

1 Introdução

A maior parte do espaço sideral encontra-se a temperaturas da ordem da dezena de Kelvin. Nessas regiões e nestas temperaturas, gases formados por moléculas relativamente simples como nitrogênio (N_2), oxigênio (O_2), água (H_2O), monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO_2), amônia (NH_3) e metano (CH_4) condensam-se formando gelos, os quais podem ser observados em cometas, na superfície de satélites de planetas gigantes e em mantos de grãos interestelares. As regiões quentes do cosmos são emissoras de diversos tipos de radiação, algumas delas ionizantes, como os fótons UV e os íons rápidos constituintes dos ventos estelares e dos raios cósmicos galácticos. As interações de tais radiações com gelos cósmicos dependem do ambiente astrofísico em questão: no sistema solar, os fótons UV dominam a ionização de superfícies cobertas de gelo, como as de cometas de curto período. O vento solar molda e interage físico-quimicamente com as caudas cometárias formadas por uma fase gasosa formada por partículas (átomos, moléculas, agregados moleculares e poeira) neutras ou ionizadas. Na nuvem de Oort, cujas distâncias ao Sol variam entre $10^4 - 10^5$ UA (1 UA $\sim 1,5 \times 10^9$ m), os raios cósmicos galácticos tornam-se mais importantes. O mesmo ocorre no meio interestelar: em regiões de alta densidade de partículas, como nas nuvens densas e quiescentes, somente os raios cósmicos galácticos conseguem penetrar em seus interiores e interagir com os mantos de gelo dos grãos de poeira.

Este trabalho é dedicado ao estudo da interação íon-gelo, assim como de alguns fenômenos resultantes da relaxação do sistema, através da simulação em laboratório dos eventos cósmicos descritos. São analisados os efeitos da irradiação de gelos por íons pesados e rápidos (MeV) que sejam representativos daqueles presentes no vento solar e nos raios cósmicos galácticos.

A interação íon-sólido é caracterizada por uma sucessão de colisões entre o projétil e átomos do alvo, resultando na transferência continuada de energia do íon ao sólido. A taxa de perda de energia cinética do íon em função da distância percorrida no sólido é denominada poder de frenagem ou *stopping power*. Existem dois mecanismos de frenagem do projétil: para íons com altas energias, a transferência de energia ocorre por interação coulombiana com elétrons do alvo (*stopping power* eletrônico); para projéteis com baixas energias a transferência ocorre através de colisões elásticas com núcleos atômicos dos átomos do alvo (*stopping power* nuclear). A relaxação da energia no alvo gera múltiplos processos como aquecimento, modificação da estrutura do alvo, reações químicas e dessorção de moléculas presentes na superfície (sublimação e *sputtering*).

Medidas recentes mostram que prótons e partículas-alfa são os principais constituintes tanto no vento solar quanto nos raios cósmicos galácticos (Mewaldt et al. 2007; Shen et al. 2004). No vento solar, a distribuição de energia/massa das partículas apresenta um máximo em aproximadamente 1 keV/u e, assim, a transferência de energia do íon para superfícies de gelos do sistema solar ocorre principalmente no regime nuclear. As distribuições de partículas dos raios cósmicos são conhecidas em um intervalo restrito de energia /massa (de 1 MeV/u a 100 GeV/u) devido à influência do vento solar dominante no intervalo de energia /massa < 1 MeV/u. Nesse intervalo de energia /massa, o íon interage com o gelo principalmente no regime eletrônico.

Desde as primeiras medidas de dessorção em gelos de água induzida pelo bombardeio de íons de keV – MeV (Brown et al. 1978), diversos gelos de interesse astrofísico vem sendo estudados sistematicamente em vários laboratórios. Os principais efeitos estudados são a dessorção de moléculas da superfície e as mudanças na composição química inicial do gelo. Brown et al. (1978, 1982, 1984) irradiaram gelos de H₂O, CO e CO₂ com íons rápidos (energia da ordem de MeV) de H, He, C, O e F com diferentes valores de energia /massa e utilizaram a técnica RBS (Rutherford BackScattering) para medir o rendimento de dessorção (número de moléculas ejetadas do gelo por impacto de íon). Eles foram os primeiros a medir rendimentos totais de dessorção de partículas (essencialmente neutras) do gelo de H₂O irradiado por íons em um grande

intervalo de energias. Os rendimentos por eles encontrados, que variam entre 10^{-1} – 10^3 moléculas/impacto, obedecem a uma relação quadrática empírica entre o rendimento de dessorção e a taxa de perda de energia eletrônica do íon.

