



# Fundamentos de Astrobiologia – AST 416-3

## 3º Trimestre - 2016

### Prof. Carlos Alexandre Wuensche

---

#### Notas de Aula - 3

A Astroquímica trata do estudo da química em ambientes estelares. Ela expande os limites da química de laboratório, ao trabalhar rotineiramente com variáveis ambientais muito diferentes e, ao detalhar canais de reação e propriedades químicas das moléculas observadas no Meio Interestelar (MI), ela pode ser usada como um excelente traçador das propriedades físicas do MI.

Operacionalmente, a astroquímica pode ser abordada do ponto de vista observacional (detecção e caracterização de novas moléculas no MI), computacional (modelagem e simulação de canais de reação em ambientes específicos no MI) e teórico (cálculo de transições moleculares específicas)

As principais regiões de interesse astroquímico são: nuvens moleculares, aglomerados jovens, nebulosas planetárias, [discos protoplanetários](#), [cometas](#) e [asteroids](#).

O interesse principal de observações nas regiões acima concentra-se em moléculas de até 6 átomos (e.g., CO, CO<sub>2</sub>, CN, HCN, HNC, H<sub>2</sub>CO, C<sub>2</sub>H, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, CS, OH, HCO<sup>+</sup>, DCO<sup>+</sup>, N<sub>2</sub>H<sup>+</sup> e vapor de água)

Algumas questões motivadoras para o estudo da astroquímica são:

- Até que nível de complexidade é possível formar moléculas no MI?
- Quais os processos de formação dessas moléculas complexas?
- Como algumas delas resistem aos processos de colapso das nuvens protoestelares e a outros eventos catastróficos?

Requisitos para aumentos de complexidade astroquímica:

- No. de átomos constituintes;
- No. e diversidade dos grupos funcionais
- presença (talvez) de centros estereogênicos
- Correlação alta entre complexidade estrutural molecular e a capacidade desta molécula de envolver-se em reações químicas de diversos tipos

Fases a serem tratadas:

- Poeira (grãos) e gás

### **Abordagem “bottom-up”**

Na fase gasosa, há pouco confinamento, mas reações diversas permitem a construção de espécies poliatômicas. Diversos canais e taxas de reação são possíveis no MI, sendo, aparentemente, a recombinação dissociativa a mais eficiente. Entretanto, podemos encontrar:

- fotodissociação e fotoionização
- reações neutro-neutro
- reações ion-molécula
- reações dissociativas por recombinação de e-
- reações induzidas por raios cósmicos
- reações de transferência de carga
- reações de associação radiativa
- reações de destacamento associativo
- reações de associação e dissociação colisional

Na fase de grão, as reações encontradas são de acreção, migração, reação e ejeção. Grãos são o “meio de cultura cósmico” e permitem que partículas adsorvidas possam reagir a partir do bombardeamento de radiação UV e X, bem como pelo impacto de raios cósmicos (partículas carregadas).

### **Abordagem “top-down”**

Busca-se entender, nesse caso, como moléculas mais complexas (glicolaldeído, bases nitrogenadas e aminoácidos) já detectadas foram formadas, a partir da junção de grupos funcionais. Em contraste com a observação espectroscópica de moléculas simples (robusta e com acurácia  $< 10^{-7}$ ), moléculas complexas possuem mais estados excitáveis, em função do número de átomos e da geometria, exigindo a confirmação de diversas transições para confirmação de detecção.

Do ponto de vista de Kwok (Astr. Space Sci., 319, 5-21, 2009), “... *what we do know is that the ingredients for life are commonly produced by stars, and are widely spread over the Galaxy by stellar winds. If these stellar materials played a role in the origin of life on Earth, they could have easily done the same elsewhere in the Galaxy. The chemical link between AGB stars, the ISM, the early Solar System and the Earth represents an área of study with great potential and significance*”.