



**OBSERVATÓRIO NACIONAL
MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E
INFORMAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ASTRONOMIA**

Química de Exoplanetas

A química como caracterizador do exoplaneta

WALTER SILVA MARTINS FILHO

Orientador:

DR. ALVARO AUGUSTO ALVAREZ CANDAL

**Monografia apresentada como
requisito parcial ao Exame de Qualificação**

Rio de Janeiro



**OBSERVATÓRIO NACIONAL
MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E
INFORMAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ASTRONOMIA**

Química de Exoplanetas

A química como caracterizador do exoplaneta

WALTER SILVA MARTINS FILHO

Orientador:

DR. ALVARO AUGUSTO ALVAREZ CANDAL

Monografia do Exame de Qualificação

Início do Doutorado: Abril de 2015

Bolsa: CAPES de Abril/2015 a Abril/2019

Rio de Janeiro

Existem infinitos mundos, alguns semelhantes ao nosso.

Epícuro, 341-270 A.C.

EXAME DE QUALIFICAÇÃO PARA PROJETO DE DOUTORADO

O tema *Química de Exoplanetas* é um tema que particularmente foi muito útil à compreensão de diversos aspectos do meu Projeto de Doutorado. A proposta do projeto de doutorado é analisar o maior número possível de atmosferas de exoplanetas utilizando-se da técnica de trânsitos primários e secundários na região do visível e do infravermelho. A compreensão do espectro do exoplaneta é dependente da temperatura, da pressão e das espécies químicas presentes na atmosfera do exoplaneta. Qualquer análise atmosférica deve considerar o perfil destes três fatores e suas interações. Um exemplo seria a dependência em temperatura e pressão da reação que converte metano (CH_4) em monóxido de carbono (CO) e controla a abundância de ambas as moléculas.

É neste contexto que esta qualificação auxilia meu projeto de doutorado. Para compreender a natureza física (perfis de temperatura e pressão) do exoplaneta é necessário compreender sua química, quais processos estão envolvidos, e como as espécies atômicas e moleculares contribuem para opacidade em diferentes altitudes.

Outro resultado a partir desta qualificação foi encontrar diversos trabalhos que originaram alguns campos de pesquisa em exoplanetas. Um exemplo é a proposta de planetas oceanos feita por Léger *et al.* (2003). Além disto, possibilitou compreender melhor as hipóteses iniciais dos modelos de atmosferas, como a suposição da abundância solar ou abundância da estrela hospedeira como a quantidade química que deve estar presente na composição do planeta (Moses *et al.*, 2013; Seager & Deming, 2010).

RESUMO

A química de exoplanetas é fundamentada em 3 parâmetros que são a massa, o raio e o espectro do exoplaneta. A massa e o raio permitem inferências sobre o tipo de planeta que está sendo estudado a partir da densidade média, e com isso modela-se o interior do exoplaneta. O espectro permite analisar a química presente na atmosfera planetária e se ela condiz com modelos de estrutura interna.

Neste trabalho apresentarei uma discussão sobre a química como caracterizador do interior e da atmosfera do exoplaneta, baseando-me na massa, no raio e no espectro do exoplaneta. Abordaremos diferentes tipos de exoplanetas a partir de densidade média e discutiremos sobre o uso da equação de estado e relação massa-raio do exoplaneta para inferir sobre sua provável composição química. Comentaremos sobre os processos relevantes para a química da atmosfera planetária, que são o equilíbrio químico, a fotoquímica e a fluorescência, e que fornecem quais são as moléculas relevantes para a química na atmosfera do exoplaneta.

Por fim, abordaremos sobre a obtenção dos espectros dos exoplanetas, e dos problemas da comparação de espectros teóricos com observados, como a degenerescência de soluções que informam valores discrepantes de abundância de determinada espécie química e a condensação e formação de nuvens em exoplanetas.

SUMÁRIO

1. <i>Introdução</i>	1
2. <i>Química na composição interna dos exoplanetas</i>	3
2.1 Química esperada dos exoplanetas	3
2.2 Interior dos exoplanetas: a dependência da composição	5
2.3 Equação de estado	5
2.3.1 Relação massa-raio	7
3. <i>Química na atmosfera do exoplaneta</i>	10
3.1 Atmosfera de exoplanetas: a química como caracterizador	10
3.2 Mecanismos químicos para atmosferas planetárias	11
3.2.1 Equilíbrio químico	11
3.2.2 Fotoquímica	18
3.2.3 Transporte induzido por fluorescência	19
3.3 Espectroscopia no visível e no infravermelho	20
4. <i>Conclusões & Perspectivas</i>	28

LISTA DE FIGURAS

1.1	Distribuição de massa e raio dos exoplanetas identificados.	1
2.1	Tipos de planetas	4
2.2	Diagrama ternário para um exoplaneta	6
2.3	Relação Massa-Raio	8
2.4	Relação Massa-Raio para Júpiteres-Quentes	9
3.1	Espectro do exoplaneta HD189733b	11
3.2	Diagrama de fase para CO, CH ₄ , e H ₂ O.	13
3.3	Diagrama de fase do NH ₃ e do N ₂	15
3.4	Razões C/O para diferentes temperaturas	16
3.5	Presença química esperada em Netunos-Quentes	17
3.6	Trânsito primário e secundário	21
3.7	Trânsito do exoplaneta GJ1214b em diferentes comprimentos de onda .	23
3.8	Transmissão de algumas moléculas relevantes para química do exoplaneta.	25
3.9	Espectro teórico para o exoplaneta XO-2b para diferentes abundâncias de água.	26
3.10	Esquema de espécies químicas a se condensarem em diferentes altitudes.	27

LISTA DE TABELAS

2.1	Minerais típicos que compõem o material rochoso.	4
3.1	Lista de gases em ordem de abundância	18
3.2	Tabela de possíveis moléculas para exoplanetas rochosos	20

1. INTRODUÇÃO

Exoplanetas são planetas que não pertencem ao Sistema Solar. A definição atual de planeta pode ser vista na Resolução B5¹ da União Internacional Astronômica, o qual define que um planeta é um corpo celeste que orbita sua estrela (para o Sistema Solar é o Sol), possui massa suficiente para que sua autogravidade force uma forma em equilíbrio hidrostático (forma quase esférica), e que tenha limpado a região de sua órbita de corpos menores, resquícios da formação do sistema planetário. Estrelas que possuem planetas orbitando-as são denominadas estrelas hospedeiras. Atualmente, foram detectados 2107 exoplanetas em 1302 sistemas planetários². Podemos visualizar na figura 1.1 a distribuição atual de massa e raio para os exoplanetas identificados.

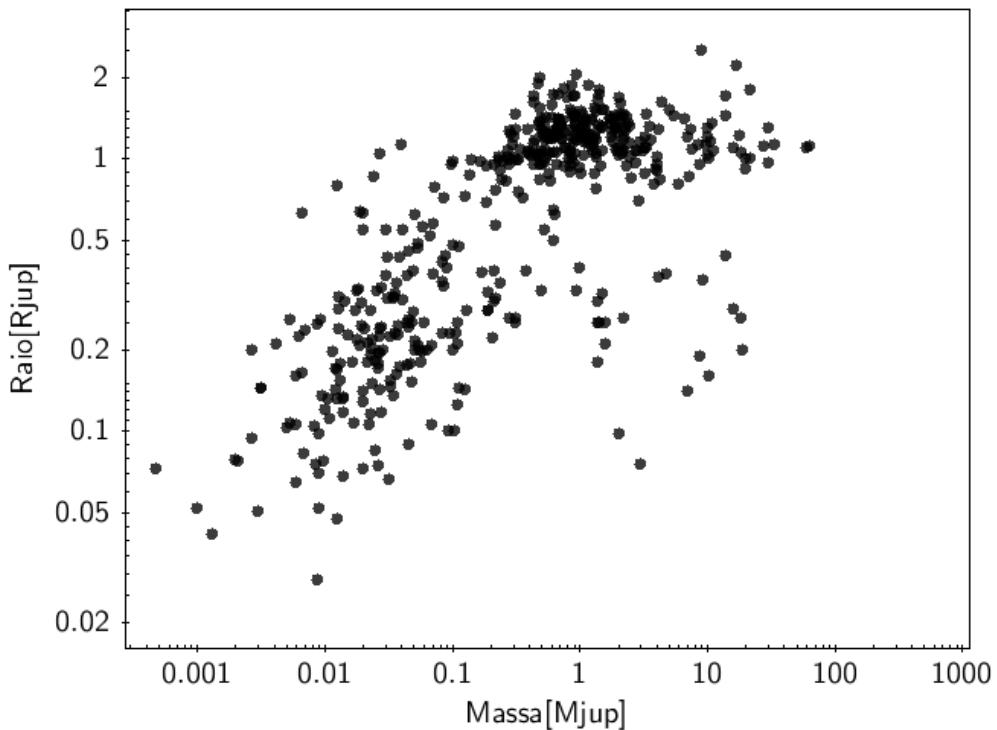


Fig. 1.1: Distribuição de massa e raio dos exoplanetas identificados em unidades de massa de Júpiter e raio de Júpiter, respectivamente. Até momento, ainda são poucos os objetos com algumas massas terrestres ($1 M_{\oplus}$ equivale a $10^{-3} M_{Jup}$). Exoplanetas descobertos e catalogados até 5 de abril de 2016. Dados obtidos em <http://exoplanet.eu>.

Esta monografia propõe-se a elucidar um pouco sobre a química dos exoplanetas. A

¹ Resolução B5 da IAU: https://www.iau.org/static/resolutions/Resolution_GA26-5-6.pdf

² verificado em 5 de abril de 2016 pelo banco de dados [www.exoplanet.eu](http://exoplanet.eu).

linha de estudo proposta é avaliar o que a massa, o raio e o espectro do exoplaneta, permitem inferir sobre a composição química do exoplaneta, e o que por fim esta química permite inferir sobre a estrutura do exoplaneta, caracterizando sua física. A massa e o raio são obtidos a partir da técnica de velocidade radial, o qual identifica o exoplaneta a partir da perturbação que este causa na velocidade radial de sua estrela hospedeira. O espectro é obtido a partir da técnica de trânsito, que identifica o exoplaneta a partir da queda do fluxo proveniente da estrela quando o exoplaneta passa na frente ou atrás da estrela (Lissauer & de Pater, 2013; Perryman, 2011). A técnica de trânsito fornece a partir da queda do fluxo a razão do raio do planeta com relação ao raio da estrela, R_p/R_\star , o que também permite inferir qual raio do exoplaneta .

Outras técnicas usadas no estudo dos exoplanetas são as técnicas de astrometria, de lentes gravitacionais, de resíduos temporais e de imageamento (Perryman, 2011). A técnica de astrometria identifica variações da posição da estrela com relação ao bárcentro do sistema de massa. A técnica de resíduos temporais é aplicada às estrelas que possuem variações periódicas de brilho, quando identifica-se alterações na periodicidade deste brilho existe a possibilidade da presença de um exoplaneta. A técnica de resíduos temporais foi a primeira técnica a identificar um exoplaneta, o exoplaneta PSR B1257+12, o qual estava orbitando um pulsar (Wolszczan & Frail, 1992). A técnica de lentes gravitacionais é o uso de lentes gravitacionais para estudar os exoplanetas em estrelas distantes ou exoplanetas com baixa massa.

A química presente no exoplaneta pode ser estimada inicialmente pela densidade média ou avaliada a partir da composição inferida pela comparação entre espectros teóricos com espectros observados (Encrenaz, 2014; Griffith, 2013; Lodders, 2010; Seager & Deming, 2010). A composição química da atmosfera do exoplaneta controla qual será a opacidade em diferentes altitudes da atmosfera, influenciando no transporte de energia e no espectro resultante da atmosfera (Griffith, 2013).

A distribuição dos capítulos segue a seguinte ordem. O capítulo 2 trata sobre o que a massa e o raio nos dizem sobre a composição esperada do exoplaneta e como isto permite caracterizar em grupos os exoplanetas observados. O capítulo 3 aborda sobre a química na atmosfera do exoplaneta e sua identificação no espectro planetário. No capítulo 4 são apresentadas as conclusões desta monografia e algumas perspectivas sobre o estudo de exoplanetas relevantes para a análise química destes corpos.

2. QUÍMICA NA COMPOSIÇÃO INTERNA DOS EXOPLANETAS

Neste capítulo abordaremos qual é a química esperada para o exoplaneta quando obtém-se a sua densidade média e quais são as duas principais ferramentas usadas para analisar a possível estrutura interna do exoplaneta.

2.1 Química esperada dos exoplanetas

A primeira inferência sobre a química de um exoplaneta é baseada na densidade média estimada. Usando a densidade pode-se caracterizar 4 tipos de planetas: (1) ricos em gases, (2) pobres em gás e ricos em gelo, (3) rocha e gelo, e (4) rochosos. Planetas ricos em gás possuem uma densidade média menor do que 2 g/cm^3 e estão dentro de um intervalo de massa de 1 M_{Jup} e 13 M_{Jup} . Planetas pobres em gás e ricos em gelos possuem densidade média menor do que 2 g/cm^3 e possuem uma massa em torno de 0.05 M_{Jup} (Lodders, 2010; Perryman, 2011). Planetas de rocha e gelo possuem uma densidade média de 3 g/cm^3 e planetas rochosos possuem uma densidade média maior do que 3 g/cm^3 , ambos tipos de planeta possuem massa em torno de 0.003 M_{Jup} .