As mudanças na composição química do gelo se dão por dissociações e por formação de novas espécies moleculares, cuja identificação e taxa de formação são obtidas pela técnica de espectrometria de infravermelho. A fim de simular as condições do ambiente astrofísico, gelos formados das espécies moleculares mais abundantes no espaço (como H_2O , CO , CO_2 e etc) foram irradiados com prótons e alfas de energias variando entre keV e MeV. A destruição (no sentido de dissociação) dessas moléculas no gelo, assim como a síntese de novas espécies moleculares, foram analisadas utilizando a espectrometria de infravermelho. Diversas espécies moleculares, em particular aquelas mais complexas do que as que compõem o gelo antes da irradiação, foram identificadas nos espectros de infravermelho. Dentre as moléculas formadas, destacam-se o ácido carbônico (H_2CO_3) formado da irradiação de H_2O+CO_2 (Moore & Khanna 1991; Brucato et al. 1997); o formaldeído (H_2CO), o metanol (CH_3OH), etanol (C_2H_6O) e o ácido fórmico ($HCOOH$), formados a partir da irradiação da mistura H_2O e CO (Moore et al. 1991; DelloRusso et al. 1993). Em todos estes experimentos o íon utilizado como projétil foi o de próton de keV. Gelos puros também foram irradiados e analisados com espectrometria infravermelha, como foi o caso do gelo de CO (Gerakines & Moore 2001; Jamieson et al 2006; Trottier & Brooks 2004; Palumbo et al. 2008). As principais informações quantitativas extraídas destes experimentos são as *seções de choque de destruição e de formação* de moléculas no gelo. Essas informações são muito úteis na construção de modelos químicos para a síntese de moléculas no espaço.

As medidas de seções de choque e de rendimentos de dessorção de gelos de interesse astrofísico irradiados com íons pesados e rápidos são escassas na literatura. Além daqueles trabalhos citados anteriormente, que utilizaram RBS como técnica de análise, existem outros que utilizaram a espectrometria de massa para analisar os efeitos da irradiação nas superfícies de gelos por íons pesados de keV (Haring et al. 1984; Chrisey et al. 1986). Os efeitos da irradiação de gelos utilizando íons pesados e rápidos (MeV) começaram a ser investigados por

Collado et al. (2004) através da técnica PDMS (Plasma Desorption Mass Spectrometry): íons secundários emitidos pela superfície de gelos de água irradiados por fragmentos de fissão do nuclídeo radioativo califórnio 252 são analisados por seus tempos de voo (TOF). Os fragmentos de fissão do ^{252}Cf (entre os quais o Ba é um nuclídeo típico) possuem energias de ~65 MeV. Além do gelo de água, diversos outros foram analisados por essa técnica como os de CO, NH₃, H₂O+CO₂, CO+CO₂ e CO+NH₃. (Farenzena et al. 2005, 2006; Ponciano et al. 2005, 2006; Martinez et al. 2006, 2007). Um diferencial da espectrometria de massa é a possibilidade de analisar algumas espécies que não absorvem radiação infravermelha e que, por isso, não são detectadas por espectrometria infravermelha. Em contrapartida, a espectrometria de massa analisa apenas as formas iônicas, perdendo-se informação sobre as moléculas neutras que representam mais de 99% das moléculas dessorvidas pela irradiação. Além disso, o fato da espectrometria de massa PDMS ser uma técnica de análise de superfície, os compostos químicos no interior do gelo ficam inacessíveis a ela, dificultando sobremaneira a obtenção de informação sobre os efeitos da irradiação em todo o volume da amostra.

Neste trabalho, a espectrometria de infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) foi a técnica de análise empregada para determinar as modificações na concentração das espécies químicas no gelo. As análises foram realizadas no laboratório CIMAP (Centre de Recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique) que opera junto ao laboratório GANIL (Grand Accélérateur National d'Ions Lourds) localizado em Caen, Normandia, França. Este acelerador é capaz de produzir feixes em uma larga gama de íons (até o chumbo) e energias (até GeV), entre os quais utilizamos o feixe de íons Ni de 50 MeV e 537 MeV. O terminal de análise utilizado dispõe de um criostato acoplado a um espectrômetro de infravermelho possibilitando medidas FTIR *in-situ* de alvos a baixa temperatura.

No capítulo 2 são apresentados a descrição dos dispositivos utilizados nos experimentos e os procedimentos de preparação do gelo. No capítulo 3 são apresentados os resultados da irradiação para quatro gelos selecionados: H₂O, CO, CO₂ e a mistura H₂O+CO+NH₃. No capítulo 4, os valores dos rendimentos de

destruição e as seções de choque medidas no capítulo 3 são discutidos no contexto de ambientes astrofísicos levando em conta as abundâncias de íons pesados nos raios cósmicos galáticos. E finalmente, no capítulo 5 são apresentadas as conclusões e perspectivas de continuação deste estudo.