Isabel Regina Guerra Aleman

A Molécula H_2 em Nebulosas Planetárias

Dissertação apresentada ao Instituto Astronômico e Geofísico, da Universidade de São Paulo, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências, área de concentração: Astrofísica.

Orientadora: Profa. Dra. Ruth Gruenwald

Agência Financiadora: FAPESP

São Paulo
2002

Isabel Regina Guerra Aleman

A Molécula H_2 em Nebulosas Planetárias

Dissertação apresentada ao Instituto
Astronômico e Geofísico, da Universidade
de São Paulo, como requisito parcial para
obtenção do título de Mestre em Ciências,
área de concentração: Astrofísica.

Orientadora: Profa. Dra. Ruth Gruenwald

Agência Financiadora: FAPESP

São Paulo
2002

*Aos Meus Pais
e ao Meu Irmão*

Agradecimentos

Nesta oportunidade quero agradecer a todos que com generoso entusiasmo sempre me apoiaram e me deram incentivo para que pudesse cumprir mais uma etapa desta jornada.

Começo por agradecer àquela que foi para mim a principal motivadora: Ruth Gruenwald, minha orientadora desde a iniciação científica, incansável em esclarecer sempre as minhas dúvidas, sólido suporte por todo este longo tempo. Sua experiência, suas palavras encorajadoras me fortaleceram e fizeram-me chegar até aqui.

Um agradecimento especial aos colegas e professores da primeira turma da Habilitação em Astronomia do curso de Bacharelado em Física do IFUSP e especialmente às pessoas que em tão boa hora implantaram esta habilitação. Obrigada também aos amigos do IAG-USP.

Devo manifestar o meu reconhecimento a FAPESP, pelo importante apoio financeiro, permitindo o desenvolvimento da pesquisa científica em nosso Estado.

E minha gratidão aos meus pais e familiares que estão sempre presentes com palavras e gestos de amor e solicitude.

Finalmente, a Gene Roddenberry pelas minhas primeiras jornadas às estrelas.

Sumário

Resumo	vi
Abstract	vii
1. Introdução	1
2. O Código de Fotoionização e as Sub-rotinas Elaboradas	8
2.1. Breve Descrição do Código de Fotoionização Aangaba	8
2.2. Equações de Equilíbrio Químico	9
2.3. Reações Químicas Consideradas	12
2.3.1. Reações Importantes de Formação de H_2	12
2.3.2. Reações Importantes de Destruição de H_2	14
2.4. A Formação de H_2 na Superfície de Grãos	16
2.4.1. Evidências de Grãos no Meio Interestelar e em Nebulosas Planetárias	16
2.4.2. Sobre a Reação	18
2.4.3. Condições para a formação de H_2 na superfície de grãos	20
2.4.4. Taxa para a formação de H_2 na superfície de grãos	30
2.5. As Sub-rotinas Elaboradas	32
2.5.1. Alterações Feitas nas Sub-rotinas Pré-existentes do Código Aangaba	34
2.5.2. Sub-rotinas Elaboradas	35
2.5.3. Sub-rotinas de Press et al. (1994) Utilizadas	35
3. Modelos e Resultados	36
3.1. Resultados para a NP-Padrão	39
3.2. Razão Grão-Gás	43
3.3. Raio do Grão	46
3.4. Material Constituinte do Grão	51

3.5. Densidade do Gás	53
3.6. Luminosidade da Estrela Central	55
3.7. Temperatura da Estrela Central	57
3.8. Lyman α e o Aquecimento dos Grãos	60
3.9. Autoblindagem	60
4. Discussão Final	62
5. Perspectivas Futuras	66
6. Referências Bibliográficas	68
Apêndice A - Constantes e Seções de Choque das Reações	72
1. Fotoionização	72
2. Fotodissociação	73
3. Fotodestacamento	76
4. Recombinação Radiativa	77
5. Recombinação Dissociativa	77
6. Destacamento Associativo	78
7. Troca de Carga	79
8. Neutralização	81
9. Associação Radiativa	82
10. Reação Íon-Molécula	83
11. Processos Colisionais	83
12. Ionização Colisional	86
13. Reação na Superfície de Grãos	87
14. Processos Não Considerados	88
Referências	89
Apêndice B - Temperatura da Estrela Central e Classificação Morfológica de NPs ⁹²	
Referências	96

Resumo

O objetivo deste trabalho é o estudo das condições de existência e a determinação da concentração da molécula H_2 em diferentes condições típicas de nebulosas planetárias, dentro da região ionizada. Para este cálculo, desenvolvemos sub-rotinas computacionais que se acoplam ao código de fotoionização unidimensional Aangaba que, até agora, somente considerava espécies atômicas (H, He, C, N, O, Mg, Ne, Si, S, Ar, Cl e Fe) e seus íons. Inserimos nesse código os equilíbrios químico e de ionização envolvendo a molécula H_2 e os demais compostos de hidrogênio, H^- , H_2^+ , H_3^+ , além do H, H^+ e dos elétrons que o código de fotoionização Aangaba já considerava em sua forma original. A molécula H_3 não é considerada por ser instável. Levamos em conta 41 diferentes mecanismos de formação e destruição desses compostos do hidrogênio. Destacamos particularmente o efeito da reação de formação de H_2 na superfície de grãos na produção global dessa molécula em nebulosas planetárias, considerada na literatura como a rota mais importante de formação dessa molécula no meio interestelar. Para isso, estudamos a possibilidade da sobrevivência de grãos dentro da região ionizada da nebulosa planetária. Analisamos também a influência das propriedades da estrela central e da densidade do gás, assim como das propriedades dos grãos astrofísicos, na concentração de H_2 . Demonstramos que quantidades significativas de H_2 podem sobreviver dentro da região ionizada de nebulosas planetárias, principalmente na região de recombinação do hidrogênio. A concentração de H_2 relativa à densidade total de H alcança valores de até 10^{-4} e a razão entre a massa de H_2 e a massa total de H da NP chega a valores de $4 \cdot 10^{-4}$. Verificamos que a razão entre a massa de H_2 e a massa de H total da nebulosa aumenta significativamente com o aumento da temperatura de estrela central. Essa maior quantidade de H_2 em nebulosas planetárias com estrela central mais quente pode explicar porque é mais comum encontrar emissão da molécula H_2 em nebulosas planetárias com estrutura bipolar (regra de Gatley), já que nebulosas com esse tipo morfológico têm estrela central tipicamente mais quente. Na literatura, o valor $6,9 \cdot 10^{-5}$ é obtido para a razão entre a massa de H_2 e a massa de H total da nebulosa planetária NGC 6720, a partir de dados observacionais. Usando os mesmos parâmetros deste artigo, calculamos com o código de fotoionização Aangaba o valor de $3,3 \cdot 10^{-5}$, que está razoavelmente próximo do valor da literatura.

Abstract

The goal of this work is the study of the H_2 molecule survival and the determination of its abundance in different typical planetary nebulae conditions inside the ionized region. In order to do these calculations, we developed Fortran subroutines for the Aangaba one-dimensional photoionization code that, until this work, only took into account the atomic species (H, He, C, N, O, Mg, Ne, Si, S, Ar, Cl, and Fe) and their ions. Ionization and chemical equilibria of H, H^+ , H^- , H_2 , H_2^+ , and H_3^+ are assumed. The H_3 molecule is not included because it is unstable. Forty-one different reactions that could form and destroy these species are taken into account. Reaction on grain surfaces, the most important mechanism for the production of H_2 molecules in the interstellar medium, is analyzed in detail in the conditions of planetary nebulae ionized regions. We make a careful analysis of the grain survival in these regions. We also study the influence of the central star properties and gas density, as well as the astrophysical grain properties in the obtained H_2 concentration. It is shown that a significant concentration of H_2 can exist inside the ionized region of planetary nebulae, mostly in the recombination zone. The H_2 concentration relative to the total hydrogen concentration reaches values as high as 10^{-4} and the H_2 mass to total hydrogen mass ratio inside the ionized region reaches values as high as 4×10^{-4} . The ratio increases with increasing temperature. This fact can explain why the H_2 emission is more often observed in bipolar planetary nebulae (Gatley's rule), since this kind of object has typically hotter stars. In the literature a H_2 mass to total hydrogen mass ratio equal to 6.9×10^{-5} is estimated from observations for the planetary nebula NGC6720. With the same input parameters for the gas density and the stellar spectrum, we calculated a ratio equal to 3.3×10^{-5} , close to the observed value.

1. Introdução

Nas últimas décadas, com o avanço alcançado no campo da astronomia observacional, várias moléculas, como H_2 , CO, CN, HCN, HCO^+ , etc., têm sido detectadas em nebulosas planetárias (NPs), como pode ser visto em Thronson & Bally (1986), Cox et al. (1992), Graham et al. (1993a e b), Cox (1997), Cernicharo et al. (2001), Highberger et al. (2001), entre outros.

A primeira detecção da emissão de H_2 em uma NP ocorreu em 1975 (Treffers et al. 1976) em observações no infravermelho de NGC 7027. Depois dessa detecção várias observações da molécula H_2 em NPs já foram publicadas, por exemplo, Greenhouse, Hayward & Thonson (1988), Graham et al. (1993a, 1993b), Schild (1995), Hora, Latter & Deutch (1999), Guerrero et al. (2000), Bohigas (2001). Bandas de absorção de H_2 no UV também já foram observadas em NPs (por exemplo, Bowers et al. 1995).

As moléculas podem ter um papel importante na determinação das condições físicas do gás e têm sido alvo de um grande número de estudos em diversos ambientes astrofísicos. Particularmente importante é a molécula H_2 , já que esta é a molécula mais abundante no Universo. Uma revisão do papel da molécula H_2 nas diversas situações astrofísicas é encontrada em Williams (1999).

As linhas dos átomos neutros (CI, MgI,...) do espectro das NPs ainda não são reproduzidas corretamente pelos modelos de fotoionização (Aller 1984). Isso pode estar ocorrendo devido à presença das várias moléculas já detectadas nas NPs e que não são consideradas nestes modelos.

Atualmente, a molécula H_2 (assim como outras moléculas) já é incluída em estudos da componente molecular em diversas situações astrofísicas, como nuvens interestelares (Viala 1986), nuvens moleculares interestelares (Bergin et al. 1995), nuvens escuras (Solomon & Werner 1971, de Jong 1972), gás primordial (Shapiro & Kang 1987, Abel 1995, Abel et al. 1997), regiões de fotodissociação em geral (Tielens & Hollenbach 1985, Draine & Bertoldi 1996), choques em nuvens interestelares (Hollenbach & McKee 1979 e Hollenbach & McKee 1989) e mesmo em NPs (Black 1978; Gussie & Pritchett 1988). Diferentes processos que formam e destroem a molécula são analisados nesses estudos. Entretanto, esses modelos não são adequados para o estudo da possível presença de H_2 dentro da região ionizada das NPs, pois ou alguns processos importantes que ocorrem nesses objetos não são considerados ou a análise da componente molecular em NPs é somente feita em regiões mais neutras, sendo dissociada da análise da componente atômica, presente nas regiões mais internas.

O potencial de fotodissociação direta da molécula H_2 é de 14,7 eV e seu potencial de fotoionização é 15,4 eV. Esses valores de energia ficam acima do potencial de ionização do H ($E_{th} = 13,6$ eV) e, portanto, o H_2 é protegido da radiação pela presença de H em regiões mais internas. Existe também outro processo de destruição de H_2 , a fotodissociação em dois passos (Stecher & Williams 1967), que pode ser a rota mais importante nas regiões mais externas das NPs, onde os fótons acima de 13,6 eV já foram bastante absorvidos pelo hidrogênio presente mais internamente na NP. Esse processo ocorre em uma faixa estreita de energia entre 12,24 eV e 13,51 eV. A Figura 1 mostra as seções de choque dos processos de fotoionização do átomo H e da molécula H_2 e das duas rotas de fotodissociação da molécula H_2 .

Um fator que pode colaborar para a existência da molécula H_2 dentro das regiões ionizadas é a presença de grãos nesses ambientes. Van Hoof et al. (2000), por exemplo, utilizam modelos de fotoionização para estudar o contínuo infravermelho observado da NP NGC 6445, concluindo que existe poeira dentro da região ionizada desse objeto. Além de blindar a radiação ultravioleta (UV) eles

podem servir de catalisadores para a formação de H_2 . Nas condições típicas de nuvens interestelares, o mecanismo mais importante de formação de H_2 são reações na superfície de grãos e em diversos estudos desses objetos essa reação é levada em consideração, como, por exemplo, em Viala (1986), de Jong (1972) e Bergin et al. (1995). No entanto, em NPs, a temperatura do gás é tipicamente mais alta e há maior incidência de radiação UV. Essas condições desfavorecem a formação de H_2 em grãos em comparação às nuvens interestelares. Por outro lado, há uma maior concentração de íons H^+ e elétrons livres, o que favorece outras rotas de formação de H_2 . Esses mecanismos podem competir ou superar em importância a reação em grãos em NPs. Podemos então esperar que quantidades significativas de H_2 possam existir mesmo em regiões ionizadas.

Figura 1 – Seções de choque dos processos envolvendo a incidência de fótons no átomo H e na molécula H_2 . Veja as expressões e referências no Apêndice A.

Usando como base o modelo de fotoionização de NP de Flower (1969), Black (1978) efetuou um cálculo não acoplado àquele modelo da distribuição da concentração de H_2 , H e H_2^+ ao longo de uma NP. No modelo de Flower (1969), a presença de grãos não é considerada. Black (1978) também não implementou em seus cálculos algumas reações importantes para a concentração de H_2 , como a

formação em superfície de grãos e a recombinação do H_2^+ . Ainda sim, Black (1978) concluiu que quantidades significativas de H_2 podem estar presentes na região de recombinação do hidrogênio em NPs.

Gussie & Pritchett (1988) fazem uma estimativa da densidade de H_2 não autoconsistente e sem a consideração da presença de grãos, buscando verificar se a excitação por choque poderia explicar a concentração dessa molécula na NP NGC 7027.

O estudo feito por Draine & Bertoldi (1999), baseado em observações do telescópio ISO, indica que quantidades significativas de H_2 podem realmente existir em ambientes com temperatura do gás $T > 500 \text{ K}$, dentro de regiões de fotodissociação. Schild (1995) mostra que os contornos de emissão da linha de fluorescência do H_2 1-0 S(1) de NGC 2818 seguem aproximadamente o mesmo padrão do mapa da emissão $\text{H}\alpha$, indicando que a molécula H_2 pode estar dentro da região ionizada desta nebulosa. Essas observações de evidências da presença da molécula H_2 dentro de ambientes ionizados podem nos dar pistas importantes das condições físicas do gás e dos processos que ocorrem ali (Draine & Bertoldi 1999).

Recentemente, Bohigas (2001) publicou suas observações de um grupo de 14 NPs, em cujas imagens pode-se observar que a emissão em $2,12 \mu\text{m}$ do H_2 é semelhante à emissão da linha [NII] $\lambda 6584$. Veja um exemplo das imagens que ele obteve, especificamente da nebulosa planetária K 3-72, na Figura 2.

Algumas pesquisas também foram feitas relacionando a detecção da emissão de H_2 com o tipo ou morfologia da NP. Storey (1984) e Storey et al. (1987) observaram que a maioria das NPs com a linha 1-0 S(1) do H_2 detectada pertence ao Tipo I. Webster et al. (1988) estudam a emissão dessa mesma linha num conjunto de 22 NPs. Eles também observam que as NPs com emissão de H_2 mais intensa são do Tipo I, particularmente as bipolares pertencentes a essa classe, e que a região onde há a emissão de H_2 praticamente coincide com a região da emissão de [NII].

Figura 2 - Imagens de K 3-72 de Bohigas (2001). (A) $[NII] 6584$; (B) $[NII] 6584/H\alpha$; (C) $H_2 1-0 S(1)$ e (D) $[OIII] 5007/H\alpha$.

Kastner et al. (1996) fizeram um estudo relacionando a detecção ou não da linha 1-0 S(1) do H_2 com a morfologia da NP observada. A estatística é feita com um rol de 94 NPs, combinando observações deles com outras publicadas na literatura. Nesse trabalho, os autores verificam que, dentre os objetos nos quais foi observada tal linha, 82,5% têm tipo morfológico bipolar e, dentre os objetos nos quais não foi detectado H_2 , 59% não são bipolares. Pesquisando mais na literatura estendemos essa amostra para 116 NPs. Nessa amostra maior, é mantido que 83% dos objetos onde foi detectado H_2 são NPs bipolares, mas 64% dentre os objetos nos quais não foi detectado H_2 não são bipolares. A chamada “Regra de Gatley” (Zuckerman e Gatley 1988) afirma que a detecção da emissão de H_2 em uma NP confirma a estrutura bipolar desta.

Corradi e Schwarz (1995) por sua vez verificaram que as NPs bipolares apresentam, dentre outras propriedades, estrelas centrais tipicamente mais quentes que as de outros tipos morfológicos. Como não tivemos acesso aos dados desses autores, realizamos então uma pesquisa na literatura por temperatura de estrelas centrais e classificação morfológica de NPs (esses dados são tabelados no Apêndice B). Uma parte dos resultados dessa busca é mostrada nos histogramas da Figura 3.

Com a nossa amostra, pudemos confirmar o resultado de Corradi e Schwarz (1995). A amostra que obtivemos na literatura é constituída de 139 objetos, sendo 80 bipolares (59%). A temperatura média das estrelas das NPs bipolares é de 124000 K e a dos demais tipos é 84000 K.

Figura 3 – Histograma da contagem de NPs bipolares e das não-bipolares por intervalo de temperatura da estrela central. O número na abscissa indica o início do intervalo. Os dados para a construção destes histogramas são tabelados no Apêndice B.

Assim, estudos detalhados devem mostrar que NPs que possuam estrelas centrais mais quentes devem apresentar maior quantidade de H_2 .

No presente estudo, temos como objetivo o estudo da concentração da molécula H_2 dentro da região ionizada de NPs. Para tanto, determinamos a densidade de H_2 nessas regiões para diferentes características de NPs, com o auxílio do código de fotoionização Aangaba. Este código teve que ser alterado e acrescido de algumas sub-rotinas, para que considerasse o estudo de moléculas.

Por não ser nossa meta o estudo da população dos níveis ou a emissão em linhas do H_2 , não levamos em consideração o povoamento dos distintos níveis de energia dessa molécula.

Neste trabalho, também não consideramos o efeito de autoblindagem da radiação (“self-shielding”) do H_2 , cuja consideração detalhada somente seria possível com o estudo do povoamento dos níveis moleculares do H_2 . Isso faz com que os cálculos efetuados forneçam limites inferiores da quantidade H_2 presente na NP. Esse efeito pode ser bastante importante para a taxa de fotodissociação do H_2 . No entanto, na seção 3.9, estudamos esse efeito utilizando uma aproximação do tratamento da autoblindagem, descrita em Van der Werf (1989).

No Capítulo 2, descrevemos brevemente o código de fotoionização Aangaba e as modificações e acréscimos que tivemos que fazer, para que agora este considerasse o estudo da molécula H_2 . A justificativa dessas modificações e acréscimos, bem como a teoria necessária para seu entendimento, também são mostradas nesse capítulo. No Capítulo 3, iniciamos a apresentação detalhada dos resultados obtidos neste trabalho. No Capítulo 4, resumimos os resultados importantes e no Capítulo 5 apresentamos alguns comentários finais e as perspectivas para estudos futuros. No Apêndice A, apresentamos o resultado da extensa pesquisa dos coeficientes e seções de choque das reações envolvendo os compostos de H_2 na literatura especializada. Os dados obtidos da literatura representados na Figura 3 são mostrados em forma de tabela no Apêndice B.

2. O Código de Fotoionização e as Sub-rotinas Elaboradas

2.1. Breve Descrição do Código de Fotoionização Aangaba

O código de fotoionização unidimensional Aangaba (Gruenwald & Viegas 1992) tem o objetivo de determinar as condições físicas de uma nebulosa fotoionizada. Na sua forma original, ele leva em consideração vários processos de ionização e recombinação dos átomos e íons atômicos, assim como diversos mecanismos de aquecimento e resfriamento de um gás fotoionizado, admitindo equilíbrio de ionização e térmico. Doze elementos são considerados: H, He, C, N, O, Mg, Ne, Si, S, Ar, Cl e Fe.

