_2 = k_i x_e n_H \left( \frac{N(\text{H}_3^+)}{N(\text{H}_2)} \right) \quad [\text{s}^{-1}] \quad (13)$$

onde  $k_i = 6,7 \times 10^{-8} (T/300)^{-0,51}$  (Indriolo, et al., 2013),  $x_e$  é a fração de elétrons, definido como  $x_e = n(e)/n_H$  e  $n_H = n(H) + 2n(H_2)$ . Em nuvens moleculares difusas e densas, os valores estimados de taxa de ionização são  $3,5 \times 10^{-16} \text{ s}^{-1}$  e  $1 \times 10^{-18} \text{ s}^{-1}$ .

Os raios cósmicos podem interagir com os gelos astrofísicos de maneira direta ou indireta. A interação direta refere-se a choques entre um raio cósmico e gelos astrofísicos levando causando vários efeitos, dentre eles (i) a quebra de ligações químicas no próprio gelo, permitindo com que os radicais se reorganizem para formar novas espécies moleculares; (ii) *sputtering*, que desagrega do gelo aglomerados de moléculas. Entretanto, vários outros processos indiretos causados pelos raios cósmicos podem desencadear a química dos gelos, tais como: (i) bombardeio dos gelos por elétrons secundários criado da colisão dos raios cósmicos com o meio; (ii) processamento energético do gelos por fótons UV gerados pelo decaimento de moléculas de  $H_2$  excitadas por elétrons secundários; (iii) processamento energético por raios gama com energias de 4,44 MeV, 6,13 MeV, 1,63 MeV, resultantes do decaimento de píons neutros formados à partir da colisão de raios cósmicos e outros prótons do meio; (iv) processamento energético por raios-X de 6,4 keV, induzidos pelo decaimento eletrônico de átomos de Fe excitado por raios cósmicos. Portanto, essa seção esclarece que mesmo em regiões muito densas onde o campo de radiação estelar ou interestelar não penetra, ainda assim, existem fótons energéticos produzidos pelas interações da matéria com os raios cósmicos, e que, por sua vez, podem processar os gelos.

As transformações químicas devido ao bombardeio de raios cósmicos nos gelos astrofísicos têm sido estudadas através de experimentos em laboratório, cujos resultados estão descritos em muitos trabalhos, dentre eles (Gerakines, et al., 2000; Pilling, et al., 2010; Pilling, et al., 2010; Bergantini, et al., 2014; de Barros, et al., 2014; Andrade, et al., 2014). Nestes trabalhos podem ser obtidos, por exemplo, o valor da seção de choque de formação e destruição de moléculas presentes no gelo astrofísico simulado durante a interação com os raios cósmicos. Além disso, eles mostram como que um ambiente químico é enriquecido ao interagir com partículas energéticas, levando à produção de espécies químicas complexas, como o  $CH_3OH$ ,  $HCOOH$ ,  $CH_3CHO$ , entre outras, que já foram observadas em regiões de formação estelar.

## 1.2.2 A química na fase gasosa

A Tabela 2, mostra tipos de reações que podem ocorrer na fase gasosa, como também suas taxas de reações. Existem as reações que formam e destroem ligações, como também aquelas que rearranjam as moléculas após suas dissociações.

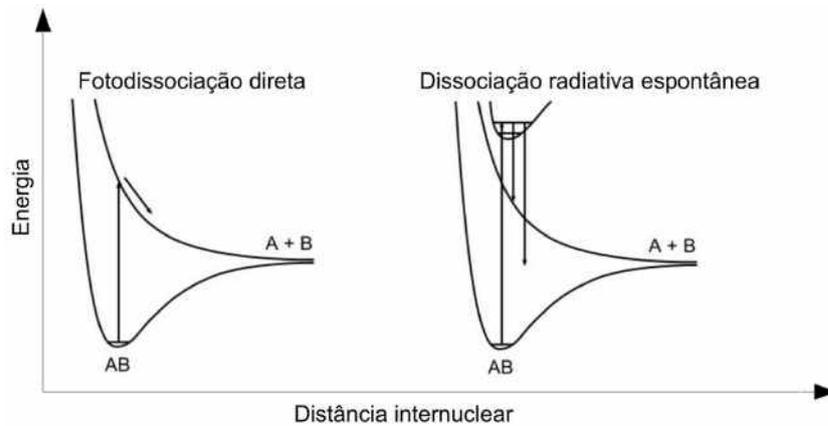
Tabela 2: Tipos de reações químicas na fase gasosa (Tielens, 2005).

Tipo	Reação	Taxa	Unidade
Fotodissociação	$AB + h\nu \rightarrow A + B$	$10^{-9}$	$s^{-1}$
Neutro-neutro	$A + B \rightarrow C + D$	$10^{-11}$	$cm^3 s^{-1}$
Íon-molécula	$A^+ + B \rightarrow C^+ + D$	$10^{-9}$	$cm^3 s^{-1}$
Transferência de carga	$A^+ + B \rightarrow A + B^+$	$10^{-9}$	$cm^3 s^{-1}$
Associação radiativa	$A + B \rightarrow AB + h\nu$	$10^{-14}$	$cm^3 s^{-1}$
Recombinação dissociativa	$A^+ + e^- \rightarrow C + D$	$10^{-7}$	$cm^3 s^{-1}$
Associação colisional	$A + B + M \rightarrow AB + M$	$10^{-32}$	$cm^6 s^{-1}$

De modo geral, as reações químicas ocorrem em quatro passos: Primeiro ocorrem colisões, onde as energias envolvidas devem ser suficientes para sobrepôr a barreira de ativação, caso exista; o segundo passo é a possível destruição de ligações químicas existentes. Em seguida as moléculas podem se rearranjar ao formar novas ligações; finalmente as espécies ficam estáveis, e o excesso de energia é retirado do sistema por um fóton, elétron, ou um terceiro corpo (ex. um grão interestelar). Caso isso não ocorra, as ligações serão quebradas novamente, levando a uma nova dissociação.

### 1.2.1.1 Fotodissociação

Dentre as reações químicas mais comuns na fase gasosa, que ocorrem no meio interestelar, estão as reações de fotodissociação. As energias de ligação das moléculas são da ordem de 5 - 10 eV, que corresponde à região de radiação ultravioleta. Dessa forma, muitas moléculas podem ser dissociadas por fótons UV. A fotodissociação pode ocorrer por caminhos diferentes, como mostrado na Figura 8, que são: (i) **fotodissociação direta** quando a absorção de um fóton leva a molécula para um contínuo de dissociação de um mesmo estado fundamental e (ii) **dissociação radiativa espontânea** quando a absorção de um fóton leva a molécula para um estado eletrônico excitado; durante o decaimento, parte das moléculas são dissociadas por ficarem no contínuo de dissociação, e a outra parte emite fótons quando decaem para o nível eletrônico fundamental.



**Figura 8:** Curvas de energia ilustrando os processos físicos que ocorrem durante os diferentes caminhos de fotodissociação de moléculas diatômicas. Figura adaptada de van Dishoeck, et al., (2011).

A taxa de fotodissociação no meio interestelar é dada pela seguinte equação (Tielens, 2005):

$$k_{fd} = \int_{\nu_i}^{\nu_H} 4\pi N_{CRMI}(\nu) \alpha_{fd}(\nu) d\nu \quad [s^{-1}] \quad (3)$$

onde  $N_{CRMI}$  é a intensidade média de fótons de um campo de radiação interestelar,  $\alpha_{fd}(\nu)$  é a seção transversal de fotodissociação (varia para fotodissociação direta e dissociação radiativa espontânea, conforme o trabalho de van Dishoeck, et al., (2011) e a integração vai do limite de dissociação para o limite de fotoionização do hidrogênio. Caso a molécula esteja no interior de uma nuvem molecular, a taxa de fotodissociação deve ser corrigida pela extinção visual  $A_V$ . Nessas situações o valor de  $k_{fd}$  pode ser dado por:

$$k_{fd} = a e^{-bA_V} \quad [s^{-1}] \quad (3)$$

onde  $a$  é a taxa de fotodissociação caso não haja proteção e é equivalente à Equação 2, cujo valor é da ordem de  $10^{-9} s^{-1}$  como ocorre para o CO e  $10^{-10} s^{-1}$  para a molécula de H<sub>2</sub>O. O parâmetro  $b$  assume valores entre 1,3 - 3,2 (Tielens, 2005). É possível perceber que o valor de  $k_{fd}$  cai à medida que a extinção visual aumenta.

Apesar de fótons UV oriundos de regiões externas não penetrarem nas partes mais densas de nuvens moleculares, discos e envelopes, eles podem ser produzidos em seu interior

devido à colisões de raios cósmicos com as moléculas na fase gasosa (Indriolo, et al., 2013), como visto na seção 1.2.1.

### 1.2.1.2 Reações neutro-neutro

A baixa taxa de reação envolvendo moléculas neutras, como mostrado na Tabela 2, ocorre devido às altas energias de ativação na ligação. Nas colisões neutro-neutro, a principal força de atração é a força de van der Waals, cujo potencial é proporcional à  $-1/r^6$ . Se não existisse barreira de ativação envolvida na reação, sua taxa de formação seria dada por (Tielens, 2005):

$$k_f = 13,5\pi \left( \frac{\epsilon_1 \epsilon_2 I}{\mu} \right) \langle v \rangle^{1/3} \quad [\text{cm}^3 \text{s}^{-1}] \quad (4)$$

onde  $\mu$  é a massa reduzida,  $\epsilon_i$  é a polarizabilidade das moléculas envolvidas,  $I$  é o harmônico médio do potencial de ionização e  $\langle v \rangle$  a média das velocidades envolvidas. Entretanto, se há energia de ativação, a Equação 4 deve ser corrigida pelo fator de Boltzmann, que é dado por  $\exp[-E_a/kT]$ . Uma vez que as temperaturas em regiões densas de nuvens moleculares são da ordem de 10 K, isso faz com que muitas das reações do tipo neutro-neutro sejam proibidas porque em reações entre espécies neutras possuem barreiras de ativação, que apenas são vencidas quando a temperatura do meio é da ordem de  $10^3$  K. Consequentemente, essas reações são apenas importantes em regiões mais aquecidas, tais como regiões de choque devido aos jatos de matéria e PDRs (*Photodissociation Regions*). As espécies produzidas por reações neutro-neutro em regiões frias de nuvens moleculares são aquelas que envolvem apenas radicais ou átomos, porque não possuem energia de ativação.

### 1.2.1.3 Reações íon-molécula

Reações envolvendo íons e moléculas na fase gasosa estão entre as mais importantes no meio interestelar, porque tanto a radiação UV, raios-X e raios cósmicos podem ionizar as espécies neutras. Como mostrado na Tabela 2, diversas reações ocorrem quando há interação com íons no meio interestelar. A alta taxa das reações íon-molécula é devida ao potencial de interação induzido pela polarização que se sobrepõe a qualquer barreira de ativação envolvida. A polarização aparece quando há interação da espécie neutra com o íon, gerando uma distribuição não uniforme de cargas. A região com maior densidade de elétrons é mais

fortemente atraída pelo íon, levando a uma colisão entre as duas espécies. Outro fator que contribui para que as taxas de reação sejam maiores do que aquelas calculadas para espécies neutras é que o potencial de interação do dipolo induzido diminui com o fator de  $r^{-4}$ , onde  $r$  é a distância entre as espécies. Por outro lado, o potencial de interação para espécies neutras cai mais rapidamente, por que diminui com o fator de  $r^{-6}$ . A taxa dessas reações é calculada pela taxa de Langevin, dada por (Tielens, 2005):

$$k_L = 2\pi e \left(\frac{\alpha}{\mu}\right)^{1/3} \quad [\text{cm}^3\text{s}^{-1}] \quad (5)$$

onde  $e$  é a carga do elétron em C (no sistema cgs  $1\text{C} = \sqrt{\text{cm}^3 \text{g}/\text{s}^2}$ ),  $\alpha$  o parâmetro de polarizabilidade, que é da ordem de  $10^{-24} \text{cm}^3$  e  $\mu$  a massa reduzida em g.

As reações íon-molécula são muito importantes em nuvem moleculares densas onde as temperaturas são muito baixas ( $\sim 10 \text{K}$ ) e, portanto, dispõem de pouca energia para vencer as barreiras de ativação envolvidas. Um dos íons mais comuns no meio interestelar é o  $\text{H}_3^+$ , que desempenha um importante papel na química do meio interestelar, interagindo com vários tipos de espécies neutras (carbono, PAH, etc). Sua própria formação é decorrente de uma interação de íon-molécula, dada por  $\text{H}_2^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_3^+ + \text{H}$ . Outros íons como o  $\text{C}^+$  e o  $\text{CH}_3^+$  são a chave de reações que formam moléculas complexas. Por exemplo, o íon de  $\text{CH}_3^+$  ao reagir com outras espécies pode formar  $\text{CH}_2\text{CO}$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ .

#### 1.2.1.4 Reações íon-molécula

As demais reações também são importantes para o enriquecimento da química do meio interestelar, porém neste trabalho, elas serão brevemente comentadas:

- Transferência de carga - responsável pela formação de íons como o  $\text{O}^+$ . Em uma nuvem difusa, a radiação do meio interestelar não possui energia suficiente para ionizar o átomo de O. Porém se há disponibilidade de íons de  $\text{H}^+$  formados previamente pela interação com raios cósmicos, a seguinte reação pode ocorrer:  $\text{O} + \text{H}^+ \rightarrow \text{O}^+ + \text{H}$ . Nesse caso, o oxigênio ionizado pode participar de reações, cujo produto final é a formação de  $\text{H}_2\text{O}$  (Maciel, 2002).
- Associação radiativa - São reações em que o produto das colisões é estabilizado através da emissão de um fóton com o excesso de energia. Em outras palavras, o produto da reação armazena energia cinética e vibracional após sua formação. Dessa

forma, a estabilização ocorre a transição de um estado vibracional excitado para o estado vibracional fundamental, e conseqüentemente a emissão de um fóton no infravermelho. Este tipo de reação não é muito comum entre espécies neutras, mas é comum em reações íon-átomo ou íon-molécula, como por exemplo, a reação  $C^+ + H \rightarrow CH^+ + hv$  (Tielens, 2005), (Maciel, 2002).

- **Recombinação dissociativa** - Nesse processo ocorre, geralmente, a formação de duas moléculas neutras em um estado eletrônico excitado, quando um íon molecular e um elétron livre se recombina. Devido ao grau de ionização do meio interestelar, esta reação é considerada uma das mais importantes devido à rapidez com que acontece. Pode-se tomar como exemplo a formação da molécula de  $H_2O$  através da seguinte reação:  $H_3O^+ + e^- \rightarrow H_2O + H$ , onde a taxa de reação é de  $3,3 \times 10^{-7} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ . Contudo algumas reações são mais rápidas como, por exemplo, a formação do hidrogênio molecular através do caminho  $H_3^+ + e^- \rightarrow H_2 + H$ , onde a taxa de reação é de  $3,8 \times 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  (Tielens, 2005).
- **Associação colisional** - Essa reação ocorre em regiões muito densas, tais como próximo à fotosferas estelares ou discos circumstelares com densidades da ordem de  $10^{11} \text{ cm}^{-3}$ . Além disso, essas reações envolvem três espécies e o terceiro corpo carrega o excesso de energia do sistema. Esse é o motivo de sua taxa de reação ser muito baixa.

### 1.2.2 A química na superfície dos grãos de poeira interestelar

Os grãos de poeira presentes no meio interestelar permitem o enriquecimento químico do meio, uma vez que átomos e moléculas, que se encontram adsorvidos em suas superfícies podem reagir entre si, formando novas espécies que seriam quase impossíveis de se formarem na fase gasosa. Dessa forma, os grãos interestelares agem como um catalisador de novas espécies. A Figura 9 ilustra como ocorre a interação do gás com os grãos de poeira. Quando o gás é preso ao grão, ocorre a adsorção, que pode ser física ou química, cujas energias de ligação envolvidas em são bastante diferentes. A adsorção física é mantida pela força de van der Waals, com energias  $< 0,1 \text{ eV}$  e a superfície do grão age apenas como um substrato passivo. Já as energias associadas com a adsorção química variam de  $1 - 5 \text{ eV}$ . As espécies adsorvidas podem migrar na superfície do grão, o que poderá levar a reações químicas, caso

dois átomos ou moléculas se encontre. Os grãos interestelares possuem superfícies altamente desordenadas, contendo vários defeitos e impurezas que enriquecem sua reatividade química (Duley, et al., 1984), mas também podem dificultar o deslocamento de átomos ou moléculas (Tielens, 2005). Uma vez que novas moléculas são formadas, elas podem receber energia do meio externo e serem desorvidas (liberadas) do grão.

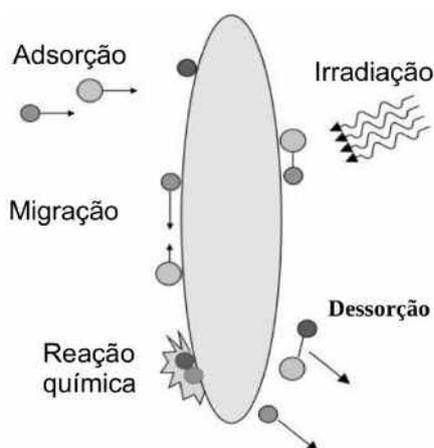


Figura 9: Ilustração das reações físico-químicas que ocorrem na superfície de grãos interestelares. Figura adaptada de Whittet, (2003).

### 1.2.2.1 Tipos de grãos interestelares

Os tipos de grãos mais comuns no meio interestelar são os silicatos (ligações Si-O) e carbonáceos (grafite, hidrocarbonetos policíclicos aromáticos, também chamados de PAHs em inglês (*Policyclic Aromatic Hydrocarbons*)). Os silicatos podem também estar ligados à outros metais, tais como Al, Fe, Mg e etc. No contexto astrofísico, os tipos de silicatos mais comuns são:

- Olivina: formados por  $(\text{Mg, Fe})_2\text{SiO}_4$ . O subgrupo de  $\text{SiO}_4$  ligado ao átomo de Mg é chamado de forsterita, e quando ligado ao átomo de Fe, é chamado de Faialite. Quando a proporção da mistura inclui tanto o Mg, como o Fe, sendo  $\text{Mg}_1\text{Fe}_1\text{SiO}_4$ , fica caracterizada a Olivina, cuja densidade é  $3,71 \text{ g cm}^{-3}$ .

- Piroxênio: formado por (Mg, Fe)SiO<sub>3</sub> com densidade de 3,20 g cm<sup>3</sup>. Subgrupos formados por MgSiO<sub>3</sub> e FeSiO<sub>3</sub> são chamados de enstatita e ferrosilita respectivamente.

Do ponto de vista observacional, as curvas de extinção interestelar são melhor ajustadas pela combinação de silicatos e carbono amorfo (Weingartner, et al., 2001).

### 1.2.2.2 Taxa de adsorção de espécies químicas sobre os grãos de poeira

A taxa de adsorção de espécies na fase gasosa na superfície de um grão é dada por (Tielens, 2005):

$$k_{ad} = n_p n_g \sigma_p v S(T_g, T_p) \quad [\text{s}^{-1}] \quad (6)$$

onde  $n_p$  é a densidade numérica de poeira,  $n_g$  a densidade numérica de gás dada por  $n_g = n(\text{H}) + 2n(\text{H}_2)$ ,  $\sigma_p$  a seção transversal da poeira,  $v$  é a velocidade da colisão do gás com o grão, e  $T_g$  e  $T_p$  são as temperaturas do gás e da poeira, respectivamente.  $S(T_g, T_p)$  é o coeficiente de afixação (*Sticking Power*) do gás na superfície do grão, que é uma grandeza adimensional variando entre 0 e 1. Baseado em experimento e modelos teóricos, o valor de  $S(T_g, T_p)$  para um átomo de H na superfície de um grão é obtido através da seguinte equação (Tielens, 2005):

$$S(T_g, T_p) = [1 + 4 \times 10^{-2} (T_g + T_p)^{\frac{1}{2}} + 2 \times 10^{-3} T_g + 8 \times 10^{-6} T_g^2]^{-1} \quad (7)$$

onde seu valor é 0,8 a 10 K e 0,5 a 100 K. Isso significa que à baixas temperaturas, o gás pode ser adsorvido facilmente na superfície dos grãos de poeira, levando à formação de mantos de gelos de composições diferentes. Em contrapartida, quando o *Sticking Power* é da ordem de 1, as moléculas de gás adsorvidas têm a eficiência de migração reduzida, levando à formação de um gelo amorfo.

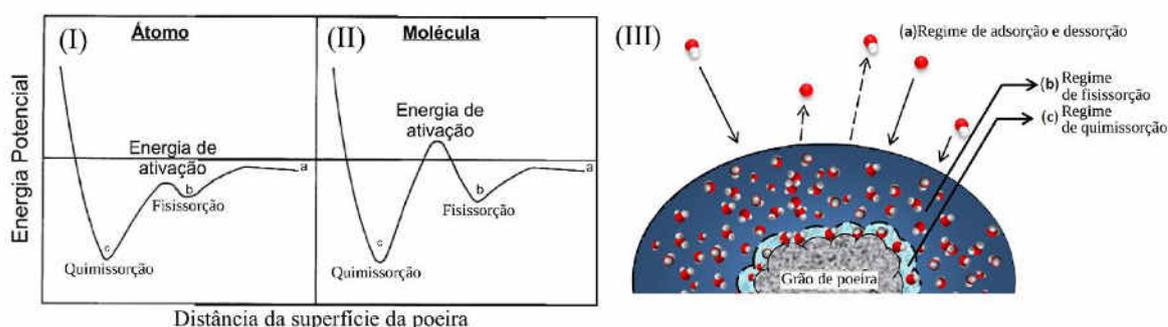
A escala de tempo de adsorção de espécies na fase gasosa sobre os grãos é dada por (Aikawa, 2013):

$$t_{ads} = \left[ S(T_g, T_p) \pi a^2 \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} n_p \right] \approx 10^6 \left( \frac{10 \text{ cm}^{-3}}{n_H} \right) \left( \frac{1,0}{S(T_g, T_p)} \right) \left( \frac{0,1 \mu\text{m}}{a} \right)^2 \text{ anos} \quad (8)$$

onde  $k$  é a constante de Boltzmann,  $a$  é o raio do grão de poeira,  $m$  a massa do próton,  $n_p$  a densidade da poeira, que nesta equação é assumido que seja da ordem de  $10^{-12} n_H$ . Para nuvens densas ( $n_H \sim 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ), frias ( $T \sim 10 \text{ K} \rightarrow S \approx 0,8$ ), e com tamanhos de grãos de poeira com raio de  $0,25 \mu\text{m}$  esse valor chega à ordem de  $10^5$  anos, o que representa apenas uma pequena parte do tempo de vida de uma nuvem densa, que é da ordem de  $10^7$  anos (Henning, et al., 2013).

### 1.2.2.3 Energias de ligação

Como mencionado no início dessa seção, a adsorção de um gás na superfície de um grão de poeira é dividida em (i) regime clássico (interação de van der Waals), atuando a grandes distâncias (ordem de  $\text{\AA}$ ) e intervalo de energia de ligação entre  $0,01 - 0,2 \text{ eV}$  e (ii) regime quântico (sobreposição das funções de onda na quimissorção) próximo à superfície do grão de poeira com energia de ligação da ordem de  $1 \text{ eV}$ . A Figura 10 mostra uma ilustração das energias e dos regimes de adsorção/dessorção, fisissorção e quimissorção. Os painéis (I) e (II) mostram como varia a energia potencial durante a aproximação de um gás (átomo e molécula, respectivamente) no regime de adsorção (c), fisissorção (b) e quimissorção (a), bem como as energias de ativação envolvidas. Para o caso da aproximação de moléculas, essa energia é maior, pois a quimissorção impõe uma quebra ou modificação estrutural nas ligações covalentes. É importante mencionar, que as barreiras de ativação também dependem da morfologia do grão de poeira, sendo diferentes para o caso cristalino ou amorfo. O painel



(III) ilustra um cenário da adsorção de átomos e moléculas na superfície de um grão de poeira.

Figura 10: Ilustração da variação da energia potencial e cenário de condensação do gás sobre a poeira. Os painéis (I) e (II) ilustram a variação da energia potencial para o caso atômico e molecular, respectivamente. O painel (III) mostra um diagrama esquemático dos regimes de adsorção/dessorção (c), fisissorção (b) e quimissorção (c) durante a condensação e formação do manto de gelo. Painéis (I) e (II) adaptados de Whittet, (2003).

Em uma nuvem molecular, as espécies hidrogenadas se condensam primeiro (Öberg, et al., 2011), ocupando os sítios de quimissorção, uma vez que este regime é limitado apenas pelos sítios ativos disponíveis. Os gases que são adsorvidos posteriormente estão sob o domínio das forças de van der Waals e não formam ligações químicas, como na quimissorção. Isso explica, por exemplo, a baixa depleção de algumas espécies no meio interestelar difuso, pois a energia absorvida na interação radiação-matéria, é suficiente para ejetar as espécies do manto com baixa temperatura de sublimação.

### 1.2.2.3 Migração, evaporação e reação química na superfície do grão

Após um gás ser adsorvido na superfície de um grão, existe uma importante relação entre o tempo de migração (movimentação na superfície do grão), o tempo de evaporação (retornar à fase gasosa - desorção) e tempo de reação para formar novas espécies.

De acordo com (Tielens, 2005), o tempo de permanência de uma espécie na superfície de um grão antes que ele evapore, é dada por:

$$t_{ev} = \nu_0^{-1} e^{E/kT_s} \quad [\text{s}] \quad (9)$$

onde  $\nu_0$  é a frequência de vibração da espécie adsorvida em Hz,  $E$  é a energia da adsorção e  $T_s$  a temperatura da superfície de adsorção. A frequência  $\nu_0$  varia de acordo com a temperatura local e com a massa atômica da espécie envolvida. Para um gás monoatômico de H e de H<sub>2</sub> ela é igual a  $2 \times 10^{13}$  Hz e  $1,4 \times 10^{12}$  Hz, respectivamente.

Então, assumindo um caso em que os sítios de quimissorção estão preenchidos com um manto de H<sub>2</sub>O, o tempo de evaporação para espécies de um gás de H<sub>2</sub> é de  $3 \times 10^7$  s à 10 K e  $3 \times 10^{-6}$  s para a temperatura de 30 K. Durante o tempo de permanência na superfície de um grão, a espécie pode migrar de um local para outro. As espécies com baixa massa atômica, como o H e o H<sub>2</sub>, por exemplo, migram através do tunelamento quântico, onde o tempo é dado por (Tielens, 2005):

$$t_t = \nu_0^{-1} e^{\frac{2a}{\hbar}(2mE_m)^{1/2}} \quad [\text{s}] \quad (10)$$

onde  $E_m$  é a altura de uma barreira de potencial retangular,  $a$  sua largura e  $m$  a massa da espécie. Embora os valores da energia associada à barreira, para o caso do  $H_2$  em uma superfície de  $H_2O$  não sejam bem conhecidos, estima-se a energia que seja menor que 350 K. Assumindo que  $a = 1 \text{ \AA}$ , a escala de tempo é de  $4 \times 10^{-12} \text{ s}$ . Isso é uma insignificante fração do tempo de evaporação mostrado logo acima.

Para o caso de espécies com maior massa atômica, o mecanismo de migração ocorre através de saltos de um sítio ativo para outro. O tempo é dado por (Tielens, 2005):

$$t_s = \nu_0^{-1} e^{E_m/kT_s} \quad [s] \quad (11)$$

O tempo de salto de uma espécie de C em uma superfície de  $H_2O$  é da ordem de  $10^{-2}$  a 10 K e  $10^{-9}$  à 30 K. Para ambos os casos, esse tempo aumenta se for considerada uma superfície de silicato (Tielens, 2005). É importante observar também, que apesar da possibilidade de átomos de H e moléculas de  $H_2$  migrarem por tunelamento através das barreiras de potencial, experimentos de laboratório apresentados em (Katz, et al., 1999) mostram que essas duas espécies têm maior eficiência de migração por salto do que por tunelamento. Os mecanismos de migração por salto ou tunelamento são conhecidos como Langmuir-Hinshelwood ou Eley-Rideal, quando uma espécie oriunda da fase gasosa, reage diretamente com outra já adsorvida. Espera-se também que as escalas de tempo para a ocorrência do mecanismo de Eley-Rideal sejam mais elevadas que para o de Langmuir – Hinshelwood, devido às altas energias cinéticas associadas ao gás. A Figura 11 ilustra os dois mecanismos de reação, como também a migração por tunelamento e salto.

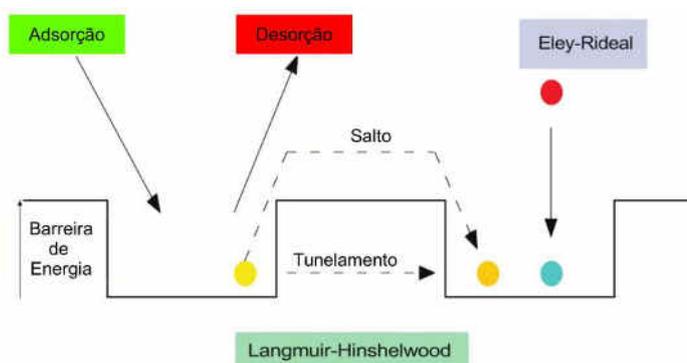


Figura 11: Ilustração dos mecanismos de migração de espécies químicas na superfície de um grão de poeira interestelar, dada a presença de barreiras de energia potencial devido às imperfeições de estrutura. Fonte: Comunicação privada com Dr. Wing-Fai Thi.

# CAPÍTULO 2

## METODOLOGIAS ADOTADAS

*Este capítulo apresenta as ferramentas e metodologias adotadas para o estudo dos gelos astrofísicos nesta tese.*

### 2.1 Panorama das metodologias adotadas

Para modelar computacionalmente as absorções espectrais no infravermelho devido à evolução química de gelos astrofísicos condensados em discos e envelopes protoestelares, foi necessário agregar dados obtidos através de experimentos em laboratório e modelos de

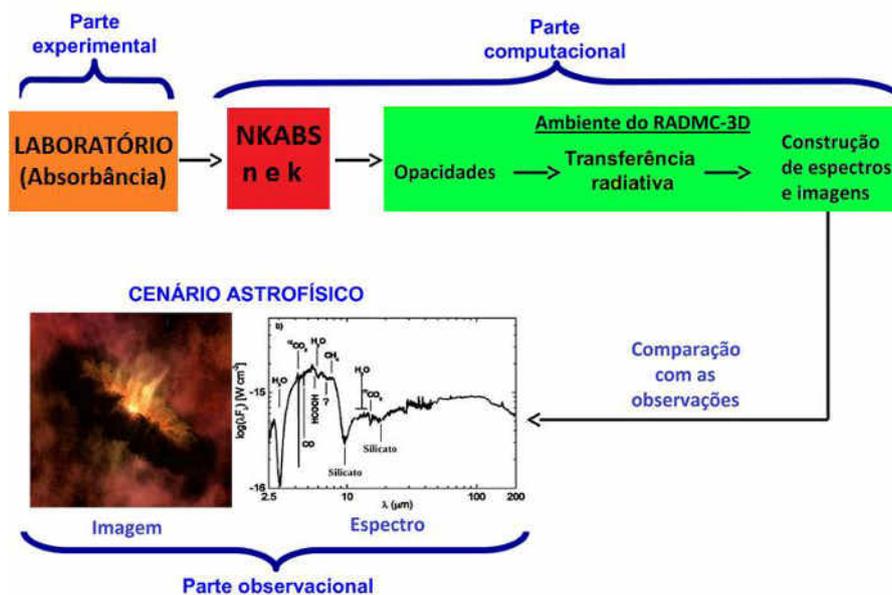


Figura 12: Panorama das metodologias empregadas neste trabalho, que são divididas em parte experimental, computacional e observacional.

simulação computacional de transferência radiativa. Nesse sentido, para deixar claro as etapas que foram executadas neste trabalho, consideremos a Figura 12.

A seguir são apresentados mais alguns detalhes das etapas mostra na Figura 12:

1. Os dados de absorvância foram obtidos em 3 laboratórios no Brasil e 1 na França, sendo: (i) LASA (Laboratório de Astroquímica e Astrobiologia da Univap) em experimentos realizados nas dependências do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS); (ii) Laboratório da PUC-Rio; (iii) LNLS e por fim no (iv) GANIL (*Grand Accélérateur National d'Ions Lourds*), respectivamente. A grandeza absorvância é dada pela seguinte equação:

$$Abs_v = -\log\left(\frac{I_0}{I}\right), \quad (13)$$

onde  $I_0$  é a intensidade do feixe de radiação no infravermelho ao incidir na amostra de gelo e  $I$  é a intensidade do feixe na detecção pelo espectrógrafo.

2. Após reunir todos os dados de absorvância obtidos experimentalmente, foram calculados para cada gelo, os índices de refração complexos utilizando o código NKABS (*Determination of N and K from ABSorbance data*) elaborado por Rocha, et al., (2014), desenvolvido em linguagem de programação Python e baseado na lei de Lambert-Beer e relações de Kramers-Kronig;
3. Os índices de refração dos gelos foram utilizados para calcular as opacidades (seção de choque por partícula por massa) usando a teoria de Mie (Mie, 1908), que resumidamente, assume que os gelos tem geometria esférica, e suas seções de choque de absorção e espalhamento são função do índice de refração complexo. Além disso, estes dados foram usados para calcular o albedo dos gelos e verificar como este parâmetro varia com o parâmetro fluência, que é dada em íons/cm<sup>2</sup>;

- Uma vez que as opacidades dos gelos foram calculadas, eles foram aplicados no código de transferência radiativa RADMC-3D<sup>2</sup> para reproduzir a distribuição espectral de energia da protoestrela de baixa massa Elias 29. Os resultados mostram que o uso dos dados de opacidade que contêm informações sobre a evolução química dos gelos é essencial para reproduzir os dados observados, como por exemplo, a distribuição espectral de energia (DEE), ou do inglês SED (*Spectral Energy Distribution*).

## 2.2 Metodologia experimental típica

Juntamente com as observações de gelos astrofísicos no meio interestelar, os experimentos em laboratório são importantes para entender como variam os parâmetros físico-químicos do gelo com a mudança de temperatura, bem como com a natureza e a intensidade da radiação ionizante e raios cósmicos. Outro aspecto importante do experimento é detecção da síntese de novas moléculas, radicais e íons que são verificados por técnicas de espectroscopia no infravermelho e espectrometria de massa e cromatografia gasosa.

Os dados usados neste trabalho dos quais foram extraídas os parâmetros físicos e químicos dos gelos foram obtidos em experimentos realizados em dois países: Brasil e França. No Brasil foram utilizados três laboratórios: (i) a câmara experimental do Laboratório de Astroquímica e Astrobiologia da Univap (LASA/UNIVAP) acoplada à linha de luz SGM (*Spherical Grating Monochromator*) do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), em Campinas-SP, Brasil; (ii) a câmara experimental e a linha de luz SGM do LNLS e (iii) laboratório da PUC-Rio. Na França foram utilizadas as diferentes linhas do acelerador de íons pesados GANIL (*Grand Accélérateur National d'Ions Lourds*), em Caen, França. É importante ressaltar que a grande maioria dos dados coletados e apresentados nesta tese foram obtidos pelo Prof. Dr. Sergio Pilling (orientador desta tese) e demais colaboradores em um período anterior a esta tese, e que a maioria deles já foram publicados na literatura ou estão em fase de preparação (Ver Tabela 5). Entretanto, todos os dados que foram obtidos no LASA/LNLS e alguns dados coletados no GANIL tiveram a participação do autor desta tese.

---

<sup>2</sup> <http://www.ita.uni-heidelberg.de/~dullemond/software/radmc-3d>

A Figura 13 apresenta um diagrama esquemático da montagem experimental típica empregada para obtenção dos dados experimentais utilizados nesta tese. Neste tipo de aparato experimental podemos simular a evolução química de um dado gelo astrofísico na presença de um campo de radiação ou mesmo na presença de um gradiente de temperatura. Dependendo do tipo de gelo astrofísico a ser simulado, as amostras podem ser puras (Ex.  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ) ou misturadas (Ex.  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}:\text{NH}_3$ ). Uma vez preparada a amostra na câmara de misturas, uma válvula é usada para injetá-la em um substrato de CsI, NaCl ou ZnSe (transparentes no infravermelho), em uma câmara de ultra-alto-vácuo a uma pressão da ordem de  $10^{-8}$  mbar ou menor e geralmente resfriado à 10 K por um criostato. Tais condições são necessárias para evitar contaminações do ar atmosférico na câmara experimental.

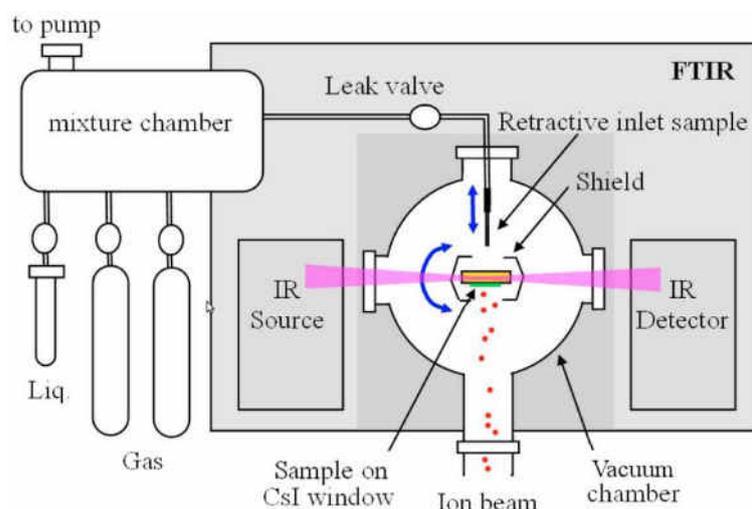


Figura 13: Diagrama esquemático da montagem experimental típica empregada para obtenção dos dados experimentais utilizados nesta tese. O gelo é condensado sobre um substrato (Ex. CsI, ZnSe) previamente resfriado à  $T \sim 10$  K. Um espectrômetro no infravermelho é usado para monitorar as bandas de absorção do gelo durante o experimento. Figura adaptada de Pilling, et al., (2010).

Depois que a amostra é condensada na superfície do substrato dentro da câmara experimental, ele pode ser submetido a (i) um campo de radiação ionizante, como UV, raio-X, ou a um feixe de íons, que simulam os efeitos da radiação em regiões típicas do meio interestelar ou (ii) uma variação de temperatura, que pode fornecer energia suficiente para algumas reações químicas, através de colisões quando as espécies do gelo migram na superfície do grão de poeira, ou para induzir efeitos de segregação ou cristalização. Para monitorar as mudanças induzidas no gelo, geralmente é utilizado um espectrógrafo no infravermelho, chamado de FTIR (*Fourier Transform InfraRed spectroscopy*). Esta técnica permite obter um espectro de absorbância, como mostrado na Figura 14. A absorbância mede,

em escala logarítmica, a razão entre a intensidade da radiação na faixa estudada (em geral no infravermelho), que incide e sai da amostra de gelo.

A Figura 14 mostra o intervalo entre  $2200 - 1000 \text{ cm}^{-1}$  ( $4,5 - 10 \text{ }\mu\text{m}$ ) de um espectro de absorvância para um gelo composto pela mistura de  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  (1:1). É apresentada também a síntese de moléculas devido à variação da fluência sobre as amostras. Nesta figura, a formação de novas moléculas é caracterizada pelo aumento da absorvância em números de onda específicos, indicando que moléculas que não estavam presentes no gelo (fluência 0) foram formadas após o processamento energético da amostra condensada. São exemplos da formação de novas espécies as moléculas de  $\text{HCOOH}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CH}_3\text{CHO}$ . Por outro lado, a Figura 14 também mostra a destruição de moléculas, como por exemplo, a quebra de ligações do *bending mode* da molécula de  $\text{H}_2\text{O}$ . A destruição é caracterizada pela diminuição na intensidade do pico entre  $1800 - 1500 \text{ cm}^{-1}$ .

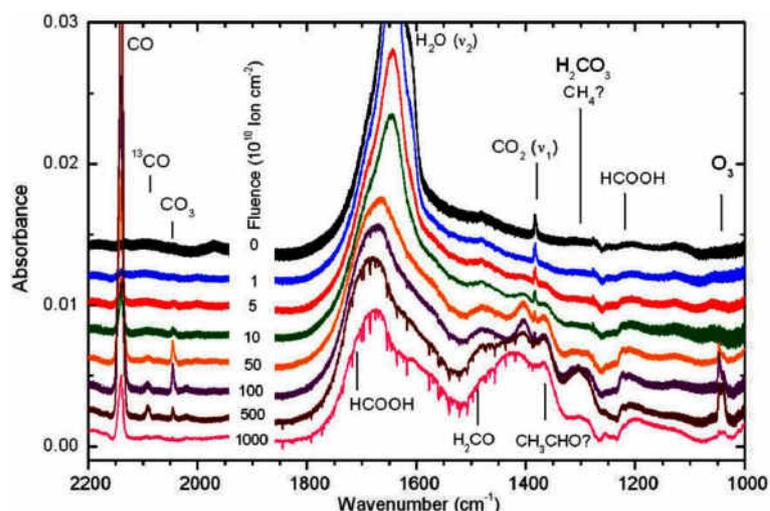


Figura 14: Detalhe de um intervalo do espectro de absorvância de uma mistura de gelo de  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  (1:1) entre  $2200-1000 \text{ cm}^{-1}$ , destacando a síntese de moléculas em várias fluências  
Fonte: Pilling, et al., 2010a.

Com base na técnica de espectroscopia no infravermelho, muitos parâmetros tais como seção de choque de destruição/formação, densidade colunar e tempo de meia-vida podem ser calculados dos dados de absorvância, como podem ser observados nos trabalhos de (Pilling, et al., 2010a; 2010b; de Barros, et al., 2014; Andrade, et al., 2014). Além disso, os dados de absorvância podem ser usados para monitorar a dinâmica de segregação e dessorção de uma mistura de gelos com a temperatura. A Figura 15a mostra a absorvâncias do modo vibracional

em  $660 - 655 \text{ cm}^{-1}$  do  $\text{CO}_2$  em uma mistura de  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  à diferentes temperaturas e no intervalo de número de onda entre  $680-600 \text{ cm}^{-1}$ . A Figura 15b apresenta uma ilustração da dinâmica das moléculas presentes em um dado gelo com o aumento de sua temperatura (Öberg, 2009). O pico duplo que aparece no dado de absorbância à 60 K, significa que houve segregação da molécula polar ( $\text{H}_2\text{O}$ ) e apolar ( $\text{CO}_2$ ), induzida pelo aumento da temperatura. Acima dessa temperatura (ex. 75 K), é iniciada a dessorção da espécie mais volátil ( $\text{CO}_2$ ), no entanto, o sinal medido pelo espectrógrafo ainda não é zero. Isso significa que uma fração da molécula de  $\text{CO}_2$  ainda está presa nas partes internas do gelo rico em  $\text{H}_2\text{O}$ , devido às porosidades. Quando a temperatura atinge valores superiores à 150 K, todo o gelo de  $\text{CO}_2$  foi dessorvido.

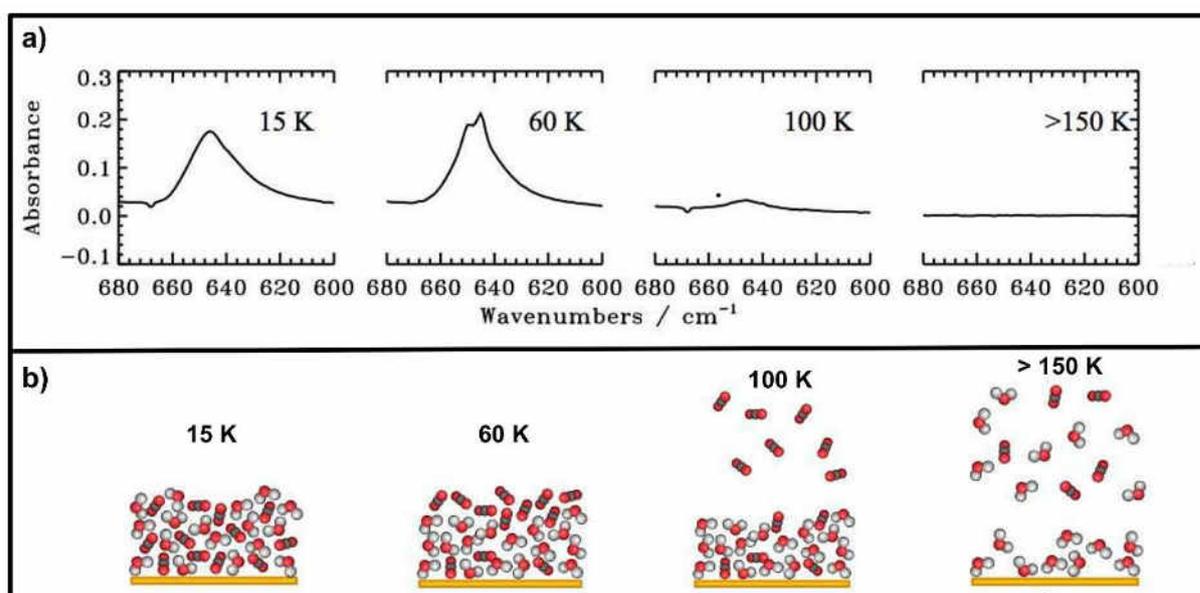


Figura 15: Absorbância e ilustração da dinâmica do gelo de  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  à diferentes temperaturas. (a) Absorbância do gelo de  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  observado entre  $680-600 \text{ cm}^{-1}$ . (b) Ilustração da dinâmica de segregação e dessorção do gelo de  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$ . Figura adaptada de Öberg, 2009.

## 2.2.1 Vibrações moleculares e espectroscopia no IR

Embora a matéria no estado sólido pareça rígida no regime macroscópico, a nível microscópico, as moléculas estão em constante vibração, com energias na faixa do infravermelho (Tielens, 2005). Dessa forma, se radiação infravermelha incide sobre esses materiais, ocorrerá absorção de fótons nos comprimentos de onda, associados aos modos vibracionais das moléculas. Os modos vibracionais das moléculas não lineares e lineares

podem ser dados, respectivamente, pelas expressões  $3N - 6$  e  $3N - 5$ , onde  $N$  é o número de átomos na molécula. Entretanto, nem todos esses modos levam a absorções distintas, uma vez que alguns modos vibracionais ocorrem na mesma frequência e então, são degenerados. Por outro lado, alguns modos vibracionais não são ativos no infravermelho, porque seu momento de dipolo não varia durante as vibrações. Como exemplo disso, observemos a molécula  $\text{CH}_4$ , que possui nove modos vibracionais, porém apenas dois são ativos no infravermelho, que são chamados de *symmetric and asymmetric stretching and bending mode* da ligação C-H. Esses modos correspondem a frequências em  $1306 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1534 \text{ cm}^{-1}$  e  $3019 \text{ cm}^{-1}$ . A Tabela 3 mostra as identificações de modos vibracionais de vários grupos moleculares.

Tabela 3: Intervalo de número de onda associado aos modos vibracionais de alguns grupos de ligações químicas. Adaptado de Tielens, 2005.

Grupo	Modo	Intervalo ( $\text{cm}^{-1}$ )	Intervalo ( $\mu\text{m}$ )	Nota
OH stretch	OH livre	3610–3645 <sup>a</sup>	2,74 – 2,77	Estreito
	intramolecular <sup>b</sup>	3450–3600	2,77 – 2,90	Estreito
	Intermolecular	3200–3550	2,81 – 3,12	Largo
	Chelated	2500–3200	3,12 – 4,00	Muito Largo
NH stretch	NH livre	3300–3500	2,85 – 3,03	Estreito
	H ligado em NH	3070–3350	3,00 – 3,26	Largo
CH stretch	$\equiv\text{C-H}$	3280–3340	3,00 – 3,05	
	$=\text{C-H}$	3000–3100	3,22 – 3,33	
	$\text{CO-CH}_3$	2900–3000	3,33 – 3,45	Cetonas
	$\text{C-CH}_3$	2865–2885	3,46 – 3,50	Simétrico
		2950–2975	3,36 – 3,40	Assimétrico
	$\text{O-CH}_3$	2815–2835	3,53 – 3,55	Simétrico
		2955–2995	3,34 – 3,40	Assimétrico
	$\text{N-CH}_3$	2780–2805	3,56 – 3,60	Aminas alifáticas
		2810–2820	3,55 – 3,56	Aminas aromáticas
	$\text{CH}_2$	2840–2870	3,48 – 3,52	Simétrico
	2915–2940	3,40 – 3,43	Assimétrico	
	CH	2880–2900	3,45 – 3,47	
$\text{C}\equiv\text{C}$ stretch	$\text{C}\equiv\text{C}$	2100–2140	4,67 – 4,76	Grupo terminal
	$\text{C-C}\equiv\text{C-C}$	2190–2260	4,42 – 4,56	
	$\text{C-C}\equiv\text{C-C-C}\equiv\text{C}$	2040–2200	4,54 – 4,90	
$\text{C}\equiv\text{N}$ stretch	Alifático saturado	2240–2260	4,42 – 4,46	
	Aril	2215–2240	4,46 – 4,51	
$\text{C=O}$ stretch	Não conjugado	1700–1900	5,26 – 5,88	
	Conjugado <sup>c</sup>	1590–1750	5,71 – 6,30	

Continuação da Tabela 3

	Amidas	1630–1680	6,00 – 6,13	
C=C <i>stretch</i>	–HC=C=CH <sub>2</sub>	1945–1980	5,05 – 5,14	
	–HC=C=CH–	1915–1930	5,20 – 5,22	
CH <i>bend</i>	CH <sub>3</sub>	1370–1390	7,20 – 7,30	Simétrico
		1440–1465	6,82 – 6,95	Assimétrico
	CH <sub>2</sub>	1440–1480	6,75 – 6,82	
CO–O–C <i>stretch</i>	CH	1340	7,46	
	Formatos	~1190	8,40	
	Acetatos	~1245	8,05	
C–O–C <i>stretch</i>	Alifáticos saturados	1060–1150	8,70 – 9,45	Assimétrico
	Alkil, éters aril	1230–1277	7,83 – 8,13	
	Éters vinil	1200–1225	8,16 – 8,33	
Modos aromáticos	C–H <i>stretch</i>	~3030	3,30	
	C–H deformação	~1160	8,62	No plano
		740–900	11,11 – 13,51	Fora do plano
	C=C <i>stretch</i>	1590–1625	6,15 – 6,30	
		1280–1315	7,60 – 7,81	

<sup>a</sup> A Frequência OH da água livre ocorre em 3756 cm<sup>-1</sup>

<sup>b</sup> H ligado como dímero ou polímero

A posição das bandas associadas aos modos vibracionais de moléculas no infravermelho é identificada através da técnica de espectroscopia no infravermelho. Esta técnica está bem apresentada na literatura científica<sup>3,4</sup>. Nos experimentos típicos de astroquímica mostrado nesse trabalho, a espectroscopia é feita utilizando um FTIR, que emite radiação infravermelha sobre a amostra de gelo. Quando a radiação atravessa o gelo, o espectro mostrará bandas de absorção, que foram ocasionados pelos modos vibracionais quantizados das moléculas do gelo.

### 2.2.2 Conjunto de dados experimentais

Os dados de absorbância de gelos virgens para o conjunto de 11 amostras foram obtidos em experimentos realizados na câmara experimental do laboratório LASA. A montagem da mesa de experimentos foi realizada nas dependências da Universidade do Vale

<sup>3</sup> (Tielens, 2005)

<sup>4</sup> <http://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/VirtTxtJmL/Spectrpy/InfraRed/infrared.htm>

do Paraíba (UNIVAP), e dispunha dos seguintes instrumentos: (i) câmara experimental de ultra-alto vácuo ( $\sim 10^{-8}$  mbar =  $10^{-6}$  Pa =  $10^{-11}$  atm); (ii) criostato; (iii) bombas de vácuo primária e turbo; (iv) espectrógrafo no infravermelho; (v) espectrômetro de massa e (vi) linha de gases. Esta montagem experimental foi transportada para as dependências do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron e acoplada à linha de luz SGM (*Spherical Grating Monochromator*), onde foram realizados os experimentos e coletados os dados de absorvância. A Figura 16a mostra a montagem da câmara experimental do LASA e a Figura 16b mostra a acoplagem à linha SGM. Na sequência de experimentos que se seguiram, foram obtidos dados de absorvância de gelos virgens, bem como gelos processados por um feixe de luz branca, cuja faixa de energia variou entre 250 - 1000 eV. No entanto, é importante deixar claro que os dados que foram processados pelo feixe de luz branca não fazem parte deste trabalho.

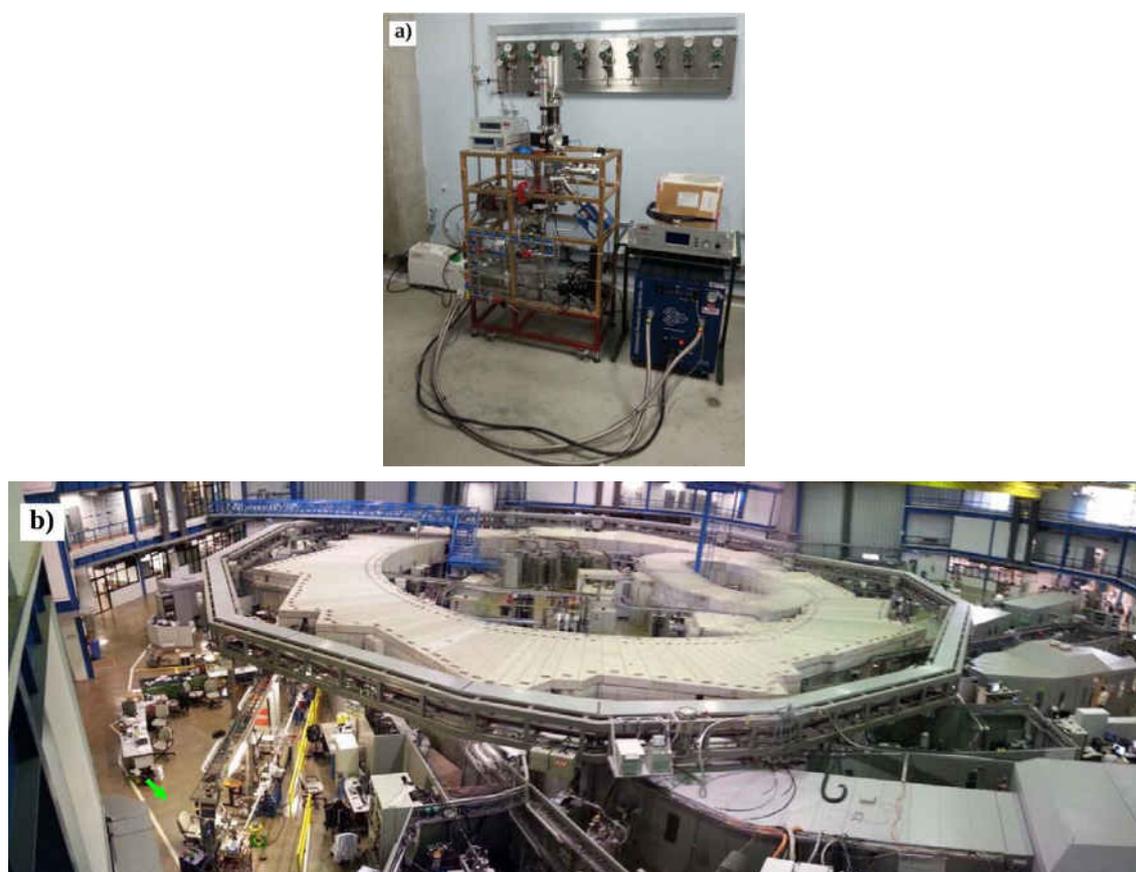


Figura 16: Montagem experimental da câmara Stark do Laboratório de Astroquímica e Astrobiologia da Univap. (a) Câmara experimental em junho de 2013. (b) Câmara Stark acoplada à linha de luz SGM (seta verde) do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), em Campinas-SP. Fotografias tiradas em junho de 2013. A estrutura atual do laboratório dispõe de mais equipamentos, tais como GC-MS e canhão de elétrons. Mais informações visite: [www1.univap.br/gaa/lasa](http://www1.univap.br/gaa/lasa).

Complementando os 11 dados de absorvância obtidos com a montagem experimental do LASA, foram utilizados mais 17 dados de diferentes gelos, que estavam disponíveis na literatura (Ver Tabela 4), totalizando 28 amostras de gelos virgens. Os experimentos para tais amostras foram realizados no LNLS, PUC-Rio e GANIL pelo Prof. Dr. Sergio Pilling e colaboradores, em um período anterior a esta tese. A Tabela 4 mostra o conjunto de gelos virgens cujos dados de absorvância foram utilizados neste trabalho, bem como as referências descrevendo as metodologias experimentais. Os dados de absorvância dos gelos mostrados nesta tabela serão utilizados para o cálculo dos seus índices de refração complexos (Ver Seção 2.3.1).

Além dos gelos virgens, foram obtidos dados de gelos bombardeados por raios cósmicos simulados no GANIL, cuja maioria dos experimentos foi realizada, também, pelo Prof. Dr. Sergio Pilling e outros pesquisadores, embora o autor desta tese tenha participado de alguns deles. A metodologia experimental consiste no uso da montagem experimental CASIMIR (*Chambre d'Analyse par Spectroscopie Infrarouge des Molécules IReadiées*), acoplada ao feixe de íons do IRRSUD, situado nas dependências do GANIL. As amostras de gelos usadas neste trabalho as quais foram bombardeadas por diferentes tipos de íons, bem como diferentes energias, estão mostradas na Tabela 5.