Esta caracterização inicial é baseada na observação dos tipos de planetas que pertencem ao Sistema Solar. Uma comparação da proporção de rochas, gases e gelos pode ser visualizada na figura 2.1 para os planetas do Sistema Solar e Plutão. No cenário do Sistema Solar, Júpiter e Saturno são planetas ricos em gás, Urano e Netuno são os planetas pobres em gás e ricos em gelos, a categoria de planeta de gelo e rocha é representado pelo planeta-anão Plutão e a categoria dos planetas rochosos por Mercúrio, Vênus, Terra e Marte.

Lodders (2003, 2010) comenta que a caracterização de uma espécie química como rocha, gelo ou gás corresponde à fase em que este material foi acretado durante a formação planetária e não como a espécie química é observada atualmente nos planetas. Esta definição para rocha, gelo e gás é associada a temperatura de condensação da espécie química durante o tempo de vida do disco proto-planetário. Rochas são espécies químicas que o seu conteúdo presente no disco proto-planetário condensa-se em temperaturas acima de 600 K, enquanto que os gelos são espécies químicas que o seu conteúdo total condensa-se em temperaturas menores do que 200 K. Uma tabela dos minerais típicos que compõem o material rochoso pode ser visualizada na tabela

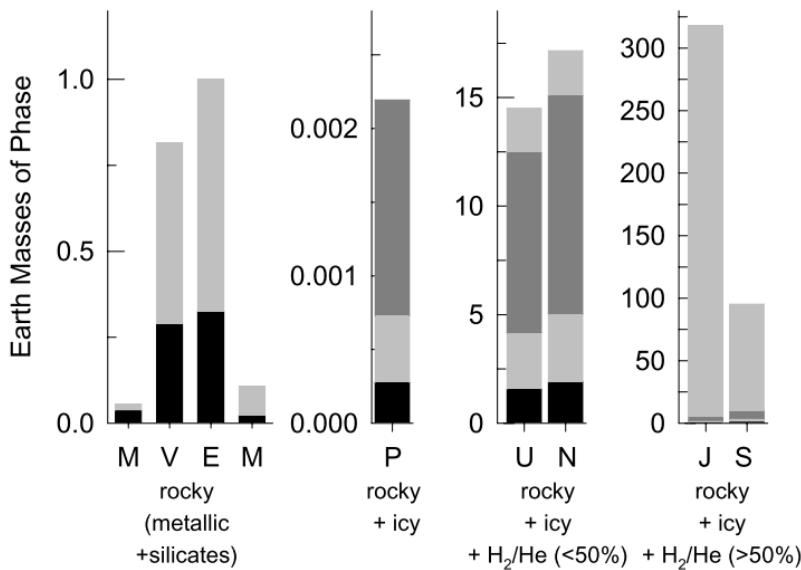


Fig. 2.1: Pode-se definir 4 tipos de planetas, baseando-se na massa e na densidade usando o conjunto de planetas do Sistema Solar e Plutão (planeta-anão) como comparação no eixo horizontal (da esquerda para direita, M: Mercúrio, V: Vênus, T: Terra, M: Marte, P: Plutão, U: Urano, N: Netuno, J: Júpiter, S: Saturno). No eixo vertical tem-se a quantidade de cada material em massas terrestres (preto: material metálico, cinza claro: silicatos, cinza escuro: gelos, segundo cinza claro acima do cinza escuro: gás H₂ e He). Figura extraída de Lodders (2010)

2.1. Gases são espécies químicas que o seu conteúdo presente no disco-protoplanetário não condensa-se totalmente no tempo de vida do disco (Lodders, 2010).

Grupo	Mineral	Mineral(em inglês)	Fórmula
Olivina (Mg,Fe) ₂ SiO ₄	Forsterita	<i>Forsterite</i>	Mg ₂ SiO ₄
	Fayalita	<i>Fayalite</i>	Fe ₂ SiO ₄
Piroxênios (Mg,Fe,Ca)SiO ₃	Enstatita	<i>Enstatite</i>	MgSiO ₃
	Ferrosilita	<i>Ferrosilite</i>	FeSiO ₃
	Wollastonita	<i>Wollastonite</i>	CaSiO ₃
Feldspato	Anortita	<i>Anorthite</i>	CaAl ₂ Si ₂ O ₈
	Albatita	<i>Albite</i>	NaAlSi ₃ O ₈
	Orthoclásio	<i>Orthoclase</i>	KAlSi ₃ O ₈
Liga metálica	Ferro-Níquel	<i>Iron-nickel</i>	FeNi
Sulfetos	Trolita	<i>Troilite</i>	FeS
	Pirrotita	<i>Pyrrotite</i>	Fe _{1-x} S
Óxidos	Magnetita	<i>Magnetite</i>	Fe ₃ O ₄
Silicatos hidratados	Silicato de Magnésio	<i>Talc</i>	Mg ₃ (Si ₄ O ₁₀)(OH) ₂
	Hidratado		

Tab. 2.1: Tabela de minerais típicos que compõem o material rochoso. Os nomes dos minerais na terceira coluna foram mantidos em inglês afim de evitar erros de tradução. Tabela adaptada de Lodders (2010); Perryman (2011).

A composição química do exoplaneta é um balanço da proporção de rochas, gelos e gases que o compõem e a primeira hipótese para inferir qual a química esperada em um exoplaneta é supor que a sequência de processos físicos e químicos que ocorreram no sistema planetário sejam semelhantes aos que ocorreram no Sistema Solar (Perryman, 2011). Os modelos de estrutura interna do exoplaneta assumem a abundância solar ou a abundância da estrela hospedeira, caso seja conhecida, como hipótese para a proporção inicial entre os elementos químicos presentes no exoplaneta (Lodders, 2010; Seager & Deming, 2010). A suposição de que a abundância solar ou da estrela hospedeira seja a abundância do exoplaneta em vez da abundância da nebulosa o qual gerou o sistema planetário para caracterizar o modelo de interior do exoplaneta deve-se ao fato de que a maioria dos modelos de interior desconsidera os eventos de formação planetária, e analisa somente o estado momentâneo do exoplaneta (Fortney *et al.*, 2007). Contudo, discrepâncias entre a abundância da estrela hospedeira com a abundância química do exoplaneta levam a estudos detalhados de sua formação, o que assumem então, como hipótese inicial, a abundância da nebulosa solar (Barnes, 2010; Perryman, 2011).

2.2 Interior dos exoplanetas: a dependência da composição

O interior do planeta é regido pela equação de estado que depende do material que o compõe (Fortney *et al.*, 2007). Esta inferência é baseada na estimativa de densidade média do exoplaneta aliada a proporção de rochas, gelos e gases considerados (Perryman, 2011).

2.3 Equação de estado

Equação de estado é uma equação que descreve o equilíbrio do estado da matéria determinada por um conjunto de condições físicas, um exemplo é o equilíbrio termodinâmico (Perryman, 2011). Para um planeta, em geral, a equação de estado descreve a pressão, P , e a entropia, S , como funções da temperatura, T , e da densidade, ρ , afim de descrever o equilíbrio mecânico e térmico (Perryman, 2011). Um exemplo de equação de estado utilizada, para planetas tipo Júpiter, é dada por Fortney *et al.* (2007):

$$P = 3.59 \times 10^{-5} \rho T \quad (2.1)$$

no sistema de unidade c.g.s.. A química do planeta fornece quais são os ingredientes que o compõem e assim qual deve ser a densidade, enquanto que a temperatura é assumida como sendo a temperatura de equilíbrio. Usando-se da conservação de energia e do equilíbrio termodinâmico pode-se inferir qual é tamanho do planeta, dado a

proporção de rochas, gelos e gases presentes em seu interior. A figura 2.2 apresenta o diagrama ternário que é uma forma de descrever resultados de modelos de interior planetário dado as proporções de rochas, gelo e manto, neste caso sendo descritos diferentes modelos de interior para um exoplaneta de $5 M_{\oplus}$ composto de proporções de água(H_2O), de manto (olivina e piroxênios) e de núcleo (ferro e níquel).

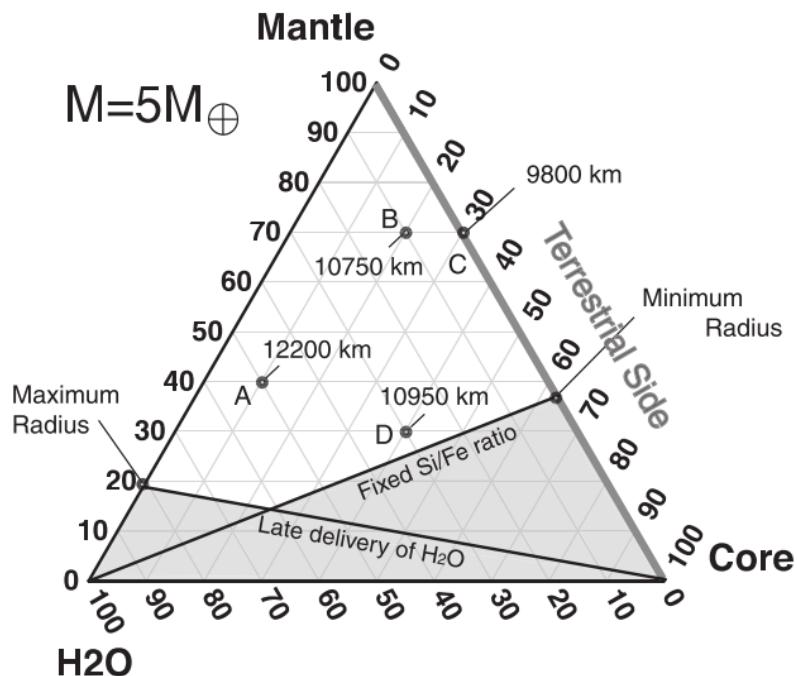


Fig. 2.2: Diagrama ternário para um exoplaneta de $5 M_{\oplus}$. Cada vértice do triângulo corresponde a 100 % de composição do que a vértice apresenta, sendo de água, manto (olivina e piroxênio) e núcleo (ferro e níquel). As linhas paralelas as vértices são proporções, em porcentagem. Assim, dada a massa e a quantidade de núcleo, manto e água, o modelo de interior é capaz de inferir qual é o possível raio, R , do exoplaneta. Exemplos são dados pelas letras A,B,C e D. Exoplaneta A possui 50 % de água, 40 % de manto e 10 % de núcleo, e é inferido que seu raio seja de 12200 Km. Para B são 10 % de água, 70 % de manto e 20 % de núcleo, com $R = 10750$ Km. Para C são 0 % de água, 70 % de manto e 30 % de núcleo, com $R = 9800$ Km. E para D são 30 % de água, 30 % de manto e 40 % de núcleo, com $R = 10950$ Km. As regiões em cinza são regiões incompatíveis com a abundância solar e determinadas por um possível acúmulo posterior de água, após a formação do exoplaneta na nebulosa que originou o sistema planetário, e pelo valor da razão Si/Fe = 0.6, que determina limite inferior para núcleo rochoso, e desta forma, um mínimo de tamanho. O lado do triângulo de manto e núcleo, determina qual a direção preferencial dos planetas rochosos (terrestres no diagrama). Figura Extraída de Valencia *et al.* (2007).

A estrutura interna do exoplaneta pode ser dividida em atmosfera e interior planetário. De forma semelhante aos planetas gigantes, essas duas regiões são definidas a partir do momento em que a atmosfera do exoplaneta passaria a ser opaca, o que ocorre a uma pressão de $P = 10^5$ bar. O interior do exoplaneta é caracterizado em

regiões com pressões maiores do que 10^5 bar, enquanto que a atmosfera é definida em regiões com pressões menores do que 10^5 bar (Encrenaz, 2014; Griffith, 2013). A pressão pode ser correlacionada com a altitude, altura com relação a superfície que é a região de pressão $P = 10^5$ bar, a partir da escala de altura, H , que é a grandeza que fornece de quanto a pressão cai por P/e dada a temperatura de equilíbrio, gravidade e a composição química da atmosfera do exoplaneta:

$$H = -\frac{P}{dP/dr} \longrightarrow H = \frac{R T}{\mu g} \quad (2.2)$$

onde R é a constante dos gases perfeitos ($R = 8.31 \times 10^7$ erg mol $^{-1}$ K $^{-1}$), T é a temperatura de equilíbrio, μ é a média de peso molecular (em inglês, *mean molecular weight*), e g é a gravidade do planeta.

Estas considerações permitem o uso do diagrama de fase, que são diagramas de temperatura-pressão para inferir propriedades do exoplaneta, como a proporção de rochas, gelos e gases, ou como hipótese inicial para perfil temperatura-pressão para resolver a equação de transferência radiativa do exoplaneta e obter um espectro teórico para sua atmosfera (Encrenaz, 2014; Perryman, 2011).

2.3.1 Relação massa-raio

Resultados de Fortney *et al.* (2007, e referências citadas) mostram que planetas de puro ferro, pura rocha (olivina) e puro gelo (gelo de água), e suas respectivas misturas, tem uma relação entre raio e a massa do exoplaneta. Esta relação é conhecida como relação massa-raio. O intervalo de massa para exoplanetas é entre $M = 0.01 M_{\oplus}$ e $M = 1000 M_{\oplus}$ (ou $M < 13 M_J$) (Perryman, 2011). Quando o exoplaneta possui baixa massa, o seu raio tende a crescer proporcional a $M^{1/3}$ devido a acresção de matéria presente no disco proto-planetário. Conforme a massa chega próxima ao limite superior, a proporcionalidade muda de sinal do expoente, $R \propto M^{-1/3}$, e assume um comportamento assintótico devido a pressão das camadas de matéria que estão acumulando-se no exoplaneta (Barnes, 2010) Fisicamente, enquanto o exoplaneta possui baixa massa, a força de Coulomb da matéria acumulada pela acresção força um crescimento $R \sim M^{1/3}$, enquanto que para altas massas a degenerescência de elétrons provocada pelo aumento de pressão provoca um crescimento de $R \sim M^{-1/3}$ (Seager *et al.*, 2007). Pode-se desta forma, verificar para diferentes valores de densidade diferentes relações de massa-raio, como pode ser visualizado na figura 2.3.