O usuário pode escolher o tipo de espectro da fonte ionizante: corpo negro, lei de potência, modelo de atmosferas, um conjunto de estrelas ou uma combinação destes. No presente estudo, as estrelas centrais de NPs são descritas pelo espectro de corpo negro como é usual. Nesse caso, caracterizamos a nebulosa planetária pela temperatura e luminosidade da estrela central ionizante (também é possível optar por utilizar o raio ao invés da luminosidade) e pela densidade e abundância química do gás. É adotada simetria esférica para a NP.

O fluxo de radiação emitido pela estrela sofre diluição ao atravessar a nebulosa. Essa diluição tem duas componentes: a) a diluição geométrica, pois o fluxo diminui proporcionalmente ao quadrado da distância; b) a diluição óptica, devida à absorção pelas partículas do gás. O código numérico também considera o tratamento da radiação difusa, utilizando a aproximação “outward-only”.

A concentração das espécies depende das condições físicas locais, ou seja, da temperatura local do gás e do espectro de radiação incidente. O espectro incidente depende das condições físicas das regiões mais internas da NP. A temperatura, por sua vez, depende do espectro incidente e das concentrações das espécies. Portanto, para o cálculo do espectro da radiação ionizante que chega em um determinado ponto da nebulosa, da temperatura local do gás e das densidades de cada espécie nesse ponto, é necessário um cálculo iterativo.

O código Aangaba efetua esse cálculo iterativo ao longo da NP. Assim, para cada ponto dentro da NP, são determinadas as densidades volumétricas relativas dos elementos, o espectro da radiação, a temperatura do gás, densidade eletrônica, profundidade óptica e emissividade de linhas. Além disso, obtém a intensidade das diferentes linhas atômicas emitidas pela nebulosa.

Para que a presença da molécula H_2 fosse considerada, tivemos então que desenvolver novas sub-rotinas computacionais para o código Aangaba. Admitimos a hipótese de equilíbrio químico e de ionização envolvendo a molécula H_2 e os demais compostos de hidrogênio, H , H^+ , H^- , H_2^+ , H_3^+ , além dos elétrons, assim como as espécies atômicas e seus íons já citados, que o código de fotoionização Aangaba já considerava em sua forma original. As espécies H^- , H_2^+ , H_3^+ são consideradas, pois processos importantes de formação e destruição de H_2 envolvem tais íons. A molécula H_3 não é levada em conta por ser instável.

2.2. Equações de Equilíbrio Químico

Diversos processos podem formar ou destruir a molécula H_2 , assim como os demais compostos de hidrogênio aqui considerados. Por exemplo, a molécula H_2 pode ser formada ou destruída através de diversas reações químicas com outras espécies do meio, por fotoprocessos ou por reações na superfície de grãos.

A taxa de formação dos produtos das reações depende diretamente da concentração das diferentes espécies envolvidas na reação e da probabilidade de ocorrência de cada reação, representada pelo coeficiente da reação. O coeficiente de cada reação pode depender das condições físicas locais do meio. Por exemplo, pode depender da temperatura do gás, densidade de matéria ou do nível de energia em que se encontra o íon ou molécula, além do espectro de radiação incidente. A reação na superfície de grãos depende da temperatura e da área superficial dos grãos, da temperatura do gás e de outros fatores, como veremos mais adiante na seção 2.4.

Para uma reação genérica:

a taxa de formação dos compostos produzidos é:

$$\Gamma_{FC} = \Gamma_{FD} = k.n(A).n(B)$$

onde k é a constante da reação e $n(A)$ e $n(B)$ são as densidades volumétricas, respectivamente, dos reagentes A e B. Obviamente, temos que a taxa de destruição das espécies reagentes é:

$$\Gamma_{DA} = \Gamma_{DB} = k.n(A).n(B)$$

No caso de um fotoproceto, onde um fóton incide em uma espécie, ionizando-a ou dissociando-a,

a taxa de formação das espécies resultantes é:

$$\Gamma_{FC} = \Gamma_{FD} = k.n(A)$$

Nesse caso, o espectro dos fótons incidentes determina os coeficientes para os fotoprocessos, i.e., processos que envolvem a absorção de um fóton. Os coeficientes dessas reações são obtidos pela integração numérica da expressão:

$$k = \int_{E_{th}}^{\infty} \frac{F(E, R)}{E} \sigma(E) dE$$

$F(E, R)$ é o fluxo de radiação que chega à distância R da estrela com energia entre E e $E+dE$ e $\sigma(E)$ é a seção de choque para a reação em questão, nesse intervalo de energia. A integração se dá a partir da energia mínima necessária para ocorrência do processo, E_{th} . As demais reações dependem, em geral, da temperatura do gás da nebulosa.

A variação global de uma espécie é dada pelo somatório da variação causada por cada um dos diferentes processos de formação e destruição considerados. Se considerarmos equilíbrio químico, ou seja, que não há variação na densidade total de uma dada espécie ao longo do tempo, em um dado ponto dentro da NP,

$$\frac{d}{dt} n(X) = 0 \quad .$$

Num meio onde está disponível um número M de espécies que reagem entre si, teremos M equações como esta. No entanto, uma dessas equações é linearmente dependente das demais e, obviamente, não deve ser usada nos cálculos¹. Como vínculos a este sistema de equações, ainda temos as equações de conservação total

¹ Esta equação pode ser usada para testar as soluções obtidas.

de matéria e de conservação da carga. Utilizamos uma destas equações para tornar o sistema determinado e a outra pode servir para substituir qualquer outra das equações, já que estas duas equações são mais simples que as primeiras citadas. Ficamos, então, novamente com um sistema de M equações acopladas e não lineares a M incógnitas, que resolvemos para determinar as concentrações das M espécies reagentes.

2.3. Reações Químicas Consideradas

Pesquisamos na literatura reações entre os compostos de hidrogênio que pudessem ocorrer com taxa significativa nos ambientes ionizados das NPs. Encontramos quarenta e uma diferentes reações, incluindo aquelas que já eram consideradas no código Aangaba original. Esse rol é apresentado na Tabela 1. Entre essas reações encontram-se duas reações de troca de carga entre íons de H e de He que já constavam do código Aangaba original. Apresentamos as expressões para as taxas ou seções de choque dessas reações e as referências de sua publicação no Apêndice A. Na seção 2.4, apresentamos uma descrição detalhada da reação de formação de H_2 na superfície de grãos para que a discussão dos resultados a seguir fique mais clara.

2.3.1. Reações Importantes de Formação de H_2

Os principais mecanismos de produção de H_2 em nebulosas são as rotas:

segundo a literatura (de Jong 1972, Black 1978; Gussie & Pritchett 1988, Abel 1995, entre outros).

Tabela 1
Reações Químicas Envolvendo os Compostos de Hidrogênio Consideradas Neste Trabalho.

Fotoionização	Fotodissociação
$H + h\nu \rightarrow H^+ + e^-$ $H_2 + h\nu \rightarrow H_2^+ + e^-$	$H_2 + h\nu \rightarrow 2H$ (direta) $H_2 + h\nu \rightarrow 2H$ (dois passos) $H_2^+ + h\nu \rightarrow H^+ + H$ $H_2^+ + h\nu \rightarrow 2H^+ + e^-$ $H_3^+ + h\nu \rightarrow H^+ + H_2$ $H_3^+ + h\nu \rightarrow H_2^+ + H$
Fotodestacamento	
$H^- + h\nu \rightarrow H + e^-$	
Recombinação Radiativa	Associação Radiativa
$H^+ + e^- \rightarrow H + h\nu$ $H_2^+ + e^- \rightarrow H_2 + h\nu$	$H + H^+ \rightarrow H_2^+ + h\nu$ $2H \rightarrow H_2 + h\nu$ $H + e^- \rightarrow H^- + h\nu$
Recombinação Dissociativa	Reação Íon-Molécula
$H_2^+ + e^- \rightarrow 2H + h\nu$ $H_3^+ + e^- \rightarrow H_2 + H$ $H_3^+ + e^- \rightarrow 3H$	$H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$ $H_2 + H_3^+ \rightarrow H_2 + H_2^+ + H$ $H_2 + H_3^+ \rightarrow H_2 + H^+ + H_2$
Troca de Carga	Neutralização
$H_2^+ + H \rightarrow H^+ + H_2$ $H_2 + H^+ \rightarrow H + H_2^+$ $H + He^+ \rightarrow H^+ + He$ $H + He^{++} \rightarrow H^+ + He^+$	$H^- + H^+ \rightarrow 2H$ $H_2^+ + H^- \rightarrow H_2 + H$ $H_2^+ + H^- \rightarrow 3H$ $H_3^+ + H^- \rightarrow H_2 + H_2$
Destacamento Associativo	Reação na Superfície de Grãos
$H + H^- \rightarrow H_2 + e^-$ $H^+ + H^- \rightarrow H_2^+ + e^-$	$H + H + \text{grão} \rightarrow H_2 + \text{grão}$
Ionização Colisional	Outros Processos Colisionais
$H + e^- \rightarrow H^+ + 2e^-$ $H + H \rightarrow H^+ + H + e^-$ $H + H \rightarrow H^+ + H + e^-$ (com passo intermediário)	$H_2 + e^- \rightarrow 2H + e^-$ $H^- + e^- \rightarrow H + 2e^-$ $H + H_2 \rightarrow 3H$ $H_2 + H_2 \rightarrow H_2 + 2H$ $H^- + H \rightarrow 2H + e^-$ $H_2 + e^- \rightarrow H + H^-$ $H + H_3^+ \rightarrow H_2 + H_2^+$

A rota (1) tem a associação radiativa como processo limitante. A taxa para esta reação depende da densidade de elétrons livres. Em nuvens interestelares, essa quantidade pode ser muito baixa para explicar a grande concentração de H_2 nestas nuvens. Por esse motivo os cientistas foram levados a considerar a formação molecular na superfície de grãos. Esse processo seria, então, o mecanismo dominante de formação de H_2 nas condições físicas de nuvens interestelares. Estimativas da taxa necessária para explicar a concentração de H_2 em tais nuvens, dão conta que a reação ocorre com uma eficiência de cerca de 30% em relação aos choques H-grão (Jura 1975, Duley & Williams 1984). Experimentos feitos em laboratório (Pirronello et al. 1997) corroboram a ordem de grandeza desta taxa. Na região ionizada de NPs, a concentração de elétrons livres é geralmente alta e faz com que a taxa da rota (1) possa ser significativa frente à taxa da reação (2).

2.3.2. Reações Importantes de Destruição de H_2

O processo de fotodissociação em dois passos (Abel 1995, Abel et al. 1997, Duley & Williams 1984) é o processo de destruição mais eficiente dessa molécula em regiões onde uma quantidade significativa dos fótons acima de 13,6 eV (o potencial de ionização do hidrogênio neutro) foi absorvida. Ele ocorre com fótons pertencentes a uma faixa estreita do espectro, entre 12,24 eV e 13,51 eV, que fica abaixo dos potenciais de ionização do H, do He e do He^+ , respectivamente 13,6 eV, 24,6 eV e 54,4 eV, e assim não sofrem diluição óptica por esses constituintes principais do gás ao atravessar a NP. Nessa reação, a molécula é promovida a um estado excitado pela absorção de fótons na faixa mencionada e o decaimento subsequente ao contínuo vibracional do estado fundamental pode levar à dissociação da molécula.

Segundo Abel et al. (1997), como essa absorção se dá numa faixa estreita de energia, eles assumem que o espectro da radiação incidente deve ser

aproximadamente constante nessa faixa. A partir dessa admissão, eles demonstram que o coeficiente desta reação pode ser escrito da seguinte forma:

$$k = 6,6.10^{-19} J(E')$$

onde $J(E')$ é o fluxo de radiação (em $\text{eV.s}^{-1}\text{cm}^{-2}.\text{eV}^{-1}$) na energia $E' = 12,87 \text{ eV}$ e k é dado em $\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$. Com o mesmo raciocínio Van der Werf (1989) fornece (usando as mesmas unidades):

$$k = 5,2.10^{-19} J(E')$$

A autoblindagem do H_2 pode ser importante ao considerarmos a fotodissociação do H_2 . Neste trabalho, como não levamos em conta o estudo do povoamento dos níveis moleculares do H_2 , não podemos considerar precisamente o efeito de autoblindagem da radiação (em inglês conhecido por “self-shielding”) do H_2 . Por isso salientamos que os cálculos efetuados fornecem limites inferiores da quantidade H_2 .

Van der Werf (1989) demonstra, depois de uma série de considerações e aproximações, que devemos incluir o fator de atenuação $7,0.10^5.N(\text{H}_2)^{-1/2}$ para levarmos em conta a autoblindagem. Assim:

$$k = 3,6.10^{-13} N(\text{H}_2)^{-1/2} J(E')$$

onde $N(\text{H}_2)$ é a densidade coluna de H_2 . Uma amostra do efeito que esse modelo de autoblindagem provoca na densidade de H_2 é mostrado na seção 3.9. No entanto optamos por não considerar a autoblindagem e inserir tais aproximações, preferindo obter um limite inferior para a concentração de H_2 , evitando assim superestimar essa concentração.

Em regiões onde a quantidade de fótons acima de 13,6 eV é grande, o processo de destruição da molécula dominante é a fotoionização do H_2 .

2.4. A Formação de H_2 na Superfície de Grãos

2.4.1. Evidências de Grãos no Meio Interestelar e em Nebulosas Planetárias

Existem várias evidências da presença de partículas microscópicas sólidas no meio interestelar (MI), cujos tamanhos estão em torno de 0,01 μm a 1 μm (Dyson & Williams 1997, Draine 2000):

- **Extinção:** A dependência da curva de extinção interestelar com o comprimento de onda pode ser explicada pela existência de partículas sólidas, com tamanho menor que ou da ordem de 1 μm , no MI.
- **Espalhamento e Luz Difusa:** A luz difusa na Galáxia é produzida pelo espalhamento da luz pelos grãos.
- **Polarização:** A polarização da luz é outro indicativo da presença de grãos, que não devem ser, portanto, perfeitamente esféricos.
- **Depleção dos Elementos:** A abundância muito menor de certos elementos no MI com relação a abundâncias consideradas típicas pode indicar a agregação de átomos e moléculas em grãos. Estima-se que boa parte do C e O e quase todo Fe, Mg e Si estejam aglomerados em grãos no MI.
- **Linhas Espectrais de Materiais do Estado Sólido:** Linhas espectrais observadas são atribuídas à absorção da radiação por partículas sólidas.

Grãos constituídos de carbono ou silicatos são formados nos “outflows” de estrelas na fase de gigante vermelha. É razoável, portanto, esperar que grãos possam estar presentes nas NPs, já que se acredita que estes objetos sejam estágios evolucionários posteriores ao das estrelas gigantes vermelhas. De fato, características espectrais atribuídas a esses tipos de grãos já foram identificadas em observações e mostraram sua existência tanto em NP como em suas progenitoras (Kwok, Hrivnak & Geballe 1994). Estudos do contínuo infravermelho observado também indicam a presença de grãos em NPs (Evans 1994, Stasinska & Szczerba 1999, Meixner et al. 1996).

As características espectrais dos hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs) também são observadas em NPs ricas em carbono (com algumas poucas exceções), embora não sejam vistas em estrelas AGB, suas progenitoras. Segundo Kwok et al. (1994) e Whittet (1992) essas “moléculas gigantes” podem se formar em estrelas AGB, mas somente nos estágios posteriores, quando Proto-NP e NP, essas moléculas podem ter seus níveis moleculares excitados. Kwok et al. (1994) também afirmam que essas observações estão associadas a NPs com estrelas centrais [WC11], que são objetos ricos em carbono.

As técnicas usadas para a determinação das propriedades dos grãos circunstelares são a fotometria do contínuo infravermelho e a observação das características espectrais produzidas pelos materiais em estado sólido. O contínuo infravermelho de uma estrela que possua uma casca de poeira deve apresentar um excesso de emissão relativo ao que seria esperado da estrela no caso dessa casca não existir. Esse “excesso infravermelho”, como é chamado, pode fornecer informações sobre a quantidade, a distribuição de temperatura e tamanho dos grãos. A observação das características espectrais geradas pelos materiais em estado sólido na faixa do infravermelho próximo do espectro pode nos fornecer informações sobre os tipos de materiais constituintes, tamanhos e formas dos grãos.

As propriedades físicas dos grãos circunstelares são determinadas pela natureza da estrela. A temperatura dos grãos, por exemplo, depende da quantidade

de radiação emitida pela estrela. A molécula CO é bastante estável em temperaturas da ordem de 2000 K, típicas da atmosfera das gigantes vermelhas onde os grãos se formam. Assim, o elemento C ou O que estiver presente em excesso é que determinará o material a constituir os grãos. Se a estrela for rica em C, os grãos serão baseados em carbono (grafite, PAH, carbono amorfo, etc., sendo carbono amorfo a forma dominante). Se a estrela for rica em oxigênio, os grãos serão formados principalmente de silicatos (amorfo em sua grande maioria) e outros óxidos.

A formação de grãos na atmosfera de estrelas de massa pequena e intermediária em estágios avançados de evolução é considerada uma das maiores fontes de grãos interestelares, pois esse tipo de estrela é formado em grande número e pode produzir quantidade razoável de grãos (Whittet 1992).

2.4.2. Sobre a Reação

A reação de formação de H₂ na superfície de grãos foi proposta para explicar a grande concentração dessa molécula no meio interestelar, pois nenhum outro processo conhecido seria tão eficiente segundo dados de laboratório. Baseando-se na concentração de H₂ observada em nuvens interestelares, estima-se que cerca de 30% dos átomos que se chocam com grãos devem deixá-los sob a forma molecular (Duley & Williams 1984). No entanto, a avaliação analítica da taxa desta reação não é simples por causa das dificuldades em se modelar os grãos e a própria reação (Duley & Williams 1984, Dyson & Williams 1997). Mesmo a composição dos grãos ainda é tema de discussão, embora se acredite que eles sejam formados principalmente por compostos de carbono (grafite e carbono amorfo) e silicatos (Duley & Williams 1984, Duley & Williams 1993, Rowan-Robinson 1986, Duley 1996, Draine 2000), que devem conter cerca de 10% a 20% do Mg, Si e Fe do meio interestelar (Draine 1996). Esse conhecimento provém das curvas observacionais de

extinção e da comparação entre as linhas espectrais de sólidos observadas e modelos teóricos.

A taxa de formação de moléculas na superfície dos grãos depende muito da composição e forma destes. A presença de irregularidades nos grãos pode aumentar significativamente a eficiência desta reação (Hollenbach & Salpeter 1971) não só devido ao aumento da área superficial efetiva, mas também pela possível existência de locais que privilegiam, do ponto de vista da energia de ligação átomo-grão, a formação da molécula em grãos.

Os grãos presentes em ambientes astrofísicos devem e podem ter irregularidades na sua superfície por causa (Hollenbach & Salpeter 1971):

- da radiação no UV e em raios X moles, além de raios cósmicos, que causam a sublimação ou a ejeção dos átomos da superfície do grão e
- dos desvios ligeiros da superfície plana que elevam a energia de ligação e que, por sua vez, elevam a intensidade das irregularidades.

A coleta de amostras de poeira estratosférica e de meteoritos comprova que os grãos podem ter formatos muito variados e isso certamente influi na taxa da formação molecular, pois aumenta a superfície onde pode haver a reação (Hollenbach & Salpeter 1971, Millar & Williams 1993). A Figura 4 mostra um exemplo de grão interplanetário; um grão de SiC (carbeto de silício) extraído de um meteorito.

Figura 4 - Grão extraído do meteorito de Murchison, composto de cristal de SiC (Bernatowicz & Walker 1997).