Os gelos processados neste trabalho foram bombardeados por íons de  $^{58}\text{Ni}^{13+}$ ,  $^{58}\text{Ni}^{11+}$ ,  $^{58}\text{Ni}^{24+}$ ,  $^{16}\text{O}^{5+}$  e  $^{16}\text{O}^{7+}$ . Contudo é importante deixar claro que devido às altas energias empregadas, os íons atravessam todo o gelo e, portanto, o enriquecimento do ambiente químico induzido pelo íon é função apenas de sua energia, e não de sua natureza, como mostram os trabalhos de Andrade, et al., (2013) e Bergantini, et al., (2014). Porém, existem experimentos que têm por objetivo implantar íons nos gelos, e dessa forma, são utilizados íons com baixa energia e de interesse astroquímico, como por exemplo, íons de  $^{16}\text{O}$ , o que aumenta o número de espécies no gelo (Lv, et al., 2012, 2014). No entanto, este tipo de experimento não foi aplicado neste trabalho.

Nos experimentos, os íons são produzidos no GANIL são acelerados e guiados por campo magnéticos até atingir os gelos condensados na câmara experimental como mostra a Figura 17. Após o bombardeamento das amostras de gelo pelos íons pesados, as mudanças químicas das espécies moleculares são monitoradas por *in situ* por espectroscopia no infravermelho, usando um FTIR (*Fourier Transformer InfraRed spectroscopy*).

Tabela 4: Conjunto de dados dos gelos virgens usados neste trabalho. Nesta tabela são mostradas as espessuras dos gelos e as temperaturas nos experimentos, bem como os substratos utilizados e os laboratórios onde foram realizados os procedimentos experimentais. Fonte: Rocha & Pilling (2014)

Identificação	Amostra	d (µm)	Temperatura (K)	Substrato	Laboratório
G1	CO	0,15	10	CsI	- <sup>a</sup>
G2	CO <sub>2</sub>	0,4	13	CsI	GANIL <sup>b</sup>
G3	NH <sub>3</sub>	0,3	14	CsI	GANIL <sup>c</sup>
G4	SO <sub>2</sub>	1,3	12	ZnSe	LASA
S1	α-Glicina	~2,0	300	CaF <sub>2</sub>	LNLS <sup>d</sup>
S2	α-Glicina	1,5	14	CsI	GANIL <sup>e</sup>
S3	β-Glicina	0,5	300	KBr	PUC-Rio <sup>f</sup>
S4	DL-Proline	~2,0	300	CaF <sub>2</sub>	LNLS <sup>d</sup>
S5	DL-Valine	~2,0	300	CaF <sub>2</sub>	LNLS <sup>d</sup>
S6	Adenine	~2,0	300	CaF <sub>2</sub>	LNLS <sup>d</sup>
S7	Uracil	~2,0	300	CaF <sub>2</sub>	LNLS <sup>d</sup>
L1	H <sub>2</sub> O (amorfo)	0,4	12	ZnSe	LASA
L2	H <sub>2</sub> O (cristalino)	1,5	165	CsI	GANIL
L3	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CO	0,8	12	ZnSe	LASA
L4	CH <sub>3</sub> CN	0,5	12	ZnSe	LASA
L5	CH <sub>3</sub> COOH	0,3	12	ZnSe	LASA
L6	HCOOH	0,6	12	ZnSe	LASA
L7	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	0,5	12	ZnSe	LASA
L8	CH <sub>3</sub> OH	0,4	12	ZnSe	LASA
L9	c-C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	1,8	13	CsI	GANIL <sup>c</sup>
M1	N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> (19:1) (Titan)	1,0	12	ZnSe	LASA
M2	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> (9:1)	0,4	13	CsI	GANIL <sup>b</sup>
M3	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> (1:1)	0,6	13	CsI	GANIL <sup>b</sup>
M4	H <sub>2</sub> O:HCOOH (1:1)	7,7	13	KBr	GANIL <sup>g</sup>
M5	H <sub>2</sub> O:NH <sub>3</sub> :CO(1:0.5:0.4)	1,7	13	CsI	GANIL <sup>h</sup>
M6	H <sub>2</sub> O:NH <sub>3</sub> (1:0.3:0.7)	1,7	14	CsI	GANIL <sup>c</sup>
M7	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> (9:1:1:1)(Enceladus)	1,5	80	ZnSe	LASA
M8	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> (10:1:1:1)(Europa)	1,2	90	ZnSe	LASA

<sup>a</sup> Ehrenfreund, et al., (1996); <sup>b</sup> Pilling, et al., (2010b); <sup>c</sup> Pilling, et al., (2012); <sup>d</sup> Pilling, et al., (2011); <sup>e</sup> Portugal, et al., (2014);

<sup>f</sup> Pilling, et al., (2013); <sup>g</sup> Bergantini, et al., (2014); <sup>h</sup> Pilling, et al., (2010a)

Tabela 5: Conjunto de gelos bombardeados usados neste trabalho. As colunas mostram os códigos das misturas (W#), a composição, a espessura, a temperatura, o projétil e as fluências usadas nos experimentos. Foi usado o substrato de CsI para todas as amostras.

Identificação	Mistura	d (μm)	Temperatura (K)	Projectile	Fluência (10 <sup>10</sup> íons cm <sup>-2</sup> )
W1a	<sup>a</sup> H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> (1:1)	0.6	13	52 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+13</sup>	0
W1b	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> (1:1)	<0.6	13	52 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+13</sup>	100
W1c	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> (1:1)	<0.6	13	52 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+13</sup>	1000
W2a	<sup>a</sup> H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> (10:1)	0.4	13	52 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+13</sup>	0
W2b	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> (10:1)	<0.4	13	52 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+13</sup>	100
W2c	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> (10:1)	<0.4	13	52 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+13</sup>	500
W3a	<sup>b</sup> H <sub>2</sub> O:CH <sub>4</sub> (1:0.6)	2	16	40 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+11</sup>	0
W3b	H <sub>2</sub> O:CH <sub>4</sub> (1:0.6)	<2	16	40 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+11</sup>	100
W3c	H <sub>2</sub> O:CH <sub>4</sub> (1:0.6)	<2	16	40 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+11</sup>	1000
W4a	<sup>b</sup> H <sub>2</sub> O:CH <sub>4</sub> (10:1)	1	16	40 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+11</sup>	0
W4b	H <sub>2</sub> O:CH <sub>4</sub> (10:1)	<1	16	40 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+11</sup>	100
W4c	H <sub>2</sub> O:CH <sub>4</sub> (10:1)	<1	16	40 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+11</sup>	1000
W5a	<sup>c</sup> H <sub>2</sub> O:NH <sub>3</sub> (1:0.5)	1.4	13	46 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+13+</sup>	0
W5b	H <sub>2</sub> O:NH <sub>3</sub> (1:0.5)	<1.4	13	46 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+13+</sup>	100
W5c	H <sub>2</sub> O:NH <sub>3</sub> (1:0.5)	<1.4	13	46 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+13+</sup>	1600
W6a	<sup>d</sup> H <sub>2</sub> O: HCOOH (1:1)	7.4	15	46 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+11+</sup>	0
W6b	H <sub>2</sub> O: HCOOH (1:1)	<7.4	15	46 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+11+</sup>	100
W6c	H <sub>2</sub> O: HCOOH (1:1)	<7.4	15	46 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+11+</sup>	1000
W7a	<sup>e</sup> H <sub>2</sub> O: CH <sub>3</sub> OH (1:1)	~4.5	15	40MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+11+</sup>	0
W7b	H <sub>2</sub> O: CH <sub>3</sub> OH (1:1)	<4.5	15	40MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+11+</sup>	100
W7a	H <sub>2</sub> O: CH <sub>3</sub> OH (1:1)	<4.5	15	40MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+11+</sup>	1000
W8a	<sup>c</sup> H <sub>2</sub> O:NH <sub>3</sub> :CO (1:0.6:0.4)	1.7	13	46 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+13+</sup>	0
W8b	H <sub>2</sub> O:NH <sub>3</sub> :CO (1:0.6:0.4)	<1.7	13	46 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+13+</sup>	100
W8c	H <sub>2</sub> O:NH <sub>3</sub> :CO (1:0.6:0.4)	<1.7	13	46 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+13+</sup>	2000
W9a	<sup>f</sup> H <sub>2</sub> O:NH <sub>3</sub> :c-C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> (1:0.3:0.7)	4.5	13	632 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+24+</sup>	0
W9b	H <sub>2</sub> O:NH <sub>3</sub> :c-C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> (1:0.3:0.7)	<4.5	13	632 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+24+</sup>	200
W9c	H <sub>2</sub> O:NH <sub>3</sub> :c-C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> (1:0.3:0.7)	<4.5	13	632 MeV <sup>58</sup> Ni <sup>+24+</sup>	3000
W10a	<sup>g</sup> H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> (10:1:1)	2.1	72	15.7 MeV <sup>16</sup> O <sup>+5</sup>	0
W10b	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> (10:1:1)	<2.1	72	15.7 MeV <sup>16</sup> O <sup>+5</sup>	10
W10c	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> (10:1:1)	<2.1	72	15.7 MeV <sup>16</sup> O <sup>+5</sup>	100
W11a	<sup>h</sup> H <sub>2</sub> O:H <sub>2</sub> CO:CH <sub>3</sub> OH (100:2:0.8)	0.3	15	220 MeV <sup>16</sup> O <sup>+7+</sup>	0
W11b	H <sub>2</sub> O:H <sub>2</sub> CO:CH <sub>3</sub> OH (100:2:0.8)	<0.3	15	220 MeV <sup>16</sup> O <sup>+7+</sup>	1700
W11c	H <sub>2</sub> O:H <sub>2</sub> CO:CH <sub>3</sub> OH (100:2:0.8)	<0.3	15	220 MeV <sup>16</sup> O <sup>+7+</sup>	9600
W12a	<sup>i</sup> H <sub>2</sub> O: NH <sub>3</sub> :CO <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> (10:1:1:1)	1.4	35	15.7 MeV <sup>16</sup> O <sup>+5</sup>	0
W12b	H <sub>2</sub> O: NH <sub>3</sub> :CO <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> (10:1:1:1)	<1.4	35	15.7 MeV <sup>16</sup> O <sup>+5</sup>	10
W12c	H <sub>2</sub> O: NH <sub>3</sub> :CO <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> (10:1:1:1)	<1.4	35	15.7 MeV <sup>16</sup> O <sup>+5</sup>	100
W13a	<sup>i</sup> H <sub>2</sub> O: NH <sub>3</sub> :CO <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> (10:1:1:1)	1.1	72	15.7 MeV <sup>16</sup> O <sup>+5</sup>	0
W13b	H <sub>2</sub> O: NH <sub>3</sub> :CO <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> (10:1:1:1)	<1.1	72	15.7 MeV <sup>16</sup> O <sup>+5</sup>	10
W13c	H <sub>2</sub> O: NH <sub>3</sub> :CO <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> (10:1:1:1)	<1.1	72	15.7 MeV <sup>16</sup> O <sup>+5</sup>	100

<sup>a</sup>Pilling, et al., (2010b); <sup>b</sup>de Barros et al. (em preparação); <sup>c</sup>Pilling, et al., (2010a); <sup>d</sup>Bergantini, et al., (2014); <sup>e</sup>de Barros, et al., (2014b); <sup>f</sup>Pilling, et al., (2012); <sup>g</sup>Pilling et al. (em preparação); <sup>h</sup>de Barros, et al., (2014a); <sup>i</sup>Bergantini et al. (em preparação).

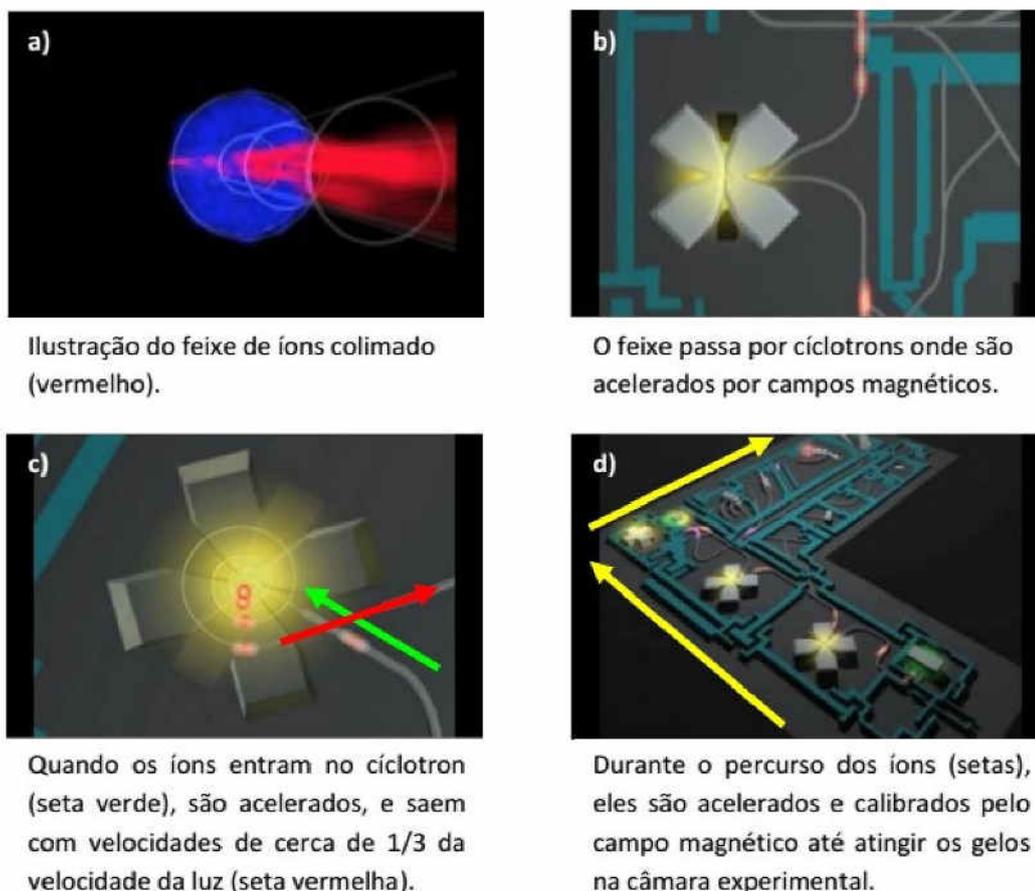


Figura 17: Ilustração das etapas (a), (b), (c) e (d) seguidas pelo feixe de íons em experimentos no GANIL desde a produção até a colisão com a amostra de gelo. Figuras extraídas de: <http://www.ganil-spiral2.eu/science/accelerateurs/fonctionnement-de-laccelerateur/view>.

## 2.3 Metodologia computacional

A etapa após a obtenção/preparação dos dados de absorbância obtidos em laboratório (ou tomados da literatura) foi a de cálculo dos índices de refração complexo, no infravermelho, associado a cada um dos gelos astrofísicos apresentados nas Tabelas 4 e 5. Tais dados, por sua vez, foram utilizados como parâmetros de entrada para determinar a opacidade dos gelos adotando a teoria de absorção e de espalhamento da radiação proposta por Gustav Mie em 1908 (Mie, 1908). O objetivo final desses passos citados é a modelagem computacional do espectro e das imagens no infravermelho da protoestrela Elias 29, que foi feita usando o código de transferência radiativa RADMC-3D.

### 2.3.1 Cálculo do índice de refração complexo e o código NKABS

O índice de refração complexo de qualquer material é dado pela seguinte equação:

$$\mathbf{m} = n + ik \quad (14)$$

onde  $n$  é a parte real e  $k$  é a parte imaginária. A grandeza  $n$  pode ser entendida pela lei de Snell e é responsável pelo espalhamento da radiação, enquanto que a grandeza  $k$  é responsável pelas absorções da radiação causada pelo material que está sendo atravessado. No entanto essas duas grandezas podem ser entendidas como variáveis macroscópicas, ou seja, os fenômenos a níveis moleculares que estão acontecendo para espalhar ou absorver a radiação não são explicados por estes valores; eles apenas mostram os efeitos. Além disso, essas duas grandezas são chamadas frequentemente de constantes ópticas, o que não achamos correto, uma vez que são função do comprimento de onda, e são definidas em todo espectro eletromagnético, e não apenas no óptico.

A determinação do índice de refração complexo é parâmetro fundamental em muitos campos de pesquisa, tais como engenharia de materiais, física, química e astronomia. No contexto de astronomia, por exemplo, o grande desafio é entender como que a radiação eletromagnética interage com a matéria, na fase gasosa ou condensada, que estamos chamando de gelos astrofísicos. Contudo, o procedimento para obter o índice de refração complexo não é uma tarefa trivial como descrito por (Wood, et al., 1982; Bergren, et al., 1978; Hudgins, et al., 1993; Ehrenfreund, et al., 1996; Baratta, et al., 1998). Nesta seção, entretanto, é apresentado o código computacional NKABS (acrônimo para “Determinação de N e K à partir dos dados de ABSorbância”), desenvolvido na linguagem de programação Python<sup>5</sup>, que calcula o índice de refração complexo no infravermelho, diretamente dos dados de absorbância obtidos em laboratório. Este código toma como base os trabalhos de Wood, et al., (1982); Bergren, et al., (1978); Hudgins, et al., (1993), porém com mudanças computacionais que permitiram aumentar a precisão dos valores calculados e a rapidez do cálculo numérico.

Os índices de refração complexos dos gelos citados neste trabalho foram calculados tomando como base a lei de Lambert-Beer, que trata do decaimento exponencial da

---

<sup>5</sup> <http://www.python.org/>

intensidade da radiação ao atravessar um meio material e as relações de Kramers-Kronig, que relacionam a parte real  $n$  e imaginária  $k$  do índice de refração complexo. Ambas as teorias adotadas são suficientes para determinar os valores de  $n$  e  $k$ , sabendo a intensidade inicial e final de um feixe ao interagir com o conjunto vácuo-gelo-substrato, como ilustrado em detalhes na Figura 18. Os sub-índices 0, 1 e 2, representam a interface amostra-vácuo, filme de gelo e substrato, respectivamente.

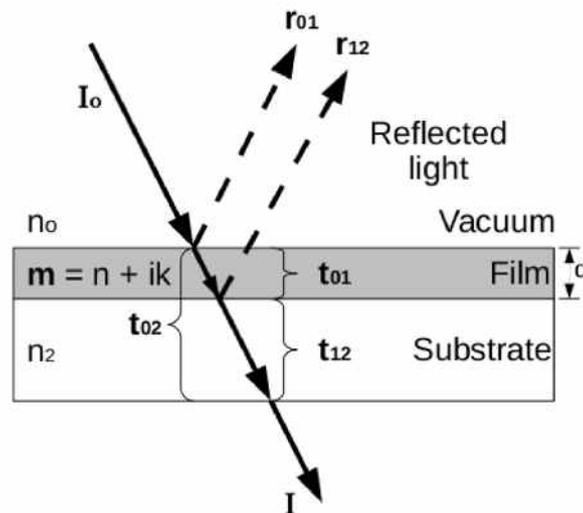


Figura 18: Representação esquemática do feixe de incidência sobre o filme fino. Os sub-índices 0, 1 e 2 representam a interface amostra-vácuo, filme fino e substrato, respectivamente. Os parâmetros dados por  $t$  e  $r$  são os coeficientes de Fresnel, que representam os coeficientes de transmissão e reflexão entre cada interface, respectivamente. Fonte: Rocha & Pilling (2014).

Embora a Figura 18 apresente um caso geral de incidência oblíqua do feixe de radiação, os experimentos em laboratório são em sua grande maioria realizados com incidência normal. Entretanto, o trabalho de Baratta, et al., (1998) mostra que a inclinação do feixe não altera o índice de refração complexo do material, uma vez que ele é uma propriedade intrínseca. Dessa forma, a intensidade do feixe transmitido pode ser dada pela equação da transmitância teórica para incidência normal, descrita como segue Hudgins, et al., (1993):

$$T_{teo} = \frac{I}{I_0} = e^{-\alpha d} \left| \frac{t_{01} t_{12} / t_{02}}{1 + r_{01} r_{12} e^{2ix}} \right|^2 \quad (15)$$

onde  $x = 2\pi v d m$  é um parâmetro adimensional, com  $v$  em  $\text{cm}^{-1}$ ,  $d$  a espessura do gelo e,  $\alpha$  o coeficiente de absorção de Lambert, dado por:

$$\alpha = 4\pi\nu k, \quad [\text{cm}^{-1}] \quad (16)$$

onde  $k$  é a parte imaginária do índice de refração complexo.

As espessuras dos gelos estão mostradas na Tabela 4 para os gelos virgens e processados por íons pesados. Para os gelos simulados no GANIL (amostras virgens e algumas bombardeadas), LNLS e PUC-Rio, os valores das espessuras foram obtidos em suas próprias referências, quando já publicados na literatura. Por outro lado, as espessuras dos gelos, cujos dados ainda não foram publicados (GANIL - alguns gelos bombardeados e LASA), foram calculadas pela equação encontrada em Pilling, et al., (2011), Bergantini, et al., (2014), Rocha, et al., (2014):

$$d = \left[ \frac{N}{\rho} \left( \frac{\mathcal{M}}{\mathcal{N}_A} \right) \right] 10^4 \quad [\mu\text{m}] \quad (17)$$

onde  $N$  é a densidade colunar ( $\text{cm}^{-2}$ ),  $\rho$  a densidade específica ( $\text{g}/\text{cm}^3$ ),  $\mathcal{M}$  a massa molar ( $\text{g}/\text{mol}$ ) e  $\mathcal{N}_A$  a constante de Avogrado. A densidade colunar foi calculada por:

$$N = \frac{2,3}{A} \int Abs_\nu d\nu, \quad [\text{cm}^{-2}] \quad (18)$$

onde  $A$  é a força da banda disponível na literatura para diferentes moléculas, dada em  $\text{cm}/\text{moléculas}$ .

Os termos definidos por  $\mathbf{t}$  e  $\mathbf{r}$  na Figura 18 e Equação 15 são os coeficientes de Fresnel (adimensionais), que representam os coeficientes complexos de reflexão e transmissão. Para uma incidência normal, eles são dados por (Bergren, et al., 1978; Hudgins, et al., 1993):

$$\mathbf{t}_{pq} = \frac{2\mathbf{m}_p}{\mathbf{m}_p + \mathbf{m}_q} \quad (19)$$

$$\mathbf{r}_{pq} = \frac{\mathbf{m}_p - \mathbf{m}_q}{\mathbf{m}_p + \mathbf{m}_q} \quad (20)$$

onde  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{q}$  representam as diferentes regiões na amostra (Ex.: vácuo, filme, substrato) e a notação  $\mathbf{pq}$  indica a interface entre as regiões dadas. Relembrando a equação de absorvância

dada por  $Abs = -\log I_0/I$  (Ver Equação 13) e empregando-a na Equação 15, o coeficiente de absorção de Lambert (Equação 16), pode ser reescrito como:

$$\alpha = \frac{1}{d} \left[ 2,3 \cdot Abs_{\nu} + \ln \left| \frac{t_{01}t_{12}/t_{02}}{1 + r_{01}r_{12}e^{2ix}} \right|^2 \right], \quad [\text{cm}^{-1}] \quad (21)$$

onde a espessura  $d$  da Equação 17 foi dividida por  $10^4$  para ser dado em centímetros (cm).

De acordo com as equações, se o valor do coeficiente de absorção de Lambert, dado pela Equação 21, é conhecido, pode-se calcular a parte imaginária do índice de refração complexo ao substituir o valor de  $\alpha$  na Equação 16. Uma vez que o valor de  $k$  foi calculado, a relação de Kramers-Kronig é aplicada para determinar o valor da parte real do índice de refração complexo  $n$ . Os valores de  $n$  e  $k$  estão, portanto, relacionados pela seguinte equação (Hudgins, et al., 1993):

$$n(\nu) = n_0 + \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_{\nu_1}^{\nu_2} \frac{\nu' k(\nu')}{\nu'^2 - \nu^2} d\nu' \quad (22)$$

onde  $n_0$  é o índice de refração do gelo calculado em 670 nm que está disponível na literatura (Hudgins, et al., 1993),  $\nu'$  é o número de onda sobre o qual varia o valor de  $k$ ,  $\nu$  o número de onda central referente ao pico da banda de absorção e  $\mathcal{P}$  o Valor Principal de Cauchy (Landau, et al., 1984), que é necessário para evitar a singularidade no cálculo quando  $\nu'$  é igual a  $\nu$ .

Para comprimentos de onda muito energéticos como ultravioleta extremo e raios-X, o índice de refração complexo apresenta uma forma ligeiramente diferente. Mais detalhes podem ser encontrados em (Attwood, 1999).

A metodologia computacional empregada no código NKABS tem como objetivo criar um espectro teórico (sintético) de transmitância baseado nas equações dadas anteriormente e comparar com o espectro de transmitância medido em laboratório. No entanto, como nossas medidas experimentais são de dados de absorbância, elas são convertidas em transmitância experimental pela equação:

$$T_{exp,\nu} = 10^{-Abs_{\nu}} \quad (23)$$

onde  $Abs_{\nu}$  são os valores de absorvância medidos em laboratório em cada  $\nu$ .

Uma vez que o valor do índice de refração complexo é capaz de fornecer um espectro de transmitância teórico compatível com o experimental (Equação 23), então os valores de  $n$  e  $k$  são verdadeiros para aquele material. A comparação dos espectros é feita utilizando o parâmetro MAPE, dado pela seguinte equação:

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{T_{exp,i} - T_{teo,i}}{T_{teo,i}} \right| \quad (24)$$

onde  $n$  é o número de pontos,  $T_{exp}$  é a transmitância experimental diretamente dos dados de absorvância obtidos em laboratório e  $T_{teo}$  é a transmitância teórica, calculada pela Equação 15.

Portanto, o código NKABS utiliza como parâmetros de entrada o (i) índice de refração do gelo calculado em 670 nm -  $n_0$ , disponível em (Hudgins, et al., 1993), (ii) a espessura do gelo simulado em laboratório -  $d$ , (iii) o índice de refração do substrato<sup>6</sup> em 670 nm -  $n_2$ , (iv) o espectro de absorvância obtido em laboratório e (v) o erro de corte -  $E$  (escolhido pelo usuário), que será constantemente comparado com o valor do MAPE, dado pela Equação 24.

A Figura 19a e Figura 19b apresenta, respectivamente, uma ilustração e um fluxograma do procedimento computacional executado pelo código NKABS. A ilustração apresentada na Figura 19a mostra que o dado de absorvância é usado para calcular a parte real e imaginária do índice de refração complexo, bem como para calcular o espectro de transmitância teórica, que será constantemente comparado com a transmitância sintética. A Figura 19b, por outro lado apresenta mais detalhes do procedimento computacional. Uma vez que os parâmetros de

---

<sup>6</sup> <http://refractiveindex.info/>

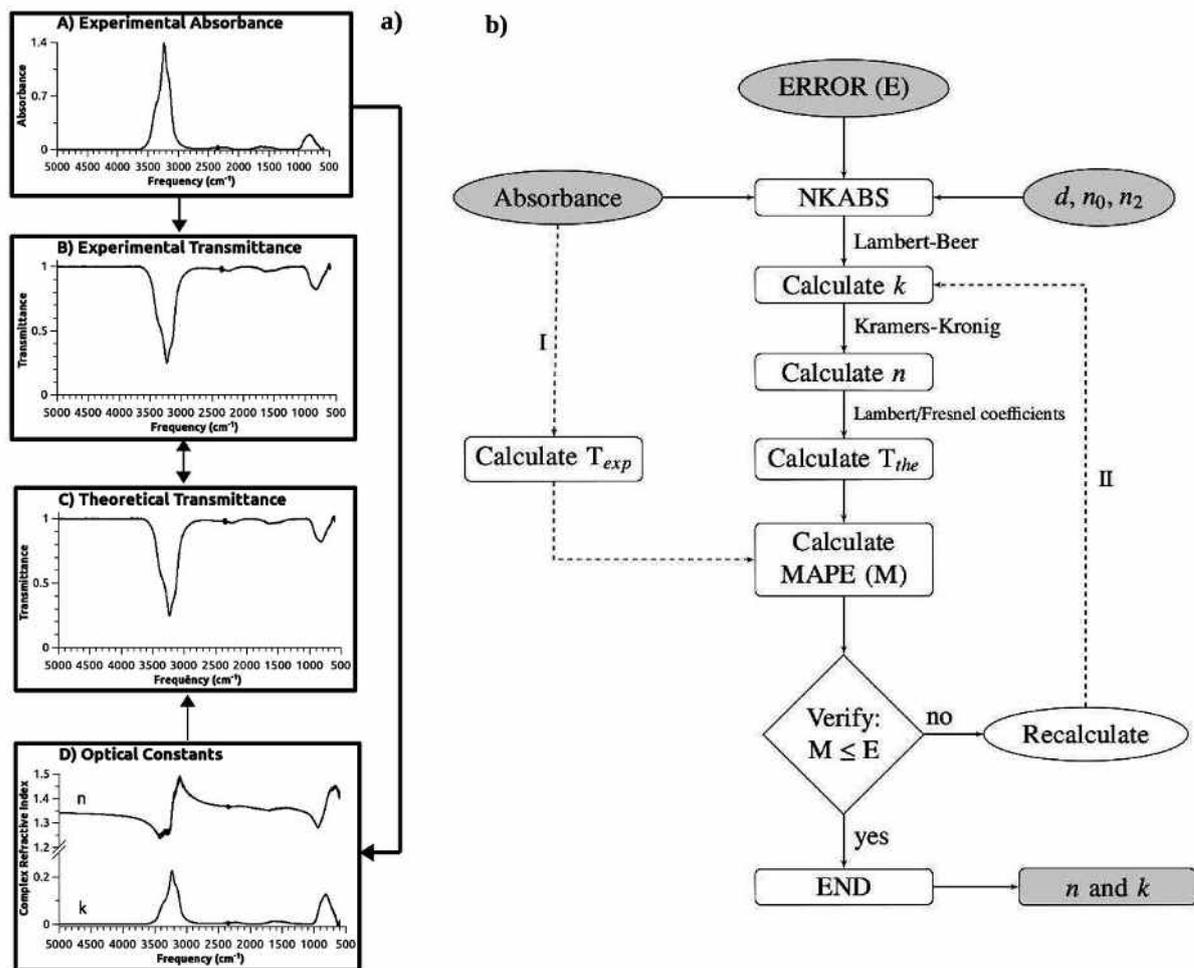


Figura 19: Ilustração (a) e fluxograma (b) mostrando o procedimento computacional do código NKABS. (a) No bloco A é mostrado o dado de absorvância do gelo de água cristalino a 165 K. Os blocos B e C mostram as transmitâncias teórica e experimental, respectivamente. Em D, estão mostradas o  $n$  e  $k$  para o gelo de água cristalino. As setas indicam os caminhos executados pelo código para o cálculo das constantes ópticas. (b) Fluxograma do código NKABS. Os parâmetros de entrada são dados de absorvância,  $d$ ,  $n_0$ ,  $n_2$  e erro. Quando os parâmetros são informados, o código inicia o procedimento para obter as constantes ópticas, usando a lei de Lambert-Beer, relações de Kramers-Kronig e também os coeficientes de Fresnel e Lambert. O código compara o erro calculado com o escolhido como corte e decide se recalcula as constantes ópticas ou pára. Ao final do procedimento, a parte real e complexa do índice de refração são fornecidas. Fonte: Rocha & Pilling (2014).

entrada são informados ao código NKABS, a parte imaginária  $k$  do índice de refração  $\mathbf{m}$  é calculado usando as Equações 21 e 16. Na primeira iteração, os coeficientes de Fresnel (Equações 19 e 20) são assumidos ser igual a 1 e 0, uma vez que  $\mathbf{m}_p$  e  $\mathbf{m}_q$  são iguais a  $n_0$ . No passo seguinte, o código calcula numericamente a parte real  $n$  usando a Equação 22. Para resolver a integral da Equação 22, foi empregado o método de McLaurin, descrito em Ohta, et

al., (1988). O cálculo, portanto, é feito discretizando os valores de  $k$  em  $m$  valores tomados em  $m$  frequências  $\nu_j$  com intervalos iguais:

$$\nu_1, \nu_2, \nu_3, \dots, \nu_j, \dots, \nu_{m-1}, \nu_m; \quad (25)$$

$$k_1, k_2, k_3, \dots, k_j, \dots, k_{m-1}, k_m, \quad (26)$$

onde os intervalos  $h$  são definidos por:

$$h = \nu_{j+1} - \nu_j \quad (j = 1, 2, 3, \dots, m - 1) \quad (27)$$

Numericamente, a Equação 22 é reescrita como segue:

$$I_i = n_0 + \frac{2}{\pi} \times 2h \times \left[ \sum_{j=1}^{m-1} f_j \right] \quad (28)$$

onde

$$f_j = \frac{\nu_j k_j}{\nu_j^2 - \nu_i^2} = \frac{1}{2} \left[ \frac{k_j}{\nu_j - \nu_i} + \frac{k_j}{\nu_j + \nu_i} \right] \quad (29)$$

A Equação 30 é calculada evitando a singularidade quando  $j = i$ . Para isto, quando  $i$  é ímpar,

$$j = 2, 4, 6, \dots, i - 1, i + 1, \dots \quad (30)$$

e quando  $i$  é par,

$$j = 1, 3, 5, \dots, i - 1, i + 1, \dots \quad (31)$$

A vantagem deste procedimento é a redução do custo computacional e o aumento da acurácia para o cálculo das constantes ópticas. Isso ocorre porque não há nenhum tratamento especial em torno da singularidade. Para comparação, nós executamos o mesmo

procedimento, mas aplicando a regra de integração dos trapézios para o cálculo da Equação 28, como apresentado em (Ohta, et al., 1988). Porém o tempo computacional aumentou em quatro vezes e a acurácia caiu pela metade (cálculo feito para a molécula de CO<sub>2</sub>).

Ao final da primeira iteração, se o MAPE calculado pelo NKABS é maior que o valor de corte inserido pelo usuário, o código refaz o procedimento a partir do cálculo de  $k$ , como indicado pela seta II, porém com os fatores de correção  $t_{pq}$  e  $r_{pq}$ . Estas correções são necessárias, porque os coeficientes de Fresnel são dados em função de  $m$ , como mostrado nas Equações 19 e 20. Este ciclo é repetido até que o MAPE calculado seja menor que o erro de corte. Ao final do procedimento computacional, os parâmetros de saída são: (i) os valores de  $n$  e  $k$ , (ii) um arquivo de resultados contendo os valores de MAPE,  $\chi^2$  e tempo de cálculo, (iii) os coeficientes de Fresnel e (iv) as transmitâncias teórica e experimental. Note, no entanto, que embora o parâmetro estatístico  $\chi^2$  também é calculado pelo NKABS.

O tempo de cálculo do código NKABS depende principalmente, da resolução dos dados de absorvância. No entanto, o cálculo para uma mistura de H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub> (1:1), com resolução de 1 cm<sup>-1</sup> e 18254 linhas, demorou cerca 1039 segundos para atingir 1,7 × 10<sup>-4</sup> %. O procedimento foi feito com um processador *intel core i5*<sup>®</sup>, com frequência de 3,2 GHz.

Para avaliar a funcionalidade do código NKABS com outras metodologias, foi calculado o índice de refração complexo do CO<sub>2</sub> a partir de dados de absorvância disponíveis nos trabalhos de (Hudgins, et al., 1993) e (Ehrenfreund, et al., 1996). A Figura 20 mostra os valores de  $n$  e  $k$  obtidos com diferentes metodologias, em comparação com os valores calculados pelo código NKABS. O resíduo, definido pela subtração entre o valor da literatura e o calculado pelo código NKABS é também mostrado. A diferença entre o valor calculado com o código NKABS e da literatura são em torno de 0,8 % para  $n$  e 0,9 % para  $k$ .

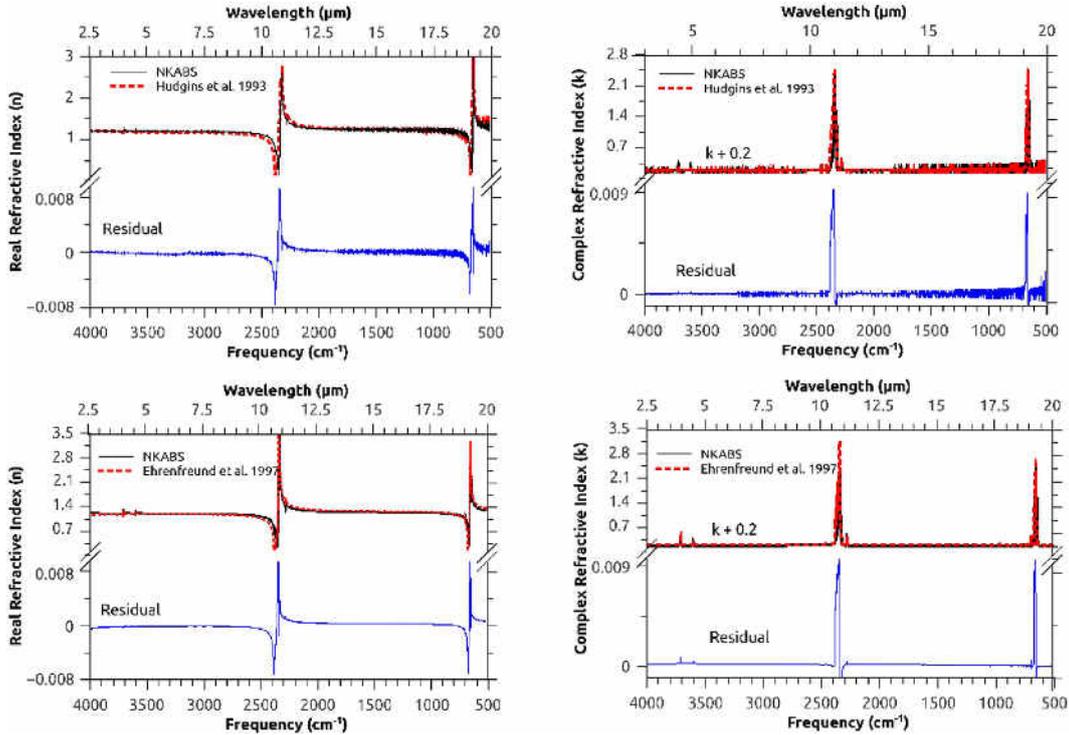


Figura 20: Comparação entre os valores das constantes ópticas calculadas com o código NKABS e valores da literatura para um gelo de  $\text{CO}_2$ . Os dados de absorvância foram extraídos de Hudgins, et al., (1993) e Ehrenfreund, et al., (1996). Os valores calculados com o código NKABS estão representados pela linha contínua preta e os valores da literatura como linhas tracejadas vermelhas. O resíduo é mostrado pela linha contínua azul. Fonte: Rocha & Pilling (2014).

### 2.3.2 Cálculo das opacidades dos gelos e transferência radiativa usando o código RADMC-3D

Na sequência de passos que pertencem à metodologia computacional mostrado na Figura 12, após o cálculo do índice de refração complexo, seriam calculadas as opacidades dos gelos astrofísicos mostrados na Tabela 4 e 5. Este procedimento, portanto, foi executado usando a rotina *makeopac* do código RADMC-3D. A opacidade em função do comprimento de onda (ou da frequência -  $\kappa_\nu$ ) é dada pela razão entre as seções de choque ( $\sigma_\nu$ ) de absorção ou espalhamento e a massa da espécie considerada ( $m$ ), como mostrado na seguinte equação:

$$\kappa_\nu = \frac{\sigma_\nu}{m} \quad [\text{cm}^2/\text{g}] \quad (32)$$

### 2.3.2.1 Opacidade de absorção e espalhamento da radiação em meios com poeira

Para determinar os valores de opacidade dos gelos virgens e processados neste trabalho, aplicaremos a teoria de Mie (Mie, 1908), que obteve soluções das equações do transporte radiativo em meios com partículas de poeira esféricas com propriedades dielétricas. Uma descrição completa da teoria de Mie pode ser encontrada em (Mie, 1908) e em (Bohren, et al., 1998). No entanto, comentando brevemente sobre a teoria, o problema consiste em determinar a fração de radiação eletromagnética que é absorvida e espalhada quando há interação com um grão de determinado raio e composição. A solução consiste em expandir a radiação absorvida e espalhada, ou seja, extinta, em harmônicos esféricos. Os coeficientes da expansão são  $a_n$  e  $b_n$ , que são função do tipo de material, isto é, do índice de refração complexo  $\mathbf{m}$  (Ver Equação 14) e da razão entre o raio do material e o comprimento de onda  $\lambda$ , dado pela equação  $x = 2\pi a/\lambda$ . Dessa forma, os coeficiente  $a_n$  e  $b_n$  podem ser dados como segue:

$$a_n = \frac{m\psi_n(\mathbf{m}x)\psi'_n(x) - \psi_n(x)\psi'_n(\mathbf{m}x)}{\mathbf{m}\psi_n(\mathbf{m}x)\xi'_n(x) - \xi_n(x)\psi'_n(\mathbf{m}x)} \quad (32)$$

$$b_n = \frac{\psi_n(\mathbf{m}x)\psi'_n(x) - \mathbf{m}\psi_n(x)\psi'_n(\mathbf{m}x)}{\psi_n(\mathbf{m}x)\xi'_n(x) - \mathbf{m}\xi_n(x)\psi'_n(\mathbf{m}x)} \quad (34)$$

onde  $\psi_n$  e  $\xi_n$  são as funções de Riccati-Bessel (Bohren, et al., 1998).

Uma vez determinados os valores dos coeficientes  $a_n$  e  $b_n$  as seções de choque de espalhamento, extinção e absorção da Equação 32 podem ser calculados conforme as seguintes equações

$$\sigma_{esp} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) [|a_n|^2 + |b_n|^2] \quad (35)$$

$$\sigma_{ext} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n) \quad (36)$$

$$\sigma_{abs} = \sigma_{ext} - \sigma_{esp} \quad (37)$$

Desde que os parâmetros de seção de choque e opacidade foram determinados, a próxima grandeza física de interesse nesse trabalho é o albedo  $\gamma$ , que dá a fração da radiação espalhada em relação a radiação extinta, cuja equação é dada por:

$$\gamma = \frac{k_{esp,\nu}}{k_{ext,\nu}} \quad (38)$$

### 2.3.2.2 Teoria MRN

As opacidades dos materiais são dadas em função da teoria de Mie, que por sua vez depende do tamanho do grão considerado. Entretanto, é possível obter as opacidades supondo uma distribuição de tamanhos de grãos, numa metodologia conhecida como distribuição MRN (Mathis, et al., 1977). Nessa teoria, assume-se que o tamanho das espécies variam de tamanhos pequenos  $a_{min}$  até dimensões maiores  $a_{max}$  regidos pela seguinte lei de potência:  $dN(a)/da \propto a^{-3/5}$ . Esse tipo de distribuição já se mostrou eficiente em reproduzir as curvas de extinção do meio interestelar (Draine, et al., 1984; Weingartner, et al., 2001; Clayton, et al., 2003). Além disso, conforme o trabalho de (Weingartner, et al., 2001) os grãos de poeira no meio interestelar são compostos por silicato e carbono amorfo, cujo tamanho pode varia entre 0,005 - 0,25  $\mu\text{m}$ . No entanto, em nuvens moleculares há evidências observacionais da presença de grãos cujo tamanho é da ordem de 1  $\mu\text{m}$  (Steinacker, et al., 2010) ou maior (Miotello, et al., 2014).

Neste trabalho, as opacidades dos gelos foram calculadas de duas formas, sendo uma maneira assumindo uma distribuição MRN e a outra apenas um tamanho fixo dos grãos. As amostras para as quais foram consideradas distribuições MRN foram H<sub>2</sub>O (L1), CO<sub>2</sub> (G1), CO (G2), e H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub> (W1c), onde os códigos entre parênteses são as identificações dos gelos nas Tabelas 4 e 5. Para essas amostras o tamanho dos grãos de gelo variou entre 0,012 - 0,12  $\mu\text{m}$ , que representam a metade dos valores propostos em (Weingartner, et al., 2001). A distribuição MRN também foi empregada aos grãos de poeira (silicato + carbono), cujas variações foram três: (i) 0,005 - 0,25  $\mu\text{m}$ , (ii) 0,025 - 0,70  $\mu\text{m}$  e 0,25 - 1,0  $\mu\text{m}$ . O intervalo (i) satisfaz as justificativas apresentadas em (Weingartner, et al., 2001) o intervalo (ii) é baseado em observações feitas por (Beckford, et al., 2008) para Elias 29, e a terceira distribuição (iii), é justificada por (Steinacker, et al., 2010). Todas as três distribuições de tamanhos foram empregadas para verificar qual delas ajustava melhor o perfil de extinção induzido pela poeira na direção de Elias 29. É importante observar também, que os valores de  $n$  e  $k$  do índice de refração complexo para o gelo de CO, silicato e carbono foi obtido em endereços

eletrônicos<sup>7,8,9</sup>, uma vez que eles não foram medidos nos experimentos mencionados neste trabalho. Por outro lado, a distribuição MRN não foi aplicada aos gelos mostrados na Tabela 5, e, portanto, suas opacidades foram calculadas, considerando tamanhos fixos de  $a = 0,1 \mu\text{m}$ .

### 2.3.2.3 Código RADMC-3D

O código RADMC-3D foi usado para modelar calcular as opacidades de gelos astrofísicos à partir dos valores de índice de refração complexo e modelar o espectro e imagens no infravermelho da protoestrela de baixa massa Elias 29. O objetivo desse procedimento é reproduzir a evolução química dos gelos astrofísico na vizinhança de Elias 29 aplicando no código de transferência radiativa, dados de opacidades dos gelos bombardeados por raios cósmicos simulados em laboratório. Nessa seção, será feita uma breve apresentação de como funciona o código RADMC-3D aplicado à Elias 29. Os resultados desse procedimento poderão ser vistos no Capítulo 4.

Este código de transferência radiativa se baseia no método de Monte Carlo e foi desenvolvido pelo Prof. Dr. C. P. Dullemond, da Universidade de Heidelberg em colaboração com outros pesquisadores. Além disso, ele é um código aberto e pode ser encontrado no seguinte endereço eletrônico: <http://www.ita.uni-heidelberg.de/~dullemond/software/radmc-3d/>. Embora existam outros códigos computacionais que fazem cálculo de transferência radiativa, o RADMC-3D tem algumas vantagens para usuários iniciantes, porque possui um manual detalhado de todas as suas funções, bem como exemplos de aplicação direta em situações astrofísicas realistas. A estrutura do código está dividida em linguagem de programação FORTRAN e IDL/Python, sendo estes últimos, usados para criar parâmetros de entrada para os cálculos usando o FORTRAN, tais como perfil de densidade, divisão de grades espaciais entre outros, como também visualizar os espectros e imagens modeladas.

Durante a utilização do código, nós assumimos que o perfil de densidade de Elias 29 é axissimétrico (simetria em relação aos eixos), embora os fótons tenham liberdade de percorrer todas as três dimensões. Esta aproximação transforma o problema em 2-D, com coordenadas  $r$  e  $\theta$ , que é mais rápido computacionalmente. Durante as simulações os fótons são absorvidos e

<sup>7</sup> <http://www.strw.leidenuniv.nl/lab/databases/isodb/isodb.html>

<sup>8</sup> <http://www.astro.uni-jena.de/Laboratory/OCDB/data/silicate/amorph/olmg50.lnk>

<sup>9</sup> <http://www.astro.uni-jena.de/Laboratory/OCDB/data/carbon/ce1800.lnk>

espalhados isotropicamente (igualmente em todas as direções). O cálculo da temperatura da poeira (assumida ser igual à do gás) é feita utilizando o método de Monte Carlo, como descrito em (Bjorkman, et al., 2001). Sobre o cálculo da temperatura, o procedimento inicia quando a estrutura de densidade do modelo é dividido em grades, que podem ter espaços iguais ou variados. Neste trabalho foram usadas 60.000 grades de tamanhos iguais para o modelo da estrutura de Elias 29. Em seguida, o código divide a luminosidade total da fonte em pacotes de fótons, que serão emitidas um a um em direção à estrutura de grade. Depois que entram, os pacotes de fótons poderão (i) ser espalhados pela poeira e apenas mudar de direção, ou seja, não há troca de energia com os grãos, bem como (ii) ser absorvidos, e consequentemente reemitido em outra direção e em outro comprimento de onda. Dessa forma, cada pacote de fótons pode percorrer toda a estrutura da grade, aumentando sua temperatura, até que ele escapa pelas bordas dessa grade. Uma vez que ele escapa, um novo pacote de fótons é lançado até que também escapa. Após todos os pacotes de fótons terem sido lançados e escapados, a temperatura de cada célula da grade ao final do processo é assumida como a temperatura do sistema. O método de Monte Carlo, no entanto, pode ser ineficiente quando o sistema apresenta altas profundidades ópticas. Nesse caso, o uso de aproximações numéricas, como o *Modified Random Walk* pode ser usado pelo RADMC-3D, entretanto, essa técnica não foi necessária para a modelagem de Elias 29.

O cálculo da temperatura é uma etapa fundamental no código RADMC-3D, porque é através dele que são calculadas as distribuições espectrais de energia, bem como as imagens no infravermelho. Além disso, o resultado da distribuição de temperatura é de grande interesse astroquímico, porque permite inferir a posição dos gelos no ambiente circumestelar, uma vez que as espécies condensadas sublimam em temperaturas específicas.

## 2.4 Metodologia observacional

A fim de comparar os dados modelados de Elias 29 com o código de transferência radiativa RADMC-3D, foram obtidos dados observacionais, tais como distribuição espectral de energia e imagens no infravermelho próximo e médio.

### 2.4.1 Distribuição espectral de energia de Elias 29

O espectro de Elias 29 usado neste trabalho, foi obtido do catálogo público do telescópio ISO (*InfraRed Space Observatory*)<sup>10</sup>. Para obtenção dos dados, os instrumentos a bordo do ISO foram os espectrógrafos SWS (*Short Wavelength Spectrometer* - (de Graauw, et al., 1996)) entre 2,3 e 45  $\mu\text{m}$  e LWS (*Long Wavelength Spectrometer* - (Clegg, et al., 1996)) entre 45 e 190  $\mu\text{m}$ . O poder de resolução para os dois instrumentos são 400 e 200, respectivamente. O tempo de exposição usado por cada instrumento sobre os alvos foram 3454 s e 2611 s, respectivamente.

Os dados disponíveis no catálogo público tinham sido previamente reduzidos por pacotes automáticos como mostra Boogert, et al., 2000 e estavam pronto para uso. A Figura 21 mostra o espectro no infravermelho de Elias 29, obtido com o ISO (SWS e LWS), dominado por bandas de absorção devido ao silicato e gelos ao longo da linha de visada.

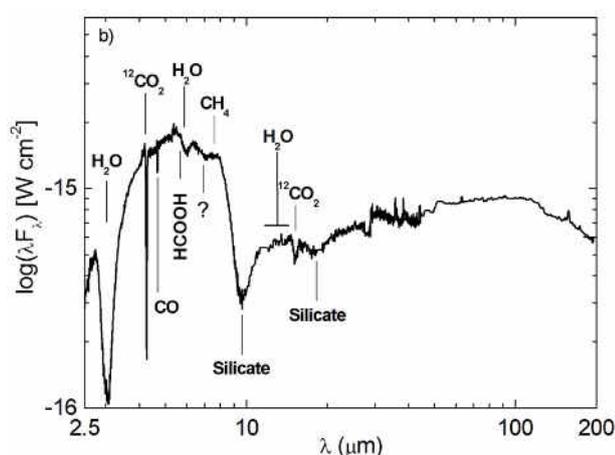


Figura 21: Espectro de Elias 29 obtido com o telescópio ISO (SWS + LWS). As fortes bandas de absorção devido aos gelos e silicatos são indicadas pelas respectivas moléculas. O símbolo de interrogação indica a banda em 6,85  $\mu\text{m}$  ( $1459,8 \text{ cm}^{-1}$ ) que permanece sem associação conclusiva. Fonte: Rocha & Pilling (2014).

### 2.4.2 Imagens no infravermelho

<sup>10</sup> iso.esac.esa.int/ida/

A comparação das imagens modeladas de Elias 29 na banda K foi feita em relação às imagens obtidas por Huélamo, et al., 2006, no campo de visão de  $1' \times 1'$  e  $1,5'' \times 1,5''$ , respectivamente, como mostra a Figura 22. Para obter essas imagens os autores usaram os dados do espectrógrafo ISAAC (*Infrared Spectrometer And Array Camera*), acoplado no VLT (*Very Large Telescope*), bem como polarimetria diferencial com o instrumento NAOS CONICA (NACO) e Óptica Adaptativa.

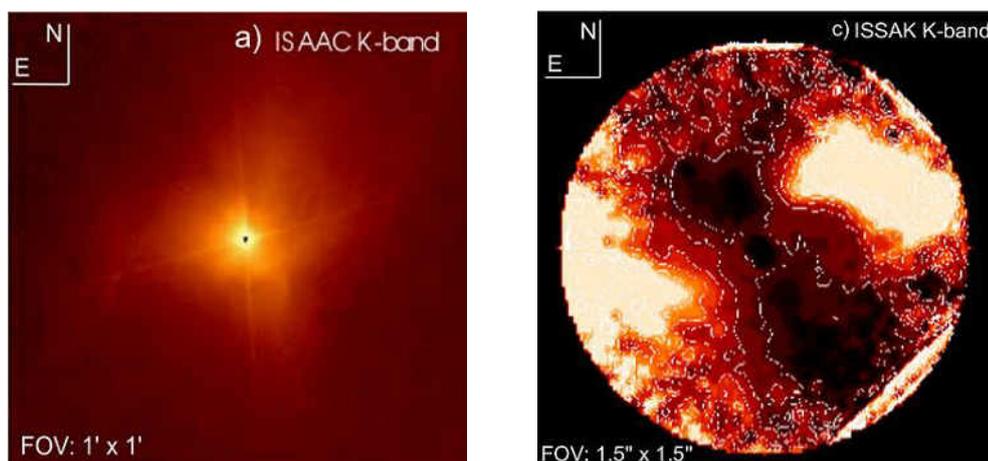


Figura 22: imagens no infravermelho próximo (banda K –  $2,16 \mu\text{m}$ ) de Elias 29 obtidas com o telescópio VLT e o espectrógrafo ISAAC. (a) Campo de visão de  $1' \times 1'$ . (b) campo de visão de  $1,5'' \times 1,5''$  mostrando a faixa escura devido a extinção da radiação causada pelo disco de poeira. Fonte: Huélamo, et al., (2006).

Para determinar o estágio evolucionário de Elias 29, foram usadas imagens de  $1' \times 1'$  da nuvem  $\rho$  Ophiuchi centrada em Elias 29 obtidas da base de dados da câmera IRAC<sup>11</sup>, que é um dos imageadores presentes no Telescópio Espacial Spitzer. Os comprimentos de onda centrais dos quatro filtros presentes são  $3,6 \mu\text{m}$ ,  $4,5 \mu\text{m}$ ,  $5,8 \mu\text{m}$  e  $8,0 \mu\text{m}$ ). Correções fotométricas e instrumentais foram feitas previamente, como mostrado em Fazio, et al., (2004) e Hora, et al., (2008). O procedimento de astrometria e fotometria de cada imagem foi feita por ajuste de PSF (*Point Spread Function*) usando o código Starfinder (Diolaiti, et al., 2000).

<sup>11</sup> <http://sha.ipac.caltech.edu>

# Capítulo 3

## PROPRIEDADES ÓPTICAS NO INFRAVERMELHO DOS GELOS VIRGENS E BOMBARDEADOS

---

*Neste capítulo serão apresentados os resultados desta tese acerca dos cálculos das propriedades ópticas de gelos virgens e bombardeados obtidos em laboratório. Serão também discutidas as suas implicações astrofísicas. Este capítulo está dividido em três grandes partes: índice de refração complexo de gelos virgens e gelos bombardeados; mudanças nas propriedades astrofísicas de gelos bombardeados e implicações de gelos bombardeados na modelagem computacional do espectro e imagens de protoestrelas de baixa massa.*

***“Science never solves a problem without creating ten more”***

**George B. Shaw**

### 3.1 Índice de refração complexo de gelos virgens

As constantes ópticas dos gelos virgens apresentados na Tabela 4 e calculadas usando o código NKABS estão mostradas nas Figuras 23 – 26. A Figura 23 mostra as constantes ópticas determinadas dos dados de absorvância de filmes finos produzidos pela condensação de gases puros (Ex. CO, CO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub>) sobre superfícies frias em vácuo. Na Figura 24 nós apresentamos os resultados para filmes finos produzidos de amostras sólidas ( $\alpha$ -Glycina (300K),  $\alpha$ -Glycina (14K),  $\beta$ -Glycina, DL-Prolina, DL-Valina, Adenina, Uracila). Na Figura 25 estão mostradas as constantes ópticas para filmes finos produzidos da sublimação de

líquidos puros ( $\text{H}_2\text{O}$  amorfo,  $\text{H}_2\text{O}$  cristalino,  $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$ ,  $\text{CH}_3\text{CN}$ ,  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ,  $\text{HCOOH}$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $c\text{-C}_6\text{H}_{12}$ ) em vácuo. As constantes ópticas de filmes finos produzido de misturas ( $\text{N}_2:\text{CH}_4$  (19:1),  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  (10:1),  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  (1:1),  $\text{H}_2\text{O}:\text{HCOOH}$ (1:1),  $\text{H}_2\text{O}:\text{NH}_3:\text{CO}$  (1:0.5:0.4),  $\text{H}_2\text{O}:\text{NH}_3:c\text{-C}_6\text{H}_{12}$  (1:0.3:0.7),  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2:\text{NH}_3:\text{CH}_4$  (9:1:1:1),  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2:\text{NH}_3:\text{SO}_2$  (10:1:1:1)) estão apresentadas na Figura 26.

