

## ANÁLISE DE MOLÉCULAS RELEVANTES E NÃO RELEVANTES EM GELOS DE HCOOH

Caroline Milenna Lucas Fagnoli<sup>1</sup>, Sergio Pilling<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Universidade 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<sup>1</sup>, sergiopilling@yahoo.com.br<sup>2</sup>.

### Resumo

Este estudo investiga a evolução química de gelos astrofísicos de HCOOH puro e HCOOH misturado com H<sub>2</sub>O, utilizando o código PROCODA para modelar as reações químicas induzidas por radiação ionizante. O objetivo principal é caracterizar as moléculas relevantes e não relevantes formadas e destruídas nesses gelos sob condições de radiação, particularmente sob a influência de radiação ionizante de ferro a 15K. A análise inclui a identificação das abundâncias moleculares no estado de equilíbrio químico, tanto para o gelo de HCOOH puro como para o gelo de HCOOH misturado com H<sub>2</sub>O, destacando as espécies observadas e não observadas. Os resultados fornecem detalhes sobre a complexidade dos processos químicos em ambientes espaciais, contribuindo para uma melhor compreensão da formação e evolução molecular em regiões astrofísicas.

**Palavras-chave:** Gelos astrofísicos, Evolução química, PROCODA

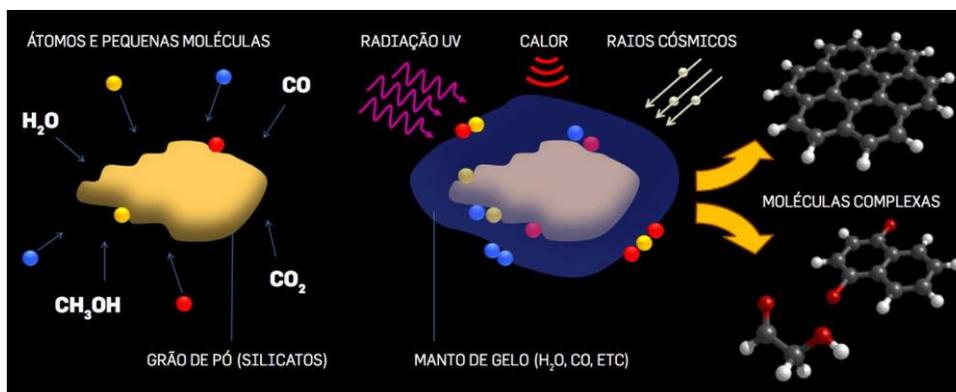
**Área do Conhecimento:** Astronomia, Astroquímica.

### Introdução

A astroquímica, uma subdisciplina que une aspectos da química e da astronomia, é fundamental para a compreensão da formação, evolução e destruição das moléculas em ambientes espaciais. Estes ambientes, que incluem desde as densas nuvens interestelares até as superfícies geladas de cometas e luas, são caracterizados por condições extremas, como baixíssimas temperaturas e alta exposição a radiação ionizante, como raios cósmicos e radiação ultravioleta. Tais condições promovem reações químicas únicas que não ocorrem naturalmente na Terra, resultando na formação de uma vasta gama de moléculas complexas, muitas das quais precursoras de compostos orgânicos fundamentais para a vida. O estudo dos gelos astrofísicos, compostos por moléculas como HCOOH (ácido fórmico), é especialmente relevante dentro desse campo, dada a importância dessas moléculas na química pré-biótica. O HCOOH, quando presente em gelos misturado com H<sub>2</sub>O, pode sofrer uma série de transformações químicas ao ser exposto à radiação ionizante, levando à formação de novas espécies moleculares. A compreensão desses processos é crucial para elucidar os mecanismos pelos quais moléculas orgânicas complexas se formam e evoluem no espaço, contribuindo para o entendimento da química interestelar e de outros corpos gelados no sistema solar. Neste trabalho, utilizamos o código PROCODA, uma ferramenta computacional desenvolvida para modelar reações químicas em gelos sob condições espaciais extremas. Focando na análise dos gelos contendo HCOOH puro e misturas de HCOOH com H<sub>2</sub>O, o estudo tem como objetivo caracterizar as moléculas relevantes e não relevantes, tanto observadas como não observadas experimentalmente, que são formadas ou destruídas sob radiação ionizante de ferro a 15K. Através da modelagem detalhada, este estudo busca oferecer uma visão abrangente dos processos químicos que ocorrem em gelos astrofísicos, contribuindo para a compreensão da química complexa em ambientes espaciais e implicações na formação de moléculas orgânicas no universo. Além disso, a aplicação do PROCODA (Pilling, S et al. (2022). *ApJ*, 925, 147) permite a exploração de cenários não acessíveis experimentalmente, como a evolução temporal de espécies moleculares em estágios intermediários e a quantificação das taxas de reação envolvidas. O código também possibilita a avaliação do impacto de diferentes tipos de radiação e fluxos energéticos sobre a dinâmica das reações químicas, fornecendo informações cruciais para a construção de modelos astroquímicos.