A relação massa-raio pode indicar qual cenário provável da estrutura interna do exoplaneta e fornecer indícios se o exoplaneta é enriquecido de gás, gelos ou rochas. Um exemplo é o exoplaneta HD149026b, que pode ser observado na figura 2.4, o qual

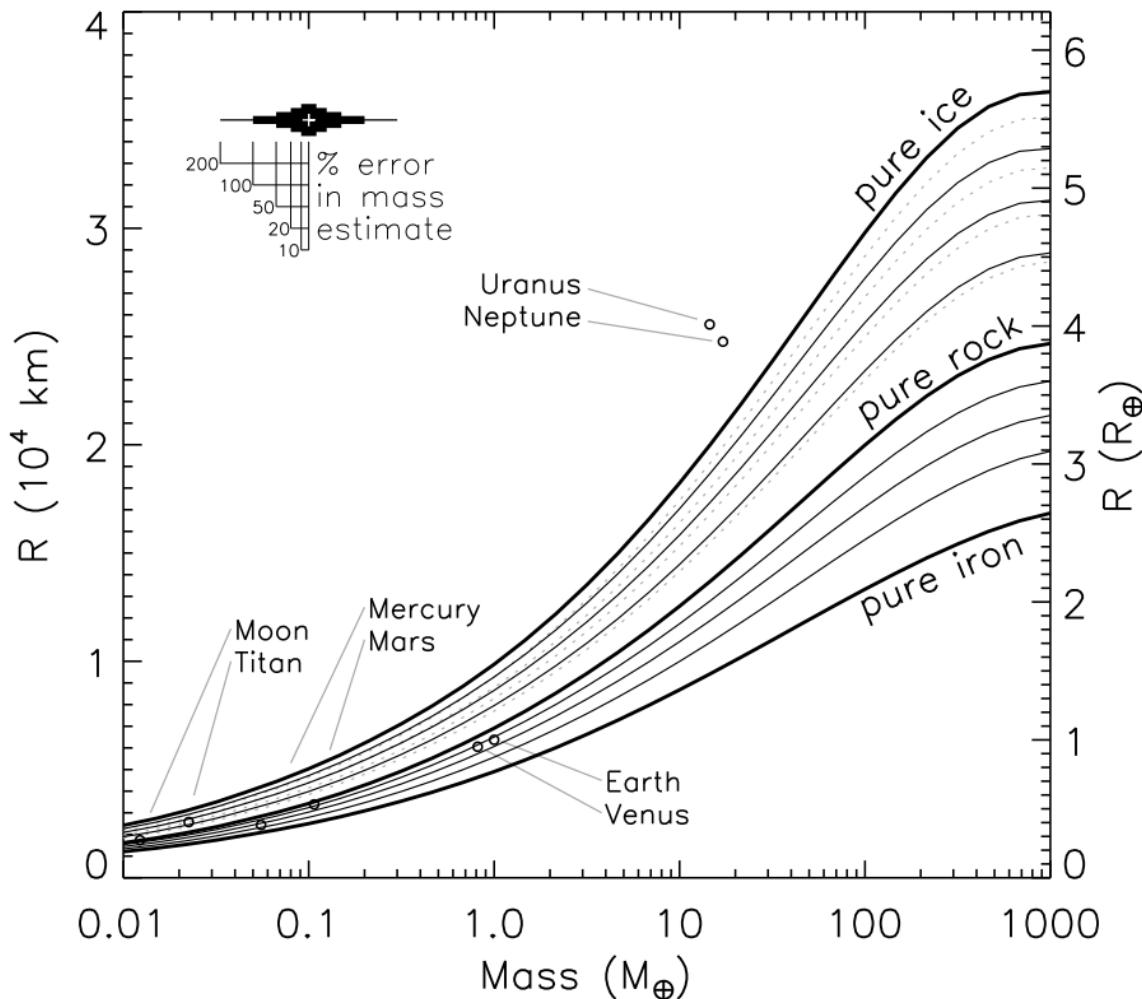


Fig. 2.3: Modelos de relação massa-raio para planetas com diferentes composições. As curvas contínuas em negrito representam planetas compostos 100 % de gelo de água, rocha (olivina) e ferro (de cima para baixo). As curvas contínuas finas representam proporções de mistura entre as curvas contínuas em negrito, respectivamente 25, 50 e 75 % de cima para baixo. Também está destacado aonde estão alguns planetas do Sistema Solar (Mercúrio, Vênus, Terra, Marte, Urano e Netuno) e duas luas (Lua e Titã). Os erros em porcentagem de massa podem ser visualizados no topo esquerdo, o raio em quilômetros está no eixo a esquerda e em raios terrestres na direita. A massa está em unidades de massa terrestres. Os planetas Urano e Netuno estão na região que descreve planetas compostos de gelo, gás ou uma combinação de gelo e gases. Figura extraída de Fortney *et al.* (2007).

possui uma massa maior do que Saturno enquanto que possui um raio menor do que Saturno. Isto implica que sua densidade seja maior, o que sugere que HD149026b seja mais enriquecido de material rochoso e gelos do que Saturno.

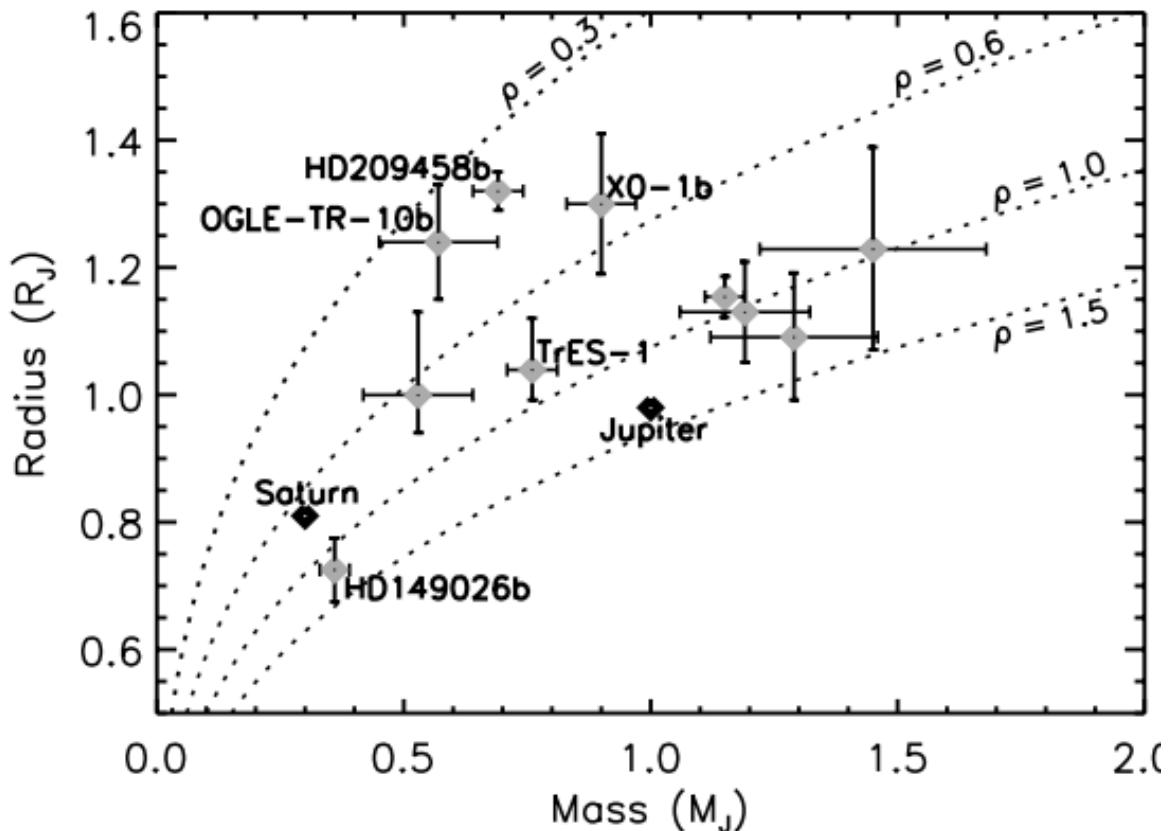


Fig. 2.4: Relação Massa-Raio para Júpiteres-Quentes e incluindo Júpiter e Saturno para comparação. As linhas pontilhadas representam diferentes valores de densidade no sistema c.g.s., o raio em unidades de raio de Júpiter e massa em unidades de massa de Júpiter. O exoplanta HD149026b possui massa maior do que Saturno, contudo com raio menor, o que indica que é mais denso e deve ser mais enriquecido de material rochoso e de gelos do que Saturno. Figura extraída de Fortney (2007).

3. QUÍMICA NA ATMOSFERA DO EXOPLANETA

A densidade média aliada à análise da equação de estado e da relação massa-raio permitem inferir qual a composição esperada nos exoplanetas. Se o planeta for rochoso, espera-se uma presença maior de silicatos, enquanto que para um Júpiter-Quente espera-se que seja composto majoritariamente de H e He (Perryman, 2011). Contudo, esta análise não permite conferir quais são as reais espécies químicas presentes no exoplaneta.

A observação de atmosferas dos exoplanetas, por sua vez, possibilita a inferência das reais condições químicas do exoplaneta, aliada a uma confirmação do perfil de temperatura e do perfil de pressão (Seager & Deming, 2010).

3.1 *Atmosfera de exoplanetas: a química como caracterizador*

Modelos atmosféricos tem como objetivo obter as propriedades dos envoltórios de gás (atmosfera planetária), sendo eles: (1) o perfil de temperatura, (2) o perfil de pressão, (3) a circulação atmosférica, (4) a composição química, (5) a condensação, e (6) as propriedades espectrais resultantes (linhas de emissão e absorção, e bandas moleculares) na região do visível e do infravermelho (Perryman, 2011; Seager & Deming, 2010).

Devido aos planetas não possuírem emissões geradas por reações termonucleares, a maioria de sua emissão deve-se a reemissão da luz proveniente de sua estrela hospedeira. Essa reemissão ocorre em maior parte no térmico, onde observa-se o máximo de emissão na região do infravermelho (Encrenaz, 2014). Os primeiros exoplanetas a serem analisados foram Júpiteres-Quentes devido a proximidade com sua estrela hospedeira, pois a alta temperatura de equilíbrio permite um maior sinal-ruído (Seager & Deming, 2010), sendo estes HD209458b, HD189733b, HAT-P-7b, TrES-4b, XO-1b, TrES-2b, TrES-3b, XO-2b pelos instrumentos espaciais HST/ACS¹, HST/NICMOS e Spitzer/IRAC (Seager & Deming, 2010). Devido ao espectro planetário ser constituído de diferentes regiões de temperatura e pressão, ele pode possuir tanto linhas em emissão quanto em absorção, e não tem como contínuo um único corpo negro (Lissauer & de Pater, 2013; Perryman, 2011).

Na figura 3.1 pode-se observar dados obtidos na região do infravermelho para o

¹ Telescópio Espacial Hubble: HST

exoplaneta HD189733b, e são esperadas nesta região a presença de bandas moleculares de H₂O, CO, CO₂ e CH₄. A inferência sobre quais moléculas devem ser esperadas no espectro de exoplanetas é feita baseada nos mecanismos químicos relevantes para atmosfera planetária.

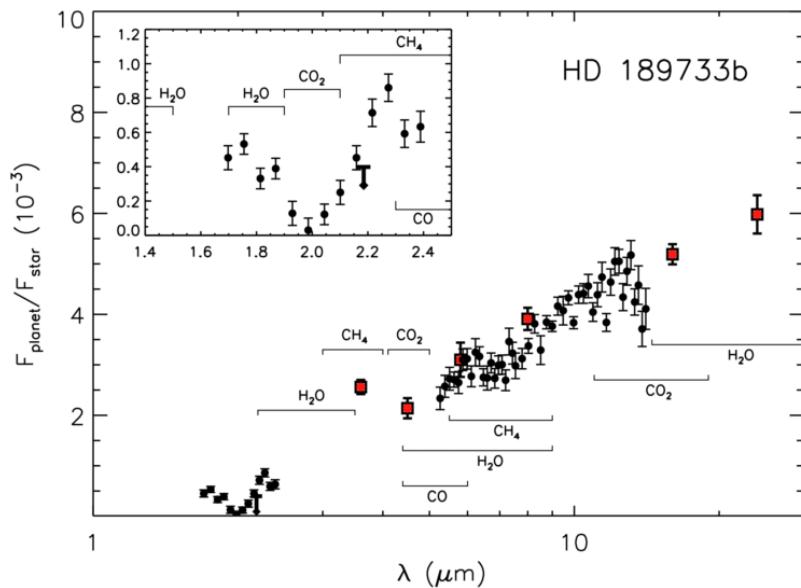


Fig. 3.1: Espectro do exoplaneta HD189733b. Dados obtidos pelos instrumentos HST/NICMOS (pontos pretos) e pelo Spitzer/IRAC (pontos em vermelho). Regiões esperadas para bandas moleculares são identificadas no gráfico para as moléculas H₂O, CO, CO₂ e CH₄. Figura extraída de Seager & Deming (2010).