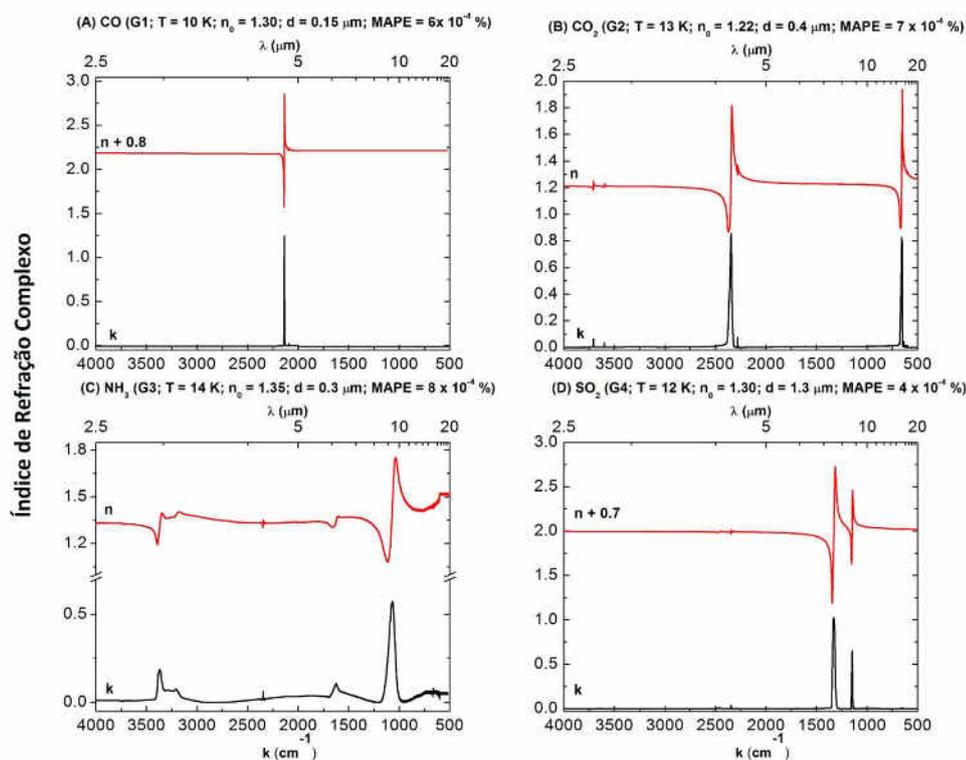


Figura 23: Parte real e imaginária  $n$  e  $k$ , do índice de refração complexo de geos formados a partir da condensação de gases puros de (a)  $\text{CO}$ , (b)  $\text{CO}_2$ , (c)  $\text{NH}_3$  e (d)  $\text{SO}_2$ . A temperatura dos geos nos experimentos, bem como os valores de  $n_0$  e do MAPE obtido com o código NKABS são mostrados em cada painel. Fonte: Rocha & Pilling (2014).

Como mostrado no Capítulo 2, os índices de refração complexos de geos astrofísicos são grandezas físicas importantes da matéria porque contêm informações de suas propriedades físico-químicas. Além disso, são essenciais na aplicação em modelos teóricos de transferência radiativa e cálculo de propriedades físico-químicas de interesse astroquímico (Hudson, et al., 2014; Giuliano, et al., 2014). É importante mencionar também que os dados de índice de refração complexo de geos virgens apresentados neste trabalho complementam vários outros dados disponíveis em alguns endereços eletrônicos<sup>12 13 14</sup>. Além disso, os dados tabelados das

<sup>12</sup> <https://www.strw.leidenuniv.nl/lab/databases/isodb/isodb.html>

<sup>13</sup> <http://www.astrochem.org/db.php>

<sup>14</sup> <http://home.strw.leidenuniv.nl/~linnartz/leiden-ice-database.html>

Figuras 23 – 26 estão disponíveis no endereço eletrônico do laboratório LASA<sup>15</sup>, bem como o código NKABS usado para calcular os índices de refração.

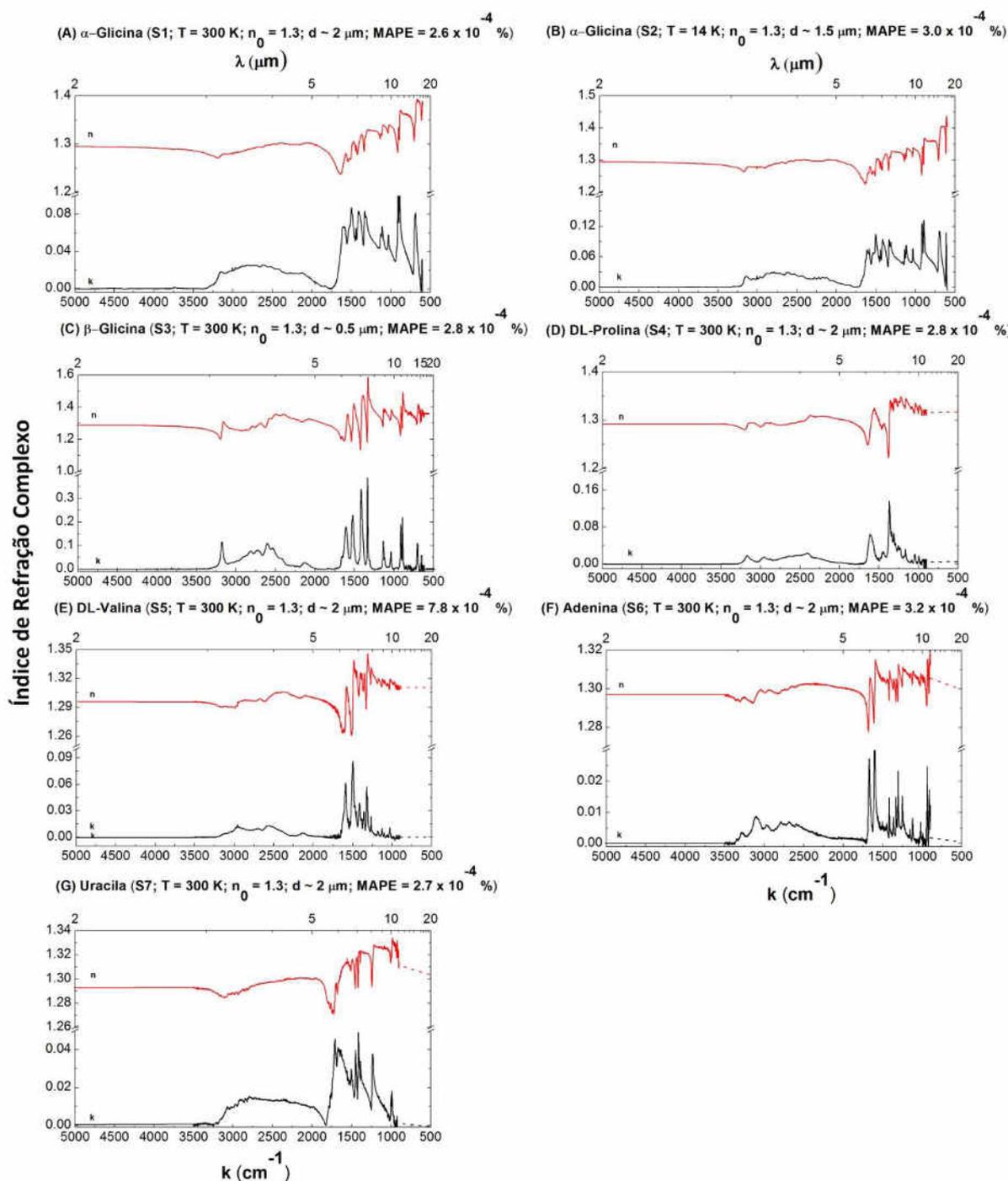


Figura 24: Parte real e imaginária  $n$  e  $k$ , do índice de refração complexo de geos formados a partir da sublimação e depois condensação das seguintes amostras sólidas (a)  $\alpha$ -glicina (300 K), (b)  $\alpha$ -glicina (14 K), (c)  $\beta$ -glicina, (d) DL-prolina, (e) DL-valina, (f) adenina e (g) uracila. A temperatura dos geos nos experimentos, bem como os valores de  $n_0$  e do MAPE obtido com o código NKABS são mostrados em cada painel. Fonte: Rocha & Pilling (2014).

<sup>15</sup> <http://www1.univap.br/gaa/nkabs-database/data.htm>

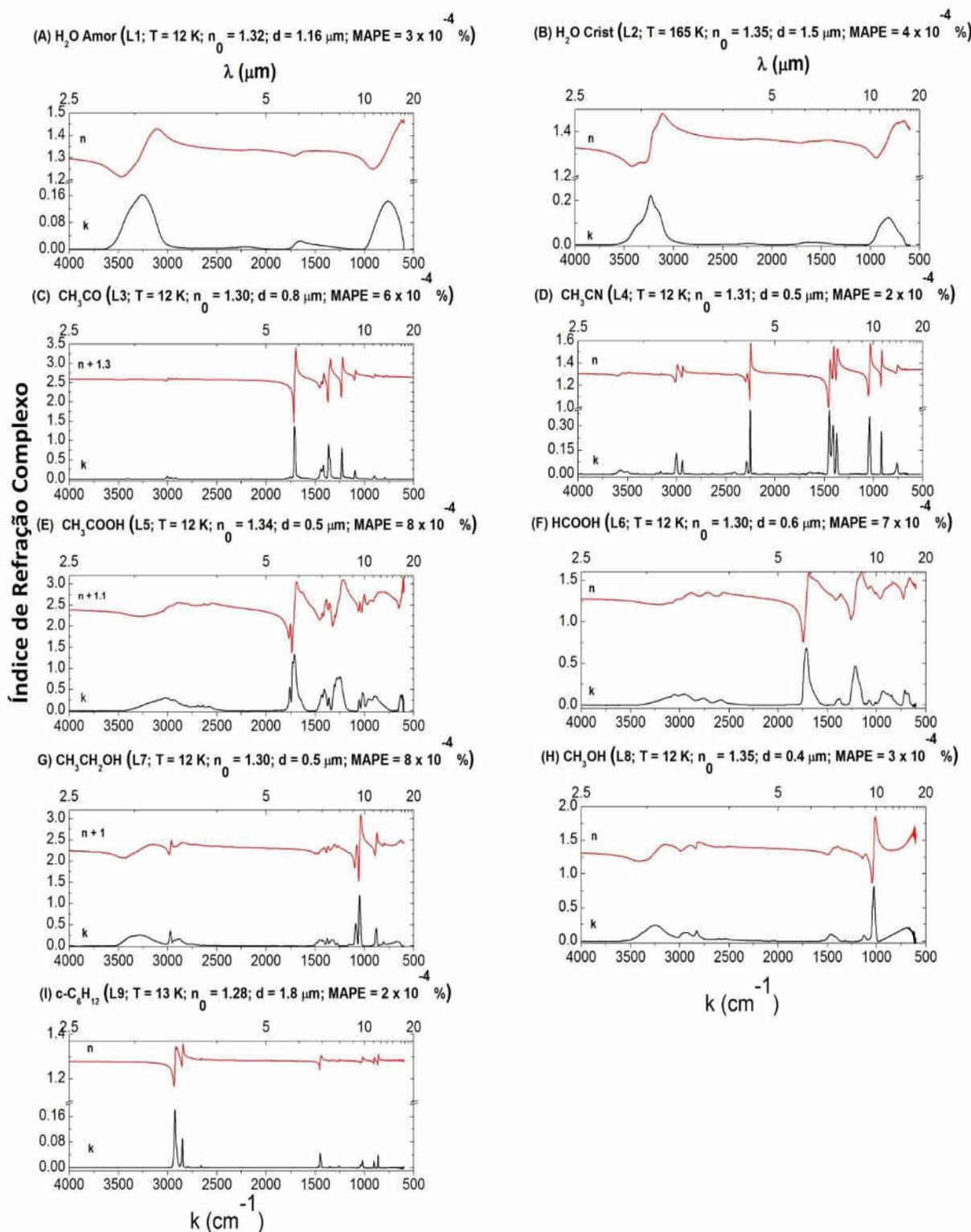


Figura 25: Parte real e imaginária  $n$  e  $k$ , do índice de refração complexo de geos formados a partir da sublimação e depois condensação do vapor das seguintes amostras líquidas: (a)  $\text{H}_2\text{O}$  amorfo, (b)  $\text{H}_2\text{O}$  cristalino, (c)  $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$  – acetona, (d)  $\text{CH}_3\text{CN}$  – acetonitrila, (e)  $\text{CH}_3\text{COOH}$  – ácido acético, (f)  $\text{HCOOH}$  – ácido fórmico, (g)  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$  – etanol, (h)  $\text{CH}_3\text{OH}$  – metanol, (i)  $\text{c-C}_6\text{H}_{12}$  – ciclo-exano. A temperatura dos geos nos experimentos, bem como os valores de  $n_0$  e do MAPE obtido com o código NKABS são mostrados em cada painel. Fonte: Rocha & Pilling (2014).

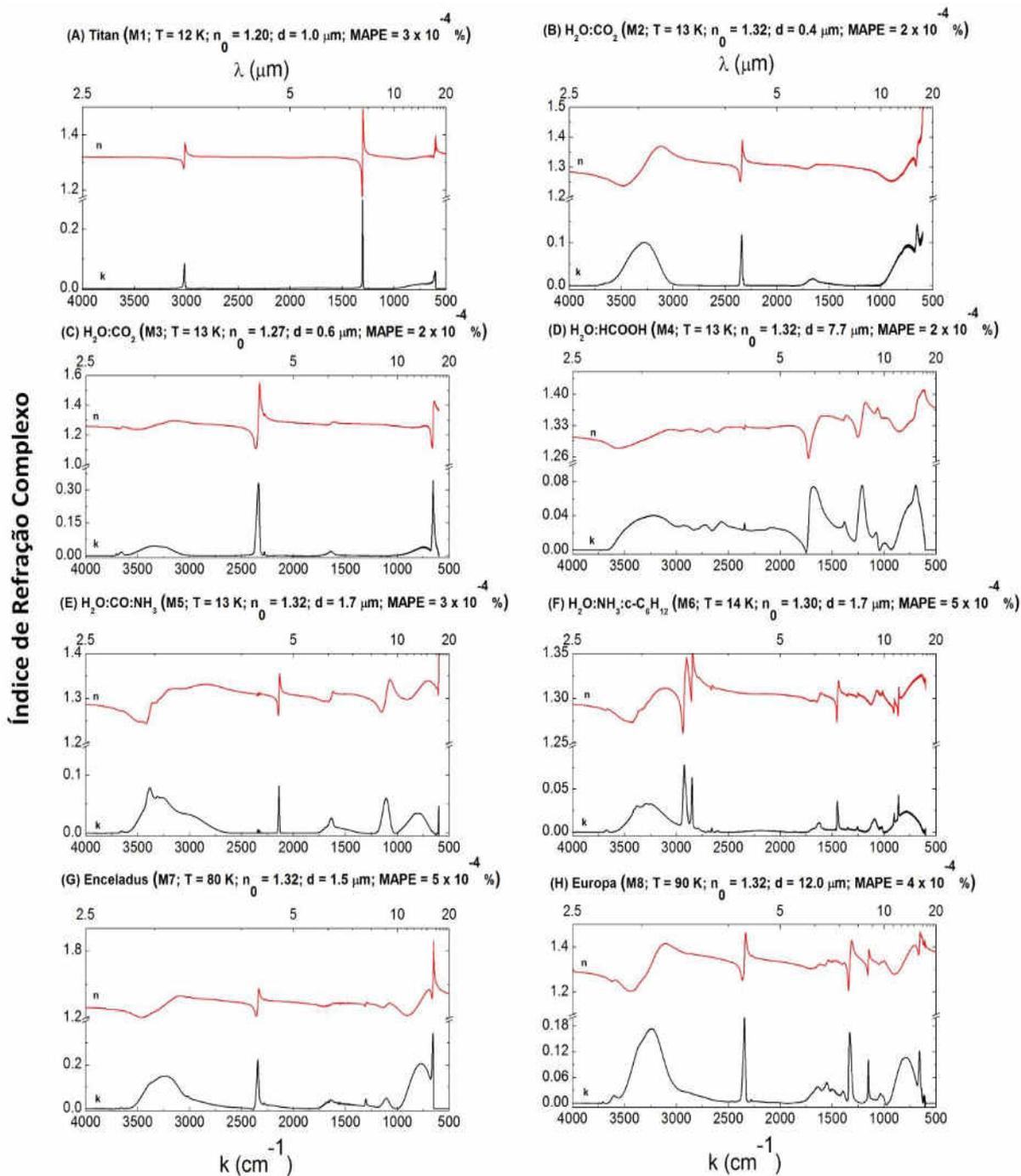


Figura 26: Parte real e imaginária  $n$  e  $k$ , do índice de refração complexo de geos formados a partir da sublimação e depois condensação do vapor de amostras líquidas e condensação de amostras gasosas para formar as seguintes misturas: (a)  $\text{N}_2:\text{CH}_4$  (19:1) – lua de Saturno - Titã, (b)  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  (10:1), (c)  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  (1:1), (d)  $\text{H}_2\text{O}:\text{HCOOH}$  (1:1), (e)  $\text{H}_2\text{O}:\text{NH}_3:\text{CO}$  (1:0,5:0,4), (f)  $\text{H}_2\text{O}:\text{NH}_3:\text{c-C}_6\text{H}_{12}$  (1:0,3:0,7), (g)  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2:\text{NH}_3:\text{CH}_4$  (10:1:1:1) – lua de Saturno - Enceladus, (h)  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2:\text{NH}_3:\text{SO}_2$  (10:1:1:1) – lua de Júpiter - Europa. A temperatura dos geos nos experimentos, bem como os valores de  $n_0$  e do MAPE obtido com o código NKABS são mostrados em cada painel. Fonte: Rocha & Pilling (2014).

Os valores mais representativos para meio interestelar dentre os índices de refração complexos dos gelos virgens (apresentados nas Figuras 23 – 26) são os dados de misturas, devido aos processos pelos quais os gelos são formados, como mostrado no Capítulo 1. Relembrando brevemente os conceitos sobre a formação dos gelos em ambientes astrofísicos, dados observacionais (Öberg, et al., 2008; Boogert, et al., 2008; Pontoppidan, et al., 2008) sugerem que a primeira onda de formação dos gelos ocorre devido a processos de hidrogenação de espécies adsorvidas na superfície do grão. Dessa forma é possível que seja formada inicialmente uma camada de gelo rico em  $H_2O$ . Porém, paralelo a esse processo, outras espécies simples como a molécula de  $CO$ , pode ser condensada no grão de poeira, levando a formação de gelos “sujos” como tem sido chamado o gelo astrofísico em diversos trabalhos (Ossenkopf, et al., 1994; Draine, et al., 1984; Weingartner, et al., 2001). Outras espécies podem também ser adsorvidas sobre o grão de poeira como o  $NH_3$  e  $CH_4$  que, potencialmente podem ser formados na fase pré-estelar, ou seja, na nuvem molecular antes do colapso gravitacional (Öberg, 2009; Öberg, et al., 2008; Öberg, et al., 2011).

Embora tenha sido mostrado no Capítulo 1 que os gelos podem ser processados pela radiação e/ou temperatura, os gelos virgens podem existir em regiões densas de nuvens moleculares e onde o campo de partículas energéticas é baixo o suficiente para não processar os gelos. Entretanto, o cenário mais comum para o meio interestelar é o de misturas de gelos processadas. Dessa forma, apresentamos na próxima seção algumas das misturas da Figura 26, porém bombardeadas por raios cósmicos simulados em laboratório.

## **3.2 Dados dos gelos bombardeados**

### **3.2.1 Índice de refração complexo**

O índice de refração de gelos bombardeados por raios cósmicos simulados em laboratório estão mostrados na Figura 27. Os valores de  $n_0$  e do MAPE para as três fluências estão mostrados na Tabela 6.

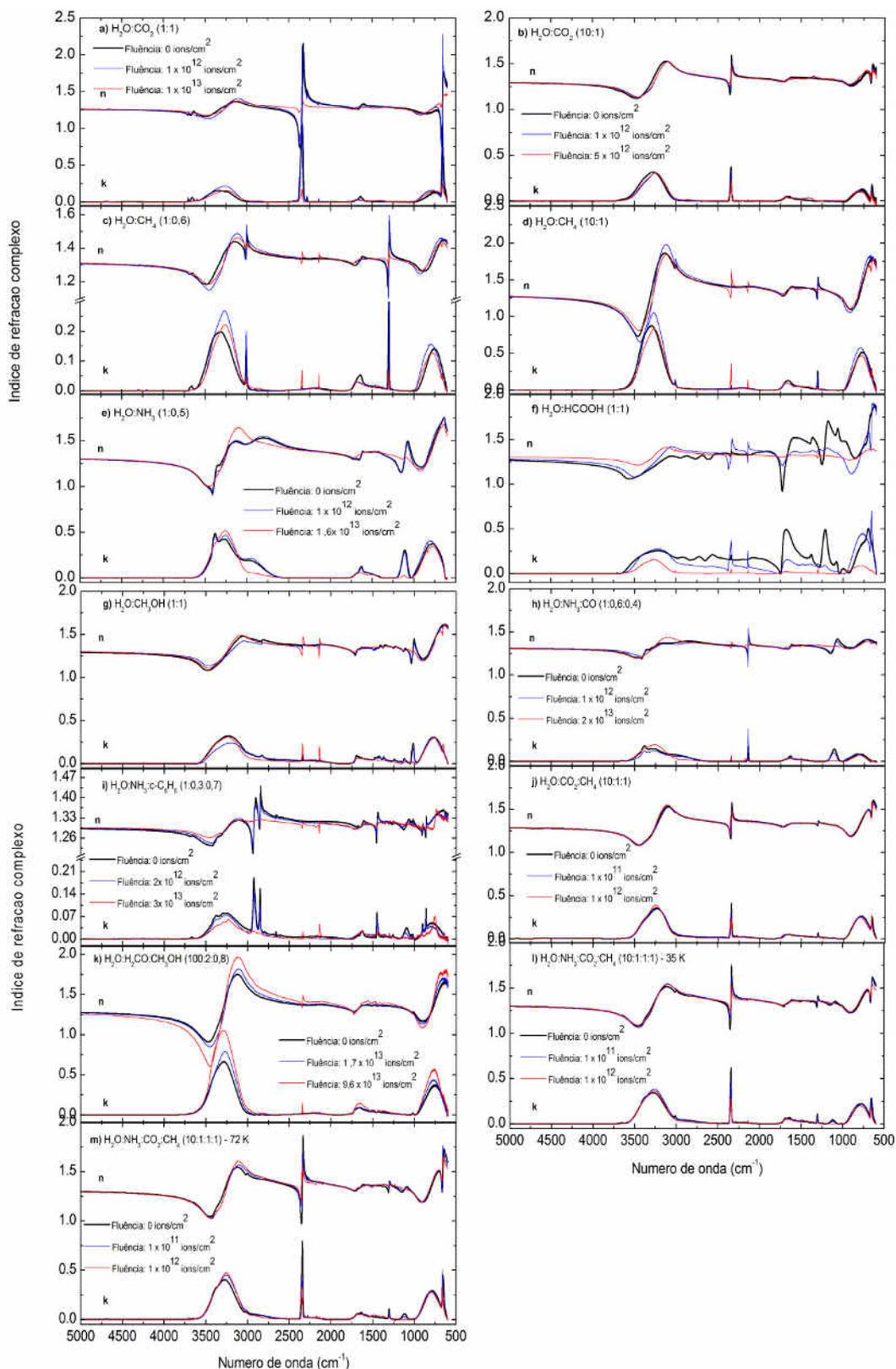


Figura 27: Parte real e imaginária  $n$  e  $k$ , do índice de refração complexo de gelos bombardeados por raios cósmicos simulados em laboratório. As fluências usadas nos experimentos estão indicadas nos painéis (onde não são dados valores considere igual ao painel “a”).

Tabela 6: Valores de  $n_0$  e MAPE calculado com o código NKABS para os gelos bombardeados listados na Tabela 5 (W1 a W13).

Parâmetros	W1	W2	W3	W4	W5	W6	W7	W8	W9	W10	W11	W12	W13
$n_0$	1,27	1,30	1,30	1,30	1,33	1,32	1,33	1,32	1,30	1,31	1,32	1,32	1,32
MAPE <sup>a</sup> ( $\times 10^{-4}$ %)	1,7	1,4	3,1	3,1	2,5	13,1	5,8	2,1	5,1	5,1	2,7	3,4	3,3
MAPE <sup>b</sup> ( $\times 10^{-4}$ %)	3,5	1,5	3,6	4,7	2,8	10,3	5,1	1,7	4,5	5,0	1,7	3,6	4,0
MAPE <sup>c</sup> ( $\times 10^{-4}$ %)	1,2	1,5	3,3	3,3	2,6	7,1	5,3	2,3	4,2	5,2	5,5	3,3	4,1

<sup>a</sup> Amostra virgem; <sup>b,c</sup> amostras irradiadas (conforme Tabela 5)

Os índices de refração complexos para amostras irradiadas são importantes para a astrofísica e astroquímica porque contêm informações sobre as propriedades físico-químicas dos gelos à diferentes fluências, ou seja, diferentes estágios de evolução. Para ilustrar a variação do índice de refração complexo de amostras irradiadas, consideremos, por exemplo, o valor de  $m$  tomado em  $3260 \text{ cm}^{-1}$  ( $3,1 \text{ }\mu\text{m}$ ) referente ao modo de estiramento O-H da molécula de  $\text{H}_2\text{O}$  em uma mistura com a molécula de  $\text{NH}_3$ , para as três fluências indicadas no painel “e” da Figura 27:

$$\mathbf{m}_1 = 1,35 + 0,42$$

$$\mathbf{m}_2 = 1,30 + 0,47$$

$$\mathbf{m}_3 = 1,35 + 0,52$$

As mudanças induzidas no índice de refração complexo mostrados acima são ocasionadas pelo bombardeamento de íons pesados, pelas mudanças de temperatura devido às colisões, como também às variações do ambiente químico que alteram a forma como as cargas dos gelos interagem. Dessa forma, as variações na estrutura do pico de  $\text{H}_2\text{O}$  numa mistura com  $\text{NH}_3$  pode explicar os perfis de absorção da água em protoestrelas de baixa e alta massa (Boogert, et al., 2008; Pontoppidan, et al., 2008).

Variações no índice de refração complexo dos gelos em diferentes comprimentos de onda podem também ser usadas para determinar a força da banda dos modos vibracionais no infravermelho das moléculas que compõe o gelo. A força da banda é um parâmetro fundamental para determinar a densidade de coluna, e conseqüentemente a abundâncias de espécies na fase sólida no meio interestelar. Alguns trabalhos experimentais tem se preocupado em determinar esse parâmetro, dada sua importância (Ver Öberg, (2009), Moore, et al., (2010), Giuliano, et al., (2014), Hudson, et al., (2014)). Contudo, os trabalhos têm

focado apenas na variação da força da banda em relação à proporção entre espécies moleculares no gelo. Porém, os índices de refração complexos dos gelos mostrados na Figura 27 podem ser usados para determinar a variação da força da banda com a fluência e consequentemente, em função do estágio evolutivo do gelo. Embora esse estudo não tenha sido feito nesta tese, trata-se de um objetivo a ser alcançado brevemente.

Neste trabalho, os índices de refração complexos foram usados para determinar alguns parâmetros de astronomia, como opacidade dos gelos e seus albedos na tentativa de encontrar tendências de comportamento quando as amostras são irradiadas.

### 3.2.2 Opacidades dos gelos bombardeados

As opacidades dos gelos bombardeados por raios cósmicos simulados em laboratório, foram calculadas pelo método descrito na Seção 2.3.2.1 e estão mostradas nas Figuras 28 a 31. Relembrando a metodologia, foi aplicada a teoria de Mie, que assume grãos com geometria esférica, e assumindo o raio de  $a = 0,1 \mu\text{m}$ . É importante mencionar que essas opacidades foram calculadas apenas para os gelos, e, portanto as influências de carbono amorfo e silicatos não estão presentes.

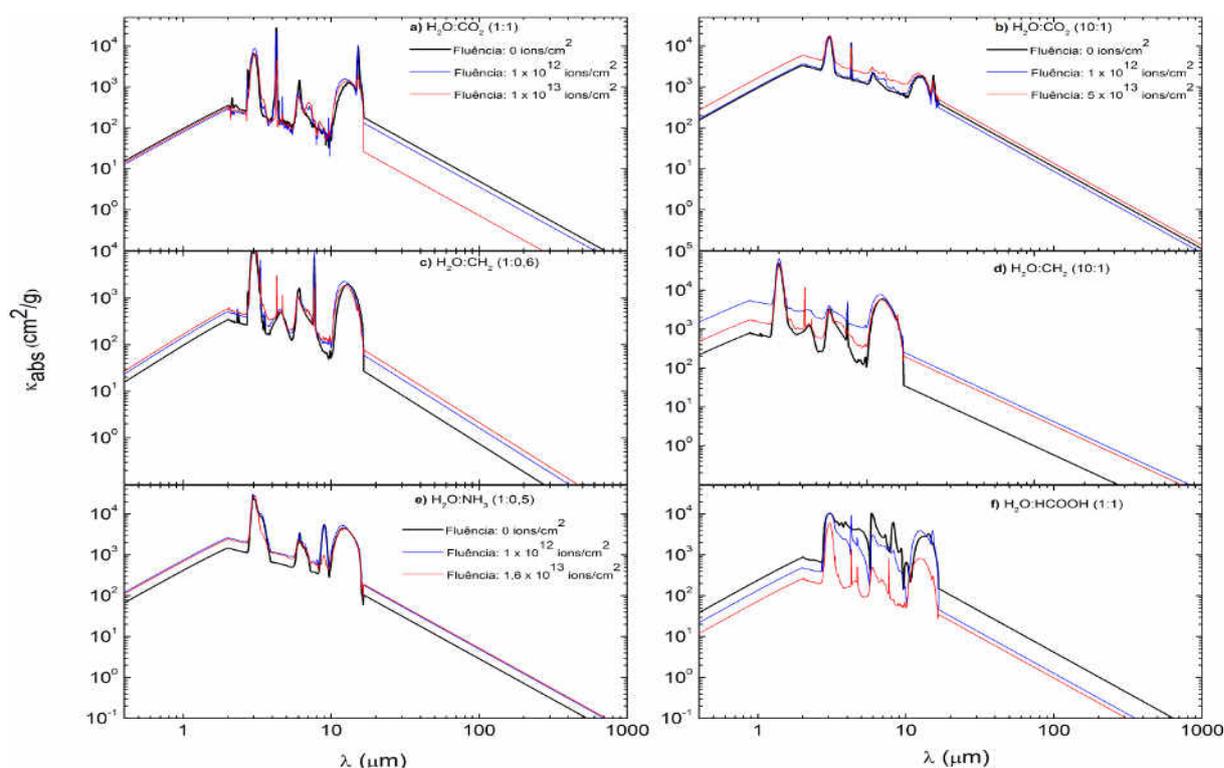


Figura 28: Opacidades de absorção de gelos astrofísicos bombardeados por raios cósmicos simulados em laboratório em três fluências diferentes.

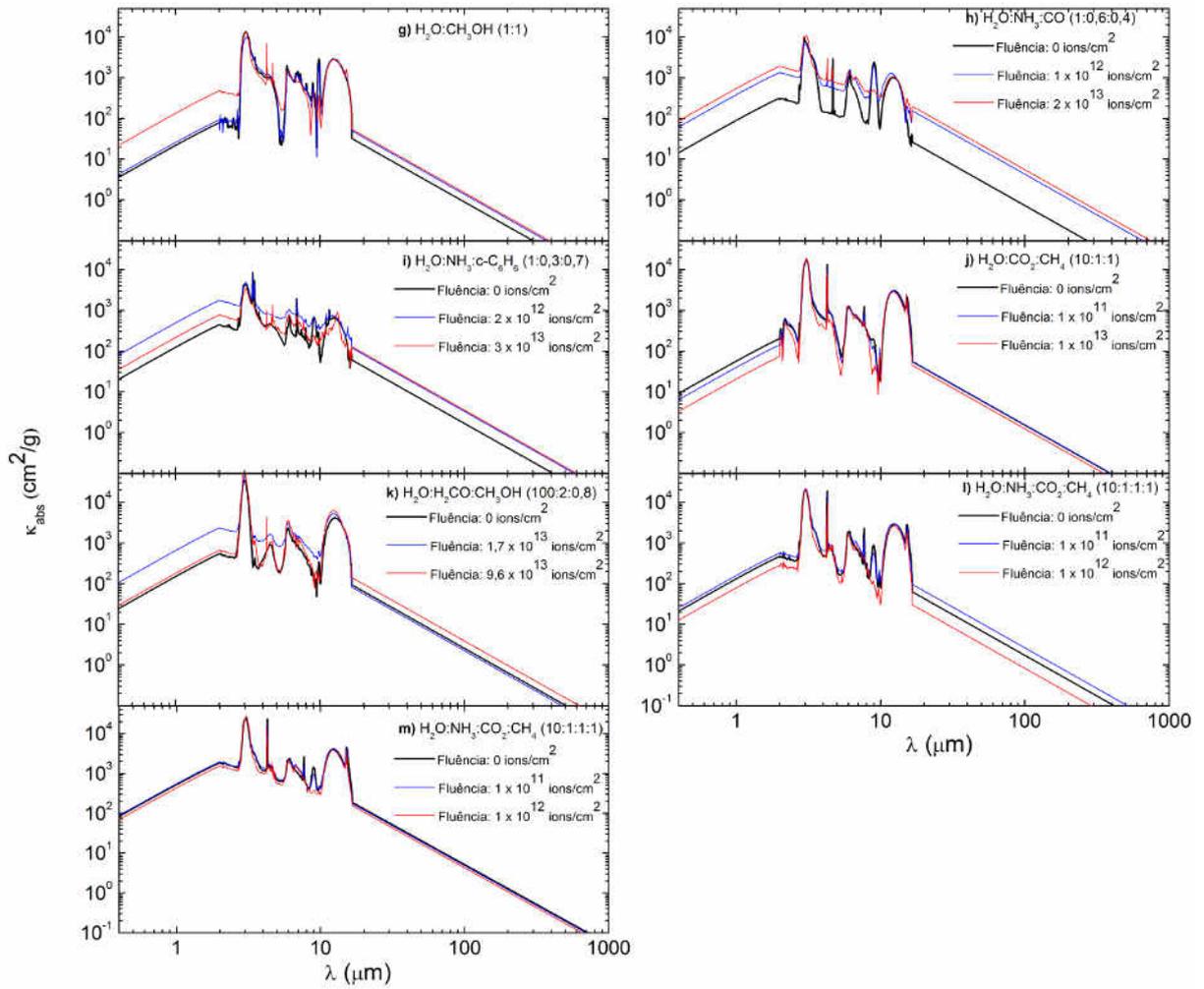


Figura 29: Continuação da Figura 28.

Para o cálculo das opacidades foi empregado o algoritmo numérico *makeopac.pro* do código RADMC-3D, que está em linguagem de programação IDL (*Interactive Data Language*). Esse código utiliza como parâmetros de entrada os índices de refração complexos dos gelos (ver Figura 27). Onde não existem dados disponíveis, o código faz extrapolações para comprimentos de onda menores e maiores em relação aos dados informados (neste trabalho 2,0 – 20  $\mu\text{m}$ ). Um resultado interessante é que a maioria dos dados apresentou um aumento na opacidade de absorção no visível e no sub-milimétrico. Para verificar se esse era um efeito do código RADMC-3D ou dos dados do índice de refração, procedemos da seguinte forma: (i) primeiro utilizamos o código BHMIE<sup>16</sup> para calcular as opacidades, os resultados foram os mesmos da rotina *makeopac.pro*; (ii) segundo, verificamos se era um problema

<sup>16</sup> <http://www.astro.princeton.edu/~draine/scattering.html>

associado ao ajuste de *baseline*<sup>17</sup> dos dados de absorbância obtidos em laboratório. Porém o comportamento foi o mesmo para os dois códigos aplicados. Dessa forma, isso pode indicar que um gelo processado energeticamente absorve mais radiação na região do infravermelho, do que um gelo virgem. Esse comportamento é investigado na Seção 3.3.3, usando como ferramenta o albedo dos gelos calculados a partir das opacidades de absorção e espalhamento. Além disso, mostramos na Seção 3.3.4 que o aumento na opacidade de absorção devido às extrapolações é irrelevante quando se consideram grãos de poeira misturados ao gelo (núcleo de poeira e manto de gelo), mesmo considerando um grão fictício de proporção 50 % de poeira e 50 % gelo.

As Figuras 30 e 31 apresentam as opacidades de espalhamento dos gelos bombardeados. É possível perceber que as variações devido ao processamento energético são irrelevantes, com exceção do painel f ( $\text{H}_2\text{O}:\text{HCOOH}$ ) que apresentou um comportamento diferente em todos os parâmetros calculados.

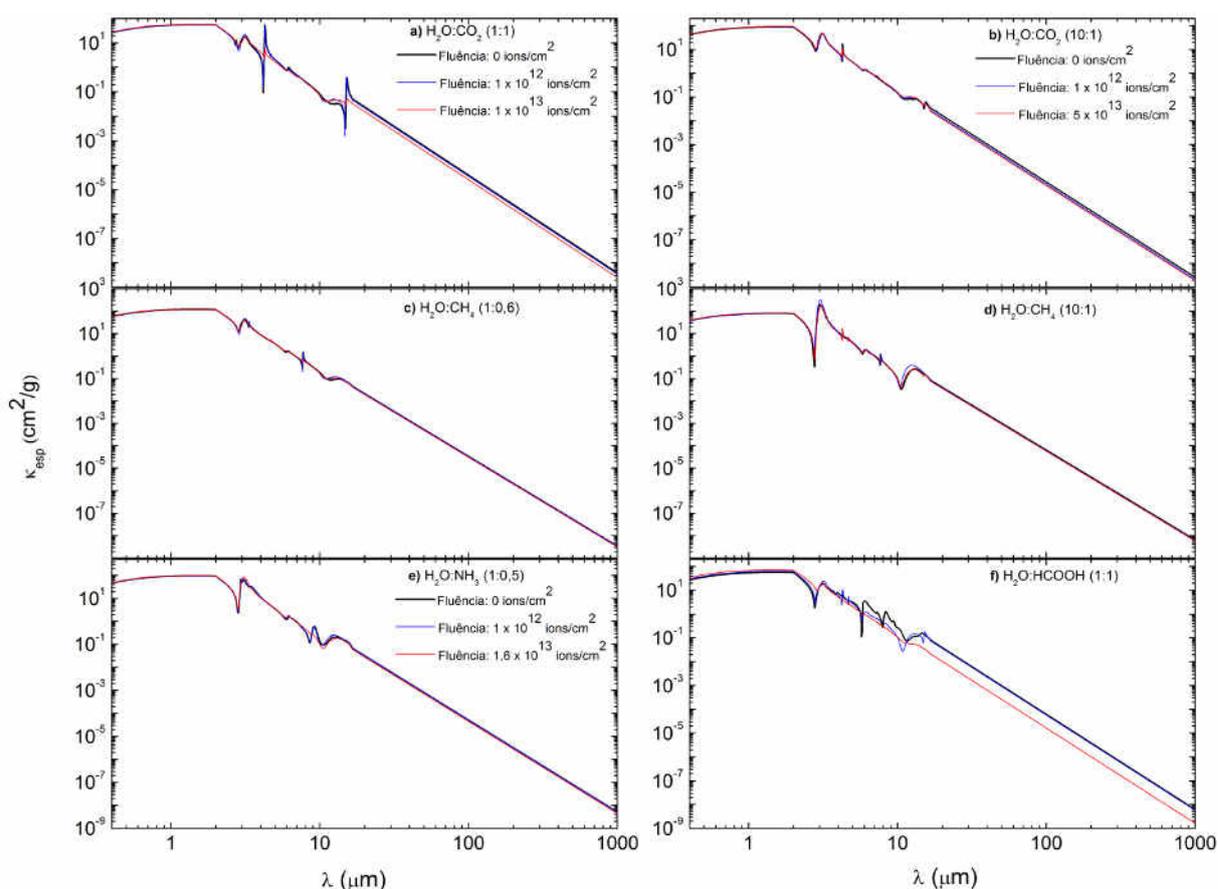


Figura 30: Opacidades de espalhamento dos gelos astrofísicos bombardeados por raios cósmicos simulados em laboratório em três fluências diferentes.

<sup>17</sup> Ajuste de *baseline* é um procedimento aplicado aos dados de absorbância, para normalizar todo o espectro por uma única linha base.

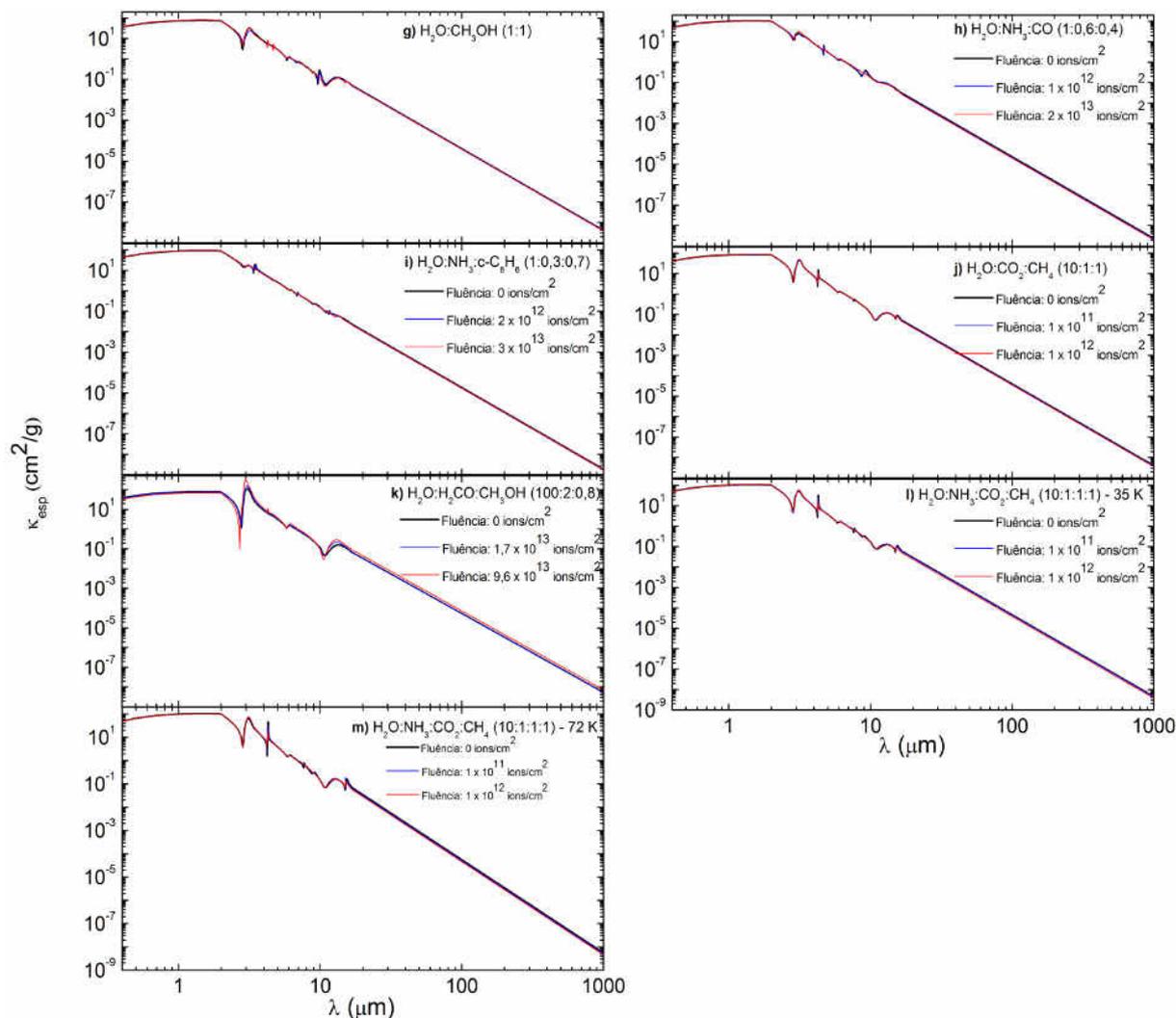


Figura 31: Continuação da Figura 30.

### 3.3.3 Albedos dos gelos bombardeados

O albedo é um parâmetro astrofísico que calcula a quantidade de radiação espalhada em relação à radiação extinta e já foi definido na Seção 2.3.2.1. Nesta seção apresentamos os valores calculados dos albedos dos gelos bombardeados usando a Equação 38 aplicada às opacidades. Os gráficos dos albedos estão mostrados na Figura 32.

Para analisar as mudanças no albedo apenas devido ao processamento energético dos gelos astrofísicos, isolamos o intervalo entre 2 – 20  $\mu\text{m}$ , onde foram determinados os índices de refração complexos. Depois foi calculado o albedo integrado no infravermelho para cada fluência, a fim de observar comportamentos diferentes da variação do albedo em função da composição química dos gelos. Os resultados estão mostrados na Figura 32.

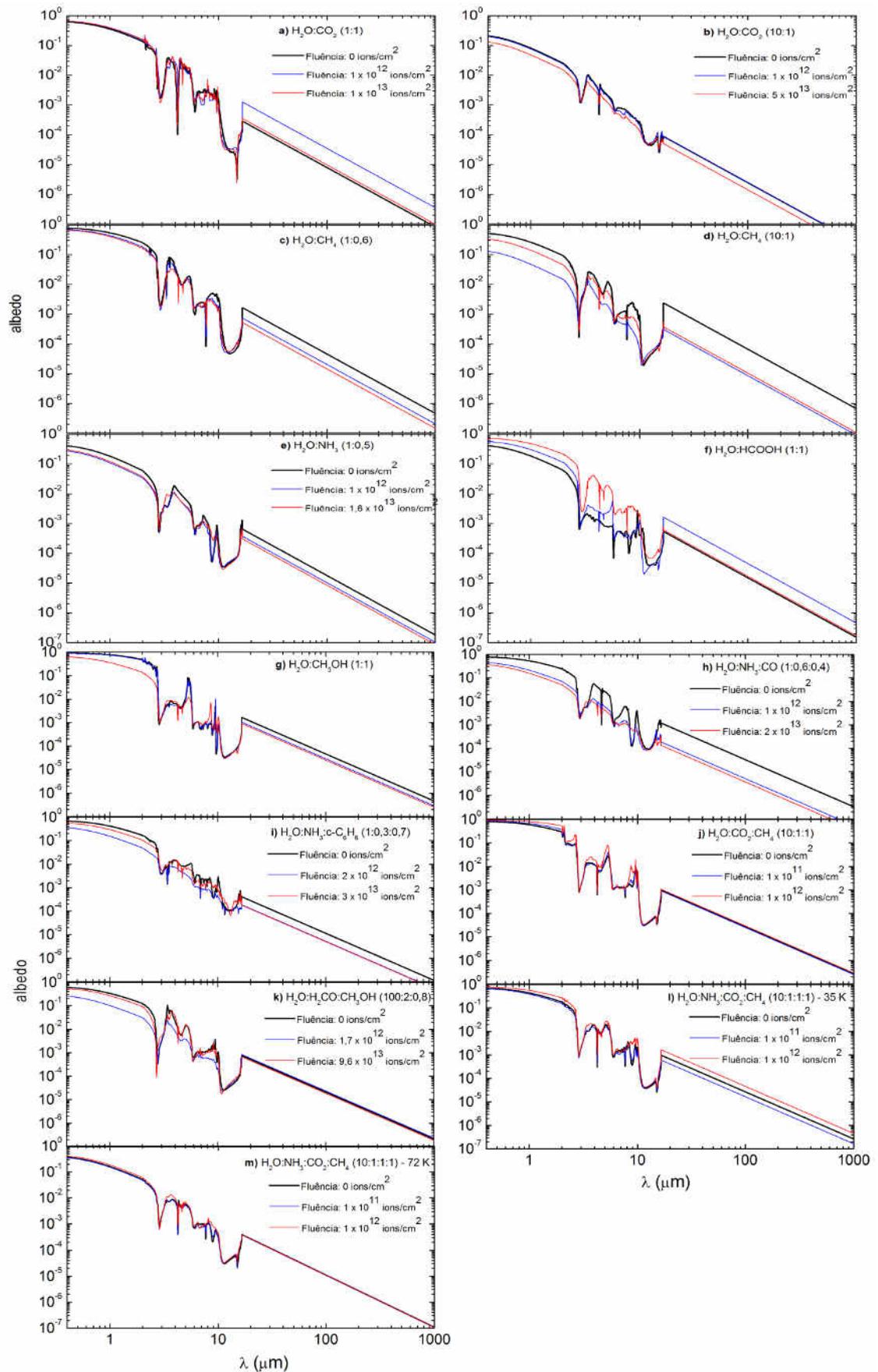


Figura 32: Albedos dos gelos bombardeados por raios cósmicos simulados em laboratório em três fluências diferentes.

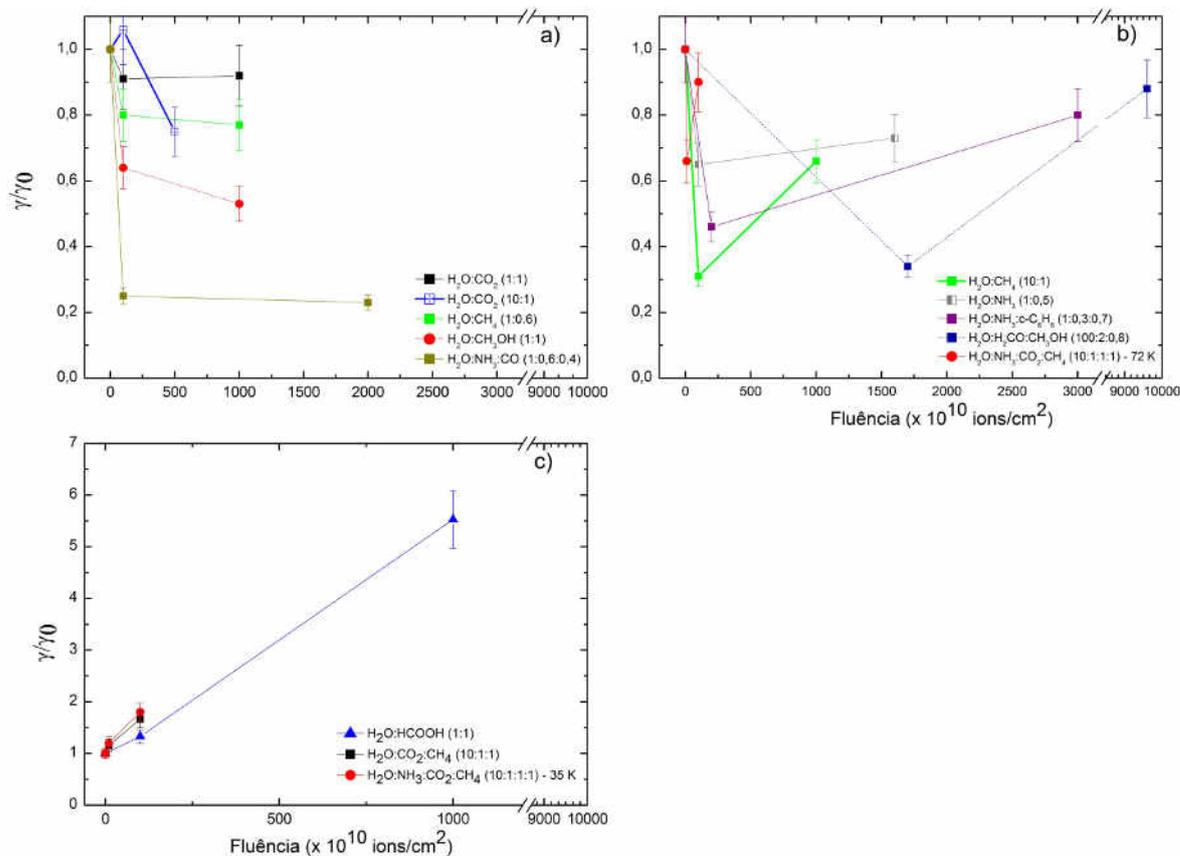


Figura 33: Variação dos albedos relativos integrados no IR (2,0 – 25,0  $\mu\text{m}$ ) com o aumento da fluência dos raios cósmicos simulados em laboratório. Nessa figura o termo  $\gamma_0$  é o albedo do gelo na fluência 0. São observadas três tendências: (a) o albedo sempre diminui; (b) O albedo diminui e depois aumenta e (c) O albedo só aumenta.

A Figura 33 apresenta a variação do albedo dos gelos em função da fluência da radiação incidente. Vemos que o aumento da fluência dos íons pesados usados nos experimentos altera de forma diferente o albedo dos gelos bombardeados. A determinação das barras de erro foram calculadas dos procedimentos empregados ao longo dos cálculos, como índice de refração complexo; cálculo da opacidade e posteriormente os albedos. No entanto, para todas as amostras, o erro não foi maior do que 10 %.

O comportamento dos albedos relativos mostrados na Figura 33 pode estar diretamente relacionado com a química inicial dos gelos e a formação de novas moléculas a partir da amostra inicial. Para o painel (a) da Figura 33, os albedos relativos diminuem consideravelmente após a primeira dose de radiação e depois diminui de forma suave. O Painel (b) mostra que o albedo relativo diminui após a primeira dose de radiação, porém depois teve um aumento importante, embora não maior que o albedo inicial. Por outro lado, o

painel (c) mostra um comportamento diferente para três amostras de gelos, onde o albedo do gelo sempre aumenta após o processamento energético. Embora a variação dos albedos relativos necessite de estudos mais detalhados posteriormente, é possível perceber que para a maioria dos gelos, tem seu albedo diminuído logo após a primeira dose de radiação. Esse fenômeno pode estar relacionado com a produção de moléculas orgânicas (baseadas em carbono) complexas a partir das moléculas simples do gelo inicial. Entretanto, à medida que a fluência sobre a amostra aumenta, as moléculas orgânicas produzidas podem estar sendo destruídas pelo bombardeamento dos íons, que é um cenário muito comum observado nos experimentos (Gerakines, et al., 2000; Andrade, et al., 2013; Andrade, et al., 2014; Bergantini, et al., 2014; Pilling, et al., 2010; Pilling, et al., 2012). Dessa forma, o aumento do albedo relativo no painel (b) pode significar que uma fração das moléculas orgânicas produzidas inicialmente foram destruídas, e o albedo relativo volta a aumentar. As informações contidas no painel (c), por outro lado, precisa de mais estudos para entender porque o albedo relativo apenas aumenta, uma vez que muitas espécies orgânicas também são formadas da composição inicial dos gelos.

### **3.3.4 Modelo de opacidade de grãos de poeira típicos cobertos por mantos de gelo processados**

As seções anteriores mostram como variam as propriedades astrofísicas dos gelos quando são bombardeados por íons pesados em laboratório. Entretanto nessa seção mostramos os valores de opacidade e albedo de um grão não homogêneo, ou seja, um grão de poeira com manto de gelo, que é a situação real do meio interestelar. A opacidade do silicato e do carbono amorfo foram obtidos de catálogos públicos disponíveis em endereços eletrônicos (Ver seção 2.3.2.2).

Foi discutido na seção 1.2.2.2 os mecanismos da adsorção de moléculas sobre um grão de poeira para formar o manto de gelo. Entretanto, os valores para a espessura dos mantos não foram apresentados ainda. Assumindo um grão esférico de poeira imerso em um gás de partículas idênticas de massa  $m$  (Kg) e densidade numérica  $n$  ( $\text{m}^{-3}$ ), a espessura do manto de gelo formado sobre um grão de poeira, pode ser dada pela seguinte equação (ver demonstração em Whittet, 2003):

$$\Delta a(t) = \left(0,4 S(T_g, T_p) n s^{-1} (k T_g m)^{1/2} t\right) 10^6 \quad [\mu\text{m}] \quad (39)$$

onde  $S$  é o *Sticking Power* mostrado na Equação 7,  $s$  a densidade da espécie ( $\text{Kg/m}^3$ ),  $T_g$  e  $T_p$  as temperaturas do gás e da poeira em K, respectivamente,  $k$  a constante de Boltzmann e  $t$  o tempo em segundos. Entretanto, essa equação mostra que a espessura do gelo é independente do tamanho do grão. Porém, a situação mais realista deve considerar o tamanho da poeira e a rugosidade da superfície como parâmetros importantes, uma vez que em grãos pequenos, os gelos tem uma taxa de dessorção elevada ao interagirem com fótons energéticos.

