

Universidade de São Paulo
Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas
Departamento de Astronomia

Luciene da Silva Coelho

Formação de Moléculas Orgânicas em Ambientes Interestelares

São Paulo

2012

Luciene da Silva Coelho

Formação de Moléculas Orgânicas em Ambientes Interestelares

Dissertação apresentada ao Departamento de
Astronomia do Instituto de Astronomia, Geofísica
e Ciências Atmosféricas da Universidade de
São Paulo como requisito parcial para a obtenção
do título de Mestre em Ciências.

Versão Corrigida

Área de Concentração: Astronomia

Orientador: Prof. Dr. Amâncio César Santos
Friaça

São Paulo

2012

Àqueles que estiveram comigo durante esta jornada!

Agradecimentos

À minha mãe Cléa, e aos meus irmãos Alexandre e Allan por me ajudarem, me estimularem e me darem suporte para chegar aqui. Devo tudo a vocês;

Ao Professor Doutor Amâncio César S. Friaça por me orientar neste projeto e em outros que ainda estão por vir;

À Ana Cecília Soja e ao Rafael Santucci por tudo, sem vocês eu não conseguiria chegar aqui e conto com vocês na qualificação!!!

À Fernanda, Maria Clara e Pedro Caetano por tornarem minha vida mais feliz;

Ao Professor Doutor Jacques Le Bourlet e ao Professor Doutor Franck Le Petit pela gentileza em me assessorar na utilização do Código *Meudon PDR*;

À Professora Doutora Ruth pelos conselhos sempre úteis, principalmente nos relatórios;

Ao Professor Rama pelos conselhos e por me ajudar a crescer pessoal e profissionalmente;

À Professora Sílvia Rossi pelo colo e pelas broncas;

À Professora Vera Jatenco pelo semestre que trabalhamos juntas;

Aos amigos Cris Forcioni, Fábio Rodrigues, Felipe A. Augusto, por toda a ajuda e disponibilidade em me atender e tirar minhas dúvidas, principalmente em química!!!;

Aos amigos James, Rodrigo Costa, César, Artur, Lilian, Andressa, Isis, Elisa, Aiara, Thaíse, Giovanni, Denise, Tatiane, Alexandra, Mariana Tanaka, Mariane Marins, alguns por simplesmente estarem lá e os outros por entenderem porque eu não podia estar lá.

Aos colegas Marcus, Vinicius e Oscar por disponibilizarem esta versão super amigável do latex facilitando muito minha dissertação;

Ao Marco, Luis e Ulisses da informática, e também, é claro, as meninas queridas Marina, Regina, Conceição e Cida da secretaria, sem vocês o IAG não funcionaria;

À CAPES pelo apoio financeiro;

Ao Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas - IAG/USP

“And in the end the love you take is equal the love you make”

Lennon and McCartney

“Não importa o que eu já sei, eu ainda erro demais”

Herbert Vianna

Resumo

Este trabalho apresenta o estudo de algumas moléculas do meio interestelar úteis para o levantamento do conteúdo de matéria orgânica do universo e para as condições pré-bióticas na Terra e em outros ambientes no universo. Utilizamos como objeto-teste a Nebulosa Cabeça de Cavalo, devido à sua geometria simples, à sua distância moderada até nós, ao seu campo de radiação ultravioleta bem conhecido resultante da iluminação por uma estrela próxima, σ Orionis, e por ter sido extensivamente estudada por diversos trabalhos. Desse modo, podemos investigar com segurança diversos processos físicos e químicos no meio interestelar.

O principal instrumento utilizado neste trabalho foi o código PDR Meudon devido ao fato de que é amplamente utilizado por ser um dos programas de análise de dados de projetos recentes de astronomia, como o projeto Herschel, e por ser público. O código pode ser utilizado para modelizar com confiabilidade a Nebulosa Cabeça de Cavalo, visto que ela mesma é uma PDR (região de fotodissociação) prototípica. Atualizamos o setor de química do código para testar diversos cenários de formação de moléculas.

Consideramos o impacto nas abundâncias derivadas das moléculas de várias suposições em relação ao estado do gás (modelos isocórico, isotérmico e isobárico), decidindo em favor de um modelo isobárico. Verificou-se o papel dos raios cósmicos e de vários conjuntos de dados das reações químicas.

Obtivemos as abundâncias de várias moléculas, incluindo algumas de potencial importância pré-biótica: CN e seus íons, HCN, HNC, nitrilas e seus íons, hidretos de nitrogênio, benzeno. Investigamos o papel dos ânions e dos PAHs. Finalmente, exploramos canais de produção para heterocíclicos nitrogenados com relevância em astrobiologia: pirrol e piridina.

As presentes simulações apresentaram como a exploração de uma pequena gama de possíveis canais de produção de heterocíclicos já resultou em abundâncias significativas para ao menos uma espécie de heterocíclicos nitrogenados, a piridina. Dessa forma, excursões sistemáticas pelos diversos canais de produção deverão revelar mais espécies para serem alvos de buscas.

Abstract

This work presents the study of some molecules of the interstellar medium that are useful for the bookkeeping of the molecular content of the universe and for prebiotic conditions on Earth and in other environments in the universe. The Horsehead Nebula was chosen as test object, due to its simple geometry, its moderate distance to us, its well-known ultraviolet radiation field resulting from the star σ Orionis, and due the fact that it has been extensively studied in several works. In this way, we can safely investigate several physical and chemical processes on the interstellar medium.

The main tool used in the present work was the Meudon PDR code due the fact that it is widely used as one of the legacy data analysis programs of current astronomy projects, e.g. the Herschel project, and it is public. The code can reliably model the Horsehead Nebula, since this nebula is a prototypic PDR (photodissociation region). We updated the chemical sector of the code in order to test several scenarios for molecule production.

We considered the impact on the derived molecule abundances of several assumptions relative to the gas state (isochoric, isothermal and isobaric models), and the isobaric model was found to be the most plausible. We checked the role of cosmic rays and several datasets of chemical reactions.

We derived the abundances of several molecules, including some of potential prebiotic importance: CN and their ions, HCN, HNC, nitriles and their ions, nitrogen hydrides, and benzene. We investigated the role of anions and PAHs. Finally, we explored production channels for astrobiologically relevant nitrogenated heterocycles: pyrrole and pyridine.

This presents simulations show us how the exploration of a small quantities of possibles path of production of heterocycles resulted already in significant abundances at least one n-heterocycle specie, the pyridine. Thereby, systemact tours for the many productions

paths should show more species to be target of searches.

Lista de Abreviações

$\Delta_f H^0$ Variação da entalpia de formação.

AIBs Bandas Aromáticas no Infravermelho

Akari Satélite astronômico no infravermelho desenvolvido pela Agência de Exploração Espacial Japonesa.

ALMA Da sigla em inglês para *The Atacama Large Millimeter/submillimeter Array* - Radiotelescópio desenvolvido em parceria entre Europa, América do Norte, leste da Ásia e Chile.

A_v Extinção na faixa espectral do visível.

CHO Elementos carbono, hidrogênio e oxigênio.

CHON Elementos carbono, hidrogênio, oxigênio e nitrogênio.

CHONPS Elementos essenciais para a vida, ou seja, carbono, hidrogênio, oxigênio, nitrogênio, fósforo e enxofre.

CoRoT Da sigla para *Convection Rotation et Transits Planétaires* - Missão espacial liderada pela Agência Espacial Francesa em conjunto com a Agência Espacial Européia com objetivo de buscar exoplanetas e realizar astrosismologia.

DFT Teoria da densidade funcional.

DIBs Da sigla em inglês para *Diffuse Interstellar band* - bandas interestelares difusas.

DNA Da sigla em inglês para *deoxyribonucleic acid* - ácido desoxirribonucleico.

ESO Da sigla em inglês para *European Southern Observatory* - Observatório Europeu do Sul.

FIR Da sigla em inglês para *far infrared* - infravermelho distante

FUV Da sigla em inglês para *far ultraviolet* - ultravioleta distante

HARPS Da sigla em inglês para *High Accuracy Radial velocity Planetary Search project* - espectrometro dedicado a busca por exoplanetas, instalado no telescópio de 3.6 metros em La Silla.

Herschel Observatório espacial desenvolvido pela Agência Espacial Européia.

HHN Da sigla em inglês para *Horsehead Nebula* - Nebulosa Cabeça de Cavalo.

Kepler Telescópio espacial da NASA que visa a busca por planetas habitáveis.

LLAMA Da sigla em inglês para *Long Latin American Millimeter Array* - Radiotelescópios para comprimentos de onda milimétricos e submilimétricos.

M_{\odot} Massa solar.

Mag Magnitude.

NASA Da sigla em inglês para *National Aeronautics and Space Administration* - Administração Nacional de Aeronáutica e Espacial dos Estados Unidos da América.

n_{H} Densidade total de núcleos de hidrogênio.

Odin Mini-satélite desenvolvido pela Suécia em cooperação com França, Canadá e Finlândia com proposta de estudar a atmosfera terrestre além de objetos astronômicos.

PACS Da sigla em inglês para *Photo-conductor Array Camera and Spectrometer* - Espectrômetro e câmera fotocondutora instalados no observatório espacial Herschel.

PAHs Da sigla em inglês para *polycyclic aromatic hydrocarbon* - hidrocarbonetos aromáticos policíclicos.

PANHs Da sigla em inglês para *polycyclic aromatic nitrogen-hydrocarbon* - hidrocarbonetos nitrogenados aromáticos policíclicos.

PDR Da sigla em inglês para *photon-dominated region* - região fotodominada ou de fotodissociação.

RNA Da sigla em inglês para *ribonucleic acid* - ácido ribonucleico.

Sophie Da sigla em francês para *Spectrographe pour l'Observation des Phénomènes des Intérieurs stellaires et des Exoplanètes* - espectrógrafo instalado no telescópio de 1.93 metros do *Haute-Provence Observatory* no sudoeste da França.

SPICA Da sigla em inglês para *Space Infrared Telescope for Cosmology and Astrophysics* - observatório espacial proposto pela Agência de Exploração Espacial Japonesa para ser lançado em 2018.

Spitzer Telescópio espacial da NASA que opera na região do infravermelho do espectro eletromagnético.

SWAS Da sigla em inglês para *Submillimeter Wave Astronomy Satellite* - telescópio espacial da NASA designado a estudar a composição química de nuvens de gás interestelares.

T_c Temperatura cinética.

T_e Temperatura eletrônica.

T_{ef} Temperatura efetiva.

UV Ultravioleta.

VISIR Da sigla em inglês para *The VLT spectrometer and imager for the mid-infrared* - espectrometro para o infravermelho médio usado pelo ESO.

VLT Da sigla em inglês para *Very Large Telescope* - Constituído por quatro telescópios principais de 8.2 metros de diâmetro e outros quatro telescópios auxiliares de 1.8 metros que juntos operam como um “interferômetro gigante”.

Lista de Figuras

1.1	Mapa das Áreas de estudos da Astrobiologia (Briggs, 2009)	28
1.2	Carboidratos formados por cadeias de carbono. (Gilmour e Sephton, 2004)	36
1.3	Membranas lipídicas de células. (Gilmour e Sephton, 2004)	36
1.4	Produção de proteínas a partir de aminoácidos. (Gilmour e Sephton, 2004)	37
1.5	Bases encontradas no DNA. (Gilmour e Sephton, 2004).	37
2.1	Ilustração de uma PDR com seus principais elementos. (Le Petit, 2012) . .	45
2.2	Ilustração de nuvem molecular com suas regiões típicas. (Le Petit, 2012) .	46
2.3	Nebulosa Cabeça de Cavalo (HHN) e circunvizinhança. (NASA, 2010) . . .	56
2.4	Características geométricas do código em uma nuvem. (Le Petit, 2012) . .	58
3.1	Variação dos principais parâmetros no modelo com n_H constante.	67
3.2	Teste de Convergência do código para a HHN.	68
3.3	Teste de Convergência do código para a HHN.	68
3.4	Teste da influência da taxa de ionização por raios cósmicos na HHN.	69
3.5	Teste da influência da taxa de ionização por raios cósmicos na HHN.	70
3.6	Teste da influência da variação da entalpia de formação na HHN.	72
3.7	Abundâncias de algumas espécies CHO na HHN.	73
3.8	Abundâncias de algumas espécies CHO na HHN.	73
3.9	Abundância de algumas espécies CHO na HHN.	74
3.10	Abundâncias do CN, CN^+ , CN^- , HCN e HNC em relação ao CN.	75
3.11	Variação dos principais parâmetros no modelo isobárico.	76
3.12	Abundâncias de CHO para o modelo isobárico ao longo da HHN.	77
3.13	Abundância CN, HCN e HNC para o modelo isobárico ao longo da HHN. .	78

3.14	Variação dos principais parâmetros no modelo isotérmico.	79
3.15	Abundâncias de CHOs para o modelo isotérmico ao longo da HHN.	79
3.16	Abundância CN, HCN e HNC para o modelo isotérmico ao longo da HHN.	80
3.17	Abundância de algumas moléculas nitrogenadas na HHN.	81
3.18	Abundância de algumas moléculas nitrogenadas na HHN.	82
3.19	Abundância de alguns ânions na HHN.	83
3.20	Abundância de ânions na HHN.	83
3.21	Abundância do benzeno ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo.	85
3.22	Abundância do pirrol ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo.	87
3.23	Abundância do pirrol com mais reações.	89
3.24	Diferença obtida para a abundância do pirrol	90
3.25	Abundância da piridina a partir do etano ao longo da HHN.	92
3.26	Abundância dos principais hidrocarbonetos na HHN (incluindo o CH).	92
3.27	Abundância da piridina ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo.	94
3.28	Abundância do benzeno quando considera-se uma abundância inicial.	95
3.29	Comparação da produção do benzeno.	96
3.30	Abundância do pirrol produzido por PAHs.	97
3.31	Comparação da produção do pirrol por diversos canais.	98
3.32	Abundância da piridina produzida por PAHs.	98
3.33	Comparação da produção da piridina por diversos canais.	99
3.34	Comparação entre pirrol e piridina produzidos por PAHs.	100
3.35	Abundância de alguns PAHs e PANHs ao longo da HHN.	102
3.36	Comparação da produção do pirrol por diversos canais.	103
3.37	Produção da piridina por diversos canais.	103
3.38	Comparação da produção da piridina por diversos canais.	104
3.39	Comparação entre pirrol e piridina produzidos por PAHs.	104
4.1	Fração de N em algumas formas simples de nitrogênio na HHN.	106
4.2	Fração de N em alguns hidretos de nitrogênio na HHN.	106
4.3	Fração de N em cianeto e seus derivados na HHN.	107
4.4	Comparação de fotos tiradas com o <i>Herschel</i> e com o <i>Spitzer</i>	114