3.2 Mecanismos químicos para atmosferas planetárias

Moses (2014)², (Moses *et al.*, 2013) e (Yung & DeMore, 1999) comentam que os processos que dominam a química presente na atmosfera dos planetas e exoplanetas são: (1) o equilíbrio químico, (2) a fotoquímica, e (3) o transporte induzido devido a fluorescência.

3.2.1 Equilíbrio químico

O equilíbrio químico ocorre quando a abundância química dos reagentes e dos produtos permanece a mesma (Yung & DeMore, 1999). Sendo a reação química



onde *A* e *B* são os reagentes enquanto que *C* e *D* são os produtos. O equilíbrio químico ocorre quando a reação num dado sistema acontece em ambas as direções mantendo a

² Apresentação de Moses (2014) no EXOCIMES III pode ser obtida em: http://www.exocimes.org/wp-content/uploads/2014/02/exocimes14_moses.pdf.

quantidade de A e B que torna-se C e D , o mesmo ocorrendo para a reação inversa. Pela física estatística, isso corresponde a encontrar a menor energia de Gibbs³ possível para atmosfera planetária. Sendo G a energia de Gibbs, então:

$$G = \sum_{l=1}^L \bar{g}_l N_l \quad (3.2)$$

onde \bar{g}_l é a energia livre parcial de dada espécie química l e N_l é a quantidade de moles da espécie química l . A minimização desta função corresponde a encontrar o estado de equilíbrio químico para atmosfera planetária. Assumindo que a atmosfera é composta por gases ideais, a energia livre parcial é dada por $\bar{g}_l = E(T, P) + R T \log(N_l)$, onde E é a energia livre⁴ sendo uma função da temperatura e da pressão em cada camada da atmosfera, R é a constante dos gases perfeitos, e T é a temperatura (Venot *et al.*, 2012). Usualmente, considera-se que cada camada da atmosfera esteja em equilíbrio termodinâmico.

Os problemas para obter a minimização da energia livre de Gibbs para o equilíbrio químico é o desconhecimento de todas as espécies químicas presentes, os parâmetros termodinâmicos com altas taxas de incerteza, como no caso da temperatura terem erros da ordem de 1000K (Griffith, 2013), e as complicações devido ao processo de condensação (Moses, 2014). Contudo, os diversos trabalhos sobre a química dos exoplanetas permitem reduzir as possibilidades de cenário físico e químico (Seager & Deming, 2010).

O equilíbrio químico, que a partir de agora denominaremos termoquímico pois consideraremos incluído o equilíbrio termodinâmico, é controlado pela química do oxigênio, do nitrogênio e do carbono que são os elementos reativos mais abundantes, regulamentando a química planetária (Lodders, 2010; Lodders & Fegley, 2002; Perryman, 2011). Assim, conhecendo-se a temperatura, a pressão e a abundância química, define-se qual o cenário de equilíbrio termoquímico adequado ao exoplaneta que se queira caracterizar (Moses, 2014; Moses *et al.*, 2013, 2011).

Os gases dominantes baseados em carbono presentes na atmosfera são o metano (CH_4), o monóxido de carbono (CO) e o dióxido de carbono (CO_2) (Lewis, 2004; Lodders & Fegley, 2002). O equilíbrio do carbono e do oxigênio são controlados pela reação entre CO e CH_4 :



³ Energia de Gibbs é a grandeza termodinâmica capaz de dizer o quanto de energia está disponível em dado sistema para que ocorra trabalho.

⁴ Parcela de energia disponível a ser transformada em energia mecânica.

onde o símbolo \rightleftharpoons informa que a reação ocorre para ambos os lados e que as espécies químicas atuantes estão no estado gasoso. Enquanto que CO domina em altas temperaturas e baixas pressões ($T \geq 1500$ K e $P \leq 1$ bar), o CH₄ domina em baixas temperaturas e altas pressões, como pode ser visualizado na figura 3.2. Quando o equilíbrio termoquímico não é alcançado, ocorre o processo de fluorescência do CO e do CH₄. A fluorescência será discutida mais à frente.

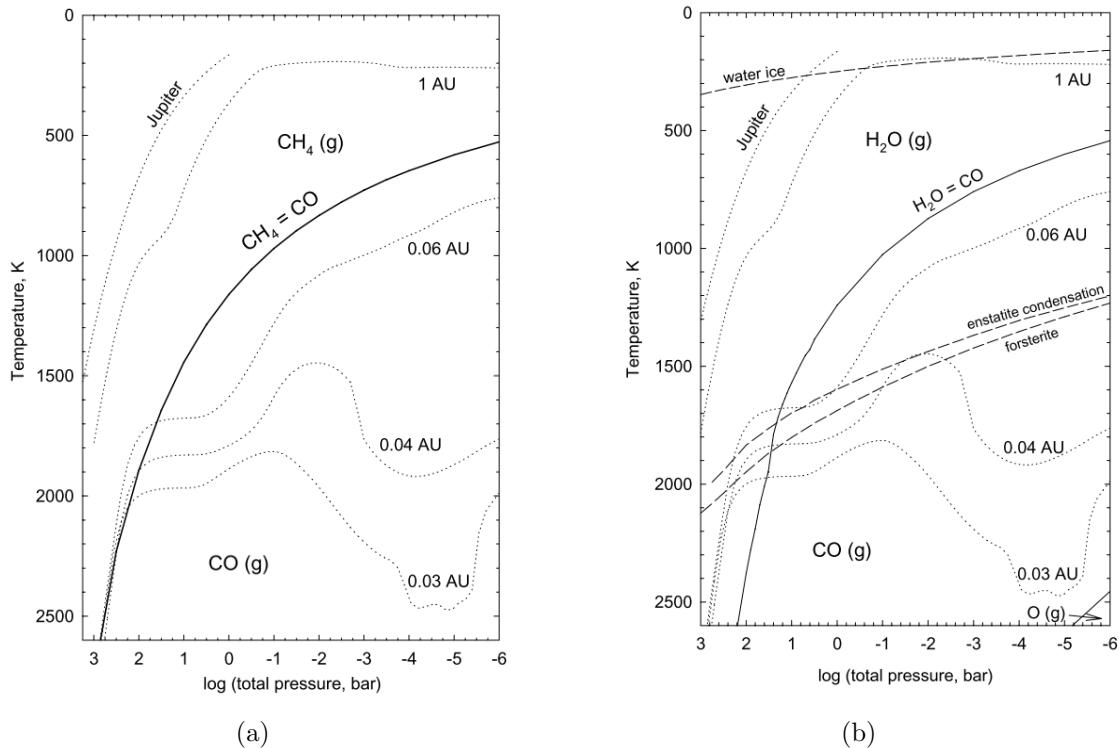
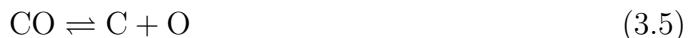
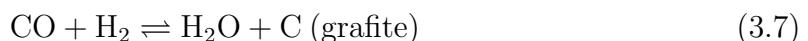
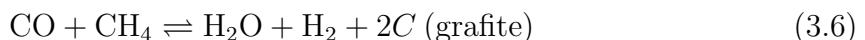


Fig. 3.2: Diagrama de fase referente a equação 3.3. Na figura (a) observa-se o equilíbrio entre o CO e o CH₄, onde a linha contínua em preto representa a região em que existe proporção igual de CO e CH₄. Em regiões de altas temperaturas e baixas pressões, o gás CO domina, enquanto que em regiões de baixas temperaturas e altas pressões o gás CH₄ domina o ambiente da atmosfera planetária. As linhas pontilhadas são os perfis de temperatura-pressão para exoplanetas do tipo Júpiter em diferentes distâncias de suas estrelas hospedeiras, em unidades astronômicas. Na figura (b) observa-se o equilíbrio entre CO e H₂O. Por sua vez, o H₂O domina em regiões de alta pressão e baixa temperatura, enquanto o CO domina em regiões de baixas pressões e altas temperaturas. As linhas tracejadas representam regiões de condensação de gelo de água, enstatita e forsterita. Figuras extraídas de Lodders (2010).

Em altas temperaturas, geralmente em Júpiteres-Quentes, o CO e o CH₄ dissociam-se formando CH₃ e liberando H, O e C no meio (Lodders & Fegley, 2002):



O ponto triplo do CH₄-CH₃-CO ocorre quando a temperatura é $T = 4695$ K numa pressão de $P = 8904$ bar, e a abundância destes gases é a mesma $A(\text{CH}_4) = A(\text{CH}_3) = A(\text{CO})$ (Lodders & Fegley, 2002). Em baixas temperaturas, o CH₄ e o CO reagem formando grafite (Lodders & Fegley, 2002):



As equações 3.6, 3.7 e 3.8 falham em três casos: (1) nas regiões de estabilidade do grafite, (2) nas regiões em que grafite é a espécie química mais abundante, e (3) nas regiões em que a maior parte do carbono está presente em CO₂ (Lodders & Fegley, 2002). O CO₂ surge em reações químicas envolvendo o CO, CH₄ e H₂O, os quais podem possuir o grafite como um sub-produto:



Os gases dominantes baseados em oxigênio são a água e o monóxido de carbono. H₂O domina em regiões de baixas temperaturas e altas pressões enquanto que o CO domina em regiões de altas temperaturas e baixas pressões, como pode ser visualizado na figura 3.2. A presença de CO como gás dominante também pode ocorrer devido à presença de metais, aonde o oxigênio presente na água une-se a estes, oxidando-os, diminuindo a abundância de água e metano e mantendo a de CO. Outro fator que modifica a abundância relativa de H₂O e CO é o processo de condensação e formação de nuvens. Em altas temperaturas, a presença de óxidos e silicatos consomem 20% do oxigênio presente, ficando retidos em Mg₂SiO₄ e em MgSiO₃.

Para nitrogênio, os gases dominantes são o N₂ e o NH₃. Em altas pressões, o NH₃ domina a região, enquanto que para baixas pressões o N₂ é o gás dominante, como

pode ser visualizado na figura 3.3. A reação química que controla a presença de N₂ e NH₃ é:

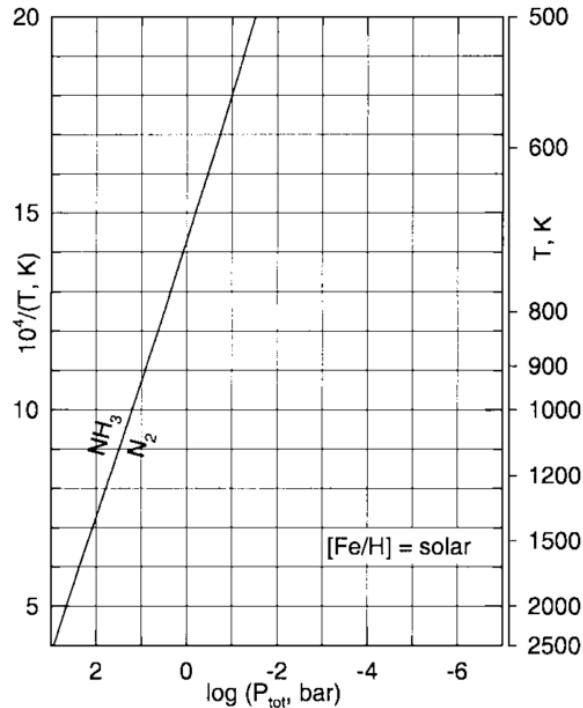
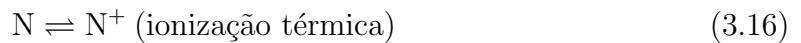
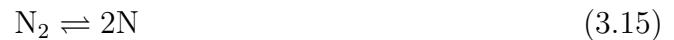


Fig. 3.3: Diagrama de fase do NH₃ e do N₂. Regiões com alta temperatura favorecem o N₂, enquanto baixas temperaturas favorecem o NH₃. A linha contínua representa as regiões com abundâncias semelhantes, $A(\text{NH}_3) = A(\text{N}_2)$. Figura extraída de Lodders & Fegley (2002).

A reação inversa é favorecida quando ocorre em altas temperaturas, tornando o N₂ o gás mais abundante. Em baixas temperaturas, o N₂ dissocia-se, enquanto que em altas pressões o NH₃ dissocia-se:



Devido à importância da abundância de C, N e O que compõem as principais moléculas encontradas na atmosfera, a razão C/O é usada como estimativa para inferir as condições da formação planetária (Lodders, 2010; Perryman, 2011), e caracterizador da atmosfera do exoplaneta (Madhusudhan, 2012). Isto deve-se ao fato de pode-se correlacionar a razão C/O com a razão de misturas de outras espécies químicas, X/H_2 onde

X é a espécie química analisada, como pode ser visualizada na figura 3.4. Nela pode-se observar que para as baixas temperaturas, $T \leq 1200$ K, o gás dominante de oxigênio é H_2O , e o gás dominante de carbono é o CH_4 . Conforme a temperatura aumenta o CO e C_2H_2 passam a dominar em altas temperaturas. O excesso de carbono $\text{C}/\text{O} > 1$ influencia a formação de hidrocarbonetos, C_2H_2 , C_2H_4 e HCN (Madhusudhan, 2012). HCN e C_2H_2 tornam-se fontes importantes de opacidade na região do infravermelho, substituindo a opacidade do CO na janela espectral em $4.5 \mu\text{m}$ (Lodders, 2010).