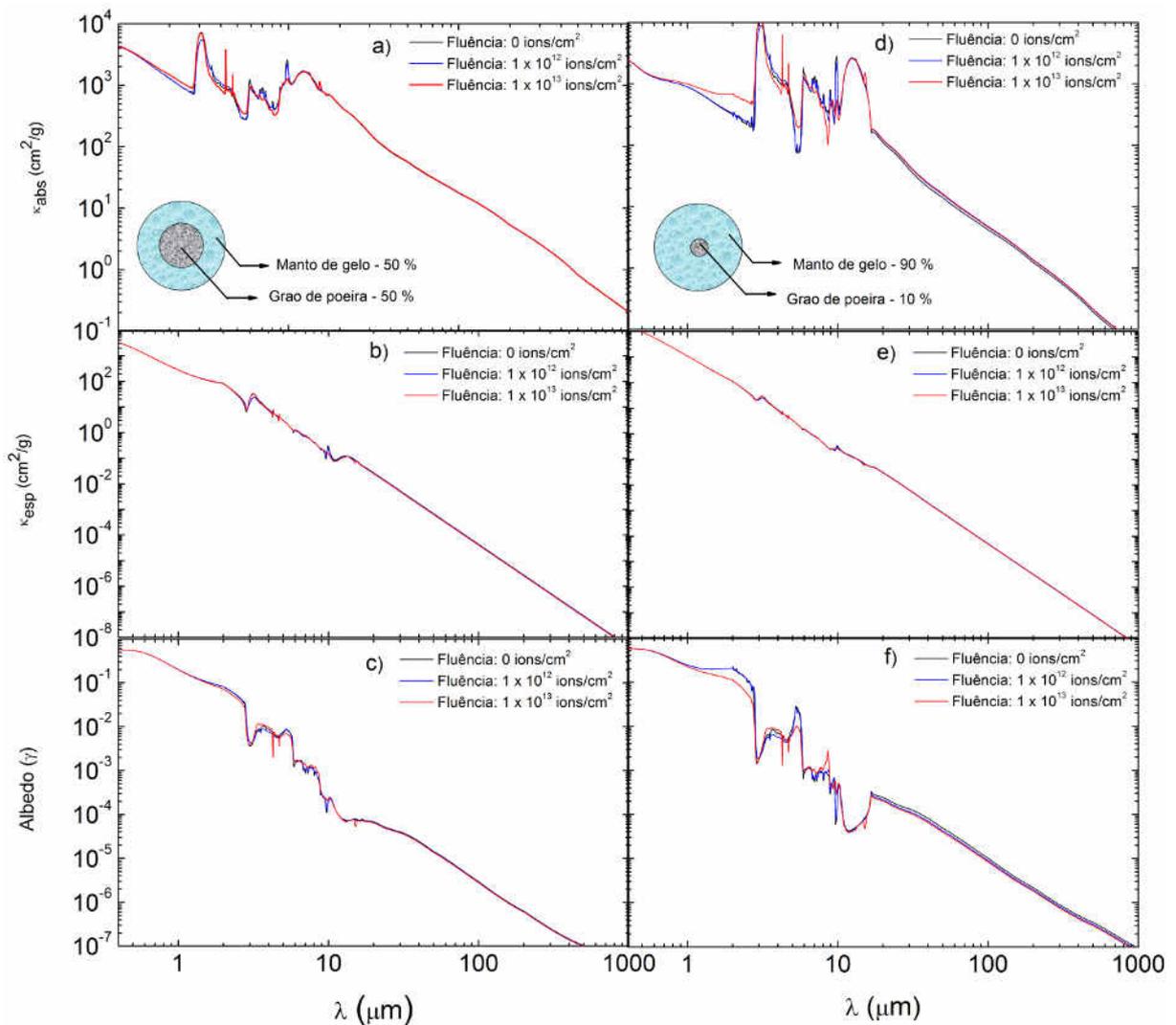


Figura 34: Opacidade de absorção e espalhamento e albedo de um grão não homogêneo com raio de  $0,1 \mu\text{m}$  bombardeado por íons de  $^{58}\text{Ni}^{11+}$  de  $40 \text{ MeV}$ . Nos painéis a, b e c foi considerado que  $50 \%$  do volume do grão é composto por poeira (silicato + carbono amorfo) e  $50 \%$  composto de gelo de  $\text{H}_2\text{O}:\text{CH}_3\text{OH}$ . Nos painéis d, e e f foi considerado que  $10 \%$  do volume do grão é composto por poeira e  $90 \%$  composto de gelo de  $\text{H}_2\text{O}:\text{CH}_3\text{OH}$ .

A Figura 34 mostra dois modelos de grãos não homogêneos de raio 0,1  $\mu\text{m}$ . No Modelo 1, mostrado nos painéis a, b e c, 50 % do volume do grão é composto por silicato misturado a carbono amorfo e 50 % composto de gelo de  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{CH}_3\text{OH}$ . No Modelo 2, mostrado nos painéis d, e – e f, 10 % do volume do grão é composto por silicato e carbono amorfo e o restante (90 %) composto pelo mesmo gelo do Modelo 1. Esses dois modelos são consistentes com as situações propostas por Ossenkopf, et al., (1994), onde foram calculadas opacidades de gelos com 50 % do volume do gelo e 50 % de poeira e em outra situação, o volume do gelo foi de 4,5 vezes o volume do material refratário (poeira), que é um cenário provável no interior de nuvens moleculares muito densas e frias. Da Figura 34 observa-se que a proporção do volume de gelo em relação à poeira influencia significativamente a curva das opacidades de absorção, enquanto que as opacidades de espalhamento não são afetadas. O albedo dos grãos dos dois modelos também é modificado, mostrando mais uma vez que gelos processados energeticamente ficam mais opacos à radiação infravermelha, embora esse efeito seja atenuado ao considerar a opacidade de grãos não homogêneos. Porém não são observadas mudanças para  $\lambda > 20 \mu\text{m}$  ao considerar apenas o efeito do processamento energético nos dois modelos.

A Figura 35 mostra as opacidades de absorção de um grão não homogêneo com raio de 0,1  $\mu\text{m}$ , constituído de material refratário (silicato e carbono amorfo) e gelo de  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{CH}_3\text{OH}$ . Porém, nessa figura são adotados diferentes volumes de poeira e gelo, que pode ser representativo de vários ambientes astrofísicos.

Como primeiro resultado da Figura 35, nota-se que a opacidade de absorção do grão de poeira coberto por gelo, diminui à medida que o gelo domina sobre o volume total, mostrando que menos radiação entre 0,4 – 1000  $\mu\text{m}$  é absorvida quando o volume do material volátil condensado é maior que 30 % do volume total. Isso ocorre porque a opacidade do gelo é menor do que a do material refratário. Portanto, se o volume do grão é dominado pelo material, sua opacidade domina sobre a da poeira. Além disso, podemos observar que a forma do perfil de absorção do silicato é modificada se o volume do gelo for maior que 30 % do volume total. Baseado nisso, podemos inferir que o volume do material volátil condensado deve ser menor do que 30 % do volume total de um grão de poeira coberto por gelo no envoltório de protoestrelas de baixa massa, uma vez que o perfil de absorção do silicato é bem definido nessas regiões (D’Hendecourt, et al., 1996; Boogert, et al., 2002; Crapsi, et al., 2008; Henning, et al., 2013).

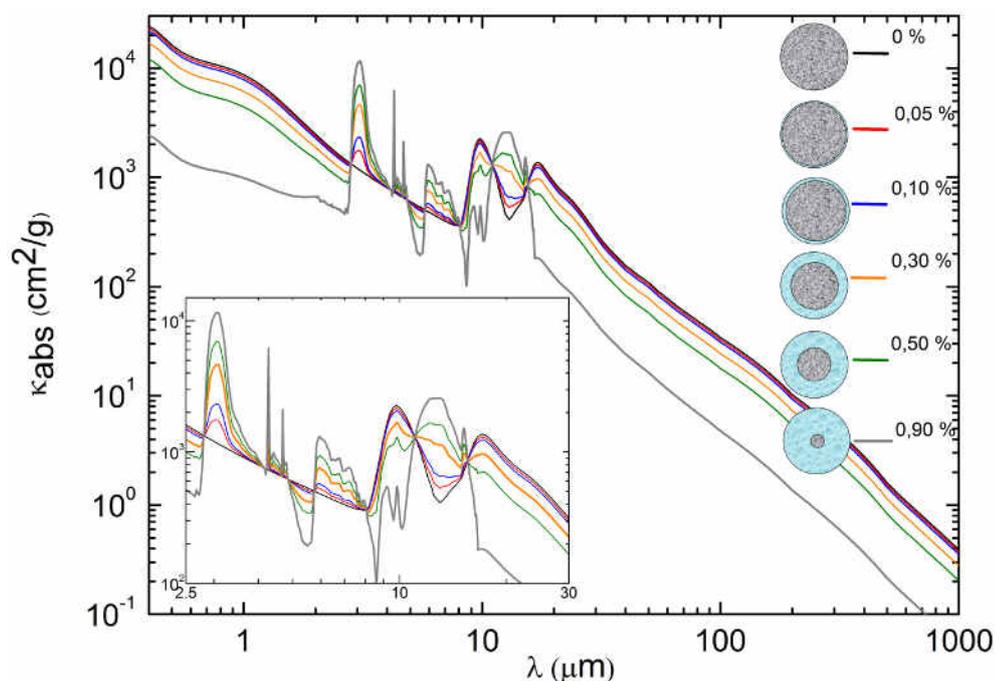


Figura 35: Opacidades de absorção de grão não homogêneos com raio de  $0,1 \mu\text{m}$  e diferentes volumes de poeira e gelo. A opacidade mostrada na curva preta é devida apenas ao grão de poeira. A opacidade na curva vermelha é devido a um grão de poeira com volume de gelo de 5% do volume total. A curva vermelha representa 10 % de gelo do volume total. A curva laranja representa 30 % de gelo do volume total. A curva verde representa 50 % de gelo do volume total. O painel interno mostra uma ampliação da região entre  $2,5 - 30 \mu\text{m}$ .

Além das características observadas a Figura 35, as opacidades de gelos processados energeticamente carregam informações da evolução química do gelo astrofísico. Esse resultado é de extrema importância, porque abre caminhos para investigar qual situação de processamento de gelos realizados em laboratório é mais adequada a um determinado cenário de formação estelar. Dessa forma, baseado nessa ideia, propomos que os dados de opacidade calculados por Ossenkopf, et al., (1994) sejam revisitados, uma vez que seus dados são limitados a cenários onde o material volátil está protegido do processamento energético e térmico ocasionado pela turbulência presente no processo de formação estelar. Por fim, com os dados de índice de refração complexo e de opacidade apresentados nesta tese, um novo catálogo de opacidades pode ser elaborado para aplicações diretas em regiões de formação estelar, onde a química dos gelos está sendo constantemente modificada.

# CAPÍTULO 4

## MODELAGEM DA PROTOESTRELA ELIAS 29 UTILIZANDO DADOS DE GELOS PROCESSADOS EM LABORATÓRIO

---

*Este capítulo apresenta um exemplo de aplicação dos dados obtidos no Capítulo 3 na modelagem computacional do espectro e imagem da protoestrela Elias 29, utilizando dados de gelos processados obtidos em laboratório. Essa metodologia é inédita e permite simular de forma mais verossímil o cenário astrofísico que se estuda.*

***“Look up t the stars and not down at your feet. Try to make sense of what you see, and wonder about what makes the Universe exists. Be curious.”***

**Stephen Hawking**

### **4.1 Classificação espectral de Elias 29**

Neste trabalho a classificação espectral de Elias 29 foi determinada utilizando um diagrama Cor-Cor (Figura 36), construído com base nos dados de fotometria obtidos com o código *Starfinder* a partir das imagens no infravermelho médio coletadas pelo telescópio espacial Spitzer. Os limites das caixas foram tomados de Megeath, et al., (2004), para definir

as regiões do índice de cor das protoestrelas de classe I e II. Este diagrama também mostra que a classificação de Elias 29 tem boa relação com os diagramas BLT (*Bolometric Luminosity and Temperature*) (Chen, et al., 1995; Enoch, et al., 2009), e, portanto define que Elias 29 é uma protoestrela de classe I.

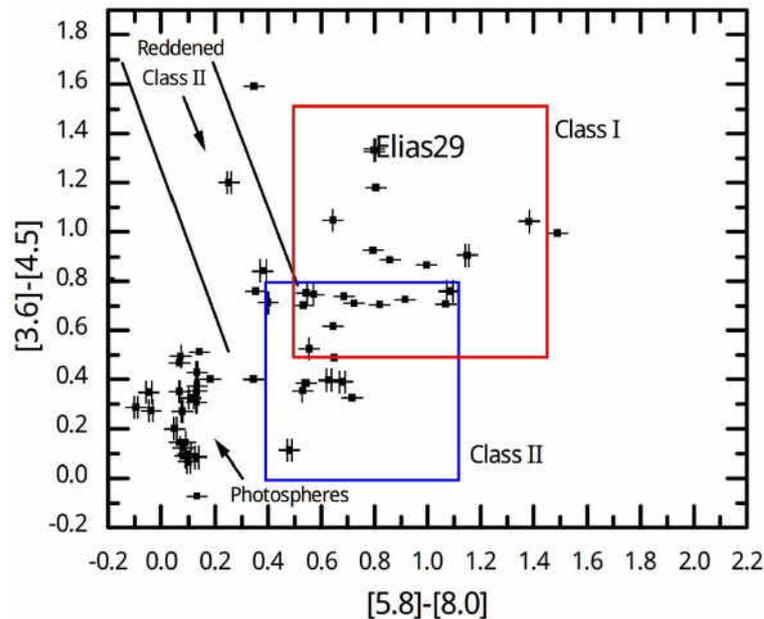


Figura 36: Diagrama Cor-Cor na região de  $\rho$  Ophiuchi. As caixas definem regiões para objetos estelares jovens de classe I e II. As linhas pretas indicam protoestrelas de classe II avermelhadas. O termo “fotósferas” indicam estrelas da sequência principal. Nesta região também podem estar protoestrelas de classe III. Elias 29 é classificado como protoestrela classe I. Fonte: Rocha & Pilling (2015).

Embora esse resultado sobre a classe evolutiva de Elias 29 já tenha sido mostrada com sucesso nos trabalhos de Chen, et al., (1995), McClure, et al., (2010) e (Rocha, et al., 2015), os autores Boogert, et al., (2002) levantaram a hipótese que o limite superior de extinção visual das nuvens de frente ( $A_V \sim 11$  mag) pudesse estar fornecendo um resultado equivocado do estágio evolutivo de Elias 29. Dessa forma, Elias 29 seria classificado como classe II (T-Tauri) ou um objeto Herbig Ae/Be. No entanto, foi mostrado no trabalho de Rocha, et al., (2015) que a presença de um envelope é necessária para reproduzir o perfil plano da distribuição espectral de energia de Elias 29, bem como nuvens de frente. Caso contrário, se Elias 29 apenas fosse um objeto de classe II embebido, o modelo empregado no código RADMC-3D não reproduziriam os dados observados.

## 4.2 Apresentação do modelo e identificação de Elias 29

A modelagem da distribuição espectral de energia e das imagens no infravermelho de Elias 29 foi feita empregando os dados de opacidade obtidos no Capítulo 3, calculados a partir do índice de refração complexo de gelos virgens e bombardeados por raios cósmicos simulados em laboratório. Na simulação computacional foram utilizados dois modelos, sendo o Modelo 1, caracterizado pelo uso de apenas gelos virgens de H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CO, mostrados na Tabela 4 bem como poeira (silicato + carbono) e Modelo 2, definido pelo uso de gelo processado (H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub>) além dos gelos virgens e poeira do Modelo 1, mostrados na Tabela 5. Esta metodologia mostra que o uso das opacidades de gelos processados é fundamental para reproduzir os perfis de absorção presentes no espectro devido à evolução química induzida por raios cósmicos. Isso confirma, portanto, que o ambiente circumestelar de Elias 29 passou por evolução química induzida por agentes do meio interestelar.

A protoestrela Elias 29 (Elias, 1978), também conhecida como Elias 2-29 e WL 15 (Wilking, et al., 1983) está localizada na nuvem molecular  $\rho$  Ophiuchi, e tem sido classificada como uma protoestrela de classe I de idade entre  $0,4 - 5,0 \times 10^5$  anos (Chen, et al., 1995; Boogert, et al., 2000; Enoch, et al., 2009). Suas coordenadas são  $\alpha(\text{J2000}) = 16^{\text{h}}27^{\text{m}}09,3^{\text{s}}$  e  $\delta(\text{J2000}) = -24^{\circ}37'21''$ . Apesar de muitos trabalhos publicados à respeito de Elias 29, o valor de sua luminosidade permanece divergente:  $L = 36 L_{\odot}$  (Chen, et al., 1995; Boogert, et al., 2000; Boogert, et al., 2002) e  $L = 13,6 L_{\odot}$  (de Geus, et al., 1989), (Lommen, et al., 2008), enquanto que sua distância parece relativamente estabelecida:  $d \sim 160$  pc (Boogert, et al., 2000; Boogert, et al., 2002),  $d \sim 125 \pm 25$  pc (de Geus, et al., 1989; Lommen, et al., 2008). Além disso, Elias 29 está localizado numa região ativa de formação estelar, onde estão presentes vários outros objetos estelares jovens, e, portanto, está imerso em um intenso campo de radiação de sua região de formação. A Figura 37 mostra uma imagem da região onde está localizada Elias 29 com campo de visão de  $38' \times 32'$  (minutos de arco), tomado da câmera MIPS em  $24 \mu\text{m}$ , à bordo do Telescópio Espacial Spitzer.

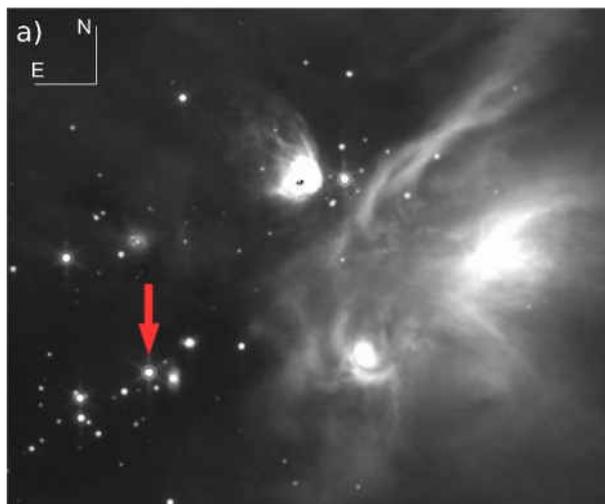


Figura 37: Imagem da nuvem molecular  $\rho$  Ophiuchi e da protoestrela de baixa massa Elias 29 (seta vermelha). Fonte: Rocha & Pilling (2015).

A determinação precisa da inclinação do disco de Elias 29 ainda não foi possível, devido à grande extinção causada pelo material circumestelar. Kenyon, et al., 1993 argumentam que absorções profundas no espectro devido a silicatos, tal como observado na direção de Elias 29, são evidências típicas de discos com inclinação *edge-on*, ou seja, linha de visada paralela ao disco. No entanto, estudos de Boogert, et al., 2002, sugerem que devido ao perfil plano do espectro de Elias 29, entre 4 - 100  $\mu\text{m}$ , a inclinação do disco deve ser menor do que  $60^\circ$ . Se a hipótese sobre a inclinação do disco de Elias 29 proposta no trabalho de (Boogert, et al., 2002) for correta, as profundas características de absorção do gelo e silicato, observada no espectro de Elias 29, não têm origem no disco protoestelar, mas em sua maior parte no seu envelope, e em menor quantidade em nuvens difusas ao longo da linha de visada (também chamadas de nuvens de *foreground*). Como a inclinação exata ainda não está resolvida, nós adotamos uma inclinação de confiança de  $60^\circ$ , como também foi feito nos trabalhos de Lommen, et al., (2008) e Miotello, et al., (2014). Índícios adicionais sobre a inclinação do disco de Elias 29 são dados no trabalho de Huélamo, et al., (2006), onde os autores obtiveram uma imagem direta de Elias 29, usando a técnica de polarimetria diferencial com o instrumento NAOS CONICA (NACO) e Óptica Adaptativa no Telescópio VLT (*Very Large Telescope*). Os resultados mostram que a inclinação *edge-on* é impossível para Elias 29. Além disso, os autores também relataram a detecção no infravermelho próximo (bandas H e K) de ejeções bipolares de hidrogênio molecular na direção NO-SL (assumindo N para cima e E para esquerda) e uma faixa escura na direção NL-SO. A presença da molécula de CO e hidrogênio molecular foi também observadas em jatos oriundos de Elias

29, como mostrado nos trabalho de Gómez, et al., (2003) e Zhang, et al., (2013), respectivamente.

### 4.3 Parâmetros da modelagem computacional empregados no código RADMC-3D para a protoestrela Elias 29

Muitos parâmetros são necessários para modelar a distribuição espectral de energia de objetos estelares jovens, o que implica em alta degenerescência nos cálculos. Trabalhos anteriores de Robitaille, et al., (2007), Gramajo, et al., (2010) e Whitney, et al., (2013) mostram a importância de definir intervalos de valores para os parâmetros envolvidos na modelagem, e depois tentar encontrar o melhor deles. Para Elias 29, o intervalo de valores dos parâmetros foi limitado pelos resultados de dados observacionais, publicados nos trabalhos de (Boogert, et al., 2002; Huélamo, et al., 2006; Lommen, et al., 2008; Miotello, et al., 2014), e estão mostrados na Tabela 7.

Tabela 7: Parâmetros dos Modelos 1 e 2 empregados para Elias 29. Fonte: Rocha & Pilling (2015).

Parâmetro	Descrição	Valor adotado (ver texto)	Intervalo estimado	Valor na literatura
$R (R_{\odot})$	Raio estelar	5,7	5 – 12	5,8 <sup>a</sup> ; 5,9 <sup>b</sup>
T (K)	Temperatura estelar	4880	4000 – 5000	4786 <sup>b</sup> ; 4913 <sup>a</sup>
L ( $L_{\odot}$ )	Luminosidade estelar	16,5	13 – 36	13,6 <sup>c</sup> ; 16,3 <sup>b</sup> ; 17,5 <sup>a</sup> ; 36 <sup>d</sup>
$M_d (M_{\odot})$	Massa do disco	0,004	0,002 – 0,007	< 0,007 <sup>e</sup>
$R_{d,in}$ (UA)	Raio interno do disco	0,36	fixo	0,25 <sup>f</sup>
$R_{d,ext}$ (UA)	Raio externo do disco	200	fixo	200 <sup>e</sup>
$M_{env} (M_{\odot})$	Massa do envelope	0,03	0,02 – 0,06	< 0,058 <sup>e</sup>
$R_{env,in}$ (UA)	Raio interno do envelope	0,36	fixo	-
$R_{env,ext}$ (UA)	Raio externo do envelope	6000	fixo	6000 <sup>g</sup>
$\theta_c$ (°)	Ângulo de cavidade	30	25 – 55	40 <sup>h</sup>
d (pc)	Distancia	120	100 – 160	125 <sup>i</sup> ; 160 <sup>g</sup>

<sup>a</sup>McClure, et al., 2010

<sup>b</sup>Miotello, et al., 2014

<sup>c</sup>Evans II, et al., 2003

<sup>d</sup>Chen, et al., 1995

<sup>e</sup>Lommen, et al., 2008

<sup>f</sup>Simon, et al., 1987

<sup>g</sup>Boogert, et al., 2002

<sup>h</sup>Beckford, et al., 2008

<sup>i</sup>de Geus, et al., 1989



da ao longo da linha de visa deve ser de  $A_V \sim 11$  mag. Usando esse resultado para estimar a abundância de espécies condensadas nas nuvens de frente com base nos valores relatados em Boogert, et al., 2000, chegaríamos a uma pequena porcentagem de 15 - 20 % e não 70 % como sugerido pelos autores Boogert, et al., 2002. Portanto, podemos concluir que embora seja possível a condensação de moléculas nas nuvens de frente, a contribuição das absorções dos gelos é pequena em relação ao ambiente circumestelar.

Uma vez que Elias 29 é uma protoestrela que têm bastante material ao da linha de visada devido às nuvens de frente, ao disco e ao envelope, a estimativa da temperatura efetiva  $T_{ef}$  da fonte central não pode ser feita a partir de observáveis físicos. Com base nessa restrição, Mayers, et al., 1993 propuseram o uso da temperatura bolométrica, que é definida como a temperatura de um corpo negro a uma frequência média da distribuição espectral de energia, dada por:

$$T_{bol} = 1,25 \times 10^{-11} \langle \nu \rangle K \quad (40)$$

onde a frequência média ( $\langle \nu \rangle$ ) é calculada por

$$\langle \nu \rangle = \frac{\int \nu F_\nu d\nu}{\int F_\nu d\nu} \quad (41)$$

em que  $\nu$  é a frequência e  $F_\nu$  é o fluxo em função da frequência.

Baseado nas Equações 39 e 40, as temperaturas bolométricas de Elias 29, têm sido estimadas em 410 K (Chen, et al., 1995) e 390 K (Evans II, et al., 2003). Entretanto, não existe relação entre a temperatura bolométrica e a efetiva, no sentido de que o conhecimento de uma leva ao cálculo da outra. Portanto, para estimar a temperatura efetiva de protoestrelas embebidas, são usados códigos de transferência radiativa e correções no cálculo da extinção no infravermelho próximo na direção de nuvens moleculares. Dois trabalhos que utilizaram essa técnica relatam os seguintes valores: (i)  $T_{ef} = 4913$  K,  $R = 5,8 R_\odot$  e  $L = 17,5 L_\odot$  (McClure, et al., 2010) e (ii)  $T_{ef} = 4786$  K,  $R = 5,9 R_\odot$  e  $L = 16,3 L_\odot$  (Miotello, et al., 2014). Dessa forma, para testar quais valores de temperatura, raio e luminosidade reproduzem o modelo adotado no RADMC-3D para Elias 29, foram considerados os seguintes intervalos: (i)  $T_{ef} = 4000 - 5000$  K, (ii)  $R = 5 - 12 R_\odot$ . Portanto, como poderá ser observado ao longo deste texto, os valores que melhor ajustaram a distribuição espectral de energia (Seção 4.3.2) e as

imagens no infravermelho (Seção 4.3.6) foram  $T_{\text{ef}} = 4880 \text{ K}$ ,  $R = 5,7 R_{\odot}$  e  $L = 16,5 L_{\odot}$  (Rocha & Pilling 2015).

### 4.3.1 Geometria do disco e do envelope

A presença do disco e um envelope em Elias 29 foi relatada em trabalhos de Boogert, et al., (2000, 2002), Lommen, et al., (2008) e Miotello, et al., (2014). A estimativa da extensão dessas estruturas, no entanto, depende da profundidade óptica do meio. Modelos computacionais feitos para Elias 29 (Boogert, et al., 2002; Miotello, et al., 2014), sugerem que seu disco dever ter um tamanho mínimo entre 15 - 30 UA, se o meio for altamente espesso. Porém, se o meio for menos espesso, o tamanho do disco tem extensão de 500 UA segundo Boogert, et al., 2002 e de 200 UA, conforme Miotello, et al., 2014. No entanto, resultados observacionais das absorções da molécula de CO sugere um disco com extensão de cerca de 110 UA (Boogert, et al., 2000).

Algumas imagens obtidas por Huélamo, et al., (2006), confirmam a presença de um disco protoestelar em Elias, bem como limitam parte irradiada desse disco com cerca de 175 UA, e portanto bem maior que os tamanhos mínimos propostos em Boogert, et al., (2002) e Miotello, et al., (2014). No entanto, é importante observar que o disco de uma protoestrela pode ter uma componente não visível em comprimentos de onda do infravermelho próximo (também chamada de *self shadowed*), a distâncias maiores que 175 UA do centro. Dessa forma, é possível que o disco observado por Huélamo, et al., 2006 seja um pouco maior do que 175 UA. Neste trabalho, portanto, assumimos que o raio externo do disco é de 200 UA, baseado nas observações de Huélamo, et al., 2006, e nas sugestões dadas nos trabalhos de Lommen, et al., 2008 e Miotello, et al., 2014.

O perfil de densidade do disco empregado no código RADMC-3D para modelar o espectro e as imagens de Elias 29 é dado por uma lei de potência ao longo da coordenada radial e uma dependência gaussiana na altura, cuja expressão matemática obtida de Lommen, et al., 2008 é dada por:

$$\rho_{\text{disco}}(r, \theta) = \frac{\Sigma_0 (r/R_0)^{-1}}{\sqrt{2\pi}H(r)} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{r\cos\theta}{H(r)}\right]^2\right\} \quad (42)$$

onde  $\theta$  é o ângulo do eixo de simetria,  $\Sigma_0$  a densidade superficial no raio externo  $R_0$ , que determina a massa do disco,  $M_{\text{disco}}$  e  $H(r)$ , definido por  $H(r) = r \cdot H_0/R_0 \cdot (r/R_0)^{2/7}$ , que corresponde ao disco passivo de Chiang, et al., 1997. O raio interno do disco foi calculado, adotando a temperatura de sublimação do silicato ( $T \sim 1500$  K) e usando a equação  $R_{\text{in}} = R_*(T_*/T_{\text{in}})^2$  de Dullemond, et al., 2010, onde  $R_*$  e  $T_*$  são parâmetros da fonte central, mostrados na Tabela 5. Dessa forma, o raio interno do disco de Elias 29 foi calculado em  $R_{\text{in}} = 0,36$  UA. O parâmetro  $H_0/R_0 = 0,17$  foi adotado dos trabalhos de (Lommen, et al., 2008; Miotello, et al., 2014).

Além do disco, Elias 29 é rodeado por um grande envelope de raio externo  $R_{\text{ext}} = 6000$  UA, dado o perfil de intensidade em 1,3 mm (Motte, et al., 1998), modelado por (Boogert, et al., 2002). Neste trabalho, seu perfil de densidade é dado por:

$$\rho_{\text{env}}(r) = \rho_0 \left( \frac{R_{\text{ext}}}{r} \right)^{1.5} \quad (43)$$

onde  $\rho_0$  é o valor da densidade no raio externo.

Devido a observações de jatos em Elias 29 (Gómez, et al., 2003; Zhang, et al., 2013), é apropriado considerar uma abertura no envelope. O tamanho angular da cavidade foi determinada por Beckford, et al., 2008 a partir de imagens no infravermelho próximo, combinadas com a técnica de polarimetria linear. Dessa forma, o tamanho angular da cavidade, determinada na banda K foi  $\theta = 40^\circ$ . A Tabela 5 mostra os valores dos parâmetros usados nos Modelos 1 e 2, como também os limites estimados, devido à degenerescência envolvida na modelagem.

Cenários mais realistas para a modelagem de discos e envelopes protoestelares, devem considerar a temperatura de sublimação dos grãos de poeira e dos gelos, como também a possibilidade da radiação processá-los. Levando isto em conta, a poeira e os gelos devem ocupar regiões específicas em torno da protoestrela. Dessa forma, a posição da poeira e dos gelos no disco e envelope de Elias 29 foram definidas à partir do cálculo da temperatura feita com o código RADMC-3D e de suas respectivas temperaturas de sublimação, dadas por (i) silicato + carbono amorfo – 1500 K (Gail, 2010), (ii)  $\text{H}_2\text{O}$  - 150 K,  $\text{CO}_2$  - 75 K, CO - 20 K (Collings, et al., 2004) and (iii)  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  processado, assumindo ser 150 K.

Experimentos de laboratório (Collings, et al., 2004), mostram, no entanto, que moléculas congeladas e presas ao gelo de H<sub>2</sub>O, serão desorvidas a duas temperaturas diferentes: (i) desorção de moléculas da superfície de H<sub>2</sub>O e (ii) desorção das moléculas presas nas partes internas da matriz de gelo (Collings, et al., 2004). Isto significa que moléculas voláteis podem estar localizadas nas partes internas dos discos (Visser, 2009) e envelopes protoestelares se presas ao gelo de H<sub>2</sub>O. Dessa forma, moléculas muito voláteis como o CO e CH<sub>4</sub>, que desorvem a 20 K e 30 K, respectivamente, podem estar sendo processadas junto com um gelo de H<sub>2</sub>O, e permitindo o enriquecimento da química local.

### 4.3.2 Distribuição espectral de energia

A Figura 39 mostra a distribuição espectral de energia para o Modelo 1, empregando apenas gelos não processados. Embora este modelo possa determinar muitos parâmetros físicos da protoestrela, ele não consegue reproduzir as mudanças químicas induzidas pela radiação (raios cósmicos ou fótons de alta energia) sobre os mantos de gelo, observados entre 5,5-8,0  $\mu\text{m}$  e 15,15-15,25  $\mu\text{m}$ . Isto significa que, embora as fortes absorções devido ao gelos de H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CO tenham sido ajustadas, o enriquecimento da química do gelo não pode ser validado pelo Modelo 1. Por outro lado, o melhor ajuste é mostrado na Figura 40, como resultado do Modelo 2, onde a propriedades físicas e químicas de Elias 29 foram reproduzidos. Para atingir este resultado, a presença de gelos bombardeados (H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub>) foi fundamental para representar um cenário mais realista. Em ambos os modelos, a abundâncias dos gelos em relação ao gás de H<sub>2</sub> e a massa do disco e do envelope, foram determinadas com base em valores da literatura, apresentados em (Boogert, et al., 2000; Lommen, et al., 2008).

As Figuras 39a e 40a mostram o espectro de Elias 29 modelado com o código RADMC-3D, cobrindo 0,1 – 80.000  $\mu\text{m}$ . Este gráfico também mostra (i) o espectro observacional obtido com o telescópio ISO (linha preta), (ii) curva de corpo negro da protoestrela sem extinção (linha pontilhada preta), (iii) curvas de corpo cinza de nuvens de frente (*foreground*) (linhas tracejadas azul e verde), como também (iv) dados fotométricos obtidos com o 2MASS (1,23  $\mu\text{m}$ ; 1,66  $\mu\text{m}$ ; 2,16  $\mu\text{m}$ ), WISE (3,35  $\mu\text{m}$ ; 4,6  $\mu\text{m}$ ; 11,56  $\mu\text{m}$ ; 22,08  $\mu\text{m}$ ), SPITZER (8,0  $\mu\text{m}$ ), IRAS (12  $\mu\text{m}$ ; 25  $\mu\text{m}$ ; 60  $\mu\text{m}$ ; 100  $\mu\text{m}$ ) e em comprimentos de onda distantes (1,1 mm; 3,0 mm; 3,0 cm; 6,0 cm). Os dados fotométricos no infravermelho

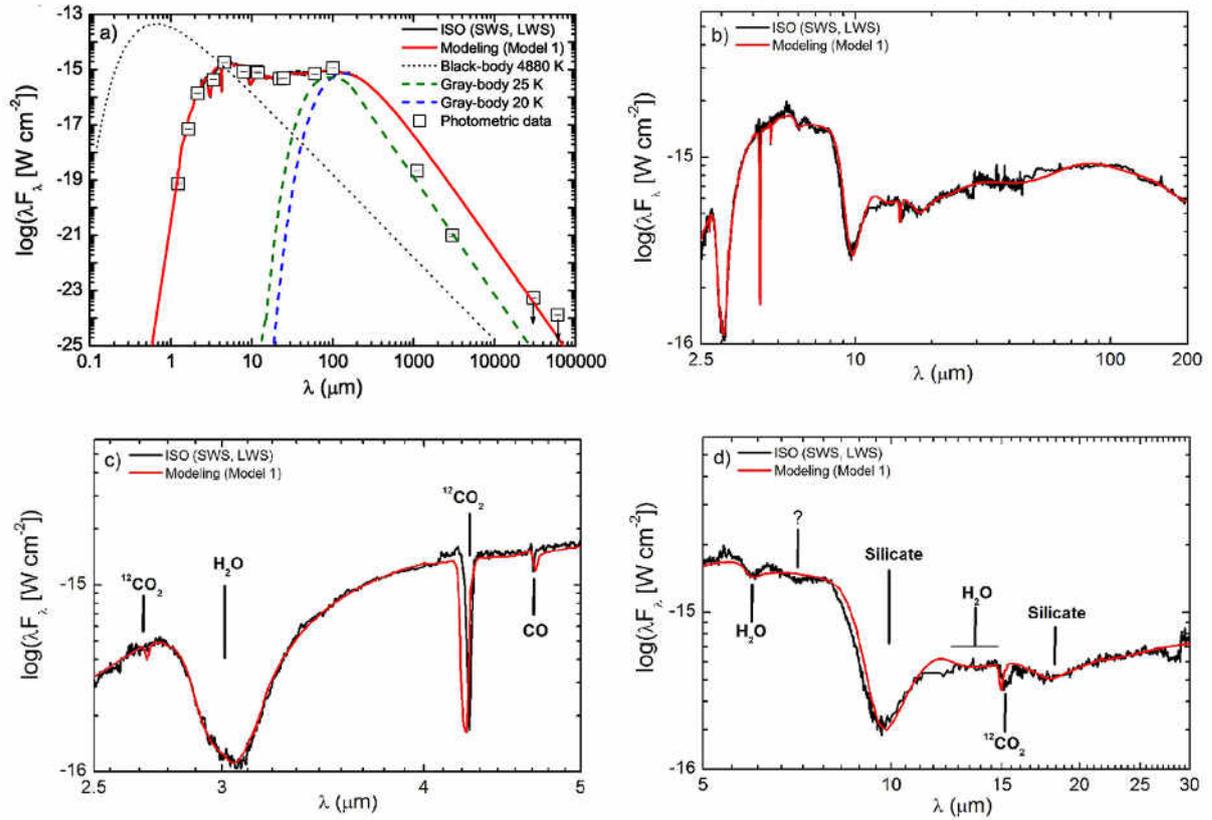


Figura 39: Modelagem empregando apenas gelos não processados para o cálculo da SED de Elias 29. Os quatro painéis mostram a distribuição espectral de energia observada de Elias 29 (linha preta), modelada pelo código RADMC-3D (linha vermelha). (a) (i) a linha preta pontilhada representa à curva de corpo negro associado com 4880 K, (ii) as linhas tracejadas azuis e verdes são as curvas de corpo negro de nuvens frias de frente (12 K e 16 K, respectivamente), (iii) medidas fotométricas ente infravermelho próximo e sub-mm obtidos de catálogos públicos. (b) Detalhe do painel (a), cobrindo 2,5-200  $\mu\text{m}$ . (c) Detalhe do painel (b) cobrindo 2,5-5,0  $\mu\text{m}$ . Este painel também mostra a presença das bandas de absorção do CO, CO<sub>2</sub>, e H<sub>2</sub>O. (d) Detalhe do painel (b), cobrindo 5 - 30  $\mu\text{m}$ . Este painel destaca a presença de H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> e silicato, como também absorções entre 5,5-8,0  $\mu\text{m}$ . Fonte: Rocha & Pilling (2015).

foram obtidos do seguinte endereço eletrônico: *Infrared Science Archive*<sup>18</sup>, como também dos trabalhos de Lommen, et al., (2008) e Miotello, et al., (2014). Devido ao fato de que Elias 29 ser uma protoestrela bastante embebida na nuvem molecular de *Ophiuchi*, a presença de nuvens frias (12 – 16 K) de frente são necessárias para ajustar o espectro observado após 80  $\mu\text{m}$ . O perfil de emissão das nuvens de frente foram adicionadas à mão, e não são parte da simulação de transferência radiativa. Estas nuvens produzem uma emissão de corpo negro modificado a grandes comprimentos de onda (Hildebrand, 1983; Ward-Thompson, et al., 2000), às vezes chamado de emissão de corpo cinza, e é dada por:

$$S_\nu = \Delta\Omega B_\nu(T)[1 - e^{-\tau_\nu}] \quad (44)$$

<sup>18</sup> <http://irsa.ipac.caltech.edu>

onde  $\Delta\Omega$  é o ângulo sólido da fonte e  $B_\nu(T)$  é a emissão de corpo negro na temperatura  $T$ . A profundidade óptica é dada por  $\tau_\nu = \kappa_\nu N_d$ , onde  $\kappa_\nu$  é a opacidade da poeira dada por  $\kappa_\nu = \kappa_0(\nu/\nu_0)^\beta$ , onde  $\beta$  é o índice de opacidade e  $N_d$  é a densidade de coluna da poeira ao longo da linha de visada. Adotando  $\kappa_0$  a 1,3 mm como  $\kappa_{1,3} = 0,01$  (Rocha & Pilling 2015), nós fizemos o ajuste do espectro de Elias 29 em comprimentos de onda grandes usando duas curvas de corpo cinza. A Tabela 8 mostra os melhores parâmetros obtidos com o ajuste.

Tabela 8: Parâmetros obtidos do ajuste de corpo cinza relativo às nuvens frias de frente. Fonte: Rocha & Pilling (2015)

Corpo cinza	$N_H$ ( $\text{cm}^{-2}$ ) <sup>a</sup>	$A_V$ (mag) <sup>b</sup>	$\Delta\Omega$ (sr)	$\beta$	T (K)
1	$(8,0 \pm 0,2) \times 10^{21}$	$4,0 \pm 1,0$	$(1,7 \pm 0,1) \times 10^{-8}$	2	$25,2 \pm 1,3$
2	$(1,2 \pm 0,3) \times 10^{22}$	$6,0 \pm 1,5$	$(7,0 \pm 0,1) \times 10^{-7}$	2	$20,2 \pm 0,8$

<sup>a</sup>Assumindo a razão poeira-gás de 0,01

<sup>b</sup>Usando a relação  $N_H = 2 \times 10^{21} A_V \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$  de Bohlin, et al., (1978)

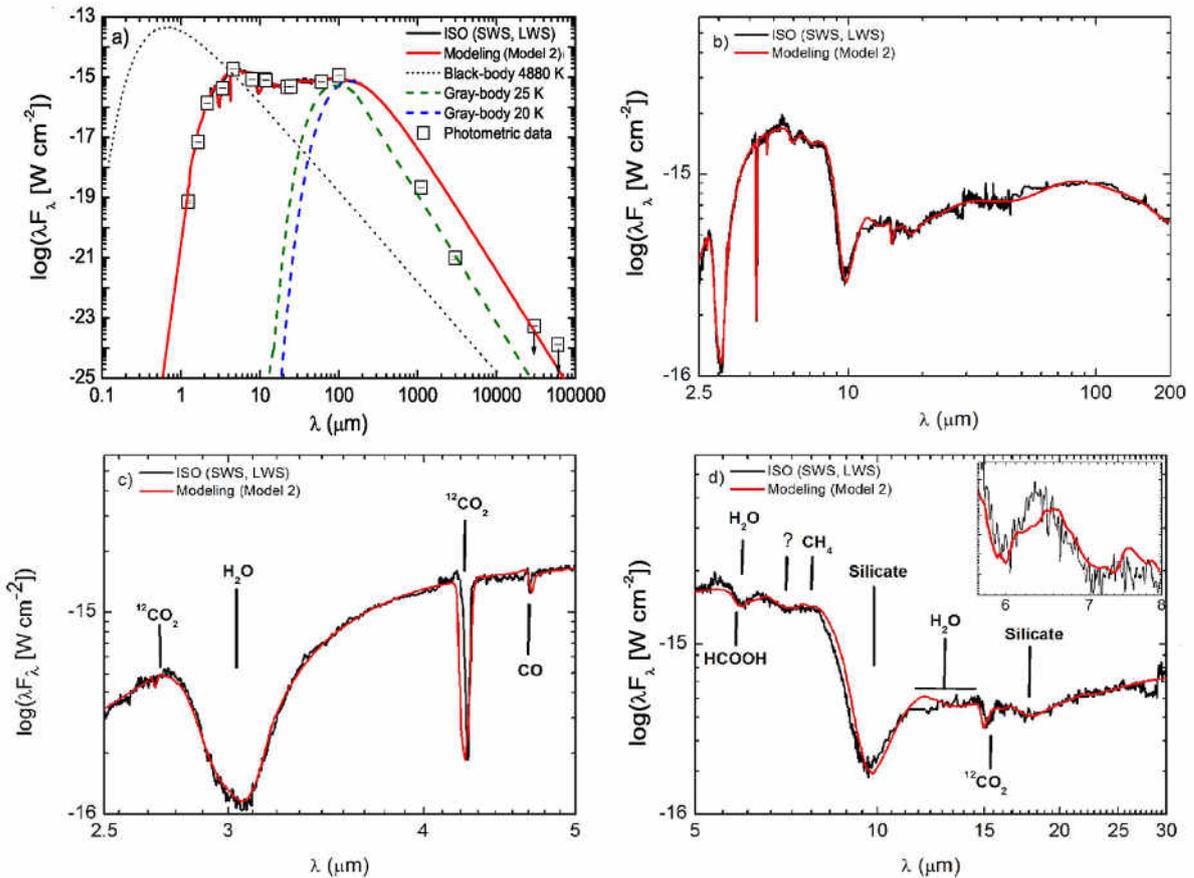


Figura 40: Melhor ajuste empregando gelos processados (Modelo 2) para o cálculo da SED de Elias 29. As linhas e símbolos são os mesmos da Figura 39. No entanto, no painel (d), o intervalo entre 5,5-8,0  $\mu\text{m}$  foi melhor ajustado pelo Modelo 2. O painel interno mostra um detalhe do ajuste nesta região do espectro. Fonte: Rocha & Pilling (2015).

As Figuras 39a e 40a, também mostra que os fluxos no infravermelho próximo estão sob forte extinção devida à poeira. Devido à diferença entre a curva de corpo negro da protoestrela sem extinção (linha pontilhada) e o corpo negro modelado (linha vermelha), a extinção calculada para a banda J em  $1,23 \mu\text{m}$  é  $A_J = 15,3 \text{ mag}$ . Assumindo que a extinção visual  $A_V$  está relacionada com  $A_J$  pela equação  $A_J = 0,282 A_V$  de (Cambrésy, et al., 2002), então a extinção visual ao longo de Elias 29 é  $A_V = 54,3 \text{ mag}$ . Dada a relação entre a extinção visual e a densidade de coluna do hidrogênio de (Bohlin, et al., 1978), então  $N_H = 1,3 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$  pode ser calculada. Este valor está de acordo com a estimativa apresentada em Boogert et al., (2000), calculada em  $N_H = 0,5 - 1,2 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$ . Do trabalho de McClure, et al., (2010), é possível calcular que  $N_H = 0,8 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$  na direção de Elias 29.

As Figuras 39b e 40b mostram com detalhe, o ajuste (linha vermelha), cobrindo 2,3-200  $\mu\text{m}$  sobre o espectro observado (linha preta). Estes painéis destacam o bom ajuste do contínuo entre o infravermelho próximo e distante. As Figuras 39c e 40c mostram as bandas de absorção dos gelos de  $\text{H}_2\text{O}$  (3,07  $\mu\text{m}$ ),  $\text{CO}_2$  (2,69  $\mu\text{m}$  and 4,26  $\mu\text{m}$ ) and  $\text{CO}$  (4,67  $\mu\text{m}$ ). Como discutido em Rocha & Pilling (2014), o perfil de absorção de gelo de  $\text{H}_2\text{O}$ , indica uma estrutura amorfa. Estudos de laboratório apresentados em Fraser, et al., (2001), mostram que o gelo de  $\text{H}_2\text{O}$  muda da estrutura amorfa para a fase cristalina à temperatura da ordem de 120 K. Isto significa que a temperatura onde o gelo de  $\text{H}_2\text{O}$  está condensado no envoltório de Elias 29, precisa ser menor que 120 K. As Figuras 39c e 40c também mostram um pequeno desvio das bandas modeladas do  $\text{CO}_2$  e  $\text{CO}$ , comparado com as observações. Isto ocorre porque nós estamos assumindo que os grãos de gelo possuem uma geometria esférica, baseada na teoria de Mie. Trabalhos de Boogert, et al., (2002a) mostram que se são assumidos grãos elipsoidais, o desvio é corrigido.

As Figuras 39d e 40d mostram que a banda do silicato é mais forte no intervalo apresentado (9,8  $\mu\text{m}$  e 18,0  $\mu\text{m}$ ). Além disso, os grãos de gelo contendo moléculas como  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{HCOOH}$  e  $\text{CH}_4$ , observados na direção de Elias 29 (Boogert, et al., 2000), também apresentam modos vibracionais nesta parte do espectro no infravermelho. No entanto, as Figuras 39d e 40d, mostram que se apenas gelos não processadas são empregados na modelagem (Modelo 1), as bandas de absorção entre 5,5-8,0  $\mu\text{m}$  não são bem ajustadas. Por outro lado, se uma fração de gelos bombardeados ( $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$ ) é adicionado ao Modelo 1, dado pelo Modelo 2, o mesmo intervalo entre 5,5-8,0  $\mu\text{m}$  é melhor ajustado. O Modelo 2 ajusta melhor as bandas em 15,15  $\mu\text{m}$  e 15,25  $\mu\text{m}$ , comparadas com o Modelo 1.

A Figura 41 apresenta, em detalhe, as evidências do processamento químico dos gelos astrofísicos em torno de Elias 29. O Painel **a** mostra os resultados dos espectros para o Modelo 1 e Modelo 2 sobre o espectro observado de Elias 29, no intervalo entre 5,5 – 8,0  $\mu\text{m}$ . Muitas moléculas tem modos vibracionais nesta faixa do espectro, e portanto, os experimentos de laboratório são muito importantes para ajudar na identificação de moléculas específicas. Primeiramente, é observada a presença de gelo de HCOOH, devido aos modos vibracionais em 5,85  $\mu\text{m}$  e 7,25  $\mu\text{m}$ . Depois, o modelo de deformação do gelo de CH<sub>4</sub> é também observado em 7,69  $\mu\text{m}$ . Além disso, algumas moléculas complexas podem estar associadas com as bandas em 6,85  $\mu\text{m}$  e 7,01  $\mu\text{m}$ . A banda em 7,01  $\mu\text{m}$  pode estar associada com a molécula de acetaldeído (CH<sub>3</sub>CHO). Estudos de Bennett, et al., (2005) mostram que esta molécula pode ser formada dentro de nuvens moleculares densas, quando algumas espécies de gelos astrofísicos interagem com os raios cósmicos de alta energia. Por outro lado, a natureza da banda em 6,85  $\mu\text{m}$  permanece sem associação conclusiva. Geralmente, esta banda é associada com o íon de amônio (NH<sub>4</sub><sup>+</sup>), baseado nos trabalhos de Schutte, et al., (2003). Porém, nós mostramos que as absorções na faixa do espectro entre 5,5-8,0  $\mu\text{m}$  podem surgir quando uma mistura contendo apenas H<sub>2</sub>O e CO<sub>2</sub> é bombardeada por raios cósmicos simulados em laboratório. Uma vez que não foram empregados componentes nitrogenados nos experimentos, a banda em 6,85  $\mu\text{m}$  não pode estar associada com o íon NH<sub>4</sub><sup>+</sup>.

Outra evidência do processamento térmico do conjunto de gelo em torno de Elias 29 pode ser observado no painel **(b)** da Figura 41. O gelo de CO<sub>2</sub>, puro e parcialmente cristalino à baixa temperatura (~ 10 K) é dividido em duas bandas estreitas em 15,15  $\mu\text{m}$  e 15,25  $\mu\text{m}$ . Por outro lado, se o gelo de CO<sub>2</sub> está preso no gelo de H<sub>2</sub>O à baixa temperatura, sua absorção aparece como único pico. No entanto, experimentos de laboratório de Ehrenfreund, et al., (1997) mostraram que se a mistura de H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub> é submetido ao aumento de temperatura, o perfil dividido em 15,15  $\mu\text{m}$  e 15,25  $\mu\text{m}$  aparece novamente. Esta dinâmica da banda do CO<sub>2</sub> tem sido associada com a segregação do gelo em espécie polar (H<sub>2</sub>O) e apolar (CO<sub>2</sub>), que inicia a 40 K. A Figura 41b, também mostra que se apenas o gelo de CO<sub>2</sub> puro e cristalino está presente, as bandas 15,15  $\mu\text{m}$  e 15,25  $\mu\text{m}$  não são bem ajustadas, enquanto se houver a segregação do gelo, o ajuste reproduz melhor as observações (Modelo 2).

A Figura 42 mostra que o regime entre 5,5-8,0  $\mu\text{m}$  pode ser melhor associado com muitas outras espécies moleculares que não contêm átomos de nitrogênio, como por exemplo éteres alifáticos (Ex. R1-OCH<sub>2</sub>-R2), CH<sub>3</sub>CHO e espécies relacionadas. O problema da associ-

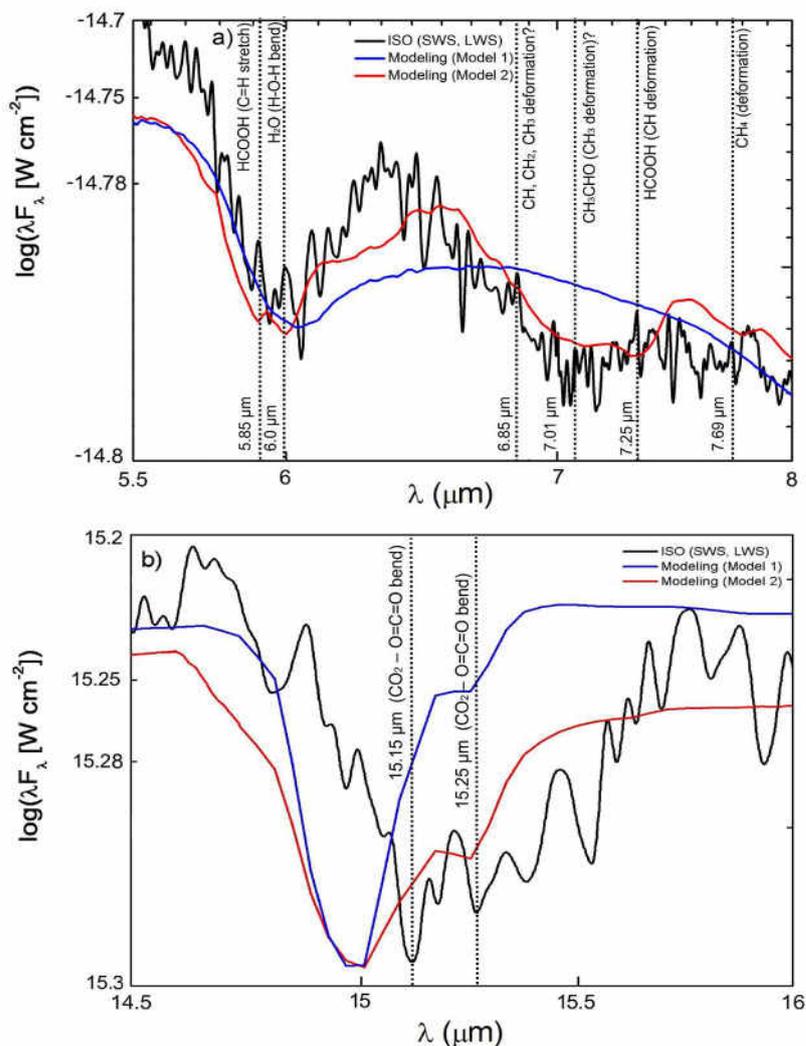


Figura 41: Evidências do processamento dos gelos em torno de Elias 29. O painel (a) mostra a presença de HCOOH e CH<sub>4</sub>. Além disso, o intervalo entre 5,5-8,0 μm pode estar associado com ligações C-H, incluindo a molécula de CH<sub>3</sub>CHO em 7,01 μm. O painel (b) mostra evidências da segregação do gelo polar e apolar. Fonte: Rocha & Pilling (2015).

ação das bandas de absorção nesta faixa do espectro com moléculas complexas é a falta de absorção em outras faixas do espectro. O trabalho de Pilling, et al., (2010), mostra que se uma mistura contendo NH<sub>3</sub> em sua composição é bombardeada por raios cósmicos análogos, a banda de absorção em 6,85 μm também aparece. No entanto, a banda associada com o íon de OCN<sup>-</sup>, também é formada deste tipo de experimento. Talvez, isto indique que a banda em 6,85 μm está associada com o íon NH<sub>4</sub><sup>+</sup> quando o íon de OCN<sup>-</sup> também é formado. Caso contrário, tais bandas devem estar associadas com os modos vibracionais de ligações C-H. Como o Modelo 2 apresenta o melhor ajuste para o espectro de Elias 29, é mostrado na Tabela 9 uma comparação entre os comprimentos de onda central entre o espectro observado e modelado, dos gelos observados na Figura 40.

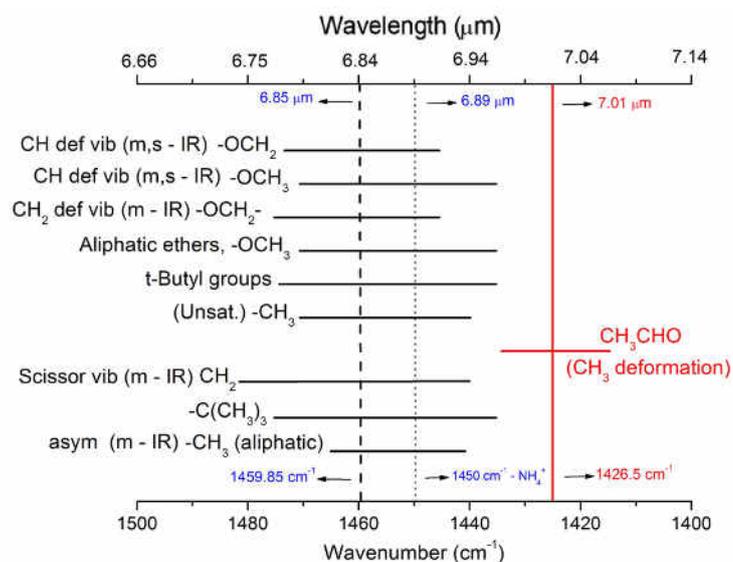


Figura 42: Diagrama mostrando espécies moleculares e alguns radicais contendo H, C e O que podem estar associados com o intervalo de absorções entre 5,5-8,0 μm. A linha vertical preta tracejada indica o comprimento de onda em 6,85 μm e a linha pontilhada preta indica o comprimento de onda central associado com o íon NH<sub>4</sub><sup>+</sup>. A linha vermelha indica o comprimento de onda associado com a deformação CH<sub>3</sub>, da molécula de acetaldeído (CH<sub>3</sub>CHO). Fonte: Rocha & Pilling (2015).

Tabela 9: Comparação entre os valores de λF<sub>λ</sub> observado e modelado para cada banda de absorção de gelo e silicato. Fonte: Rocha & Pilling (2015).