5.1	Moléculas e exoplanetas detectados ao longo dos anos.	119
-----	---	-----

Lista de Tabelas

1.1	Os dez elementos mais abundantes.	35
2.1	Comprimentos de onda de transições de níveis de energia.	48
2.2	Valores médios para taxas de reação.(Maciel, 2002)	56
2.3	Características físicas da HHN.(Gerin et al., 2009)	57
3.1	Parâmetros iniciais do modelo padrão para a Nebulosa Cabeça de Cavalo. .	66
3.2	Valores usados na variação da entalpia de formação ($\Delta_f H^\circ$).	71
3.3	Reações químicas, parâmetros e tipos de reação usados para a acrilonitrila	81
3.4	Reações químicas, parâmetros e tipos de reação usados para o benzeno . .	84
3.5	Reações químicas, parâmetros e tipos de reação usados para o pirrol	88
3.6	Mais reações químicas, parâmetros e tipos de reação para estimar o pirrol .	89
3.7	Formação da piridina a partir do C_2H_6	91
3.8	Reações químicas, parâmetros e tipos de reação para estimar a piridina . .	93
3.9	Reações químicas e parâmetros para pirrol e piridina produzidos por PAHs.	97
3.10	Reações químicas e parâmetros para pirrol e piridina produzidos por PAHs.	101
4.1	Razões de densidade de Coluna em relação ao CN.	107
4.2	Razões de densidade de Coluna dos hidretos.	108
4.3	Razões de densidade de Coluna em relação ao CN.	108
4.4	Densidade de Coluna das principais moléculas na HHN.	109
5.1	Transições de moléculas observáveis com o ALMA.	123
A.1	Moléculas encontradas em ambientes interestelares.	137

B.1	Elementos usados no modelo da HHN e seus parâmetros.	139
B.2	Reações químicas, parâmetros e tipos de reação usados no código	144

Sumário

1. <i>Introdução</i>	27
1.1 Matéria Orgânica no Universo	27
1.2 Astrobiologia	30
1.3 Origem e Busca pela Vida	31
1.3.1 O que é vida?	31
1.4 Água	33
1.5 Carbono	34
1.6 Nitrogênio	35
1.6.1 Ácidos Nucleicos (DNA/RNA)	37
1.6.2 Espécies Nitrogenadas de Interesse Astrobiológico	37
1.7 O Mundo Aromático	38
1.8 Organização da Dissertação	41
2. <i>Base de Dados</i>	43
2.1 Meio Interestelar	43
2.1.1 Regiões de Fotodissociação	45
2.2 Detecção de Moléculas no Meio Interestelar	47
2.2.1 Reações Moleculares na Fase Gasosa	49
2.2.1.1 Reações Íon-Molécula	49
2.2.1.2 Reações Neutro-Neutro	52
2.2.1.3 Associação Radiativa	52
2.2.1.4 Recombinação Radiativa	53

2.2.1.5	Recombinação Dissociativa	53
2.2.1.6	Reações de Troca de Carga	53
2.2.2	Destruição de Moléculas	53
2.2.2.1	Fotodissociação	54
2.2.2.2	Dissociação Colisional	54
2.3	Cinética de Reação	54
2.3.1	Taxas de Reação	55
2.4	Nebulosa Cabeça de Cavalo	56
2.5	<i>O Código PDR Meudon</i>	57
2.5.1	Características do Código	58
2.5.1.1	Reações Químicas	60
3.	<i>Simulações e Modelagens</i>	65
3.1	Condições Iniciais da Nebulosa Cabeça de Cavalo	65
3.2	Modelo para uma Densidade de Gás Constante	66
3.2.1	Convergência nas Iterações	67
3.2.2	O Papel dos Raios Cósmicos	69
3.2.3	Efeitos das Incertezas da Entalpia de Formação	70
3.2.4	Escolha da Base de Dados de Química	72
3.2.5	Moléculas Nitrogenadas Simples: CN, HCN e HNC	74
3.3	Modelo Isobárico	76
3.4	Modelo Isotérmico	78
3.5	Nitrilas	80
3.6	Íons	82
3.7	Benzeno	84
3.8	Pirrol	85
3.9	Piridina	91
3.10	O Papel dos PAHs	94
3.10.1	Benzeno	95
3.10.2	PAHs, PANHs e Heterocíclicos Nitrogenados (Pirrol e Piridina)	96

4. <i>Análise</i>	105
4.1 Inventário do Nitrogênio no Meio Interestelar	105
4.2 Rotas para a Produção de Heterocíclicos	109
4.3 Busca por Moléculas em Ambientes Interestelares e Circum-estelares	112
5. <i>Conclusões e Perspectivas</i>	117
5.1 Precisamos de uma Revolução Molecular	118
5.2 Próximos Passos em Simulações	121
5.3 Perspectivas Observacionais	123
<i>Referências</i>	125
<i>Apêndice</i>	135
A. <i>Moléculas Encontradas em Ambientes Interestelares e Circum-estelares</i>	137
B. <i>Moléculas e reações químicas usadas na modelagem da Nebulosa Cabeça de Cavalo</i>	139

Introdução

O estudo do universo orgânico tornou-se uma das áreas de fronteira em astrofísica. O enorme crescimento que esta área apresentou nos últimos anos deve-se ao aumento da disponibilidade de bases de dados em laboratório e de cálculos quânticos fundamentais com respeito às taxas de reações e espectros de moléculas. Grande parte das moléculas observadas no espaço são orgânicas e, de fato, houve uma mudança paradigmática muito recente, motivada pelo florescimento da astrobiologia, ou seja, o estudo multidisciplinar da origem, evolução, distribuição e destino da vida no Universo, considerando em especial a vida em outros lugares além da Terra (Lafleur, 1941). Além disso, diversos observatórios tanto espaciais como em solo têm explorado partes do espectro eletromagnético rico em linhas moleculares, desde o infravermelho próximo ao rádio, incluindo o infravermelho médio e distante e o submilimétrico/milimétrico. Uma das principais frentes exploradas pela astrobiologia é o estudo da biologia terrestre, já que a busca pela vida em qualquer lugar do Universo é condicionada por nosso conhecimento da vida na Terra. Além disso, a origem e a evolução da vida terrestre, é condicionada pelas condições que possui nosso planeta no Sistema Solar e na nossa Galáxia (Friaça, 2012). O surgimento da vida no Universo passou a ser visto como uma etapa da evolução cosmológica da complexidade, da qual a formação das moléculas orgânicas representam uma importante fase.

1.1 Matéria Orgânica no Universo

A primeira molécula descoberta no meio interestelar foi o radical metilidina (CH), identificada em 1937 pelo astrônomo P. Swings e pelo físico L. Rosenfeld com base em espectros obtidos por Durham e Adams (1937) para uma amostra de estrelas de tipo

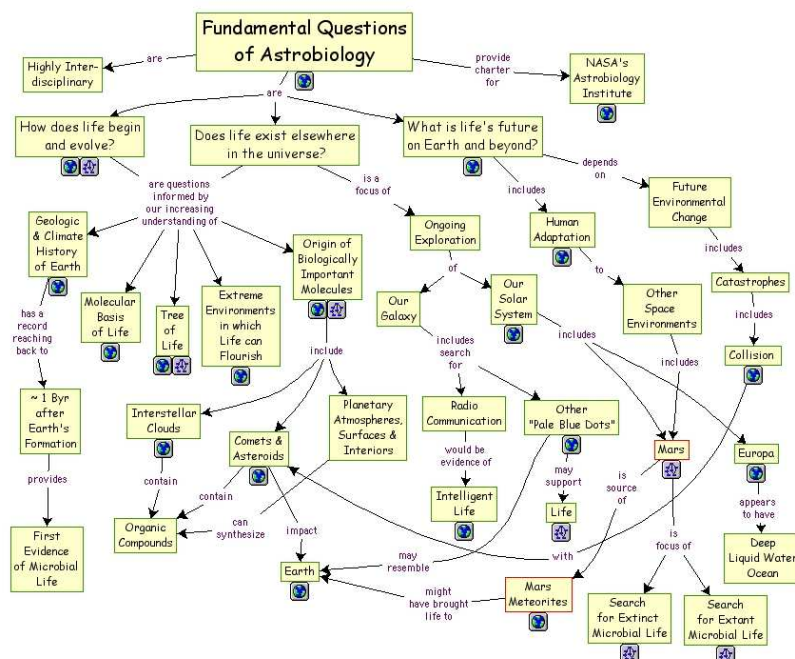


Figura 1.1: Mapa das Áreas de estudos da Astrobiologia (Briggs, 2009)

“early”, usando o recém-completado espectrógrafo Coudé do observatório de Monte Wilson. No seu trabalho de 1937, Durham e Adams identificaram facilmente nos espectros estelares linhas do Ti^+ de origem interestelar, mas restavam algumas linhas de origem desconhecida. No mesmo ano, Swings e Rosenfeld reconheceram o comprimento de onda de uma das linhas não identificadas a 4300.3 \AA como um dos componentes da banda 4315 \AA do CH (Herzberg, 1988). Nesse momento, começou a era do universo molecular em astrofísica.

Pode-se dizer que também que em 1937 começou a era do universo orgânico em astrofísica. A definição de química orgânica tem alguma variação, mas um modo de defini-la seria o campo da química que estuda compostos onde comparece a ligação CH. Esta definição exclui o CO e CN^- assim como compostos mais complexos onde não comparece o H, como os fulerenos – C_{60} e C_{70} , por exemplo – de serem orgânicos. O radical CH normalmente não é considerado um composto orgânico, mas temos que levar em conta que a química de ambientes astrofísicos difere daquela dos laboratórios usuais, pelo papel importante dos radicais livres e dos íons, além de mecanismos de fornecimento de energia normalmente não considerados em condições terrestres, como fótons ultravioleta (UV) de curto comprimento de onda e raios cósmicos.

Também para o HCN é crítico na definição de química orgânica, visto que normalmente não é considerado orgânico. Mas, segundo o ponto de vista astrofísico, ele seria orgânico porque apresenta a ligação H-C. Ademais é o precursor da importante classe de nitrilas, que apresentam abundâncias significativas no meio interestelar. Também é importante ao se considerar os compostos heterocíclicos nitrogenados, de grande significado na biologia terrestre.

Além do meio interestelar, representado tanto por nuvens difusas interestelares como por nebulosas, os envelopes circum-estelares e, principalmente, arredores de gigantes vermelhas, são regiões ricas em carbono, onde se encontra grande quantidade de matéria orgânica. Verificou-se que as reações químicas que formam moléculas orgânicas nestas regiões (Cherchneff et al., 1992) fazem delas as fontes dominantes de uma importante classe de compostos orgânicos, os hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs, na sigla em inglês). Tais moléculas, consistindo de vários anéis aromáticos fundidos, representam um reservatório importante de carbono no meio interestelar, chegando a aprisionarem 30-50% de todo carbono desse meio (Puget e Leger, 1989). Essa alta proporção de PAHs reflete suas abundâncias elevadas nos sítios de produção e a sua resistência às condições do meio interestelar. De fato, modelos dos envelopes carbonados frios mostram que mais carbono está contido em PAHs do que em CO a temperaturas de cerca de 850 K, quando $C/O > 5$ (Helling et al., 1996). Os ventos estelares expõem estas moléculas para o meio interestelar e, a partir daí, elas podem ser encontradas em outros ambientes.

Inúmeras moléculas diferentes foram identificadas no meio interestelar e em envelopes circum-estelares (Tabela A.1 vista no anexo), e essa lista se expande diariamente. A tabela A.1 no anexo mostra, por uma atualização de agosto de 2012, que já foram encontradas no meio interestelar e em envelopes circum-estelares cerca de 170 moléculas. As moléculas nitrogenadas são de especial interesse para considerações bióticas e pré-bióticas, e pela Tabela A.1 podemos ver que cerca de um terço delas são nitrogenadas. Como foi dito acima, os compostos heterocíclicos nitrogenados, e em especial os heterocíclicos aromáticos nitrogenados são de grande interesse pela sua presença na bioquímica terrestre. As classes das purinas e pirimidinas, que contêm as bases nitrogenadas dos ácidos nucleicos ilustram esse ponto. Desse modo, neste trabalho daremos especial atenção aos compostos heterocíclicos nitrogenados.

A matéria orgânica é componente fundamental de sistemas vivos e, portanto, os estudos sobre a origem da vida e a evolução da biosfera procuram elucidar como se deu a passagem de compostos orgânicos abióticos para as primeiras formas de vida e como as substâncias orgânicas permanecem disponíveis para os seres vivos na biosfera por períodos de tempo de vários bilhões de anos. Além disso, é inevitável que a distribuição da matéria orgânica no Universo tenha um impacto direto na origem da vida na Terra e em outras partes do Cosmos além do nosso planeta. Por esse motivo, o estudo do conteúdo molecular do universo é um dos eixos da pesquisa em astrobiologia.

1.2 *Astrobiologia*

Existe vida fora da Terra? Se existir, é um tipo de vida similar às formas de vida que se conhece na Terra? Como detectá-la? Estas são algumas das mais fascinantes perguntas que defrontam as ciências hoje, sendo a astrobiologia a área que se dedica particularmente ao estudo da origem, da evolução e da distribuição da vida no Universo.

Três estratégias clássicas foram seguidas na busca por vida extraterrestre: o estudo celular de organismos exóticos terrestres, a busca por matéria orgânica, como o estudo realizado neste trabalho, e microorganismos vivos fora da Terra e o uso de radiotelescópios para detectar sinais de vida inteligente no Universo (Chela-Flores, 2001).

A primeira estratégia tem por objetivo entender como a vida na Terra começou. Pesquisas revelaram organismos exóticos, os chamados extremófilos, vivendo em ambientes inóspitos, tais como o fundo de oceanos, lençóis glaciais antárticos e fluxos de lava vulcânicos, que apresentam temperatura e pressão que podem até ser semelhantes às encontradas durante a formação da Terra há cerca de 4,5 bilhões de anos atrás (Chela-Flores, 2001). Descobertas recentes indicam que há ecossistemas inteiros que não dependem da luz solar, estendendo nosso conceito de limites de zona de habitabilidade no Sistema Solar. Pesquisar nossas próprias origens não somente amplia nossa avaliação da enorme diversidade da vida aqui na Terra, mas também pode ajudar-nos a entender as situações extremas que organismos simples podem tolerar, tais como ambientes encontrados em outros corpos celestes, tornando mais provável que exista vida em outro lugar.

A segunda estratégia é a busca por formas simples de matéria orgânica - aminoácidos ou proteínas, por exemplo - que podem encontrar-se incrustadas em rochas antigas de

planetas, cometas ou meteoritos, ou, ainda, em nuvens interestelares. Hoje já há evidências de fluxos de água líquida num passado geológico recente, ou até atual, em Marte. A Missão Espacial Galileu forneceu ampla evidência de um oceano embaixo da superfície congelada de Europa (Chela–Flores, 2001). Um dos objetivos primários da astrobiologia é determinar onde a vida pode existir além da Terra e, se isto é possível, quais as condições ambientais limitantes.

A terceira estratégia usada na busca por indícios de vida fora da Terra utiliza os radiotelescópios que, além de pesquisarem os comprimentos de onda invisíveis ao olho humano, permitem a detecção de anomalias nas ondas de rádio, que podem representar sinais de vida no cosmos. Os astrônomos têm vasculhado o espectro em rádio há cinco décadas, aproximadamente, sem nenhum sinal de civilização extraterrestre (Chela–Flores, 2001).