No entanto, uma forma esférica média ainda é a mais comumente adotada nos modelos apresentados na literatura, pois somente existem cálculos analíticos para as propriedades ópticas de grãos esféricos, assim como para cilíndricos, desenvolvidos na chamada Teoria de Mie (veja, por exemplo, Wickramasinghe 1967).

2.4.3. Condições para a formação de H_2 na superfície de grãos

O processo de formação molecular na superfície de grãos é usualmente subdividido em várias etapas básicas. Seguindo Hollenbach & Salpeter (1970), Hollenbach & Salpeter (1971), Duley & Williams (1993) e Duley (1996), subdividimos o processo nas seguintes etapas:

- (i) Grãos devem sobreviver ao aquecimento devido à radiação UV incidente
- (ii) Átomo de H tem que colidir com o grão
- (iii) Esse átomo deve se ligar (fracamente) ao grão, acomodando-se termicamente à temperatura do grão
- (iv) Um átomo de H deve encontrar-se e reagir com outro átomo de H e para isso:
 - (a) os átomos de H devem ter certa mobilidade sobre a superfície do grão para haver a migração ao sítio adequado à reação
 - (b) o átomo deve permanecer na superfície até que esse encontro ocorra
- (v) A reação entre os dois átomos de H deve resultar na formação da molécula H_2 e na sua ejeção da superfície

Vamos a seguir estudar em mais detalhes cada um destes subprocessos.

(i) Grãos devem sobreviver ao aquecimento devido à radiação UV incidente ($T_g < T_s$)

A primeira informação que devemos buscar para calcularmos a taxa da reação de formação de H_2 em grãos é saber se realmente os grãos podem sobreviver à sublimação nas condições físicas locais. Para isso, o grão deve ter sua temperatura (T_g) menor que sua temperatura de sublimação (T_s), característica dependente do material que o constitui. Materiais refratários, i.e., resistentes a altas temperaturas, como grafite ou silicatos, possuem temperatura de sublimação da ordem ou maior que 1500 K. Veja os valores adotados de T_s na Tabela 2 a seguir.

Tabela 2
Temperatura de Sublimação e Densidade Específica dos Materiais Constituintes de Grãos Considerados nesse Trabalho.

Material do Grão	T_s (K)	Referência	ρ_g (g/cm ³)	Referência
Carbono Amorfo	1750	1	2,26	1
Grafite	1750	1	2,26	1
Silicato	1400	1	3,3	1
Silicato Atenuado no UV	1400	1	3,3	1
SiC	1400	1	3,22	1
PAH neutro	400	2	2,26	2
PAH ionizado	400	2	2,26	2

Referências: (1) Laor & Draine (1993) e (2) Li & Draine (2000).

Outros processos, como choques grão-grão ou grão-partícula energética, podem destruir grãos, mas devido às densidades relativamente baixas aqui tratadas não levaremos esses processos em consideração.

A temperatura do grão é calculada pela igualdade:

$$\pi a_g^2 \int_0^\infty Q_E^{abs} \cdot F_E dE = 4\pi a_g^2 \int_0^\infty Q_E^{abs} \cdot \pi B_E(T_g) dE \quad (1)$$

que expressa a condição de equilíbrio radiativo do grão com seu meio. Nesta equação, a_g é o raio do grão, que consideramos esférico, F_E é o fluxo radiativo que atinge o grão, $B_E(T_g)$ é a expressão da emissão de um corpo negro com temperatura T_g e Q_E^{abs} é o fator de eficiência de absorção do grão. Q_E^{abs} depende da energia da radiação incidente. A Figura 5 mostra um exemplo da dependência de Q_E^{abs} com a energia. O lado esquerdo da equação acima expressa a quantidade de radiação que é absorvida por unidade de tempo e por grão, enquanto o lado direito à radiação que é emitida, também por unidade de tempo e por grão. No fluxo incidente sobre os grãos a radiação proveniente da linha de recombinação Lyman α ($Ly\alpha$), que é bastante intensa, pode contribuir bastante para o aquecimento do grão (Harrington, Monk & Clegg 1988). Na seção 3.8, estudamos a importância dessa contribuição na temperatura e na concentração de H_2 calculadas.

Figura 5 - Q_E^{abs} como função da energia para grãos de grafite de distintos raios.

A maior parte da radiação emitida pelos grãos tem frequências na faixa do infravermelho, já que os grãos em ambientes astrofísicos têm temperaturas entre 10 K a 1000 K. Já a absorção, se dá principalmente no ultravioleta, porque é nessa faixa do espectro que temos a máxima eficiência de absorção pelos grãos

astrofísicos. Quanto maior o grão, menor a energia dos fótons para a qual o grão começa a se comportar como o absorvedor (quase) ideal, i.e., $Q_E^{abs} = 1$ (Figura 5).

A eficiência de absorção da radiação pelo grão, Q_E^{abs} , depende do material e do tamanho do grão, assim como da energia do fóton envolvido. A determinação dos valores desse fator de eficiência pode ser feita em laboratório ou através de cálculos analíticos. São ainda escassos os materiais que possuem publicadas suas propriedades ópticas. Neste trabalho, usaremos os valores determinados e publicados por Rowan-Robinson (1986) para carbono amorfo e por Draine & Lee (1984), Laor & Draine (1993) e Li & Draine (2001) para grafite, silicato, silicato atenuado no UV, SiC, PAH neutro e PAH ionizado.

Na Figura 6, mostramos uma comparação entre o espectro da radiação absorvida por um grão por unidade de área incluindo-se o fator de eficiência Q_E^{abs} (Rowan-Robinson 1986, para grão de carbono amorfo) e o espectro ao admitirmos $Q_E^{abs} = 1$ (Figura 3a) e uma comparação entre o espectro da radiação emitida por um grão por unidade de área incluindo-se o fator de eficiência Q_E^{abs} e o espectro ao admitirmos $Q_E^{abs} = 1$ (Figura 3b). Em ambos os gráficos, os cálculos são feitos para uma NP com densidade de hidrogênio total $n_H = 10^3 \text{ cm}^{-3}$ e estrela central com temperatura $T_* = 150000 \text{ K}$ e luminosidade $L_* = 3000 L_\odot$. Os grãos são de carbono amorfo com raio igual a $0,1 \text{ } \mu\text{m}$. No ponto escolhido dentro da NP, a temperatura do gás é $T = 8000 \text{ K}$ e a do grão é $T_g = 28 \text{ K}$. Observe que ao incluir o fator Q_E^{abs} a absorção no UV é favorecida e a emissão do grão no infravermelho é reduzida e assim, a temperatura do grão calculada com o fator é maior do que se não o levássemos em consideração.

Uma estimativa da temperatura do grão pode ser determinada se supusermos um caso idealizado onde $Q_E^{abs} = 1$. Dessa forma, simplificamos a equação (1):

$$\pi a_g^2 \int_0^\infty F_E dE = 4\pi^2 a_g^2 \int_0^\infty B_E(T_{g,ideal}) dE$$

ou seja:

$$\pi a_g^2 \int_0^\infty F_E dE = 4\pi a_g^2 \sigma T_{g,ideal}^4$$

onde $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-5} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-4}$ é a constante de Stefan-Boltzmann. Assim, o que chamamos de temperatura do grão ideal, é calculada pela expressão:

$$T_{g,ideal} = \left[\frac{1}{4\sigma} \int_0^\infty F_E dE \right]^{1/4} \quad (2)$$

Figura 6 - Espectros da radiação (a) emitida e (b) absorvida por um grão (por unidade de área) incluindo-se o fator de eficiência Q_E^{abs} (linha contínua) e os mesmos espectros ao admitirmos $Q_E^{abs} = 1$ (linha tracejada). Em ambos os gráficos, considera-se uma NP com $n_H = 10^3 \text{ cm}^{-3}$ e estrela central com $T_* = 150000 \text{ K}$, $L_* = 3000 L_\odot$. Os grãos são de carbono amorfo com raio igual a $0,1 \mu\text{m}$. No ponto escolhido dentro da NP, a temperatura do gás é $T = 8000 \text{ K}$ e a do grão é $T_g = 28 \text{ K}$.

É importante notar nesta última expressão que a temperatura do grão fica independente do seu tamanho, dependendo somente da quantidade de energia total por unidade de área que ele recebe. Como já afirmamos antes, devemos salientar

que essa é uma estimativa inferior da temperatura do grão, pois ela faz com que a emissão do grão, que na expressão precisa (eq. [1]) é atenuada pelo fator Q_E^{abs} (que é menor que 1 na região do infravermelho), não mais seja atenuada. Assim, com uma maior emissão de radiação e com um ligeiro aumento na absorção no UV (veja a Figura 6) a temperatura do grão fica menor do que no cálculo não aproximado. No entanto, no presente trabalho usamos a temperatura do grão determinada através da equação (1) que não é aproximada.

(ii) Átomo de H tem que colidir com o grão

A taxa de colisão de um átomo de H com grãos depende da densidade de grãos e de hidrogênio, assim como das dimensões do grão e velocidade dos átomos com respeito aos grãos. Essa expressão bem conhecida da Física elementar é:

$$\sigma_g \langle v_H \rangle n_g n_H$$

onde os fatores são, respectivamente, a seção de choque média dos grãos, a velocidade média do átomo de H e as densidades numéricas volumétricas de grãos e de átomos de hidrogênio.

(iii) Esse átomo deve se ligar fracamente ao grão

Esse átomo deve se ligar fracamente ao grão, ser adsorvido, acomodando-se termicamente à temperatura do grão, como vai ficar claro pela explicação na seção (iv) a seguir.

(iv) Um átomo de H deve encontrar-se e reagir com outro átomo de H

Nem todos os átomos que se chocam com os grãos formam moléculas. Por isso, para escrevermos a taxa desta reação acrescentamos um fator multiplicativo indicador da sua eficiência.

Assim, a taxa total de produção de H_2 pela reação em grãos é escrita na forma do produto da taxa de colisão entre átomos e grãos por um fator de eficiência:

$$k_g = \frac{\gamma}{2} \sigma_g \langle v_H \rangle n_g n_H .$$

γ é o fator de eficiência da reação, que corresponde à fração de átomos que colidem com o grão e efetivamente formam a molécula H_2 que é, logo em seguida, liberada no gás. Dois átomos de H são necessários para a formação de cada molécula de H_2 , por isso o fator .

O fator de probabilidade γ é usualmente separado em dois outros fatores, que dão as probabilidades de ocorrência dos diferentes subprocessos já mencionados. Em Hollenbach & Salpeter (1971), Hollenbach & McKee (1979) e Sternberg & Dalgarno (1989) γ é escrito como o produto:

$$\gamma = S.f$$

Os termos S e f serão explicados a seguir.

a) Os átomos de H devem ter certa mobilidade sobre a superfície do grão para haver a migração ao sítio adequado à reação

Quando o átomo de hidrogênio colide com o grão, ele deve ficar ligado à superfície por forças fracas que lhe permitam ter certa mobilidade sobre a superfície do grão, de modo a favorecer a reação com outro átomo H incidente. Uma ligação química forte com outra molécula ou átomo também poderia impedir a reação com outro H.

A mobilidade do átomo sobre a superfície é necessária para que a taxa de encontros com outro átomo seja maior. Forças de Van der Waals, por exemplo, têm como característica um poço de potencial raso, mas com longo alcance. O poço de potencial dessa ligação tem profundidade (energia de ligação) de cerca de 0,05 eV. Ligações químicas prendem o átomo com energias cem vezes maior e diminuem sensivelmente a reatância entre átomos de hidrogênio. Essa ligação fraca entre o átomo e o grão é chamada genericamente de adsorção. A força de Van der Waals é um exemplo desse tipo de ligação fraca.

Duley & Williams (1993) citam valores experimentais e teóricos para a energia de ligação fraca do átomo de H com diferentes moléculas como estando ao redor de $E_{LIG} = 0,077$ eV. Esta é a profundidade do poço de potencial da ligação, ou seja, a energia mínima que deve ser fornecida ao átomo de H para que ele escape do grão. Portanto, sítios com energia de ligação menor que essa têm uma probabilidade maior de que o átomo de H liberte-se dos grãos mais rápido, antes que possa ocorrer a reação com outro átomo de H formando a molécula.

O termo S da expressão de γ dada acima é o chamado coeficiente de adesão termicamente ponderado (em inglês, “thermally averaged sticking coefficient”) do átomo de hidrogênio. Esse termo dá a probabilidade do átomo de hidrogênio permanecer no grão até que haja a reação com outro átomo de hidrogênio. Em Hollenbach & McKee (1979) encontra-se uma expressão para esta probabilidade:

$$S(T, T_g) = [1 + 0,04(T + T_g)^{0,5} + 2 \cdot 10^{-3} T + 8 \cdot 10^{-6} T^2]^{-1} \quad (3)$$

Nesta expressão os termos devido à profundidade do poço já estão estimados dentro dos coeficientes numéricos. Para a faixa de temperatura do gás que tratamos neste trabalho (entre 100 e 40000 K) e para a temperatura de grãos variando entre 50 e 500 K, valores que esperamos encontrar (Stasinska & Szczerba 1999 e Hollenbach & McKee 1979), o comportamento do coeficiente S é dado na Figura 7. Observe que esse coeficiente é função forte da temperatura do gás e, para temperaturas do gás baixas, também é função da temperatura dos grãos.

Figura 7 - Dependência do coeficiente $S(T_g, T)$ com as temperaturas do gás e do grão.

b) O átomo de H deve permanecer na superfície até que o encontro com outro átomo de H ocorra

O fator f é a fração de átomos que entram nos poços antes de sublimar e que se recombinam com outro átomo de H. Hollenbach & Salpeter (1971) fornecem a expressão desse coeficiente:

$$f = \frac{1}{1 + \left(\frac{N_T}{N_I} \right) \exp \left(- \frac{E_{LIG}}{k_B T_g} \right)} \quad (4)$$

Nesta expressão N_I/N_T é a razão entre o número de locais na superfície do grão adequados à formação molecular e o número total de locais que permitem a fixação do átomo H. k_B é a constante de Boltzmann. Hollenbach & Salpeter (1971) estimam que essa razão N_I/N_T deva ser tipicamente da ordem de 10^{-4} . A Figura 8 mostra a curva de f em função da temperatura dos grãos, considerando-se distintos valores de (a) N_I/N_T e (b) E_{LIG} . A dependência de f com esses dois últimos parâmetros é muito forte. Por isso optamos por usar valores citados como típicos por Hollenbach & Salpeter (1971): $N_I/N_T = 10^{-4}$ e $E_{LIG} = 0,077$ eV.

Observando o comportamento dos fatores S e f , podemos ver que a taxa de formação de H_2 em grãos será favorecida em grãos com temperaturas menores que cerca de 100 K.

Figura 8 - Comportamento do fator $f = f(T_g, E_{LIG}, N_I/N_T)$ em função de T_g para diversos valores de (a) N_I/N_T e (b) E_{LIG} .

(v) A reação entre os dois átomos de H deve resultar na formação da molécula H₂ e na sua ejeção da superfície

A natureza exotérmica da reação de formação da molécula H₂ libera energia suficiente (cerca de 4,5 eV segundo Duley & Williams 1993) para quebrar a ligação fraca entre a molécula e o grão e depositá-la na fase gasosa do meio. Assim, esperamos que praticamente todas as moléculas formadas sejam ejetadas no gás. Assumiremos, portanto, que esse processo de ejeção tenha eficiência de 100%.

2.4.4. Taxa para a formação de H₂ na superfície de grãos

Admitimos que as velocidades dos átomos de H sigam uma distribuição de Maxwell, de forma que:

$$\langle v_H \rangle = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_H}}$$

é a velocidade térmica dos átomos de H. Nessa expressão m_H é a massa do átomo de hidrogênio.

Assim, a expressão para a taxa de formação de H₂ em grãos fica:

$$\Gamma_g = \frac{f.S}{2} \pi a_g^2 \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_H}} n_g n(H)$$

ou seja,

$$\Gamma_g = 2,28.10^4 . f . S . \pi . a_g^2 . T^{1/2} . n_g . n(H) \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad (5)$$

onde as grandezas estão no sistema de unidades CGS. Desta equação temos a proporção:

$$\Gamma_g \propto a_g^2 n_g \quad (6)$$

ou seja, a reação de formação em grãos depende diretamente da área superficial total de grãos disponível.

Na maioria das publicações que consideram grãos num meio astrofísico, nos deparamos com a quantidade denominada razão grão-gás (R_{g-g}). Essa quantidade é definida pela razão:

$$R_{g-g} = \frac{\text{massa total de grãos}}{\text{massa total de gás}}$$

Considerando que cada grão seja esférico de raio a_g e constituído de um material cuja densidade específica seja ρ_g , R_{g-g} pode ser escrito como:

$$R_{g-g} = \frac{4\pi a_g^3 \rho_g n_g}{3n_H m_H \left(1 + 4 \frac{n_{He}}{n_H} \right)} \quad (7)$$

onde n_H e n_{He} são as densidades numéricas volumétricas, respectivamente, de núcleos de H e de He.

Utilizaremos esta grandeza R_{g-g} como o parâmetro de entrada que indica a quantidade de grãos presente nos modelos.

2.5. As Sub-rotinas Elaboradas

Para este trabalho, desenvolvemos várias sub-rotinas para que o código de fotoionização Aangaba pudesse considerar o estudo da molécula H_2 e a presença dos grãos. Esse estudo é feito de forma autoconsistente com os demais processos que já eram considerados na forma original do código Aangaba.

Ao incluirmos o estudo do H_2 , o equilíbrio químico e de ionização entre os compostos do hidrogênio deverá agora incluir também as espécies H_2 , H , H_2^+ , H_3^+ , além de H e H^+ que o código originalmente já considerava. A molécula H_3 não é considerada por ser instável. No total, quarenta e uma diferentes reações envolvendo essas espécies são consideradas no equilíbrio. Para cada ponto dentro da NP, as taxas dessas reações são calculadas. Em geral, elas são dependentes do espectro da radiação (fotoprocessos) ou da temperatura e densidade total do gás (demais processos) no ponto dentro da NP onde o cálculo está sendo feito. A partir da consideração desse equilíbrio e das conservações de carga e massa, resulta um sistema de sete equações e sete incógnitas, acopladas e não-lineares, que também é resolvido por nossas sub-rotinas. A solução desse sistema fornece os valores procurados das concentrações de cada espécie.

Foi necessário incluir o estudo dos grãos por causa do importante processo já mencionado de formação de H_2 na superfície de grãos. Somente é possível escolher um tipo de grão por vez, por simplicidade e para que pudéssemos estudar os efeitos do tamanho e do material constituinte dos grãos na concentração de H_2 .

Ao considerarmos os grãos, a primeira determinação envolvendo estes é o cálculo de sua temperatura, pois, como também dito anteriormente, se a temperatura calculada do grão superar a temperatura de sublimação, característica do material que o compõe, o grão não poderá sobreviver. Se isso acontecer, o programa automaticamente não considera a presença de grãos naquele passo de cálculo.

Para determinar a taxa da reação de formação de H_2 na superfície dos grãos, devemos conhecer a temperatura destes. A reação de formação de H_2 na superfície de grãos é mais eficiente para temperaturas do grão abaixo de 100 K, como visto na Figura 7 e na Figura 8. A temperatura do grão é obtida através da solução da equação integral de equilíbrio radiativo entre o grão e o campo de radiação existente (eq. [1]).

Calculamos também o que chamamos de temperatura dos grãos ideais (eq. [2]), que é a temperatura dos grãos, sujeitos também ao equilíbrio radiativo, ao considerarmos sua eficiência Q_E^{abs} igual a um para todas as energias.