λ (μm)	k (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição	λF <sub>λ</sub> (Observado)(W cm <sup>-2</sup> ) <sup>a</sup>	λF <sub>λ</sub> (Modelado)(W cm <sup>-2</sup> ) <sup>b</sup>	Erro (%)
2.69	3708	CO <sub>2</sub>	(5.92 ± 0.05) × 10 <sup>-16</sup>	5.91 × 10 <sup>-16</sup>	0.17
3.07	3250	H <sub>2</sub> O	(1.38 ± 0.03) × 10 <sup>-16</sup>	1.37 × 10 <sup>-16</sup>	0.72
4.26	2342	CO <sub>2</sub>	(1.36 ± 0.03) × 10 <sup>-16</sup>	1.38 × 10 <sup>-16</sup>	1.45
4.67	2139	CO	(1.22 ± 0.02) × 10 <sup>-15</sup>	1.21 × 10 <sup>-15</sup>	0.81
5.83	1715	HCOOH	(1.47 ± 0.03) × 10 <sup>-15</sup>	1.44 × 10 <sup>-15</sup>	2.01
6.00	1650	H <sub>2</sub> O	(1.45 ± 0.01) × 10 <sup>-15</sup>	1.44 × 10 <sup>-15</sup>	0.70
6.85	1459	CH <sub>3</sub> def?	(1.48 ± 0.08) × 10 <sup>-15</sup>	1.47 × 10 <sup>-15</sup>	0.67
7.01	1426	CH <sub>3</sub> CHO?	(1.40 ± 0.01) × 10 <sup>-15</sup>	1.42 × 10 <sup>-15</sup>	1.41
7.67	1304	CH <sub>4</sub>	(1.38 ± 0.02) × 10 <sup>-15</sup>	1.41 × 10 <sup>-15</sup>	2.27
9.70	1031	Silicato	(2.94 ± 0.01) × 10 <sup>-15</sup>	3.00 × 10 <sup>-15</sup>	2.00
12.5	800	H <sub>2</sub> O	(5.55 ± 0.41) × 10 <sup>-16</sup>	5.70 × 10 <sup>-16</sup>	2.63
15.15	660	CO <sub>2</sub>	(4.53 ± 0.29) × 10 <sup>-16</sup>	4.52 × 10 <sup>-16</sup>	0.22
15.25	655	CO <sub>2</sub>	(4.78 ± 0.28) × 10 <sup>-16</sup>	4.87 × 10 <sup>-16</sup>	1.84
18.00	555	Silicato	(5.27 ± 0.17) × 10 <sup>-16</sup>	5.20 × 10 <sup>-16</sup>	1.30

**Nota:** O comprimento de onda e o número de onda central, como também as espécies moleculares estão apresentadas nas colunas 1, 2 e 3, respectivamente. Os valores de λF<sub>λ</sub> são mostrados nas colunas 4 e 5 e o erro percentual em 6.

<sup>a</sup> ISO (SWS e LWS) – de Graauw, et al., (1996) e Clegg, et al., (1996).

<sup>b</sup> Este trabalho

### 4.3.3 Modelo para tamanho de grãos diferentes

A Figura 43 mostra os resultados dos ajustes, empregando os parâmetros do Modelo 2 e diferentes tamanhos de grãos de poeira. O painel (a) mostra o espectro de Elias 29 entre 2,5-30,0  $\mu\text{m}$ . A linha tracejada azul é o espectro modelado considerando apenas grãos pequenos (0,005-0,25  $\mu\text{m}$ ) e a linha tracejada verde o espectro considerando grãos grandes (0,25-1,0  $\mu\text{m}$ ). O melhor ajuste entre o infravermelho próximo e distante é dado por grãos cuja distribuição de tamanhos está entre 0,25-0,70  $\mu\text{m}$ . Embora tamanhos pequenos e grandes ajustem os dados observacionais além de 8,0  $\mu\text{m}$ , eles não reproduzem as observações no

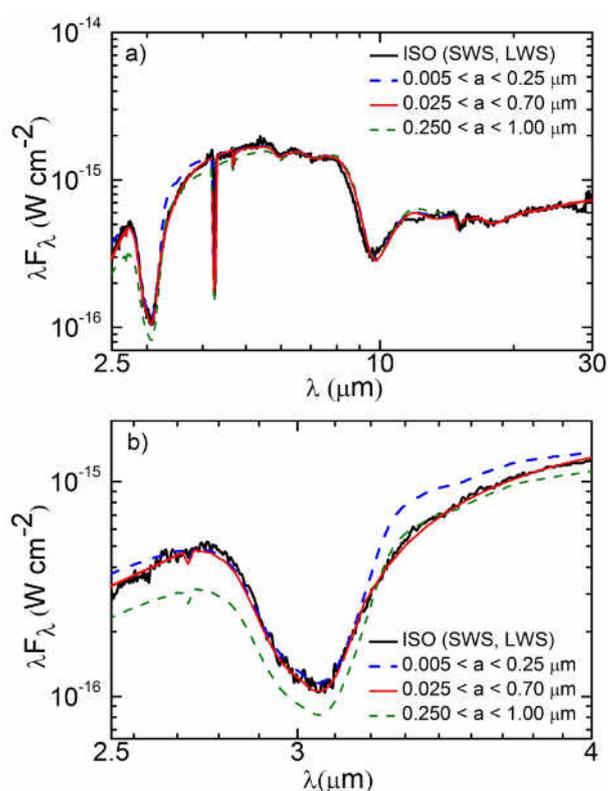


Figura 43: Modelagem aplicando diferentes tamanhos de grãos de poeira. O painel (a) mostra o espectro entre 2,5-30,0  $\mu\text{m}$ , mostrando que os grãos de poeira pequenos e grandes não podem ajustar as observações. O painel (b) mostra um detalhe do painel (a), entre 2,5-4,0  $\mu\text{m}$ . Os grãos pequenos (0,005-0,25  $\mu\text{m}$ ) ajustam apenas uma faixa do espectro observado. Grãos grandes (0,25-1,0  $\mu\text{m}$ ) não reproduzem as observações entre infravermelho próximo e médio. O melhor ajuste é dado por grãos com tamanhos entre 0,025-0,70  $\mu\text{m}$ . Fonte: Rocha & Pilling (2015).

infravermelho próximo. A região do espectro entre 2,5-4,0  $\mu\text{m}$  para diferentes tamanhos de grãos de poeira é mostrado no painel b da Figura 43, e destaca o ajuste no infravermelho próximo. A extinção causada por grãos pequenos ou grandes não reproduz o espectro observado nesta faixa espectral, enquanto que grãos de tamanho intermediário ajustam

melhor. Este resultado é interessante, porque grãos de poeira com tamanho de 0,6  $\mu\text{m}$  foram propostos por Boogert, et al., (2000) para ajustar o espectro de Elias 29, e tamanhos de 0,7  $\mu\text{m}$  foram observados em Elias 29 por Beckford, et al., (2008). Isto significa que os tamanhos da poeira em torno de Elias 29 devem ser maiores que os observados no meio interestelar, mas um pouco menores que os tamanhos “micrométricos”, observados no interior de nuvens densas Steinacker, et al., (2010).

#### 4.3.4 Abundâncias das espécies químicas

Para determinar as abundâncias médias das espécies moleculares em relação ao  $\text{H}_2$ , nós empregamos a metodologia detalhada em Boogert, et al., (2000). Em resumo, é definida uma curva contínua sobre o espectro observado de Elias 29, como simulado pelo ajuste de corpo negro. Em seguida, a equação  $\tau(\lambda) = \ln [I_0(\lambda)/I(\lambda)]$  é usada para determinar a profundidade óptica  $\tau$  em cada comprimento de onda, onde o espectro observado e o contínuo adotado são dados pelas funções  $I(\lambda)$  e  $I_0(\lambda)$ , respectivamente. Então, sabendo a profundidade óptica e a força da banda de cada absorção, a densidade de coluna dos gelos é calculada. A densidade de coluna do hidrogênio é  $N_H = 1,3 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$ , como mostrado anteriormente. Finalmente, a razão entre as densidades de coluna dos gelos e do hidrogênio determinam as abundâncias médias de cada espécie. No entanto, diferentemente do trabalho de Boogert, et al., (2000), esta metodologia foi aplicada sobre o espectro modelado, obtido com o Modelo 2, e mostrado na Figura 40. Este procedimento permite calcular as densidades de coluna dos gelos formados do processamento por raios cósmicos, mas sem o ruído presente no espectro observado. A Tabela 10 mostra os valores obtidos neste trabalho para Elias 29, comparados os encontrados em Boogert, et al., (2000).

A Figura 44 mostra um gráfico de barras, mostrando as abundâncias dos gelos empregados no Modelo 2 e as massas de poeira adotadas para o disco e o envelope. O painel a mostra as abundâncias médias dos gelos puros e processados calculados do Modelo 2 e comparadas com valores de Boogert, et al., (2000) e Lommen, et al., (2008). As abundâncias de gelos processados de  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{CO}_2$ , necessárias para modelar o espectro observado foram 14 % e 7 %, respectivamente, relativa às abundâncias totais empregadas na modelagem. Os limites maiores que os observados de Boogert, et al., (2000) são devidos às larguras das bandas presentes no Modelo 2. A Figura 44b, mostra a massa do disco e do envelope usando no Modelo 2, comparada com os valores de Lommen, et al., (2008). Os limites superiores

propostos para Elias 29 são  $M_{\text{disco}} \leq 0,007 M_{\odot}$  e  $M_{\text{envelope}} \leq 0,058 M_{\odot}$ . Os valores obtidos do Modelo 2 foram  $M_{\text{disco}} = 0,004 M_{\odot}$  e  $M_{\text{envelope}} = 0,03 M_{\odot}$ .

Tabela 10: Abundâncias médias dos gelos observados na direção da protoestrela Elias 29, calculada a partir do Modelo 2 e comparadas aos valores da literatura. Fonte: Rocha & Pilling (2015).

Gelo	Densidade colunar ( $10^{18} \text{ cm}^{-2}$ )	Abundancia relativa ao $\text{H}_2$	Abundancia relativa ao $\text{H}_2$ (literatura) <sup>a</sup>	$\lambda - \mu\text{m}$ $k - \text{cm}^{-1}$	Força da banda ( $\text{cm molécula}^{-1}$ )
$\text{H}_2\text{O}$	3.5	$2.9 \times 10^{-5}$	$2.5 \times 10^{-5}$	3.07 (3250)	$2.0 \times 10^{-16}$
$\text{CO}_2$	0.84	$7.0 \times 10^{-6}$	$5.6 \times 10^{-6}$	4.26 (2342)	$7.6 \times 10^{-17}$
$\text{CO}$	0.21	$1.9 \times 10^{-6}$	$1.7 \times 10^{-6}$	4.67 (2139)	$1.1 \times 10^{-17}$
$\text{HCOOH}$	0.022	$1.8 \times 10^{-7}$	$< 2.5 \times 10^{-7}$	5.83 (1715)	$6.7 \times 10^{-17}$
$\text{CH}_4$	0.036	$3.0 \times 10^{-7}$	$< 4.1 \times 10^{-7}$	7.67 (1304)	$7.3 \times 10^{-18}$
$\text{CH}_3\text{OH}$	$> 0.0014$	$> 1.2 \times 10^{-8}$	$< 6.3 \times 10^{-7}$	6.85 (1460)	$1.2 \times 10^{-17}$
$\text{CH}_3\text{CHO}$	$< 0.0070$	$< 5.8 \times 10^{-8}$	-	7.01 (1426)	$3.6 \times 10^{-18}$

<sup>a</sup> Boogert, et al., (2000); <sup>b</sup> Gerakines, et al., (1995); <sup>c</sup> Schutte, et al., (1999); <sup>d</sup> Kerkhof, et al., (1999);

<sup>e</sup> Assumindo ser a deformação  $\text{CH}_3$  do  $\text{CH}_3\text{OH}$  em  $6,85 \mu\text{m}$ ;

<sup>f</sup> Bennet et al. (2005) – Assumindo ser a molécula  $\text{CH}_3\text{CHO}$ .

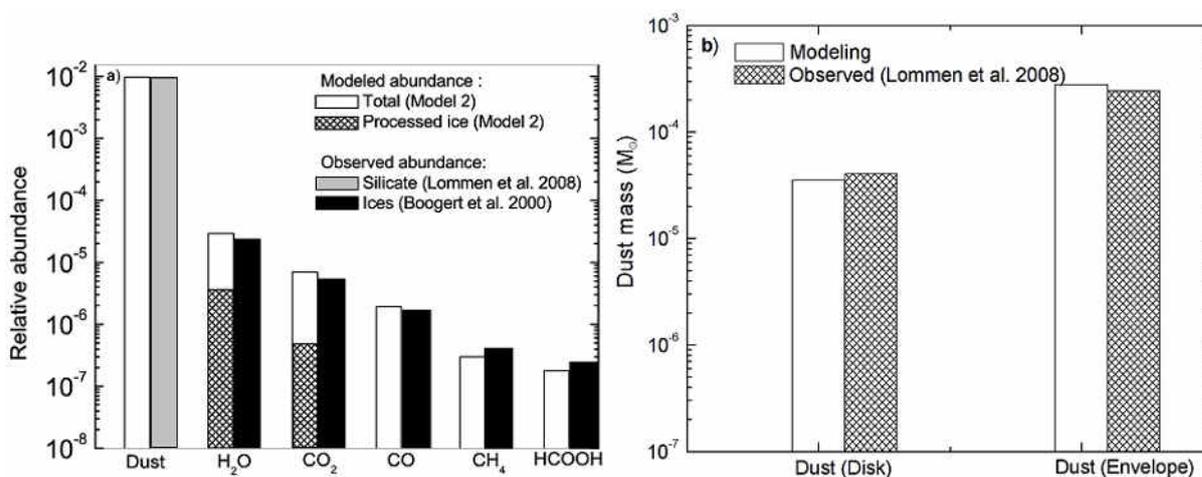


Figura 44: Abundâncias de gelos e massa de poeira do disco e envelope usados no Modelo 2. (a) Abundância relativa dos gelos obtidos neste trabalho e comparados com valores da literatura. As barras brancas representam as abundâncias totais relativa ao  $\text{H}_2$ , para ajustar o espectro de Elias 29, assumindo a razão poeira-gás igual a 0,01. A barra cinza é a abundância da poeira obtida de Lommen, et al., (2008). As barras hachuradas representam as as abundâncias de gelos processados pelos raios cósmicos, empregadas no Modelo 2. As barras pretas mostram as abundâncias de gelos obtidas de Boogert, et al., (2000) para Elias 29. (b) Massa da poeira usada no Modelo 2 (barras brancas) para o disco e envelope, comparadas com os dados de Lommen, et al., (2008) (barras hachuradas). Fonte: Rocha & Pilling (2015).

### 4.3.5 Perfis de densidade e temperatura

A Figura 45 apresentam os perfis de densidade e temperatura para o Modelo 2. O painel **a** enfatiza a estrutura do disco e o painel **b** destaca o envelope. Tais parâmetros foram necessários para determinar a melhor posição dos gelos na modelagem de Elias 29. As linhas contínuas nas Figuras 45a e 45b indicam os contornos de densidade de  $\text{H}_2$  em  $\text{cm}^{-3}$ . A Figura 45a mostra que a densidade do disco no meio do plano atinge valores maiores que  $10^7 \text{ cm}^{-3}$ , enquanto que na Figura 45b, a densidade numérica é de  $140 \text{ cm}^{-3}$ . As linhas tracejadas representam as *snow lines*, que são limites que definem regiões em torno da protoestrela, onde moléculas puras sobrevivem na fase sólida. Os painéis internos na Figura 45a mostra os detalhes da *snow line* dos gelos de  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{CO}_2$ .

Os mapas de temperatura calculados do Modelo 2, usando o código RADMC-3D, permite concluir que gelos rico em água estão presentes no disco de Elias 29, em distâncias superiores a 8 AU da fonte central, e no envelope além de 14 UA. Tais diferenças são devidas às distribuições de densidade do disco e do envelope. Por outro lado, gelos mais voláteis, como o  $\text{CO}_2$ , estão presentes no disco e no envelope em distâncias superiores a 20 UA e 80 UA, respectivamente. No entanto, o gelo de CO puro apenas sobrevive na fase sólida em regiões específicas do envelope, devido sua baixa temperatura de sublimação. Devido à inclinação do disco de Elias 29 igual a  $60^\circ$ , a Figura 45b permite concluir que a maior parte do CO puro, observado ao longo de Elias 29, deve estar presente nas nuvens frias de frente. Isto confirma as observações de CO na fase gasosa, como mostrado em Boogert, et al., (2000). Embora tenha sido considerado neste trabalho, que todo o gelo de CO observado ao longo de Elias 29 está preso no gelo de  $\text{H}_2\text{O}$ , o cenário mais realista deve considerar que nuvens de frente deve conter uma fração considerável de gelo de CO puro.

Existem evidências observacionais na literatura de que as *snow lines* se movem para longe da fonte central de radiação, ao longo da evolução da protoestrela. O trabalho de Zhang, et al., (2013) relata diferentes abundâncias de  $\text{H}_2\text{O}$  no disco protoplanetário TW HYA. Os autores observaram que entre 0,5-4,0 UA, as abundâncias eram calculadas em  $10^{-6}$  em relação ao  $\text{H}_2$ , enquanto que distâncias superiores a 4 UA, o valor era de  $10^{-4}$  relativo ao  $\text{H}_2$ . Este dado observacional sugere que com o tempo, os discos protoestelares como detectado Elias 29, possuem um interior mais árido, em quando que o reservatório de gelos ficam nas partes externas do disco.

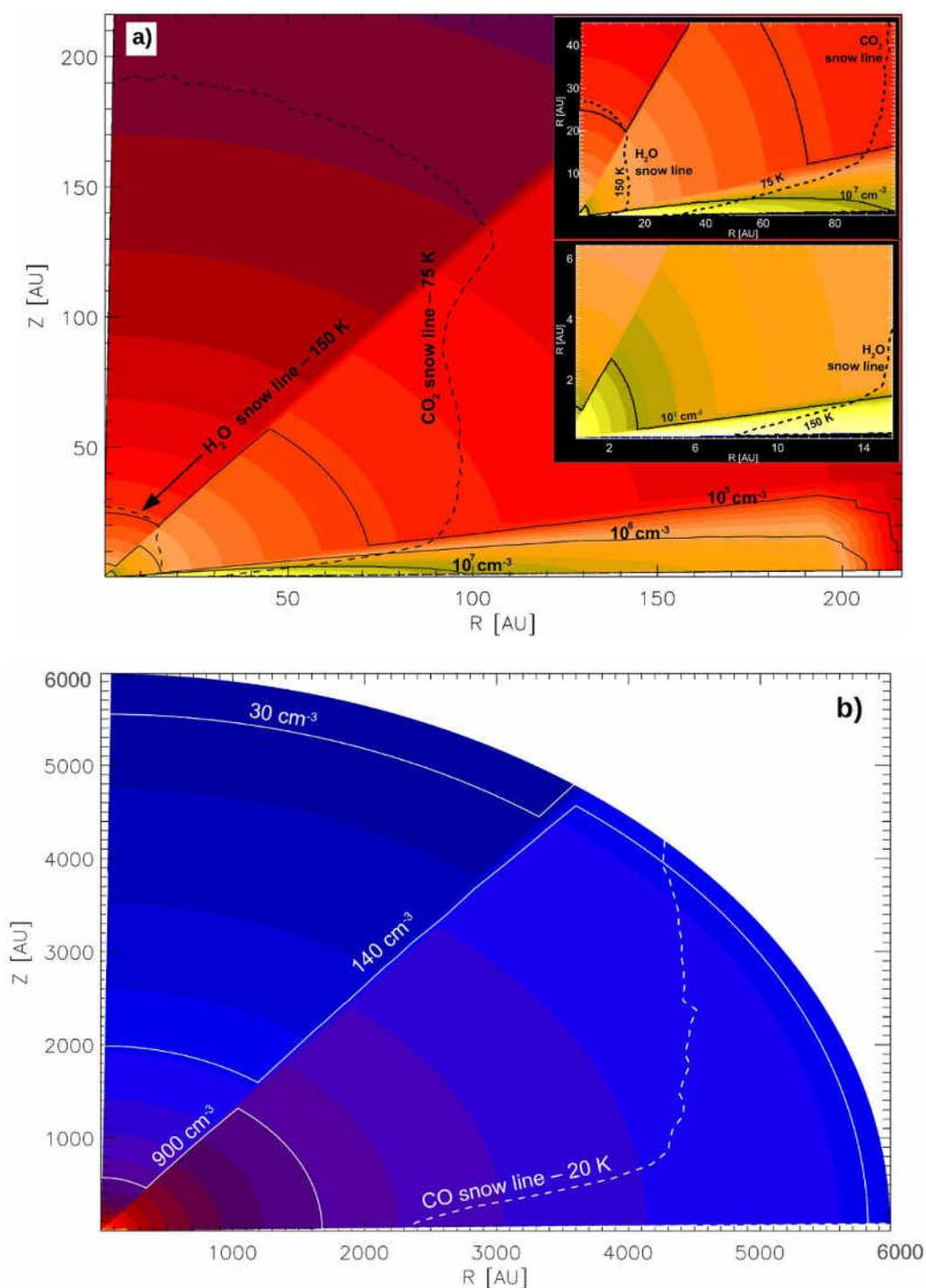


Figura 45: Perfil da densidade de H<sub>2</sub> (linha contínua) em cm<sup>-3</sup> e temperaturas selecionadas em K (linhas tracejadas) em torno da protoestrela Elias 29. O código de cores indicam as mudanças na densidade. (a) Região limitada a 210 UA para destacar o disco de Elias 29. As duas linhas tracejadas indicam a temperatura de 150 K e 75 K, respectivamente. Os painéis internos mostram com detalhe das regiões do disco próximo ao objeto central. (b) Região limitada a 6000 UA para destacar o envelope. A densidade desta região é baixa comparada ao disco protoestelar, e as linhas tracejadas indicam a temperatura de sublimação do CO a 20 K. Fonte: Rocha & Pilling (2015).

### 4.3.6 Imagens no infravermelho

Nesta seção, nós apresentamos as imagens no infravermelho de Elias 29, modelada com o código RADMC-3D, assumindo um cenário mais realista (Modelo 2). As imagens foram geradas usando  $10^9$  pacotes de fótons para rodar a simulação de Monte Carlo. Depois, as intensidades médias sobre a largura  $\Delta\lambda$  de cada filtro foram calculadas. A comparação entre as imagens modeladas de Elias 29 e as imagens observadas na banda K por Huélamo, et al., (2006) estão mostradas na Figura 46. O campo de visão FOV =  $1' \times 1'$  está mostrado nas Figuras 46a (observado) e 46b (modelado). A diferença de brilho entre a observação e a modelagem é devido à presença de fontes externas de iluminação, vindo de estrelas do tipo

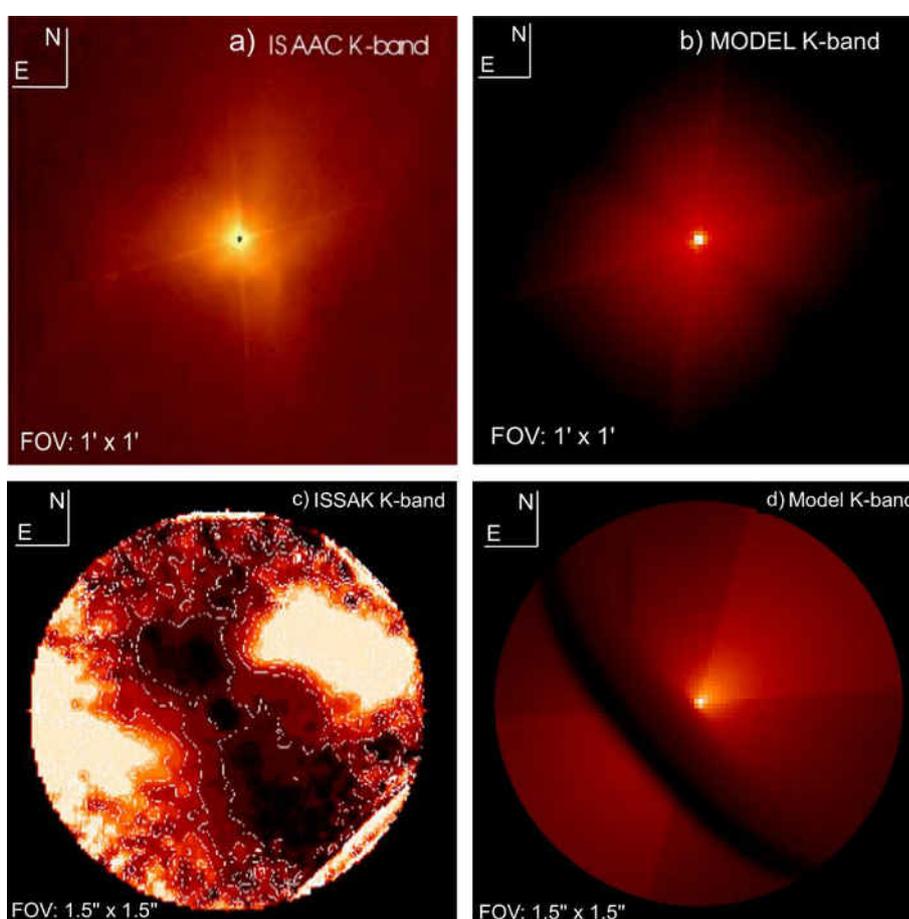


Figura 46: Comparação entre as imagens observadas e modeladas de Elias 29 no infravermelho com o mesmo campo de visão FOV (*Field of View*). **(a)** Estrutura de Elias 29 no campo de visão FOV =  $1' \times 1'$  na banda K do telescópio ISAAC (*Infrared Spectrometer And Array Camera*), modificada de Huélamo, et al., (2006). **(b)** Imagem modelada de Elias 29 na banda K, assumindo os parâmetros do Modelo 2. **(c)** Imagem de polarização normalizada na banda K, destacando o disco de Elias 29. **(d)** Imagem modelada calculada do Modelo 2 sem polarização. Fonte: Rocha & Pilling (2015).

espectral B, em torno de Elias 29. O trabalho de Whitney, et al., (2013) mostra que a fonte de iluminação externa pode dominar se a fonte central é tem pouca luminosidade, e/ou o raio externo do envelope é muito grande. A Figura 45b, mostra que a região próxima à borda do envelope de Elias 29 é fria, e, portanto apresenta pouco brilho no infravermelho próximo. Por outro lado, a presença de fontes externas de iluminação podem contribuir para o aumento do brilho na banda K. Além disso, as Figuras 46c e 46d destacam a estrutura dos disco de Elias 29 em um campo de visão FOV = 1,5'' x 1,5''. A imagem modelada leva a concluir que a estrutura escura vista na imagem observada é devido à superfície do disco de Elias 29.

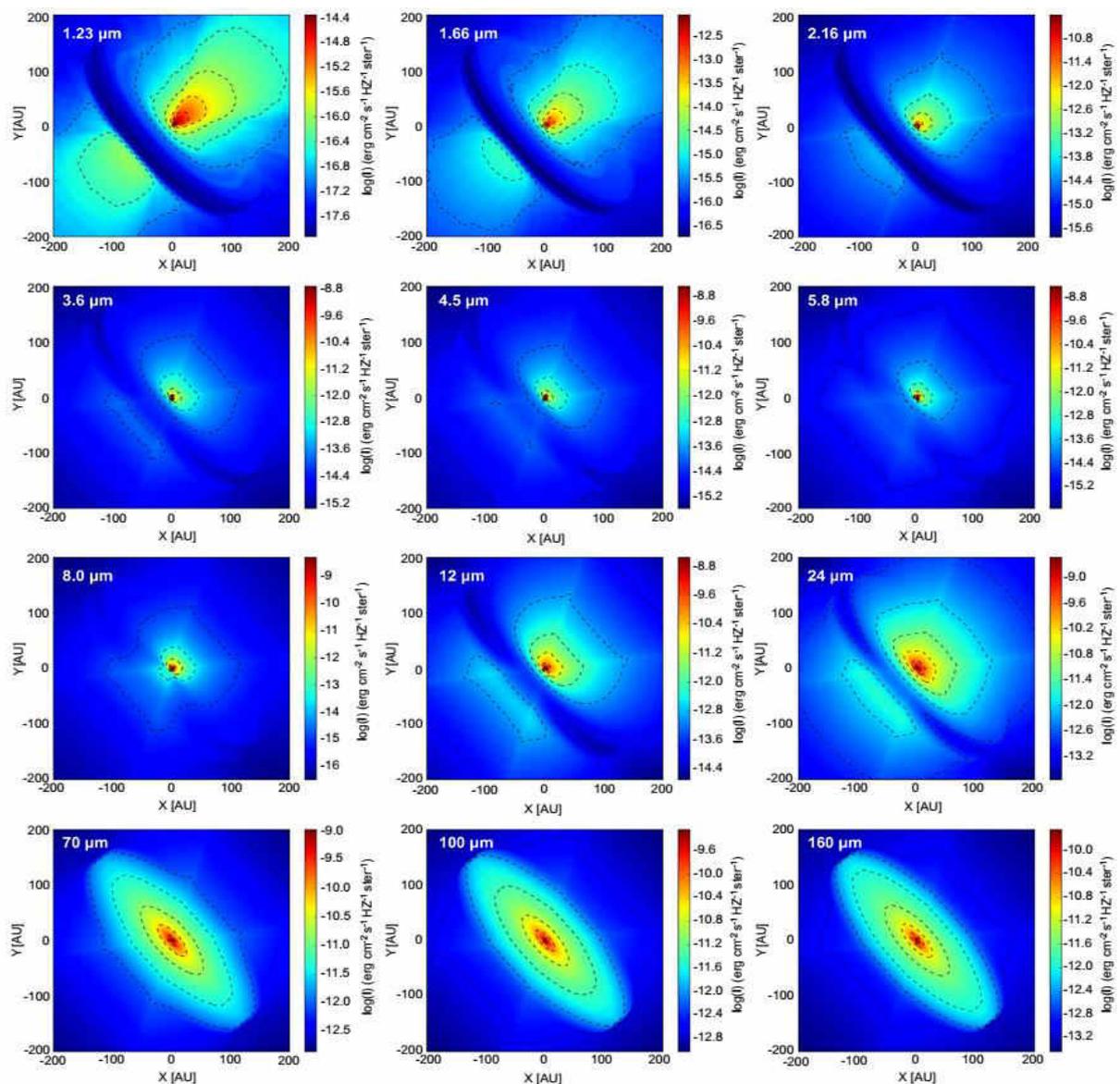


Figura 47: Imagens resolvidas de Elias 29 no infravermelho, destacando o disco, feitas com o código RADMC-3D. Os painéis apresentam as intensidade em  $\text{ergs cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{Hz}^{-1} \text{sr}^{-1}$  em diferentes comprimentos de onda e os contornos representam os valores da barra de cor lateral. Cada painel tem um campo de visão de 3,3'' x 3,3'' ou 400 x 400 UA. O ângulo de inclinação do disco ( $60^\circ$ ) é melhor observado em comprimentos de onda mais curtos, devido à extinção causada pelo disco. Fonte: Rocha & Pilling (2015).

As Figuras 47 e 48, mostram as imagens no infravermelho de Elias 29, destacando o disco e o envelope. As intensidades estão em escala logarítmica e os contornos representam os limites de intensidades observadas nas barras de cor laterais. Os painéis da Figura 47 tem um campo de visão de  $3,3'' \times 3,3''$  ou  $400 \times 400$  UA, enquanto que os painéis da Figura 48 apresentam o campo de visão  $100'' \times 100''$  ou  $1200 \times 1200$  UA, assumindo a distância de 120 pc.

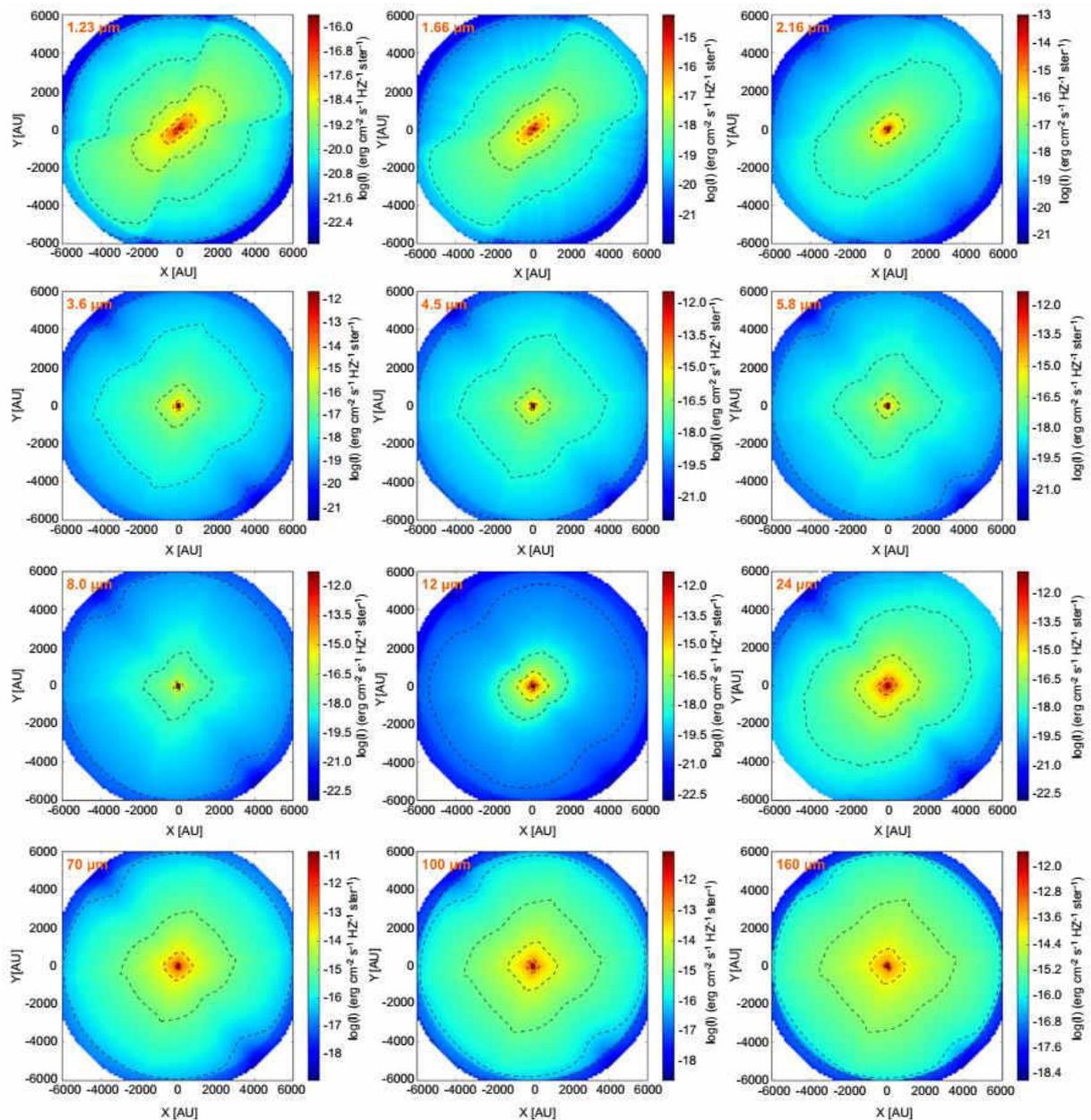


Figura 48: Imagens resolvidas de Elias 29 no infravermelho, destacando o envelope, feitas com o código RADMC-3D. Os painéis apresentam as intensidade em  $\text{ergs cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{Hz}^{-1} \text{sr}^{-1}$  em diferentes comprimentos de onda e os contornos representam os valores da barra de cor lateral. Cada painel tem um campo de visão de  $100'' \times 100''$  ou  $12000 \times 12000$  UA. Fonte: Rocha & Pilling (2015).

# Conclusões e perspectivas

---

*“The mind that opens to a new idea never returns to its original size”*

*Albert Einstein*

Neste trabalho, abordamos a questão da química de gelos astrofísicos provocados pelo processamento energético de íons pesados simulados em laboratório, empregando os resultados na modelagem computacional da protoestrela Elias 29. Dessa forma, esta tese foi o primeiro trabalho da literatura a empregar dados de gelos processados energeticamente em laboratório, em modelos de transferência radiativa para reproduzir a evolução química dos gelos observados no espectro de protoestrelas de baixa massa. Para esse fim, apresentamos uma metodologia que agrega técnicas e dados observacionais, técnicas e dados experimentais, bem como modelagem computacional, para chegar a conclusões significativas no entendimento do cenário mais realista de processamento dos gelos astrofísicos no meio interestelar.

Em termos quantitativos, os principais resultados dessa tese foram:

1. Um código computacional (NKABS) de acesso livre para calcular os índices de refração complexos no infravermelho de gelos astrofísicos, diretamente a partir de dados de absorvância obtidos em laboratório;
2. Um banco de dados com 67 valores de índice de refração complexos no intervalo de 2,0 – 25  $\mu\text{m}$  (5000 – 500  $\text{cm}^{-1}$ ), sendo 28 de gelos virgens e 39 de gelos bombardeados por íons pesados de  $^{58}\text{Ni}$  e  $^{16}\text{O}$ , onde a grande maioria deles são inéditos e que poderão ser usados por outros grupos de pesquisa;
3. Um banco de dados com 39 valores de opacidade de absorção, de opacidade de espalhamento e albedos (totalizando 117 valores) no infravermelho, entre 2,0 – 25  $\mu\text{m}$  (5000 – 500  $\text{cm}^{-1}$ ) dos gelos bombardeados por íons energéticos de várias energias;
4. Modelagem computacional, utilizando um código que calcula a transferência radiativa (RADMC-3D) em conjunto com dados de gelos processados em laboratório, do objeto estelar jovem (Elias 29). Nesse estudo foi reproduzido com sucesso, a banda de absorção centrada em 6,85  $\mu\text{m}$ , modelada pela primeira vez na literatura, no espectro de uma protoestrela.

Além dos resultados quantitativos obtidos ao longo deste trabalho, pudemos concluir que dados de laboratório que simulam os efeitos da radiação ionizante sobre gelos astrofísicos são fundamentais para fazer aproximações mais realistas no estudo da evolução química do material em torno de estrelas jovens. Nesse trabalho, mostramos que os efeitos da química produzida por raios cósmicos é fundamental para explicar algumas bandas de absorção observadas na protoestrela Elias 29. Entretanto, essa conclusão levanta alguns questionamentos, que precisam ser investigados, como por exemplo: (1) O modelo de abundância químicas (gelos virgens e processados) empregado para Elias 29 é válido para outras protoestrelas de baixa massa? (2) Se outra fonte ionizante, como UV e raios-X fosse empregado para processar os gelos de Elias 29, a modelagem seria tão eficiente quanto foi nesse objeto? (3) Será que um modelo de abundância química híbrido, ou seja, gelos processados por raios cósmicos e fótons energéticos, reproduziria melhor os espectros de

protoestrelas de baixa massa? (4) Um modelo híbrido é melhor correlacionado para protoestrelas de alta massa do que de baixa massa?

O código NKABS se mostrou uma ferramenta importante no cálculo dos índices de refração complexos a partir de dados experimentais de absorbância. Além disso, concluímos que novas tabelas de opacidade de grão não homogêneos precisam ser feitas, para que os dados apresentados por Ossenkopf & Henning (1994), sejam atualizados. A necessidade de dados mais realistas do que os calculados por Ossenkopf & Henning (1994) é devido ao fato de que a resolução dos espectrógrafos à bordo dos telescópios espaciais têm melhorado à cada novo projeto. No caso do JWT (*James Webb Telescope*), os espectrógrafos NIRSpec (*Near-Infrared Spectrograph*) e MIRI (Mid-Infrared Instrument), cobrirão 0,6 – 5,0  $\mu\text{m}$  e 5,0 – 28,3  $\mu\text{m}$ , respectivamente. O poder de resolução do NIRSpec poderá chegar  $R = 25.000$  e do MIRI,  $R = 3.000$ <sup>19</sup>. O intervalo espectral coberto é de grande interesse astroquímico, uma vez que muitas bandas de absorção aparecem nessa região do espectro. Dessa forma, o uso de opacidades que tenham informações da evolução química dos gelos se torna fundamental.

Concluimos também que o albedo dos gelos muda com a fluência do feixe de íons sobre a amostra de gelo. Embora esse resultado, a princípio, esteja relacionado com a produção e destruição de moléculas orgânicas, mais estudos desse comportamento deve ser feito para investigar os reais efeitos desse fenômeno. Em alguns casos o albedo aumentou com a fluência e em outros casos ele diminuiu. Esse tipo de comportamento provavelmente está associado com a química inicial do gelo (se mais rica em orgânicos ou não inicialmente). Estudos futuros irão ajudar a elucidar essa questão.

Por fim, concluímos que há evidências sólidas do processamento dos gelos em Elias 29 por fontes ionizantes, ao contrário do proposto por Boogert et al., (2000). As evidências desse processamento são dadas pela presença de moléculas de HCOOH, CH<sub>4</sub>, CH<sub>3</sub>OH e CH<sub>3</sub>CHO, que são moléculas complexas formadas a partir do processamento de gelos astrofísicos. Além disso, podemos afirmar que em algumas situações, a banda em 6,85  $\mu\text{m}$  pode estar associada a alguma ligação C–H, ao contrário do proposto por Schutte & Khanna (2003), cuja associação deveria ser ao íon NH<sub>4</sub><sup>+</sup>. Nossa conclusão está fundamentada no

<sup>19</sup> <http://jwst.nasa.gov/nirspec.html>;  
<http://jwst.nasa.gov/miri.html>;  
[http://www2.keck.hawaii.edu/koa/public/nspec/nirspec\\_data\\_description.html](http://www2.keck.hawaii.edu/koa/public/nspec/nirspec_data_description.html);  
<http://www.stsci.edu/jwst/instruments/miri>

método experimental para bombardear a o gelo de  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  empregado na modelagem de Elias 29, obtido de Pilling et al. 2010b. Nos experimentos a banda em  $6,85 \mu\text{m}$  surgiu, mesmo sem a presença de espécies nitrogenadas que estão associadas à formação do amônio.

Como perspectivas futuras, pretendemos ampliar os catálogos de índice de refração, opacidades e albedos dos gelos, porém processados por outras fontes ionizantes como raios-X, UV e elétrons, em laboratórios como o LNLS e LASA. Com esses novos dados, iremos simular o espectro da protoestrela de alta massa W33a, a fim de entender qual cenário de processamento energético dos gelos é mais adequado nesse tipo de objeto. Posteriormente, poderá ser criado um extenso catálogo de espectros modelados contendo grãos de poeira não homogêneos e gelos processados, para comparação com espectros observados com novos telescópios espaciais como o JWST.

Além disso, pretendemos determinar as forças das bandas de diferentes ligações moleculares de gelos astrofísicos obtidos em várias fluências. Esse tipo de resultado é importante para determinar com maior precisão as abundâncias de gelos na direção de objetos estelares jovens. Atualmente as abundâncias são calculadas usando valores de forças da banda de gelos puros e não processados, o que pode estar subestimando ou superestimando as abundâncias reais. As diferenças nas forças das bandas são esperadas porque a força das ligações são influenciadas pelo ambiente químico, como tem sido mostrado no trabalho de Bonfim & Pilling (em preparação).

# **Apêndice 1**

## **ARTIGO 1: CÓDIGO NKABS E CATÁLOGO DE GELOS VIRGENS**

---



Contents lists available at ScienceDirect

# Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/saa](http://www.elsevier.com/locate/saa)

## Determination of optical constants $n$ and $k$ of thin films from absorbance data using Kramers–Kronig relationship



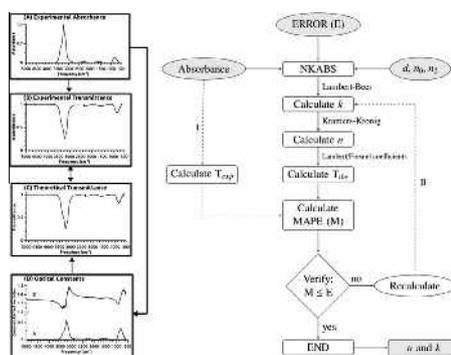
W.R.M. Rocha, S. Pilling\*

Universidade do Vale do Paraíba, São José dos Campos, SP, Brazil

### HIGHLIGHTS

- We report a new code (NKABS) to determine the optical constants for thin films.
- The NKABS code works directly from laboratory absorbance spectra in the infrared.
- It is very fast, accurate and free to download.
- Its can be applied on samples that suffered radiation or thermal processing.
- This code is also useful for simulation of space environments containing dust grains.

### GRAPHICAL ABSTRACT



### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 20 September 2013

Received in revised form 15 December 2013

Accepted 16 December 2013

Available online 26 December 2013

#### Keywords:

Optical constants  
Kramers–Kronig  
Thin films

### ABSTRACT

We present a code, called NKABS, to determine optical constants (complex refractive index) of thin films directly from the absorbance data in the infrared. The code is written in the Python language, which is more accurate and faster than previous methods in the literature. For solving the Kramers–Kronig relationship, we used the Maclaurin's methodology. Unlike other codes, which found convergence in 30–40 iterations, the NKABS reach the convergence in just 4 or 5 iterations. Additionally, to evaluate the error, this code calculates the MAPE (Mean Absolute Percentage Error) and the chi-square  $\chi^2$ . The typical MAPE error obtained using NKABS is less than  $1 \times 10^{-3}\%$ .

To illustrate the functionality of this code, we calculate the optical constants in the infrared spectral region of 28 different samples of astrophysical interest at different temperatures (10–300 K), which simulates molecules in space environments, mostly the ones called astrophysical ices. The samples were obtained from the condensation of pure gases (e.g. CO, CO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub>), from the sublimation in vacuum of pure liquids (e.g. water, acetone, acetonitrile, acetic acid, formic acid, ethanol and methanol) and from mixtures of different species (e.g. H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O:CO:NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub>:CH<sub>4</sub>). Additionally films of solid biomolecules samples of astrochemistry/astrobiology interest (e.g. glycine, adenine) were probed.

The code and the data-base obtained here are available on-line. The NKABS can also be employed to calculate refractive index of processed samples (by heating or radiation). Such data and the refractive index of virgin samples are required as input in several astrophysical models that calculate the radiative transfer in dusty astrophysical environments such as protoplanetary disks and circumstellar environments as well as dense molecular clouds.

© 2013 Elsevier B.V. All rights reserved.

### Introduction

The determination of optical constants or complex refractive index, defined by  $\mathbf{m} = n + ik$ , is a key parameter in several research fields from material science and physical chemistry to astronomy.

\* Corresponding author. Tel.: +55 12992078050.

E-mail addresses: [willrobson88@hotmail.com](mailto:willrobson88@hotmail.com) (W.R.M. Rocha), [sergiopilling@yahoo.com.br](mailto:sergiopilling@yahoo.com.br) (S. Pilling).

In astronomy, for example, the challenge is to understand how the electromagnetic radiation interacts with the samples, in both gaseous or solid phases (in some cases, the frozen condensed phases are called astrophysical ices), which are present in several astrophysical environments such as in the interstellar medium and protostellar and circumstellar environments. The thickness of the ices found in the interstellar medium is around tens of nanometers, somewhere also reaching a micron size. Such ices can be studied in the laboratory by analyzing thin films produced from the condensation of gaseous samples on cold solid substrates.

As described by [19,3,7,4,1], the procedure for obtaining the optical constants is not a trivial task. The most employed method is the Kramers–Kronig (KK) relationship, which relates the real part  $n$  with complex part  $k$  of the complex refractive index  $\mathbf{m}$ . In this work, we present a free code called NKABS (acronym for “N and K determination from ABSorbance data”), developed in Python® programming language, available in <http://www.python.org/>. It calculates the optical constants in the infrared range directly from the absorbance data of thin films obtained in the laboratory. In addition, the code may be employed to calculate the optical constants of samples that have been processed by radiation. To

illustrate the functionality of this code, we calculate the optical constants of several samples with astrophysical interest at different temperatures, which simulates samples detected or (in some cases predicted) in space environments. For obtaining the refractive index of the thin films, the code requires the sample thickness  $d$ , the standard refractive index in the visible range  $n_0$ , the refractive index of the substrate  $n_2$ , and also the absorbance data in the infrared. The  $n_0$  contains the contribution given by the electronic transitions of the sample in the infrared. As a first approximation, this value can be obtained from the refractive index in the red region of visible light (around 670 nm). In this methodology, the calculation error is given in terms of the Mean Absolute Percentage Error (MAPE) and by the chi-square function  $\chi^2$ .

In section Materials and methods, we briefly discuss the determination of absorbance data from laboratory measurements. The theoretical procedure employed in the determination of optical constants and the Execution flowchart of NKABS code is given in section Theory and calculation. The next section contains the results from the optical constant calculations of the selected samples and the discussion about the error involved in the calculations. The conclusion is given in last section.

**Table 1**

Data set of the samples used in this work. The first and second columns we show a label for identification of each sample and its composition. In the third and fourth columns we present the input parameters used by NKABS code for calculation of the optical constants. The fifth and sixth columns are shown the temperatures reach in each experiment, as well as, the substrate on which were deposited the samples. In the seventh and eighth columns are present the  $\chi^2$  and MAPE errors calculated by NKABS code. Lastly the ninth column says the laboratory in which were performed the experiments.

Label	Sample	$n_0^a$	Thickness ( $\mu\text{m}$ )	Temp. (K)	Substrate	$\chi^2$	MAPE (%)	Laboratory
G1	CO	1.30	0.15	10	CsI	$1.0 \times 10^{-6}$	$6.0 \times 10^{-4}$	– <sup>b</sup>
G2	CO <sub>2</sub>	1.22	0.4	13	CsI	$5.9 \times 10^{-5}$	$7.0 \times 10^{-4}$	GANIL <sup>c</sup>
G3	NH <sub>3</sub>	1.35	0.3	14	CsI	$8.7 \times 10^{-5}$	$8.0 \times 10^{-4}$	GANIL <sup>d</sup>
G4	SO <sub>2</sub>	1.30	1.3	12	ZnSe	$4.5 \times 10^{-6}$	$4.0 \times 10^{-4}$	LASA
S1	$\alpha$ -Glycine	1.30	~2.0	300	CaF <sub>2</sub>	$1.9 \times 10^{-7}$	$2.6 \times 10^{-4}$	LNLS <sup>e</sup>
S2	$\alpha$ -Glycine	1.30	1.5	14	CsI	$1.9 \times 10^{-7}$	$3.0 \times 10^{-4}$	GANIL <sup>f</sup>
S3	$\beta$ -Glycine	1.30	0.5	300	KBr	$1.2 \times 10^{-7}$	$2.8 \times 10^{-4}$	PUC-Rio <sup>g</sup>
S4	DL-Proline	1.30	~2.0	300	CaF <sub>2</sub>	$6.0 \times 10^{-8}$	$2.8 \times 10^{-4}$	LNLS <sup>e</sup>
S5	DL-Valine	1.30	~2.0	300	CaF <sub>2</sub>	$1.0 \times 10^{-6}$	$7.8 \times 10^{-4}$	LNLS <sup>e</sup>
S6	Adenine	1.30	~2.0	300	CaF <sub>2</sub>	$1.7 \times 10^{-7}$	$3.2 \times 10^{-4}$	LNLS <sup>e</sup>
S7	Uracil	1.30	~2.0	300	CaF <sub>2</sub>	$5.5 \times 10^{-7}$	$2.7 \times 10^{-4}$	LNLS <sup>e</sup>
L1	H <sub>2</sub> O (Amorphous)	1.32	0.4	12	ZnSe	$8.7 \times 10^{-8}$	$3.0 \times 10^{-4}$	LASA
L2	H <sub>2</sub> O (Crystalline)	1.35	1.5	165	CsI	$8.5 \times 10^{-7}$	$4.0 \times 10^{-4}$	GANIL
L3	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CO	1.30	0.8	12	ZnSe	$2.3 \times 10^{-5}$	$6.0 \times 10^{-4}$	LASA
L4	(CH <sub>3</sub> )CN	1.31	0.5	12	ZnSe	$8.0 \times 10^{-8}$	$2.2 \times 10^{-4}$	LASA
L5	(CH <sub>3</sub> )COOH	1.34	0.3	12	ZnSe	$1.4 \times 10^{-5}$	$6.0 \times 10^{-4}$	LASA
L6	HCOOH	1.30	0.6	12	ZnSe	$3.7 \times 10^{-5}$	$7.3 \times 10^{-4}$	LASA
L7	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	1.30	0.5	12	ZnSe	$2.3 \times 10^{-6}$	$8.0 \times 10^{-4}$	LASA
L8	(CH <sub>3</sub> )OH	1.35	0.4	12	ZnSe	$3.1 \times 10^{-7}$	$3.0 \times 10^{-4}$	LASA
L9	c-C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	1.28	1.8	13	CsI	$2.2 \times 10^{-5}$	$2.0 \times 10^{-4}$	GANIL <sup>d</sup>
M1	N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> (19:1) (Titan)	1.20	1.0	12	ZnSe	$1.8 \times 10^{-7}$	$2.8 \times 10^{-4}$	LASA
M2	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> (9:1)	1.32	0.4	13	CsI	$1.0 \times 10^{-7}$	$1.5 \times 10^{-4}$	GANIL <sup>c</sup>
M3	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> (1:1)	1.27	0.6	13	CsI	$4.0 \times 10^{-7}$	$1.7 \times 10^{-4}$	GANIL <sup>c</sup>
M4	H <sub>2</sub> O:HCOOH (1:1)	1.32	7.7	13	KBr	$3.0 \times 10^{-6}$	$1.4 \times 10^{-3}$	GANIL <sup>h</sup>
M5	H <sub>2</sub> O:NH <sub>3</sub> :CO (1:0.5:0.4)	1.32	1.7	13	CsI	$2.0 \times 10^{-7}$	$2.3 \times 10^{-4}$	GANIL <sup>i</sup>
M6	H <sub>2</sub> O:NH <sub>3</sub> :c-C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> (1:0.3:0.7)	1.30	1.7	14	CsI	$7.0 \times 10^{-7}$	$5.0 \times 10^{-4}$	GANIL <sup>d</sup>
M7	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> :NH <sub>3</sub> :CH <sub>4</sub> (9:1:1:1) (Enceladus)	1.32	1.5	80	ZnSe	$1.6 \times 10^{-7}$	$4.6 \times 10^{-4}$	LASA
M8	H <sub>2</sub> O:CO <sub>2</sub> :NH <sub>3</sub> :SO <sub>2</sub> (10:1:1:1) (Europa)	1.32	1.2	90	ZnSe	$1.0 \times 10^{-7}$	$3.3 \times 10^{-4}$	LASA

<sup>a</sup> For **G#** and **L#** [7,9] – when available; For **M#** (weighted average considering  $n_0$  of each specie); For **S#** (was considered  $n_0 = 1.30$ ).

<sup>b</sup> [4].

<sup>c</sup> [16].

<sup>d</sup> [11].

<sup>e</sup> [12].

<sup>f</sup> [17].

<sup>g</sup> [14].

<sup>h</sup> [2].

<sup>i</sup> [15].

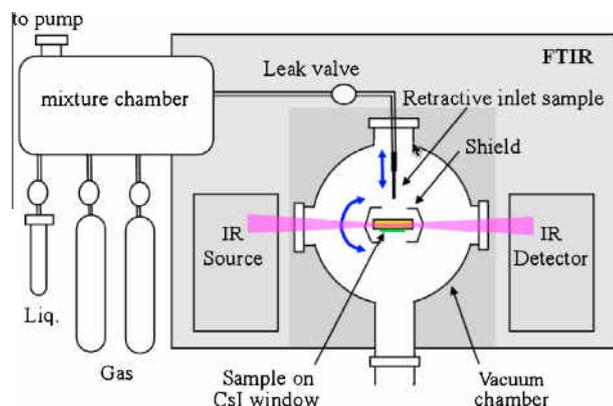


Fig. 1. Schematic diagram of the experimental set-up. There is a incidence of infrared radiation upon ice film deposited on a Csl crystal. Modified of Pilling et al.[16].

## Materials and methods

To illustrate the functionality of the code NKABS, we calculate the optical constants in the infrared spectral range, covering  $4000\text{--}400\text{ cm}^{-1}$  (in some cases between  $4000\text{--}400\text{ cm}^{-1}$ ,  $5000\text{--}500\text{ cm}^{-1}$  and also  $3500\text{--}1000\text{ cm}^{-1}$ ) of 28 different samples with astrophysical interest at different temperatures, which simulates frozen samples called astrophysical ices.

Briefly, the majority of the samples were obtained from the condensation of gases on substrates previously cooled to cryogenic temperatures as low as 12 K. Four different types of samples were selected to illustrate the functionality of the code. The thin films were produced by condensation of (i) pure gases (e.g.  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{SO}_2$ ), (ii) sublimated liquids inside vacuum (e.g. water (amorphous and crystalline), acetone, acetonitrile, acetic acid, formic acid, ethanol, and methanol), and (iii) gaseous mixtures (e.g.  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2:\text{NH}_3:\text{CH}_4$  (9:1:1:1) – Enceladus Moon Surface,  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2:\text{NH}_3$  (10:1:1:1) – Europa Moon Surface,  $\text{N}_2:\text{CH}_4$  (19:1) – Titan Atmosphere,  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  (1:1),  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  (9:1),  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}:\text{NH}_3$  (1:0.5:0.4)). It is necessary to cite, that Enceladus and Titan (Saturn's satellites) and Europa (Jupiter's satellite) are moons with frozen surface. The fourth set of the samples was produced from solid samples such as amino acids and nucleobases. As described in Pilling et al. [12], these samples were diluted and deposited on to a  $\text{CaF}_2$  substrate by drop casting following solvent evaporation at 320 K before they were put into the vacuum chamber. Water was used as solvent for the amino acids. The studied samples are listed

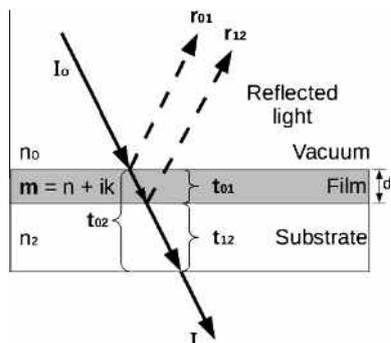


Fig. 2. Schematic representation of incoming ray over a thin film. The subindexes 0, 1, and 2 denote the interface (sample – vacuum), ice film, and substrate, respectively. The parameters given by  $t$  and  $r$  are the Fresnel coefficients, explained in the paper. It represents the transmission and reflection coefficient between each interface.

in Table 1. The experimental thicknesses of the films after condensation were calculated using the following relation [11]:

$$d(\mu\text{m}) = \left[ \frac{N}{\rho} \left( \frac{M}{N_A} \right) \right] 1000, \quad (1)$$

where  $N$  is colunar density ( $\text{mol}/\text{cm}^2$ ),  $\rho$  specific density ( $\text{g}/\text{cm}^3$ ),  $M$  molar mass ( $\text{g}/\text{mol}$ ) and  $N_A$  the Avogadro's constant.