A busca de vida extraterrestre, combinada com grandes avanços em astronomia espacial e de solo levou a encontrar seguidamente novos planetas extrassolares e mesmo novos sistemas planetários, e mantém a esperança de encontrar vida inteligente “em algum lugar lá fora”.

Estas três estratégias fornecem um mapa para uma grande jornada de descobertas, incluindo a possibilidade de encontrar um lugar real no Universo que seja como o planeta Terra e, ao mesmo tempo, elucidar como a vida se desenvolveu no nosso planeta.

1.3 Origem e Busca pela Vida

A procura por vida dentro e fora do Sistema Solar está intrinsecamente relacionada à compreensão dos sistemas vivos na ciência moderna. Porém, definir o que é vida não é uma tarefa tão simples como parece; é preciso examinar a química e a função dos elementos que constituem um sistema vivo. Outro passo é estudar os lugares no Universo e na Terra onde a matéria-prima para a vida poderia ter se formado antes da vida ter começado de fato. Finalmente, temos que entender os mecanismos através dos quais a matéria-prima não biológica pode ter se combinado resultando nos primeiros organismos vivos.

1.3.1 O que é vida?

Durante toda a história, muitas questões têm sido levantadas sobre como e quando a vida surgiu. Inicialmente, muitos consideraram que a vida surgiu espontânea e repentina-

mente na Terra. Estas suposições eram apoiadas pelas evidências observacionais da época sobre a geração espontânea de moscas e larvas de insetos a partir de carne podre, piolhos a partir de suor, enguias e peixes a partir da lama do mar e sapos e ratos a partir do solo úmido. Ocasionalmente, a idéia da geração espontânea era questionada. Por exemplo, em 1668, o médico Francesco Redi (1627-1697) demonstrou que as larvas de insetos eram postas por moscas e se a carne fosse deixada em um recipiente fechado, então, as moscas adultas eram impedidas de entrar e depositar seus ovos e as larvas não apareciam. De qualquer modo, quando o microscópio holandês feito por Anthony van Leeuwenhoek (1632-1723) detectou microorganismos em 1676, a geração espontânea era a explicação que melhor dava conta de tais criaturas. O problema foi finalmente resolvido em 1862, quando em uma tentativa de ganhar um prêmio oferecido pela Academia Francesa de Ciência, Louis Paster (1822-1895) realizou uma série de experimentos convincentes demonstrando a inexistência da geração espontânea. Pasteur mostrou que se um caldo ou solução estiver devidamente esterilizado e excluído de contatos com microorganismos, ele poderá permanecer estéril indefinidamente (Gilmour e Sephton, 2004).

Pasteur respondeu uma questão importante ao provar que a geração espontânea não era a origem da vida, mas inevitavelmente fez surgir questões novas e mais difíceis. Se toda a vida vem de vida existente, de onde veio a primeira vida? Ironicamente, em contraste ao banimento da velha e arraigada ideia que a vida surge espontaneamente de matéria inanimada, veio a inevitável e lógica conclusão que a primeira vida pode ter aparecido exatamente assim - surgida de materiais não-vivos presentes no Universo.

Se vamos estabelecer quando e como a vida se originou, devemos primeiro definir o que é vida.

Em geral, muitos biólogos costumam identificar duas características chave que indicam vida (Gilmour e Sephton, 2004):

- a capacidade de se auto-replicar;
- a capacidade de evoluir de acordo com a teoria Darwiniana.

Para um organismo se auto-replicar é preciso que ele seja capaz de produzir cópias dele mesmo. Para a evolução Darwiniana acontecer, imperfeições ou mutações devem acontecer ocasionalmente, durante o processo de copiamento, e estas novas características devem

estar sujeitas à seleção natural. A natureza favorece algumas características particulares sob dadas condições ambientais e aqueles indivíduos que melhor se adaptarem às condições existentes sobreviverão mais facilmente. Por este processo, uma mudança evolutiva com qualquer característica vantajosa por qualquer tipo de mutação deve ser passada para as gerações futuras (Gilmour e Sephton, 2004).

Uma pequena lista de apenas duas características pode não ser uma definição muito confiável de *vida*. Por isso, a NASA propôs a seguinte definição: “vida é um sistema químico auto-sustentável capaz de permitir a evolução Darwiniana” (Joyce, 1994). De qualquer forma, qualquer definição de vida será igualmente falha sob certas circunstâncias. Por exemplo, a mula é a descendência de jumento com égua, que são espécies distintas, por isso a mula é estéril. Uma mula não pode se multiplicar e, sendo assim, é incapaz de satisfazer os critérios de auto-replicação e de evolução Darwiniana, mas apesar disso, não se pode negar que ela esteja viva. Entretanto, para a maioria dos casos, essa definição de vida será uma definição satisfatória.

Para que a vida seja auto-sustentável e capaz de evoluir conforme a Teoria de Darwin, energia e materiais básicos precisam ser extraídos do ambiente ao redor para permitir crescimento e replicação. Além disso, alguns tipos de sistemas vivos devem estar presentes para governar a química da vida. Para um primeiro passo na procura por vida no Universo podemos nos basear na compreensão dos sistemas vivos na Terra, o que significa vida baseada em água líquida, um conjunto de elementos biogênicos, como o carbono e o nitrogênio, além de uma fonte de energia livre. Nesse estágio, a busca pela vida conduz à busca de água, carbono, nitrogênio e energia livre para sustentar a vida.

1.4 Água

À primeira vista, a água líquida parece ser essencial para a vida. Sistemas vivos precisam de um meio no qual uma grande variedade de moléculas possam se dissolver e onde as reações químicas possam ocorrer rapidamente. O fato da água preencher estes requisitos justifica que ela possa ser chamada de solvente universal. Poucos outros solventes poderiam ter a mesma capacidade da água para facilitar a existência da vida. A água existe como líquida em uma faixa de temperatura que não é nem tão fria, que pode freiar a velocidade das reações químicas, nem tão quente que impeça a formação de cadeias orgânicas.

Uma alternativa ocasionalmente proposta, a amônia, poderia ser líquida em outros mundos muito mais frios que o nosso, mas a tais baixas temperaturas as reações químicas que levariam à vida operariam lentamente e os sistemas vivos teriam que experimentar lapsos de tempo excessivamente longos para alcançarem a estabilidade.

Ademais, os elementos que formam a água, o hidrogênio e o oxigênio, são os elementos mais abundantes não só dos seres vivos terrestres, mas também do Universo, seguidos pelo carbono e pelo nitrogênio.

1.5 Carbono

O carbono é o único elemento que pode formar moléculas suficientemente grandes para realizar algumas funções necessárias para a vida como conhecemos. Pode formar cadeias químicas com diversos outros átomos, permitindo uma grande diversidade química. A importância do carbono para a bioquímica terrestre é ilustrada pela posição que ocupa na frente da sigla CHONPS, que designa os elementos essenciais para a vida, ou seja, carbono, hidrogênio, oxigênio, nitrogênio, fósforo e enxofre, aos quais se acrescentam os macrossubstâncias cloro, sódio, potássio e cálcio e cerca de uma dúzia de microelementos, tais como ferro, magnésio e zinco.

Uma das principais características do carbono é a capacidade de vários de seus compostos de se dissolverem facilmente na água. Tal capacidade de interação mútua faz dos compostos de carbono e da água as mais importantes substâncias para o desenvolvimento de organismos vivos. Atualmente, todas as formas de vida conhecidas são baseadas em carbono.

A abundância relativa dos elementos mais comuns no Universo indica uma grande disponibilidade dos elementos necessários para construir os compostos biogênicos (Tabela 1.1). Os quatro elementos mais abundantes utilizados para a vida na Terra (hidrogênio, oxigênio, carbono e nitrogênio, ou CHONs) são também os quatro elementos quimicamente ativos (excetuando os gases nobres), com maiores abundâncias cósmicas.

Tabela 1.1 - Os dez elementos mais abundantes no Universo, na Terra e nos organismos vivos [átomos de elementos por 100.000 átomos no total] (Gilmour e Sephton, 2004)

Universo		Toda a Terra		Crosta terrestre		Oceanos terrestres		Humanos	
H	92.714	O	48.880	O	60.425	H	66.200	H	60.563
He	7.185	Fe	18.870	Si	20.475	O	33.100	O	25.670
O	50	Si	14.000	Al	6.251	Cl	340	C	10.680
Ne	20	Mg	12.500	H	2.882	Na	290	N	2.440
C	15	S	11.400	Na	2.155	Mg	34	Ca	230
N	8	Ni	1.400	Ca	1.878	S	17	P	130
Si	2,3	Al	1300	Fe	1.858	Ca	6	S	130
Mg	2,1	Na	640	Mg	1.784	K	6	Na	75
Fe	1,4	Ca	460	K	1.374	C	1,4	K	37
S	0,9	P	140	Ti	191	Si	-	Cl	33

Depois da água, as moléculas mais abundantes em sistemas vivos são as macromoléculas biológicas: carboidratos, lipídios, proteínas e ácidos nucleicos, todas formadas por cadeias de carbono.

Os carboidratos são importantes como fontes de energia para a vida (Figura 1.2) e os lipídios, para a formação da membrana celular (Figura 1.3). Já as proteínas, longas cadeias de aminoácidos, são responsáveis pela catálise e pela produção das enzimas, constituindo uma das principais classes de macromoléculas biológicas (Figura 1.4).

1.6 Nitrogênio

O nitrogênio é o quarto elemento quimicamente ativo mais abundante no Universo. Este elemento é de extrema importância, pois juntamente com o carbono, oxigênio e fósforo é um dos elementos que compõe o portador de informação biológica na Terra - o DNA. Além disso, o nitrogênio permite a montagem de uma série de heterocíclicos complexos e de compostos assimétricos. Outrossim, a valência ímpar do nitrogênio introduz assimetrias e heterogeneidades, que são uma condição necessária para o armazenamento da informação.

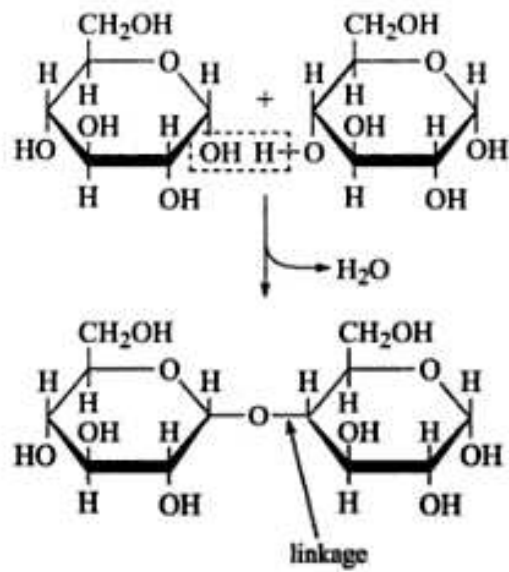


Figura 1.2: Carboidratos formados por cadeias de carbono – transformação de energia para organismos vivos. (Gilmour e Sephton, 2004)

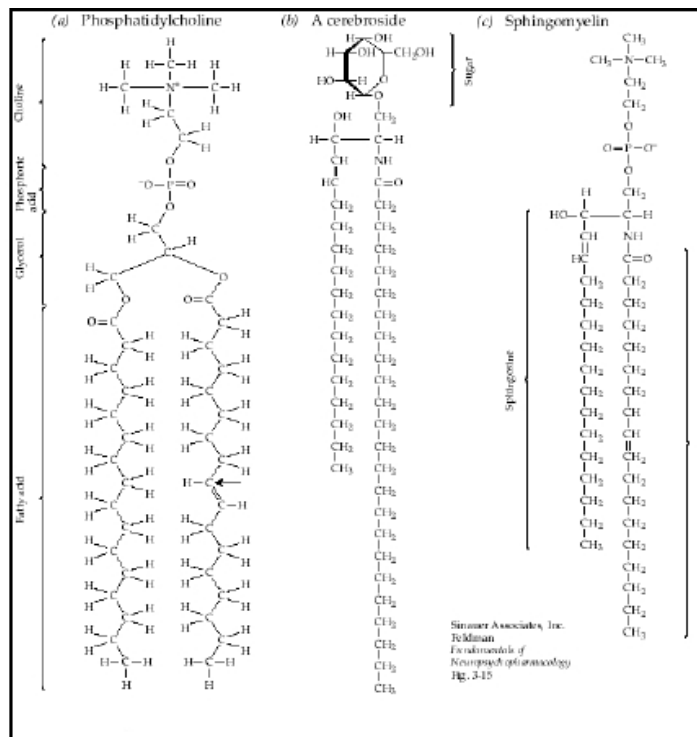


Figura 1.3: Membranas lipídicas de células. (Gilmour e Sephton, 2004)

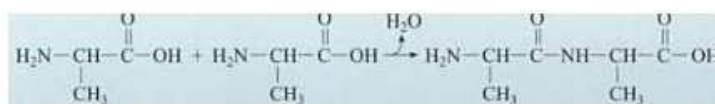


Figura 1.4: Produção de proteínas a partir de aminoácidos. (Gilmour e Sephton, 2004)

1.6.1 Ácidos Nucleicos (DNA/RNA)

Ácidos Nucleicos podem ser as maiores macromoléculas biológicas conhecidas. Elas consistem em uma coleção de nucleotídios individuais ligados em longas cadeias lineares de polímeros. Assim como açúcares e aminoácidos, nucleotídios podem ser ligados por simples reações que envolvem a perda de água. Cada nucleotídio é composto por uma pentose (açúcar com cinco átomos de carbono), um ou mais grupos de fosfato e por uma base nitrogenada, para as quais há cinco possibilidades: adenina, citosina, timina e guanina (Figura 1.5), além da uracila.

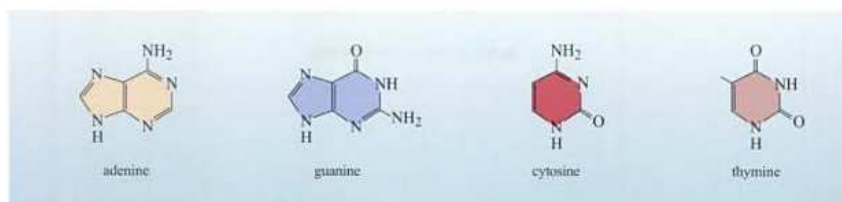


Figura 1.5: Bases encontradas no DNA. (Gilmour e Sephton, 2004).

Os organismos vivos contêm dois tipos de ácidos nucleicos: DNA e RNA, sendo o DNA o ácido nucleico que contém as instruções genéticas usadas no desenvolvimento e funcionamento de todos os organismos vivos.

1.6.2 Espécies Nitrogenadas de Interesse Astrobiológico

O espectro no infravermelho para as bases nitrogenadas ainda não é bem conhecido para a fase gasosa, o que dificulta sua detecção no meio interestelar. Há poucos trabalhos como o de Plützer et al. (2001), que apresenta um espectro para a nucleobase adenina produzido em jatos supersônicos com linhas de absorção na faixa de números de onda entre 36050 e 36700 cm^{-1} . Porém, outros compostos contendo a função nitrila, tais como CH_3CN -acetonitrila, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$ -propanonitrila, CH_2CHCN -acrilonitrila, HCCCN

-cianoacetileno, $HCCN$ -cianometileno, HCN e o OCN^- , foram detectados recentemente na atmosfera de Titã, em comas cometárias e no meio interestelar (Hudson e Moore, 2004). De fato, esta é uma das áreas que está em desenvolvimento e que possibilitará grandes descobertas observacionais num futuro próximo.