Também consideramos a absorção da radiação pelos grãos no transporte radiativo:

$$F_E = \frac{4\pi R_*^2}{4\pi R^2} F_{E,*} \cdot e^{-\tau_E}$$

onde: R_* é o raio da estrela central, $F_{E,*}$ é o fluxo emergente da estrela e F_E é o fluxo após atravessar a massa de gás e grãos a uma distância R dentro da NP, com profundidade óptica:

$$\tau_E(E) = \tau_{E, \text{gás}} + \tau_{E, \text{grãos}} .$$

É possível escolher no programa o material do qual o grão é composto dentre os seguintes materiais:

- Carbono amorfo
- Grafite
- PAH ionizado
- PAH neutro
- Silicato

- Silicato atenuado no ultravioleta (UV)
- SiC

Além disso, possibilitamos escolher o raio do grão (a_g) entre os valores 10^{-3} , 10^{-2} , 10^{-1} , 1 e 10 μm . Para os PAHs somente estão disponíveis os raios 10^{-3} e 10^{-2} , já que estes são tipicamente menores (Evans 1994). Esses valores são representativos dos grãos existentes em ambientes astrofísicos, particularmente em NPs (Stasinska & Szczerba 1999), e que, além disso, têm propriedades ópticas publicadas na literatura.

Ao parâmetro R_{g-g} pode ser atribuído numericamente qualquer valor real, conforme desejar o usuário.

2.5.1. Alterações Feitas nas Sub-rotinas Pré-existentes do Código Aangaba

Várias alterações nas sub-rotinas do código original foram necessárias para que houvesse:

- a declaração das novas variáveis globais e locais
- a leitura dos parâmetros de entrada que mostram se o usuário pediu que o estudo da molécula H_2 e/ou dos grãos fosse incluído
- a inserção de comandos condicionais ao valor desses parâmetros, que controlam as sub-rotinas e os comandos a serem chamados no caso de se considerar a molécula e os grãos e no caso contrário.
- a leitura dos novos parâmetros relativos ao estudo dos grãos (material que constitui o grão, raio do grão e razão grão-gás)
- a chamadas das novas sub-rotinas
- a consideração da presença do H_2 e dos grãos pelas expressões já existentes no código original

2.5.2. Sub-rotinas Elaboradas

Para que o código de fotoionização Aangaba passasse a considerar o estudo da molécula H_2 , elaboramos diversas sub-rotinas que:

- lêem os arquivos de propriedades ópticas dos grãos
- calculam a temperatura do grão em equilíbrio radiativo
- calculam a taxa de cada uma das 41 reações envolvendo os compostos de H consideradas
- resolvem o sistema de equações de equilíbrio químico e de ionização dos compostos de H, determinando as concentrações dos compostos de H relativas à densidade total de núcleos de H ($n(X)/n_H$, onde $n(X)$ é a concentração do composto X em cm^{-3})
- imprimem os resultados na tela e em arquivos

2.5.3. Sub-rotinas de Press et al. (1994) Utilizadas

As seis sub-rotinas computacionais de Press et al. (1994) que utilizamos, com mínimas modificações e nomeadas como no livro, são:

- Mnewt – Resolução de sistemas de equações pelo método de Newton-Raphson; utilizando a decomposição LU de sistemas
- Lubksb e Ludcmp – Decomposição LU de sistemas de equações
- Gauleg – Integração numérica pelo método de Gauss
- Spline e Splint – Interpolação de funções usando “splines”

3. Modelos e Resultados

Em nosso estudo, admitimos que a estrela central de NP emite como um corpo negro e usamos intervalos representativos de NPs para os parâmetros que a descrevem, a saber: a luminosidade (L_*), no intervalo de $10^2 L_\odot$ a $10^4 L_\odot$ e temperatura (T_*), no intervalo entre $3 \cdot 10^4$ K e $5 \cdot 10^5$ K (Pottasch 1984). O parâmetro densidade total de núcleos de H no gás da NP (n_H) é mantido constante dentro da NP e efetuamos nossos cálculos também em um intervalo representativo de NPs, com n_H entre $5 \cdot 10^2 \text{ cm}^{-3}$ e $1 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$ (Pottasch 1984).

Admitimos as propriedades ópticas dos grãos de Rowan-Robinson (1986) para carbono amorfo e de Draine & Lee (1984), Li & Draine (2001) e Laor & Draine (1993) para grafite, silicato, silicato atenuado no UV, SiC, PAH neutro e PAH ionizado, como já mencionado. Efetuamos cálculos para verificar como a quantidade de H_2 é afetada por cada material citado (seção 3.3), pois se acredita que tais compostos possam potencialmente compor os grãos presentes em NPs.

Para o estudo da dependência da quantidade de H_2 com o tamanho do grão, escolhemos cinco valores para o raio dos grãos (a_g) logarithmicamente espaçados dentro do intervalo entre $10^{-3} \mu\text{m}$ e $10 \mu\text{m}$, para o qual encontramos as propriedades ópticas dos grãos em Rowan-Robinson (1986), Draine & Lee (1984), Li & Draine (2001) e Laor & Draine (1993). Esses valores cobrem boa parte do intervalo de valores de raio de grãos em NPs encontrados por Stasinska & Szczerba (1999), situados entre $10^{-4} \mu\text{m}$ e $10^{-1} \mu\text{m}$, embora não alcancem os valores mais baixos que $10^{-3} \mu\text{m}$. Valores abaixo de $10^{-3} \mu\text{m}$ não são frequentes em NPs. Em Stasinska & Szczerba (1999), é estudado o conteúdo de poeira de uma amostra de 500 NPs. Foram encontrados também valores para R_{g-g} entre 10^{-5} e 10^{-1} (com valor médio de

cerca de 10^{-3}) intervalo que consideramos neste trabalho para o estudo da variação da concentração de H_2 com a quantidade de grãos.

Admitimos as mesmas abundâncias dos elementos em todos os cálculos, independentemente da quantidade de grãos que consideramos presentes nos modelos. A Tabela 4 mostra os valores adotados, que são obtidos de Kingsburgh & Barlow (1994), com exceção dos elementos Mg, Si, Cl e Fe, cujas abundâncias são de Stasinska & Tylenda (1986) corrigidas da depleção em grãos.

Tabela 3
Abundância dos Elementos Relativa ao H para os Modelos Considerados.

Elemento	Abundância	Elemento	Abundância	Elemento	Abundância
H	1,00	O	$4,49.10^{-4}$	S	$8,32.10^{-6}$
He	$1,15.10^{-1}$	Ne	$1,23.10^{-4}$	Cl	$3,20.10^{-9}$
C	$5,50.10^{-4}$	Mg	$3,80.10^{-7}$	Ar	$2,45.10^{-6}$
N	$2,24.10^{-4}$	Si	$3,50.10^{-7}$	Fe	$4,70.10^{-7}$

O raio máximo ($R_{máx}$) mencionado a seguir é o raio da região ionizada da NP. Esse raio é definido pela distância à estrela central onde a razão $n(H^+)/n_H$ atinge o valor 10^{-4} .

Definimos a grandeza RM como a razão entre a massa de H_2 , tanto neutro quanto ionizado, e a massa total de compostos de H dentro da região ionizada, ou seja, por definição:

$$RM = \frac{\int_{R_0}^{R_{máx}} 4\pi \left[n(H_2, R) + n(H_2^+, R) \right] 2,02m_H R^2 dR}{\int_{R_0}^{R_{máx}} 4\pi n_H m_H R^2 dR}$$

Nesta expressão, $n(H_2, R)$ e $n(H_2^+, R)$ são, respectivamente, as concentrações de H_2 e H_2^+ na posição R . R_0 é o raio inicial da NP, que é usualmente muito menor que $R_{máx}$. A massa molecular do H_2 é $2,02m_H$. A grandeza RM é usada para indicar a

quantidade de H_2 de forma independente do tamanho da região ionizada da NP, pois diferentes parâmetros físicos para o modelo resultam em diferentes valores de $R_{máx}$, dificultando a comparação.

Para o estudo da influência na concentração de H_2 de cada um dos parâmetros de um modelo de NP, a saber, T_* , L_* , n_H , material constituinte do grão, a_g e R_{g-g} , escolhemos uma NP-padrão com propriedades físicas típicas e variamos esse parâmetro, mantendo fixos os demais. Portanto, a não ser quando mencionado o contrário, os parâmetros considerados a seguir são os dessa NP-padrão, cujas propriedades são indicadas na Tabela 4.

Tabela 4
Propriedades da NP-padrão.

Propriedades da Estrela Central	
T_*	150000 K
L_*	3000 $L_\odot$
Propriedades da Nebulosa	
n_H	10^3 cm^{-3}
R_{g-g}	10^{-3}
Material Constituinte dos Grãos	Carbono Amorfo
a_g	0,1 μm

Iniciamos a apresentação e discussão dos resultados deste trabalho a seguir (seção 3.1), com uma discussão geral sobre os resultados obtidos, focalizada na NP-Padrão. Nas seções 3.2 a 3.4, verificamos a importância da reação de formação de H_2 em grãos dentro da região ionizada de NPs, observando também o impacto da temperatura dos grãos e da área superficial de grãos disponível na concentração de H_2 calculada. Em seguida, estudamos o efeito dos parâmetros densidade do gás da NP, luminosidade e temperatura da estrela central na quantidade de H_2 determinada (seções 3.5 a 3.7). Na seção 3.8, estudamos a importância de levar em consideração a linha $Ly\alpha$ no aquecimento dos grãos. Finalmente, na seção 3.9, mostramos o que acontece com a concentração de H_2 ao se considerar a autoblindagem da molécula

H_2 no seu processo de fotodissociação, através da simplificação descrita em Van der Werf (1989) (veja a seção 2.3.2).

3.1. Resultados para a NP-Padrão

A Figura 9 ilustra esquematicamente os principais processos de formação e destruição dos compostos H_2^+ , H^- , H_3^+ e H_2 , permitindo a visualização da interdependência entre as concentrações desses compostos. As espécies H e H^+ são mostradas somente como reagentes ou produtos para os processos de formação e destruição de H_2^+ , H^- , H_3^+ e H_2 , para melhor visualização. Por exemplo, a recombinação do H^+ e a ionização do H são as rotas mais importantes para o equilíbrio destas duas espécies e não são representadas nesta figura.

Figura 9 – Esquema ilustrativo das rotas de formação e destruição mais importantes dos compostos H_2 , H_2^+ , H_3^+ e H , segundo os resultados deste trabalho.

Através dos cálculos que efetuamos para os diversos modelos de NPs mencionados ao longo deste trabalho, verificamos que os processos mais importantes de formação de H_2 neutro dentro da região ionizada de NPs são:

- $H + H^- \rightarrow H_2 + e^-$
- $H_2^+ + e^- \rightarrow H_2 + h\nu$
- $H + H + \text{grão} \rightarrow H_2 + \text{grão}$

e os processos mais importantes de destruição são:

- $H_2 + h\nu \rightarrow H_2^+ + e^-$
- $H_2 + h\nu \rightarrow 2H$ (dois passos)
- $H_2 + H^+ \rightarrow H + H_2^+$

Cada um desses processos é importante em uma determinada região da NP, como pode ser visto na Figura 10. Os demais processos são sempre menos importantes que esses por um fator da ordem de 10^2 na taxa da reação.

Figura 10 – Distribuição ao longo da NP das taxas das seis reações que verificamos ser as mais importantes nas condições físicas da região ionizada de NPs

De um modo geral, a espécie H^- é muito importante para a produção de núcleos de H_2 (H_2 e H_2^+). O íon H^- é formado, principalmente, pela associação radiativa de H com elétrons e , portanto, é mais abundante em regiões onde temos a concentração alta dessas duas espécies, i.e., uma região intermediária entre a ionizada e a neutra, a qual chamaremos genericamente de região semi-ionizada.

A recombinação do H_2^+ é o processo de formação de H_2 neutro mais importante na região mais interna da NP (região mais ionizada). Na região semi-ionizada, o destacamento associativo entre H e H^- compete com a recombinação do H_2^+ na produção de H_2 , ultrapassando-o em importância em uma região um pouco mais externa a esta. A reação de formação na superfície de grãos é o processo mais importante na região mais externa da NP. A importância desta última reação será tratada nas seções seguintes.

Dentre os processos de destruição de H_2 , a ionização dessa molécula é o processo mais significativo na parte mais interna e ionizada da nebulosa. Esse processo necessita de fótons com energia acima de 15,42 eV. Já na região mais externa da NP, como os fótons com energia acima de 13,6 eV já foram bastante absorvidos, o processo mais importante de destruição do H_2 é a fotodissociação do H_2 em dois passos, que ocorre com fótons entre 12,24 eV e 13,51 eV. Outro processo importante, principalmente na região intermediária a essas duas regiões citadas, é a troca de carga entre H_2 e H^+ , que é importante nas regiões onde as concentrações de H_2 e de H^+ são ambas significativas.

Em resumo, a concentração da molécula H_2 dentro da região ionizada será favorecida em um ambiente onde a densidade de H neutro e a densidade eletrônica sejam ambas significativas.

Os processos mais importantes de produção do íon molecular H_2^+ são:

- $H_2 + h\nu \rightarrow H_2^+ + e^-$
- $H + H^+ \rightarrow H_2^+ + h\nu$

- $\text{H}_2 + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2^+ + \text{H}$
- $\text{H}^- + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2^+ + \text{e}^-$

e os de destruição são:

- $\text{H}_2^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{h}\nu$
- $\text{H}_2^+ + \text{e}^- \rightarrow 2\text{H} + \text{h}\nu$
- $\text{H}_2^+ + \text{H} \rightarrow \text{H}^+ + \text{e}^-$

Podemos observar que a formação de H_2^+ , a exemplo da molécula H_2 , será favorecida em ambientes semi-ionizados. Esse íon molecular somente tem concentração maior que a molécula neutra em uma região bastante interna da NP. Por exemplo, na NP-padrão a concentração do íon supera a da molécula neutra na estreita região em que $R < 0,04 R_{\text{máx}}$. Nas demais regiões, principalmente nas mais externas onde a concentração de H_2 é mais importante, a concentração de H_2^+ é sempre muito menor que a da molécula neutra. Na NP-padrão, a razão $n(\text{H}_2)/n(\text{H}_2^+)$ é da ordem de 10^3 na região onde ambas espécies têm suas concentrações máximas.

Os valores que determinamos para a distribuição radial das densidades dos compostos de hidrogênio ($n(X)/n_H$, onde X é o composto) ao longo da NP-Padrão são mostrados na Figura 11. Adicionamos a este gráfico a distribuição da temperatura do gás ao longo da NP. Observe que a concentração de H_2 é alta mesmo em regiões onde a temperatura do gás é alta ($T \sim 10000 \text{ K}$) e $n(\text{H}^+)/n_H$ ainda é bem próximo à unidade.

A queda em $n(\text{H}_2)/n_H$ observada em $R > 0,87 R_{\text{máx}}$ é devida à queda na produção de H^- acarretada pela diminuição na densidade de elétrons produzida pela recombinação de hidrogênio. Veremos nas seções seguintes que, na região mais externa a essa diminuição significativa, a reação em grãos começa a dominar a produção de H_2 e, dependendo da área superficial efetiva de grão, poderemos até observar o aumento da concentração de H_2 .

Figura 11 – Distribuição radial das densidades dos compostos de hidrogênio, relativas à n_H , ao longo da NP-padrão. Neste gráfico também é mostrada a distribuição da temperatura do gás ao longo da NP (curva tracejada, escala da direita).

3.2. Razão Grão-Gás

A razão grão-gás (R_{g-g}) nos dá uma idéia da densidade de grãos, já que mantemos constantes os outros parâmetros da equação (7) nos modelos analisados nesta seção. Na Figura 12, mostramos o comportamento de RM em função de R_{g-g} (os demais parâmetros lembramos que são os da NP-padrão). Quando não consideramos a presença de grãos na NP-padrão, o valor calculado de RM é $3,7 \cdot 10^{-6}$, que é o valor para o qual a curva da Figura 12 tende ao diminuirmos R_{g-g} , ou seja, a quantidade de grãos. Observe que RM só começa a aumentar com o crescimento de R_{g-g} quando esta grandeza está próxima do valor 10^{-3} .

Podemos ver por que isso acontece observando a Figura 13, onde é mostrada a distribuição de $n(H_2)/n_H$ ao longo da NP, para diferentes valores de R_{g-g} . Somente existem diferenças entre os valores de $n(H_2)/n_H$ calculados com os diferentes valores de R_{g-g} nas regiões mais externas, onde a reação em grãos passa a ser um processo importante de formação de H_2 (como veremos mais adiante). A taxa da

formação de H_2 em grãos (I_g) é diretamente proporcional a R_{g-g} (eqs. [5] e [7]). A concentração de H_2 tem um aumento mais significativo, em relação ao modelo onde os grãos não são considerados, para valores de R_{g-g} maiores que 10^{-3} . Nesta figura também acrescentamos os cálculos da concentração de H_2 quando não consideramos a presença de grãos. Esta curva praticamente coincide com a curva na qual $R_{g-g} = 10^{-5}$.

Figura 12 – Valor calculado de RM em função da razão grão-gás em massa, R_{g-g} .

Figura 13 – Distribuição radial da concentração de H_2 (relativa a n_H) ao longo da NP, considerando-se diversos valores de R_{g-g} .

A Figura 14 mostra a distribuição radial das taxas dos processos de formação e destruição de H_2 mais importantes. As taxas dos demais processos são sempre menos importantes pelo menos por um fator da ordem de 10^2 . Podemos verificar a grande diferença que há entre os valores da taxa de formação de H_2 em grãos quando $R_{g-g} = 10^{-3}$ e quando $R_{g-g} = 10^{-1}$. Lembramos que somente para valores de R_{g-g} maiores que 10^{-3} RM é significativamente afetada pela reação em grãos. Segundo os valores inferidos por Stasinska e Szczerba (1999) em NPs, 10^{-3} é um valor médio para R_{g-g} .

Figura 14 – Distribuição ao longo da NP das taxas das seis reações que verificamos ser as mais importantes para a concentração de H_2 neutro nas condições físicas da região ionizada de NPs.

A recombinação do H_2^+ e a reação de H^- com H são as outras duas rotas importantes para a produção de H_2 . São elas que sustentam a concentração de H_2

quando a quantidade de grãos disponíveis diminui (parte plana da Figura 12). A recombinação do H_2^+ é a reação dominante na região mais ionizada da NP. Comparando a Figura 13 com a Figura 14, podemos verificar que o pico mais interno existente em $R = 0,87 R_{\text{máx}}$ é produzido por essas duas reações. As taxas dessas reações diminuem bastante após esse máximo. Nas regiões mais externas, a reação em grãos torna-se o processo mais importante de produção de H_2 , no caso de considerarmos grãos. A reação de H^- com H é significativa na região de transição entre a recombinação do H_2^+ e a reação em grãos.

Como já vimos na seções 3.1, os processos mais significativos de destruição de H_2 são: na parte mais ionizada da nebulosa ($R < 0,7 R_{\text{máx}}$ nos modelos da Figura 14), é a sua ionização; na região mais externa da NP, é a fotodissociação do H_2 em dois passos e, na região intermediária a essas duas regiões citadas, é a troca de carga entre H_2 e H^+ .

3.3. Raio do Grão

A Figura 15 mostra como a temperatura dos grãos varia com a distância à estrela central ao considerarmos diferentes valores para os raios dos grãos (a_g). Também incluímos a curva da temperatura do que chamamos de grão “ideal”, ou seja, o grão absorvedor e emissor ideal. Neste gráfico podemos observar que quanto maior o grão, menor é sua temperatura para uma dada distância e mais próxima da temperatura do grão “ideal” ela é. Isso ocorre porque quanto maior o grão, maior é sua eficiência Q_E^{abs} para uma dada energia, principalmente no infravermelho (Figura 5), onde a emissão da radiação pelo grão é mais importante.

Embora somente sejam mostrados os cálculos usando o composto grafite, todos os outros materiais aqui considerados se comportam de forma análoga, já que suas propriedades ópticas têm comportamento semelhante.

A partir das curvas T_g em função de R que obtivemos, podemos inferir que o comportamento de T_g com a distância R à estrela central segue aproximadamente a lei:

$$T_g \propto R^{-0,4}$$

As curvas somente apresentam desvios desse comportamento na região de recombinação do H, onde elas admitem valores menores que os calculados por essa lei.

Figura 15 - Temperatura dos grãos em função da distância à estrela central em unidades do raio máximo da região ionizada da NP, para diversos valores de raios de grão e para o grão “ideal”. Cálculos efetuados considerando grãos compostos por grafite e os demais parâmetros como definimos para a NP-padrão.