The colunar density is calculated by:

$$N = \frac{2.3}{A} \int Abs_\nu d\nu, \quad (2)$$

where  $A$  is strength band available in the literature.

Using a different technique, the experimental thicknesses for solid samples were measured with a Dektak profilometer (Veeco Inc.) as explained in Pilling et al.[12]. The thicknesses of each sample as well as the temperatures is also given. In addition, we show the temperature and substrate used in the experiments. The errors associated to the calculation are also present. The absorbance measurements in the infrared were obtained mainly in two laboratories: LASA (Laboratório de ASTroquímica e Astrobiologia da Univap) in São José dos Campos, Brazil and GANIL (Grand Accélérateur National d'Ions Lourds), in Caen, France. However, infrared data from other laboratories were also employed.

Fig. 1 illustrates the typical setup for the measurements of absorbance spectrum in the infrared of thin films. Briefly, the samples are deposited onto previously cooled substrate (e.g.  $\text{ZnSe}$ ,  $\text{CsI}$ ,  $\text{KBr}$ ,  $\text{CaF}_2$ ) and probed by infrared beam from the spectrometer. Details of the experimental setup are given elsewhere [13,15,16,11,14]. The experiments here presented, were performed in the high vacuum regime ( $p < 10^8$  mbar).

The absorbances were measured using FTIR spectrometer, through the relation

$$Abs = \ln(I_0/I) \quad (3)$$

where  $I_0$  is the emitted intensity and  $I$  the observed intensity.

As will be described in this paper, besides the absorbance spectrum in the infrared, the code also requires the transmittance spectrum, which can be easily obtained by the equation

$$T_{exp} = 1/e^{Abs} \quad (4)$$

The comparison between this experimental transmittance with the theoretical transmittance obtained with NKABS code allows the quantification of the uncertainty of optical constant determination. This will be discussed in the next sections.

## Theory and calculation

In this section, we give a briefly overview of commonly used method to obtain the optical constants in the infrared. It shows the mathematic background for its calculation, as well as the computational procedure employed in this work. A brief comment

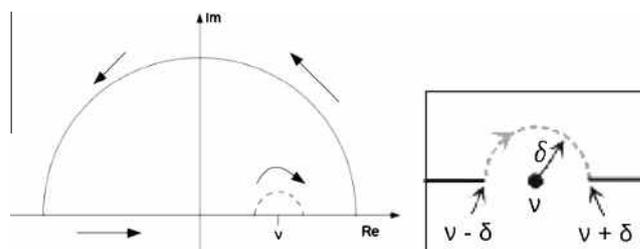
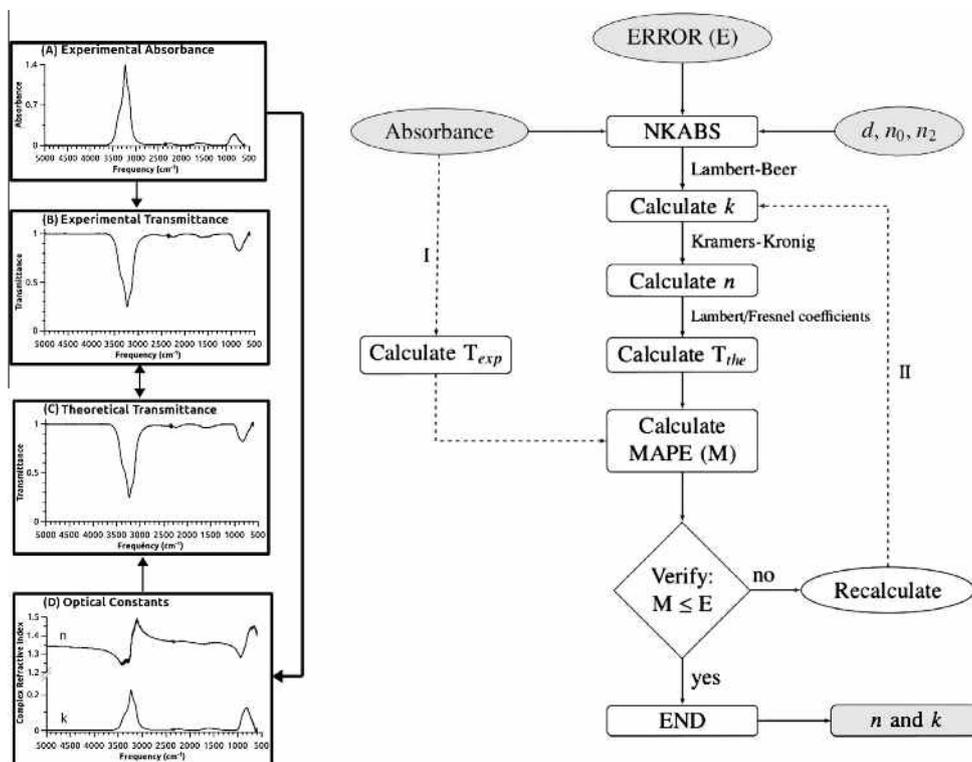


Fig. 3. Left: Illustration of the mathematical procedure for calculate the integral given by Eq. (10) avoiding the singularity point  $x = v$ . The integration path is indicated by arrows, which skirting the singularity point. Right: Detail of the singularity point  $v$ , showing that function is calculated for  $(v - \delta)$  and  $(v + \delta)$ .



**Fig. 4.** Left: Illustration of computational procedure of the NKABS code. In block A is shown the absorbance data of the crystalline water at 165 K. The B and C blocks shows the experimental and theoretical transmittance, respectively. In D, is shown the optical constants for crystalline water. The arrows indicates the path executed by code for calculate the optical constants. Right: Execution flowchart of NKABS code. The input parameters are absorbance data,  $d$ ,  $n_0$ ,  $n_2$  and error. When these parameters are informed, the code begins the procedure for obtain the optical constants, using Lambert–Beer law, Kramers–Kronig relationship and also Fresnel and Lambert coefficients. The code evaluate the error and decides if stop or remakes the procedure.

about Cauchy Principal Value is also presented. It helps to explain how the singularity involved in Kramers–Kronig relations can be overcome.

#### Theoretical background for the calculation of optical constants

The optical constants are usually obtained by using the Lambert–Beer law and Kramers–Kronig relationship [3,7]. Fig. 2 shows the general scheme of interaction between incoming ray and the sample. The subindexes 0, 1, and 2 denote the interface (sample – vacuum), ice film, and substrate, respectively.

The theoretical transmittance for normal incidence is given by:

$$T_{the} = \frac{I}{I_0} = e^{-\alpha d} \left| \frac{\mathbf{t}_{01}\mathbf{t}_{12}/\mathbf{t}_{02}}{1 + \mathbf{r}_{01}\mathbf{r}_{12}e^{2ix}} \right|^2 \quad (5)$$

where  $\mathbf{x} = 2\pi\nu d\mathbf{m}$  is dimensionless parameter, with  $\nu$  in  $\text{cm}^{-1}$  and,  $\alpha$  is Lambert absorption coefficient, given as:

$$\alpha = 4\pi\nu k. \quad (6)$$

The terms defined by  $\mathbf{t}$  and  $\mathbf{r}$  in Fig. 2 and in Eq. (5) are Fresnel coefficients, which represent the complex transmission and reflection coefficients. For normal incidence, they are defined by:

$$\mathbf{t}_{pq} = \frac{2\mathbf{m}_p}{\mathbf{m}_p + \mathbf{m}_q} \quad (7a)$$

$$\mathbf{r}_{pq} = \frac{\mathbf{m}_p - \mathbf{m}_q}{\mathbf{m}_p + \mathbf{m}_q} \quad (7b)$$

where  $\mathbf{p}$  and  $\mathbf{q}$  represent generically the different regions in the sample (e.g. film, substrate, vacuum) and the notation  $\mathbf{pq}$  indicates the interfaces between given regions.

Combining Eqs. (3) and (5), we found that Lambert absorption coefficient can be rewritten as follow:

$$\alpha = \frac{1}{d} \left[ Abs_v + \ln \left| \frac{\mathbf{t}_{01}\mathbf{t}_{12}/\mathbf{t}_{02}}{1 + \mathbf{r}_{01}\mathbf{r}_{12}e^{2ix}} \right|^2 \right] \quad (8)$$

Since the absorption coefficient is known, is possible to calculate the complex part of the refractive index as illustrated in Eq. (9), and from there, the real part, using the Kramers–Kronig relationship:

$$n(\nu) = n_0 + \frac{2}{\pi} \wp \int_{\nu_1}^{\nu_2} \frac{\nu' k(\nu')}{\nu'^2 - \nu^2} d\nu' \quad (9)$$

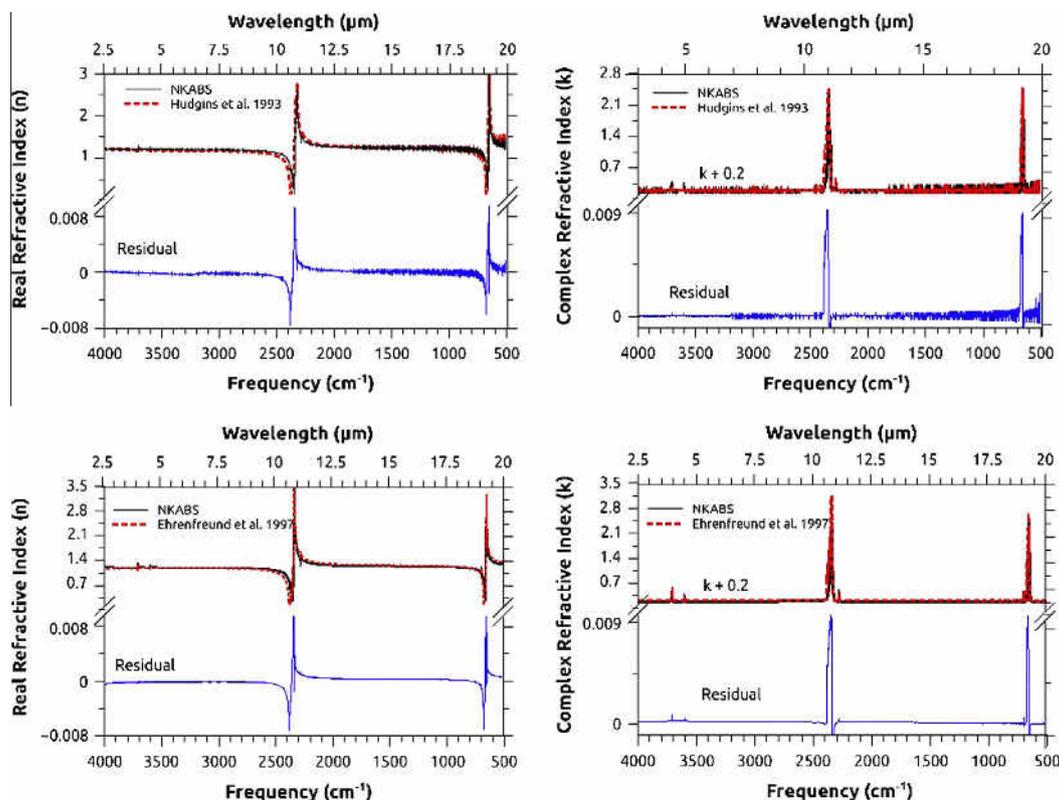
where  $\wp$  represents the Cauchy Principal Value [8].

In Eq. (9), there is a singularity, when  $\nu'$  is equal to  $\nu$ . This problem is theoretically bypassed by introducing the Cauchy Principal Value. The Cauchy Principal Value applied on function is formally defined by:

$$\wp \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x - \nu} dx = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[ \int_{-\infty}^{\nu - \delta} \frac{f(x)}{x - \nu} dx + \int_{\nu + \delta}^{+\infty} \frac{f(x)}{x - \nu} dx \right] \quad (10)$$

where the integration is calculated avoiding the divergence point. For a better understanding, consider a illustration shown in Fig. 3: Left. It shows a illustration of the mathematical procedure for calculate the integral given by Eq. (10), avoiding the singularity point  $x = \nu$ . In Fig. 3: Left, the integration path is indicated by arrows. Therefore, the Cauchy Principal Value overcomes this problem when calculates the function in the intervals  $(-\infty$  to  $\nu - \delta)$  and  $(\nu + \delta$  to  $+\infty)$ . Fig. 3: Right, show a detail of the integration path skirting the singularity point.

Physically speaking, the complex part  $k$  of the  $\mathbf{m}$  is related to damping of the electromagnetic wave. Moreover, it is closely very



**Fig. 5.** Comparison between values of the optical constants calculated using NKABS code and values available in the literature. The absorbance data was extracted from Ehrenfreund et al. [4,7]. The values calculated with NKABS code are represented by continuous black line and the values from the literature as dashed red line. The residue is shown as continuous blue line. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

related to the absorbance spectrum of the sample. We can associate the real part  $n$  with scattering. These two quantities have a strong relation translated by Kramers–Kronig relations: when the absorption is prevalent, there will be little scattering. In contrast, when scattering is prevalent, there will be little absorption [18].

#### Computational procedure

To obtain the optical constants of thin films in infrared spectral regime, we developed a free code using the Python programming language, called NKABS. Its main advantage is to determine the optical constants directly from the absorbance data, obtained experimentally in the mid-infrared. Additionally, its velocity and accuracy are other advantages, when compared to similar codes in the literature (e.g. [6,5]).

Fig. 4 presents an illustration (left) and a flowchart (right) of the computational steps executed by NKABS code. The executable file of the code (for windows only) as well as the optical constants database determined here are available at the LASA laboratory home page.<sup>1</sup>

As indicated in Fig. 4: Right, the input parameters of the NKABS code relative to sample are: (i) absorbance data in the mid-infrared, (ii) thickness  $d$ , and (iii) the standard refractive index in the visible range  $n_0$ . The absorbance data, should be identified as Abs.dat and placed in same directory of the NKABS executable file. Additionally, the user should inform in the code, the refractive index of the substrate in the visible range  $n_2$  and what is the desired error for the calculation. For evaluate this error, the code calculates the Mean Absolute Percentage Error (MAPE) and  $\chi^2$ , comparing the

experimental transmittance (Eq. (3)) with the theoretical transmittance (Eq. (5)). The code will finalize when calculated MAPE is less than error informed by user in begins of the computational procedure. Typically, this value is around 0.001%.

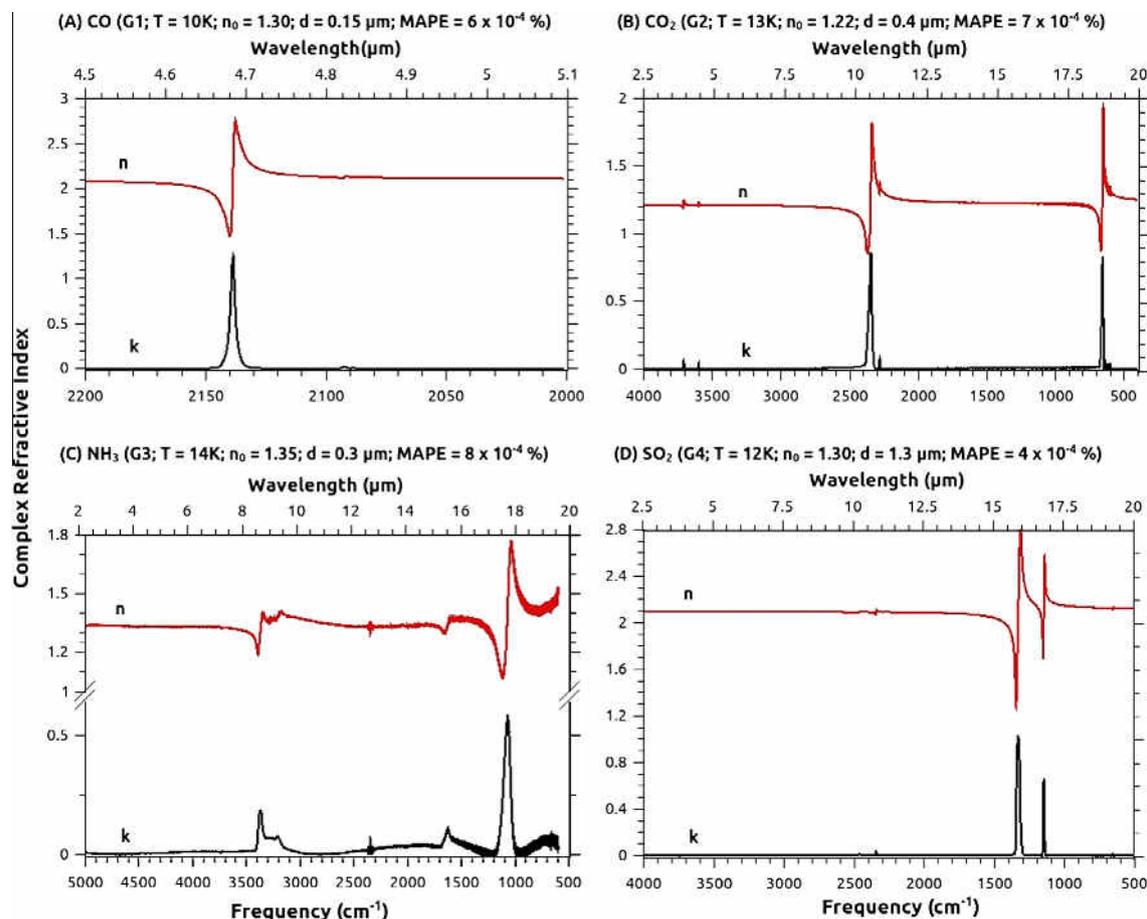
Fig. 4: Left, show an illustration of the procedure executed by NKABS code. We used the absorbance data of the crystalline water at 165 K (indicated as A). In B and C, is shown the experimental transmittance and theoretical transmittance, respectively calculated using Eqs. (3) and (5). Finally, in D, we have the optical constants calculated using Eqs. (6) and (7) (6) and (9). The arrow from A to D indicates that, the optical constants are calculated from absorbance data. After that, these values are used for calculate the theoretical transmittance, as shown by arrow from D to C. Thereafter, the theoretical transmittance is compared with experimental transmittance (calculated from absorbance, as shown by arrow from A to B). This comparison is indicated by arrow up and down between B and C.

The calculation of the complex part  $k$  of the refractive index  $\mathbf{m}$  is performed using Eqs. (8) and (6). In the first iteration, the Fresnel coefficients (Eq. (7)) is assumed to be equal 1 and 0, because  $\mathbf{m}_p$  and  $\mathbf{m}_q$  are equals to  $n_0$ . In the next step, the code calculates the real part  $n$  of the refractive index  $\mathbf{m}$  using Eq. (9). The integral given by Kramers–Kronig relationship was performed numerically. Ohta and Ishida [10] compare many numerical methods to solve this integral. The lowest computational cost is obtained using the Maclaurin's method. The calculation is performed as following: The  $k$  values are discretized in  $m$  values taken in  $m$  frequencies  $\nu_j$  with equal intervals:

$$\nu_1, \nu_2, \nu_3, \dots, \nu_j, \dots, \nu_{m-1}, \nu_m; \quad (11a)$$

$$k_1, k_2, k_3, \dots, k_j, \dots, k_{m-1}, k_m, \quad (11b)$$

<sup>1</sup> <http://www1.univap.br/gaa/nkabs-database/data.htm>.



**Fig. 6.** Optical constants determined with NKABS code from the absorbance spectra of thin films produced by the condensation of pure gases (e.g. CO, CO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub>) over cold surfaces inside vacuum.

and the intervals  $h$  are defined by:

$$h = v_{j+1} - v_j \quad (j = 1, 2, 3, \dots, m - 1). \quad (12)$$

Now, Eq. (9) is rewritten in the follow form:

$$I_i = n_o + \frac{2}{\pi} \times 2h \times \left[ \sum_j f_j \right] \quad (13)$$

where

$$f_j = \frac{v_j k_j}{v_j^2 - v_i^2} = \frac{1}{2} \left[ \frac{k_j}{v_j - v_i} + \frac{k_j}{v_j + v_i} \right]. \quad (14)$$

Eq. (12) is calculated to avoid the equality  $j = i$ . For this, when  $i$  is odd,

$$j = 2, 4, 6, \dots, i - 1, i + 1, \dots$$

On the other hand, when  $i$  is even,

$$j = 1, 3, 5, \dots, i - 1, i + 1, \dots$$

The advantage of this procedure is the reduction of the computational cost and the increase of accuracy in determining the optical constants. This is possible because there is no special treatment around the singularity. For comparison effects, we execute the same procedure, calculating Eq. (12), using the trapezium rule, as presented in Ohta and Ishida [10]. However, the computational cost increased four times and the accuracy decreases by half (calculation done for CO<sub>2</sub> molecule).

After the determination of  $n$  and  $k$  values, the next step in the code is to calculate the theoretical transmittance spectrum, using Eq. (5). To evaluate the accuracy of the methodology, we define the parameter Mean Absolute Percentage Error as

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{T_{exp,i} - T_{the,i}}{T_{the,i}} \right|, \quad (15)$$

where  $T_{exp}$  is the experimental spectrum calculated directly from absorbance data obtained in laboratory (arrow I) and  $T_{the}$  is the theoretical spectrum, calculated with Eq. (5).

The MAPE is a powerful statistical tool to verify the quality of the results. For the first iteration, if the MAPE value is greater than cut value, the code executes again the procedure, from the calculation of  $k$  as indicate by arrow II, but now correcting the transmission and reflections ( $t_{pq}$  and  $r_{pq}$ , respectively). These corrections are necessary, because now the Fresnel coefficients do not equal  $n_o$ , but are given as a function of  $m$ , as shown in Eqs. (7a) and (7b). This cycle is repeated until that MAPE value is less than the error introduced in the beginning of the procedure. The final part of the program gives an output file, the optical constants *N.txt* and *K.txt*. Other output files are created, such as: (i) *Results.txt*, containing the additional information of the calculations such as the MAPE, Chi-square, and time of the procedure, (ii) Fresnel coefficients *COEF.txt*, as well as (iii) experimental and theoretical transmittance (*T<sub>exp</sub>.txt* and *T<sub>the</sub>.txt*, respectively).

To calculate the theoretical transmittance and compare this value with the experimental transmittance, several parameters are required, as illustrated by

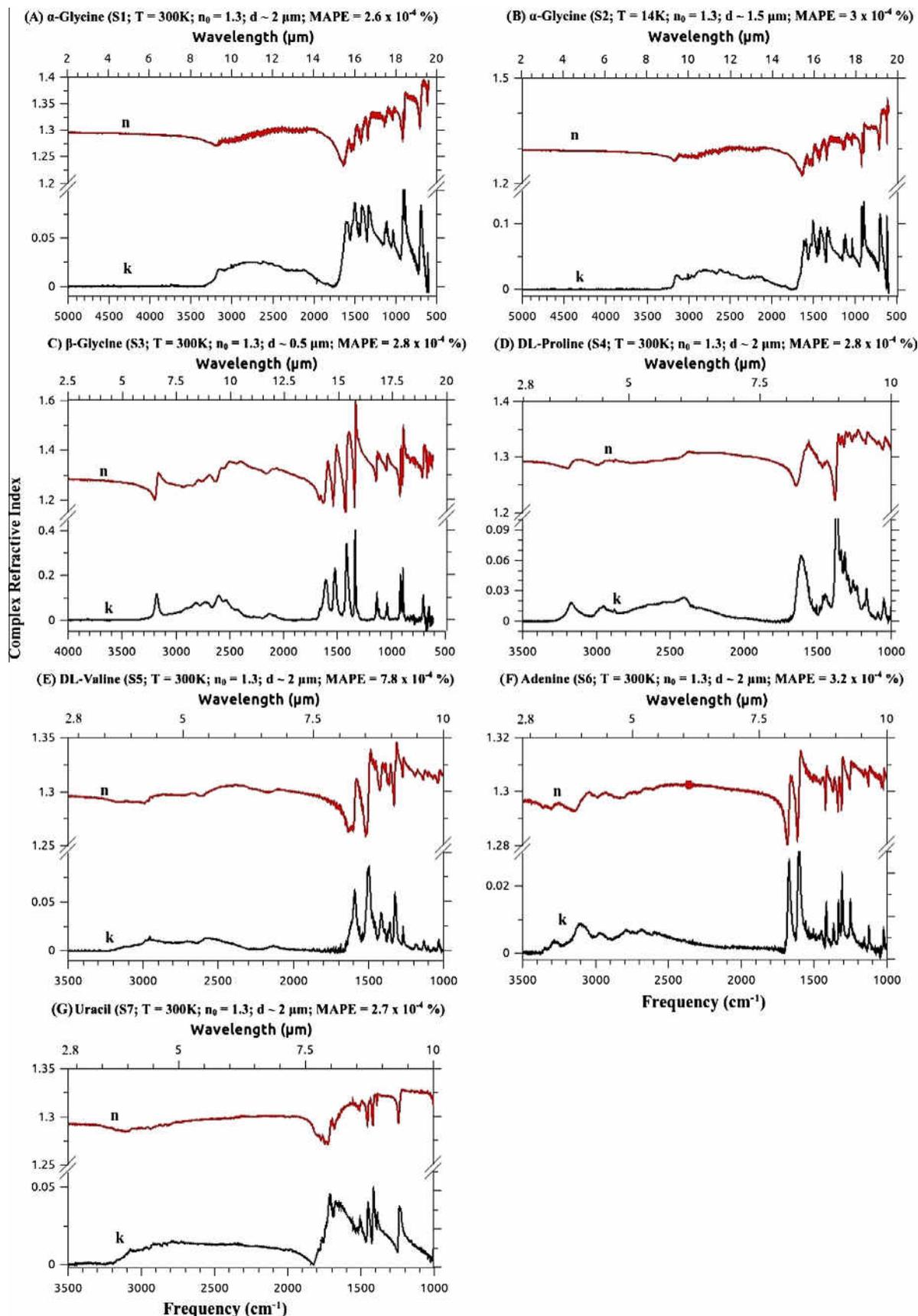
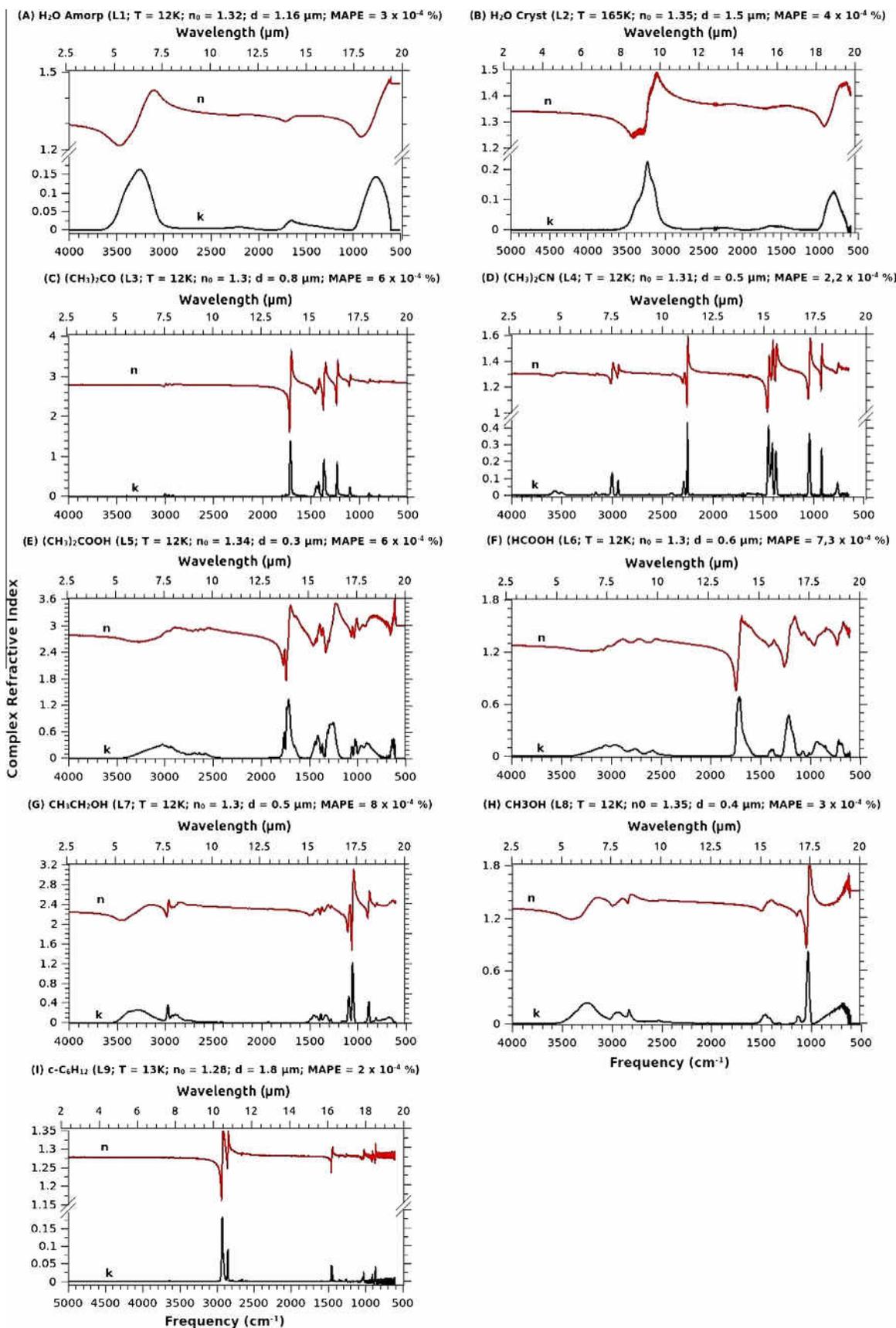
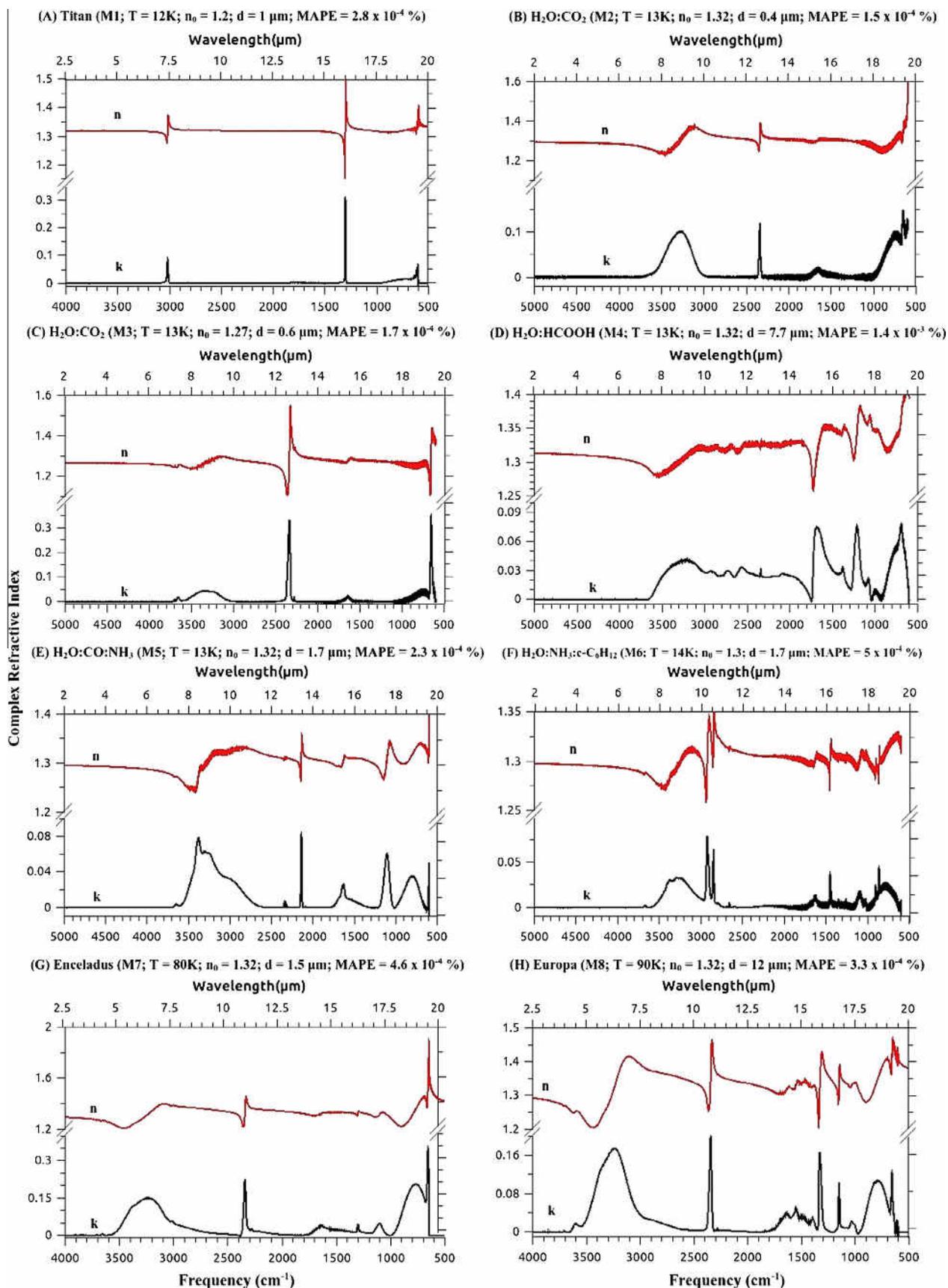


Fig. 7. Optical constants determined with NKABS code from the absorbance spectra of thin films produced from solid samples (drop cast or powder evaporation inside vacuum). The sample illustrated here are  $\alpha$ -Glycine (300 K),  $\alpha$ -Glycine (14 K),  $\beta$ -Glycine, DL-Proline, DL-Valine, Adenine, and Uracil.



**Fig. 8.** Optical constants determined with the NKABS code from the absorbance spectra of thin films produced from the vapour condensation over cold surfaces of sublimated pure liquids ( $\text{H}_2\text{O}$  Amorphous,  $\text{H}_2\text{O}$  Crystalline,  $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$ ,  $\text{CH}_3\text{CN}$ ,  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ,  $\text{HCOOH}$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ , and  $\text{c-C}_6\text{H}_{12}$ ) inside vacuum.



**Fig. 9.** Optical constants determined with the NKABS code from the absorbance spectra of thin films produced from gaseous mixtures (e.g. N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub> (19:1), H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub> (9:1), H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub> (1:1), H<sub>2</sub>O:HCOOH (1:1), H<sub>2</sub>O:NH<sub>3</sub>:CO (1:0.5:0.4), H<sub>2</sub>O:NH<sub>3</sub>:c-C<sub>6</sub>H<sub>12</sub> (1:0.3:0.7), H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub>:CH<sub>4</sub> (9:1:1:1), H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub>:SO<sub>2</sub>(10:1:1:1)) condensed over cold surfaces inside vacuum.

$$T_{the}(v, n_2, n_0, d, n(v), k(v)) \approx T_{exp} \quad (16)$$

Sometimes, some parameters in Eq. (14), such as  $d$  and/or  $n_0$ , are not known, and therefore, the solution remains undetermined. This means that, for example, we can have a set of values for  $d$  and  $n_0$ , that will give a MAPE lower than the value chosen as the calculate precision (cut value).

#### Comparison with other methodologies for the calculation of $n$ and $k$

To evaluate the accuracy of our procedure with other methodologies, we compare the optical constants calculated using NKABS code with the optical constants obtained by two other distinct methodologies from the literature [4,7]. The employed sample for this comparisons was the frozen CO<sub>2</sub> film at 10 K. For this analysis, we adopted the same absorbance data employed by the above cited authors which was obtained from internet database.<sup>2,3</sup>

Fig. 5 shows the values for  $n$  and  $k$  obtained with different methodologies [4,7] in comparisons with the values calculated using the NKABS code. The residuals, defined as the subtraction between the literature value and NKABS value, is also shown. We can observe that, the difference between the value calculated with NKABS code and the literature value is around 0.8% for  $n$  and 0.9% for  $k$ .

## Results and discussion

The optical constants calculated using NKABS code for the selected samples are shown in Figs. 6–9. Fig. 6 shows the optical constants determined from the absorbance spectrum of thin films produced by the condensation of pure gases (e.g. CO, CO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub>) over cold surfaces inside vacuum. In Fig. 7 we present the results for the thin films produced from solid samples ( $\alpha$ -Glycine (300 K),  $\alpha$ -Glycine (14 K),  $\beta$ -Glycine, DL-Proline, DL-Valine, Adenine, Uracil). Fig. 8 shows the optical constants for the cold thin films produced from sublimated pure liquids (H<sub>2</sub>O Amorphous, H<sub>2</sub>O Crystalline, (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO, CH<sub>3</sub>CN, CH<sub>3</sub>COOH, HCOOH, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH, CH<sub>3</sub>OH, c-C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>) inside vacuum. The optical constants for the thin films produced from mixed samples (e.g. N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub> (19:1), H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub> (9:1), H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub> (1:1), H<sub>2</sub>O:HCOOH (1:1), H<sub>2</sub>O:NH<sub>3</sub>:CO (1:0.5:0.4), H<sub>2</sub>O:NH<sub>3</sub>:c-C<sub>6</sub>H<sub>12</sub> (1:0.3:0.7), H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub>:CH<sub>4</sub> (9:1:1:1), H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub>:NH<sub>3</sub>:SO<sub>2</sub> (10:1:1:1)) are presented in Fig. 9. All these optical constants are available at the website of the astrochemical and astrobiology research group of UNIVAP (<http://www1.univap.br/gaa>).

Besides of the general scientific interest, each sample set presented in this paper has a great importance in the astrophysical context. For example, inside molecular clouds, there are suitable conditions for the condensation of free molecules onto dust grains forming ice mantles. In some situations, these ices are formed by pure molecules, such those used for calculate the optical constant presented at Fig. 6. However, in several cases, the interstellar ices are composed by mixtures of frozen molecules as well are observed inside solar system. A typical optical constant of such samples are shown in Figs. 8 and 9. Moreover, depending on the temperature of the interstellar grains, the water can be found in different crystalline phases (ex. amorphous at around 20 K and crystalline at around 160 K). An exemple of optical constant of two distincts water samples are shown in Fig. 8A and B. As we can observe here, the optical constants of the interstellar ices are also sensitive to temperature. Therefore the values of  $n$  and  $k$  obtained at low temperature should be used with careful when applied for representing regions with high temperatures (and also exposed

to ionizing agents) and vice-versa.

The optical constants calculated in this paper has a low error, given by MAPE. Its value is around 10<sup>-4</sup>%. However, we can see from Table 1 that MAPE calculated for mixture H<sub>2</sub>O:HCOOH was 10<sup>-3</sup>%. It is important to observe that its estimated thickness was 7.7  $\mu$ m. This perhaps occurs because of the great thickness of this film and the methodology using Kramers-Kronig used to obtain the optical constants can fail in this range.

## Conclusion

We presented a free code for obtaining the optical constants of ice films in the infrared directly from the absorbance data obtained in the laboratory, called NKABS code. This code has a low computational cost when compared with similar codes in the literature. To illustrate the functionality of this code, we calculate the optical constants in the mid-infrared regime of several samples of astrophysical interest at different temperature (10–300 K). It simulates astrophysical ices in the space environment. The code is available for download at the LASA home page in two executable files (32 bits and 64 bits) to run in Windows<sup>®</sup>. The calculated optical constants of the thin film presented here are also available for download.

This code can also be employed to determine the optical constant of processed samples, for example on samples from experiments involving photolysis, radiolysis and thermal processes. Such optical constants when applied to the radiative transfer models of astrophysical scenarios will result in a more realistic simulation of the studied environment.

## Acknowledgements

The research was financially supported by FAPESP (JP 2009/18304-0 and 2013/07657-5) and FVE/UNIVAP PhD scholarship. We thanks A. Bergantini and V. Bordalo for helping during some experiments. We also want express our gratitude to anonymous referees for the comments/suggestions that allows the improvement of this manuscript.

## References

- [1] G.A. Baratta, M.E. Palumbo, Infrared optical constants of CO and CO<sub>2</sub> thin icy films, *J. Opt. Soc. Am. A* 15 (12) (1998) 3076–3085.
- [2] A. Bergantini, S. Pilling, H. Rothard, P. Boduch, D.P.P. Andrade, Processing of formic acid-containing ice by heavy and energetic cosmic ray analogues, *MNRAS* (2013).
- [3] M.S. Bergren, D. Schuh, M.G. Sceats, S.A. Rice, The OH stretching region infrared spectra of low density amorphous solid water and polycrystalline ice Ih, *J. Chem. Phys.* 69 (8) (1978) 3477–3482.
- [4] P. Ehrenfreund, A.C.A. Boogert, P.A. Gerakines, A.G.G.M. Tielens, E.F. van Dishoeck, Infrared spectroscopy of interstellar apolar ice analogs, *Astron. Astrophys.* 328 (1997) 649–669.
- [5] T.G. Goplen, D.G. Cameron, R.N. Jones, The control of errors in infrared spectrophotometry. VI. The evaluation of optical constants by combined transmission and attenuated total reflection measurements, *Appl. Spectrosc.* 34 (6) (1980) 652–656.
- [6] J. Hawranek, P. Neelakantan, R. Young, R. Jones, The control of errors in i.r. spectrophotometry—IV. Corrections for dispersion distortion and the evaluation of both optical constants, *Spectrochim. Acta Part A: Mol. Spectrosc.* 32 (1) (1976) 85–98.
- [7] D.M. Hudgins, S.A. Sandford, L.J. Allamandola, A.G.G.M. Tielens, Mid- and far-infrared spectroscopy of ices—optical constants and integrated absorbances, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 86 (2) (1993) 713–870.
- [8] L.D. Landau, L.P. Pitaevskii, E.M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*, Butterworth-Heinemann, 1984.
- [9] M.H. Moore, R.F. Ferrante, W.J. Moore, R. Hudson, Infrared spectra and optical constants of nitrile ices relevant to titan's atmosphere, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 191 (1) (2010) 96.
- [10] K. Ohta, H. Ishida, Comparison among several numerical integration methods for Kramers–Kronig transformation, *Appl. Spectrosc.* 42 (6) (1988) 952–957.
- [11] S. Pilling, D.P.P. Andrade, E.F. da Silveira, H. Rothard, A. Domaracka, P. Boduch, Formation of unsaturated hydrocarbons in interstellar ice analogues by cosmic rays, *MNRAS* 423 (2012) 2209–2221.

<sup>2</sup> <http://www.strw.leidenuniv.nl/lab/databases/isodb/isodb.html>.

<sup>3</sup> <http://www.astrochem.org/data/CO2.php>.

- [12] S. Pilling, D.P.P. Andrade, E.M. Do Nascimento, R.R.T. Marinho, H.M. Boechat-Roberty, L.H. de Coutinho, G.G.B. de Souza, R.B. de Castilho, R.L. Cavasso-Filho, A.F. Lago, A.N. de Brito, Photostability of gas- and solid-phase biomolecules within dense molecular clouds due to soft X-rays, *MNRAS* 411 (2011) 2214–2222.
- [13] S. Pilling, D.P.P. Andrade, Á.C. Neto, R. Rittner, A. Naves de Brito, DNA nucleobase synthesis at titan atmosphere analog by soft X-rays, *J. Phys. Chem. A* 113 (2009) 11161–11166.
- [14] S. Pilling, L.A.V. Mendes, V. Bordalo, C.F.M. Guaman, C.R. Ponciano, E.F. da Silveira, The influence of crystallinity degree on the glycine decomposition induced by 1 MeV proton bombardment in space analog conditions, *Astrobiology* 13 (2013) 79–91.
- [15] S. Pilling, E. Seperuelo Duarte, E.F. da Silveira, E. Balanzat, H. Rothard, A. Domaracka, P. Boduch, Radiolysis of ammonia-containing ices by energetic, heavy, and highly charged ions inside dense astrophysical environments, *A&A* 509 (2010) A87.
- [16] S. Pilling, E. Seperuelo Duarte, A. Domaracka, H. Rothard, P. Boduch, E.F. da Silveira, Radiolysis of H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub> ices by heavy energetic cosmic ray analogs, *A&A* 523 (2010) A77.
- [17] W. Portugal, S. Pilling, P. Boduch, H. Rothard, D.P. Andrade, Radiolysis of Amino Acids by Heavy and Energetic Cosmic Rays Analogs in Simulated Space Environments: Alfa-glycine Zwitterion Form, 2013 (submitted for publication).
- [18] A.G.G.M. Tielens, *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium*, Cambridge University Press, 2005.
- [19] B.E. Wood, J.A. Roux, Infrared optical properties of thin H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>, and CO<sub>2</sub> cryofilms, *J. Opt. Soc. Am.* 72 (6) (1982) 720–728.

# **Apêndice 2**

## **ARTIGO 2: MODELAGEM COMPUTACIONAL DE ELIAS 29**

---

---

# COMPUTATIONAL MODELING OF THE CLASS I LOW-MASS PROTOSTAR ELIAS 29 APPLYING OPTICAL CONSTANTS OF ICES PROCESSED BY HIGH ENERGY COSMIC RAY ANALOGS

W. R. M. ROCHA AND S. PILLING

Instituto de Pesquisa & Desenvolvimento, Universidade do Vale do Paraíba, Sao Jose dos Campos,

SP 12244000, Brazil; willrobson88@hotmail.com, sergiopilling@yahoo.com.br

Received 2014 June 9; accepted 2015 January 27; published 2015 April 8

## ABSTRACT

We present a study of the effects of high energy cosmic rays (CRs) over the astrophysical ices, observed toward the embedded class I protostar Elias 29, by using computational modeling and laboratory data. Its spectrum was observed with the *Infrared Space Observatory* (ISO) covering 2.3–190  $\mu\text{m}$ . The modeling employed the three-dimensional Monte Carlo radiative transfer code RADMC-3D and laboratory data of bombarded ice grains by CR analogs and unprocessed ices (not bombarded). We are assuming that Elias 29 has a self-irradiated disk with inclination  $i = 60^\circ$ , surrounded by an envelope with a bipolar cavity. The results show that absorption features toward Elias 29 are better reproduced by assuming a combination between unprocessed astrophysical ices at low temperature ( $\text{H}_2\text{O}$ , CO,  $\text{CO}_2$ ) and bombarded ices ( $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$ ) by high energy CRs. Evidences of the ice processing around Elias 29 can be observed by the good fitting around 5.5–8.0  $\mu\text{m}$ , by polar and apolar ice segregation in 15.15–15.25  $\mu\text{m}$ , and by the presence of the  $\text{CH}_4$  and  $\text{HCOOH}$  ices. Given that non-nitrogen compounds were employed in this work, we assume that absorption around 5.5–8.0  $\mu\text{m}$  should not be associated with the  $\text{NH}_4^+$  ion (see the 2003 work of Shutte & Khanna), but more probably with aliphatic ethers (e.g.,  $\text{R}_1\text{-OCH}_2\text{-R}_2$ ),  $\text{CH}_3\text{CHO}$ , and related species. The results obtained in this paper are important because they show that the environment around protostars is better modeled considering processed samples and, consequently, demonstrate the chemical evolution of the astrophysical ices.

*Key words:* protoplanetary disks – ISM: molecules – radiative transfer – methods: laboratory: molecular – stars: individual (Elias 29)

## 1. INTRODUCTION

The star formation process takes place inside molecular clouds, where dense cores collapse to form young stellar objects (YSOs), which are often called protostars. Following the initial contraction phase these objects continue their physical evolution. Several observations and computational models have shown that protostars can be classified in four classes, Class 0–III (Lada & Wilking 1984; Lada 1987), which suggests an evolutionary sequence among them. A Class I source, which is the subject of this paper, is a T Tauri star surrounded by an infalling envelope, which in some cases has bipolar cavities. Scatter light models show that cavities are necessary to better fit the observed flux in the near-infrared (near-IR; Kenyon et al. 1993; Whitney et al. 1997). In addition to the physical evolution of young stars, their environment evolves chemically, due to the rich physicochemical processes that exist among gases, ices, and high energy radiation.

In the densest regions of the protostellar disk and envelope, the molecules in the gas phase can condense onto dust grains by an adsorption process, such as physisorption and chemisorption, forming ice mantles. Once formed, the astrophysical ices (as they are also called) can be subjected to FUV or X-ray radiation due to the protostar, as well as bombardment by cosmic rays (CRs) from the interstellar medium. Such interactions are important because they can change ice mantle properties, as well as return molecules (and new molecules) to the gas phase by desorption processes (Tielens & Charnley 1997; van Dishoeck & Blake 1998). In other words, the ices experienced chemical changes by thermal or radiative processing. However, having average energies of several MeV, the CRs are able to penetrate deeply into the envelope or disk, compared to FUV or X-rays photons. Therefore, since the ices

are formed in the densest parts of the disk or envelope, the chemical effects driven by FUV or X-rays photons on the ices are very small compared with CRs. Instead, such photons are very important to regulate the gas-phase chemistry, as for example, to dissociate molecules ( $\text{HCN}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ , CO,  $\text{H}_2$ ) or ionize He, considering X-rays (Henning & Semenov 2013).

Pilling et al. (2010a, 2010b, 2012) suggested that the bombardment of ices by CR analogs may help to justify some features in the infrared spectra of YSOs. In addition, as discussed by Pilling et al. (2011), the chemistry of the ice depends on the temperature in addition to the stellar radiation field (IRF) or interstellar radiation field. A recent paper from Cleaves et al. (2014) highlights the importance of CRs for the enhancement of the chemistry inside protoplanetary disks. The authors shows that, if a model does not contain CRs as an ionizing factor, then the ionization level in the internal regions of the disk is too small to support a high rate of ion-molecule reactions.

The protostar Elias 29 (Elias 1978), also known as Elias 2–29 and WL 15 (Wilking & Lada 1983), is located in the  $\rho$  Ophiuchi molecular cloud and is classified as a class I YSO with an age range of  $0.4\text{--}5 \times 10^5$  yr (Chen et al. 1995; Boogert et al. 2000; Enoch et al. 2009). The coordinates of Elias 29 (J2000) are  $\alpha = 16^{\text{h}}27^{\text{m}}09^{\text{s}}.3$  and  $\delta = -24^\circ37'21''$ . Despite several investigations, the distance and luminosity of this object given in the literature are still quite divergent:  $d \sim 160$  pc (Whittet 1974; Boogert et al. 2000, 2002a),  $d \sim 125 \pm 25$  pc (de Geus et al. 1989; Lommen et al. 2008),  $L = 36 L_\odot$  (Chen et al. 1995; Boogert et al. 2000, 2002a), and  $L = 13.6 L_\odot$  (Evans et al. 2003; Lommen et al. 2008). Elias 29 is also surrounded by several other YSOs presents in the  $\rho$  Ophiuchi molecular cloud.

The inclination of Elias 29 has been estimated from spectroscopic features and more recently from images obtained by Huélamo et al. (2006). Kenyon et al. (1993) argue that deep absorption silicate bands, such as those observed in Elias 29, are typical of a disk with edge-on inclination. However, studies from Boogert et al. (2002a) show that due to flatness of the Elias 29 spectrum, from 4 to 100  $\mu\text{m}$ , the disk inclination must be less than  $60^\circ$ . From this result, the deep absorption features observed from spectral energy distribution (SED) due to ices and silicate, must originate in the envelope or foreground clouds found in the same study. In this work, we adopt a fiducial inclination of  $i = 60^\circ$ , as for example, Lommen et al. (2008) and Miotello et al. (2014). In the studies from Huélamo et al. (2006), the authors obtained a direct image of Elias 29 using a polarimetric differential technique with a NAOS–CONICA (NACO) instrument and adaptive optics facility from the Very Large Telescope. Their results show that a full edge-on inclination is improbable for Elias 29. Besides the presence of the disk, the authors also detected in the near-IR ( $H$  and  $K$  bands) a bipolar hydrogen molecular outflow in the NW–SE direction (assuming N to the top and E to the left) and a dark lane in the NE–SW direction. The presence of CO and molecular hydrogen was also observed in the outflows of Elias 29 by Gómez et al. (2003), and Zhang et al. (2013), respectively.

Öberg et al. (2011) and references therein show that most abundant molecular species around low and high mass young stars are  $\text{H}_2\text{O}$ , CO,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CH}_4$ , and  $\text{OCN}^-$ . By using spectral data from the *Infrared Space Telescope* (ISO), Boogert et al. (2000) has shown that the inventory of ices around Elias 29 is composed mainly of  $\text{H}_2\text{O}$ , CO, and  $\text{CO}_2$ . However, several absorption features between 5.5 and 8.0  $\mu\text{m}$  were also observed toward this source, including the prominent band at 6.85  $\mu\text{m}$ . This last feature has often been attributed to the  $\text{NH}_4^+$  ion (Demyk et al. 1998; Hudson et al. 2001; Shutte & Khanna 2003). However in many cases the condensation of gas over dust grains leads to the formation of dirty ices, such as  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  (Öberg et al. 2011). Once the different molecular species are trapped in the same ice matrix, the chemistry induced by high energy radiation should be rich. Nevertheless, it is not conclusive from Boogert et al. (2002a) whether the ices in the disk or envelope have experienced some interaction with high energy radiation, inducing chemical changes in their properties.

In this paper, we investigate whether the ices observed toward Elias 29 show evidence of thermal or radiative processing due to an interaction with high energy CRs coming from the interstellar medium. We present a better model for Elias 29 SED and the resolved simulated IR images (from near-to far-IR). The general parameters that constrain our modeling were obtained from observational data in the IR taken from the literature (Boogert et al. 2002a; Huélamo et al. 2006; Beckford et al. 2008; Lommen et al. 2008; Miotello et al. 2014). The model was built by employing the radiative transfer code RADMC-3D<sup>1</sup> (C. P. Dullemond, in preparation), assuming the presence of not bombarded ices (unprocessed ices; Rocha & Pilling 2014) and bombarded ices by CR analogs (processed ices; Pilling et al. 2010a) distributed by the protostellar disk and envelope. By using the temperature of the disk and envelope calculated by the RADMC-3D code, the position of

the ices employed in the modeling were fixed because the ices cannot occupy regions where the temperature is enough to return the frozen molecules to the gas phase. For comparison, we also show the fit for the model using only unprocessed ices, which is an usual method observed in the literature (e.g., Boogert et al. 2002a; Pontoppidan et al. 2005). However, this methodology cannot reproduce the chemical evolution features observed in the Elias 29 spectrum. This paper shows that a powerful radiative transfer code combined with processed ices to simulate the chemical evolution of the astrophysical ices is fundamental to better characterize the protostellar environment. Such evidence of the chemical evolution of the ices around Elias 29 is given by the presence of several absorption features between 5.5–8.0  $\mu\text{m}$ , such as  $\text{CH}_4$  and  $\text{HCOOH}$ , and by the polar and apolar ice segregation, seen by the splitted profile at 15.15 and 15.25  $\mu\text{m}$ . Furthermore, we show that absorption bands between 5.5 and 8.0  $\mu\text{m}$  are better related with CH bonds than the  $\text{NH}_4^+$  ion. Additionally, in this work we verified which dust grain size better fits the observed spectrum of Elias 29 in the infrared.

This paper is structured as follows. In Section 2 we present how the observation and laboratory data were obtained and how the modeling was employed. Section 3 shows the results of this paper.

## 2. METHODOLOGY

### 2.1. Observations

#### 2.1.1. Elias 29 SED

The spectrum used in this paper for Elias 29 was obtained from the public database of the *Infrared Space Observatory* (ISO) observed with two instruments:<sup>2</sup> the Short Wavelength Spectrometer (SWS; de Graauw et al. 1996) for 2.3–45  $\mu\text{m}$  and the Long Wavelength Spectrometer (LWS; Clegg et al. 1996) for 45–190  $\mu\text{m}$ . The power resolutions  $R = \lambda/\Delta\lambda$  are  $R_{\text{SWS}} = 400$  and  $R_{\text{LWS}} = 200$ , respectively. The *exposure times* using each instrument on the target were 3454 and 2611 s, respectively.

The spectrum was reduced automatically using the offline-processing package. As informed in the online database, the two spectra have good quality, without dark current problems, and are scientifically validated. Additional information about the reduction processing can be found in ISO Data Analysis Software<sup>3</sup> and Boogert et al. (2000). Figure 1(a) presents a field of view (FOV) of  $38 \times 32$  arcmin taken from MIPS camera in 24  $\mu\text{m}$  from the *Spitzer Space Telescope*. This image shows a very dense region with several embedded sources, where Elias 29 is indicated by a red arrow. Figure 1(b) shows the IR spectrum of Elias 29 obtained from ISO (SWS + LWS), which is dominated by absorption bands due to silicate and ices along the line of sight. In addition to strong bands observed in this spectrum, other weak features are also detected (Boogert et al. 2000).