Dentro do Sistema Solar, a química da nitrila é particularmente relevante em Titã, já que sua atmosfera oferece condições de temperatura e pressão para a formação de tais compostos, além das reações estimuladas por radiação cósmica, fótons ultravioleta (UV) e pela magnetosfera de Saturno. As nitrilas também são relevantes no contexto de estudo de cometas.

Os cometas são essenciais para entender as nebulosas solares e sua evolução, já que as moléculas são mais facilmente detectáveis nestes objetos devido à sua trajetória cruzando a órbita terrestre e servem de comparativo para o que se pode encontrar nas regiões de formação estelar e, também, para pesquisas dos processos químicos que ocorrem no meio interestelar.

Nesse contexto, cabe salientar a teoria da Panspermia, que sugere que a vida não necessariamente tenha se originado na Terra mas em cometas (Napier et al., 2007), ou ao menos transportada para cá por estes; mais especificamente, Wickramasinghe et al. (2012) refere-se aos planetas primordiais, nos quais teria havido o início da vida, ou pelo menos a formação dos primeiros blocos construtores, alguns milhões de anos após o Big Bang, desde a primeira condensação do H_2 , seria possível mapear essa história evolucionária pelo processo de colisão de cometas e outros astros que expeliram gás e poeira na nuvem zodiacal, quando da passagem dos primeiros corpos planetários pelo sistema solar (Wickramasinghe et al., 2012). Outra teoria, mais aceita, é de que os cometas possam ter fornecido compostos orgânicos-chaves para o início da vida na Terra. Dentre estes, os compostos heterocíclicos nitrogenados têm especial importância.

1.7 O Mundo Aromático

Apesar do crescente avanço das pesquisas, ainda não há um resultado conclusivo que explique o surgimento da vida no nosso planeta. Embora haja muitas hipóteses para a origem da vida, ainda não há provas convincentes de que um cenário é mais provável do que o outro. Na verdade, ao olhar para os sistemas químicos, não existe sequer uma

definição sem ambiguidade que separe “vida” de “não-vida”. Todos concordam, porém, que a vida tenha que, de alguma forma, passar sua informação genética ao longo do tempo para se perpetuar.

Existem aproximadamente 170 moléculas detectadas no meio interestelar (ver tabela A.1 no anexo) e várias delas são importantes para compreender a origem da vida. Cabe salientar os hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs), que são moléculas orgânicas encontradas em todo espaço e podem ter desempenhado um papel fundamental na origem da vida. De fato, os PAHs devem ter sido as primeiras grandes moléculas produzidas logo após a primeira geração de estrelas massivas do Universo jovem (Chela-Flores, 2001).

Estas moléculas de carbono e hidrogênio são chamadas “policíclicas” devido as suas múltiplos anéis de átomos de carbono, e “aromáticas” devido às fortes ligações químicas do anel conjugado, pares isolados ou orbitais vazios que mostram uma estabilidade mais forte do que se poderia esperar da estabilidade de um conjugado sozinho. Os PAHs podem ser encontrados na Terra quando ocorre a combustão incompleta de materiais à base de carbono. Constituem uma família de compostos caracterizada por possuírem dois ou mais anéis aromáticos condensados. Essas substâncias, bem como os seus derivados nitrogenados e oxigenados, são encontrados como constituintes de misturas complexas em todos os ambientes.

Segundo a bioquímica moderna, os três principais requisitos dos sistemas celulares são ácidos nucleicos, proteínas e membranas. A maior parte destes blocos de construção da vida, no espaço, é encontrado em meteoritos carbonáceos, mas há indícios de algumas moléculas complexas na fase gasosa no meio interestelar (Chela-Flores, 2001).

Os PAHs podem ter sido material importante para a estabilidade da vida em sua origem, pois possuem uma estrutura muito robusta contra diversos tipos de degradação, incluindo por radiação. Eles podem ser modificados, mas não serão totalmente destruídos. Mesmo se forem divididos, os fragmentos ainda estarão disponíveis para futuras moléculas. Em contrapartida, outras moléculas mais imediatamente ligadas à vida, como os aminoácidos, não têm grande probabilidade de serem observadas no meio interestelar, uma vez que fótons ultravioleta (UV) as destruiriam (Chela-Flores, 2001).

Os meteoritos contêm cerca de três por cento de carbono, no máximo. Destes, 80% são incorporados a redes aromáticas. Trata-se de um material abundante, estável ao calor

e parcialmente insolúvel, e bastante resistente a radiação. Logo, por resistir mesmo sob condições muito hostis, como durante o possível início da Terra, esse material pode ter sido mais importante do que inicialmente se suspeitava. Os PAHs são as moléculas orgânicas livres mais abundantes no espaço, ambiente certamente menos propício à formação molecular em geral do que a Terra, uma vez que não existe uma atmosfera protetora (Lunine, 2005).

Os três requisitos para um sistema vivo são a existência de sistemas informacionais, redes metabólicas e compartimentalização. Os PAHs podem desempenhar o papel de polímeros informacionais ao constituir de um modo direto templates com blocos de PAHs complementares. Em relação à compartimentalização os PAHs são capazes de se organizarem em bicamadas para constituir estruturas primitivas de membrana (Ehrenfreund et al., 2006).

Um ponto importante é que os PAHs também podem ser fotossensibilizados, porque podem realizar transferência de carga entre cátions e ânions. Assim, eles podem desempenhar um papel metabólico como transdutores energia. Além disso, Nicolas Platts, do Laboratório de Geofísica do *Carnegie Institution of Washington* propôs que, pela junção de PAHs, eles podem formar um polímero informacional semelhante a um ácido nucleico (Platts, 1992). Portanto, o material aromático pode ser utilizado como “recipiente” para os três requisitos à vida de uma só vez.

A recente detecção de C_4H^- , C_6H^- e C_8H^- levou à investigação dos ânions de hidrocarbonetos no meio interestelar e no ambiente circum-estelar. A razão encontrada entre a abundância de ânions e moléculas neutras é de, pelo menos, uma pequena porcentagem, uma vez que essas últimas têm mais de cinco átomos de carbono. Esses cálculos predizem, ainda, ânions de n átomos de carbono (Cordiner et al., 2007a).

Acredita-se que a captura eletrônica por hidrocarbonetos é muito eficiente para as espécies que contêm mais de cinco átomos de carbono. Os ânions são criados de forma eficaz e podem ser abundantes mesmo em regiões onde eles são rapidamente destruídos por fótons. Em particular, acredita-se que os ânions como C_6H^- , C_8H^- e $C_{10}H^-$ possam ter, em relação à sua abundância com as espécies neutras, uma pequena porcentagem superior à unidade, enquanto C_4H^- , embora desenvolvida de forma relativamente ineficiente, pode ser observada em objetos astronômicos com grandes abundâncias de C_4H (Cordiner et al.,

2007a).

Considerando o papel da carga dos PAHs quanto à extinção ultravioleta, uma combinação de PAHs majoritariamente neutros e com carga negativa reproduz satisfatoriamente curvas de extinção interestelar observadas (Cecchi-Pestellini et al., 2008).

Além disso, as assim chamadas Bandas Aromáticas no Infravermelho (AIBs, na sigla em inglês) são atribuídas à emissão infravermelha de PAHs aquecidos, excitados por fótons UV. Também se acredita que algumas das Bandas Difusas Interestelares (DIBs, na sigla em inglês), um conjunto de linhas de absorção no visível e no infravermelho próximo, teriam sua origem nos PAHs (ver seções 3.10 e 4.2 desta dissertação).

Assim, os PAHs são excelentes moléculas alvo para a busca de matéria orgânica que foi produzida em outras partes do Sistema Solar ou mesmo em outros locais da Galáxia e entregue posteriormente quase intacta em planetas como Marte e a Terra.

1.8 Organização da Dissertação

Esta dissertação está organizada como segue: no segundo capítulo, encontram-se as informações sobre o meio interestelar e as principais reações de formação e de destruição de compostos, uma breve descrição da Nebulosa Cabeça de Cavalão como modelo padrão para regiões de fotodissociação e da estrutura do código *PDR Meudon* que foi usado para modelizar esta região. No capítulo três estão apresentados os testes realizados com o código, os resultados das simulações com os respectivos modelos utilizados. O capítulo quatro faz uma análise dos resultados obtidos. Conclusões e perspectivas são apresentados no capítulo cinco.

Base de Dados

O principal instrumento utilizado neste estudo foi um modelo computacional para regiões de fotodissociação (PDRs), o código *PDR Meudon*, podendo ser usado no estudo de propriedades físicas e químicas de nuvens difusas, nuvens moleculares densas e regiões circum-estelares, além das regiões de fotodissociação (Le Petit et al., 2006). Dessa forma, é possível analisar a região estudada de acordo com seus principais parâmetros, como a incidência de um campo de radiação, a densidade, a temperatura e a pressão da região, bem como as propriedades químicas de compostos que podem ser formados e/ou destruídos e suas reações químicas.

2.1 Meio Interestelar

O componente mais óbvio do meio interestelar é constituído pelos fótons, dos quais os produzidos por estrelas quentes, especialmente de tipo O e B, fótons UV, têm especial importância ao constituir um campo de radiação associado ao meio interestelar geral, que pode aquecer e ionizar o gás, interagindo também com os demais componentes do meio.

A idéia de um gás interestelar é relativamente recente, as primeiras evidências remontam às observações da binária espectroscópica δ *Orionis* em 1904, feitas por Johannes Franz Hartmann (1865-1936), que revelaram a presença de linhas de absorção de CaII que não participavam do movimento orbital do par. Hartmann concluiu pela existência de uma nuvem de gás na linha de visada de δ *Orionis*, afastando-se com velocidade radial de 16km/s.

O gás interestelar está geralmente associado a grãos interestelares. Caso uma nuvem contendo gás e grãos não esteja associada a estrelas brilhantes, os grãos absorverão a

radiação do campo, apresentando-se no céu como *nebulosas escuras*. É o caso do Saco de Carvão e da Nebulosa Cabeça de Cavalo, na constelação de Órion.

Caso a nuvem de grãos esteja associada a estrelas moderadamente quentes, com temperaturas efetivas até $T_{ef} \simeq 25000K$, os grãos podem espalhar a radiação estelar, formando uma *nebulosa de reflexão*. Essas nebulosas são importantes para a determinação das propriedades físicas dos grãos. Um exemplo é a nebulosa de reflexão ao redor das Plêiades.

Quando a nebulosa está associada a estrelas muito quentes, com $T_{ef} \geq 25000K$, o gás ao redor encontra-se fotoionizado, e a nebulosa é uma *nebulosa difusa* ou *região HII*. O gás ionizado ocupa uma região bem definida no espaço, com uma separação nítida entre a região HII ionizada e quente, com temperatura eletrônica $T_e \simeq 10^4K$, e a região HI neutra e fria, com temperatura cinética de $T_c \simeq 10^2K$. As regiões HII apresentam intensa emissão nas linhas UV e ópticas do H, He e elementos pesados e, além disso, emissão em rádio e no infravermelho. Essas regiões são associadas com as regiões de formação estelar e têm um papel importante no estudo da evolução química da Galáxia e na definição dos braços espirais, dos quais são os principais traçadores (Maciel, 2002).

Outros tipos de nebulosas são formadas no processo de evolução estelar. Estrelas com massa da ordem de $1M_{\odot}$ terminam suas vidas ejetando suas camadas externas, torna-se uma anã branca e, posteriormente, uma anã negra. Expulsas, suas camadas externas formam uma *nebulosa planetária*. Este tipo de nebulosa possui propriedades análogas às região HII, pois suas estrelas centrais são objetos muito quentes com $T_{ef} \geq 30000K$ e fotoioniza essas regiões. Estrelas com massas maiores do que $9M_{\odot}$ terminam suas vidas ejetando toda ou parte de sua massa de um modo explosivo, constituindo as supernovas. Forma-se uma nebulosa gasosa brilhante a partir do material estelar espalhado pelo espaço interestelar, chamada *resto de supernova*. Através das colisões entre o material ejetado e o meio interestelar o gás nesta região é ionizado. Os processos não-térmicos, como a emissão síncrotron, são os principais responsáveis pela emissão da radiação.

Até o século XIX, as nebulosas brilhantes se confundiam com objetos como a “Nebulosa” de Andrômeda, que é uma galáxia. Huggins (1824-1911), obteve e analisou os primeiros espectros, entre 1864 e 1868, e mostrou que as galáxias tinham espectros contínuos característicos das estrelas que as compõem, enquanto as nebulosas possuem espectros de linhas brilhantes típicos de gás aquecido, tornando evidentes as distinções entre as regiões.

Os grãos interestelares são os principais responsáveis pela polarização da radiação das estrelas e, assim, fornecem evidências da existência de um *campo magnético* fraco no meio interestelar - com intensidade $B \simeq 10^{-6} \text{Gauss}$ - pois este tipo de campo pode causar uma anisotropia, como a apresentada na polarização, segundo uma direção preferencial.

O espaço interestelar contém também *raios cósmicos*, partículas de alta energia como prótons, elétrons e núcleos de elementos pesados, que atravessam a região com velocidades próximas à da luz. A detecção e análise dos raios cósmicos permite estudar as condições físicas de seus locais de origem através dos possíveis processos de aceleração que tenham sofrido.

2.1.1 Regiões de Fotodissociação

Quando somente fótons, em sua grande maioria menos energéticos do que a energia de ionização do hidrogênio, chegam à camada superficial de uma grande nuvem molecular, dissociando e ionizando suas moléculas, deixando o resto da nuvem predominantemente neutra, ou seja, molecular, a camada superficial da nuvem é chamada de região fotodominada ou de fotodissociação, PDR (*photon-dominated region*, na sigla em inglês). A distinção entre PDRs e regiões HII torna-se clara se a definição de PDR aplicada não for a de região fotodominada, já que as regiões HII também são dominadas por fótons, mas a de regiões de fotodissociação, pois moléculas dissociadas são dificilmente encontradas em regiões HII.

Uma PDR é definida abrangentemente como uma região onde as propriedades físicas e químicas do gás são determinadas por fótons penetrantes do ultravioleta distante (FUV, $6 < h\nu < 13.6\text{eV}$).

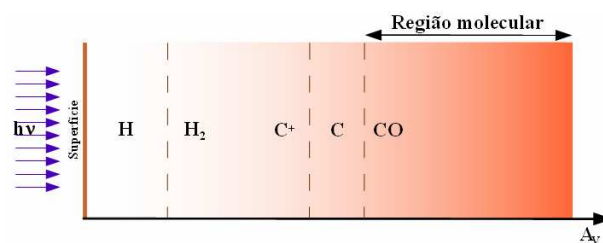


Figura 2.1: Ilustração esquemática de uma PDR com as regiões de aparecimento das principais espécies atômicas e moleculares. (Le Petit, 2012)

Próximo à superfície da nuvem, o campo de radiação FUV é forte, mas vai per-

dendo intensidade ao penetrar a nuvem e, assim, as espécies mais importantes passam de íons para moléculas; a complexidade química aumenta, pois as espécies moleculares podem ser formadas sem serem imediatamente destruídas pela radiação de alta energia (ver Le Petit et al., 2006; Gerin et al., 2009).