A Figura 16 mostra a distribuição radial de $n(H_2)/n_H$. Observe que até uma certa distância (cerca de 87% da NP no modelo mostrado) o comportamento dessa distribuição é igual para todos os raios considerados, pois, como já mencionamos na seção anterior, a reação em grãos somente é importante na parte mais externa da região ionizada. Para distâncias maiores que $R = 0,87 R_{máx}$, quanto menor o grão, maior é a densidade de H_2 produzido em uma dada distância. Já sabemos também

que grãos menores adquirem temperaturas maiores, e temperaturas de grãos maiores prejudicam a formação de H_2 em grãos. Portanto, a temperatura do grão não é um fator determinante no cálculo da concentração de H_2 dentro da região ionizada. De fato, a diferença em se considerar a temperatura pela equação (1) e considerar a temperatura do grão ideal no código para o cálculo das concentrações, tem um impacto menor que 2% na concentração de H_2 . Entretanto, calcular a temperatura dos grãos da forma precisa através da equação (1) é mais adequado quando nos interessamos por saber se o grão pode sobreviver ou sublimará nas circunstâncias locais. Neste trabalho somente os grãos constituídos de PAH e com raio $a_g = 0,001 \mu m$ e os demais parâmetros da NP-padrão sublimaram e, mesmo assim, em uma região muito interna na NP, onde a concentração de H_2 é pequena e a reação em grão muito pouco eficiente.

Figura 16 – Distribuição radial de $n(H_2)/n_H$ dentro da NP, considerando-se diversos tamanhos de grãos.

A partir da equação (5), que dá a taxa de formação de H_2 em grãos, temos a proporção:

$$\Gamma_g \propto f.S.a_g^2.T^{1/2}.n_g$$

onde todos os fatores mencionados sofrem alguma influência do raio do grão na sua determinação, seja através do próprio raio a_g , das propriedades ópticas, que dependem de a_g , ou da temperatura do grão, T_g , que depende das propriedades ópticas.

Como vimos, T_g não influi significativamente na concentração de H_2 e a temperatura do gás sofre pouquíssima influência por causa da presença de grãos, somente àquela devida à absorção da radiação pelo grão, que é o único fenômeno considerado neste trabalho envolvendo os grãos que altera as condições do meio, além da reação de formação de H_2 em grãos. Assim, podemos reescrever a proporção acima, chegando à equação (6):

$$\Gamma_g \propto a_g^2 n_g$$

Podemos ver a partir da equação (7) que, para R_{g-g} constante:

$$n_g \propto \frac{1}{a_g^3}$$

e, assim, temos:

$$\Gamma_g \propto \frac{1}{a_g} .$$

Essa proporção indica que a produção de H_2 através da reação em grãos deve ser maior para grãos menores, resultado já visto em nossos cálculos (Figura 16). É importante salientar que isso somente ocorre porque mantemos R_{g-g} como parâmetro

fixo. Se não mantivéssemos R_{g-g} constante como um vínculo ligando a_g com n_g , mas sim definíssemos n_g constante, teríamos simplesmente a equação (6), ou seja, a reação em grãos seria favorecida pela presença de grãos maiores, pois a área superficial disponível para a reação seria maior. No entanto, como é usual na literatura, optamos por manter R_{g-g} constante.

A Figura 16 é praticamente idêntica à Figura 13, pois em ambas as figuras só estamos variando a área superficial total de grãos disponível, que influi na concentração de H_2 principalmente através da reação em grãos (uma parte muito pequena é devida à absorção da radiação pelos grãos). A taxa da formação de H_2 em grãos depende diretamente de R_{g-g} (para a_g constante) e inversamente de a_g (para R_{g-g} constante).

Na Figura 17, mostramos como RM depende do raio do grão considerado. Da mesma forma que na Figura 12, conforme tomamos grãos com raios maiores, a curva tende a um valor para o qual não mais a reação em grãos é importante para a sua concentração. Um aumento significativo na quantidade de H_2 é verificado para $a_g < 0,1 \mu m$ por causa da formação em grãos. Segundo Stasinska e Szczerba (1999), $a_g = 0,1 \mu m$ é um valor típico dentre os encontrados em NPs.

Figura 17 – Dependência de RM com o raio do grão considerado.

3.4. Material Constituinte do Grão

Determinamos os valores de RM ao considerarmos cada um dos vários materiais constituintes de grãos astrofísicos já citados. Os valores obtidos são mostrados na Tabela 5 para dois valores diferentes de raio de grão. Podemos observar que existem somente pequenas diferenças entre os valores calculados de RM com os diferentes materiais (para um dado a_g). Essas diferenças são devidas às variações existentes nas propriedades ópticas de cada material e são maiores quando consideramos grãos menores. A Figura 18 mostra como as propriedades ópticas de grãos de distintos materiais (com o mesmo tamanho) diferem. Na Figura 5 vimos as diferenças nas propriedades ópticas com o raio do grão, considerando-se um mesmo material, a grafite.

As propriedades ópticas influem na forma como a radiação é absorvida pelo grão, o que atinge principalmente a temperatura do grão. No entanto, como já concluímos anteriormente, a temperatura do grão não tem um efeito muito acentuado na determinação da concentração de H_2 e assim não há grandes variações nos valores de RM calculados para grãos com distintos materiais (considerando um mesmo tamanho).

Tabela 5
RM em Função do Material Constituinte do Grão.

Tipo do grão	RM	
	$a_g = 0,1 \mu m$	$a_g = 0,01 \mu m$
Silicato	$3,88.10^{-6}$	$5,55.10^{-6}$
Silicato atenuado no UV	$3,88.10^{-6}$	$5,55.10^{-6}$
SiC	$3,88.10^{-6}$	$5,23.10^{-6}$
Carbono Amorfo	$3,95.10^{-6}$	-
Grafite	$3,97.10^{-6}$	$6,40.10^{-6}$
PAH íon	-	$6,40.10^{-6}$
PAH neutro	-	$6,40.10^{-6}$

Figura 18 - Propriedades ópticas de grãos com raio de $0,1\mu\text{m}$. As curvas de silicato e silicato atenuado são praticamente coincidentes. Referências: Rowan-Robinson (1986) para o carbono amorfo e Draine & Lee (1984), Laor & Draine (1993) e Li & Draine (2001) para os demais materiais.

Figura 19 – Temperatura dos grãos ao longo da NP para distintos materiais astrofísicos constituintes. Raio dos grãos: a) $0,01\mu\text{m}$ e b) $0,1\mu\text{m}$.

Na Figura 19 temos a temperatura dos grãos ao longo da NP considerando os diversos materiais constituintes dos grãos, citados anteriormente (os demais parâmetros são da NP-padrão). Os grãos formados por PAHs, com raio $a_g = 0,01 \mu\text{m}$, sublimam em distâncias menores que $R = 0,011R_{\text{máx}}$. Observe que a temperatura dos grãos pode diferir entre os distintos materiais em até cerca de 100 K, na mesma posição dentro da NP.

3.5. Densidade do Gás

A Figura 20 mostra como RM depende da densidade total de núcleos de hidrogênio da NP (n_H). Os cálculos foram feitos dentro de uma faixa bem extensa de densidade do gás, de $5 \cdot 10^2 \text{ cm}^{-3}$ a 10^5 cm^{-3} , e representativa dos valores já observados para NPs. Dentro dessa faixa de densidades, onde temos um aumento em n_H por um fator 200, temos uma diminuição por um fator 20 em RM .

Figura 20 – RM em função da densidade total de núcleos de hidrogênio.

O fato de encontrarmos valores maiores de RM em NP menos densas pode ser explicado pela presença de uma região semi-ionizada mais extensa em NPs com menor n_H , propícia à formação de H_2 , onde temos ambas as concentrações de H neutro e elétrons significativas, como explicado na seção 3.1. Essa região semi-ionizada pode ser vista na Figura 21, onde mostramos a distribuição radial de $n(X)/n_H$ ao longo de dois modelos de NP com distintos valores de n_H .

Figura 21 - Distribuição radial de $n(X)/n_H$ ao longo de dois modelos de NP com diferentes valores de n_H .

Figura 22 - Distribuição do H_2 ao longo de NPs com distintos valores de n_H .

A distribuição de H_2 ao longo de NPs com distintos valores de n_H pode ser vista na Figura 22. O máximo valor atingido pela concentração de H_2 relativa a n_H varia entre $2,6 \cdot 10^{-6}$ e $1,5 \cdot 10^{-5}$, nos modelos com n_H entre $5 \cdot 10^2 \text{ cm}^{-3}$ a 10^5 cm^{-3} considerados nesta seção. Nesse ponto de máxima concentração de H_2 na NP, a temperatura do gás é de cerca de 9000 K e a razão $n(H^+)/n(H)$ é cerca de 0,3.

Podemos também ver na Figura 22 que na parte mais externa da NP, depois do pico de concentração de H_2 , temos uma maior quantidade de H_2 em NPs menos densas. Isso acontece porque, embora ao aumentarmos a densidade da NP também estejamos aumentando a densidade de grãos ($n_g \propto R_{g-g} \cdot n_H$ e R_{g-g} é constante), a radiação que chega a essa região onde a formação de H_2 em grãos domina é mais diluída geometricamente, e portanto a taxa de fotodissociação em dois passos (processo de destruição do H_2 dominante nessa região) diminui.

3.6. Luminosidade da Estrela Central

O comportamento dos valores calculados de RM com a luminosidade da estrela central da NP é mostrado na Figura 23. Podemos observar que RM depende inversamente de L_* e enquanto esta aumenta duas ordens de grandeza RM diminui por um fator 20.

A Figura 24 mostra a distribuição do H_2 ao longo da NP, para diferentes valores de luminosidade da estrela central. Analogamente ao que vimos na seção anterior, quando tratamos da densidade da NP, verificamos que quanto menor é a luminosidade da estrela central, maior é o volume relativo (ao volume total da NP) da região semi-ionizada e, portanto, maiores são os valores de RM determinados. Estrelas centrais mais luminosas produzem regiões ionizadas mais extensas, i.e., $R_{máx}$ é maior. Observando a Figura 25, vemos que a região semi-ionizada produzida pelas estrelas mais luminosas é mais extensa quando normalizada pelo $R_{máx}$, embora

seja menos extensa absolutamente. Lembramos que é a largura relativa que importa no cálculo de RM , pois definimos essa grandeza para que fosse independente do tamanho da NP.

Figura 23 - RM em função da luminosidade da estrela central da NP.

Figura 24 – Distribuição da concentração de H_2 ao longo de NPs com diferentes valores de luminosidade de estrela central.

Figura 25 – Distribuição radial de $n(X)/n_H$ ao longo de dois modelos de NP com diferentes valores de luminosidade de estrela central.

Dentro da faixa de luminosidade estudada, o valor máximo da concentração de H_2 relativa à densidade total de núcleos de H varia entre $8,2 \cdot 10^{-6}$ e $4,0 \cdot 10^{-5}$, ou seja, um fator 20 assim como em *RM*. Nesse ponto de máximo, a temperatura do gás é de cerca de 8800 K e a razão $n(H^+)/n(H)$ é de aproximadamente 0,2, dentro do intervalo de luminosidades de estrela central estudado.

3.7. Temperatura da Estrela Central

A Figura 26 mostra *RM* como função da temperatura da estrela central da NP. No gráfico (a), além da curva da NP-padrão (com $R_{g-g} = 0,001$) também mostramos os cálculos de *RM* para $R_{g-g} = 0,1$ e $R_{g-g} = 0,01$ e sem considerar grãos. No gráfico (b) também mostramos a dependência de *RM* com a temperatura da estrela central da NP, mas dessa vez as curvas adicionadas são os cálculos com $L_* = 100L_\odot$ e $L_* = 10000L_\odot$, além da NP-padrão (com $L_* = 3000L_\odot$).

De imediato, podemos observar nestes gráficos que quanto mais alta a temperatura da estrela central, maior é o valor de *RM*. Estrelas mais quentes

produzem na NP uma região semi-ionizada mais extensa, favorecendo a produção de H_2 , principalmente através da reação de H com H^- (veja a Figura 27).

Figura 26 – Comportamento de RM com a temperatura da estrela. Curvas para diversos valores de (a) R_{g-g} e (b) L_* .

Figura 27 - Distribuição radial de $n(X)/n_H$ ao longo de dois modelos de NP com temperaturas de estrela central diferentes.

Tendo uma região semi-ionizada mais extensa, as NPs com estrela central mais quente também têm a região onde a reação em grãos domina mais extensa e,

por isso, vemos um aumento de RM com valores maiores de R_{g-g} conforme tomamos maiores valores de T_* (Figura 26, gráfico da esquerda). Já a influência de luminosidade em RM é maior para valores maiores de T_* (Figura 26, gráfico da direita) e para valores menores de luminosidade (seção 3.6), já que ambos os fatores, i.e., temperaturas maiores e luminosidades menores, favorecem a formação de uma região semi-ionizada com maior volume, principalmente quando combinados. A Figura 28 mostra a distribuição da densidade de H_2 ao longo de modelos de NP com diferentes temperaturas de estrela central.

Figura 28 – Distribuição da concentração de H_2 ao longo de NPs com diferentes valores de temperatura de estrela central.

Essa maior quantidade de H_2 em NPs com temperatura de estrela central mais alta pode explicar a chamada regra de Gatley (Zuckerman e Gatley 1988, Kastner et al. 1996), que afirma que é mais comum encontrar emissão da molécula H_2 em NPs com estrutura bipolar. Isso pode estar ocorrendo porque NPs bipolares têm estrela central tipicamente mais quente (Corradi & Schwarz 1995). A emissão da molécula H_2 não está somente associada com o toro, como mostra a Figura 2.

3.8. Lyman α e o Aquecimento dos Grãos

Neste trabalho, não levamos em consideração no aquecimento dos grãos o fluxo da linha Lyman α ($\text{Ly}\alpha$) incidente no grão. Ao considerarmos essa linha no equilíbrio radiativo um aumento máximo de 10% na temperatura dos grãos é observado. O impacto desse aumento de T_g em $n(\text{H}_2)/n_H$ é da ordem de 0,3% e em RM é da ordem de 0,01%. Assim, a não consideração desta linha não afeta as conclusões do presente trabalho.

3.9. Autoblindagem

A autoblindagem é a proteção proporcionada a uma espécie através da absorção da radiação por partículas desta mesma espécie, retirando fótons que poderiam destruir as partículas mais externas.

Seguindo a aproximação para a consideração da autoblindagem (“self-shielding”) na reação de fotodissociação em dois passos do H_2 descrita em Van der Werf (1989) (veja a seção 2.3.2 do presente trabalho), obtemos a Figura 29. Nesta figura mostramos a diferença provocada na concentração de H_2 pela consideração da autoblindagem na NP-padrão. Observe que o efeito da autoblindagem só é considerável na região mais externa, onde essa reação de fotodissociação em dois passos é o processo mais significativo de destruição. Nessa região os fótons acima de 13,6 eV já sofreram significativa diluição pelos átomos de H mais internos e a ionização do H_2 (que ocorre com fótons acima de 14,5 eV) já não é mais uma rota eficiente. Ao mesmo tempo, nessa região, já temos uma razoável densidade coluna de H_2 (densidade coluna de $\text{H}_2 \equiv N(\text{H}_2) > 10^{14} \text{ cm}^{-2}$) causando autoblindagem. A consideração da autoblindagem aumenta RM de $4,0 \cdot 10^{-6}$ para $2,1 \cdot 10^{-4}$, ou seja, um fator maior que cinquenta, para a NP-padrão.

A forma geral da curva permanece a mesma tanto com a autoblindagem como sem ela, pois, como já mencionamos, a presença da corcova é devida aos processos de recombinação do H_2^+ e de destacamento associativo entre H^- e H .

Figura 29 – O efeito da autoblindagem na distribuição de $n(H_2)/n_H$ ao longo da NP.

4. *Discussão Final*

Neste trabalho, mostramos que quantidades significativas de molécula H_2 podem sobreviver dentro da região ionizada de NPs. Também efetuamos o estudo da influência dos diversos parâmetros físicos de uma NP, incluindo propriedades da poeira, na concentração de H_2 .

Verificamos que os processos mais importantes de formação de H_2 dentro da região ionizada de NPs são:

- $H + H^- \rightarrow H_2 + e^-$
- $H_2^+ + e^- \rightarrow H_2 + h\nu$
- $H + H + \text{grão} \rightarrow H_2 + \text{grão}$

e os processos mais importantes de destruição são:

- $H_2 + h\nu \rightarrow H_2^+ + e^-$
- $H_2 + h\nu \rightarrow 2H$ (dois passos)
- $H_2 + H^+ \rightarrow H + H_2^+$

Cada um desses processos é importante em uma determinada região da NP (Figura 10). Os demais processos são sempre menos importantes que esses por um fator da ordem de 10^2 na taxa da reação.

A recombinação do H_2^+ é o processo de formação de H_2 mais importante na região mais interna da NP (região mais ionizada). Na parte mais interna da região de recombinação, o destacamento associativo entre H e H^- que domina a produção

de H_2 . A reação de formação na superfície de grãos é o processo mais importante na região mais externa da NP.

Dentre os processos de destruição de H_2 , a ionização dessa molécula é o processo mais significativo na parte mais interna e ionizada da nebulosa. Esse processo necessita de fótons com energia acima de 15,42 eV. Já na região mais externa da NP, como os fótons com energia acima de 13,6 eV já foram bastante absorvidos, o processo mais importante de destruição do H_2 é a fotodissociação do H_2 em dois passos, que ocorre com fótons entre 12,24 eV e 13,51 eV. Outro processo importante, principalmente na região intermediária a essas duas regiões citadas, é a troca de carga entre H_2 e H^+ , que é importante nas regiões onde tanto a concentração de H_2 quanto a concentração de H^+ são significativas.

Ao contrário do que acontece em NPs, a concentração de H^- em nuvens interestelares é muito pequena e, portanto, os processos mais efetivos de produção de H_2 nestes dois objetos são distintos.

As curvas da distribuição radial de densidade de H_2 ao longo dos modelos de NPs estudados mostram um máximo quando a temperatura do gás é de cerca de 9000 K e a razão $n(H^+)/n(H)$ tem valor aproximado de 0,3 (variando significativamente apenas quando mudamos muito a temperatura da estrela central). Seguindo na direção radial, após esse máximo há uma queda acentuada na concentração de H_2 , queda que somente é atenuada ou até revertida em crescimento, dependendo da área superficial de grãos disponível para a reação de formação de H_2 em grãos.

Mostramos que a razão entre as massas de H_2 e total de compostos de H dentro da região ionizada, RM , só depende acentuadamente de R_{g-g} quando esta grandeza ultrapassa 10^{-3} , ou seja, para valores acima da média dos valores encontrados em NPs por Stasinska & Szczerba (1999). As concentrações de H_2 determinadas com os distintos valores de R_{g-g} são diferentes nas regiões mais externas da região ionizada da NP, onde a reação em grãos passa a ser o processo

mais importante de formação de H_2 e como sabemos a taxa da formação de H_2 em grãos é diretamente proporcional a R_{g-g} .

Verificamos que grãos maiores adquirem temperaturas menores. Verificamos também que é importante considerar a eficiência Q_E^{abs} no cálculo da temperatura, pois caso contrário, obteríamos um limite inferior da temperatura, principalmente porque estaríamos superestimando a emissão do grão. Embora somente sejam mostrados os cálculos para a grafite, todos os outros materiais aqui tratados se comportam de forma análoga, já que suas propriedades ópticas têm comportamento semelhante.

Mostramos que determinar a temperatura do grão de forma mais precisa, através da equação (1), ou através de uma aproximação (o que deixaria a sub-rotina de determinação da temperatura do grão muito mais rápida e, por consequência, o código Aangaba), não causa variação significativa no valor calculado da concentração de H_2 . De fato, a diferença em se considerar a temperatura pela equação (1) e considerar a temperatura do grão ideal no código para o cálculo das concentrações, tem um impacto menor que 2% na concentração de H_2 ao longo da NP (em qualquer dos modelos tratados neste trabalho). A importância em calcularmos a temperatura dos grãos da forma precisa através da equação (1) reside no fato de que desejamos saber se o grão pode sobreviver ou sublimará nas circunstâncias locais.