mais precisos. Esses resultados não só ampliam o entendimento dos mecanismos de formação e destruição molecular em gelos sob condições espaciais, mas também tem implicações diretas na interpretação de dados observacionais de regiões ricas em gelos, como nuvens moleculares densas e discos protoplanetários. A capacidade do PROCODA de integrar dados experimentais com modelagem teórica posiciona-o como uma ferramenta valiosa para desvendar a complexidade química dos gelos astrofísicos e avançar na compreensão dos processos que podem levar a síntese de moléculas prébióticas em diferentes ambientes cósmicos. Além de oferecer uma visão detalhada dos processos químicos que ocorrem em gelos astrofísicos o PROCODA permite a simulação de condições e cenários que seriam extremamente difíceis ou impossíveis de reproduzir em laboratório. Isso inclui, por exemplo a exposição prolongada de gelos a fluxos de radiação ionizante que ocorrem em escalas temporais cósmicas, bem como a interação com partículas energéticas em regiões do espaço interestelar. O código também possibilita o ajuste de parâmetros experimentais e teóricos para explorar a influência de diferentes composições de gelo, variações de temperatura e densidade, e a presença de outros componentes químicos (Andrade et al., 2013). Essas simulações ajudam a prever não apenas quais moléculas podem se formar, mas também como a sua abundância pode variar ao longo do tempo, oferecendo pistas sobre a história química de regiões distantes do universo (Oberg et al., 2009). O uso do PROCODA portanto, não só contribui para o avanço da teoria astroquímica, mas também fornece uma base sólida para futuras missões espaciais e observações astronômicas que buscam identificar e entender a composição química de corpos gelados, como cometas, luas e planetas exteriores (Gerakines et al., 1996). A aplicação desses conhecimentos pode, eventualmente fornecer informações vitais sobre a origem e distribuição de moléculas orgânicas complexas, contribuindo para a busca por sinais de vida em outros planetas (Ehrenfreund & Charnley, 2000).

Figura 1 -Representação esquemática da síntese de moléculas complexas nos grão de pó



Fonte: casadasciências.org

## Metodologia

A metodologia seguiu as etapas como inicialmente, preparou-se amostras de gelos contendo HCOOH puro e misturas de HCOOH com H<sub>2</sub>O, mantidas a 15K. Essas amostras foram expostas à radiação ionizante de ferro para simular condições espaciais extremas. A evolução das espécies moleculares foi monitorada utilizando espectroscopia infravermelha. O código PROCODA foi aplicado para modelar as reações químicas, permitindo a caracterização das moléculas relevantes e não observadas experimentalmente. Finalmente, os resultados modelados foram comparados com dados experimentais, validando o modelo e identificando as principais vias reacionais.