O aquecimento da nuvem se dá principalmente pelo campo de radiação incidente, mas outras fontes também são importantes: a desexcitação colisional de moléculas de H_2 vibracionalmente excitadas, emitindo fótons no processo; colisões poeira-gás quando a temperatura do grão é maior que a do gás; raios cósmicos, que podem penetrar fundo na nuvem; efeito fotoelétrico na superfície dos grãos e dos PAHs pelos fótons FUV; a formação e dissociação de H_2 ; a turbulência do gás; e reações químicas no interior da nuvem (Le Petit et al., 2006).

O resfriamento se dá principalmente pela emissão por moléculas excitadas, pela emissão no contínuo pelos grãos e pelas colisões poeira-gás quando a temperatura do grão é menor do que a do gás.

A densidade da nuvem e a intensidade do campo de radiação FUV basicamente determinam o tamanho e a estrutura química - a distribuição de abundância de cada constituinte químico - da PDR da nuvem.

Os grãos na nuvem molecular têm grande importância física, pois determinam grande parte da curva de extinção da nuvem, catalisam algumas reações químicas e são responsáveis por toda formação de hidrogênio molecular em condições padrão galácticas, além de participarem do balanço térmico da nuvem por aquecimento fotoelétrico e colisão poeira-gás (Le Petit et al., 2006).

Quanto mais adentramos a nuvem, ou seja, maior a extinção (A_V), mais energética deve ser a radiação para conseguir penetrá-la. Passando da região da PDR (região I na figura 2.2) dominada por fótons FUV, vem uma região ainda dominada por fótons FUV, mas somente parcialmente, pois o campo de radiação externo é fortemente atenuado. Nessa região (II na figura 2.2) há o acúmulo de capas de gelo na superfície dos grãos na nuvem molecular. A fotodissociação é devido ao atenuado campo FUV que, ainda assim, consegue fazer espécies em estado sólido na superfície dos grãos passarem para o estado gasoso.

Em regiões ainda mais profundas das nuvens moleculares, no núcleo frio, o campo de radiação FUV foi praticamente todo atenuado e somente raios cósmicos têm papel

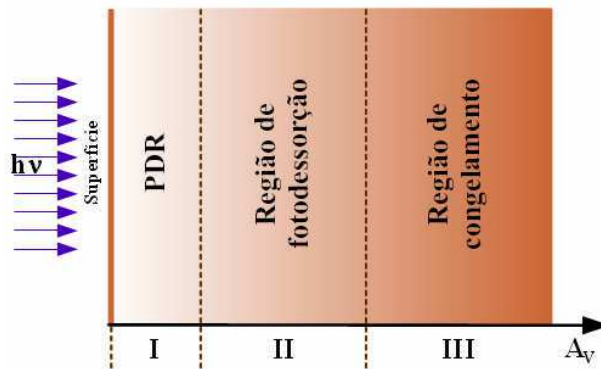


Figura 2.2: Ilustração esquemática de uma nuvem molecular com suas três regiões típicas. (Le Petit, 2012)

importante como agentes externos (Hollenbach et al., 2009).

2.2 Detecção de Moléculas no Meio Interestelar

Moléculas apresentam linhas de emissão e absorção assim como os átomos, porém o número de linhas do espectro molecular é muito maior, já que elas podem estar excitadas tanto eletronicamente como também vibracional e rotacionalmente, na fase de gás.

A mecânica quântica prevê que, assim como no caso das transições eletrônicas, somente algumas transições vibracionais e rotacionais são permitidas. As energias destes estados de vibração e rotação podem ser entendidas, respectivamente, como modos de vibração ao redor das posições de equilíbrio dos átomos da estrutura molecular, uns em relação aos outros e como rotação das moléculas como um todo ao redor dos eixos, a partir do centro de massa (Karplus e Porter, 1970).

Um espectro molecular a baixa resolução ($> 0.1 \text{ \AA}$) apresentará linhas finas e muitas bandas (linhas grossas). Numa resolução mais alta, as bandas são resolvidas em um complexo sistema de linhas finas decorrentes das transições entre estados vibracionais e rotacionais. Essas transições emitem e absorvem radiação numa ampla gama de comprimentos de onda, indo do infravermelho a microondas (Karplus e Porter, 1970), conforme mostra a tabela 2.1.

Tabela 2.1 - Comprimentos de onda de diversas emissões provenientes de transições entre diversos tipos de átomos, núcleos atômicos e moléculas. As denominações FUV, NIR e FIR são, respectivamente, ultravioleta distante, infravermelho próximo e infravermelho distante. (Karplus e Porter, 1970)

Comprimento de onda	Origem	Radiação
$10^{-1} - 10^3 \text{ \AA}$	Transições eletrônicas internas de átomos e moléculas	Raios-X e FUV
$10^3 - 10^4 \text{ \AA}$	Transições eletrônicas externas de átomos e moléculas	UV ($10^3 - 4 \times 10^3 \text{ \AA}$) Visível ($4 \times 10^3 - 7 \times 10^3 \text{ \AA}$) NIR ($> 7 \times 10^3 \text{ \AA}$)
$10^4 - 10^6 \text{ \AA}$	Vibrações moleculares	Infravermelho (IR)
$1 - 10^2 \mu m$	Vibrações moleculares	Infravermelho (IR)
$10^2 - 10^5 \mu m$	Rotações moleculares	FIR ($10^2 - 10^3 \mu m$)
$0.1 - 10^2 mm$	Rotações moleculares	Microondas ($10^3 \mu m - 0.1 mm$)
$10 - 30 cm$	Rotações moleculares e ressonância elétron-spin	Microondas
$0.3 - 300 m$	Ressonância nuclear-magnética	Ondas de rádio

A presença de moléculas no meio interestelar é inferida por suas linhas de emissão ou absorção, pois essas são características das ligações químicas entre seus átomos constituintes. Mas para moléculas mais complexas a quantidade de linhas pode ser imensa, tornando difícil distinguir entre linhas de diferentes moléculas ou entre linhas de diferentes átomos. No caso de PAHs e de outras moléculas grandes, as linhas de diferentes ligações químicas podem até ser observadas, mas a estrutura espacial das ligações entre seus átomos constituintes não pode ser inferida diretamente do espectro observado. Isso dificulta a detecção de moléculas complexas, fato percebido na redução da quantidade de moléculas detectadas com grande número de átomos. (ver tabela A.1)

As observações são feitas tanto por observatórios em solo como em órbita. Os telescópios em solo operam no infravermelho próximo, no rádio e, mais recentemente, na faixa de microondas e milimétrico/submilimétrico. Os instrumentos espaciais incluem o ISO, o *Spitzer*, o *Akari* e o *Herschel* operando do infravermelho próximo ao distante, e instrumentos menos sensíveis como o SWAS e o Odin operando com microondas.

2.2.1 Reações Moleculares na Fase Gasosa

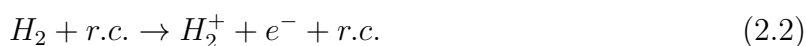
Os processos de formação e destruição de moléculas no meio interestelar apresentam quatro diferenças básicas com relação aos processos conhecidos na atmosfera terrestre (Maciel, 2002): i) os principais processos que levam à formação e fixação de uma população estável de moléculas interestelares são, basicamente, processos na fase gasosa, já que as espécies atômicas e moleculares nas nuvens interestelares estão essencialmente na fase gasosa, com exceção dos grãos sólidos; ii) ocorrência de reações envolvendo três ou mais partículas são praticamente impedidas devido às baixas densidades das nuvens interestelares, mesmo as mais densas - da ordem de 10^4 por cm^{-3} . Em compensação, devido à sua destruição mais lenta e sua maior estabilidade nessas nuvens, radicais e moléculas muito reativos em laboratório, como OH e N_2H^+ , podem ser estudados mais detalhadamente nas nuvens interestelares. Além disso, algumas espécies somente foram identificadas no meio interestelar, como HC_7N e HC_9N ; iii) a energia cinética dos átomos e das moléculas é baixa, pois as temperaturas das nuvens interestelares são muito baixas e somente reações exotérmicas têm, geralmente, importância. Algumas reações ocorrem quando processos dinâmicos injetam no gás uma energia superior à energia térmica média dos átomos nas nuvens. As nuvens têm movimentos aleatórios com velocidade ($\simeq 10 km s^{-1}$) superiores à velocidade do som em nuvens interestelares típicas ($\simeq 1 km s^{-1}$), de modo que a colisão de duas nuvens pode produzir ondas de choque com energia suficiente para elevar sua temperatura localmente por um fator da ordem de cem; iv) no meio interestelar, as reações de oxigênio são muito menos importantes nas nuvens interestelares do que nas condições de laboratório, em que a alta reatividade do oxigênio tem um papel preponderante nos processos químicos, já que a abundância de oxigênio é muito mais baixa que a do hidrogênio. Por exemplo a molécula de CO, que em condições terrestres transforma-se facilmente em CO_2 , é a segunda mais abundante no meio interestelar. Isso se deve à grande estabilidade do CO nas nuvens interestelares e mesmo nas atmosferas das estrelas mais fria e, assim, ela é utilizada para determinar a abundância da espécie mais importante, o H_2 .

2.2.1.1 Reações Íon-Molécula

Provavelmente, as reações mais importantes da fase gasosa no meio interestelar são as reações íon-molécula. A presença de íons dentro das nuvens moleculares é assegurada pela

radiação UV ou pela propagação de partículas energéticas - os raios cósmicos, e a carga elétrica de um dos reagentes resulta em uma força de atração, que favorece a reação.

Exemplos dos principais processos são (Maciel, 2002):



onde *r.c.* significa raios cósmicos.

Nas nuvens interestelares as reações íon-moléculas frequentemente envolvem o H_2 . Por exemplo, o íon H_2^+ produzido pela reação 2.2 pode desencadear as seguintes reações em nuvens densas (Maciel, 2002):



com a produção de H_2O na reação de recombinação dissociativa 2.7. Essa reação pode ser substituída pela formação de OH, como por exemplo



O mesmo resultado, isto é, a formação de H_2O e OH, pode resultar da reação



seguindo-se, então, as reações 2.5 a 2.8.

A química do carbono nas nuvens interestelares densas é também baseada nas reações íon-molécula, em especial a formação de CO. A partir do íon H_3^+ formado em 2.3 e de maneira semelhante às reações 2.4 a 2.6, temos (Maciel, 2002):



A formação do CO é feita, então, pelas reações



Em nuvens difusas a penetração da radiação produz íons reativos como o C^+ , que se associa radiativamente com H_2 (Maciel, 2002):



O produto (CH_2^+) pode sofrer reações como 2.12 a 2.14 ou formar CH ou CH_2 pelas reações



As reações íon-molécula estão em geral envolvidas na formação das moléculas mais abundantes que são observadas no meio interestelar, e têm também um papel importante na síntese de moléculas longas, como os cianopoliacetilenos HC_9N e $HC_{11}N$. De fato, acredita-se que reações íon-molécula envolvendo NH_3 ou NH_2 levem à produção de HCN, a partir do qual são formadas as moléculas mais complexas por incremento de pares de átomos de carbono.

2.2.1.2 Reações Neutro-Neutro

Embora menos eficientes que as reações íon-molécula, as colisões de átomos neutros, ou de um átomo com uma molécula, podem levar à formação de uma nova molécula. Neste caso, a interação é mais fraca, podendo eventualmente haver uma barreira de energia que dificulta a reação. Esta poderá ocorrer se a partícula incidente tiver energia suficiente ou puder atravessar a barreira de potencial por tunelamento. Alguns exemplos são:



No caso da primeira reação, a barreira é desprezível, mas a segunda é lenta para $T \simeq 10K$ e mais rápida para $T \simeq 300K$, havendo uma barreira importante (Maciel, 2002).

A molécula de H_2O pode ser produzida em nuvens interestelares a partir do O neutro - mais abundante que o íon O^+ envolvido na reação 2.9 - pela reação



Essa reação é exotérmica, mas possui uma barreira de energia de ativação correspondente a cerca de $100K$ (Maciel, 2002). Essa temperatura pode ser alcançada por meio de ondas de choque. Reações endotérmicas, como a reação envolvendo C e H_2 para produzir hidrocarbonetos ou N e H_2 produzindo amônia (NH_3) podem também ocorrer pela mesma razão.

2.2.1.3 Associação Radiativa

Reações do tipo



são chamadas reações de *associação radiativa* e podem ocorrer no meio interestelar, sendo o excesso de energia dos átomos A e B transportado pela radiação, deixando-os com energia insuficiente para se separarem. Este tipo de reação não ocorre frequentemente entre os átomos neutros, mas pode ser importante para interações íon-átomo ou íon-molécula,

como 2.15 ou em



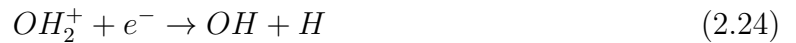
2.2.1.4 Recombinação Radiativa

Em uma recombinação radiativa, um íon recombina-se com um elétron, havendo emissão de um fóton. Por exemplo, além de 2.9, o íon O^+ pode ser destruído por



2.2.1.5 Recombinação Dissociativa

Esta é uma reação em que um íon molecular recombina-se com um elétron, com a formação de dois produtos neutros, como em



Geralmente, essas recombinações são mais rápidas que as recombinações radiativas. Outros exemplos são as reações 2.7, 2.16 e 2.17.

2.2.1.6 Reações de Troca de Carga

Em nuvens difusas, a radiação não é suficientemente energética para ionizar o O, mas o íon O^+ pode ser obtido por uma reação de troca de carga do tipo



Os íons H^+ são produzidos pela ionização do H pelos raios cósmicos. O íon O^+ produzido pode, então, ser usado para as reações iniciadas com 2.9 até a formação de H_2O ou OH.

2.2.2 Destruição de Moléculas

As reações consideradas nos processos acima podem também destruir algumas moléculas já formadas, as quais serão, então, reagentes de outras reações. Os principais processos de destruição de moléculas interestelares são a *fotodissociação* e a *dissociação colisional*.

2.2.2.1 Fotodissociação

Possivelmente o principal meio de destruição das moléculas nas nuvens interestelares difusas é a fotodissociação como, por exemplo, na reação



As moléculas em nuvens interestelares não protegidas pelos grãos de poeira podem ser destruídas pela radiação UV em escalas de tempo relativamente curtas, da ordem de algumas centenas de anos. As escalas de tempo para a fotodissociação tornam-se apreciavelmente mais longas à medida que aumenta-se a extinção da nuvem interestelar, o que tende a bloquear os fótons do campo de radiação.

