

Equilíbrio químico e processos de dessorção em gelos de HCOOH e $\text{HCOOH:H}_2\text{O}$

Caroline Milenna Lucas Fagnoli¹, Sergio Pilling².

¹Universidade do Vale do Paraíba/Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento, Avenida Shishima Hifumi, 2911, Urbanova - 12244-000 - São José dos Campos-SP, Brasil, carolinemilena499@gmail.com, sergiopilling@yahoo.com.br.

Resumo

O objetivo deste trabalho é investigar os processos de dessorção molecular e equilíbrio químico em gelos astrofísicos contendo ácido fórmico (HCOOH) puro e HCOOH misturado com água, sob a influência de radiação ionizante. Utilizando o código PROCODA, foi possível modelar como essas condições afetam a formação e destruição de moléculas nesses gelos. A metodologia envolveu a simulação da dessorção molecular e a análise do equilíbrio químico durante a exposição dos gelos à radiação de íons de ferro a 15 K. Os resultados destacam as dinâmicas de equilíbrio e a importância das espécies moleculares observadas e não observadas. As imagens incluídas no estudo caracterizam o equilíbrio químico atingido, mostrando as diferenças nas abundâncias moleculares e nas taxas de dessorção das espécies sob radiação ionizante.

Palavras-chave: Gelos astrofísicos, evolução química, PROCODA

Área do Conhecimento: Astronomia, astroquímica.

Introdução

A astroquímica é uma área interdisciplinar que explora a formação, evolução e destruição de moléculas em ambientes espaciais, como nuvens moleculares, discos protoplanetários e corpos gelados do sistema solar. Esses ambientes, ricos em gelo e expostos a variadas fontes de radiação ionizante, são fundamentais para a compreensão de processos químicos complexos que dão origem a moléculas orgânicas, algumas das quais podem estar relacionadas com a origem da vida. Uma molécula de particular interesse nesses estudos é o ácido fórmico (HCOOH), que tem sido detectado em várias regiões do espaço interestelar e em cometas, desempenhando um papel importante na química do gelo interestelar (Bergantini et al 2014).

Neste contexto, a investigação da dessorção molecular e do equilíbrio químico em gelos contendo HCOOH é crucial para entender a dinâmica dessas moléculas em condições astrofísicas extremas. O equilíbrio químico em gelos astrofísicos é atingido quando as taxas de formação e destruição das moléculas se igualam, estabilizando as abundâncias relativas das espécies presentes. No entanto, a radiação ionizante, como a proveniente de raios cósmicos, pode romper esse equilíbrio, induzindo reações químicas que alteram significativamente a composição molecular dos gelos.

O presente trabalho utiliza o código PROCODA (Pilling, S et al.(2022)) uma ferramenta de modelagem avançada, para simular o comportamento de gelos de HCOOH puro e HCOOH misturado com água sob a influência de radiação ionizante a 15 K. Através desta modelagem, busca-se compreender como as condições extremas do espaço afetam a dessorção molecular e o equilíbrio químico, fornecendo pistas sobre a estabilidade das moléculas e a formação de novas espécies químicas em ambientes astrofísicos. Esses resultados são essenciais para a interpretação de observações astronômicas e para a compreensão dos processos químicos que ocorrem em gelos cósmicos, contribuindo para o avanço do conhecimento na astroquímica (Andrade, D.P.P et al (2013)).

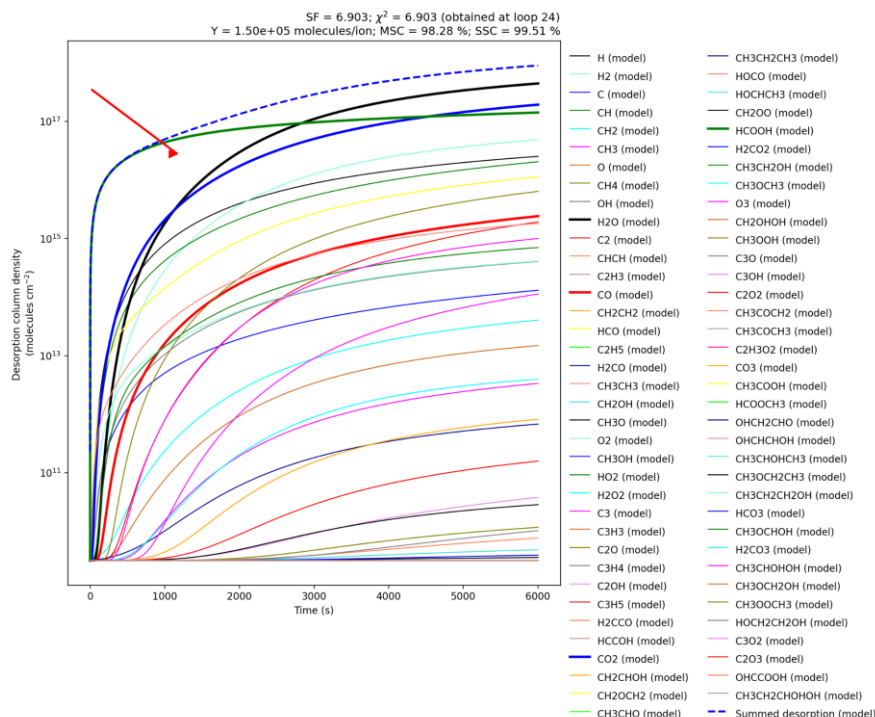


Figura 2: caracterização da densidade de coluna de desorção do gelo de HCOOH puro