Não encontramos diferenças significativas em RM ou na concentração de H_2 com a aplicação dos diversos materiais constituinte do grão. Embora as diferenças entre as propriedades dos distintos materiais tenham efeitos significativos na extinção da radiação pelos grãos e na temperatura, o impacto destas grandezas na concentração de H_2 mostrou-se pequeno.

Estudando RM em função dos parâmetros físicos da NP, verificamos que essa grandeza diminui com o aumento da densidade do gás e com o aumento da luminosidade da estrela central, mas aumenta significativamente com o aumento da

temperatura de estrela central. Essa maior quantidade de H_2 em NPs com estrela central mais quente pode explicar porque é mais comum encontrar emissão da molécula H_2 em NPs com estrutura bipolar (regra de Gatley), já que NPs com esse tipo morfológico têm estrela central tipicamente mais quente.

Greenhouse et al. (1988) inferem a partir de observações que a NP NGC6720 (Nebulosa do Anel) tem $RM = 6,9.10^{-5}$. Usando o valor por eles inferido para a razão grão-gás, $R_{g-g} = 3.10^{-2}$, e os mesmos parâmetros $T_* = 117000$ K, $L_* = 135 L_{\odot}$ e $n_H = 600 \text{ cm}^{-3}$ ($= n_e$) por eles admitidos, calculamos com o código de fotoionização Aangaba o valor de $RM = 3,3.10^{-5}$, que está razoavelmente próximo do valor de RM que eles inferem, mas que eles acreditam somente ser explicado pela existência de choques. No final desse artigo é estimada de forma muito simplificada a concentração de H_2 que seria esperada pelo equilíbrio de ionização apenas e eles concluem que dessa forma não é possível explicar tamanha concentração de H_2 . No entanto, nessa simplificação Greenhouse et al. (1988) deixam de considerar processos importantes de produção de H_2 dentro da região ionizada (eles somente consideram a reação em superfície de grãos e a sua fotodissociação).

5. Perspectivas Futuras

Nesta pesquisa verificamos que podemos encontrar quantidades razoáveis da molécula H_2 mesmo num ambiente hostil como as regiões ionizadas de NPs. Uma continuação natural para este trabalho seria efetuar uma análise detalhada da população dos níveis da molécula H_2 , o que possibilitaria a determinação da intensidade das linhas de emissão desta molécula no infravermelho e ultravioleta, permitindo a comparação com as observações. Com a adição do tratamento da população dos níveis moleculares seria possível a consideração mais precisa do processo de fotodissociação e da autoblindagem do H_2 . Além disso, seria possível considerar a presença desta molécula no equilíbrio térmico do gás da nebulosa.

O aperfeiçoamento das sub-rotinas desenvolvidas neste trabalho também pode ser importante. Poderiam ser incluídos outros processos físicos para completeza do estudo, por exemplo, o aquecimento do gás por emissão fotoelétrica dos grãos, que pode ser importante em regiões com grande fluxo UV presente, ou a destruição dos grãos por colisão com outras partículas (Evans 1994). Também poderíamos implementar o uso de uma distribuição de grãos com diversos tamanhos e materiais constituintes.

A eficiência da sub-rotina de determinação da temperatura dos grãos também poderia ser aumentada, utilizando um código mais rápido para resolver equações integrais simples. Isso possibilitaria que nossas sub-rotinas fossem também implementadas em códigos de fotoionização em três dimensões, onde tempo de processamento é um ponto fundamental.

Uma aplicação futura possível para as sub-rotinas desenvolvidas, utilizando semelhante metodologia, seria a aplicação ao estudo dos núcleos ativos de galáxias (AGNs).

6. Referências Bibliográficas

- Abel, T. G. 1995, *Molecular Hydrogen and the Very First Light in the Universe*,
Tese de Doutorado (Universidade de Regensburg)
- Abel, T. G., Anninos, P., Zhang, Y. & Norman, M.L 1997, *New A.*, **2**
- Aller, L. H. 1984, *Physics of Thermal Gaseous Nebulae* (Dordrecht: Reidel)
- Bergin, E. A., Langer, W. D. & Goldsmith, P.F. 1995, *ApJ*, **441**, 222
- Bernatowicz, T. J. & Walker, R. M. 1997, *Phys. Today*, **50**, 26
- Black, J. H. 1978, *ApJ*, **222**, 125
- Bohigas, J. 2001, *RevMexAA*, **37**, 237
- Bowers, C. W., Blair, W. P., Long, K. S. & Davidsen, A. F. 1995, *ApJ*, **444**, 748
- Cernicharo, J., Heras, A. M., Tielens, A. G. G. M., Pardo, J. R., Herpin, F.,
Guélin, M. & Waters, L. B. F. M. 2001, *ApJ*, **546**, L123
- Corradi, R. L. M. & Schwarz, H. E. 1995, *A&A*, **293**, 871
- Cox, P. 1997, em *IAU Symp. 178, Molecules in Astrophysics: Probes and
Process*, ed. E. F. van Dishoeck (Leiden: Kluwer), 477
- Cox, P., Omont, A., Huggins, P. J., Bachiller, R. & Forveille, T. 1992, *A&A*, **266**,
420
- de Jong, T. 1972, *A&A*, **20**, 263
- Draine, B. T. 1996, em *Astronomical Society of the Pacific Conference Series 97,
Polarimetry of the Interstellar Medium*, ed. W.G. Roberge e D.C.B. Whittet
(Nova Iorque: Rensselaer Polytechnic Institute), 16
- Draine, B. T. 2000, em *Encyclopedia of Astronomy & Astrophysics*, (Londres: IOP
Publishing e McMillan), 1266

- Draine, B. T. & Bertoldi, F. 1996, ApJ, **468**, 269
- Draine, B. T. & Bertoldi, F. 1999, em ESASP 427 , The Universe as Seen by ISSO
427, eds. P. Cox e M. F. Kessler (Londres: IOP Publishing e McMillan), 553
- Draine, B. T. & Lee, H. M. 1984, ApJ, **285**, 89
- Duley, W. W. 1996, MNRAS, **279**, 591
- Duley, W. W. & Williams. D. A. 1993, MNRAS, **260**, 37
- Duley, W. W. & Williams. D. A. 1984, Interstellar Chemistry (Londres: Academic
Press)
- Dyson, J. E. & Williams, D. A. 1997, The Physics of Interstellar Medium (Bristol:
Institute of Physics Publishing)
- Evans, A. 1994, The Dusty Universe (Inglaterra: John Wiley)
- Flower, D. R. 1969, MNRAS, **146**, 171
- Graham, J. R., Serabyn, E., Herbst, T. M., Mathews, K., Neugebauer, G.,
Soifer, B. T., Wilson, T. D. & Beckwith, S. 1993a, AJ, **105**, 250
- Graham, J. R., Herbst, T. M., Mathews, K., Neugebauer, G., Soifer, B. T., Serabyn,
E. & Beckwith, S. 1993b, ApJ, **408**, L105
- Greenhouse, M. A., Hayward, T. L & Thronson Jr., H. A. 1988, ApJ, **325**, 604
- Gruenwald, R. & Viegas, S. M. 1992, ApJS, **78**, 153.
- Guerrero, M. A., Villaver, E., Manchado, A., Garcia-Lario, P. & Prada, F.
2000, ApJS, **127**, 125
- Gussie, G. & Pritchett, C. 1988, J. Roy. Astron. Soc. Can, **82**, N^o. 2, 69
- Harrington, J. P., Monk, D. J. & Clegg, R. E. S. 1988, MNRAS, **231**, 577
- Highberger, J. L., Savage, C., Biegging, J. H. & Ziurys, L. M. 2001, ApJ, **562**, 790
- Hollenbach, D. & McKee, C. F. 1979, ApJ, **41**, 555
- Hollenbach, D. & McKee, C. F. 1989, ApJ, **342**, 306
- Hollenbach, D. & Salpeter, E. E. 1970, J. Chem. Phys., **53**, 79
- Hollenbach, D. & Salpeter, E. E. 1971, ApJ, **163**, 155

- Hora, J. L., Latter, W. B. & Deutch, L. K. 1999, *ApJS*, **124**, 195
- Jura, M. 1975, *ApJ*, **197**, 581
- Kastner, J. H., Weintraub, D. A., Gatley, I., Merrill, K. M. & Probst, R. G. 1996, *ApJ*, **462**, 777
- Kingsborough, R. L. & Barlow, R. L. 1994, *MNRAS*, **271**, 257
- Kwok, S., Hrivnak, B. J. & Geballe, T. R. 1994, in Proceedings of the 34th Herstmonceux Conference 1993, Circumstellar Media in the Late Stages of Evolution (London: Cambridge University Press)
- Laor, A. & Draine, B. T. 1993 *ApJ*, **402**, 441
- Li, A. & Draine, B. T. 2000 *ApJ*, **554**, 778
- Meixner, M.; Skinner, C. J.; Keto, E.; Zijlstra, A.; Arens, J. F. & Jernigan, J. G. 1996, *A&A*, **313**, 234
- Millar, T. J. & Williams, D. A. 1993, *Dust and Chemistry in Astronomy* (Grã-Bretanha: Institute of Physics Publishing)
- Pirronello, V., Liu, C., Shen, L. & Vidali, G. 1997 *ApJ*, **475**, L69
- Pottasch, S. R. 1984, *Planetary Nebulae* (Dordrecht: Reidel)
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T. & Flannery, B. P. 1994, *Numerical Recipes in FORTRAN* (EUA: Cambridge University Press)
- Rowan-Robinson, M. 1986, *MNRAS*, **219**, 737
- Schild, H. 1995, *A&A*, **297**, 246.
- Shapiro, P. R. & Kang, H. 1987 *ApJ*, **318**, 32
- Solomon, P. M. & Werner, M. W. 1971, *ApJ*, **165**, 41
- Stasinska, G. & Szczerba, R. 1999, *A&A*, **352**, 297
- Stasinska, G. & Tylenda, R. 1986, *A&A*, **155**, 137
- Stecher, T. P. & Williams, D. A. 1967, *ApJ*, **149**, L29
- Sternberg, A. & Dalgarno, A. 1989, *ApJ*, **338**, 197
- Storey, J. W. V. 1984, *MNRAS*, **206**, 521

- Storey, J. W. V., Webster, B. L., Payne, P. & Dopita, M.A. 1987, em
Astrochemistry, eds. M. S. Vardya & S. P. Tarafdar (Dordrecht: Reidel), 339
- Thronson, Jr., H. A. & Bally, J. 1986, ApJ, **300**, 749
- Tielens, A. G. G. M. & Hollenbach, D. 1985, ApJ, **291**, 722
- Treffers, R. R., Fink, U., Larson, H. P. & Gautier III, T. N. 1976, ApJ, **209**, 793
- Van der Werf, P. 1989, An HI Study of HII Regions and Dark Clouds, Tese de
Doutorado (Holanda: Univ. Groningen)
- Van Hoof, P. A. M., Van de Steene, G. C., Beintema, D. A., Martin, P. G., Pottasch,
S. R. & Ferland, G. J. 2000, ApJ, **532**, 384
- Viala, Y. P. 1986, A&A, **64**, 391
- Webster, B. L., Payne, P. W., Storey, J. W. V. & Dopita, M. A. 1988, MNRAS,
235, 533
- Wikramasinghe, N. C. 1967, Interstellar Grains (Londres: Chapman and Hall)
- Williams, D. A. 1999, A&G, **40**, 2.10
- Whittet, D. C. B. 1992, Dust in the Galactic Enviroment (Londres: Institute of
Physics Publishing)
- Zuckerman, B. & Gatley, I. 1988, ApJ, **324**, 501

Apêndice A - Constantes e Seções de Choque das Reações

A seguir apresentamos os coeficientes e seções de choque das reações químicas possíveis em ambientes ionizados típicos de NPs, escolhidas após extensa pesquisa na literatura especializada. Em todas as expressões utilizamos energia em eV e as demais unidades no sistema CGS.

1. Fotoionização

1.1. $H + h\nu \rightarrow H^+ + e^-$

Para a seção de choque de fotoionização do hidrogênio neutro utilizamos a expressão de Osterbrock (1974):

$$\sigma_E = A_0 \left(\frac{13,6}{E} \right)^4 \frac{\exp(4 - (4 \cdot \arctg \varepsilon_E) / \varepsilon_E)}{1 - \exp(-2\pi / \varepsilon_E)}$$

onde:

$$\varepsilon_E = \sqrt{\frac{E}{E_{th}}} - 1,$$

E é a energia do fóton em eV, $E_{th} = 13,6$ eV é o potencial de fotoionização do hidrogênio, $A_0 = 6,3 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$.

1.2. $\text{H}_2 + h\nu \rightarrow \text{H}_2^+ + \text{e}^-$

Usamos o ajuste de Shapiro & Kang (1987) para os valores dados em O'Neil & Reinhardt (1978):

$$\begin{aligned}\sigma(E) &= 6,2 \cdot 10^{-18} E - 9,4 \cdot 10^{-17} & \text{se } 15,42 < E < 16,5 \\ \sigma(E) &= 1,4 \cdot 10^{-18} E - 1,48 \cdot 10^{-17} & \text{se } 16,5 < E < 17,7 \\ \sigma(E) &= 2,5 \cdot 10^{-14} E^{-2,71} & \text{se } E > 17,7\end{aligned}$$

onde E é a energia do fóton em eV e $E_{th} = 15,42$ eV é o potencial de ionização da molécula H_2 .

2. Fotodissociação

2.1. $\text{H}_2 + h\nu \rightarrow 2\text{H}$ (direta)

A fotodissociação do H_2 direta do estado fundamental pela absorção do contínuo dos sistemas de Lyman & Werner foi estudada por Allison & Dalgarno (1969). Abel et al. (1997) efetuaram o seguinte ajuste para a seção de choque deste processo, usando os dados de Allison & Dalgarno (1970):

$$\sigma(E) = \frac{I}{y+I} (\sigma^{L0} + \sigma^{W0}) + \left[1 - \frac{I}{y+I} \right] (\sigma^{LI} + \sigma^{WI})$$

onde:

$$\begin{aligned}\sigma^{L0} &= 10^{-18} \text{ dex } (15,1289 - 1,05139 \cdot E) & \text{se } 14,675 < E < 16,820 \\ \sigma^{L0} &= 10^{-18} \text{ dex } (-31,41 + 1,8042 \cdot 10^{-2} \cdot E^3 - 4,2339 \cdot 10^{-5} \cdot E^5) & \text{se } 16,820 < E < 17,6 \\ \sigma^{W0} &= 10^{-18} \text{ dex } (13,5311 - 0,918261 \cdot E) & \text{se } 14,675 < E < 17,7\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma^{L1} &= 10^{-18} \text{ dex } (12,0218406 - 0,819429.E) & \text{se } 14,159 < E < 15,302 \\
\sigma^{L1} &= 10^{-18} \text{ dex } (16,04644 - 1,082438.E) & \text{se } 15,302 < E < 17,2 \\
\sigma^{W1} &= 10^{-18} \text{ dex } (12,87367 - 0,85088597.E) & \text{se } 14,159 < E < 17,2
\end{aligned}$$

E é a energia do fóton em eV, σ^{L0} e σ^{L1} são as seções de choque de absorção a partir do nível $v = 0$ do nível fundamental para o contínuo de Lyman. Analogamente, σ^{W0} e σ^{W1} são as seções de choque para $v = 0$ e $v = 1$, respectivamente, para o contínuo de Werner. y é razão entre as densidades de H_2 -orto e H_2 -para, normalmente adotada igual a 3, a razão entre os pesos estatísticos dos níveis envolvidos.

A energia limiar desse processo é de $E_{th} = 14,159$ eV e, portanto, esse processo não é importante na região onde o fluxo de radiação acima de 13,6 eV já foi muito absorvido pelo hidrogênio mais interno.

2.2. $H_2 + h\nu \rightarrow 2H$ (dois passos)

Outro processo pelo qual a fotodissociação do H_2 a partir do estado fundamental pode ocorrer é a absorção das bandas de Lyman e Werner, levando o H_2 a estados excitados eletronicamente e vibracionalmente, decaindo em seguida para o contínuo vibracional do estado fundamental. Esse é o chamado processo de dois passos de Solomon (Stecher & Williams 1967) e é importante quando não há quantidade significativa de fótons com energias $E > 13,6$ eV. Segundo Abel et al. (1997) o caminho dominante se dá pela absorção na banda de Lyman numa faixa estreita compreendendo $12,24 \text{ eV} < E < 13,51 \text{ eV}$. Como essa absorção se dá numa faixa estreita de energia, o espectro da radiação incidente não deve em geral variar muito, assim Abel et al. (1997) admitem que o espectro é constante no intervalo citado. A partir dessa aproximação, eles demonstram que o coeficiente desta reação pode ser escrito da seguinte forma:

$$k = 6,9 \cdot 10^{-19} \cdot J(\nu')$$

onde $J(\nu')$ é o fluxo de radiação em $\text{eV} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{Hz}^{-1}$ na energia $E = h\nu' = 12,87 \text{ eV}$ e k é dado em $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.

2.3. $\text{H}_2^+ + h\nu \rightarrow \text{H}^+ + \text{H}$

Shapiro & Kang (1987) efetuaram um ajuste para os valores da seção de choque de Dunn (1968):

$$\begin{aligned}\sigma &= \text{dex} (-40,97 + 6,03E - 0,50E^2 + 1,387 \cdot 10^{-2}E^3) & \text{se } 2,65 < E < 11,27 \\ \sigma &= \text{dex} (-30,26 + 2,79E - 0,184E^2 + 3,535 \cdot 10^{-3}E^3) & \text{se } 11,27 < E < 21,0\end{aligned}$$

onde $E_{th} = 2,65 \text{ eV}$ e E é a energia do fóton incidente, em eV. Esse não se mostra um bom ajuste para uso fora do intervalo citado. Para energias maiores que cerca de 35 eV a curva gerada por esta fórmula diverge. Também existe uma descontinuidade nesse ajuste. Abel (1995) elaborou um ajuste para os dados de Stancil (1994) que não se comporta dessa maneira:

$$\begin{aligned}\sigma &= \text{dex} (-1,6547717 \cdot 10^6 + 1,8660333 \cdot 10^5 \cdot \ln(E/h) - 7,8986431 \cdot 10^3 \cdot \ln(E/h)^2 + \\ &148,73693 \cdot \ln(E/h)^3 - 1,0513032 \cdot \ln(E/h)^4)\end{aligned}$$

onde $h = 4,136 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}$ é a constante de Planck e E é a energia do fóton incidente, em eV. Segundo o autor, esse ajuste resulta dentro de um erro de 2% dos pontos calculados de Stancil (1994) e não diverge para energias altas. No entanto, tal expressão leva a valores cerca de 10^{10} vezes maiores que os obtidos a partir da expressão de Shapiro & Kang (1987) e dos dados de Stancil (1994). Usamos a expressão de Abel (1995) corrigida desse fator 10^{10} que leva a valores semelhantes aos de Shapiro e Kang (1987), mas sem a descontinuidade.

2.4. $\text{H}_2^+ + h\nu \rightarrow 2\text{H}^+ + \text{e}^-$

Usamos o ajuste de Shapiro & Kang (1987) para os dados de Bates & Öpik (1968), válido no intervalo de 30 a 90 eV (Abel 1997):

$$\sigma = \text{dex} (-16,926 - 4,528.10^{-2}E + 2,238.10^{-4}E^2 + 4,245.10^{-7}E^3) \quad E > 30,0 \text{ eV}$$

Para energias maiores que 90 eV, essa expressão diverge para valores muito grandes, não mais sendo possível usá-la. Para esses valores admitimos seção de choque nula.

Como sugerido por Beck (1992)² admitimos que as seções de choque das reações 2.5 e 2.6 são iguais à seção de choque da reação 2.1.