2.2.2.2 Dissociação Colisional

No interior de nuvens densas o processo dominante de dissociação molecular é colisional, pois os fótons UV não conseguem penetrar devido à absorção pelos grãos nas regiões periféricas. De fato, a maior densidade nessas regiões favorece a ocorrência de reações na fase gasosa, com a eventual dissociação de espécies moleculares. Além disso, processos dinâmicos como ondas de choque podem favorecer a formação de moléculas, fornecendo a energia necessária para superar a barreira de energia de ativação. Entretanto, se o choque for suficientemente intenso, com velocidade de algumas dezenas de km/s , as colisões poderão dissociar moléculas como o H_2 , produzindo átomos de H que, por sua vez, podem dissociar colisionalmente outras moléculas como NH ou NH_3 .

2.3 Cinética de Reação

Nas nuvens moleculares densas ocorrem os principais processos moleculares. As abundâncias moleculares não são, em geral, aquelas obtidas admitindo equilíbrio químico, essencialmente devido à dependência de muitas das reações químicas com a temperatura do gás. Portanto, a química interestelar é controlada basicamente pela *cinética das reações*, de modo que as reações devem ser consideradas individualmente.

2.3.1 Taxas de Reação

Considere uma reação do tipo



Chamando σ a seção de choque da reação, pode-se definir a *constante de reação* ou *coeficiente de reação* κ pela relação

$$\kappa = \langle \sigma v \rangle \quad (2.29)$$

onde v é a velocidade relativa dos reagentes. Admitindo, por exemplo, uma distribuição maxwelliana de velocidades para os átomos reagentes, a constante de reação pode depender, portanto, da temperatura do gás.

A taxa de reação r mede a taxa de variação dos reagentes e produtos envolvidos na reação no decorrer do tempo. A taxa r é uma quantidade positiva e é, geralmente, proporcional à constante de reação e às densidades dos reagentes, podendo ser escrita como

$$r = \kappa n_A n_B \quad (2.30)$$

onde n_A e n_B são as densidades numéricas dos reagentes A e B. Se σ for medido em cm^2 e v em cm/s , a constante κ será medida em cm^3/s e, medindo as densidades em cm^{-3} , a taxa r tem unidades de $cm^{-3}s^{-1}$.

As constantes de reação podem depender fortemente da temperatura, em particular quando há barreira de energia de ativação. Essa dependência, da constante de reação κ com a temperatura é frequentemente escrita utilizando-se a clássica equação de Arrhenius,

$$\kappa(T) = A e^{-E_a/\kappa T} \quad (2.31)$$

onde A é o *fator de Arrhenius* e E_a é a energia de ativação. Desta relação, temos:

$$\ln \kappa = \ln A - \frac{E_a}{\kappa T} \quad (2.32)$$

De modo geral, as constantes de reação variam bastante de uma reação para outra e, frequentemente, com a temperatura. A tabela 2.2 mostra alguns valores médios para os principais tipos de reação na fase gasosa e pode ser considerada como uma primeira aproximação quando não houver dados disponíveis para a reação (Maciel, 2002).

Tabela 2.2 - Valores médios para os principais tipos de reação na fase gasosa. (Maciel, 2002)

Tipo de Reação	$\kappa(cm^3/s)$
Reações íon-molécula	10^{-9}
Reações neutro-neutro	10^{-11}
Associação radiativa - diatômica	10^{-17}
Associação radiativa - poliatômica	10^{-9}
Recombinação radiativa	10^{-12}
Recombinação dissociativa	10^{-6}
Reações de troca de carga	10^{-9}

2.4 Nebulosa Cabeça de Cavalo

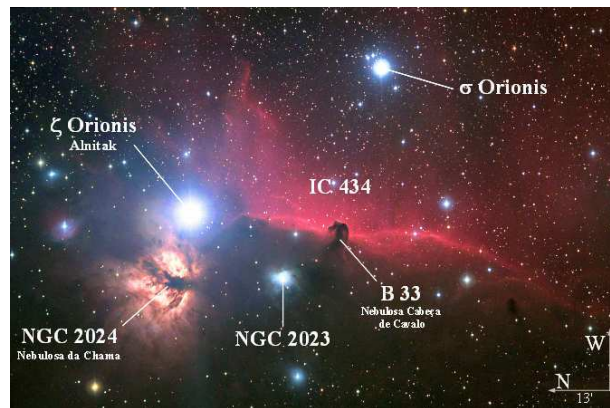


Figura 2.3: Nebulosa Cabeça de Cavalo (HHN) e circunvizinhança. (NASA, 2010)

Um importante objeto, usado como objeto-modelo, é a Nebulosa Cabeça de Cavalo, do inglês *Horsehead Nebula* (HHN). Ela aparece como uma mancha escura contra a luminosa região HII IC434, em luz visível. A HHN foi escolhida como objeto-modelo por ser exemplo representativo de PDR e de nuvem molecular, tendo sido extensivamente observada e parametrizada devido à sua distância moderada ($d \simeq 400 pc$), geometria simples e um campo de radiação FUV bem conhecido, onde a estrela $\sigma Orionis$ ioniza a região, conforme parametrizado por Gerin et al. (2009). Além disso, a modelagem clássica de Cordiner et al. (2007b) para este objeto e o seu espectro rico em linhas moleculares, como as de C_4H e de C_6H , fazem dessa nebulosa um alvo ideal para testar qualquer modelo

para a formação de linhas moleculares. Outrossim, é possível ampliar os estudos sobre a região, tendo como base os resultados obtidos por Goicoechea et al. (2009) e Gerin et al. (2009), considerando essa região como arquétipo de nuvens moleculares. As características físicas mais importantes da HHN estão sintetizadas na tabela 2.3.

Tabela 2.3 - Características físicas da Nebulosa Cabeça de Cavalo. (Gerin et al., 2009)

Nome	Barnard 33 (Nebulosa Cabeça de Cavalo - HHN)
Localização	AR: 50h40m54.27s; DEC: -02°28'00" (2000)
Distância da Terra	$\sim 400pc$
Estrela iluminadora	σ Orionis (O9.5V)
Campo de radiação FUV	60 (unidades de Draine)
Profundidade ao longo da linha de visada	$\sim 0.1pc$
Inclinação da linha de visada	$\leq 6^\circ$
	Gradiente em forma de degrau:
Perfil de densidade	$n \sim r^{-3} de \sim 10^5 - 10^3 cm^{-3}$ no núcleo frio $n \sim 5 - 10 \times 10^3 cm^{-3}$ na borda da (PDR)
Temperatura cinética	$T_K \sim 15K$ no núcleo frio; $T_K \sim 100K$ na borda (PDR)
Pressão térmica	$\sim 4 \times 10^6 K cm^{-3}$

σ Orionis é na verdade um sistema quártuplo (Kaler, 2012), na borda de um pequeno aglomerado estelar, a 1150 anos-luz da Terra. O sistema de cinco estrelas é dominado por um par de estrelas: a mais luminosa do par tem tipo espectral O9.5V e, a menos luminosa do par tem tipo espectral B0.5V.

2.5 O Código PDR Meudon

Modelos teóricos sobre a estrutura das PDRs vêm sendo feitos há cerca de 30 anos, evoluindo para complexos códigos computacionais e passando a considerar um número crescente de efeitos físicos, provendo resultados cada vez mais acurados (Röllig et al., 2007). O código PDR Meudon é um desses modelos computacionais, podendo ser usado no estudo físico e químico de nuvens difusas, PDRs, nuvens moleculares densas e regiões circum-estelares.

Há uma variedade de códigos para o cálculo de condições químicas e físicas em PDRs, sendo o código PDR Meudon um código amplamente utilizado, pelo fato de estar disponível

publicamente (<http://pdr.obspm.fr/PDRcode.html>) e de ser um dos programas usados como recurso dos trabalhos a serem conduzidos com o observatório *Herschel*. Ele é descrito em Le Petit et al. (2006), Röllig et al. (2007). Deve ser mencionado também um importante trabalho (Röllig et al., 2007) que compara os resultados de diversos códigos PDR, entre eles o código *PDR Meudon*.

2.5.1 Características do Código

O modelo considera uma nuvem unidimensional, com bordas paralelas e bem definidas (Figura 2.4), podendo ter extensão finita ou semi-finita. O observador sempre se encontra no lado negativo. O modelo considera, ainda, uma geometria plano-paralela estacionária para o gás e poeira, iluminado por um campo de radiação UV, caracterizado pela equação 2.35 e ajustado por um fator χ , que representa a intensidade do campo de radiação FUV incidente em unidades do campo de radiação interestelar médio definido por Draine (1978), proveniente de um ou de ambos os lados da nuvem (as duas intensidades podem ser diferentes - χ^+ para o lado positivo e χ^- para o lado negativo).

Uma estrela de dado tipo espectral também pode ser introduzida a uma distância d (em parsecs) para criar um campo de radiação adicional. O código resolve a equação de transferência radiativa (no UV) de uma forma iterativa, em cada ponto da nuvem, considerando também as absorções causadas por transições de H e H_2 , além do contínuo devido à poeira. O modelo também calcula o equilíbrio térmico, tendo em vista processos de aquecimento (tais como o efeito fotoelétrico), a química, raios cósmicos e outros parâmetros, além do resfriamento resultante da emissão no infravermelho e milimétrico, abundante em íons, átomos e/ou moléculas. A abundância de cada espécie é calculada em cada ponto. O estado de excitação de algumas espécies importantes é então calculado e, assim, o programa é capaz de calcular a densidade de coluna e emissividade/intensidade.

O campo de radiação padrão é o campo de Draine (Draine, 1978), adotado no código como

$$I(\lambda) = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{6.300 \times 10^7}{\lambda^4} - \frac{1.0237 \times 10^{11}}{\lambda^5} + \frac{4.0812 \times 10^{13}}{\lambda^6} \right) \quad (2.33)$$

onde λ é dado em \AA e $I(\lambda)$ está em $\text{erg} \cdot \text{cm}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{\AA}^{-1}$, sendo usada no intervalo de comprimentos de onda entre $912 \leq \lambda \leq 2400 \text{\AA}$. Para outros comprimentos de onda, o perfil usado é dado pela equação 2.34.

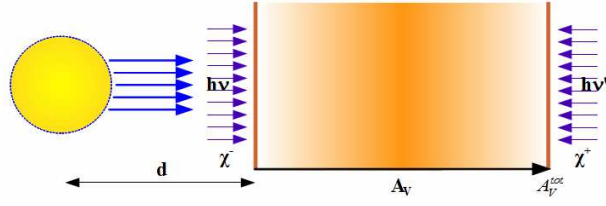


Figura 2.4: Ilustração de algumas características geométricas do código *Meudon PDR* em uma nuvem. O A_V^{tot} é o tamanho da nuvem, no caso χ^+ de uma nuvem finita. (Le Petit, 2012)

$$I(\lambda) = 1.38243 \times 10^{-5} \lambda^{-0.3} \quad (2.34)$$

É comum medir a intensidade do campo de radiação usando o parâmetro G devido a Habing (1968), que é expresso, no modelo, pela equação 2.35.

$$G = \frac{1}{5.6 \times 10^{-14}} \int_{912}^{2400} u(\lambda) d\lambda \quad (2.35)$$

O campo de radiação adicional devido à estrela é oriundo da criação de um espectro de corpo negro a partir da temperatura efetiva T_{ef} e do raio r^* do tipo espectral da estrela.

As distâncias na nuvem são medidas em extinção A_V , dada pela equação 2.36

$$A_V = 2.5 \log_{10}(e) \tau \quad (2.36)$$

com A_V dado em magnitudes e τ sendo a profundidade óptica em determinado ponto da nuvem (Rybicki e Lightman, 1979).

A relação entre a profundidade óptica e uma distância real l , entre l e A_V , é dada pela equação 2.37 (Karplus e Porter, 1970).

$$l = 2.5 \log_{10}(e) \frac{C_D}{R_V} \int_0^{\tau_{max}} \frac{dt\tau}{n_H(\tau_V)} \quad (2.37)$$

onde, $C_D = \frac{N_H}{E_{B-V}}$, sendo $N_H[cm^{-2}] = N(H) + 2N(H_2)$ a densidade de coluna total do hidrogênio não ionizado, E_{B-V} o excesso de cor, $R_V = \frac{A_V}{E_{B-V}}$, e $n_H(\tau_V)[cm^{-3}] = n(H^+) + n(H) + 2n(H_2)$ a densidade total de núcleos de hidrogênio a uma profundidade óptica visível τ_V . O limite superior de integração τ_{max} é a profundidade óptica máxima da nuvem. Valores galácticos típicos para estes parâmetros são de estados estacionários $C_D = 5.8 \times 10^{21} cm^{-2} mag^{-1}$ e $R_V = 3.1$.

Uma das grandes restrições do modelo é a aproximação de estado estacionário, de modo que os resultados não podem ser comparados diretamente às observações de regiões com evolução rápida. No entanto, o tempo em escalas de fotoprocessos é modesto comparado ao de extinção e/ou alta radiação de campos. O período de tempo dado pela fotodissociação do H_2 é tipicamente $1000/\chi$ anos na beira de uma nuvem (com radiação UV). O estado estacionário é então uma aproximação satisfatória (Le Petit et al., 2006).

Podem-se definir os parâmetros que descrevem o sistema e que podem ser ajustado como melhor convém. A primeira hipótese é de que cada célula de gás é pequena o suficiente para que todas as quantidades físicas possam ser constantes, mas suficientemente grande para a média estatística ser significativa. Podemos, assim, falar da quantidade “temperatura cinética” (T_K) como uma função da posição. Esta única hipótese exclui alguns problemas interessantes, como a presença de choques. As duas quantidades físicas mais importantes consideradas são densidade e temperatura. Para a temperatura variável, as equações são resolvidas para equilíbrio térmico, e a densidade em si torna-se uma variável se algum tipo de equação de estado for utilizada. Os casos mais usuais a serem resolvidos são aqueles de equilíbrio térmico com densidade ou pressão constantes.

Outra restrição é o grupo de propriedades ou constantes que têm valores bem definidos, mas incertezas a cerca desses valores podem existir, em alguns casos por serem determinadas experimentalmente, além de poderem variar conforme a fonte na literatura.

2.5.1.1 Reações Químicas

Os resultados do modelo são altamente dependentes da química e da micro-física (as constantes ou propriedades) existentes nas PDRs. Neste caso, o modelo só tem uso se a descrição da micro-física em que ele se sustenta for acurada. Assim, os processos físicos e químicos medidos em laboratório e observações precisas são requisitos fundamentais na construção dos modelos.

No caso das reações químicas, são diversos os parâmetros necessários para que estas tenham precisão suficiente para estimar a realidade nas PDRs. Estes parâmetros são estabelecidos através, principalmente, de modelos quânticos que calculam as taxas das reações baseados na densidade dos reagentes e produtos formados na região.

Para inserir uma nova molécula no arquivo de entrada de química do código é necessário

inicialmente adicionar alguns parâmetros básicos dessa nova espécie na lista de moléculas propriamente dita, como a abundância inicial (dada normamente como nula) e sua entalpia de formação, usada para o balanço térmico.