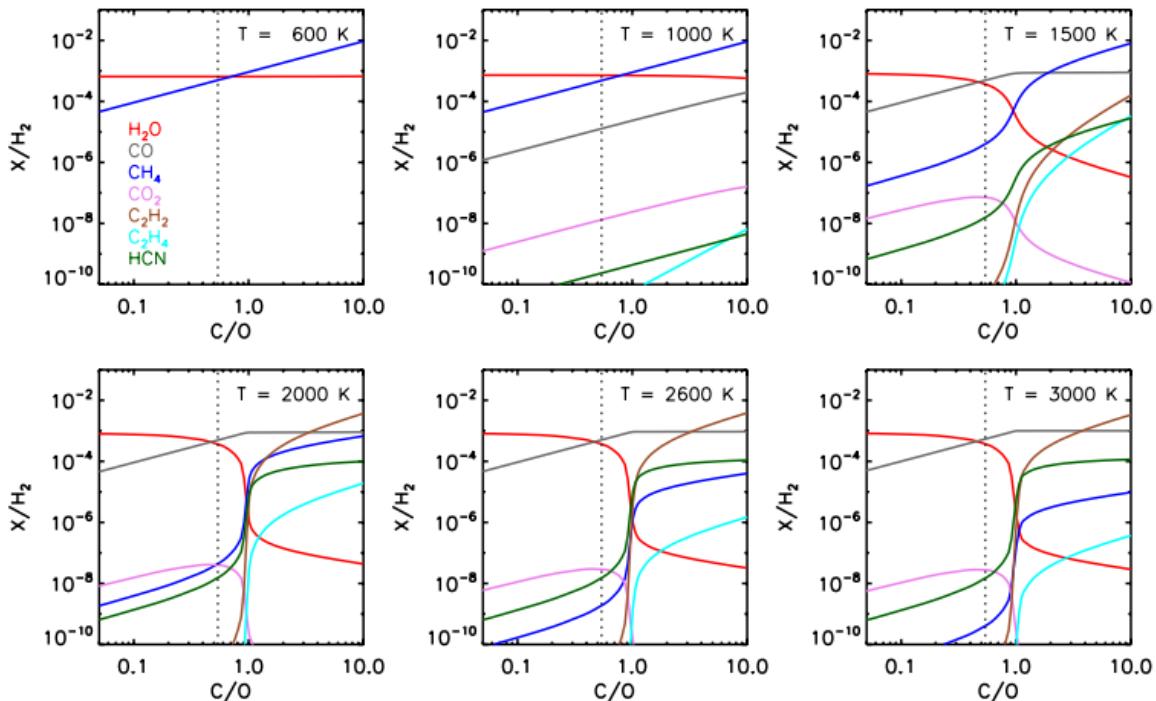


Fig. 3.4: Razões C/O para diferentes temperaturas localizadas no canto superior direito em uma pressão de $P = 1$ bar. A linha pontilhada representa a razão solar, $[\text{C}/\text{O}] = 0.5$. Figura extraída de Madhusudhan (2012).

A metalicidade influencia na razão C/O e na razão de misturas aumentando a diversidade química no exoplaneta, permitindo inferir a proporção das moléculas presentes na atmosfera dado o equilíbrio termoquímico (Moses *et al.*, 2013). Exemplos de modelos termoquímicos para Netunos-Quentes, planetas ricos em gelo e pobres em gás próximos de sua estrela são dados por Moses *et al.* (2013) e podem ser visualizados na figura 3.5. O aumento da razão C/H favorece as reações vistas anteriormente, tornando a atmosfera dominada por CO_2 em baixas temperaturas e altas metalicidades, e por CO_2 e CO em altas temperaturas e altas metalicidades. Uma compilação dos principais gases em diferentes temperaturas pode ser visto na tabela 3.1.

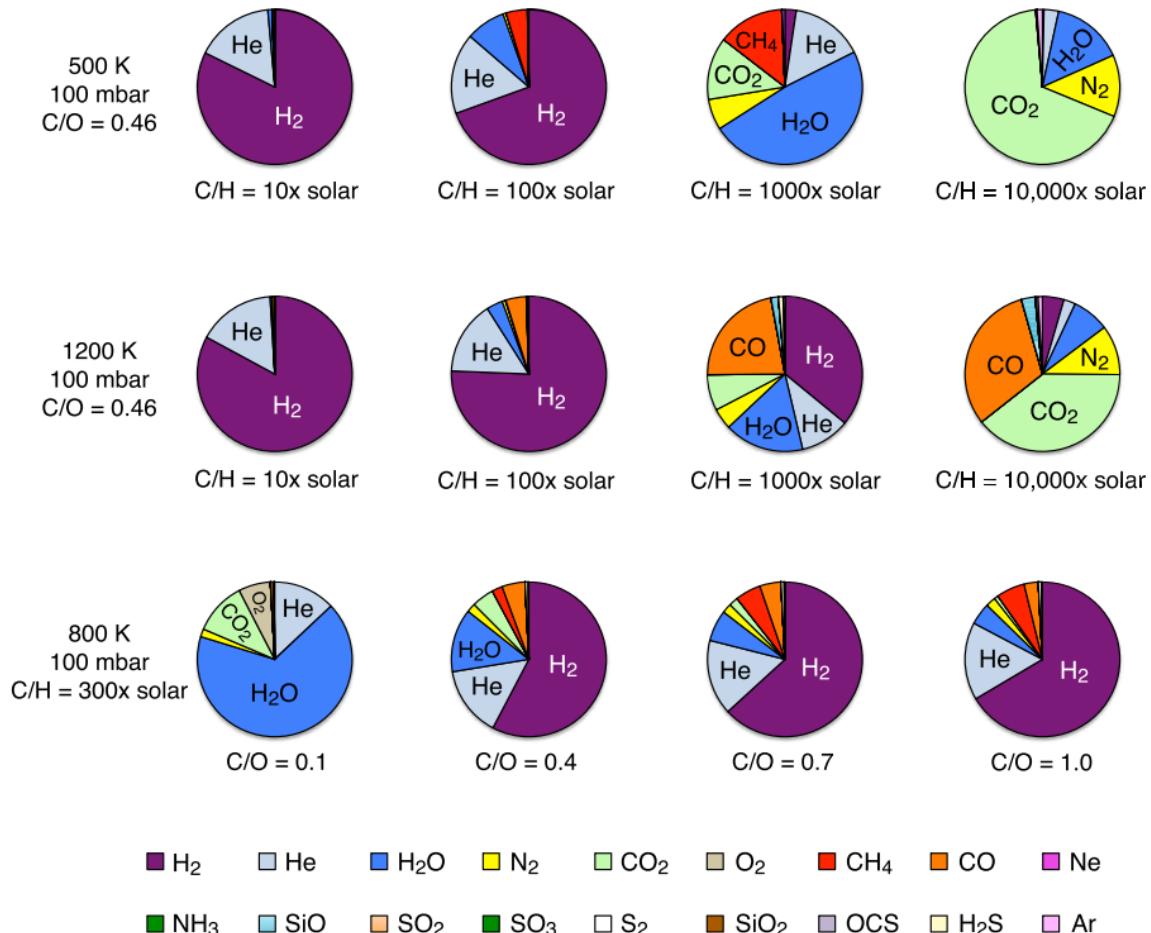


Fig. 3.5: Presença química esperada em Netunos-Quentes. As cores representam as espécies químicas consideradas nos modelos de equilíbrio termoquímico. Pressões e temperaturas correspondentes, além da metalicidade representada pela razão C/H e pela razão C/O estão descritas próximas aos respectivos gráficos de pizza. Nas duas linhas de cima para baixo do gráfico, considera-se a mesma razão C/O, demonstrando como a metalicidade influencia aumentando a quantidade de espécies químicas presentes. A última linha de gráficos de pizza, mostra como a razão C/O influencia, em que baixas razões C/O para um mesmo valor de metalicidade (300x solar) aumentam a diversidade química presente nos Netunos-Quentes. Figura extraída de Moses *et al.* (2013).

	10^3 bar	1 bar	10^{-7} bar
Abundância	H ₂ O	CH ₄	CO
	CH ₄	CO	CO ₂
	CO, C ₂ H ₆	CO ₂	CH ₄
	CH ₃ , CH ₃ OH	CH ₃ , C ₂ H ₄ , CH ₂ O, C ₂ H ₆	CHO, CH ₂ O
	C ₂ H ₄ , CO ₂ , CH ₂ O	CH ₃ OH	CH ₃ , HCOOH
	C ₃ H ₈ , HCOOH	N ₂	N ₂
	NH ₃	NH ₃	NH ₃
	N ₂	HCN	HCN, NS
	CH ₃ NH ₂	HNC	HNC, NH ₂ , NO
	NH ₂ , HCN	CH ₃ , NH ₂ , HNCO, NH ₂	HCNO
	HNC		

Tab. 3.1: Lista de gases em ordem de abundância para diferentes pressões. Tabela realizada assumindo uma temperatura de $T = 1000$ K. Espécies químicas foram escritas na ordem que os átomos ou moléculas se conectam, discriminando assim moléculas com a mesma fórmula química. Tabela obtida em Lodders & Fegley (2002).

3.2.2 Fotoquímica

Fotoquímica, em inglês *photochemistry*, refere-se a todos os aspectos de interação entre a luz e os átomos ou moléculas, incluindo a ionização e a isomerização⁵ (Perryman, 2011; ShawA., 2006). Existem três tipos de fotoquímica: a fotólise, a reação bimolecular e a reação termomolecular. Reações termomoleculares, reações moleculares induzidas pela temperatura e pressão do ambiente, foram vistas já na seção sobre equilíbrio químico. Elas tem o formato:



Reações bimoleculares são reações envolvendo duas moléculas onde um grupo de átomos da primeira molécula intercambia com a segunda molécula:

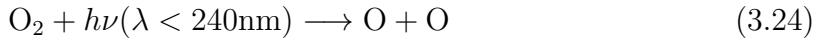
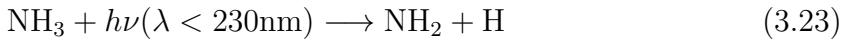
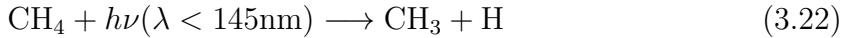
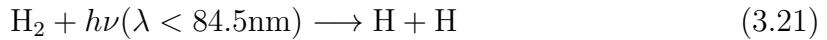


A fotólise é o termo que refere-se a quebra de uma molécula devido à interação com um fóton. A fotólise em atmosferas planetárias ocorre devido à interação com fótons no ultra-violeta (UV), com raios-X e raios- γ . Normalmente, a fotólise ocorre nas regiões de baixa pressão (alta altitude e baixa densidade) da atmosfera planetária. Elas tem o formato:



⁵ Transformação de uma molécula em seu isômero. Isômeros são moléculas de mesma fórmula química, mas que possuem fórmula estrutural diferente. Exemplos são o HCN e o HNC.

Alguns exemplos comuns são (Yung & DeMore, 1999):



A fotólise contribui para acelerar o escape atmosférico (de Pater & Lissauer, 2010; Perryman, 2011), e seus produtos contribuem para processos de opacidade na resolução do problema da transferência radiativa (Perryman, 2011; Rybicki & Lightman, 1985).

Modelos fotoquímicos podem tornar-se tão complexos quanto se queira, conforme coloca-se mais detalhes as possíveis espécies químicas presentes no equilíbrio termoquímico. Moses *et al.* (2000) apresentam um modelo fotoquímico para planetas gigantes utilizando-se de aproximadamente 1600 reações químicas.

As relações vistas acima funcionam tanto em planetas rochosos, gelo e rocha, de gelo pobres em gás, e ricos em gás e pobres em gelo que apresentem atmosfera.

Fotoquímica em planetas rochosos

As moléculas presentes na atmosfera de planetas rochosos por sua vez também interagem com a presença da superfície, como por exemplo oxidando a superfície do planeta (de Pater & Lissauer, 2010; Lissauer & de Pater, 2013; Perryman, 2011). Hu *et al.* (2012) modelaram 4 cenários para a fotoquímica presente em exoplanetas rochosos. Os cenários possíveis são uma atmosfera rica em N₂, uma atmosfera rica em CO₂, uma atmosfera rica em H₂ e uma atmosfera semelhante à atmosfera terrestre. A diferença direta é que o conjunto de espécies químicas que são fotolisadas e que interagem com a superfície ou condensam-se, como pode ser visto na tabela 3.2. O objetivo de Hu *et al.* foi desenvolver modelos a serem utilizados como primeiras hipóteses para a análise de exoplanetas rochosos.

3.2.3 Transporte induzido por fluorescência

Fluorescência é o processo aonde o átomo ou a molécula absorve um fóton e é seguido por uma emissão espontânea causado pelo excesso do átomo ou molécula que sofre a emissão espontânea (de Pater & Lissauer, 2010). Este efeito causa o aumento de temperatura, e pode ser observada no aumento da intensidade das linhas de emissão da molécula em excesso (Moses, 2014; Moses *et al.*, 2011; Perryman, 2011), sendo as moléculas CH₄, CO, N₂ e NH₃ as mais relevantes para o efeito de fluorescência em

Planeta Rochoso	Fotólise	Interagem com a superfície	Condensação
rico em H ₂	H ₂ O, OH, CO ₂	CO ₂ , CO, CH ₂ O, CHO CH ₄ , H ₂ S, SO ₂ , S ₈	H ₂ O, CO ₂ , CH ₂ O CH ₄ O, SO ₂
rico em N ₂	O ₂ , H ₂ O, CO ₂	CO ₂ , CH ₂ O, CH ₄ O SO ₂ , H ₂ SO ₄ , S ₈	H ₂ O, CO ₂ , CH ₂ O CH ₄ , SO ₂ , H ₂ SO ₄
rico em CO ₂	O ₂ , CO ₂ , H ₂ O	CO ₂ , CO, SO ₂ H ₂ S, H ₂ SO ₄	H ₂ O, CO ₂ , CH ₂ O SO ₂ , H ₂ SO ₄
semelhante à Terra	O ₂ , O ₃ , H ₂ O	O ₂ , CO ₂ , NH ₃ , HNO ₃ H ₂ S, SO ₂ , H ₂ SO ₄	H ₂ O, CO ₂ , SO ₂ H ₂ SO ₄ , HNO ₃

Tab. 3.2: Tabela de possíveis moléculas fotolisadas, que interagem com a superfície de exoplanetas rochosos ou condensam-se na atmosfera. Dados obtidos em Hu *et al.* (2012).

atmosferas planetárias (Moses *et al.*, 2011). A fluorescência é um indicador de que a mistura de gases na atmosfera não favorece um equilíbrio químico, e este desequilíbrio causa o excesso de alguma espécie gasosa (Moses *et al.*, 2010).