3. Fotodestacamento

Usamos a expressão obtida por Shapiro & Kang (1987) a partir das expressões e valores de de Jong (1972):

$$\sigma = 7,928.10^5 (E - E_{th})^{3/2} . h^{3/2} . E^{-3} \quad E > 0,755$$

Nesta expressão E é a energia do fóton em eV e $E_{th} = 0,755$ eV é a energia mínima para a ocorrência desse processo. Segundo Abel (1995), a curva de Shapiro & Kang (1987) representa os valores de Wishart (1979) dentro de um erro máximo de aproximadamente 10%. Os dados de Wishart são acurados dentro de 1% na faixa de energia de 0,755 eV < E < 9,9 eV.

² Beck, H. (1993) comunicação pessoal

4. *Recombinação Radiativa*

4.1. $\text{H}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + \text{h}\nu$

Utilizamos a expressão para o coeficiente de recombinação do hidrogênio de Péquignot, Petitjean & Boisson (1991).

$$k = \frac{5,596 \cdot 10^{-13} \cdot T_4^{-0,6038}}{1 + 0,3436 \cdot T_4^{0,4479}}$$

onde $T_4 = T \cdot 10^{-4}$. Essa expressão “...é exata no limite de densidade eletrônica baixa (e.g. Seaton 1959) e aceitável na maioria das aplicações para nebulosas” (Péquignot et al. 1991).

4.2. $\text{H}_2^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{h}\nu$

Utilizamos a expressão fornecida em Mitchell & Deveau (1983):

$$k = 2,25 \cdot 10^{-6} \cdot T^{0,40}$$

5. *Recombinação Dissociativa*

5.1. $\text{H}_2^+ + \text{e}^- \rightarrow 2\text{H} + \text{h}\nu$

Utilizamos os resultados experimentais de McGowan et al. (1979), que são muito utilizados na literatura especializada (ver, por exemplo, Viala 1986). McGowan et al. (1979) verificam experimentalmente que, para a faixa de 110 K a 930 K, a variação com a temperatura do gás da constante desta reação se dá com

$T^{0.5}$. Usamos essa mesma expressão para valores fora do intervalo citado. A expressão obtida por McGowan et al. (1979) é:

$$k = 8,8.10^{-7} T^{0,5}$$

5.2. $\text{H}_3^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}$

Utilizamos a expressão de Bergin et al. (1995), pois está em bom acordo com valores experimentais recentes. Eles se baseiam em medidas recentes de Canosa et al. (1991) e Sundström et al. (1994), obtendo:

$$k = 2,6.10^{-6} . T^{-0,5}$$

5.3 $\text{H}_3^+ + \text{e}^- \rightarrow 3\text{H}$

Os coeficientes das reações 5.2 e 5.3 são considerados sempre iguais (veja McGowan et al. 1979, Prasad & Huntress 1980, Mitchell & Deveau 1983, Viala 1986, Hollenbach & McKee 1989, Bergin et al. 1995, por exemplo).

6. *Destacamento Associativo*

6.1. $\text{H} + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{e}^-$

Abel (1995) ajusta dados de Janev (1987) para $T > 1.160$ K e mostra que k é constante para temperaturas menores que esta, onde o valor coincide com o calculado por Dalgarno & Browne (1967). Este ajuste é, em média, 10% maior que valor de Bieniek (1980) e de Jong (1972). As expressões fornecidas por Abel (1995) são:

$$k = 1,428.10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1} \quad \text{se } T < 1.160 \text{ K}$$

$$k = \exp(-20,06913897 + 0,22898 \ln(k_B T) + 3,5998377 \cdot 10^{-2} \ln(k_B T)^2 - 4,55512 \cdot 10^{-3} \ln(k_B T)^3 - 3,10511544 \cdot 10^{-4} \ln(k_B T)^4 + 1,0732940 \cdot 10^{-4} \ln(k_B T)^5 - 8,36671960 \cdot 10^{-6} \ln(k_B T)^6 + 2,23830623 \cdot 10^{-7} \ln(k_B T)^7) \quad \text{se } T > 1.160 \text{ K}$$

que, na faixa de 1160 K a 100000 K, varia apenas entre $1,4 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ e cerca de $3,5 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. $k_B = 8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$ é a constante de Boltzmann.

6.2. $\text{H}^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_2^+ + \text{e}^-$

As expressões de Dalgarno (1984), Shapiro & Kang (1987) e Abel (1995) ajustadas aos dados de Poulaert et al. (1978) fornecem valores extremamente próximos. Utilizamos, então, a mais simples e sem descontinuidades, Dalgarno (1984):

$$k = 5,6 \cdot 10^{-9} \cdot T^{0,325}$$

As medidas de Poulaert et al. (1978) cobrem a faixa de temperatura de 11,6 K a 34.800 K. Abel (1995) afirma que seu ajuste está preciso dentro de 1% dessas medidas.

7. Troca de Carga

7.1. $\text{H}_2^+ + \text{H} \rightarrow \text{H}^+ + \text{H}_2$

Na literatura que este coeficiente é adotado constante (de Jong 1972, Karpas, Anicich & Huntress 1979, Prasad & Huntress 1980, Dalgarno 1984, Viala 1986, Hollenbach & McKee 1989, entre outros). Utilizaremos o valor mais freqüentemente citado: Karpas et al. (1979). Estes últimos determinaram

experimentalmente esse coeficiente, obtendo valores com acurácia melhor que 20%, determinando que esse valor é constante e vale:

$$k = (6,4 \pm 1,2).10^{-10} \text{ cm}^3.s^{-1}$$

7.2. $\text{H}_2 + \text{H}^+ \rightarrow \text{H} + \text{H}_2^+$

Encontramos diversas expressões para o coeficiente desta reação na literatura e eles diferem entre si em até cerca de duas ordens de grandeza. Por exemplo, Mitchell & Deveau (1983), Duley & Williams (1984), Shapiro & Kang (1987), Hollenbach & McKee (1989), Donahue & Shull (1991), Abel (1995). Este último ajusta uma expressão para os dados de Janev et al. (1987). Ainda segundo ele, esse ajuste deve ser considerado mais acurado do que o cálculo de Donahue & Shull (1991), por balanceamento detalhado, e que os valores de Karpas et al. (1979).

$$k = \exp(24,24914687 + 3,40082444.\ln(k_B T) - 3,89800396.\ln(k_B T)^2 + 2,04558782.\ln(k_B T)^3 - 0,541618285.\ln(k_B T)^4 + 8,41077503.10^{-2}.\ln(k_B T)^5 - 7,87902615.10^{-3}.\ln(k_B T)^6 + 4,13839842.10^{-4}.\ln(k_B T)^7 - 9,36345888.10^{-6}.\ln(k_B T)^8)$$

onde $k_B = 8,62.10^{-5} \text{ eV/K}$ é a constante de Boltzmann.

7.3. $\text{He}^+ + \text{H} \rightarrow \text{He} + \text{H}^+$

Em Jura & Dalgarno (1971) encontramos a expressão:

$$k = 1,9.10^{-15} \left(1 + \frac{5}{T} \right).$$

para a taxa desta reação, mas como usualmente ocorre nas regiões ionizadas estudadas pelo código Aangaba, $T \gg 5$ e assim podemos reescrever a equação como o termo constante que este código admite:

$$k = 1,9.10^{-15}$$

7.4. $\text{He}^{++} + \text{H} \rightarrow \text{He}^+ + \text{H}^+$

Mantivemos a expressão já usada pelo código Aangaba em sua forma original:

$$k = 1,56.10^{-13}$$

obtida de Arthurs & Hyslop (1957).

8. Neutralização

- 8.1. $\text{H}^- + \text{H}^+ \rightarrow 2\text{H}$**
- 8.2. $\text{H}_2^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}$**
- 8.3. $\text{H}_2^+ + \text{H}^- \rightarrow 3\text{H}$**
- 8.4. $\text{H}_3^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}_2$**

Prasad & Huntress (1980) admitem coeficientes iguais para todas as reações de neutralização. A reação 8.3 não consta desse artigo; no entanto Dalgarno (1984) e de Jong (1972) admitem esse coeficiente igual à da reação 8.2. Outras expressões para este coeficiente também são encontradas na literatura (de Jong 1972, Dalgarno 1984, Abel 1995, Donahue & Shull 1991) e todos os valores obtidos a partir dessas expressões são da mesma ordem de grandeza dos valores obtidos com a expressão de Prasad e Huntress (1980), transcrita a seguir:

$$k = 4,0.10^{-6}.T^{-0,5}$$

9. Associação Radiativa

9.1. $\text{H} + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2^+ + h\nu$

Usamos o ajuste elaborado por Shapiro & Kang (1987) para os cálculos efetuados por Ramaker & Peek (1976):

$$\begin{aligned} k &= 1,85 \cdot 10^{-23} \cdot T^{1,8} & \text{se } T < 6.700 \text{ K} \\ k &= 5,81 \cdot 10^{-16} (T/56.200)^{(-0,6657 \cdot \log(T/56.200))} & \text{se } T > 6.700 \text{ K} \end{aligned}$$

9.2. $2\text{H} \rightarrow \text{H}_2 + h\nu$

O valor que Malville (1964) estimou para o coeficiente desta reação a 100 K é o valor comumente adotado na literatura para qualquer faixa de temperatura:

$$k = 4 \cdot 10^{-27} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$$

9.3. $\text{H} + \text{e}^- \rightarrow \text{H}^- + h\nu$

De Jong (1972) calculou valores para o coeficiente desta reação que cobrem a faixa de temperaturas de 10 a 15.000 K, mas ele fornece uma expressão analítica na forma de integral que, em princípio, pode ser usada além dessa faixa. Abel (1997) fez um ajuste para os valores obtidos dessa expressão de de Jong (1972), que é válido no intervalo de 1 - 10^8 K, com precisão melhor que 1% na faixa entre 1 K - 100 K e de aproximadamente 1% na faixa de 100 K - 10^4 K.

$$\begin{aligned} k &= 1,429 \cdot 10^{-18} \cdot T^{(0,7620 + 0,1523 \cdot \log(T) - 0,03274 \cdot \log(T)^2)} & \text{se } T < 6000 \text{ K} \\ k &= 3,802 \cdot 10^{-17} \cdot T^{0,1998 \cdot \log(T)} \cdot \text{dex}(4,0415 \cdot 10^{-5} \cdot \log(T)^6 - 5,447 \cdot 10^{-3} \cdot \log(T)^4) & \text{se } T > 6000 \text{ K} \end{aligned}$$

A energia do fóton liberado nessa reação é $E = 0,755$ eV.

10. Reação Íon-Molécula

10.1 $\text{H}_2^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_3^+ + \text{H}$

Todos os autores pesquisados fornecem a constante desta reação independente da temperatura e com valor da ordem de $10^{-9} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ (Stecher & Williams 1970, Solomon & Werner 1971, Prasad & Huntress 1980, Herbst 1985, Theard & Huntress 1974 e Millar et al. 1997). Utilizamos o valor de Millar et al. (1997) porque foi obtido experimentalmente:

$$k = 2,08.10^{-9} \text{ cm}^3.\text{s}^{-1}$$

11. Processos Colisionais

11.1. $\text{H}_2 + \text{e}^- \rightarrow 2\text{H} + \text{e}^-$

Utilizamos a expressão de Hollenbach & McKee (1989) que fornecem uma expressão ajustada aos valores de seção de choque de Corrigan (1965):

$$k = 4,4.10^{-10}.T^{0,35} \exp(-102.000/T)$$

Observe que esta expressão somente resulta em valores significativos para temperaturas maiores que 4.000 K.

11.2. $\text{H}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + 2\text{e}^-$

Usamos a expressão fornecida em Shapiro & Kang (1987):

$$k = 4.10^{-12}.T.\exp(-8.750/T)$$

11.3. $\text{H} + \text{H}_2 \rightarrow 3\text{H}$

Utilizamos a modificação aconselhada por Shapiro & Kang (1987) ao ajuste de Lepp & Shull (1983). Esse ajuste leva em consideração a dependência desse coeficiente com a densidade do gás. Para os valores de densidade que usamos (10^3 e 10^5 cm^{-3}) essa dependência provoca neste coeficiente uma variação de duas ordens de grandeza. Pelas expressões a seguir podemos ver que essa reação somente é significativa para temperaturas acima de cerca de 3000 K

$$\log_{10} k = \log_{10} k_H - \log_{10} \left[\frac{k_H}{k_L} \right] \cdot \left(1 + \frac{n_H}{n_{cr}} \right)^{-1}$$

onde: $\log_{10}(n_{cr}) = 4,00 - 0,416 \cdot \log_{10}(T_4) - 0,327 \cdot (\log_{10}(T_4))^2$

$$T_4 = T \cdot 10^{-4}$$

$$k_H = 1,20 \cdot 10^{-9} \cdot \exp(-52.400/T)$$

$$k_L = 1,12 \cdot 10^{-10} \cdot \exp(-70.350/T)$$

e n_H é a densidade total de núcleos de hidrogênio.

Outros autores oferecem ajustes mais simples, como Donahue & Shull (1991), Abel (1995), Abel (1997), Millar et al. (1997), mas o artigo de Lepp & Shull (1983) permanece usado como base da expressão fornecida por esses autores ou é usado para comparação. Além disso, normalmente são ajustes para uma determinada densidade n_H . A diferença entre as expressões desses autores é muito grande. Por tudo isso, optamos por usar a expressão de Lepp & Shull (1983) com a modificação aconselhada por Shapiro & Kang (1987).

11.4. $\text{H}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2 + 2\text{H}$

Pelos mesmos motivos citados na reação 11.3, usamos a expressão de Shapiro & Kang (1989), que é também uma modificação ao ajuste feito por Lepp & Shull (1983). As demais observações feitas em 11.3 também são válidas aqui.

$$\log_{10} k = \log_{10} k_H - \log_{10} \left[\frac{k_H}{k_L} \right] \left(1 + \frac{n_H}{n_{cr}} \right)^{-1}$$

onde: $\log_{10}(n_{cr}) = 4,845 - 1,3 \cdot \log_{10}(T_4) + 1,62 \cdot (\log_{10}(T_4))^2$

$$T_4 = T \cdot 10^{-4}$$

$$k_H = 1,30 \cdot 10^{-9} \cdot \exp(-53.300/T)$$

$$k_L = 1,18 \cdot 10^{-10} \cdot \exp(-69.500/T)$$

e n_H é a densidade total de núcleos de hidrogênio.

Outros autores que fornecem ajustes alternativos, normalmente para casos de densidades particulares, são Jacobs et al. (1967), Mitchell & Deveau (1983), Duley & Williams (1984), Tielens & Hollenbach (1985), Abel (1995) e Millar et al. (1997).

11.5. $\text{H}^+ + \text{H} \rightarrow 2\text{H} + \text{e}^-$

Usamos a expressão de Izotov & Kolesnik (1984):

$$k = 5,3 \cdot 10^{-20} \cdot T^{2,17} \cdot \exp(-8.750/T)$$

A expressão de Izotov & Kolesnik (1984) e os valores calculados por Dalgarno & Browne (1967) estão em bom acordo.

11.6. $\text{H}_2 + \text{H}_3^+ \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}_2^+ + \text{H}$

Usamos a expressão de Hollenbach & McKee (1989):

$$k = 2,0 \cdot 10^{-12} T^{0,5} \exp(-71.600/T)$$

Usamos a expressão de Hollenbach & McKee (1989):

$$k = 2,0 \cdot 10^{-12} T^{0,5} \exp(-50.400/T)$$

Usamos a expressão de Izotov & Kolesnik (1984):

$$k = 9,69 \cdot 10^{-13} \cdot \exp(-11,323/(\ln T - 7,28))$$

Os citados autores afirmam que esta expressão é válida para temperaturas acima de 1500 K, mas ela só resulta em valores significativos em temperaturas acima de cerca de 4.000 K. Não é possível também usar essa expressão extrapolando em valores de T menores que 1.500 K, já que ela possui uma descontinuidade em $\ln T = 7,28$, ou seja, para $T = 1451$ K.

Usamos a expressão de Hollenbach & McKee (1989):

$$k = 2,8 \cdot 10^{-9} \exp(-18.800/T)$$

Para valores de T menores que 500 K, essa expressão retorna valores de k muito baixos.

12. Ionização Colisional

12.1. $\text{H} + \text{e}^- \rightarrow \text{H}^+ + 2\text{e}^-$

Mantivemos o coeficiente já usado pelo código Aangaba em sua forma original, o qual é um ajuste ao coeficiente de Arnaud e Rothenflug (1985):

$$k = 3.10^{-8} \left(\frac{T}{10^5} \right)^{0.5} \exp\left(\frac{-157800}{T} \right)$$

Esta taxa somente é importante em temperaturas altas.

12.2. $2\text{H} \rightarrow \text{H}^+ + \text{H} + \text{e}^-$

Usamos a expressão fornecida em Hollenbach & McKee (1989):

$$k = 9.8.10^{-15} T^{0.5} \exp(-158.000/T)$$

12.3. $2\text{H} \rightarrow \text{H}^+ + \text{H} + \text{e}^-$ (com passo intermediário)

Usamos a expressão fornecida em Hollenbach & McKee (1989):

$$k = 1.7.10^{-14} T^{0.5} \exp(-149.000/T)$$

13. Reação na Superfície de Grãos

13.1. $\text{H} + \text{H} + \text{grão} \rightarrow \text{H}_2 + \text{grão}$

Essa reação é discutida em detalhes na seção 2.4.

14. Processos Não Considerados

Esses dois processos colisionais não são considerados em nossa análise. Elas são reações de três corpos e por isso pouco importantes nas condições de densidade das NPs. Palla, Salpeter & Stahler (1983) dizem que essas reações somente são importantes para $T > 10^8 \text{ cm}^{-3}$. Jacobs et al. (1967) dão as expressões para as constantes desses processos como sendo, respectivamente:

$$\begin{aligned} k &= 5,5 \cdot 10^{-29} \cdot T^{-1} \\ k &= 6,9 \cdot 10^{-30} \cdot T^{-1} \end{aligned}$$

Não incluímos essa reação no código, pois segundo Ford, Kirby-Docken & Dalgarno (1975), sua taxa máxima atinge apenas cerca de 3,2% da taxa da reação 1.2 e, portanto não é importante na destruição do H_2 . Na produção do H^+ e do H , outros processos são mais significativos, como a ionização do H para o primeiro e a recombinação do H^+ para o segundo.

Stecher & Williams (1970) afirmam que esta reação é improvável. Não achamos mais nenhum outro comentário sobre esta reação.

Stecher & Williams (1970) afirmam que esta reação é pouco eficiente, perto da reação 10.1, na produção de H_3^+ . Não achamos mais nenhum outro comentário sobre esta reação.

O coeficiente dessa reação de dissociação colisional é encontrado em Hollenbach & McKee (1989):

$$k = 2,4 \cdot 10^{-12} T^{0,5} \exp(-30.700/T)$$

Não consideramos essa reação, pois mesmo no seu máximo valor (cerca de $10^{-14} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$), ela é uma rota menos significativa que 10.1 na destruição do H_2^+ e na produção do H^+ e do H outros processos são mais significativos, como a ionização do H para o primeiro e a recombinação do H^+ para o segundo.