Após o término da lista de espécies, o código lê as reações listadas, sendo possível acrescentar reações com até dois reagentes e quatro produtos. Todas as espécies da reação devem estar declaradas na listagem inicial. Para as reações ocorrerem é preciso, ainda, declarar o tipo de reação e as três variáveis reais, obtidas a partir de cálculos quânticos fundamentais ou experimentos de laboratório, descrevendo a magnitude e a dependência com a temperatura da constante de reação, dadas como α , β e γ (ver as tabelas B.1 e B.2).

As constantes de reação são calculadas de diferentes modos, dependendo do tipo de ocorrência. Os tipos de 1 a 10 correspondem a reações de fase gasosa; os tipos de 11 a 18 são reações que envolvem grãos. Os tipos acima de 100 são referentes a casos especiais. Os principais tipos encontram-se mais detalhados abaixo.

As reações de *tipo 1* referem-se a destruição da espécie por raios cósmicos. Sua taxa de reação é dada pela equação 2.38. Neste tipo de reações alpha e beta não são usados.

$$\kappa_1 = \gamma \zeta \text{ s}^{-1} \quad (2.38)$$

Reações do *tipo 2* são de destruição por fótons secundários e sua taxa de reação é dada pela equação 2.39.

$$\kappa_2 = \gamma \zeta \left(\frac{T_K}{300} \right)^\alpha \frac{n(\text{H}_2)}{n(\text{H}) + n(\text{H}_2)} \text{ s}^{-1} \quad (2.39)$$

Na equação 2.39, além da fração de hidrogênio em H_2 , aparece ζ , a fração de H ionizado por raios cósmicos. Neste cálculo, β não é usado.

As de *tipo 3* referem-se à associação radiativa e a constante de reação é calculada pela equação 2.40:

$$\kappa_3 = \gamma \left(\frac{T}{300} \right)^\alpha \exp(-\beta/T) \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (2.40)$$

As reações do *tipo 4* são reações “ordinárias” de fase gasosa. Suas constantes de reação também são dadas pela equação 2.40. As reações de *tipo 6* são reações endotérmicas de fase gasosa com H_2 , com suas constantes de reação dadas pela equação 2.41, onde E_i é a

energia interna de cada nível do H_2 usada para diminuir a barreira exponencial, somando todos os níveis.

$$\kappa_6 = \gamma \left(\frac{T}{300.0} \right)^\alpha \exp\left(\frac{-\beta - E_i}{T} \right) \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (2.41)$$

As reações do *tipo 5* são fotoreações, cujas constantes de reação são dadas por 2.42, que só é usada quando a taxa de fotodestruição não for computada explicitamente no código por integração direta da seção de choque do campo de radiação.

$$\kappa_5 = 0.5 \gamma \chi \exp(-\beta A_V) \text{ s}^{-1}, \quad (2.42)$$

onde χ é o fator de escala do campo de radiação incidente em relação ao campo de Draine.

A primeira exceção, representada pelo *tipo 101*, é a reação 2.43, que usa a energia interna do H_2 antes das reações do tipo 6 serem introduzidas.



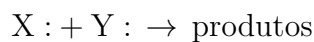
A segunda exceção é dada pela reação 2.44 que é do *tipo 102*:



Outras exceções são as reações 2.45 e 2.46, dos tipos *103* e *104*, respectivamente.



As reações do *tipo 11* são reações que ocorrem na superfície dos grãos e sua constante de reação é dada pela equação 2.47, onde X: e Y: são as espécies adsorvidas na superfícies do grão e *xkhydr* depende das características dos grãos.



$$\kappa_{11} = \frac{\gamma}{xkhydr} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (2.47)$$

As reações do *tipo 12* são fotorreações nas superfícies dos grãos e sua constante de reação é calculada pela equação 2.42. Já as de *tipo 13* são de adsorção nos grãos, com taxas de reação dadas pela equação 2.48, onde *coef* é calculado internamente:

$$\kappa_{13} = \gamma \textit{coef} \text{ s}^{-1}. \quad (2.48)$$

Os demais tipos de reação têm cálculos das constantes de reação muito mais complexos e possuem rotinas para realizá-los. Essas reações referem-se às de neutralização por colisão de íons nos grãos (*tipo 14*), as de *tipo 15* à desorção explosiva, as de *tipo 16* à desorção induzida por raios cósmicos, as de *tipo 17* são de fotodissociação, enquanto as de *tipo 18* são de evaporação térmica.

As reações de tipo 113, 123, 118 e 128 são parcialmente artificiais, construídas especificamente para considerar a adsorção e desorção do H_2 nos grãos. De fato é possível ter uma diminuição na temperatura do grão de acordo com o tamanho deste. O processo pode afetar fortemente o gás na razão de H_2 .

O grau de complexidade da química dos grãos cresce proporcionalmente ao conhecimento que se acumula sobre eles, no entanto, esse conhecimento é muito pequeno quando comparado àquele já acumulado para a química da fase gasosa. Tais implementações vem sendo realizadas nos códigos, porém este tipo de química não é frequentemente utilizada.

As tabelas apresentadas no apêndice, ou seja, as B.1 e B.2 foram usadas como arquivo de química inicial no programa Meudon para regiões PDR. Estas tabelas foram construídas tendo por base o banco de dados do próprio código, usando duas versões diferentes (2006 e 2008) combinadas, já que o arquivo mais atual não apresentava moléculas e suas respectivas reações de formação e de destruição que estavam inclusas no anterior. Estas moléculas listadas no próprio código equivalem às espécies numeradas até 120 na tabela B.1.

Todas as demais moléculas foram inseridas uma a uma, assim como qualquer reação de formação e destruição na qual elas estivessem presentes. As espécies numeradas de 150 a 201 referem-se às moléculas neutras inseridas, enquanto as com número superior a 300 são íons inclusos.

A inclusão de moléculas no arquivo de química é realizada como descrito a seguir. Primeiro, verifica-se se tal espécie possui reações de formação e destruição, bem como seus parâmetros para o cálculo da taxa de reação, conhecidas para ambientes interestelares.

Isto se dá a partir de consulta a bancos de dados de astroquímica, como o UDFA (2012), o Astrochemistry (2012), o Herbst (2012), o ChemSpider (2012) e posterior consulta ao banco de dados NIST (2012), Chemeo (2012) ou Goos et al. (2012) para aquisição da entalpia de formação de tal molécula e inserção da molécula na listagem inicial e sua rede de reações no arquivo usado como *input* do programa.

Para obter os dados de algumas espécies que não são cadastradas em tais bancos de dados ou nunca tiveram publicações com tais dados, estes foram então estimados a partir de uma reação encontrada em laboratórios terrestres, preferencialmente reações que não envolvessem água ou algum diluente líquido como catalisador. Para isso foi usado o banco de dados Reaxys (2012). Inferindo que estas reações apliquem-se ao meio interestelar, pode-se estimar as taxas de reação destas moléculas, assim como algumas reações de destruição.

Simulações e Modelagens

As simulações usando o código *PDR Meudon* foram divididas, basicamente, em três etapas, de maneira a otimizar o estudo das condições físicas e químicas mais relevantes na formação e destruição de moléculas que, de alguma forma, estejam relacionadas à origem de vida tal como conhecemos. O objeto teste utilizado foi a Nebulosa Cabeça de Cavalo (*HHN*), juntamente com um campo de radiação adicional proveniente de uma estrela, a qual simulava a estrela mais luminosa (tipo O9,5V) de σ *Orionis*, conforme parametrizado por Gerin et al. (2009), e abundâncias iniciais de várias espécies dadas segundo Goicoechea et al. (2009). Nas primeiras simulações, mantivemos a densidade de núcleos de hidrogênio constante, em uma tentativa de representar a situação real, permitindo o uso da temperatura cinética T_K do modelo, compatível com dados obtidos na literatura. Nessa etapa, realizamos uma série de testes do código. Numa segunda etapa, as simulações foram repetidas e consideramos o impacto nas abundâncias derivadas das moléculas de várias suposições em relação ao estado do gás (modelos isocórico, isotérmico e isobárico), decidindo em favor de um modelo isobárico. Na terceira etapa, obtivemos as abundâncias de várias moléculas, incluindo algumas de potencial importância pré-biótica: CN e seus íons, HCN, HNC, nitrilas e seus íons, hidretos de nitrogênio, benzeno. Investigamos o papel dos ânions e dos PAHs. Finalmente, exploramos canais de produção para dois heterocíclicos nitrogenados com relevância em astrobiologia, o pirrol e a piridina.

3.1 Condições Iniciais da Nebulosa Cabeça de Cavalo

A tabela 3.1 apresenta um sumário das condições iniciais.

As abundâncias dos metais relativas ao hidrogênio, que constam na tabela 3.1, foram

obtidas como um valor médio das simulações e estimativas de Goicoechea et al. (2009). Da mesma forma, a densidade padrão n_H foi escolhida por ser um valor intermediário entre as estimativas dos limites máximo e mínimo dadas por Gerin et al. (2009) para o núcleo frio da nebulosa.

Tabela 3.1 - Parâmetros iniciais do modelo padrão para a Nebulosa Cabeça de Cavalo. As abundâncias que não constam na tabela foram mantidas como no padrão do código Meudon, normalmente $\sim 10^{-20}$.

Parâmetro	Valor	Unidade	Comentário
Campo de radiação FUV - χ	60	"Draine"	Draine (1978)
Temperatura cinética $T_{inicial}$	15	K	Goicoechea et al. (2009)
Pressão térmica	4×10^6	$K cm^{-3}$	
Tipo espectral da estrela iluminadora	O9.5V		Kaler (2012)
Distância d da estrela à HHN	3.5	pc	Kaler (2012)
Taxa de ionização por raios cósmicos	5×10^{-17}	s^{-1}	
Densidade de núcleos de hidrogênio - n_H	10^4	cm^{-3}	
[He]	1.00×10^{-1}		
[O]	3.02×10^{-4}		
[C]	1.38×10^{-4}		
[N]	7.95×10^{-5}		em relação ao hidrogênio:
[D]	1.60×10^{-5}		$n(X)/n_H$
[S]	3.50×10^{-6}		
[Fe]	10^{-8}		
[Si]	10^{-8}		

Na tabela 3.1, as abundâncias dos elementos referem-se à fase gasosa. As abundâncias de O, C e S têm depleções moderadas devido aos grãos, N não tem depleção e Fe e Si têm fortes depleções. Para facilitar possíveis comparações com os resultados de Goicoechea et al. (2009), usamos as abundâncias solares de Anders e Grevesse (1989), as mesmas empregadas por Goicoechea et al. (2009).

3.2 Modelo para uma Densidade de Gás Constante

O primeiro passo foi considerar o modelo com uma densidade de gás constante, com $n_H \simeq 10^4 cm^{-3}$, onde n_H é a densidade total de núcleos de hidrogênio $n_H = n(H) +$

$2n(H_2) + n(H^+)$, adotando os parâmetros de Gerin et al. (2009) para a HHN.

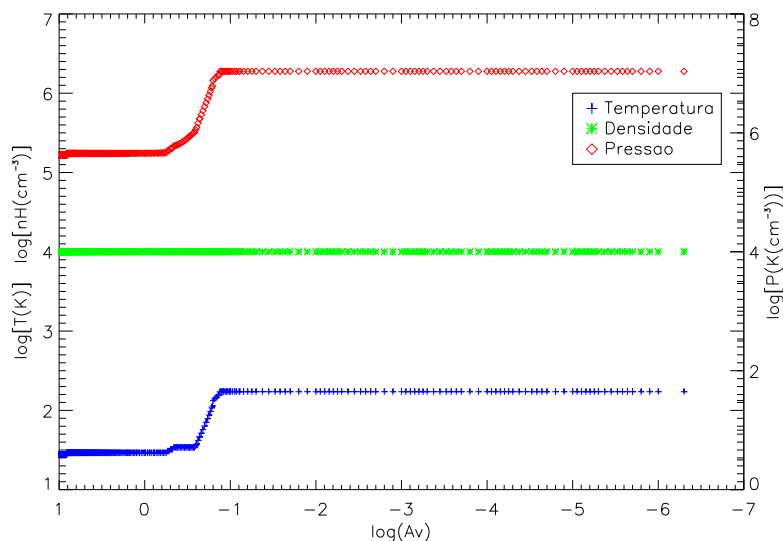


Figura 3.1: Variação dos parâmetros densidade do gás, temperatura e pressão para o modelo com densidade do gás constante.

A figura 3.1 mostra previsões para a temperatura, densidade do gás e pressão como função da profundidade da PDR para o modelo com densidade constante. A temperatura é mais baixa na região interna até $A_V \sim -1$, indicando a dependência do aquecimento fotoelétrico com a intensidade do campo de radiação FUV.

3.2.1 Convergência nas Iterações

Para garantir que fosse escolhido o número adequado de iterações, ou seja, aquele que fosse suficiente para a convergência dos resultados, foram feitos testes de maneira a determinar a influência do número de iterações nos resultados. O programa foi rodado com 20, 30 e 50 iterações para as moléculas C, CH_4 , CN e HCN, escolhidas por serem espécies simples típicas das nuvens. O resultado é mostrado na figura 3.2. Mesmo quando se usam entre 5 e 10 iterações podemos ver que a convergência é alcançada rapidamente (figura 3.3).