#### 2.1.2. IRAC Bands Photometry

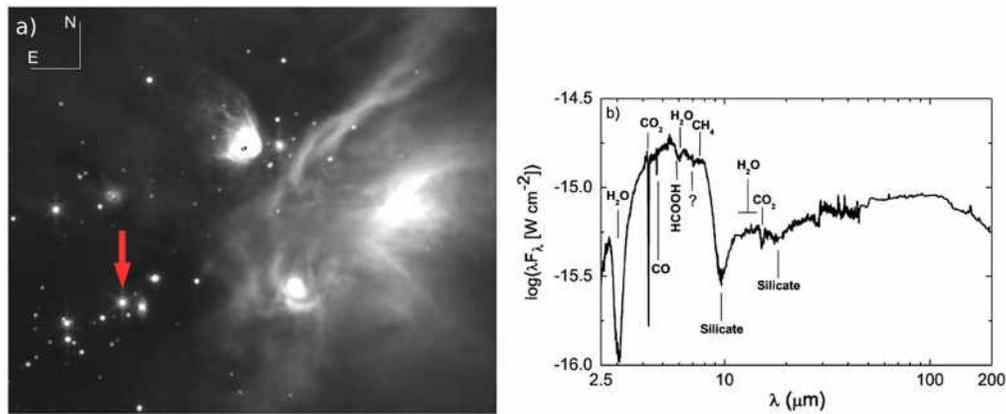
To determine the evolutionary stage of Elias 29, images of the  $\rho$  Ophiuchi cloud were taken from a public archive of the IRAC/*Spitzer* camera in four filters (3.6, 4.5, 5.8, and 8.0  $\mu\text{m}$ ).<sup>4</sup>

<sup>1</sup> <http://www.ita.uni-heidelberg.de/~dullemond/software/radmc-3d/>

<sup>2</sup> <http://iso.esac.esa.int/>

<sup>3</sup> <http://iso.esac.esa.int/archive/software/>

<sup>4</sup> <http://sha.ipac.caltech.edu>

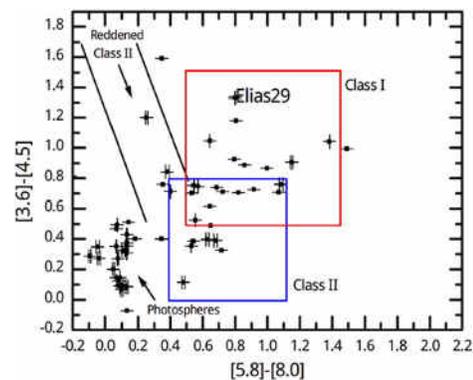


**Figure 1.** (a) Rho ophiuchi molecular cloud region containing the low mass protostar Elias 29 (red arrow). (b) IR spectrum of Elias 29 obtained from *ISO* observations (SWS + LWS). The strong absorption features due to silicate and ices are indicated. The question mark indicates the small absorption band in  $6.85 \mu\text{m}$  ( $1459.8 \text{ cm}^{-1}$ ), which remains without conclusive assignment.

Photometric and instrumental corrections have previously been made (Fazio et al. 2003; Hora et al. 2008).

The astrometry and photometry of each image were performed using the Starfinder code (Diolaiti et al. 2000) by PSF fitting. This procedure allowed us to build a color-color diagram and determine the evolutionary stage of Elias 29, as shown in Figure 2.

The boundary boxes were taken from Megeath et al. (2004) to define the regions for YSO class I and II. This diagram also shows that the Elias 29 classification agrees with a previous study using a Bolometric Luminosity and Temperature diagram from Chen et al. (1995); therefore, it can definitively be classified as a class I protostar.

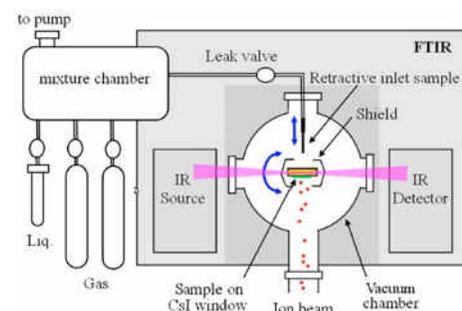


**Figure 2.** Color-color diagram for the  $\rho$  Ophiuchi cloud. The boxes define the regions for YSO class I and II. The black lines identify reddened class II protostars. The photospheres are main sequence stars or YSO class III. Elias 29 is classified as a Class I protostar and is indicated by its name.

## 2.2. Opacity Calculation

One of the most important parameters of radiative transfer models is the optical constants (refractive index) of the matter. However, physical properties such as the size and geometry of absorbers (grains) and their temperature are also essential. Such parameters can be considered as one simple parameter: opacity. Because opacity parameters are a key part of the radiative transfer calculation, we show how they were calculated, considering two models for the nature of the grain around Elias 29. In this work, the label “Model 1” refers to opacities of only unprocessed ices and “Model 2” refers to more realistic ices that were previously processed by CR analogs (taken from Pilling et al. 2010a), combined with unprocessed ices.

In Model 1, we adopted the usual methodology from the literature (Pontoppidan et al. 2005), using only unprocessed ices composed of  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ , and silicate ( $\text{MgFeSiO}_4$ ), combined with amorphous carbon. The more realistic approach, described by Model 2, supposes that a fraction of the material was processed by energetic CRs coming from the interstellar medium. In this case, Model 2 takes into account a processed mixture of  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  (1:1; Pilling et al. 2010a) in addition to pure grains of  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ , and silicate. Previous papers usually use the opacities of coagulated grains from Ossenkopf & Henning (1994) and Weingartner & Draine (2001) to simulate the presence of the grains and ices in the interstellar medium. In this paper, such data cannot be applied because we are using processed ices, which are not available in the literature.



**Figure 3.** Schematic diagram of the experimental setup. The ice is deposited on the substrate (e.g.,  $\text{ZnSe}$ ) where it is condensed due to lower temperature (generally  $\sim 10 \text{ K}$ ). The infrared spectroscopy is used to detect the absorption bands before and after the irradiation of the ice with the ion beam. Extracted from Pilling et al. (2010a).

### 2.2.1. Laboratory Experiments

In the interstellar medium, frozen molecules on the dust grains are exposed to ionizing radiation, which triggers physicochemical processes allowing chemical changes. Such processes can be reproduced in the laboratory, leading to the understanding of how the chemistry in the star-forming regions and their environment evolves.

A typical setup of the experiment is presented in Figure 3. Briefly, the samples were deposited onto substrates (e.g.,  $\text{CsI}$ ,

ZnSe) previously cooled to cryogenic temperatures ( $\sim 10$  K), in the high vacuum regime ( $p < 10^8$  mbar). Using this procedure, the molecules from gas or liquid are condensed to represent the astrophysical ices. During the experiments, these ices can be bombarded by the CR analogs or photons to simulate different input energies coming from the interstellar medium or young star. Fourier Transform InfraRed spectroscopy (FTIR) was used as a diagnostic tool to detect the molecular absorption bands in the sample.

In this paper, the astrophysical ices used in Models 1 and 2 were simulated in the laboratory to obtain the absorbance data in the infrared. The experimental procedure employed for non-bombarded ices can be found in Rocha & Pilling (2014), and in Pilling et al. (2010a) for the processed ice. The processed ices employed in this work (Model 2) were obtained from the mixture of  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{CO}_2$ , bombarded with heavy ions ( $^{58}\text{Ni}^{13+}$  ion projectiles with energies of 52 MeV) up to a final fluence equal to  $1 \times 10^{13}$  ions  $\text{cm}^{-2}$  (Pilling et al. 2010a), to simulate the effects of the high energy CRs. At the end of the experiment the formation of new infrared bands associated with new molecular species was observed.

Details about the chemistry behind the ice processing by CRs can be found in Bennett et al. (2005) and Pilling et al. (2010a, 2010b, 2011). In summary, if CR particles penetrate into ice-forming regions they lose their energy almost exclusively due to the electronic interaction with the target molecules, which allows a temperature increase, among other effects. Such energy exchange may be enough to break the chemical bonds of the molecules in the solid phase and allow for the formation of new molecular species.

### 2.2.2. Dust Model

Because it is necessary to model the ices and silicate abundances independently for Elias 29, the opacities were calculated for each species using the results from experiments in the laboratory and the optical constants as input data. The first step was to calculate the optical constants of the ices, given by equation  $\mathbf{m} = n + ik$ , where the  $n$  value represents the real part and  $k$  values the complex part; both are a function of the wavelength. They were calculated directly from absorbance data in the infrared obtained from experimental works. This procedure was performed with the NKABS code, which is a free code developed in Python Programming Language (Rocha & Pilling 2014). This code is based on the Lambert–Beer law, Kramers–Kronig relationship, and Mclaurin’s methodology. Figure 4 presents the graphics for the optical constants of grain employed in this paper. The values for CO ice and silicate and amorphous carbon dust were taken from an online database.<sup>5,6,7</sup>

After the calculation of optical constants (refractive index in the infrared), the absorption and scattering opacities of the dust and ices were calculated employing the Mie theory. To proceed with the calculations, we assumed that the grains are spherical, with sizes defined by a MRN distribution and given by a power law,  $dN(a)/da \propto a^{-3/5}$ , where  $a_{\min}$  and  $a_{\max}$  define the boundary size of the grains (Mathis et al. 1977). Results from Weingartner & Draine (2001) indicate that in the interstellar medium the dust grains are composed of silicate species and

amorphous carbon. The size of such dust grains varies from  $a_{\min} = 0.005$  to  $a_{\max} = 0.25 \mu\text{m}$ . In addition, inside dense clouds or in the star-forming regions the grains can be mixed due to physical processes such as turbulence. This assumption is adopted in this paper, as well as in previous papers in the literature (Ossenkopf & Henning 1994; Weingartner & Draine 2001; Pontoppidan et al. 2005). Additionally, there is observational evidence of the presence of large grains ( $a \sim 1 \mu\text{m}$ ) inside dense clouds in the interstellar medium (Steinacker et al. 2011). In the current work, the presence of silicate grains with different sizes around Elias 29 were investigated: (i)  $a_{\text{grain}} = 0.005\text{--}0.25 \mu\text{m}$ , (ii)  $a_{\text{grain}} = 0.025\text{--}0.70 \mu\text{m}$  from Beckford et al. (2008), and (iii)  $a_{\text{grain}} = 0.25\text{--}1.0 \mu\text{m}$ . The size range of the employed ice grains in this work was  $a_{\text{ice}} = 0.0125\text{--}0.125 \mu\text{m}$ . Figure 5 presents the opacities calculated for the grains used in this paper, considering case (ii) for dust grains.

### 2.3. Modeling Elias 29

A lot of parameters are necessary to model a young star, which means that high degeneracy is involved in the calculations. Previous papers from Robitaille et al. (2007), Gramajo et al. (2010), and Whitney et al. (2013) show that it is important to define a range of values for each parameter involved in the modeling process, and after that, to try to find the best set. For Elias 29, the parameters were constrained using observational results published in previous papers from Boogert et al. (2002a), Huéllamo et al. (2006), Lommen et al. (2008), Beckford et al. (2008), and Miotello et al. (2014), and can be seen in Table 1.

To model the observed spectrum of Elias 29 and its images in the IR, a three-dimensional Monte Carlo radiative transfer code, RADMC-3D (Dullemond 2012), was used with the opacities described in the previous section. In this code, we assume that density structure for Elias 29 is axisymmetric, although the photons are able to interact in the three dimensions. This approximation makes the problem essentially 2D with coordinates  $(r, \theta)$ , and thus, much less computationally heavy. The Monte Carlo procedure used to calculate the temperature of the system is described in Bjorkman & Wood (2001), and its result is used to determine the position of the ices, where they can survive in the solid phase, and to create the SEDs and images of Elias 29 in specific wavelengths. During the simulation, the Monte Carlo calculation incorporated absorption and isotropic scattering, and used the size aperture of  $100''$  to build the SEDs. This aperture is necessary to compute the flux of entire system (disk and envelope), as we will show in the next sections.

Figure 6 shows a schematic diagram of the Elias 29 environment, together with the ionizing radiation due to the protostar and CRs. This paper focuses on the effects of CRs on ices observed toward Elias 29. This figure also shows the inclination angle of observation and the chemical scenarios seen toward Elias 29.

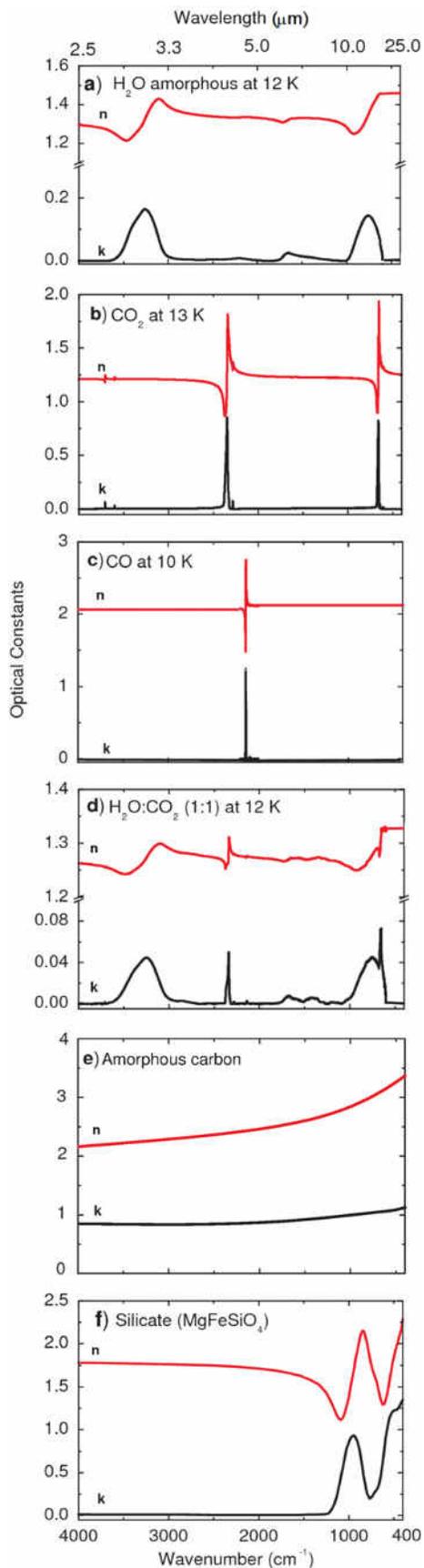
#### 2.3.1. Central Object

Because Elias 29 is a protostar heavily embedded, the high obscuration prevents optical spectroscopic measurements of effective temperature  $T_{\text{eff}}$ . Thus, to characterize this kind of protostar, Myers & Ladd (1993) proposed to use the bolometric temperature  $T_{\text{bol}}$ . The values estimated for Elias

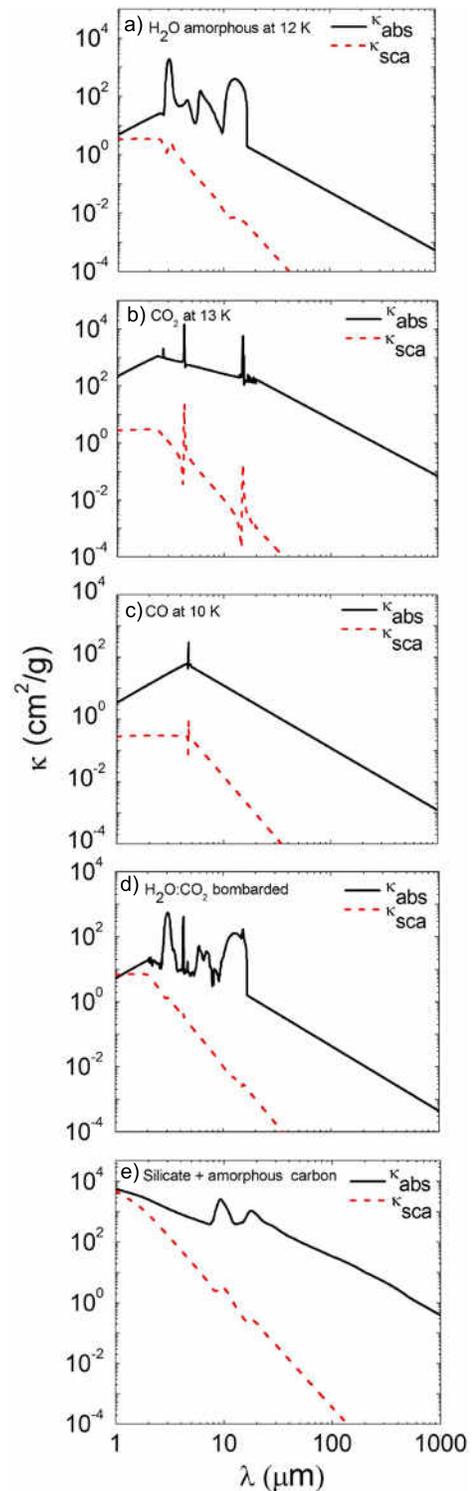
<sup>5</sup> <http://www.strw.leidenuniv.nl/lab/databases/isodb/isodb.html>

<sup>6</sup> <http://www.astro.uni-jena.de/Laboratory/OCDB/data/silicate/amorph/olmg50.lnk>

<sup>7</sup> <http://www.astro.uni-jena.de/Laboratory/OCDB/data/carbon/cel800.lnk>

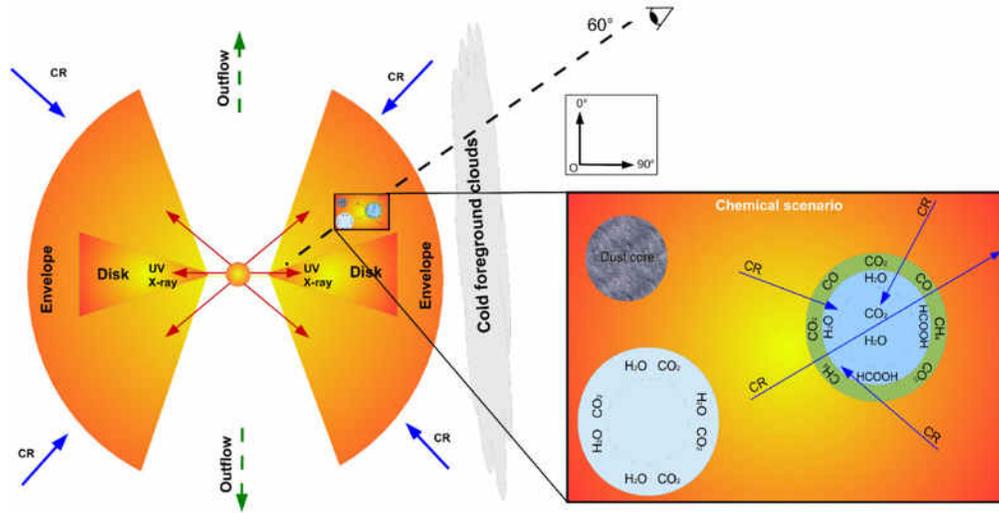


**Figure 4.** Optical constants  $n$  and  $k$  calculated using NKABS code, except for silicate and amorphous carbon.



**Figure 5.** Opacities for ices and silicates with amorphous carbon. The continuous line represents the absorption opacity and the dashed line the scattering opacity.

29 in the literature are 410 K (Chen et al. 1995) and 390 K (Evans et al. 2003). In this paper an estimation of effective temperature was used for the Elias 29 protostar that was based on McClure et al. (2010), which employed the extinction law toward the  $\rho$  Ophiuchi cloud to determine the spectral type of several YSOs, and Miotello et al. (2014), which obtained data in longer wavelengths. From these observational constraints,



**Figure 6.** Schematic overview of the morphology and chemical scenario of Elias 29 employed in this paper. The line of sight crosses through the foreground clouds and envelope, indicating the angle  $i = 60^\circ$ , taking as reference the angles shown in the inset panel.

**Table 1**  
Better Parameters Employed in Model 1 (Non-bombarded Ices) and Model 2 (Bombarded Ices)

Parameter	Description	Employed Value (see text)	Estimated Range	Literature Value
$R$ ( $R_\odot$ )	Stellar radius	5.7	5–12	5.8 <sup>a</sup> , 5.9 <sup>b</sup>
$T$ (K)	Stellar temperature	4880	4000–5000	4786 <sup>b</sup> , 4913 <sup>a</sup>
$L$ ( $L_\odot$ )	Stellar luminosity	16.5	13–36	13.6 <sup>c</sup> , 16.3 <sup>b</sup> , 17.5 <sup>a</sup> 36 <sup>d</sup>
$M_d$ ( $M_\odot$ )	Disk mass	0.003	0.002–0.007	<0.007 <sup>e</sup>
$R_{d,in}$ (AU)	Disk inner radius	0.36	fixed	0.25 <sup>f</sup>
$R_{d,out}$ (AU)	Disk outer radius	200	fixed	200 <sup>e</sup>
$M_{env}$ ( $M_\odot$ )	Envelope mass	0.028	0.02–0.06	<0.058 <sup>e</sup>
$R_{env,in}$ (AU)	Envelope inner radius	0.36	fixed	...
$R_{env,out}$ (AU)	Envelope outer radius	6000	fixed	6000 <sup>g</sup>
$\theta_c$ ( $^\circ$ )	Cavity angle	30	25–55	40 <sup>h</sup>
$d$ (pc)	Distance	120	100–160	125 <sup>i</sup> , 160 <sup>g</sup>

#### Notes.

<sup>a</sup> McClure et al. (2010).

<sup>b</sup> Miotello et al. (2014).

<sup>c</sup> Evans et al. (2003).

<sup>d</sup> Chen et al. (1995).

<sup>e</sup> Lommen et al. (2008).

<sup>f</sup> Simon et al. (1987).

<sup>g</sup> Boogert et al. (2002a).

<sup>h</sup> Beckford et al. (2008).

<sup>i</sup> de Geus et al. (1989).

the physical properties should be  $T_{\text{eff}} = 4913$  K and  $R = 5.8 R_\odot$ , meaning that  $L = 17.5 L_\odot$ , and  $T_{\text{eff}} = 4786$  K and  $R = 5.9 R_\odot$ , meaning that  $L = 16.3 L_\odot$ , respectively. In this paper, the considered ranges were  $R = 5\text{--}12 R_\odot$  and  $T = 4000\text{--}5000$  K. From our modeling, the better values were  $T_{\text{eff}} = 4880$  K and  $R = 5.7 R_\odot$ , and  $L = 16.5 L_\odot$ .

#### 2.3.2. Disk and Envelope Geometry

The images from Huélamo et al. (2006) constrain the flared disk up to around 175 AU. However, it is important to note that such a disk may have a non-flared (self shadowed) component at large radii that cannot be seen by the scattered light in the near-IR. Therefore, the images in the near-IR constrain a lower limit of the disk size if a non-flared part is present.

The Elias 29 disk was modeled by using a density structure defined by power law along the radius and a Gaussian function in height scale, given by

$$\rho_{\text{disk}}(r, \theta) = \frac{\Sigma_0 (r/R_0)^{-1}}{\sqrt{2\pi} H(r)} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[ \frac{r \cos \theta}{H(r)} \right]^2 \right\} \quad (1)$$

where  $\theta$  is the angle from the axis of symmetry;  $\Sigma_0$  is the surface density at outer radius  $R_0$ , which is related with the disk mass,  $M_{\text{disk}}$ ; and  $H(r)$  is the disk scale height, given by  $H(r) = r \cdot H_0/R_0 \cdot (r/R_0)^{2/7}$ , defined from the self-irradiated passive disk proposed by Chiang & Goldreich (1997).

The inner radius of the disk was calculated based on the sublimation temperature of the silicate, using  $R_{\text{in}} = R_*(T_*/T_{\text{in}})^2$

from Dullemond & Monnier (2012). Assuming that the silicate grains sublimate at  $T_{\text{in}} = 1500$  K, then  $R_{\text{in}} = 0.36$  AU for Elias 29. Following Lommen et al. (2008) and Miotello et al. (2014), the outer radius of the disk  $R_{\text{out}} = 200$  AU and the ratio  $H_0/R_0 = 0.17$  were adopted in this paper.

Besides the disk, Elias 29 is surrounded by a large envelope, given the radial intensity profile obtained from the 1.3 mm map (Motte et al. 1998) modeled by Boogert et al. (2002a). This profile is better fit by the presence of the envelope extended up to 6000 AU in addition to the disk. To describe it we are considering a static envelope whose density is given by the following power law:

$$\rho_{\text{env}}(r) = \rho_0 \left( \frac{R_{\text{out}}}{r} \right)^{1.5} \quad (2)$$

where  $\rho_0$  is the density at the outer radius.

Given the observations of the jets in Elias 29 (Gómez et al. 2003; Zhang et al. 2013), it is reasonable to consider a cavity in the envelope. The cavity aperture was constrained from near-IR images, combined with a linear polarimetry technique toward  $\rho$  Ophiuchi, taken from Beckford et al. (2008). For Elias 29, the opening angle of the cavity estimated in the  $K$  band is  $\theta = 30^\circ$ .

Table 1 summarizes the parameters used in Models 1 and 2, as well as the estimated range due to the degeneracy involved in the modeling.

### 2.3.3. Grain Spatial Distribution

More realistic scenarios for modeling protostellar disks and envelopes should consider the sublimation temperature of the silicates and ices, as well as the possibility of the radiation and temperature processing. Taking this into account, the silicate and ice grains should occupy specific regions around the protostar. The sublimation temperatures of the grains used in this paper can be found in the literature: (i) silicate—1500 K (Gail 2010), (ii)  $\text{H}_2\text{O}$ —150 K,  $\text{CO}_2$ —75 K,  $\text{CO}$ —20 K (Collings et al. 2004), and (iii)  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  bombarded, assumed to be 150 K.

Note, however, that frozen molecules trapped in  $\text{H}_2\text{O}$  ice will be desorbed at two different temperatures: (i) desorption of the species from the surface of the  $\text{H}_2\text{O}$  ice and (ii) desorption from molecules trapped inside the bulk of the  $\text{H}_2\text{O}$  ice (Collings et al. 2004). This means that volatile molecules can be placed at the inner regions of the protostellar disk (Visser et al. 2009) and, consequently, more subjected to radiative and thermal processing.

In this paper, the dust grains were used in the spatial grids and the ices were employed where the temperature was lower than the sublimation temperature. This procedure was performed by calculating the temperature of the structure by Monte Carlo methodology, first employing only the ice opacities. Next, this result was used to determine the position of each ice around Elias 29, and a new temperature was calculated to build the SED and images in the IR. This procedure showed that pure CO ice cannot be present in the envelope along the line of sight of Elias 29 due to low sublimation temperature, and would not be seen in the modeled spectrum. To reproduce the CO observed in Figure 1, we assume that all CO is trapped in  $\text{H}_2\text{O}$  ice. The assumption that all species are constrained to the disk and envelope is not very

realistic because a fraction of the ice should be placed in foreground clouds.

## 3. RESULTS

### 3.1. Spectral Energy Distribution

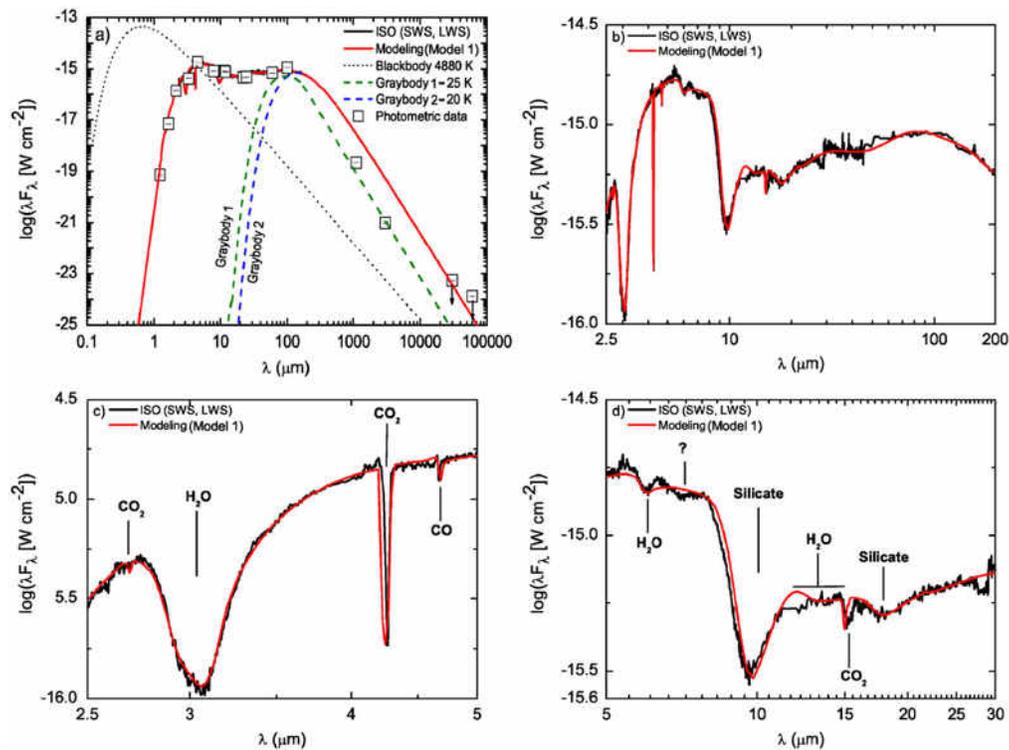
Figure 7 shows the SED for Model 1, employing only non-bombarded ices, similar to the one performed by Pontoppidan et al. (2005). Note however, that such modeling is able to reproduce many physical parameters of the protostar, but it was not able to reproduce the chemical changes induced by radiation (driven by CRs or high energy radiation) on the ice mantles, observed at wavelengths around  $5.5\text{--}8.0\ \mu\text{m}$  and  $15.15\text{--}15.25\ \mu\text{m}$ . This means that, despite the strong bands observed in the Elias 29 SED (e.g.,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ , silicate) that were well fit by the modeling, weak features formed from ice chemistry cannot be probed by Model 1. On the other hand, the better model is shown in Figure 8, where the physical and chemical properties were reproduced. To reach this result, the presence of the bombarded ice ( $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$ ) was fundamental to improve the chemistry of the modeling. Such processed ices were employed in this work in Model 2. In both models, the average abundances of the ices relative with  $\text{H}_2$  and the dust mass of the disk and envelope were constrained from Boogert et al. (2000) and Lommen et al. (2008). Section 3.3 shows how the abundances were derived in this paper.

Figures 7(a) and 8(a) show the Elias 29 SED modeled with RADMC-3D covering  $0.1\text{--}80,000\ \mu\text{m}$ . This graphic also shows the (i) observational spectrum from *ISO* (black line), (ii) blackbody of the protostar without extinction (dotted black line), (iii) cold foreground clouds (blue and green dashed lines), and the (iv) photometric data from bands 2MASS (1.23, 1.66, 2.16  $\mu\text{m}$ ), *WISE* (3.35, 4.6, 11.56, 22.08  $\mu\text{m}$ ), *Spitzer* (8  $\mu\text{m}$ ), *IRAS* (12, 25, 60, 100  $\mu\text{m}$ ), and in the longer wavelengths (1.1 mm, 3 mm, 3 cm, 6 cm). The photometric data in the IR regime were taken from Infrared Science Archive<sup>8</sup> and in the long wavelength regime from Lommen et al. (2008) and Miotello et al. (2014). Because the Elias 29 protostar is heavily embedded in its birthplace, we should consider the presence of the cold foreground (12–16 K) clouds (Boogert et al. 2002) to better simulate the observed spectrum after 80  $\mu\text{m}$ . The foreground emission of cold clouds was added to the SED by hand, and is not part of the radiative transfer simulation. These clouds produce a modified blackbody emission at long wavelengths (Hildebrand 1983; Ward-Thompson et al. 2000), sometimes called graybody emission, and given by

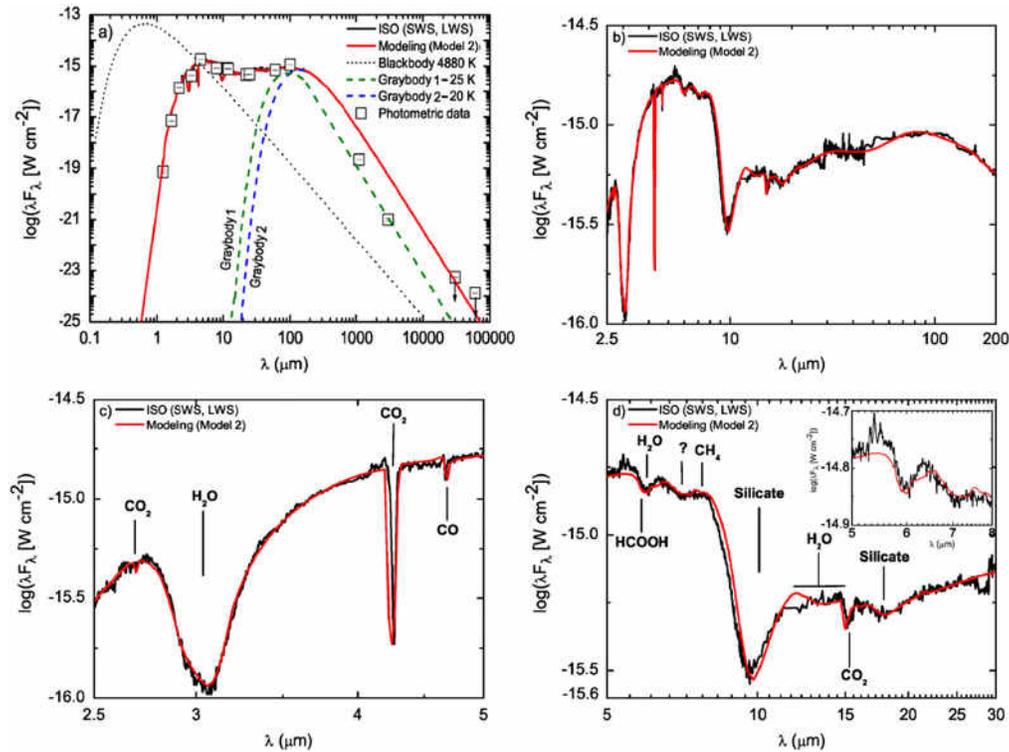
$$S_\nu = \Delta\Omega B_\nu(T) [1 - e^{-\tau_\nu}] \quad (3)$$

where  $\Delta\Omega$  is the solid angle of the source and  $B_\nu(T)$  is the blackbody emission at temperature  $T$ . The optical depth is given by  $\tau_\nu = k_\nu N_d$ , where  $k_\nu$  is the absorption mass coefficient given by  $k_\nu = k_0(\nu/\nu_0)^\beta$ —where  $\beta$  is the opacity index—and  $N_d$  the mass column density of the dust toward the line of sight. Adopting the  $k_0$  at 1.3 mm as  $k_{1.3} = 0.01$  (taken from Figure 5, assuming a dust-to-gas ratio of 0.01), we performed the fit by using two graybodies to reproduce the Elias 29 SED at long wavelengths. Table 2 shows the better parameters obtained with the fit.

<sup>8</sup> <http://irsa.ipac.caltech.edu>



**Figure 7.** Modeling employing only unprocessed ices (Model 1) for the Elias 29 SED. The four panels show the spectral energy distribution of Elias 29 (black line), modeled by RADMC-3D (red line). (a) the dotted black line represents the blackbody associated with 4880 K, blue and green dashed lines are the graybody associated with the cold foreground clouds (20 and 25 K, respectively), and photometric measurements from near-IR to sub-millimeter taken from public archives. (b) Detail of panel (a), covering 2.5–200  $\mu\text{m}$ . (c) Detail of panel (a), covering 2.5–5.0  $\mu\text{m}$ . This panel also shows the absorption features of CO, CO<sub>2</sub>, and H<sub>2</sub>O. (d) Detail of panel (b), covering 5.0–30.0  $\mu\text{m}$ . This panel shows the presence of absorption bands of CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, and silicate.



**Figure 8.** Better modeling employing processed ices (Model 2) for the Elias 29 SED. The lines and symbols are the same as Figure 7. However, in panel (d) the absorption range from 5.5 to 8.0  $\mu\text{m}$  was better fitted by Model 2, as is indicated by the presence of HCOOH and CH<sub>4</sub>. The inset panel is a zoom in on the region of the fit.

**Table 2**  
Parameters Obtained from Graybody Fitting Relative to Cold Foreground Clouds

Graybody	$N_{\text{H}}$ (cm <sup>-2</sup> ) <sup>a</sup>	$A_V$ (mag) <sup>b</sup>	$\Delta\Omega$ (sr)	$\beta$	$T$ (K)
1	$(8.0 \pm 0.2) \times 10^{21}$	$4.0 \pm 1.0$	$(1.7 \pm 0.1) \times 10^{-8}$	2	$25.2 \pm 1.3$
2	$(1.2 \pm 0.3) \times 10^{22}$	$6.0 \pm 1.5$	$(7.0 \pm 0.1) \times 10^{-7}$	2	$20.2 \pm 0.8$

**Notes.**

<sup>a</sup> Assuming a dust-to-gas ratio of 0.01.

<sup>b</sup> Using the relation  $N_{\text{H}} = 2 \times 10^{21} A_V \text{ cm}^{-2} \text{ mag}^{-1}$  from Bohlin et al. (1978).

Figures 7(a) and 8(a) also show that near-IR fluxes are over strong extinction by dust. From the difference between the blackbody of the protostar without extinction (dotted line) and the modeled blackbody (red line), the extinction calculated for the *J* band at  $1.23 \mu\text{m}$  is  $A_J = 15.3 \text{ mag}$ . Assuming that visual extinction  $A_V$  is related with  $A_J$  by using  $A_J = 0.282 A_V$  from Cambr esy et al. (2002), then the visual extinction toward Elias 29 is  $A_V = 54.3 \text{ mag}$ . Given the relation between the visual extinction and column density of hydrogen from Bohlin et al. (1978),  $N_{\text{H}} = 1.3 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$  toward line of sight of Elias 29. This value agrees with the estimate presented in Boogert et al. (2000), calculated as  $N_{\text{H}} = 0.5\text{--}1.2 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$ . From McClure et al. (2010), it is possible calculate that  $N_{\text{H}} = 0.8 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$  for Elias 29.

Figures 7(b) and 8(b) show, in detail, the fitting (red line) covering  $2.3\text{--}200 \mu\text{m}$  over the observational data from the *ISO* (black line). These panels highlight the good fit of the continuum from the near-IR to far-IR. Figures 7(c) and 8(c) present strong absorption bands of  $\text{H}_2\text{O}$  ( $3.07 \mu\text{m}$ ),  $\text{CO}_2$  ( $2.69$  and  $4.26 \mu\text{m}$ ), and  $\text{CO}$  ( $4.67 \mu\text{m}$ ) ices. As discussed by Rocha & Pilling (2014) the observed absorption profile of  $\text{H}_2\text{O}$  clearly indicates its amorphous structure. Laboratory studies from Fraser et al. (2001) show that  $\text{H}_2\text{O}$  ice changes from the amorphous to crystalline phase at a temperature around 120 K. This means that the temperature where  $\text{H}_2\text{O}$  ice is condensed must be lower than 120 K. Figures 7(c) and 8(c) also show a small shift of the modeled band of  $\text{CO}_2$  and  $\text{CO}$  compared with the observation. This happens because we are assuming that ice grains in the modeling have a spherical geometry, as proposed by the Mie theory. Studies from Boogert et al. (2002) show that if ellipsoidal grains, instead spherical ones, are assumed, such bands can be better fit.

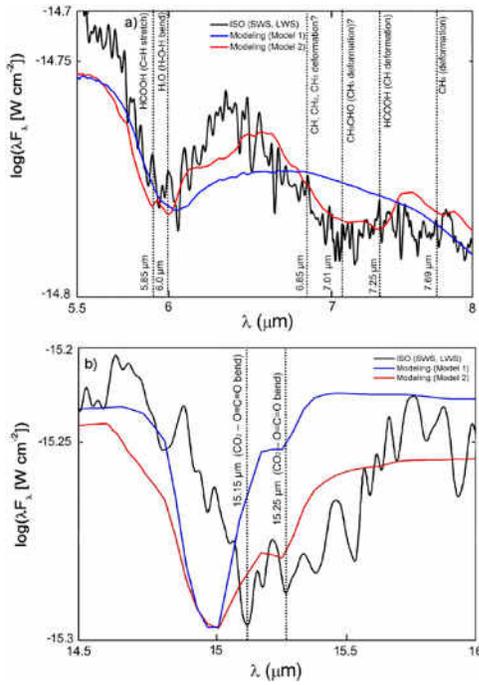
Figures 7(d) and 8(d) show that the silicate is the most strong band in this range ( $9.8$  and  $18 \mu\text{m}$ ). Furthermore, ice grains containing molecules such as  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{HCOOH}$ , and  $\text{CH}_4$  observed toward Elias 29 (Boogert et al. 2000) also present vibrational modes in this part of the infrared spectrum. However, Figures 7(d) and 8(d) show that if only unprocessed ices are employed in the modeling (Model 1), the absorption bands between  $5.5$  and  $8.0 \mu\text{m}$  are poorly fit. Otherwise, if a fraction of bombarded ice ( $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$ ) is added to an unprocessed one (Model 2), the same range in the observed infrared spectrum of Elias 29 is better simulated. The inset graphic in Figure 8(d) shows a detailed zoom of the fitting between  $5.5$  and  $8.0 \mu\text{m}$ . Model 2 is also able to better fit the  $\text{CO}_2$  absorption band at  $15.15$  and  $15.25 \mu\text{m}$ , compared with Model 1.

Figure 9(a) presents, with detail, the infrared spectrum of Elias 29, as well as the two Models developed by this work in the spectral region between  $5.5$  and  $8.0 \mu\text{m}$ . Several molecules have vibrational modes in this spectral region and, therefore, the laboratory experiments are very helpful to identify the

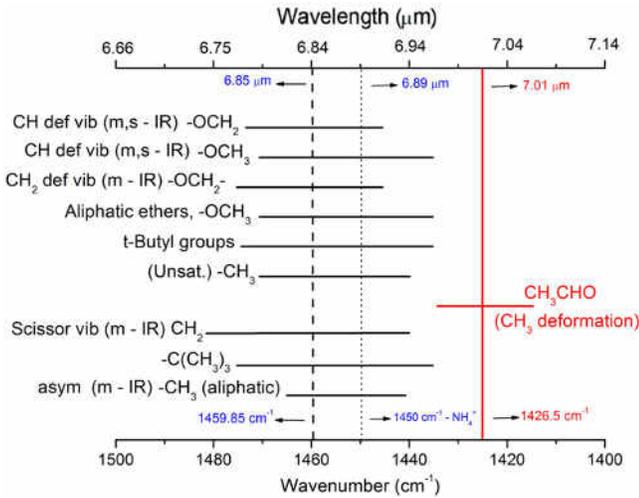
presence of specific molecules. First, the observed presence of a  $\text{HCOOH}$  ice, due to vibrational modes at  $5.85 \mu\text{m}$  (C=H stretch vibrational mode) and  $7.25 \mu\text{m}$  due to CH deformation. Next, a deformation mode of  $\text{CH}_4$  ice is also observed at  $7.69 \mu\text{m}$ . Additionally, some complex molecules may be associated with the absorption bands at  $6.85$  and  $7.01 \mu\text{m}$ . The band at  $7.01 \mu\text{m}$  can be associated with the acetaldehyde molecule ( $\text{CH}_3\text{CHO}$ ) due to the  $\text{CH}_3$  deformation mode. Studies from Bennett et al. (2005) show that this molecule can be formed inside dense molecular clouds when the astrophysical ice interacts with CRs. On the other hand, the nature of the band at  $6.85 \mu\text{m}$  is unclear. Usually in the literature this band has been associated with the  $\text{NH}_4^+$  ion from Shutte & Khanna (2003). However, in this paper we have shown that this feature can arise from a mixture containing only  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  bombarded by CR analogs. In the current methodology, the molecular composition of the employed mixture does not contain nitrogen atoms, and therefore, the feature at  $6.85 \mu\text{m}$  is reproduced without the need for the  $\text{NH}_4^+$  (ammonium) ion.

Additional evidence of the thermal processing of the ice inventory around Elias 29 can be observed from Figure 9(b). The  $\text{CO}_2$  ice, pure and partially crystalline at low temperature ( $\sim 10 \text{ K}$ ), is split into two narrow bands at  $15.15$  and  $15.25 \mu\text{m}$ . On the other hand, if the  $\text{CO}_2$  ice is trapped in an  $\text{H}_2\text{O}$  ice forming a mixture ( $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$ ) at low temperature, this absorption band presents a unique peak. However, laboratory experiments from Ehrenfreund et al. (1997) have shown that if a mixture of  $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2$  is submitted to increasing temperature, the split profile of  $\text{CO}_2$  at  $15.15$  and  $15.25 \mu\text{m}$  arises again. Such behavior has been associated with the ice segregation between apolar ( $\text{CO}_2$ ) and polar ( $\text{H}_2\text{O}$ ) molecules in the ice, which begins around 40 K. The second peak increases together with the increasing temperature. Figure 9(b) shows that if it is assumed to be pure crystalline  $\text{CO}_2$  ice (Model 1), the band in  $15.15\text{--}15.25 \mu\text{m}$  is poorly fitted. A better fit is reached if a thermally processed ice is present around Elias 29 (Model 2).

Figure 10 shows that the regime between  $5.5$  and  $8.0 \mu\text{m}$  can be associated with several and other species that do not contain nitrogen atoms, as for example, aliphatic ethers (e.g., R1-OCH<sub>2</sub>-R2) and related species. The problem of the complex molecules associated with this band is that strong absorption features in other wavelengths are missing. Pilling et al. (2010b) show that if an ice mixture containing  $\text{NH}_3$  is bombarded by CR analogs, the absorption band at  $6.85 \mu\text{m}$  also arises. However, the  $\text{OCN}^-$  is formed from ice bombardment as well, like in the Shutte & Khanna (2003) experiment. Perhaps this means that the band at  $6.85 \mu\text{m}$  is associated with  $\text{NH}_4^+$  ion when  $\text{OCN}^-$  is also formed. Otherwise, such band should be associated with the vibrational modes of C–H bonds. We conclude that Model 2 produces a better fit than Model 1, and in Table 3 compare the observed and modeled SEDs (Figure 8) at the central wavelengths of the ice absorption bands.



**Figure 9.** Evidence of the ice processing around Elias 29. Panel (a) shows the presence of HCOOH and CH<sub>4</sub>. Furthermore, the range from 5.5 to 8.0  $\mu\text{m}$  may be associated with C–H bonds, including CH<sub>3</sub>CHO at 7.01  $\mu\text{m}$ . Panel (b) shows evidence of the ice segregation in polar and apolar species.



**Figure 10.** Diagram showing molecular species and some radicals containing H, C, and O that can be associated with the peak in the IR spectrum within the range of 5.5–8.0  $\mu\text{m}$ . The black dashed line indicates the wavelength at 6.85  $\mu\text{m}$  and the dotted black line indicates the central wavelength associated with the NH<sub>4</sub><sup>+</sup> ion from Shutte & Khanna (2003). The red line indicates the CH<sub>3</sub> deformation associated with acetaldehyde (CH<sub>3</sub>CHO).

### 3.2. Alternative Models for Grain Size Distribution

In this section, we show how the modeled SED of Elias 29 changes by adopting three regimes of dust grain sizes (silicate and amorphous carbon) and following the MRN size distribution (see Section 2.2.2 and Figure 5). It is important to observe that the size distribution of the ice remains the same and the adopted parameters are the same as Model 2. Figure 11(a) shows the Elias 29 SED between 2.5 and 30.0  $\mu\text{m}$ , where the blue dashed line is the fitting employing the small grain distribution (0.005–0.25  $\mu\text{m}$ ) and the green dashed line is the

fitting employing large dust grains (0.25–1.0  $\mu\text{m}$ ). The better fit from near- to far-infrared is given by size grains between 0.25 and 0.70  $\mu\text{m}$ . The other sizes can fit the observational data besides 8  $\mu\text{m}$ , but are not able to model the spectrum at near-IR. The infrared region between 2.5 and 4.0  $\mu\text{m}$  for different size dust grains is shown in Figure 11(b), and highlights the fitting in the near-IR. The extinction caused by small or large dust grains cannot reproduce the observational SED in all wavelengths. On the other hand, dust grains with intermediary size (0.25–0.70  $\mu\text{m}$ ) are able to model with accuracy the spectrum of Elias 29. This result is interesting because dust grains with a size of 0.6  $\mu\text{m}$  were proposed by Boogert et al. (2000) to fit the Elias 29 SED, and with a size of 0.7  $\mu\text{m}$  were observed toward Elias 29 by Beckford et al. (2008).

Indeed, the intermediary size dust grains, following the MRN distribution, were able to model the Elias 29 SED in this paper. However, some caveats should be mentioned about this section. Miotello et al. (2014) show that dust grains with millimeter size can be present in the Elias 29 envelope because they are necessary to fit the data at 1.1 mm and 3 mm from the Submillimeter Array (SMA) and ATCA, respectively. However by assuming the MRN distribution in this paper, large grains are not able to reproduce the Elias 29 SED. Perhaps a way to address this question would be a detailed study about the power law of the grains size distribution focusing on Elias 29. An additional caveat about this section is that we are considering that ice opacities are not affected by changing the dust grain size. Moreover, we are supposing that the size of the ices follows a strictly MRN distribution given by small grains.

### 3.3. Grain Abundances

To determine the average abundances relative to H<sub>2</sub>, we employed the optical depth analysis explained in Boogert et al. (2000) because it allows us to calculate the abundances of numerous ice species that are formed with the ice bombardment. Briefly, it is defined as the continuum curve over the observational SED, as simulated by the blackbody fits. Next, the equation  $\tau(\lambda) = \ln(I_0(\lambda)/I(\lambda))$  is used to determine the optical depth  $\tau(\lambda)$  in each wavelength, where the observed spectrum and the adopted continuum are given by  $I(\lambda)$  and  $I_0(\lambda)$ , respectively. Thereafter, knowing the optical depth and the band strength of each absorption, the column density is calculated. The column density for hydrogen calculated in this paper was  $N_{\text{H}} = 1.3 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$  (see Section 3.1). Lastly, the abundance of ices is given by the ratio between the column density of ices and H<sub>2</sub>. However, unlike Boogert et al. (2000), such a methodology was applied by using the better model (Model 2), as shown in Figure 8. This methodology allows us to calculate the column density of the ices originated from the processing by CRs, but without the noise present in the observed spectrum. Table 4 shows the values obtained from this paper for Elias 29.

Figure 12(a) shows the average abundance of ices calculated from Model 2, compared with values from Boogert et al. (2000) and Lommen et al. (2008). Because we are assuming the presence of bombarded H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub> ice, the abundances of the processed material were also calculated. The necessary amount of processed H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> ice to fit the observable spectrum was roughly 14 and 7%, respectively, relative to the total abundance employed in the modeling. The limits greater than observed by Boogert et al. (2000) are due to the bandwidth obtained from Model 2. CH<sub>3</sub>OH and CH<sub>3</sub>CHO are not shown in this figure because the presence of such molecules is

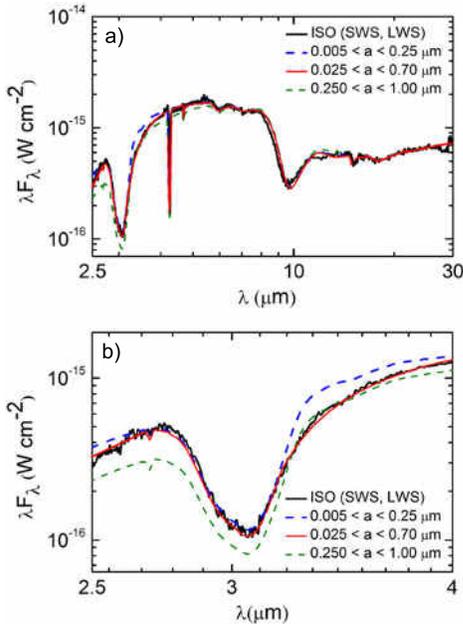
**Table 3**  
Model 2 Comparison Between the Observed and Modeled  $\lambda F_\lambda$  for Each Absorption Band of Ice and Silicate

$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	$k$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	Assignment	$\lambda F_\lambda$ (Observed) ( $\text{W cm}^{-2}$ ) <sup>a</sup>	$\lambda F_\lambda$ (Modeled) ( $\text{W cm}^{-2}$ ) <sup>b</sup>	Error (%)
2.69	3708	CO <sub>2</sub>	$(5.92 \pm 0.05) \times 10^{-16}$	$5.91 \times 10^{-16}$	0.17
3.07	3250	H <sub>2</sub> O	$(1.38 \pm 0.03) \times 10^{-16}$	$1.37 \times 10^{-16}$	0.72
4.26	2342	CO <sub>2</sub>	$(1.36 \pm 0.03) \times 10^{-16}$	$1.38 \times 10^{-16}$	1.45
4.67	2139	CO	$(1.22 \pm 0.02) \times 10^{-15}$	$1.21 \times 10^{-15}$	0.81
5.83	1715	HCOOH	$(1.47 \pm 0.03) \times 10^{-15}$	$1.44 \times 10^{-15}$	2.01
6.00	1650	H <sub>2</sub> O	$(1.45 \pm 0.01) \times 10^{-15}$	$1.44 \times 10^{-15}$	0.70
6.85	1459	CH <sub>3</sub> def?	$(1.48 \pm 0.08) \times 10^{-15}$	$1.47 \times 10^{-15}$	0.67
7.01	1426	CH <sub>3</sub> CHO?	$(1.40 \pm 0.01) \times 10^{-15}$	$1.42 \times 10^{-15}$	1.41
7.67	1304	CH <sub>4</sub>	$(1.38 \pm 0.02) \times 10^{-15}$	$1.41 \times 10^{-15}$	2.27
9.70	1031	Silicate	$(2.94 \pm 0.01) \times 10^{-15}$	$3.00 \times 10^{-15}$	2.00
12.5	800	H <sub>2</sub> O	$(5.55 \pm 0.41) \times 10^{-16}$	$5.70 \times 10^{-16}$	2.63
15.15	660	CO <sub>2</sub>	$(4.53 \pm 0.29) \times 10^{-16}$	$4.52 \times 10^{-16}$	0.22
15.25	655	CO <sub>2</sub>	$(4.78 \pm 0.28) \times 10^{-16}$	$4.87 \times 10^{-16}$	1.84
18.00	555	Silicate	$(5.27 \pm 0.17) \times 10^{-16}$	$5.20 \times 10^{-16}$	1.30

**Note.** The central wavelength and wavenumber, as well as the associated molecules, are presented in columns 1, 2, and 3, respectively. The  $\lambda F_\lambda$  values are presented in columns 4 and 5, and the percentage error in column 6.

<sup>a</sup> ISO (SWS, LWS) de Graauw et al. (1996) and Clegg et al. (1996).

<sup>b</sup> This paper.



**Figure 11.** Modeling by using different size grains. Panel (a) presents the spectrum between 2.5 and 30  $\mu\text{m}$ , showing that small and large grains cannot fit the observation. Panel (b) shows detail of panel (a) between 2.5 and 4.0  $\mu\text{m}$ . The small grains (0.005–0.25  $\mu\text{m}$ ) can fit small wavelengths, but cannot fit longer wavelengths. On the other hand, large grains (0.25–1.0  $\mu\text{m}$ ) cannot fit the spectrum at near-IR and mid-IR. The better fit is given by intermediary size grains (0.025–0.7  $\mu\text{m}$ ).

uncertain in this paper. Figure 12(b) shows the mass of the disk and envelope used in Model 2, compared with values from Lommen et al. (2008). The upper limit proposed for Elias 29 is  $M_{\text{disk}} \leq 0.007 M_\odot$  and  $M_{\text{envelope}} \leq 0.058 M_\odot$ . The values calculated from Model 2 were  $M_{\text{disk}} = 0.003 M_\odot$  and  $M_{\text{envelope}} = 0.028 M_\odot$  and are shown in Figure 12(b).

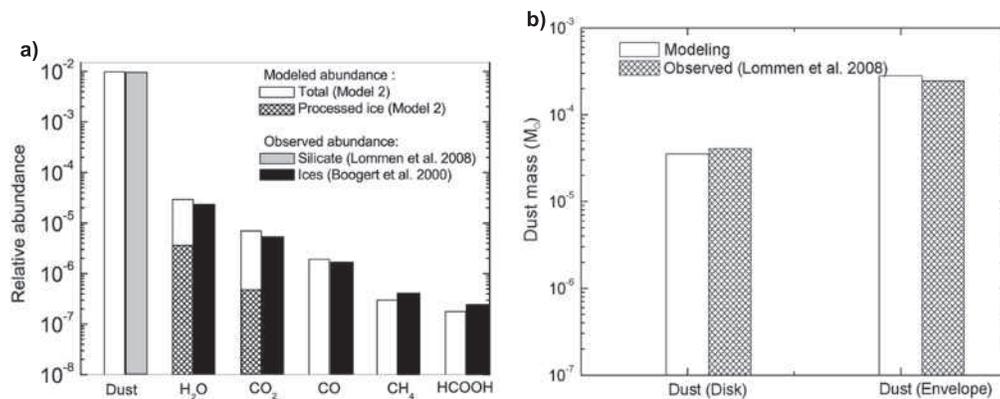
### 3.4. Density and Temperature Structure

Figures 13(a) and (b) present the density and temperature distribution for Model 2, emphasizing the disk and envelope,

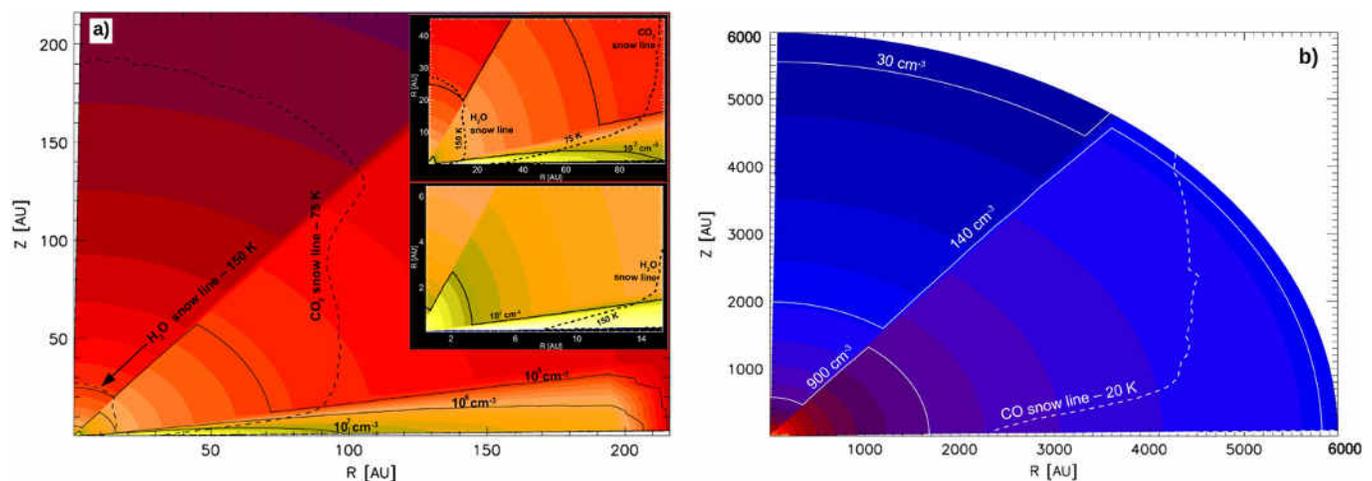
respectively. Such parameters were necessary to determine the regions where the ices employed in Model 2 survive in the solid phase. The continuous lines in Figures 13(a) and (b) indicate the density contours for H<sub>2</sub> in  $\text{cm}^{-3}$ . Figure 13(a) shows that the disk density at the mid-plane reaches values of more than  $10^7 \text{ cm}^{-3}$ , while in Figure 13(b), the density of the envelope close to the edge is equivalent to  $140 \text{ cm}^{-3}$ . The dashed lines represent the snow lines, which are the limits that define regions around the protostar where pure molecules survive in the solid phase. The inset panels in Figure 13(a) show detail of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O snow lines.