A taxa dessa reação é muito baixa, perto de outras formas de destruição de H_2 ou formação de H_2^+ e elétrons. A expressão do coeficiente dessa reação é encontrada em de Hollenbach & McKee (1989):

$$k = 8,2 \cdot 10^{-12} \cdot T^{0,37} \cdot \exp(-181.000/T)$$

Referências

- Abel, T. G. 1995, Molecular Hydrogen and the Very First Light in the Universe, Tese de Doutorado (Univ. de Regensburg)
- Abel, T. G., Anninos, P., Zhang, Y. & Norman, M.L 1997, New A., **2**
- Allison, A. C. & Dalgarno, A. 1969, Atomic Data, **1**, 91
- Allison, A. C. & Dalgarno, A. 1970, Atomic Data, **1**, 298
- Arnaud, M. & Rothenflug, R. 1985, A&A, **60**, 425
- Arthurs. A. & Hyslop, J. 1957, Proc. Phys. Soc, **70**, 849
- Bates, D. R. & Öpik, U. 1968, J. Phys. B, **1**, 543

- Bergin, E. A., Langer, W. D. & Goldsmith, P.F. 1995, ApJ, **441**, 222
- Bieniek, R. J. 1980, J. Phys. B, **13**, 4405
- Canosa, A., Rowe, B. R., Mitchell, J. B. A., Gomet, J.C. & Rebrion, C. 1991, A&A, **248**, L19
- Corrigan, S. J. B. 1965, J. Chem. Phys., **43**, 4381
- Dalgarno, A. 1984, Molecular Astrophysics, Apostila do Curso (São Paulo: IAG-USP)
- Dalgarno, A. & Browne, J. C. 1967, ApJ, **149**, 231
- de Jong, T. 1972, A&A, **20**, 263
- Donahue, M. & Shull, J. M. 1991, ApJ, **383**, 511
- Duley, W. W. & Williams. D. A. 1984, Interstellar Chemistry (Londres: Academic Press)
- Dunn, G. H. 1968, Phys. Rev., **171**, 1
- Ford, A. L., Kirby-Docken, K. & Dalgarno, A. 1975, ApJ, **195**, 819
- Herbst, E. 1985, ApJ, **291**, 226
- Hollenbach, D. & McKee, C. F. 1989, ApJ, **342**, 306
- Izotov, Y. I. & Kolesnik, I. G. 1984, Sov. Astr., **28**, n^o 1, 15
- Jacobs, T. A., Giedt, R. R., Cohen, N. 1967, J. Chem. Phys., **47**, 54
- Janev, R. K., Langer, W. D., Evans Jr., K & Post, Jr., D. E. 1987, Elementary Processes In Hydrogen-Helium Plasmas (Springer-Verlag)
- Jura, M. & Dalgarno, A. 1971, A&A, **14**, 242
- Karpas, Z., Anicich, V. & Huntress Jr., W. T. 1979, J. Chem. Phys., **70**, 2877
- Lepp, S. & Shull, J. M. 1983, ApJ, **270**, 578
- Malville, J. M 1964, ApJ, **139**, 198
- McGowan, J. W., Mul, P. M., D'Angelo, V. S. D., Millar, T. J., Farquhar, P. R. A. & Willacy, K. 1997, A&AS, **121**, 139
- Millar, T. J., Farquhar, P. R. A. & Willacy, K. 1997, A&AS, **121**, 139

- Mitchell, G. F. & Deveau, T. J. 1983, ApJ, **266**, 646
- O’Neil, S. V. & Reinhardt, W. 1978, J. Chem. Phys., **69**, 2126
- Osterbrock, D. E. 1974, Astrophysics of Gaseous Nebulae, (São Francisco: W.H. Freeman)
- Palla, F., Salpeter, E. E. & Stahler, S. W. 1983, ApJ, **271**, 632
- Péquignot, D., Petitjean, P. & Boisson, C. 1991, A&A, **251**, 680
- Poulaert, G., Brouillard, F., Claes, W., McGowan, J. W. & Van Wassenhove, G. 1978, J. Phys. B, **11**, L671
- Prasad, S. S. & Huntress Jr., W. T. 1980, ApJS, **43**, 1
- Ramaker, D. E. & Peek, J. M. 1976, Phys. Rev. A, **13**, 58
- Seaton, M. J. 1959, MNRAS, **119**, 81
- Shapiro, P. R. & Kang, H. 1987 ApJ, **318**, 32
- Solomon, P. M. & Werner, M. W. 1971, ApJ, **165**, 41
- Stancil, P. C. 1994, ApJ, **430**, 360
- Stecher, T. P. & Williams, D. A. 1967, ApJ, **149**, L29
- Stecher, T. P. & Williams, D. A. 1970, ApJ, **7**, 59
- Sundström, G., et al. 1994, Science, **263**, 785
- Theard, L. P. & Huntress, W. T. 1974, J. Chem. Phys., **60**, 2840
- Tielens, A. G. G. M. & Hollenbach, D. 1985, ApJ, **291**, 722
- Viala, Y. P. 1986, A&A, **64**, 391
- Wishart, A. W. 1979, MNRAS, **187**, 59P

Apêndice B - Temperatura da Estrela Central e Classificação Morfológica de NPs

Os dados utilizados para construir os histogramas da Figura 3 são transcritos na Tabela B.1 a seguir. A primeira coluna da tabela fornece a identificação do objeto. A segunda coluna fornece a temperatura da estrela central em unidades de 10^3 K. As temperaturas utilizadas são escolhidas dando preferência aos métodos de determinação com maior confiança pela comunidade científica em geral, ou seja, procuramos por valores obtidos da temperatura de Zanstra do HeII ($T_z[HeII]$). Quando não encontramos tal valor, procuramos pela temperatura de Zanstra do HI ($T_z[HI]$) e, na ausência desta, usamos a temperatura de Stoy e métodos derivados deste (T_{stoy}). Quando encontramos mais que um valor para a temperatura dentro do mesmo método, calculamos a média desses valores. Valores que se desviam mais que 20% do valor médio das demais temperaturas obtidas do objeto não são considerados no valor final da temperatura. Na terceira coluna da tabela, indicamos o método de determinação da temperatura e na coluna seguinte, as referências de onde os valores foram obtidos.

A classificação morfológica e a referência da publicação de onde ela foi obtida são dadas na quinta e na sexta coluna, respectivamente. Utilizamos as seguintes abreviações: E para NPs elípticas (anel ou disco), B para bipolares, PB para provavelmente bipolares, P para peculiares e I para irregulares.

Tabela B.1
Temperatura da Estrela Central e Classificação Morfológica de NPs.

Objeto	T* (10 ³ K)	Método	Referências para T* ^(a)	Classificação Morfológica	Referências para Classificação ^(b)
A 1	31,0	Tz(HI)	1	E	1
A39	86,0	Tz(HeII)	2	E	2
A71	130,0	Tz(HeII)	2	E	2
A73	66,0	Tz(HI)	2, 3	E	1
A78	69,5	Tz(HeII)	2, 4	E	1
A79	30,5	Tz(HI)	2, 5	B	1
A80	121,4	Tz(HI)	2, 6	B	2
A84	107,0	Tz(HeII)	1, 2	B	2
Ba1	88,0	Tz(HeII)	1, 2	E	2
BD+303639	64,0	Tz(HeII)	7	B	1
BV1	205,0	Tz(HeII)	8	B	3
BV5-1	219,0	Tz(HeII)	9	B	4
H2- 1	29,3	Tz(HI)	10, 11	P	5
Hb 5	131,0	Tz(HeII)	10	B	1
Hb12	43,0	Tz(HI)	6, 12	B	6
He1- 6	121,0	Tz(HeII)	1	PB	7
He2- 11	89,0	Tz(HI)	3, 12	B	1
He2- 15	211,0	Tz(HI)	3, 13	PB	7
He2- 18	110,2	Tstoy	14	PB	7
He2- 25	29,0	Tz(HI)	3, 12	B	7
He2- 37	174,2	Tstoy	15	B	1
He2- 48	32,0	Tz(HI)	10	PB	7
He2- 70	145,7	Tstoy	14	PB	7
He2- 84	182,8	Tstoy	14	B	1
He2- 95	50,5	Tz(HeII)	10	B	1
He2- 99	26,0	Tz(HI)	3, 10	B	5
He2-111	196,9	Tstoy	15	B	8
He2-114	135,0	Tz(HI)	3, 13	B	1
He2-123	47,5	Tz(HI)	3, 12	PB	7
He2-131	42,0	Tz(HeII)	10	B	5
He2-161	35,1	Tstoy	15	B	1
He2-169	123,9	Tstoy	15	B	8
He2-428	58,1	Tstoy	15	B	3
Hu1-1	110,0	Tz(HeII)	8	E	2
Hu1-2	136,0	Tz(HeII)	5, 8	B	2
IC 351	90,0	Tz(HeII)	16	E	2
IC 418	37,3	Tz(HI)	3, 5, 7, 11, 12, 16, 17, 18	E	6
IC2149	31,4	Tz(HI)	5, 12, 16, 18	P	6
IC2165	136,8	Tz(HeII)	3, 16, 18	E	8
IC3568	53,9	Tz(HeII)	5, 7, 11, 12	E	6
IC4406	105,5	Tz(HeII)	2, 19	B	1
IC4593	50,0	Tz(HeII)	10	I	6
IC4997	61,0	Tz(HeII)	16	E	1

Objeto	T* (10³ K)	Método	Referências para T* ^(a)	Classificação Morfológica	Referências para Classificação ^(b)
IC5117	91,0	Tz(HeII)	5, 12	E	1
IC5217	70,5	Tz(HeII)	12, 16	PB	7
J320	59,0	Tz(HeII)	10, 5, 12	B	6
J900	125,7	Tz(HeII)	2, 10, 16	B	6
K3-72	136,0	Tz(HeII)	9	B	1
K3-92	86,0	Tz(HeII)	1, 9	B	2
K3-94	157,0	Tz(HeII)	9	B	4
K4-55	201,0	Tz(HeII)	9	B	3
M1- 1	38,0	Tz(HI)	6	E	2
M1- 7	111,0	Tz(HeII)	8	B	2
M1- 8	155,0	Tz(HeII)	8	B	2
M1- 9	64,0	Tz(HeII)	10	E	2
M1-13	118,1	Tstoy	14	B	1
M1-16	81,0	Tz(HeII)	3	B	6
M1-41	190,0	Tz(HeII)	9	B	4
M1-46	49,5	Tz(HeII)	10	B	5
M1-57	76,0	Tz(HeII)	10	B	3
M1-75	358,0	Tz(HeII)	9	B	3
M1-79	110,0	Tz(HeII)	8	B	2
M2- 9	44,0	Tz(HI)	12	B	6
M2-46	25,3	Tstoy	15	B	3
M2-52	210,0	Tz(HeII)	9	B	3
M2-53	116,5	Tz(HeII)	1, 9	E	4
M2-54	19,5	Tz(HI)	6	E	2
M3- 2	104,0	Tz(HeII)	1, 3, 8	B	1
M3- 3	105,0	Tz(HeII)	1	PB	7
M3-39	99,8	Tstoy	14	PB	7
M4-14	85,8	Tstoy	14	B	3
M4-18	27,0	Tz(HI)	5	E	6
Me1-1	33,9	Tz(HI)	6	B	2
Me2-1	153,8	Tz(HeII)	3, 10, 19	E	1
Me2-2	59,0	Tz(HeII)	12	E	2
Mz1	139,0	Tz(HI)	13	B	1
Mz3	83,0	Tz(HI)	10	B	1
N 40	28,2	Tz(HI)	7, 12, 16	E	6
N 246	89,1	Tz(HeII)	1, 2, 4, 7, 16, 20	E	1
N 650	142,6	Tz(HeII)	1, 2, 5, 16	B	1
N1360	80,4	Tz(HeII)	1, 2, 4, 5, 7, 10, 11, 17	I	1
N1535	68,0	Tz(HeII)	7, 8, 11, 16	E	1
N2022	104,7	Tz(HeII)	16, 18, 19	E	6
N2346	112,0	Tstoy	15	B	6
N2371-2	100,3	Tz(HeII)	2, 7, 16	B	1
N2392	68,0	Tz(HeII)	5, 7, 11, 16	E	6
N2440	257,5	Tz(HeII)	3, 5, 16, 19, 20, 21	B	6
N2452	124,3	Tz(HeII)	3, 16, 19, 20	I	1
N2474-5	98,0	Tz(HeII)	2	B	1

Objeto	T* (10 ³ K)	Método	Referências para T* ^(a)	Classificação Morfológica	Referências para Classificação ^(b)
N2610	100,0	Tz(HeII)	2, 3	E	1
N2792	120,1	Tz(HeII)	3, 19, 20, 22	E	1
N2818	215,0	Tz(HeII)	19	B	1
N2899	285,0	Tz(HI)	3, 13	B	1
N3132	77,1	Tz(HeII)	16, 17, 20	B	9
N3195	88,0	Tz(HeII)	3	E	1
N3242	87,8	Tz(HeII)	3, 7, 11, 16, 17, 19, 20	E	6
N3587	111,0	Tz(HeII)	1, 2, 7, 16	E	1
N3699	260,0	Tz(HI)	13	B	1
N4071	118,0	Tz(HeII)	3	B	1
N4361	94,7	Tz(HeII)	1, 2, 3, 4, 7, 11, 16, 17	I	1
N5189	101,8	Tz(HeII)	19, 20, 21, 22	B	1
N6058	69,5	Tz(HeII)	2, 5	E	1
N6072	147,3	Tz(HeII)	1, 3, 19, 21	B	1
N6153	97,1	Tz(HeII)	3, 19, 21	E	1
N6210	62,6	Tz(HeII)	5, 7, 10, 12, 16, 17, 18	I	6
N6302	225,0	Tz(HeII)	3, 10	B	1
N6309	96,0	Tz(HeII)	5, 16, 19	PB	7
N6445	185,2	Tz(HeII)	2, 8, 16, 19, 21	B	1
N6537	185,0	Tz(HI)	5, 8, 13, 16, 19, 20, 21	B	1
N6543	59,5	Tz(HeII)	7, 16	P	6
N6572	65,7	Tz(HeII)	16, 17, 18, 19, 20	E	6
N6720	120,2	Tz(HeII)	2, 16, 20	B	6
N6741	173,3	Tz(HeII)	10, 16, 19	E	1
N6772	123,8	Tz(HeII)	2, 8, 19, 21	E	1
N6778	93,0	Tz(HeII)	19	B	1
N6781	98,0	Tz(HeII)	1, 2, 8, 19	E	1
N6803	71,4	Tz(HeII)	12, 20	E	6
N6818	154,8	Tz(HeII)	18, 19	E	1
N6826	57,0	Tz(HeII)	7, 16	E	6
N6853	139,0	Tz(HeII)	2, 16, 23	B	1
N6879	34,7	Tz(HI)	6	E	2
N6881	88,5	Tz(HeII)	5, 8	B	3
N6884	89,1	Tz(HeII)	20	E	1
N6886	127,5	Tz(HeII)	16, 20	B	2
N7009	87,7	Tz(HeII)	11, 19, 20	E	6
N7026	79,1	Tz(HeII)	5, 16, 20	B	1
N7027	299,6	Tz(HeII)	16, 20, 24, 25	B	1
N7048	154,5	Tz(HeII)	2, 8	E	1
N7293	105,7	Tz(HeII)	1, 2, 10, 11, 16, 23	B	1
N7354	97,7	Tz(HeII)	5	E	1
N7662	107,3	Tz(HeII)	5, 7, 16, 20	E	6
Na1	75,0	Tz(HeII)	3	E	2
Pe1- 7	69,0	Tz(HeII)	10	P	5
Sh1-89	145,0	Tz(HeII)	1	B	1
Sh2-71	246,5	Tz(HeII)	2, 9	I	2

Objeto	T* (10 ³ K)	Método	Referências para T* ^(a)	Classificação Morfológica	Referências para Classificação ^(b)
Vy1-1	56,0	Tz(HeII)	5, 12	E	2
Vy2-3	60,0	Tz(HeII)	5	E	2
We1-4	154,0	Tz(HeII)	9	B	1

(a) Referências para a temperatura da estrela central:

(1) Kaler, Shaw & Kwitter (1990); (2) Kaler (1983); (3) Shaw & Kaler (1989); (4) Kaler (1981); (5) Shaw & Kaler (1985); (6) Gorny, Stasinska & Tylanda (1997); (7) Pottasch et al. (1978); (8) Jacoby & Kaler (1989); (9) Bohigas (2001); (10) Gleizes, Acker & Stenholm (1989); (11) Mendez, Kudrisky & Herrero (1992); (12) Kaler & Jacoby (1991); (13) Kaler e Jacoby (1989); (14) Preite-Martinez et al. (1991); (15) Preite-Martinez et al. (1989); (16) Pottasch (1984); (17) Freitas-Pacheco, Codina & Viadana (1986); (18) Martin (1981); (19) Gathier & Pottasch (1988); (20) Gathier & Pottasch (1989); (21) Reay et al. (1984); (22) Viadana & Pacheco; (23) Bohlin, Harrington e Stecher (1982); (24) Walton et al. (1988); (25) Pottasch et al. (1982).

(b) Referências para a classificação morfológica:

(1) Kastner et al. 1996; (2) Gorny, S.K., Stasinska, G., Tylanda, R. 1997; (3) Guerrero et al. (2000); (4) Bohigas (2001); (5) Gleizes, Acker & Stenholm (1989); (6) Hora et al. (1999); (7) Corradi & Schwarz (1995); (8) Webster et al. (1988); (9) Monteiro et al. (2000).

Referências

- Bohigas, J. 2001, RevMexAA, **37**, 237
- Bohlin, R. C., Harrington, J. P. & Stecher, T. P. 1982, ApJ, **252**, 635
- Corradi, R. L. M. & Schwarz, H. E. 1995, A&A, **293**, 871
- Freitas-Pacheco, J. A., Codina, S. J. & Viadana, L. 1986, MNRAS, **220**, 107
- Gathier, R. & Pottasch, S. R. 1988, A&A, **197**, 266
- Gathier, R. & Pottasch, S. R. 1989, A&A, **209**, 369
- Gleizes, F., Acker, A. & Stenholm, B. 1989, A&A, **222**, 237
- Gorny, S.K., Stasinska, G. & Tylanda, R. 1997, A&A, **318**, 256
- Guerrero, M. A., Villaver, E., Manchado, A., Garcia-Lario, P. & Prada, F. 2000, ApJS, **127**, 125
- Hora, J. L., Latter, W. B. & Deutch, L. K. 1999, ApJS, **124**, 195
- Jacoby, G. H. & Kaler, J. B. 1989, AJ, **98**, 1662

- Kaler, J. B. 1981, ApJ, **250**, L31
- Kaler, J. B. 1983, ApJ, **271**, 188
- Kaler, J. B. & Jacoby, G. H. 1989, ApJ, **345**, 871
- Kaler, J. B. & Jacoby, G. H. 1991, ApJ, **372**, 215
- Kaler, J. B., Shaw, R. A. & Kwitter, K. B. 1990, ApJ, **359**, 392
- Kastner, J. H., Weintraub, D. A., Gatley, I., Merrill, K. M. & Probst, R. G. 1996, ApJ, **462**, 777
- Martin, W. 1981, A&A, **98**, 328
- Monteiro, H., Morisset, C., Gruenwald, R. & Viegas, S. M. 2000, ApJ, **537**, 853
- Méndez, R. H., Kudritzky, R. P. & Herrero, A. 1992, A&A, **260**, 329
- Pottasch, S. R., Goss, W. M., Arnal, E. M. & Gathier, R. 1982, A&A, **106**, 229
- Pottasch, S. R., Weisselius, P. R., Wu, C. C., Fieten, H. & Duinen, R. J. 1978, A&A, **62**, 95
- Pottasch, S. R. 1984, Planetary Nebulae (Dordrecht: Reidel)
- Preite-Martinez, A., Acker, A., Köppen, J. & Stenholm, B. 1989, A&AS, **81**, 309
- Preite-Martinez, A., Acker, A., Köppen, J. & Stenholm, B. 1991, A&AS, **88**, 121
- Reay, N. K., Pottasch, S. R., Atherton, P. D. & Taylor, K. 1984, A&A, **137**, 113
- Shaw, R. A. & Kaler, J. B. 1985, ApJ, **295**, 537
- Shaw, R. A. & Kaler, J. B. 1989, ApJS, **69**, 495
- Viadana, L & Freitas-Pacheco, J. A. 1985, Rev. Br. Fís. , **15**, 70
- Walton, N. A., Pottasch, S. R., Reay, N.K. & Taylor, A. R. 1988, ApJ, **200**, L21
- Webster, B. L., Payne, P. W., Storey, J. W. V. & Dopita, M. A. 1988, MNRAS, **235**, 533