## Resultados

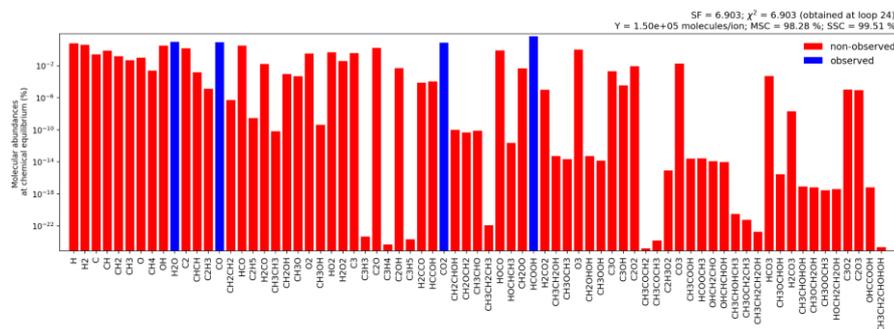


Figura 1: Caracterização das abundâncias moleculares no equilíbrio químico no gelo de HCOOH puro mostrando as moléculas relevantes e não relevantes.

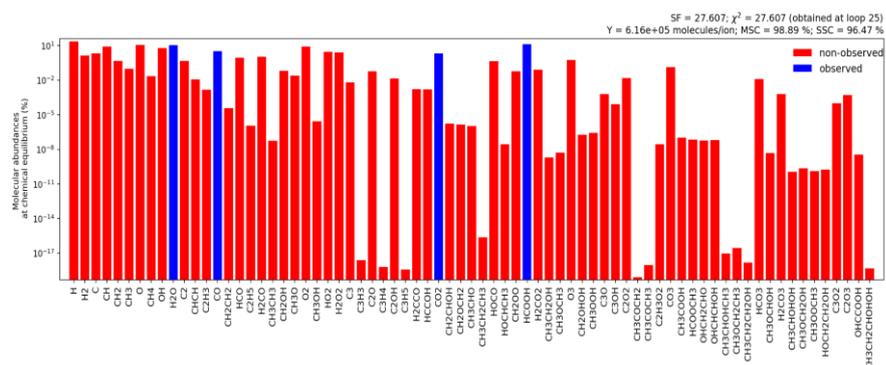


Figura 2: Caracterização das abundâncias moleculares no equilíbrio químico no gelo de HCOOH:H2O mostrando as moléculas relevantes e não relevantes.

Podemos observar que as espécies moleculares relevantes e não observadas foram analisadas. As barras azuis indicam as moléculas observadas, enquanto as vermelhas mostram aquelas que apesar de não terem sido detectadas experimentalmente, foram previstas pelo modelo PROCODA. A análise revela uma predominância significativa de espécies não observadas, o que sugere a complexidade e diversidade de produtos químicos que podem se formar em condições extremas no espaço. Como podemos ver foram 4 espécies observadas tanto no gelo de HCOOH puro como para o gelo de HCOOH misturado com H<sub>2</sub>O e 69 espécies não foram observadas em ambos os gelos.

## Discussão

O estudo investigou a evolução química de gelos de HCOOH puro e misturado com H<sub>2</sub>O sob radiação ionizante, utilizando o código PROCODA. Os resultados revelam que, tanto em gelos puros quanto misturados, há uma diversidade de moléculas relevantes e não relevantes, incluindo aquelas previstas teoricamente. A análise demonstra que a radiação ionizante promove uma complexa rede de reações químicas, gerando uma variedade de produtos moleculares, que são essenciais para a compreensão dos processos químicos em ambientes espaciais. A abordagem com o PROCODA

oferece uma ferramenta poderosa para prever a formação e destruição de moléculas em condições extremas, contribuindo significativamente para o campo da astroquímica.

### Conclusão

O estudo concluiu que a radiação ionizante exerce um papel crucial na evolução química de gelos astrofísicos contendo HCOOH, tanto puros quanto misturados com H<sub>2</sub>O. Utilizando o código PROCODA, foi possível identificar e caracterizar uma ampla gama de moléculas, tanto observadas quanto não observadas experimentalmente. Estes resultados ampliam o entendimento sobre os processos químicos que ocorrem em ambientes espaciais extremos, contribuindo para a compreensão da formação de moléculas complexas e possivelmente prebióticas no universo.

### 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
- Oberg et al., 2009
- Gerakines et al., 1996
- Ehrenfreund & Charnley, 2000

### Agradecimentos

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