The temperature map calculated from Model 2, using the RADMC-3D code, allows to conclude that water-rich ices are present in the Elias 29 disk, just beside 8 AU, and in the envelope beyond 14 AU. This difference is due to density distribution on the disk and envelope. On the other hand, the more volatile, pure CO<sub>2</sub> ice stay in the disk and envelope beyond 20 and 80 AU, respectively. However, pure CO ice just survives in the solid phase far away from the radiation source. Due to Elias 29's disk inclination of  $i = 60^\circ$ , Figure 13(b) allows us to conclude that most pure CO ice observed toward Elias 29 should not be placed in their envelope due to high temperature, but in cold foreground clouds. This confirms the observation of CO in the gas phase toward Elias 29, as shown in Boogert et al. (2000). Although it has been considered that all CO ice is trapped in the H<sub>2</sub>O ice, the most realistic scenario should take into account the radiative transfer in the foreground clouds containing pure CO ice.

There is evidence in the literature that snow lines move away along the evolution of protostars from class I to photosphere objects. Zhang et al. (2013) report different water abundances in the TW HYA protoplanetary disk. The authors observed that between 0.5 and 4 AU, the abundance was calculated in  $10^{-6}$  per H<sub>2</sub>, while after 4 AU it was calculated in  $10^{-4}$  per H<sub>2</sub>. This observational data mean that with time in passive disks, like Elias 29, the inner disk becomes very dry, while a significant ice reservoir is formed at large radii of the disks formed.



**Figure 12.** (a) Relative abundance of each molecular specie used in the modeling compared with observational data from other authors. The white bars represent the total abundance relative to H<sub>2</sub> that is necessary to fit the Elias 29 spectrum, assuming a dust-to-gas ratio equal to 0.01. Likewise, the gray bar is the dust-to-gas ratio taken from Lommen et al. (2008). The hatched bars represent the abundance of the ice processed by ionizing radiation, used in Model 2. The black bars show the abundances of the ices found in Boogert et al. (2000) for Elias 29 obtained from the ratio between the column density of the ices and the column density of H<sub>2</sub>. (b) Dust mass (in solar mass) employed in Model 2 (white bars) for the disk and envelope compared with observational data from Lommen et al. (2008; hatched bars).



**Figure 13.** Structure of the H<sub>2</sub> density (continuous line) in cm<sup>-3</sup> and selected temperature in K (dashed line) for the Elias 29 protostar. The color code indicates changes in the H<sub>2</sub> density. (a) Region limited to 210 AU to emphasize the disk. The two dashed lines indicate temperatures of 150 and 75 K, respectively. Inset panels show with detail the inner part of the protoplanetary disk. (b) Region limited to 6000 AU to emphasize the envelope. The density of that region is very low in relation to the disk, and the dashed line indicates the temperature of 20 K.

**Table 4**  
Average Abundances of Ices Observed Toward Elias 29 Calculated from Model 2, Compared with Values Obtained in the Literature

Ice Species	Column Density (10 <sup>18</sup> cm <sup>-2</sup> )	Abundance Relative to H <sub>2</sub> gas	Abundance Relative to H <sub>2</sub> gas (Literature) <sup>a</sup>	Wavelength— $\mu$ m (Wavenumber—cm <sup>-1</sup> )	Band Strength (cm molecule <sup>-1</sup> )
H <sub>2</sub> O	3.50	$2.9 \times 10^{-5}$	$2.5 \times 10^{-5}$	3.07 (3250)	$2.0 \times 10^{-16b}$
CO <sub>2</sub>	0.84	$7.0 \times 10^{-6}$	$5.6 \times 10^{-6}$	4.26 (2342)	$7.6 \times 10^{-17b}$
CO	0.21	$1.9 \times 10^{-6}$	$1.7 \times 10^{-6}$	4.67 (2139)	$1.1 \times 10^{-17b}$
HCOOH	0.02	$1.8 \times 10^{-7}$	$<2.5 \times 10^{-7}$	5.83 (1715)	$6.7 \times 10^{-17c}$
CH <sub>4</sub>	0.04	$3.1 \times 10^{-7}$	$<4.1 \times 10^{-7}$	7.67 (1304)	$7.3 \times 10^{-18d}$
CH <sub>3</sub> OH	0.06	$1.3 \times 10^{-7}$	$<6.3 \times 10^{-7}$	6.85 (1460)	$1.2 \times 10^{-17e}$
CH <sub>3</sub> CHO	0.004	$3.2 \times 10^{-8}$	...	7.01 (1426)	$3.6 \times 10^{-18f}$

<sup>a</sup> Boogert et al. (2000).

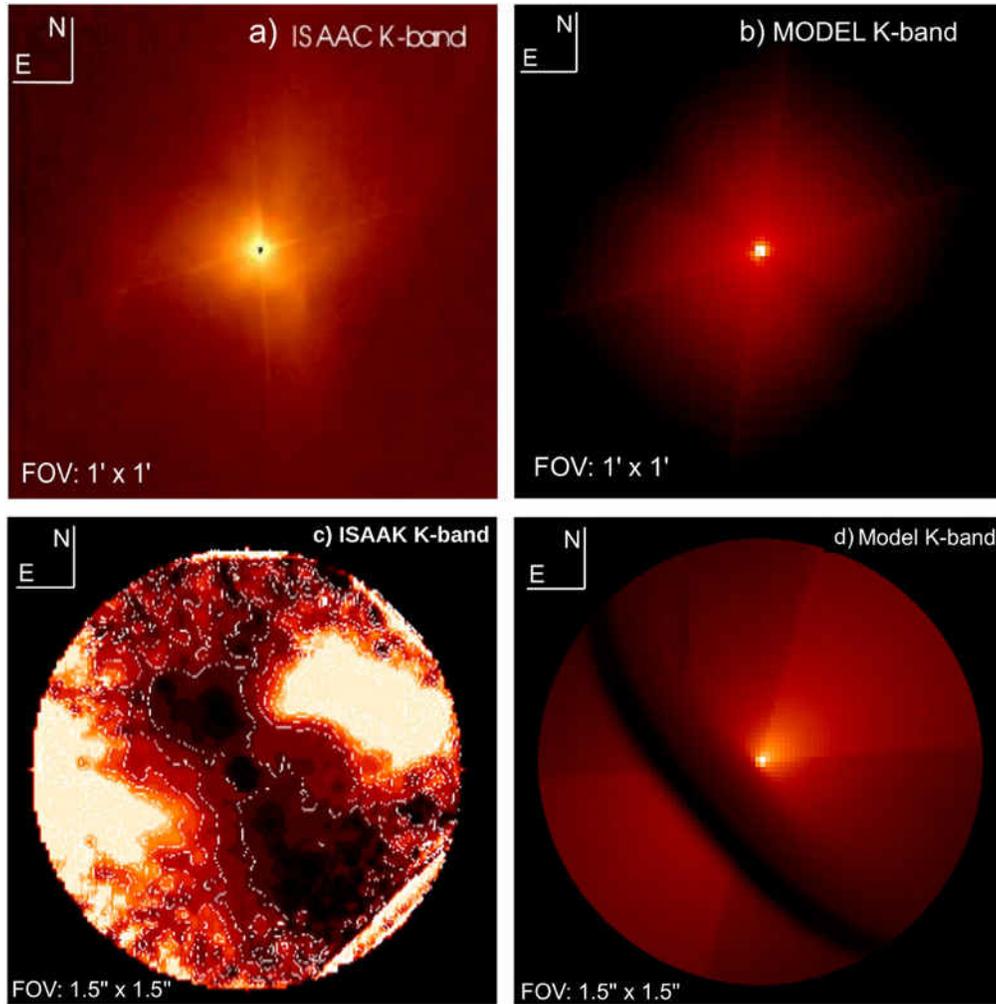
<sup>b</sup> Gerakines et al. (1995).

<sup>c</sup> Schutte et al. (1999).

<sup>d</sup> Kerkhof et al. (1999).

<sup>e</sup> Assumed to be the CH<sub>3</sub> deformation of CH<sub>3</sub>OH at 6.85  $\mu$ m.

<sup>f</sup> Bennett et al. (2005)—Assumed to be the CH<sub>3</sub>CHO molecule.



**Figure 14.** Comparison between the observed and modeled images of Elias 29 in the infrared with the same field of view (FOV). (a) Elias 29 structure in a field of view equal to  $1' \times 1'$  on the  $K$  band from ISAAC (Infrared Spectrometer And Array Camera), modified from Huélamo et al. (2005). (b) Modeled image on the  $K$  band, assuming the parameters of Model 2. (c) Normalized  $K$ -band polarization image emphasizing the disk of Elias 29. (d) Modeled image calculated from Model 2, without polarization.

### 3.5. Infrared Images

In this section we present the images in the IR, modeled with RADMC-3D, assuming a more realistic scenario (Model 2). The images were created by using the  $1 \times 10^9$  photon package to run the Monte Carlo simulation. Then, the average intensity over width  $\Delta\lambda$  of each filter was calculated.

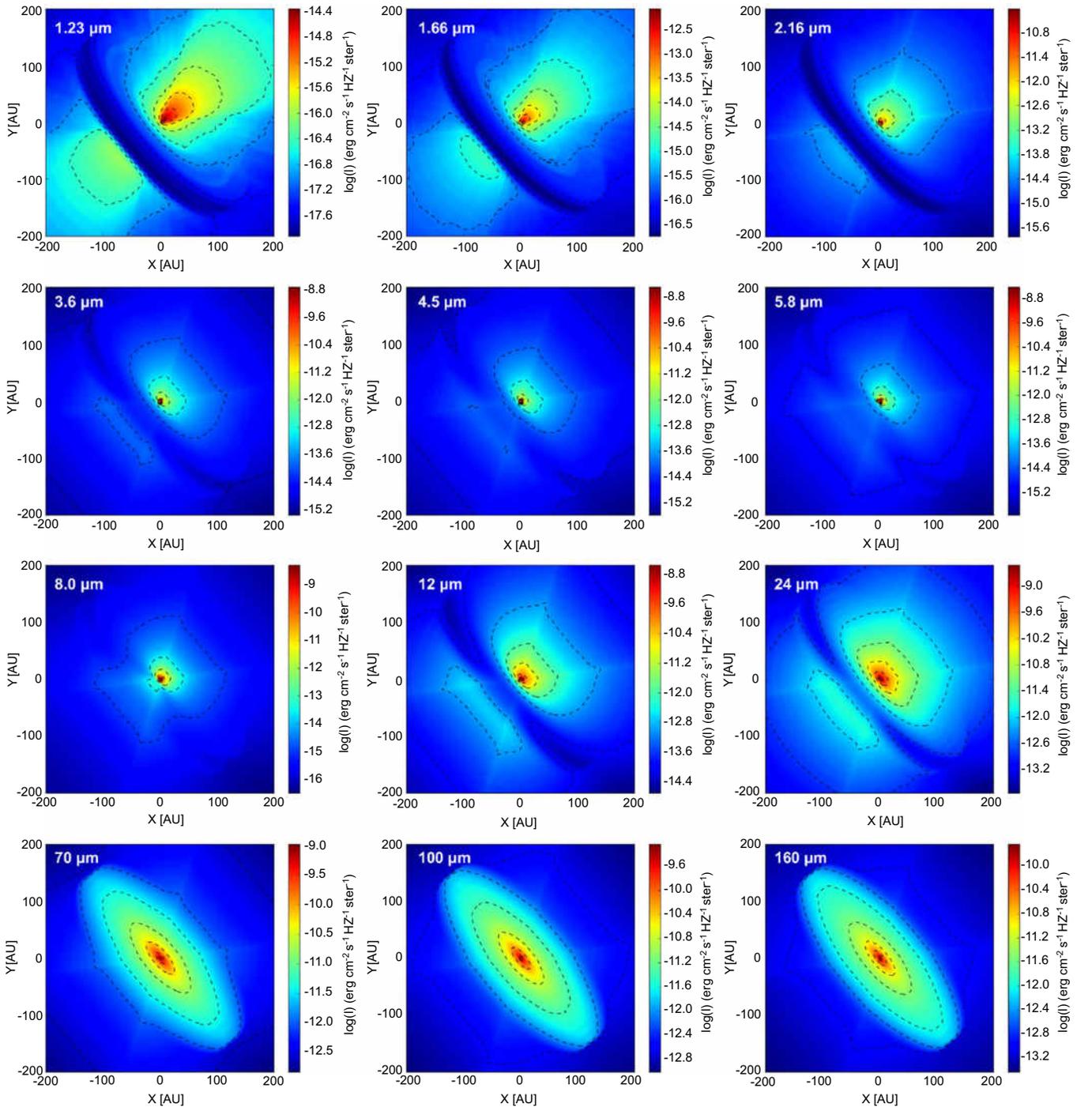
The comparison between the observed images of Elias 29 in the infrared and modeled images (Model 2) are shown in Figure 14. Figure 14(a) presents the observed image in the  $K$  band taken from Huélamo et al. (2006) with  $\text{FOV} = 1' \times 1'$ . Figure 14(b) shows the simulated image in the same band and in the same FOV employing Model 2. The difference in the brightening between the observed and modeled images may be explained by an external illumination originating from nearby stars. Whitney et al. (2013) show that the external illumination can dominate if the central source luminosity is very low, and/or the outer radius of the envelope is very large. From Figure 13(b), we can observe that the large model envelope around Elias 29 is very cold near the edge and therefore exhibits low surface brightness in the near-infrared. On the other hand, the presence of external illumination around Elias 29 would increase the temperature of the envelope, and

consequently, increase the near-IR surface brightness. Furthermore, Figures 14(c) and (d) emphasize the disk structure of Elias 29 in a  $\text{FOV} = 1.5'' \times 1.5''$ . The observed image was taken from Huélamo et al. (2006) by using the polarimetric technique with the NACO instrument. This image represents the normalized  $K$ -band polarization. The dark lane is seen in the NE–SW direction, in addition to scattering the radiation in the NW–SE. The modeled image presents the extinction of the radiation due to disk, as well as the scattering. From this image, we can conclude which dark structure seen from observations is due to the surface of the disk.

Figures 15 and 16 show the resolved images, emphasizing the disk structure and the envelope in the IR, respectively, as well as the intensity in logarithmic scale. All panels in Figure 15 have an FOV of  $3/3 \times 3/3$  or  $400 \text{ AU} \times 400 \text{ AU}$ , while Figure 16 illustrates an FOV of  $100'' \times 100''$  or  $12,000 \text{ AU} \times 12,000 \text{ AU}$ , assuming a distance of 120 pc, obtained from SED modeling.

## 4. CONCLUSIONS

We present a realistic theoretical model of the spectrum and image of the Elias 29 protostar using an axisymmetric, Monte

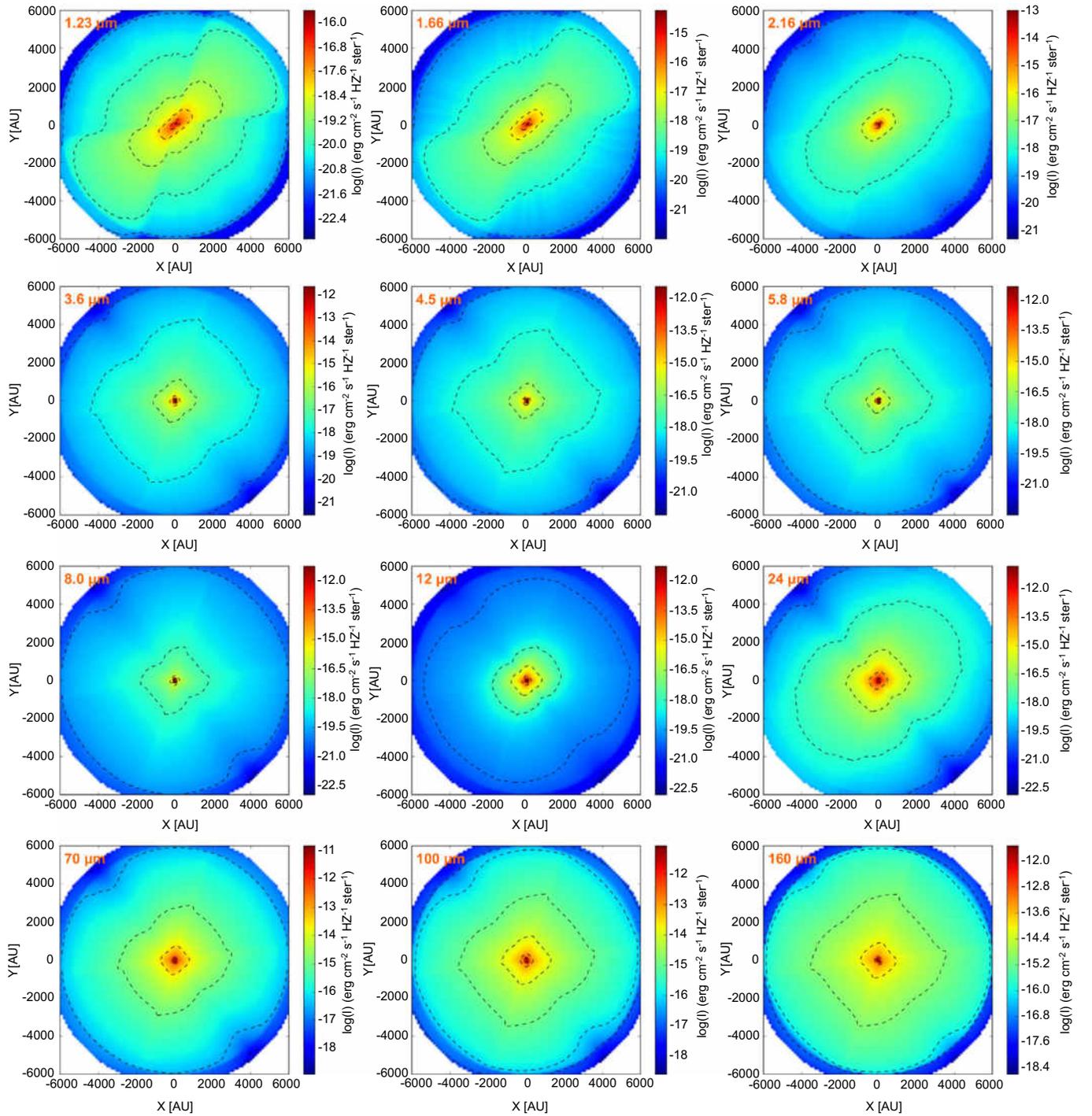


**Figure 15.** Resolved images for Elias 29, modeled using the RADMC-3D code. The layers present the intensities in  $\text{ergs cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{Hz}^{-1} \text{sr}^{-1}$  for images ranging from near- to far-IR, and the contours correspond to values on the color bar. Each layer has a field of view of  $3/3 \times 3/3$  or  $400 \text{ AU} \times 400 \text{ AU}$ . The inclination of the protoplanetary disk relative to the line of sight is easily observed at low wavelengths (the the upper panels in this figure). An illustration of the modeled scenario is given in Figure 6.

Carlo radiative transfer code. An important characteristic of this paper was the use of radiative and thermal processed ices by high energy CRs, unlike previous works. The main conclusions obtained in this paper are summarized as follows.

1. The better model obtained for this YSO indicates that Elias 29 is better explained by a class I protostar in the late accretion phase. Furthermore, Elias 29 should be surrounded by a disk, with inclination close to  $60^\circ$ , to

reproduce the observed SED and image in near-IR. Moreover, the environment of Elias 29 is better reproduced by considering grains larger than observed in the interstellar medium, but somewhat lower than observed in dense regions of molecular clouds. Furthermore, a large fraction of the  $\text{H}_2\text{O}$ -rich ices observed toward Elias 29 are likely found in the cooler envelope regions outside the  $\text{H}_2\text{O}$  snow line. On the other hand, the



**Figure 16.** Resolved images for Elias 29, modeled using the RADMC-3D code. The layers present the intensities in  $\text{ergs cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{Hz}^{-1} \text{sr}^{-1}$  for images ranging from near- to far-IR and the contours correspond to values on the color bar. Each layer has a field of view of  $100'' \times 100''$  or  $12,000 \text{ AU} \times 12,000 \text{ AU}$ .

envelope is mostly too warm to support CO ice, implying most of the CO ice must be placed in foreground clouds.

2. There strong evidence that the ices around Elias 29 have been processed by high energy CRs and by temperature, which differs from the interpretation in Boogert et al. (2002a). The fingerprint of this processing can be found from the presence of HCOOH, CH<sub>3</sub>CHO, and CH<sub>4</sub>, due to interaction of the H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> ices with high energy cosmic rays. Moreover, the band at  $6.85 \mu\text{m}$  observed in the Elias 29 spectrum can be associated with vibrational

modes of C–H bonds, instead of NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, due to the absence of the absorption feature associated with OCN<sup>-</sup>. Additionally, the ice segregation observed in 15.15 and  $15.25 \mu\text{m}$  is more evidence that the thermal processing is induced by CRs.

3. The image modeled in the *K* band presents a good agreement with the observed image from the ISAAC telescope and with results from Huélamo et al. (2006) for  $\text{FOV} = 1' \times 1'$  and  $\text{FOV} = 1.5' \times 1.5'$ . The resolved images of the disk also present a dark lane in the near-IR,

as observed in Huélamo et al. (2006). Additionally, the images emphasizing the envelope show characteristics of a bipolar cavity, as observed in Elias 29.

4. This paper shows the importance of combining the radiative transfer simulations with laboratory data of processed astrophysical ices to understand the absorption features of spectra of YSOs. Such a procedure highlights the importance of CRs to drive the formation of complex molecules around protostars.

We thank the anonymous referee for a careful review of the paper that allowed for its improvement. The authors also acknowledge the financial support from FAPESP (DR 2013/07657-5 and JP 2009/18304-0) and Ms. Alene Alder Rangel for the English revision of this manuscript.

## REFERENCES

- Beckford, A. F., Lucas, P. W., Chrysostomou, A. C., et al. 2008, *MNRAS*, **384**, 907
- Bennett, C. J., Jamieson, C. S., Osamura, Y., et al. 2005, *ApJ*, **624**, 1097
- Bjorkman, J. E., & Wood, K. 2001, *ApJ*, **554**, 615
- Bohlin, R. C., Savage, B. D., & Drake, J. F. 1978, *ApJ*, **224**, 132
- Boogert, A. C. A., Blake, G. A., & Tielens, A. G. G. M. 2002, *ApJ*, **577**, 271
- Boogert, A. C. A., Hogerheijde, M. R., Ceccarelli, C., et al. 2002a, *ApJ*, **570**, 708
- Boogert, A. C. A., Pontoppidan, K. M., Knez, C., et al. 2008, *ApJ*, **678**, 985
- Boogert, A. C. A., Tielens, A. G. G. M., Ceccarelli, C., et al. 2000, *A&A*, **360**, 683
- Cambrésy, L., Beichman, C. A., Jarrett, T. H., et al. 2002, *AJ*, **123**, 2559
- Chen, H., Myers, P. C., Ladd, E. F., & Wood, D. O. S. 1995, *ApJ*, **445**, 377
- Chiang, E. I., & Goldreich, P. 1997, *ApJ*, **490**, 368
- Clegg, P. E., Ade, P. A. R., Armand, C., et al. 1996, *A&A*, **315**, L38
- Cleeves, L. I., Bergin, E. A., Alexander, C. M. O'D, et al. 2014, *Sci*, **345**, 1590
- Collings, M. P., Anderson, M. A., Chen, R., et al. 2004, *MNRAS*, **354**, 1133
- de Geus, E. J., de Zeeuw, P. T., & Lub, J. 1989, *A&A*, **417**, 159
- de Graauw, Th., Haser, L. N., Beintema, D. A., et al. 1996, *A&A*, **315**, L49
- Demyk, K., Dartois, E., D'Hendecourt, L., et al. 1998, *A&A*, **339**, 553
- Diolaiti, E., Bendinelli, O., Bonaccini, D., et al. 2000, *A&AS*, **147**, 335
- Dullemond, C. P., & Monnier, J. D. 2012, *ARA&A*, **48**, 205
- Ehrenfreund, P., Boogert, A. C. A., Gerakines, P. A., et al. 1997, *A&AS*, **328**, 649
- Elias, J. H. 1978, *ApJ*, **224**, 857
- Enoch, M. L., Evans, N. J., II, Sargent, A. I., et al. 2009, *ApJ*, **692**, 973
- Evans, N. J., Allen, L. E., Blake, G. A., et al. 2003, *PASP*, **115**, 965
- Fazio, G. G., Hora, J. L., Allen, L. E., et al. 2003, *ApJS*, **154**, 10
- Fraser, H. J., Collings, M. P., McCoustra, M. R. S., et al. 2001, *MNRAS*, **327**, 1165
- Gail, H. P. 2010, in *Astromineralogy*, ed. T. Henning, II, Vol. 815, (2nd ed.; Berlin: Springer), 61
- Gerakines, P. A., Shutte, W. A., Greenberg, J. M., et al. 1995, *A&A*, **296**, 810
- Gómez, M., Stark, D. P., Whitney, B. A., et al. 2003, *ApJ*, **126**, 863
- Gramajo, L. V., Whitney, B. A., Gómez, M., et al. 2010, *ApJ*, **139**, 2504
- Henning, T., & Semenov, D. 2013, *ChRv*, **113**, 9016
- Hildebrand, R. H. 1983, *QJRAS*, **24**, 267
- Hora, J. L., Carey, S., Surace, J., et al. 2008, *PASP*, **120**, 1233
- Huélamo, N., Brandner, W., Wolf, S., et al. 2006, in *The Planet-Disc Connection 2006* (Cambridge: Institute of Astronomy), 9
- Hudson, R. L., Moore, M. H., & Gerakines, P. A. 2001, *ApJ*, **550**, 1140
- Kenyon, S. J., Whitney, B., Gómez, M., & Hartmann, L. 1993, *ApJ*, **414**, 773
- Kerkhof, O., Schutte, W. A., & Ehrenfreund, P. 1999, *A&A*, **346**, 990
- Lada, C. J. 1987, in *IAU Symp. 115, Star Forming Regions*, ed. M. Peimbert, & J. Jugaku (Cambridge: Cambridge Univ. Press), 1
- Lada, C. J., & Wilking, B. A. 1984, *ApJ*, **287**, 610
- Lommen, D., Jørgensen, J. K., van Dishoek, E. F., et al. 2008, *A&A*, **481**, 141
- Mathis, J. S., Rumpl, W., & Nordsieck, K. H. 1977, *ApJ*, **217**, 425
- McClure, M. K., Furlan, E., Manoj, P., et al. 2010, *ApJS*, **188**, 75
- Megeath, S. T., Allen, L. E., Gutermuth, R. A., et al. 2004, *ApJS*, **154**, 367
- Miotello, A., Testi, L., Lodato, G., et al. 2014, *A&A*, **567**, A32
- Motte, F., Andre, Ph., & Neri, R. 1998, *A&A*, **336**, 150
- Myers, P. C., & Ladd, E. E. 1993, *AJ*, **413**, L47
- Öberg, K. I., Boogert, A. C. A., Pontoppidan, K. M., et al. 2011, *ApJ*, **740**, 109
- Ossenkopf, V., & Henning, T. 1994, *A&A*, **291**, 943
- Pilling, S., Andrade, D. P. P., da Silveira, E. F., et al. 2012, *MNRAS*, **423**, 2209
- Pilling, S., Duarte, E. S., Domaracka, A., et al. 2011, *PCCP*, **13**, 15755
- Pilling, S., Seperuelo Duarte, E., da Silveira, E. F., et al. 2010, *A&A*, **509**, A87
- Pilling, S., Seperuelo Duarte, E., Domaracka, A., et al. 2010, *A&A*, **523**, A77
- Pontoppidan, K. M., Dullemond, C. P., van Dishoek, E. F., et al. 2005, *ApJ*, **622**, 463
- Robitaille, T. P., Whitney, B. A., Indebetouw, R., et al. 2007, *ApJS*, **169**, 328
- Rocha, W. R. M., & Pilling, S. 2014, *SAA*, **123**, 436
- Simon, M., Howell, R. R., Longmore, A. J., et al. 1987, *ApJ*, **320**, 344
- Schutte, W. A., Boogert, A. C. A., Tielens, A. G. G. M., et al. 1999, *A&A*, **343**, 966
- Schutte, W. A., & Khanna, R. K. 2003, *A&A*, **398**, 1049
- Steinacker, J., Pagani, L., Bacmann, A., et al. 2011, *A&A*, **511**, A9
- Tielens, A. G. G. M., & Charnley, S. B. 1997, *OLEB*, **27**, 23
- van Dishoek, E. F., & Blake, G. A. 1998, *ARA&A*, **36**, 317
- Visser, R., van Dishoek, E. F., Doty, S. D., et al. 2009, *A&A*, **495**, 881
- Ward-Thompson, D., Zylka, R., Mezger, P. G., et al. 2000, *A&A*, **355**, 1122
- Weingartner, J. C., & Draine, B. T. 2001, *ApJ*, **548**, 296
- Whitney, B. A., Kenyon, S. J., & Gómez, M. 1997, *ApJ*, **485**, 703
- Wilking, B. A., & Lada, C. J. 1983, *ApJ*, **271**, 698
- Whitney, B. A., Robitaille, T. P., Bjorkman, J. E., et al. 2013, *ApJS*, **207**, 30
- Whittet, D. C. B. 1974, *MNRAS*, **168**, 371
- Zhang, K., Pontoppidan, K. M., Salyk, C., & Blake, G. A. 2013, *ApJ*, **766**, 82
- Zhang, M., Brandner, W., Wang, H., et al. 2013, *A&A*, **553**, A41

# REFERÊNCIAS

---

---

**Adams F. C., Lada C. J. and Shu F. H.** Spectral evolution of young stellar objects [Journal] // ApJ. - 1987. - Vol. 312. - pp. 788-806.

**Ahn H. S. [et al.]** Energys spectra of cosmic-ray nuclei at high energies [Journal] // ApJ. - 2009. - Vol. 707. - pp. 593-603.

**Aikawa Y.** Interplay of Chemistry and Dynamics in the Low-Mass Star Formation [Journal] // Chem. Rev.. - 2013. - Vol. 113. - pp. 8961-8980.

**Andrade D. P. P. [et al.]** Acetone degradation by cosmic rays in the solar neighbourhood and in the Galactic Centre [Journal] // MNRAS. - 2014. - Vol. 444. - pp. 3792-3801.

**Andrade D. P. P. [et al.]** Chemical reactions induced in frozen formic acid by heavy ion cosmic rays [Journal] // MNRAS. - 2013. - Vol. 430. - pp. 787-796.

**André P., Ward-Thompson D. and Barsony M.** Submillimeter continuum observations of Rho Ophiuchi A - The candidate protostar VLA 1623 and prestellar clumps [Journal] // ApJ. - 1993. - Vol. 406. - pp. 122 - 141.

**Attwood David** Soft X-rays and Extreme Ultraviolet Radiation [Book Section] // Principles and Applications. - New York : Cambridge, 1999.

**Ballesteros-Paredes J. [et al.]** The Mass Spectra of Cores in Turbulent Molecular Clouds and Implications for the Initial Mass Function [Journal] // ApJ. - 2006. - Vol. 637. - pp. 384-391.

**Baratta G. A. and Palumbo M. E.** Infrared optical constants of CO and CO<sub>2</sub> thin icy films [Journal] // Journal of the Optical Society of America A. - 1998. - Vol. 15. - pp. 3076-3085.

**Beckford A. F. [et al.]** Near-infrared imaging polarimetry of young stellar objects in rho Ophiuchi [Journal] // MNRAS. - 2008. - Vol. 384. - pp. 907-929.

**Belloche A.** Observation of rotation in star forming regions: clouds, cores, disks, and jets [Journal] // EAS Publication Series. - 2013. - Vol. 62. - pp. 25-66.

---

**Bennett C. J. [et al.]** A Combined Experimental and Computational Investigation on the Synthesis of Acetaldehyde [CH<sub>3</sub>CHO(X1A')] in Interstellar ices [Journal] // ApJ. - 2005. - Vol. 624. - pp. 1097-1115.

**Bergantini A. [et al.]** Processing of formic acid-containing ice by heavy and energetic cosmic ray analogues [Journal] // MNRAS. - 2014. - Vol. 437. - pp. 2720-2727.

**Bergren M. S. [et al.]** The oh stretching region infrared spectra of low density amorphous solid water and polycrystalline ice ih [Journal] // The Journal of Chemical Physics. - 1978. - Vol. 69. - pp. 3477-3482.

**Bjorkman J. E. and Wood K.** Radiative Equilibrium and Temperature Correction in Monte Carlo Radiation Transfer [Journal] // ApJ. - 2001. - Vol. 554. - pp. 615-623.

**Bodenheimer P. H.** Principles of Star Formation [Book]. - Heidelberg : Springer, 2011.

**Bohlin R. C., Savage B. D. and Drake J. F.** A survey of interstellar H I from L-alpha absorption measurements. II [Journal] // ApJ. - 1978. - Vol. 224. - pp. 132-142.

**Bohren C. F. and Huffman D. R.** Absorption and Scattering of Light by Small Particles [Book]. - New York : Wiley-VCH, 1998.

**Bonnor W. R.** Boyle's Law and gravitational instability [Journal] // MNRAS. - 1956. - Vol. 116. - p. 351.

**Boogert A. C. A. [et al.]** Infrared observations of hot gas and cold ice toward the low mass protostar Elias 29. [Journal] // A&A. - 2000. - Vol. 360. - pp. 683 - 698.

**Boogert A. C. A. [et al.]** Spitzer Space Telescope Spectroscopy of Ices toward Low-Mass Embedded Protostars [Journal] // ApJS. - [s.l.] : 154, 2004. - pp. 359-362.

**Boogert A. C. A. [et al.]** The Environment and Nature of the Class I Protostar Elias 29: Molecular Gas Observations and the Location of Ices [Journal] // ApJ. - 2002. - Vol. 570. - pp. 708 - 723.

**Boogert A. C. A., Hogerheijde M. R. and Blake G. A.** High-Resolution 4.7 micron Keck/NIRSPEC Spectra of Protostars. I. Ices and Infalling Gas in the Disk of L1489 IRS [Journal] // ApJ. - abril 2002a. - Vol. 568. - pp. 761-770.

**Boogert A. C. A., Pontoppidan K. M. and Knez C.** The c2d Spitzer Spectroscopic Survey of Ices around Low-Mass Young Stellar Objects. I. H<sub>2</sub>O and the 5-8  $\mu$ m Bands [Journal] // ApJ. - 2008. - Vol. 678. - pp. 985-1004.

**Cambr esy L. [et al.]** Extinction with 2MASS: Star Counts and Reddening toward the North America and Pelican Nebulae [Journal] // AJ. - 2002. - Vol. 123. - pp. 2559-2573.

**Carroll B. W. and Ostlie D. A.** An introduction to modern astrophysics and cosmology [Book]. - San Francisco : Pearson Education, 2006.

**Chandrasekhar S. and Fermi E.** Magnetic Fields in Spiral Arms [Journal] // ApJ. - 1953. - Vol. 118. - p. 113.

**Chen H. [et al.]** Bolometric temperature and young stars in the Taurus and Ophiuchus complexes [Journal] // ApJ. - 1995. - Vol. 445. - pp. 377-392.

**Chiang E. I. and Goldreich P.** Spectral Energy Distributions of T Tauri Stars with Passive Circumstellar Disks [Journal] // ApJ. - 1997. - Vol. 490. - pp. 368-376.

**Clayton G. C. [et al.]** Dust grain size distribution from MRN to MEM [Journal] // ApJ. - 2003. - Vol. 588. - pp. 871-880.

**Cleeves L. I. [et al.]** The ancient heritage of water ice in the solar system [Journal] // Science. - 2014. - Vol. 345. - pp. 1590 - 1593.

**Cleeves L. I.** The ancient heritage of water ice in the solar system [Journal] // Science. - 2014. - Vol. 345. - pp. 1590 - 1593.

**Clegg P. E. [et al.]** The ISO Long-Wavelength Spectrometer [Journal] // A&A. - 1996. - Vol. 315. - pp. L38-L42.

**Collings M. P. [et al.]** A laboratory survey of the thermal desorption of astrophysically relevant molecules [Journal] // MNRAS. - 2004. - Vol. 354. - pp. 1133-1140.

**Cox D. P. and Reynolds R. J.** The local interstellar medium [Journal] // ARA&A. - 1987. - Vol. 25. - pp. 303-344.

**Crapsi A. [et al.]** Characterizing the nature of embedded young stellar objects through silicate, ice and millimeter observations [Journal] // A&A. - 2008. - Vol. 486. - pp. 245-254.

**D'Hendecourt L. [et al.]** ISO-SWS observations of solid state features towards RAFGL 7009S [Journal] // A&A. - 1996. - Vol. 315. - pp. L365-L368.

---

**de Barros A. L. F. [et al.]** Chemical and physical effects induced by heavy cosmic ray analogues on frozen methanol and water ice mixtures [Journal] // MNRAS. - setembro 2014b. - Vol. 443. - pp. 2733-2745.

**de Barros A. L. F. [et al.]** Processing of low carbon content interstellar ice analogues by cosmic rays: implications for the chemistry around oxygen-rich stars [Journal] // MNRAS. - 2014. - Vol. 438. - pp. 2026-2035.

**de Geus E. J., Zeeuw P. T. and Lub J.** Physical parameters of stars in the Scorpio-Centaurus OB association [Journal] // A&A. - 1989. - Vol. 216. - pp. 44-61.

**de Graauw T. [et al.]** Observing with the ISO Short-Wavelength Spectrometer [Journal] // A&A. - 1996. - Vol. 315. - pp. L49-L54.

**Diolaiti E. [et al.]** Analysis of isoplanatic high resolution stellar fields by the StarFinder code [Journal] // A&AS. - 2000. - Vol. 147. - pp. 335-346.

**Draine B. T. and Lee H. M.** Optical properties of interstellar graphite and silicate grains [Journal] // ApJ. - 1984. - Vol. 285. - pp. 89-108.

**Draine B. T.** Physics of the interstellar and intergalactic medium [Book]. - New Jersey : Princeton University Press, 2011.

**Drury L. O'C., Meyer J-P. and Ellison D. C.** Interpreting the Cosmic Ray Composition [Journal]. - 2009.

**Duley W. W. and Williams D. A.** Interstellar chemistry [Book]. - Heidelberg : Springer, 1984.

**Dullemond C. P. and Monnier J. D.** The Inner Regions of Protoplanetary Disks [Journal] // ARA&A. - 2010. - Vol. 48. - pp. 205-239.

**Ebert R** Temperatur des interstellaren Gases bei groben Dichten. Mit 1 Textabbildung [Journal] // Zeitschrift für Astrophysik. - 1955. - Vol. 36. - p. 222.

**Eddington A. S.** Interstellar matter [Journal] // The Observatory. - 1937. - Vol. 60. - pp. 99-103.

**Ehrenfreund P. [et al.]** A laboratory database of solid CO and CO<sub>2</sub> for ISO [Journal] // A&A. - 1996. - Vol. 315. - pp. L341-L344.

**Ehrenfreund P. [et al.]** Infrared spectroscopy of interstellar apolar ice analogs [Journal] // A&A. - 1997. - Vol. 328. - pp. 649-669.

**Elias J. H.** An infrared study of the Ophiuchus dark cloud [Journal] // ApJ. - 1978. - Vol. 224. - p. 453.

**Enoch M. L. [et al.]** Properties of the Youngest Protostars in Perseus, Serpens, and Ophiuchus [Journal] // ApJ. - 2009. - Vol. 692. - pp. 973-997.

**Evans II N. J. [et al.]** From Molecular Cores to Planet-forming Disks: An SIRTf Legacy Program [Journal] // PASP. - 2003. - Vol. 115. - p. 965{980.

**Fazio G. G. [et al.]** The Infrared Array Camera (IRAC) for the Spitzer Space Telescope [Journal] // ApJS. - 2004. - Vol. 154. - pp. 10-17.

**Fraser H. J. [et al.]** Thermal desorption of water ice in the interstellar medium [Journal] // MNRAS. - 2001. - Vol. 327. - pp. 1165-1172.

**Gail H. P.** Formation and Evolution of Minerals in Accretion Disks and Stellar Outflows [Book] / ed. Henning Th.. - Berlin : Berlin Springer Verlag, 2010.

**Gerakines P. A. [et al.]** The infrared band strengths of H<sub>2</sub>O, CO and CO<sub>2</sub> in laboratory simulations of astrophysical ice mixtures [Journal] // A&A. - 1995. - Vol. 296. - p. 810.

**Gerakines P. A., Moore M. H. and Hudson R. L.** Carbonic acid production in H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub> ices. UV photolysis vs. proton bombardment [Journal] // A&A. - 2000. - Vol. 357. - pp. 793-800.

**Gibb E. L. [et al.]** An Inventory of Interstellar Ices toward the Embedded Protostar W33A [Journal] // ApJ. - 2000. - Vol. 536. - pp. 347-356.

**Gillett F. C. and Forest W. J.** Spectra of the Becklin-Neugebauer point source and the Kleinmann-Low nebula from 2.8 to 13.5 microns [Journal]. - [s.l.] : ApJ, 1973. - Vol. 179. - pp. 483 - 491.

**Giuliano B. M. [et al.]** Interstellar ice analogs: band strengths of H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>OH, and NH<sub>3</sub> in the far-infrared region [Journal] // A&A. - 2014. - Vol. 565. - p. A108.

**Gómez M. [et al.]** Jets and Herbig-Haro Objects in the rho Ophiuchi Embedded Cluster [Journal] // AJ. - 2003. - Vol. 126. - pp. 863 - 886.

**Gómez M. [et al.]** Jets and Herbig-Haro Objects in the rho Ophiuchi Embedded Cluster [Journal] // AJ. - 2003. - Vol. 126. - pp. 863-886.

**Goodman A. A. [et al.]** Dense cores in dark clouds. VIII Velocity gradients [Journal] // ApJ. - 1993. - Vol. 406. - pp. 528-547.

**Gramajo L. V. [et al.]** Combined Analysis of Images and Spectral Energy Distributions of Taurus Protostars [Journal] // AJ. - 2010. - Vol. 139. - pp. 2504-2524.

**Greene T. P. [et al.]** Further mid-infrared study of the rho Ophiuchi cloud young stellar population: Luminosities and masses of pre-main-sequence stars [Journal] // ApJ. - 1994. - Vol. 434. - pp. 614 - 626.

**Hartmann J.** Investigations on the spectrum and orbit of delta Orionis [Journal]. - 1904. - Vol. 19. - pp. 268-286.

**Henning Th. and Semenov D.** Chemistry in Protoplanetary Disks [Journal] // Chem. Rev.. - 2013. - Vol. 113. - pp. 9016-9042.

**Hildebrand R. H.** The Determination of Cloud Masses and Dust Characteristics from Submillimetre Thermal Emission [Journal] // QJRAS. - 1983. - Vol. 24. - p. 267.

**Hora J. L. [et al.]** Photometry using the Infrared Array Camera on the Spitzer Space Telescope [Journal] // PASP. - 2008. - Vol. 120. - pp. 1233-1243.

**Hudgins D. M. [et al.]** Mid- and far-infrared spectroscopy of ices - optical constants and integrated absorbances [Journal] // ApJSS. - 1993. - Vol. 86. - pp. 713-870.

**Hudson R. L., Ferrante R. F. and Moore M. H.** Infrared spectra and optical constants of astronomical ices: I. Amorphous and crystalline acetylene [Journal] // Icarus. - 2014. - Vol. 228. - pp. 276-287.

**Huélamo N. [et al.]** NACO/VLT polarimetric differential imaging of the protostar Elias2-29 [Conference] // IoA Conference 2006: The Planet-Disc Connection. - 2006.

**Indriolo Nick and McCall Benjamin J.** Cosmic-ray astrochemistry [Journal] // Chem Soc Rev. - 2013.

**Katz N. [et al.]** Molecular Hydrogen Formation on Astrophysically Relevant Surfaces [Journal] // ApJ. - 1999. - Vol. 522. - pp. 305-312.

**Kenyon S. J. [et al.]** The embedded young stars in the Taurus-Auriga molecular cloud. II - Models for scattered light images [Journal] // ApJ. - 1993. - Vol. 414. - pp. 773-792.

**Kerkhof O., Schutte W. A. and Ehrenfreund P.** The infrared band strengths of CH<sub>3</sub>OH NH<sub>3</sub> and CH<sub>4</sub> in laboratory simulations of astrophysical ice mixtures [Journal] // A&A. - 1999. - Vol. 346. - pp. 990-994.

**Krumholz M. R** The big problems in star formation: The star formation rate, stellar clustering, and the initial mass function [Journal] // Physics Report. - 2014. - Vol. 539. - pp. 49-134.

**Krumholz M.** Star Formation in Molecular Clouds [online] / ed. Telles E., Dupke R. and Lazzaro D.. - Rio de Janeiro : Observatório Nacional, 2011.

---

**Landau L. D., Pitaevskii L. P. and Lifshitz E. M.** Electrodynamics of Continuous Media [Book]. - [s.l.] : Butterworth-Heinemann, 1984. - 2 Edição.

**Lommen D. [et al.]** SMA observations of young disks: separating envelope, disk, and stellar masses in class I YSOs [Journal] // A&A. - 2008. - Vol. 481. - pp. 141-147.

**Lv X. Y. [et al.]** Implantation of multiply charged carbon ions in water ice [Journal] // A&A. - 2012. - Vol. 546. - p. A81.

**Lv X. Y. [et al.]** Sulfur implantation in CO and CO<sub>2</sub> ices [Journal] // MNRAS. - 2014. - Vol. 438. - pp. 922-929.

**Maciel W. J.** Astrofísica do meio interestelar [Book]. - São Paulo : Edusp, 2002. - 1ª Edição.

**Mathis J. S., Rumpl W. and Nordsieck K. H.** The size distribution of interstellar grains [Journal] // ApJ. - 1977. - Vol. 217. - pp. 425-433.

**Mayers P. C. and Ladd E. F.** Bolometric temperatures of young stellar objects [Journal] // ApJ. - 1993. - Vol. 413. - pp. L47-L50.

**McClure M. K. [et al.]** The Evolutionary State of the Pre-main Sequence Population in Ophiuchus: A Large Infrared Spectrograph Survey [Journal] // ApJS. - 2010. - Vol. 188. - pp. 75-122.

**McKellar A.** Evidence for the Molecular Origin of Some Hitherto Unidentified Interstellar Lines [Journal]. - [s.l.] : PASP, 1940. - Vol. 52. - p. 187.

**McLean I. S. [et al.]** Design and development of NIRSPEC: a near-infrared echelle spectrograph for the Keck II telescope [Journal] // Proc. SPIE. - 1998. - Vol. 3354. - pp. 566-578.

**Megeath S. T. [et al.]** Initial Results from the Spitzer Young Stellar Cluster Survey [Journal] // ApJS. - 2004. - Vol. 154. - pp. 367-373.

**Mie G.** Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen [Journal] // Annalen der Physik. - 1908. - Vol. 330. - pp. 377-445.

**Miotello A. [et al.]** Grain growth in the envelopes and disks of Class I protostars [Journal] // A&A. - 2014. - Vol. 567. - p. A32.

**Moore M. H. [et al.]** Infrared Spectra and optical constants of nitrile ices relevant to Titan's atmosphere [Journal] // ApJSS. - 2010. - Vol. 190. - pp. 1-17.

**Moorwood A. F.** ISAAC: a 1- to 5-um imager/spectrometer for the VLT [Journal] // Proc. SPIE. - 1997. - Vol. 2871. - pp. 1146-1151.

**Motte F., Andre P. and Neri R.** The initial conditions of star formation in the rho Ophiuchi main cloud: wide-field millimeter continuum mapping [Journal] // A&A. - 1998. - Vol. 336. - pp. 150-172.

**Mouscovias T. C., Tassis K. and Kunz M. W.** Observational Constraints on the Ages of Molecular Clouds and the Star Formation Timescale: Ambipolar-Diffusion-controlled or Turbulence-induced Star Formation? [Journal] // ApJ. - 2006. - Vol. 646. - pp. 1043-1049.

**Öberg K. I. [et al.]** The c2d Spitzer Spectroscopic Survey of Ices around Low-Mass Young Stellar Objects. III. CH<sub>4</sub> [Journal] // ApJ. - 2008. - Vol. 678. - pp. 1032-1041.

**Öberg K. I. [et al.]** The Spitzer ice legacy: ice evolution from cores to protostars [Journal] // ApJ. - 2011. - Vol. 740. - p. 109.

**Öberg K. I.** Complex processes in simple ices: laboratory and observational studies of gas-grain interactions during star formation [Impresso, Online]. - Leiden : [s.n.], 2009. - Tese de doutorado.

**Ohta K. and Ishida H.** Comparison among several numerical integration methods for Kramers-Kronig transformation [Journal] // OSA. - 1988. - Vol. 42. - p. 952-957.

**Ossenkopf V. and Henning Th.** Dust opacities for protostellar cores. [Journal] // A&A. - 1994. - Vol. 291. - pp. 943-959.

**Pilling S. [et al.]** Formation of unsaturated hydrocarbons in interstellar ice analogues by cosmic rays [Journal] // MNRAS. - 2012. - Vol. 423. - pp. 2209-2221.

**Pilling S. [et al.]** Radiolysis of ammonia-containing ices by energetic, heavy, and highly charged ions inside dense astrophysical environments [Journal] // A&A. - jan 2010. - Vol. 509. - p. A87.

**Pilling S. [et al.]** Radiolysis of astrophysical ice analogs by energetic ions: the effect of projectile mass and ice temperature [Journal] // Physical Chemistry Chemical Physics. - 2011. - Vol. 13. - p. 15755.

**Pilling S. [et al.]** Radiolysis of H<sub>2</sub>O:CO<sub>2</sub> ices by heavy energetic cosmic ray analogs [Journal] // A&A. - nov 2010. - Vol. 523. - p. A77.

**Pilling S. [et al.]** The Influence of Crystallinity Degree on the Glycine Decomposition Induced by 1 MeV Proton Bombardment in Space Analog Conditions [Journal] // Astrobiology. - 2013. - Vol. 13. - pp. 79-91.

**Pontoppidan K. M. [et al.]** Ices in the Edge-on Disk CRBR 2422.8-3423: Spitzer Spectroscopy and Monte Carlo Radiative Transfer Modeling [Journal] // ApJ. - 2005. - Vol. 622. - pp. 463 - 481.

**Pontoppidan K. M. [et al.]** The c2d Spitzer Spectroscopic Survey of Ices around Low-Mass Young Stellar Objects. II. CO<sub>2</sub> [Journal] // ApJ. - 2008. - Vol. 678. - pp. 1005-1031.

**Portugal W. [et al.]** Radiolysis of amino acids by heavy and energetic cosmic ray analogues in simulated space environments:  $\alpha$ -glycine zwitterion form [Journal] // MNRAS. - 2014. - Vol. 441. - pp. 3209-3225.

**Robitaille T. P. [et al.]** Interpreting Spectral Energy Distributions from Young Stellar Objects. II. Fitting Observed SEDs Using a Large Grid of Precomputed Models [Journal] // ApJS. - 2007. - Vol. 169. - pp. 328-352.

**Rocha W. R. M. and 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 [Journal] // ApJ. - 2015. - Vol. 803. - p. id18.

**Rocha W. R. M. and Pilling S.** Determination of optical constants  $n$  and  $k$  of thin films from absorbance data using Kramers–Kronig relationship [Journal] // Spec. Acta Part A. - 2014. - Vol. 123. - pp. 436-446.

**Rocha W. R. M.** Uma análise multi-técnica das propriedades físicas e do conteúdo da nuvem interestelar DC291.1-1.7. - Itajubá : [s.n.], 2012.

**Schutte W. A. [et al.]** Weak ice absorption features at 7.24 and 7.41  $\mu\text{m}$  in the spectrum of the obscured young stellar object W 33A [Journal] // A&A. - 1999. - Vol. 343. - pp. 966-976.

**Schutte W. A. and Khanna R. K.** Origin of the 6.85 micron band near young stellar objects: The ammonium ion ( $\text{NH}_4^+$ ) revisited [Journal] // A&A. - 2003. - Vol. 398. - pp. 1049-1062.

**Shaw A. M.** Astrochemistry: From astronomy to astrobiology [Book]. - Chichester : Wiley, 2006.

**Shu F. H. [et al.]** Magnetocentrifugally driven flows from young stars and disks. 1: A generalized model [Journal] // ApJ. - 1994. - Vol. 429. - pp. 781-796.

**Shu F. H. and Li Zhi-Yun** Magnetic Forces in an Isopedic Disk [Journal] // ApJ. - 1997. - Vol. 475. - pp. 251-259.

**Shu F. H.** Self-similar collapse of isothermal spheres and star formation [Journal] // ApJ. - 1977. - Vol. 214. - pp. 488-497.

---

**Simon M. [et al.]** Milliarcsecond resolution infrared observations of young stars in Taurus and Ophiuchus [Journal] // ApJ. - 1987. - Vol. 320. - pp. 344-355.

**Snell R. L., Loren R. B. and Plambeck R. L.** Observations of CO in L1551 - Evidence for stellar wind driven shocks [Journal] // ApJ. - 1980. - Vol. 239. - pp. L17-L22.

**Steinacker J. [et al.]** Direct evidence of dust growth in L183 from mid-infrared light scattering [Journal] // A&A. - 2010. - Vol. 511. - p. A9.

**Stone E. C. [et al.]** Voyager 1 Observes Low-Energy Galactic Cosmic Rays in a Region Depleted of Heliospheric Ions [Journal] // Science. - 2013. - Vol. 341. - pp. 150-153.

**Terebey S., Shu F. H. and Cassen P.** The collapse of the cores of slowly rotating isothermal clouds [Journal] // ApJ. - 1984. - Vol. 286. - pp. 529-551.

**Tielens A. G. G. M.** The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium [Book]. - New York : Cambridge, 2005.

**van Dishoeck E. F. and Visser R.** Molecular photodissociation [Journal] // ArXiv e-prints. - 2011.

**Visser R.** Chemical evolution from cores to disks. - 2009.

**Ward-Thompson D. [et al.]** Dust emission from star-forming regions. VI. The submillimetre YSO cluster in NGC 2264 [Journal] // A&A. - 2000. - Vol. 355. - pp. 1122-1128.

**Webber W. R.** A New Estimate of the Local Interstellar Energy Density and Ionization Rate of Galactic Cosmic Cosmic Rays [Journal] // ApJ. - 1998. - Vol. 506. - pp. 329-334.

**Weingartner J. C. and Draine B. T.** Dust Grain-Size Distributions and Extinction in the Milky Way, Large Magellanic Cloud, and Small Magellanic Cloud [Journal] // ApJ. - 2001. - Vol. 548. - pp. 296-309.

**Whitney B. A. [et al.]** Three-dimensional Radiation Transfer in Young Stellar Objects [Journal] // ApJS. - 2013. - Vol. 207. - p. 30.

**Whittet D. C. B. [et al.]** An ISO SWS view of interstellar ices: first results [Journal]. - 1996. - Vol. 315. - pp. L357-L360.

**Whittet D. C. B.** Dust in the galactic environment [Book]. - London : IoP, 2003. - 2 Edição.

**Wilking B. A. and Lada C. J.** The discovery of new embedded sources in the centrally condensed core of the Rho Ophiuchi dark cloud - The formation of a bound cluster [Journal] // ApJ. - 1983. - Vol. 274. - pp. 698-716.

**Wolf S., Launhardt R. and Henning Th.** Magnetic Field Evolution in Bok Globules [Journal] // ApJ. - 2003. - Vol. 592. - pp. 233-244.

**Wood B. E. and Roux J. A.** Infrared optical properties of thin h<sub>2</sub>o, nh<sub>3</sub>, and co<sub>2</sub> cryo [Journal] // J. Opt. Soc. Am.. - 1982. - Vol. 72. - pp. 720-728.

**Zhang K. [et al.]** Evidence for a Snow Line beyond the Transitional Radius in the TW Hya Protoplanetary Disk [Journal] // ApJ. - 2013. - Vol. 766. - p. 82.

**Zhang M. [et al.]** Proper motions of molecular hydrogen outflows in the rho Ophiuchi molecular cloud [Journal] // A&A. - 2013. - Vol. 553. - p. A41.