O aumento de temperatura na camada com o gás em excesso que causa a fluorescência induz a movimentação de parcelas de gás. Isto provoca o aumento de mistura das espécies químicas ao longo das diferentes camadas da atmosfera. Este processo é denominado transporte induzido por fluorescência (Moses, 2014; Moses *et al.*, 2013, 2011, 2010).

Uma aplicação de transporte induzido por fluorescência é o trabalho de Venot *et al.* (2012), que analisam modelos de atmosfera para o exoplaneta HD189733b considerando equilíbrio termoquímico, e a fluorescência de NH₃ e HCN. Venot *et al.* (2012) obtém que a fluorescência do NH₃ e do HCN ocorre em pressões de $P = 0.03$ mbar e $P = 1$ bar, respectivamente. A reação:



controla a presença de NH₃, e ocorre por volta de $P = 100$ mbar devido ao movimento da parcela de NH₃ e de N₂, o que por sua vez controla a presença do HCN.



A presença do NH₃ pode ser identificada na sua linha de emissão localizada em 10 μm . Entretanto, Venot *et al.* (2012) comentam que a falta de dados na região do infravermelho não permitem a inferência se da fluorescência do NH₃ no exoplaneta HD189733b.

3.3 Espectroscopia no visível e no infravermelho

A observação de trânsitos planetários permitiu o desenvolvimento de uma nova área no estudo dos exoplanetas que foi a análise química e física das atmosferas a partir

da obtenção de espectros (Encrenaz, 2014; Griffith, 2013, 2015). Quando o exoplaneta passa em frente de sua estrela hospedeira (trânsito primário), como pode ser visualizado na figura 3.6, uma pequena porcentagem do brilho cai devido ao disco do exoplaneta que obstrui parte do brilho do disco estelar. A queda de brilho, também denominada *amplitude de absorção* é proporcional a escala de altura, ao raio da estrela e ao raio do exoplaneta, é utilizada para verificar se o sinal obtido será capaz de ser utilizado para inferir a composição química. O sinal obtido será capaz caso a amplitude de absorção for maior do que a escala de ruído da observação. A amplitude de absorção é dada por:

$$A = 5 \times \left[\frac{2R_p H}{R_\star^2} \right] \quad (3.27)$$

onde A é a amplitude de absorção, R_p é o raio do planeta, R_\star é o raio da estrela hospedeira e H é a escala de altura. É comum utilizar o raio dependente da escala de altura, $R_H = R = AR_\star/10H$, para representar a absorção em dado comprimento de onda (Encrenaz, 2014; Griffith, 2015). O fator 5 deve-se à área observada da atmosfera do exoplaneta ser um anel com altura radial de $5 \times H$ (Encrenaz, 2014). O espectro resultante de um trânsito primário é o espectro de transmissão que é diretamente dependente da pressão e da abundância química presente na atmosfera (Encrenaz, 2014; Griffith, 2015; Winn, 2010).

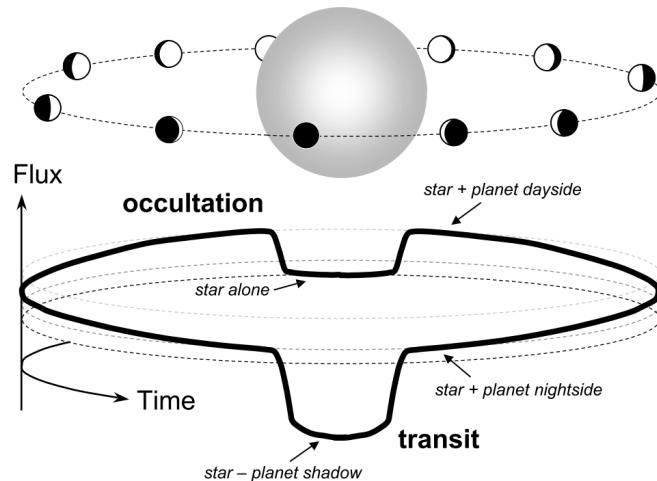


Fig. 3.6: Trânsito primário e secundário. O trânsito primário ocorre quando o exoplaneta passa em frente da estrela hospedeira, enquanto que trânsito secundário, também denominado ocultação, passa atrás da estrela, na linha de visada do observador. O trânsito primário permite inferir o perfil de pressão e a abundância química com uma menor incerteza, pois fornece um espectro de transmissão da atmosfera que é diretamente dependente da composição química e da pressão nas diferentes camadas da atmosfera. Por sua vez, o trânsito secundário permite inferir com menor incerteza o perfil de temperatura, pois fornece um espectro de emissão do lado diurno (iluminado) do exoplaneta. Figura extraída de Winn (2010).

O trânsito secundário (figura 3.6), que é a passagem do exoplaneta por trás da estrela hospedeira, fornece um espectro de emissão do lado diurno do exoplaneta e permite inferir o perfil de temperatura da atmosfera, além de indicar com maior confiabilidade as linhas de emissão presentes (Encrenaz, 2014; Griffith, 2015; Winn, 2010). Isto torna os trânsitos primário e o secundário complementares. Como o trânsito secundário corresponde ao lado diurno do exoplaneta, ele é muito dependente da razão de brilho da estrela com o exoplaneta. Desta forma, podemos utilizar a Lei de Stefan para calcular a razão do fluxo do planeta com o da estrela:

$$\rho = \left[\frac{R_p^2}{R_\star^2} \right] \times \left[\frac{T_e^4}{T_{eff}^4} \right] \quad (3.28)$$

onde T_e é a temperatura de equilíbrio do exoplaneta, T_{eff} é a temperatura efetiva da estrela hospedeira, e ρ é a razão de fluxo do planeta com o fluxo da estrela. No infravermelho médio, ρ pode ser estimado usando a aproximação de Rayleigh-Jeans (para $h\nu \ll kT$):

$$\rho = 0.01 \times \left[\frac{R_p^2}{R_\star^2} \right] \times \left[\frac{T_e}{T_{eff}} \right] \quad (3.29)$$

O uso de A e ρ permite determinar quais exoplanetas são possíveis de terem sua atmosfera obtida e analisada. Para Júpiteres-Quentes, $A \sim 10^{-4}$ e ρ varia entre 10^{-4} (visível) e 10^{-3} (infravermelho médio), tornando este tipo de exoplanetas mais suscetível a observações de sua atmosfera, dado que em telescópios terrestres o erro na razão de fluxo do exoplaneta pelo fluxo da estrela é da ordem de 10^{-3} e de telescópios espaciais o erro está na ordem de 10^{-5} (Encrenaz, 2014; Perryman, 2011).

Um exemplo de obtenção dos dados espectroscópicos pode ser visualizado no trânsito planetário do exoplaneta GJ1214b obtidos por Kreidberg *et al.* (2014), e apresentado na figura 3.7. Kreidberg *et al.* obtiveram séries espectroscópicas entre 1.1 e 1.7 μm usando o HST/WFC3. O sinal foi dividido em 22 canais, obtendo uma resolução $R \equiv \lambda/\delta\lambda = 70$. Cada trânsito em diferentes comprimentos de onda foi modelado baseando-se nas considerações de Mandel & Agol (2002).

O espectro do exoplaneta pode ser separado em duas componentes. A primeira componente é a luz refletida ou espalhada proveniente da estrela, que tem um máximo na região do visível, ou UV ou do infravermelho próximo dependendo do tipo espectral da estrela hospedeira. Nesta componente, as bandas moleculares apresentam-se em absorção sobre um fundo espectral estelar. A segunda componente é a emissão térmica do planeta. A componente térmica pode apresentar tanto linhas ou bandas de absorção ou emissão. Identificar qual região espectral e qual componente domina em cada exoplaneta é relevante para diagnosticar quais são as melhores espécies químicas

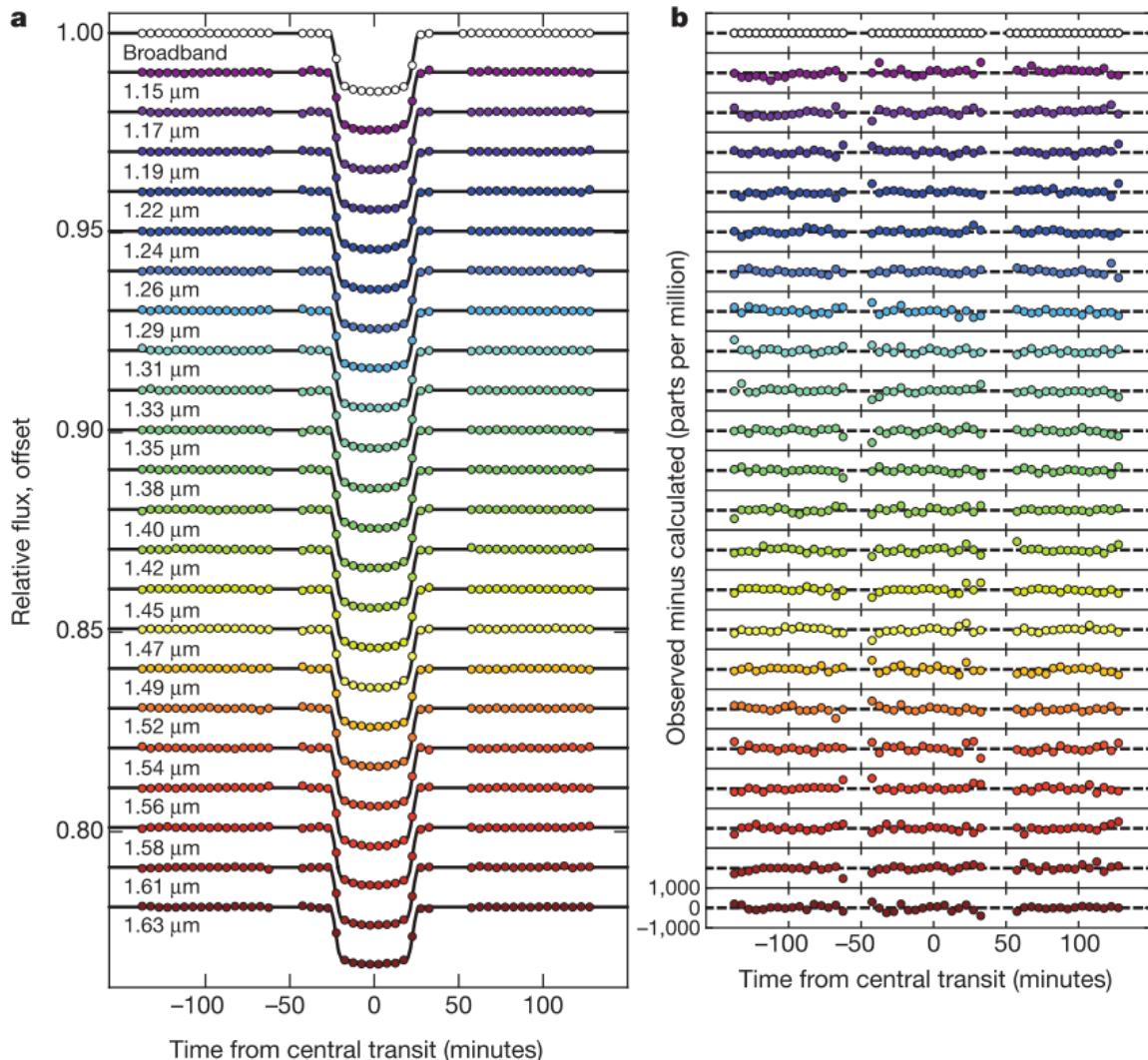


Fig. 3.7: Trânsito do exoplaneta GJ1214b em diferentes comprimentos de onda. O trânsito combinado é denominado *broadband*. Os trânsitos obtidos (pontos) e o modelado (curva contínua) podem ser visualizados em (a). A diferença entre o trânsito observado com o modelado pode ser visualizado em (b). Figura extraída de Kreidberg *et al.* (2014).

para caracterizar o exoplaneta (Encrenaz, 2014). A escolha de quais espécies químicas a utilizar é baseada portanto no intervalo de comprimento de onda em que será observado o exoplaneta.

Para modelar corretamente um espectro teórico da atmosfera do exoplaneta é necessário assumir um conjunto de espécies químicas e obter informações sobre as transições destas diferentes espécies em diferentes comprimentos de onda (ou números de onda, $w = \nu/c$, onde ν é a frequência do respectivo comprimento de onda). Dois bancos de dados de informações de transições moleculares são o GEISA⁶ e o HITRAN⁷ (Griffith, 2015), onde o mais utilizado e atualizado é o HITRAN (Rothman *et al.*, 2013). Entretanto, estes bancos de dados de informações moleculares ainda possuem alguns problemas, como valores com alta incerteza (10 a 15%) como é o caso de linhas de transições de vapor de água (Rothman *et al.*, 2013).