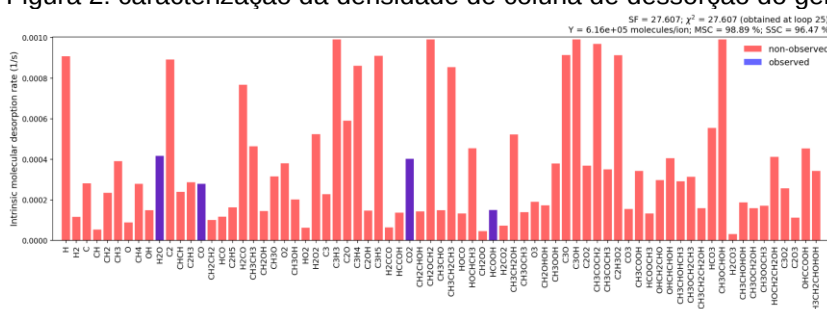


Figura 3 : caracterização do equilíbrio químico do gelo de HCOOH:H₂O mostrando as moléculas observadas e não observadas

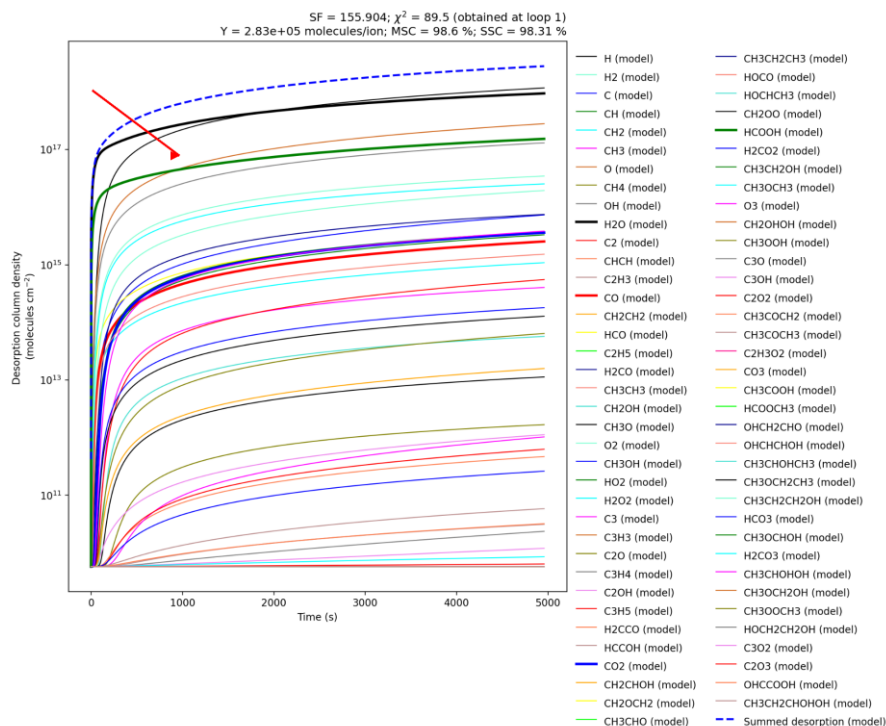


Figura 4: caracterização da densidade de coluna de dessorção do gelo de HCOOH:H₂O.

Os resultados obtidos com o código PROCODA revelam a dinâmica de dessorção molecular e o equilíbrio químico em gelos astrofísicos de HCOOH puro e HCOOH com H₂O sob radiação ionizante. As curvas de dessorção mostram como diferentes espécies moleculares são liberadas ao longo do tempo, com variações significativas entre o gelo puro e a mistura com água. A caracterização do equilíbrio químico indica que, embora muitas moléculas apresentem baixas taxas de dessorção, algumas espécies, incluindo aquelas observadas experimentalmente, mantêm abundâncias relevantes no equilíbrio final. As setas vermelhas indicam as moléculas que estão sendo dessorvidas ao longo do tempo.

Discussão

A análise dos resultados mostra que a dessorção e a composição molecular no equilíbrio químico variam significativamente entre os gelos de HCOOH puro e o gelo de HCOOH:H₂O, sugerindo que a presença da água influencia a estabilidade e a reatividade das espécies. A predominância de moléculas observadas experimentalmente no equilíbrio final destaca a relevância dessas espécies na química astrofísica.

Conclusão

A conclusão desse estudo indica que a presença de água no gelo de HCOOH influencia significativamente as dinâmicas de dessorção e equilíbrio químico, promovendo a estabilidade de moléculas relevantes. Estes resultados reforçam a importância da composição do gelo na evolução química em ambientes astrofísicos, contribuindo para uma melhor compreensão dos processos moleculares no espaço.

Referências

Pilling, S et al.(2022). Apl, 925,147

Andrade, D.P.P et al (2013). MNRAS,430,487.

Bergantini et al 2014,MNRAS,437,2720

Agradecimentos

A Univap pelo suporte e estrutura e o CNPQ pelo apoio financeiro, permitindo a execução desse trabalho.