A figura 3.8 apresenta a transmissão de diferentes moléculas relevantes à química da atmosfera de exoplanetas em dois regimes de temperatura ($T = 300\text{ K}$ e $T = 1200\text{ K}$) em uma pressão de $P = 1\text{ bar}$, num intervalo espectral de 2 a $18\text{ }\mu\text{m}$. Os gases relevantes a esta pressão são H_2O , CO , CO_2 , CH_4 e NH_3 . Para o regime de $T = 300\text{ K}$ podemos visualizar que a banda ν_2 do CO_2 em $15\text{ }\mu\text{m}$ sendo a maior fonte de absorção. Outra banda do CO_2 é a banda ν_1 e está localizada em $\lambda = 4.25\text{ }\mu\text{m}$. A designação ν_i , onde $i = 1, 2, \dots$, remete a diferentes modos de vibração da molécula (Tennyson, 2012).

Utilizando a informação do perfil de temperatura-pressão obtidas a partir de modelos da estrutura interna, raio e massa, podemos assumir uma composição inicial (normalmente a composição solar), e definir quais espécies químicas numa primeira hipótese estarão presentes na atmosfera do exoplaneta. Com isto, obtém-se quais serão as moléculas que serão fonte de opacidade na atmosfera e onde elas serão relevantes dado o perfil de temperatura-pressão. Resolvendo a equação de transferência radiativa para a atmosfera planetária, esta fornece como solução um espectro teórico que será comparado com o espectro observado do exoplaneta. A obtenção do espectro teórico assemelha-se a obtenção do espectro teórico estelar com a diferença das condições de contorno para a equação de transferência radiativa (Griffith, 2013, 2015). O maior problema no uso de conjunto de moléculas para criação de espectros teóricos é a degenerescência de soluções resultantes para mesmo conjunto moléculas em um perfil de temperatura-pressão (Encrenaz, 2014; Griffith, 2015). Esta degenerescência é causada pela proporção entre as moléculas assumidas e pela superposição das transições destas moléculas (Griffith, 2013).

Um exemplo de degenerescência é a estimativa de abundância de água no exopl-

⁶ <http://ether.ipsl.jussieu.fr/etherTypo/index.php?id=950>

⁷ <http://hitran.org/>

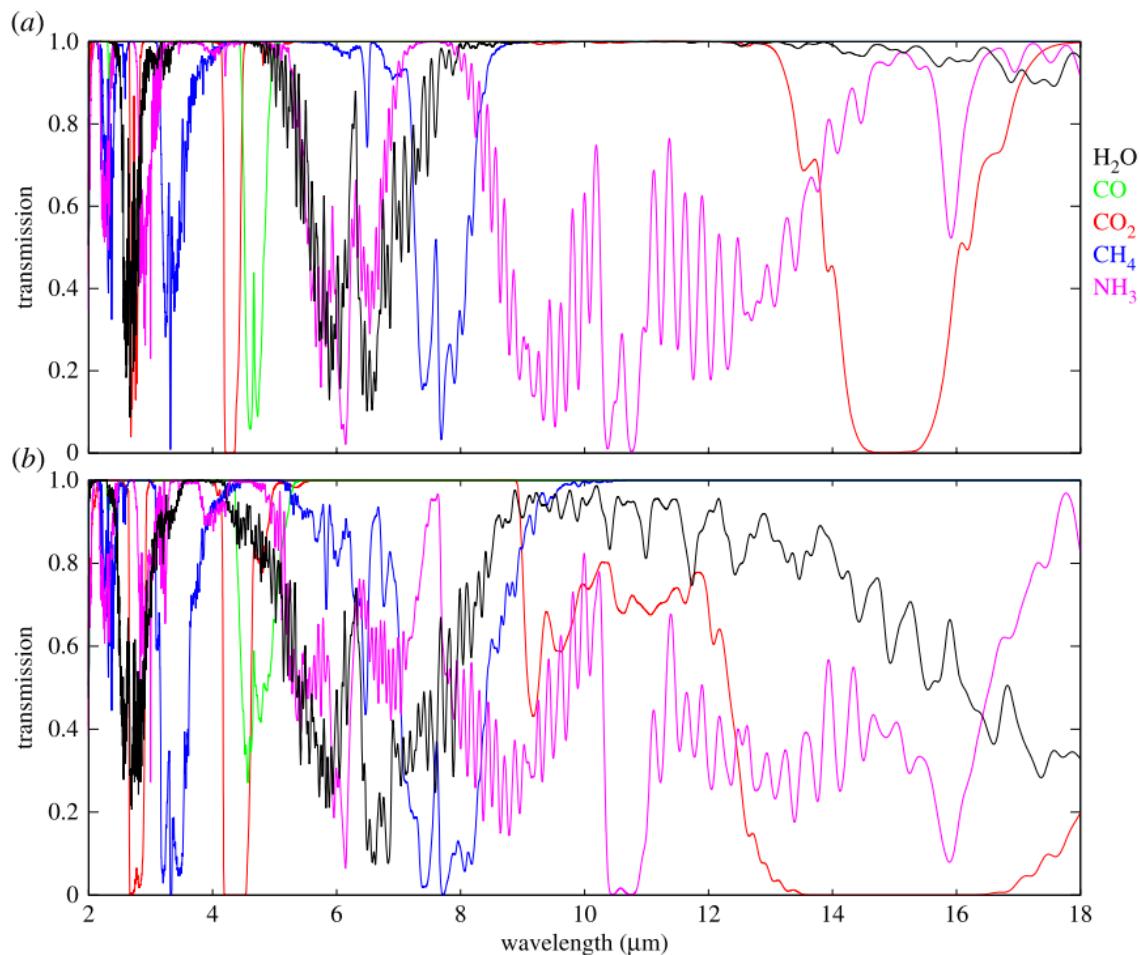


Fig. 3.8: Dados de laboratório da transmissão de algumas moléculas relevantes para química dos exoplanetas em dois regimes de temperatura: (a) $T = 300 \text{ K}$ e (b) $T = 1200 \text{ K}$. A pressão assumida é de $P = 1 \text{ bar}$. Os gases relevantes a esta pressão são H_2O (preto), CO (verde), CO_2 (vermelho), CH_4 (azul) e NH_3 (rosa). Figura extraída de Encrenaz (2014).

neta XO-2b feita por Griffith (2013), que pode ser visualizado na figura 3.9. Para mesmo valor de raio do exoplaneta, a abundância inferida de água varia em 5 ordens de grandeza.

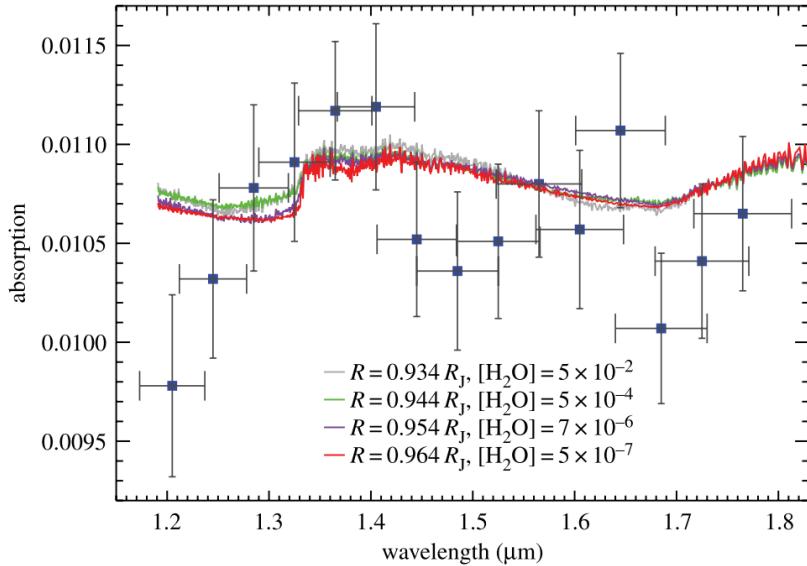


Fig. 3.9: Espectro teórico (linhas contínuas) para exoplaneta XO-2b para diferentes abundâncias de água. Os pontos são dados obtidos a partir de um trânsito primário feito com HST. Pode-se observar que diferentes valores de abundância de água geram espectros semelhantes, mantendo-se o mesmo valor de raio para exoplaneta. Figura extraída de Griffith (2013).

Outro problema na modelagem espectral é a presença de nuvens (Kreidberg *et al.*, 2014). A condensação e a formação de nuvens ocorre quando o perfil de temperatura-pressão do exoplaneta possui um interseção com a curva de fase de dada molécula (Morley *et al.*, 2012; Sing *et al.*, 2015a). A presença de nuvens em espectros pode ser identificada pela presença de regiões que seguem o caso cinzento em atmosferas estelares, onde a opacidade torna-se independente do comprimento de onda (Mihalas, 1978). Lodders (2004), Lodders (2010), Perryman (2011) e Seager & Deming (2010) usam-se do fato de que exoplanetas Júpiteres-Quentes estão tão próximos de sua estrela que encontram-se dentro do regime de temperatura e pressão de anãs-marrons. Planetas mais distantes devem possuir uma química semelhante de condensação com os planetas do Sistema Solar (Lodders, 2010; Perryman, 2011). Um esquema de quais são as possíveis espécies químicas a se condensar para um exoplaneta do tipo Júpiter e Júpiter-Quente pode ser visualizado na figura 3.10.

Seager & Deming (2010), (Perryman, 2011) e (Lodders, 2010) comentam que deve-se ter cuidado ao avaliar o espectro teórico com o observado, dado que diferentes combinações de espécies químicas podem gerar espectros teóricos semelhantes (Griffith, 2013), e alguns espectros talvez não tenham resolução ou razão S/N suficientes para

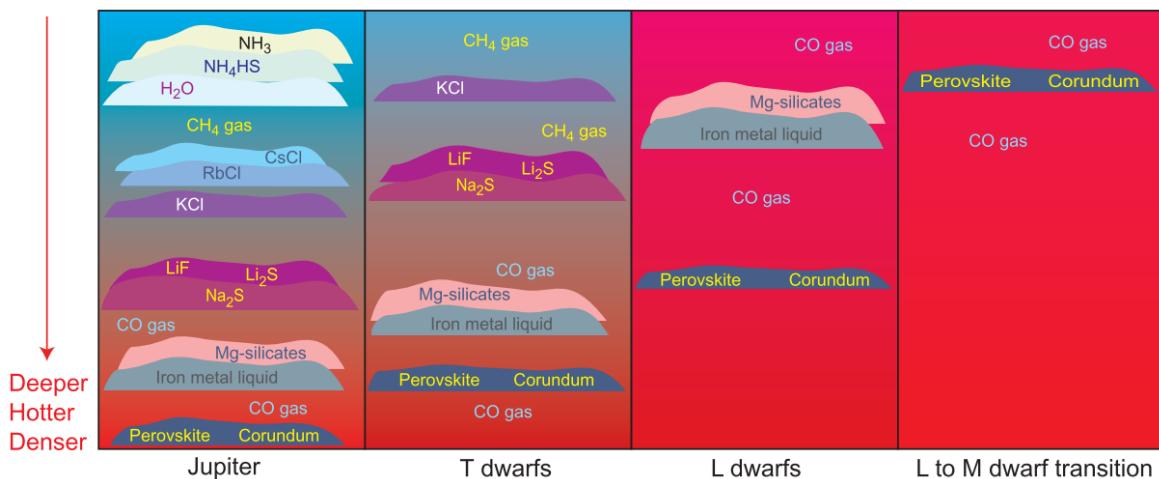


Fig. 3.10: Esquema de espécies químicas a se condensarem em diferentes altitudes. Anãs-marrons são classificadas de forma semelhante à classificação estelar MK. Tipo M possui temperatura entre $T = 2000$ e $T = 3000$ K. Tipo L, possui temperaturas entre $T = 1300$ e 2100 K. Tipo T possui temperaturas entre $T = 1200$ e 1300 K. Quanto menor a temperatura de equilíbrio (exoplaneta) ou temperatura efetiva (anãs-marrons) maior é quantidade de espécies químicas presentes que condensam-se em diferentes altitudes. Quanto mais profundo, maior também é a presença de condensados de materiais refratários. Figura extraída de Lodders (2004).

confirmar ou excluir a presença de determinada banda molecular ou linha de absorção e emissão.

Conclui-se que a química presente no exoplaneta é baseada em três mecanismos, que são o equilíbrio químico a fotoquímica e o transporte induzido por fluorescência, e isto permite inferir quais são as prováveis espécies químicas em atmosferas planetárias (CO, CO₂, CH₄, H₂O, etc). Contudo, devido a degenerescência de soluções de espectros teóricos condizentes com o mesmo perfil de temperatura-pressão, e problemas como altas incertezas e efeito de formação de nuvens, a atual inferência da química na atmosfera do exoplaneta possibilita somente a redução dos diversos cenários possíveis para química no exoplaneta.

4. CONCLUSÕES & PERSPECTIVAS

A química em exoplanetas é inferida a partir de três parâmetros que são a massa, o raio e o espectro. A massa e o raio permitem calcular uma densidade média e com isto inferir a possível composição do exoplaneta utilizando-se da equação de estado e da relação massa-raio. É possível caracterizar assim a proporção de rocha, gelo e gás que compõe o exoplaneta (Fortney *et al.*, 2007; Guillot, 2005). O espectro é utilizado para detectar quais espécies químicas estão presentes na atmosfera do exoplaneta e desta forma validar os modelos de estrutura interna criados a partir de considerações sobre a composição esperada, dada massa e raio. O espectro também permite calcular a abundância química, o perfil de pressão e o perfil de temperatura(Encrenaz, 2014; Perryman, 2011).

A suposição de quais espécies químicas a considerar para criação do espectro teórico é um ponto crucial, pois a combinação de diferentes espécies químicas pode levar ao mesmo espectro, gerando degenerescência de soluções (Griffith, 2013; Lodders, 2010; Perryman, 2011; Seager & Deming, 2010).

As principais moléculas a serem consideradas são o CO, CH₄, e H₂O. A tabela 3.1 lista quais gases são mais relevantes em ordem de abundância. A compreensão do espectro deve levar em consideração os efeitos de equilíbrio químico, fotoquímica e transporte induzido por fluorescência (Moses, 2014; Moses *et al.*, 2000, 2010).

As perspectivas para análise química dos exoplanetas está fundamentada na compreensão do desequilíbrio químico, na resolução da equação de transferência radiativa e na melhoria da razão S/N. Melhores modelos atmosféricos em 2D e 3D para o equilíbrio termoquímico e o desequilíbrio aliadas a modelos de dinâmica da atmosfera constituem os próximos passos para analisar a atmosfera do exoplaneta (Moses, 2014; Moses *et al.*, 2010). Outra perspectiva é pesquisa para melhor compreensão sobre efeito de condensação e formação de nuvens na atmosfera, inferindo qual é a sua composição química e a região em que se forma (Kreidberg *et al.*, 2014; Sing *et al.*, 2015b).

A resolução da transferência radiativa depende do banco de dados de linhas de absorção e emissão de moléculas. Aumentar o acervo de linhas e bandas moleculares é fundamental para a criação de um espectro teórico com melhor confiabilidade. Fortney *et al.* (2016, ArXiv versão) propõem a criação de um banco de dados com listas de linhas e bandas moleculares em alta resolução espectral, opacidades, propriedades óticas de

condensação, e fotoabsorção em altas temperaturas. A razão de tal proposta é a espera de uma grande quantidade de dados observacionais provenientes do projeto James Webb Space Telescope¹, JWST.

Por fim, a melhoria da razão S/N para análise dos exoplanetas constitui a maior necessidade, dado a desproporcionalidade entre o sinal do exoplaneta e de sua estrela hospedeira (Seager & Deming, 2010). A perspectiva observational para os próximos anos são as observações de exoplanetas utilizando o JWST, o *European Extremely Large Telescope*², *Characterising Exoplanet Satellite*³, *Planetary Transits and Oscillations of stars*⁴, *Transiting Exoplanet Survey Satellite*⁵, *Next-Generation Transit Survey*⁶, *Search for habitable planets eclipsing ultra-cool stars*⁷, *MERATH*⁸, *Spectro-Polarimetric High-contrast Exoplanet Research*⁹, e o *Gemini Planet Imager Exoplanet Survey*¹⁰.

¹ JWST <http://www.jwst.nasa.gov/>

² E-ELT <http://www.eso.org/public/brazil/teles-instr/e-elt/>

³ CHEOPS <http://sci.esa.int/cheops/>

⁴ PLATO <http://sci.esa.int/plato/>

⁵ TESS <http://tess.gsfc.nasa.gov/>

⁶ NGTS <http://www.ngtransits.org/>

⁷ SPECULOOS <http://www.amaurytriaud.net/Main/SPECULOOS/index.html>

⁸ MEARTH <https://www.cfa.harvard.edu/MEarth/Welcome.html>

⁹ SPHERE <https://www.eso.org/sci/facilities/develop/instruments/sphere.html>

¹⁰ GPI <http://planetimager.org/>

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Barnes, R. (Ed.) 2010. *Formation and Evolution of Exoplanets*. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
- de Pater, I., and J. Lissauer 2010. *Planetary Sciences*. Cambridge University Press.
- Encrenaz, T. 2014. Infrared spectroscopy of exoplanets: observational constraints. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 372(2014), 20130083–20130083.
- Fortney, J. J. 2007. The structure of jupiter, saturn, and exoplanets: Key questions for high-pressure experiments. *Astrophysics and Space Science* 307(1-3), 279–283.
- Fortney, J. J., M. S. Marley, and J. W. Barnes 2007. Planetary Radii across Five Orders of Magnitude in Mass and Stellar Insolation: Application to Transits. *The Astrophysical Journal* 659, 1661.
- Fortney, J. J., T. D. Robinson, S. Domagal-Goldman, D. S. Amundsen, M. Brogi, M. Claire, D. Crisp, E. Hebrard, H. Imanaka, R. de Kok, M. S. Marley, D. Teal, T. Barman, P. Bernath, A. Burrows, D. Charbonneau, R. S. Freedman, D. Gelino, C. Helling, K. Heng, A. G. Jensen, S. Kane, E. M. R. Kempton, R. K. Kopparapu, N. K. Lewis, M. Lopez-Morales, J. Lyons, W. Lyra, V. Meadows, J. Moses, R. Pierrehumbert, O. Venot, S. X. Wang, and J. T. Wright 2016. The Need for Laboratory Work to Aid in The Understanding of Exoplanetary Atmospheres. (3), 1–18.
- Griffith, C. A. 2013. Disentangling degenerate solutions from primary and secondary transit spectroscopy of exoplanets . *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences* 372(2014), 1–19.
- Griffith, C. A. 2015. *Notes on Planetary Atmosphere*. Lunar and Planetary Laboratory.
- Guillot, T. 2005. THE INTERIORS OF GIANT PLANETS: Models and Outstanding Questions. *Annu. Rev. Earth Planet. Sci* 33, 493–530.
- Hu, R., S. Seager, and W. Bains 2012. Photochemistry in Terrestrial Exoplanet Atmospheres. I. Photochemistry Model and Benchmark Cases. *The Astrophysical Journal* 761(2), 166.

- Kreidberg, L., J. L. Bean, J.-M. Désert, B. Benneke, D. Deming, K. B. Stevenson, S. Seager, Z. Berta-Thompson, A. Seifahrt, and D. Homeier 2014. Clouds in the atmosphere of the super-Earth exoplanet GJ 1214b. *Nature* 505(7481), 69–72.
- Léger, A., F. Selsis, C. Sotin, T. Guillot, D. Despois, H. Lammer, M. Ollivier, and F. Brachet 2003. A new family of planets? Ocean-planets. *European Space Agency, (Special Publication) ESA SP* 169(539), 253–259.
- Lewis, J. S. 2004. *Physics and Chemistry of the Solar System*. Academic Press.
- Lissauer, J., and I. de Pater 2013. *Fundamental Planetary Science*. Cambridge, UK: Cambridge University Press.
- Lodders, K. 2003. Solar System Abundances and Condensation Temperatures of the Elements. *The Astrophysical Journal* 591(2), 1220–1247.
- Lodders, K. 2004. Brown dwarfs—faint at heart, rich in chemistry. *Science (New York, N.Y.)* 303(5656), 323–4.
- Lodders, K. 2010. Exoplanet Chemistry. *Formation and Evolution of Exoplanets*, 157–186.
- Lodders, K., and B. Fegley 2002. Atmospheric Chemistry in Giant Planets, Brown Dwarfs, and Low-Mass Dwarf Stars. I. Carbon, Nitrogen, and Oxygen. *Icarus* 155(2), 393–424.
- Madhusudhan, N. 2012. C/O Ratio As a Dimension for Characterizing Exoplanetary Atmospheres. *The Astrophysical Journal* 758(1), 36.
- Mandel, K., and E. Agol 2002. Analytic Light Curves for Planetary Transit Searches. *The Astrophysical Journal* 580(2), L171–L175.
- Mihalas, D. 1978. *Stellar Atmospheres*. W H Freeman and Co (Sd); 2 edition.
- Morley, C. V., J. J. Fortney, M. S. Marley, C. Visscher, D. Saumon, and S. K. Leggett 2012. Neglected Clouds in T and Y Dwarf Atmospheres. *The Astrophysical Journal* 756(2), 172.
- Moses, J. I. 2014. Exoplanet Chemistry.
- Moses, J. I., B. Bezard, E. Lellouch, G. R. Gladstone, H. Feuchtgruber, and M. Allen 2000. Photochemistry of Saturn’s Atmosphere, 1, Hydrocarbon Chemistry and Comparisons with ISO Observations. **298**, 244–298.

- Moses, J. I., M. R. Line, C. Visscher, M. R. Richardson, N. Nettelmann, J. J. Fortney, T. S. Barman, K. B. Stevenson, and N. Madhusudhan 2013. COMPOSITIONAL DIVERSITY IN THE ATMOSPHERES OF HOT NEPTUNES, WITH APPLICATION TO GJ 436b. *The Astrophysical Journal* 777(1), 34.
- Moses, J. I., N. Madhusudhan, C. Visscher, and R. S. Freedman 2013. CHEMICAL CONSEQUENCES OF THE C/O RATIO ON HOT JUPITERS: EXAMPLES FROM WASP-12b, CoRoT-2b, XO-1b, AND HD 189733b. *The Astrophysical Journal* 763(1), 25.
- Moses, J. I., C. Visscher, J. J. Fortney, A. P. Showman, N. K. Lewis, C. A. Griffith, S. J. Klippenstein, M. Shabram, A. J. Friedson, M. S. Marley, and R. S. Freedman 2011. DISEQUILIBRIUM CARBON, OXYGEN, AND NITROGEN CHEMISTRY IN THE ATMOSPHERES OF HD 189733b AND HD 209458b. *The Astrophysical Journal* 737(1), 15.
- Moses, J. I., C. Visscher, T. C. Keane, and A. Sperier 2010. On the abundance of non-cometary HCN on Jupiter. *Faraday discussions* 147, 103–182.
- Perryman, M. 2011. *The Exoplanet Handbook*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Rothman, L., I. Gordon, Y. Babikov, A. Barbe, D. Chris Benner, P. Bernath, M. Birk, L. Bizzocchi, V. Boudon, L. Brown, A. Campargue, K. Chance, E. Cohen, L. Couderc, V. Devi, B. Drouin, A. Fayt, J.-M. Flaud, R. Gamache, J. Harrison, J.-M. Hartmann, C. Hill, J. Hodges, D. Jacquemart, A. Jolly, J. Lamouroux, R. Le Roy, G. Li, D. Long, O. Lyulin, C. Mackie, S. Massie, S. Mikhailenko, H. Müller, O. Naumenko, A. Nikitin, J. Orphal, V. Perevalov, A. Perrin, E. Polovtseva, C. Richard, M. Smith, E. Starikova, K. Sung, S. Tashkun, J. Tennyson, G. Toon, V. Tyuterev, and G. Wagner 2013. The HITRAN2012 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 130, 4–50.
- Rybicki, G. B., and A. P. Lightman 1985. *Radiative Processes in Astrophysics*. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH.
- Seager, S., and D. Deming 2010. Exoplanet atmospheres. *Annual Review of Astronomy & Astrophysics*.
- Seager, S., M. Kuchner, C. Hier-Majumder, and B. Militzer 2007. Mass-Radius Relationships for Solid Exoplanets.

- ShawA. 2006. Planetary Chemistry. In *Astrochesmistry*, pp. 193–223.
- Sing, D. K., J. J. Fortney, N. Nikolov, H. R. Wakeford, T. Kataria, T. M. Evans, S. Aigrain, G. E. Ballester, A. S. Burrows, D. Deming, J.-M. Désert, N. P. Gibson, G. W. Henry, C. M. Huitson, H. A. Knutson, A. L. des Etangs, F. Pont, A. P. Showman, A. Vidal-Madjar, M. H. Williamson, and P. A. Wilson 2015a. A continuum from clear to cloudy hot-Jupiter exoplanets without primordial water depletion. *Nature* 529(7584), 18.
- Sing, D. K., J. J. Fortney, N. Nikolov, H. R. Wakeford, T. Kataria, T. M. Evans, S. Aigrain, G. E. Ballester, A. S. Burrows, D. Deming, J.-M. Désert, N. P. Gibson, G. W. Henry, C. M. Huitson, H. A. Knutson, A. L. des Etangs, F. Pont, A. P. Showman, A. Vidal-Madjar, M. H. Williamson, and P. A. Wilson 2015b. A continuum from clear to cloudy hot-Jupiter exoplanets without primordial water depletion. *Nature*, 18.
- Tennyson, J. 2012. *Astronomical Spectroscopy: An Introduction to the Atomic and Molecular Physics of Astronomical Spectra (2nd Edition)*. World Scientific Publishing Company.
- Valencia, D., D. D. Sasselov, and O'Connell 2007. Radius and Structure Models of the First Super-Earth Planet. *The Astrophysical Journal* **656**, 545.
- Venot, O., E. Hébrard, M. Agúndez, M. Dobrijevic, F. Selsis, F. Hersant, N. Iro, and R. Bounaceur 2012. A chemical model for the atmosphere of hot Jupiters. *Astronomy & Astrophysics* **546**, A43.
- Winn, J. N. 2010. Transits and Occultations. In *Exoplanet*.
- Wolszczan, a., and D. a. Frail 1992. A planetary system around the millisecond pulsar PSR1257 + 12. *Nature* 355(6356), 145–147.
- Yung, Y. L., and W. B. DeMore 1999. *Photochemistry of Planetary Atmospheres*. Oxford University Press, USA.