Pelas figuras 3.2 e 3.3 observamos que a convergência dos dados se dá já para a menor quantidade de iterações e que a diferença dos valores obtidos para um número maior de iterações não é significativa em nenhum dos casos observados. Esses resultados permitem

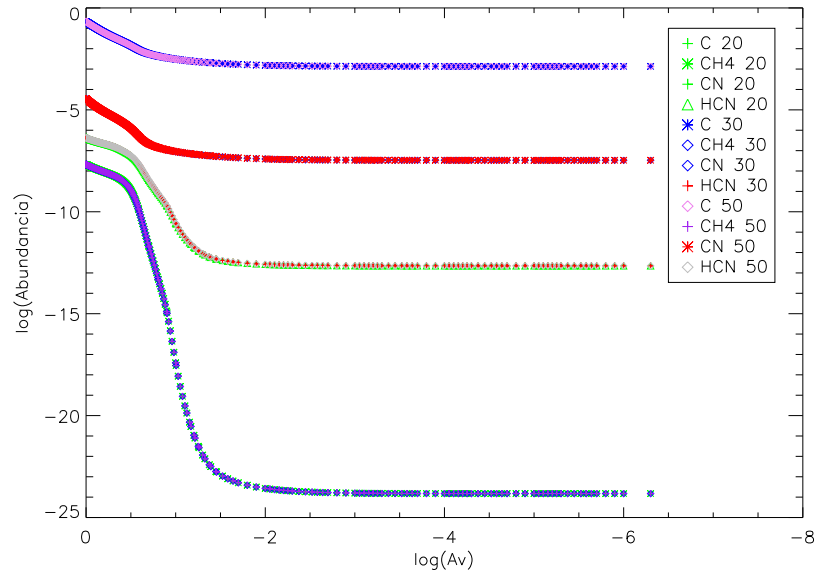


Figura 3.2: Teste de convergência para a Nebulosa Cabeça de Cavalo usando as espécies C, CH₄, CN e HCN para 20, 30 e 50 iterações do código *Meudon PDR*

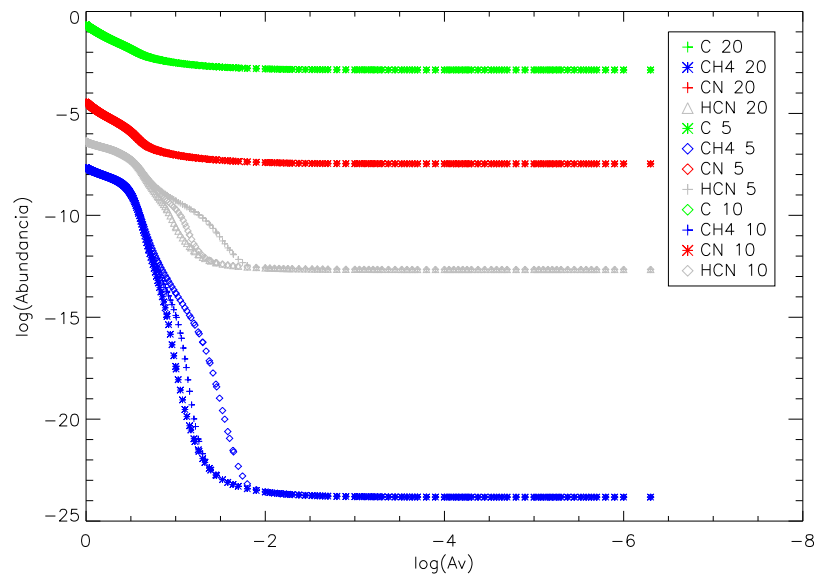


Figura 3.3: Teste de convergência para a Nebulosa Cabeça de Cavalo usando as espécies C, CH₄, CN e HCN para 5, 10 e 20 iterações do código *Meudon PDR*

considerar que não há necessidade de simular a região com um número muito grande de iterações. Porém, Le Petit et al. (2006) adverte para flutuações nos dados que podem ocorrer nas primeiras dez iterações. Portanto, optou-se por usar vinte iterações em nossas

simulações, diminuindo, assim, as incertezas nos resultados. A profundidade da nuvem também determinará o número de iterações adequado. Para nuvens difusas típicas ($A_V = 0.5 - 1$ e $n_H = 100 \text{ cm}^{-3}$) são suficientes dez iterações para alcançarmos a convergência, enquanto que para nuvens escuras, modeladas como nuvens semi-infinitas, bastam 5-8 iterações. Já nuvens muito difusas ($A_V < 0.5$) podem exigir 20 iterações.

3.2.2 O Papel dos Raios Cósmicos

Os raios cósmicos afetam o estado de ionização e a física das nuvens moleculares, sendo a principal fonte de aquecimento e ionização do gás nas regiões mais espessas da nuvem, blindadas contra o campo de radiação interestelar. Um outro efeito dos raios cósmicos é a produção de fótons UV secundários no interior das nuvens por cascatas eletrônicas do H_2 em seguida à excitação do H_2 por colisões com raios cósmicos (Prasad e Tarafdar, 1983). Portanto, os raios cósmicos mantêm um certo grau de ionização no gás blindado contra a radiação UV e podem desempenhar um papel fundamental na química íon-neutro ao determinar as abundâncias de íons chave (Herbst e Klemperer, 1973).

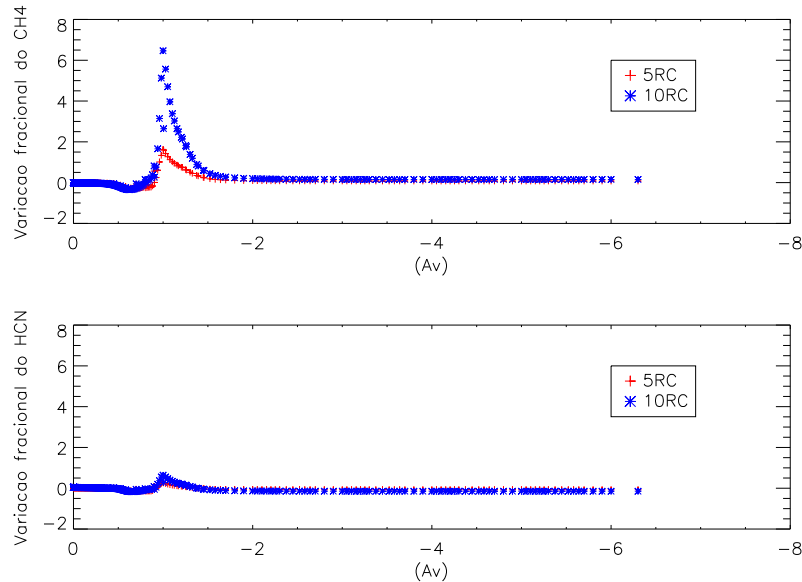


Figura 3.4: Variação das abundâncias de CH_4 e HCN na Nebulosa Cabeça de Cavalo, simulada para a taxa de ionização por raios cósmicos aumentada em 5 e 10 vezes.

Como podemos ver nas figuras 3.4 e 3.5, no caso de maior taxa de ionização por raios cósmicos, há alterações das densidades de algumas espécies mais abundantes para uma

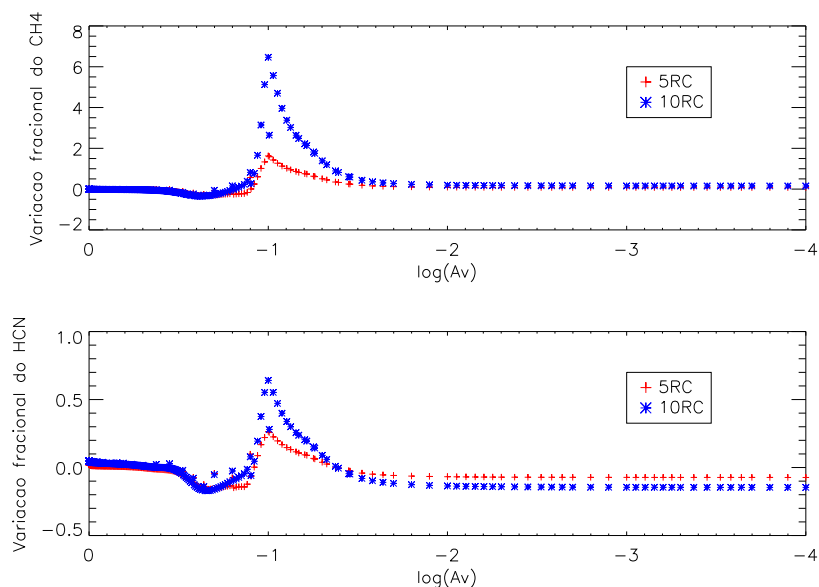


Figura 3.5: Variação das abundâncias de CH_4 e HCN na Nebulosa Cabeça de Cavalo, simulada para a taxa de ionização por raios cósmicos padrão e esta aumentada em 5 e 10 vezes, ampliando a região onde há diferença causada por esta taxa.

taxa de ionização diferente daquela padrão usada no modelo para a HHN. Concluímos que este parâmetro pode ter relevância na modelagem física da região, como seria de se esperar do fato que ele é responsável por diversas reações de destruição das moléculas, como pode ser visto na tabela B.2, no apêndice. Ademais, a ionização por raios cósmicos pode ter um impacto maior na produção de espécies menos abundantes, formadas a partir dos produtos das reações de raios cósmicos com as espécies mais abundantes. Deve-se notar que a grandes profundidades ópticas, onde a radiação UV não penetra, a única fonte de ionização e dissociação de certas moléculas são os raios cósmicos.

3.2.3 Efeitos das Incertezas da Entalpia de Formação

A entalpia de formação ($\Delta_f H^\circ$) de um composto químico refere-se à variação da energia da reação de formação deste composto a partir das espécies elementares que o compõem. Trata-se da energia liberada ou absorvida pela reação de formação de compostos.

Este foi o parâmetro físico de maior incerteza do modelo, pois ainda não existem resultados definitivos na literatura, não havendo consenso entre os autores. Em alguns casos foi usada a entalpia medida a 298K, enquanto a maioria dos compostos foram medidos a

zero Kelvin. As principais referências para se obter os valores de $\Delta_f H^\circ$ usados nas simulações foram Goos et al. (2012), NIST (2012), Le Teuff et al. (2000), Lide et al. (2008) e o próprio banco de dados do código *PDR Meudon*.

Os valores das entalpias de formação de cada composto usado na modelagem da HHN, encontram-se no apêndice, na tabela B.1, onde (*) indica $\Delta_f H^\circ$ medida a 298K e (**) representa os isômeros mais estáveis.

Para estudar as variações causadas pela entalpia de formação, a figura 3.6 apresenta os efeitos da variação deste parâmetro entre limites inferiores e superiores para alguns compostos. Para isto, seguiu-se os seguintes critérios analisados a partir dos valores que já constavam no banco de dados do próprio código *PDR Meudon*:

1. $\Delta_f H^\circ$ dos cátions é sempre maior que $\Delta_f H^\circ$ dos compostos neutros.
2. $\Delta_f H^\circ$ dos compostos neutros é sempre maior que $\Delta_f H^\circ$ dos ânions.
3. Os cadeias maiores possuem maiores $\Delta_f H^\circ$ do que os de cadeia menor da mesma “família”, por exemplo, $\Delta_f H^\circ(C_3N) > \Delta_f H^\circ(C_2N)$.

Seguindo estes critérios, foram escolhidas algumas moléculas para que se realizassem as comparações tanto por possuírem os limites de maiores e menores entalpia de formação, caso do C_5N^+ e do H_2O respectivamente, como também o CN com seu cátion e ânion. Os valores usados para este estudo podem ser encontrados na tabela 3.2.

Tabela 3.2 - Valores máximos e mínimos usados no teste de variação da entalpia de formação ($\Delta_f H^\circ$) em kJ/mol.

Espécie	$\Delta_f H^\circ$	$\Delta_f H^\circ$ limite – inferior	$\Delta_f H^\circ$ limite – superior
CN	103.200	63.975	429.300
CN^+	429.300	103.200	2000.000
CN^-	63.975	-93.965	103.200
C_5N^+	1800.000	-93.965	2000.000
H_2O	-57.100	-93.965	2000.000

A partir da figura 3.6, percebe-se que a variação deste parâmetro tem pouca relevância na abundância dos compostos ao longo da HHN. Este é um parâmetro a ser considerado em análise mais fina, já que este resultado só é representativo para as reações em fase

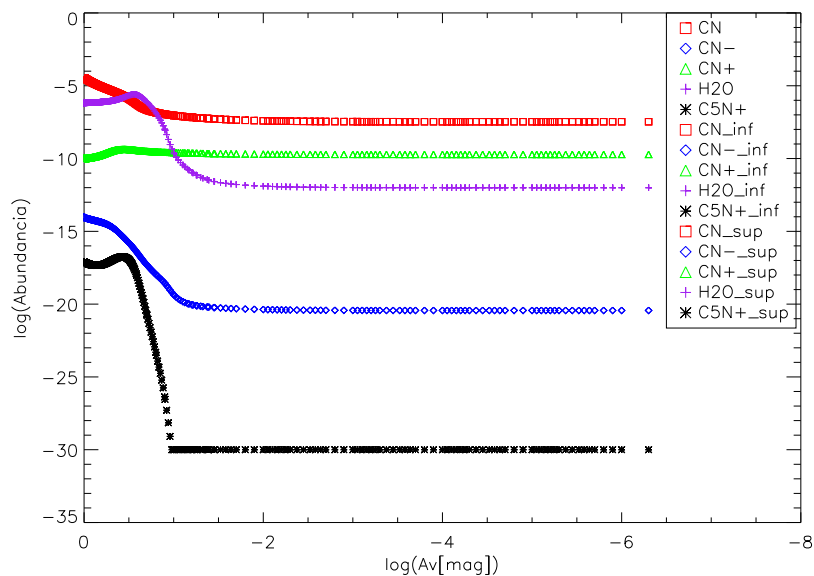


Figura 3.6: Teste da influência da variação da entalpia de formação, ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo, usando-se valores máximos e mínimos possíveis.

gasosa, desconsiderando as reações nos grãos, como acontece neste formato do modelo.

A influência da entalpia de formação na abundância das espécies tem que ser melhor estudada em um modelo que considere as reações nos grãos dentro da nuvem.

3.2.4 Escolha da Base de Dados de Química

A fim de verificar se nossas simulações geravam resultados compatíveis com os obtidos por trabalhos anteriores Gerin et al. (2009) e Goicoechea et al. (2009), obtivemos as abundâncias de algumas moléculas simples, estudadas nos trabalhos citados, como CO, CO^+ , HCO, HCO^+ , C_2H e C_3H em função da profundidade da nuvem. O comportamento das abundâncias pode ser analisado a partir da figura 3.7.

Pela figura (3.7), o comportamento para as curvas de abundância das espécies CHO reproduz bem os resultados de Gerin et al. (2009) e Goicoechea et al. (2009), para $\log(A_V) < 0.8$. Ao compararmos nossos valores, obtidos com densidade constante, aos dos artigos citados, levamos em conta que Gerin et al. (2009) e Goicoechea et al. (2009) consideram um perfil de densidade $n_H(r) \propto r^{-p}$, onde r é a distância do centro à borda da nuvem, sendo mais plano na região central ($p = 0.5$) e mais acentuado na região mais externa ($p = 0.3$). O raio de transição ($r \approx 0.04$) pc corresponde a $n_H \simeq 2 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$. Desse modo, é

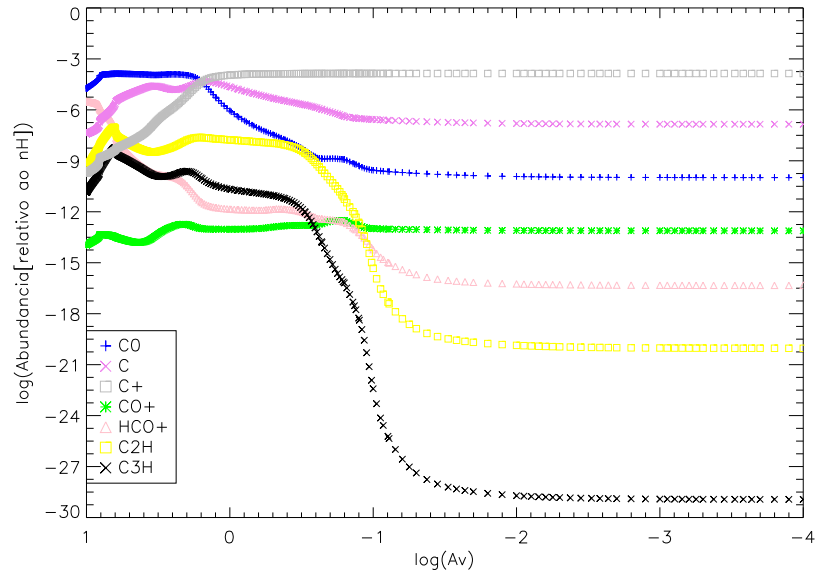


Figura 3.7: Abundâncias de algumas espécies CHO, ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo, para o modelo com densidade do gás constante, usando o banco de dados de química atualizado neste trabalho.

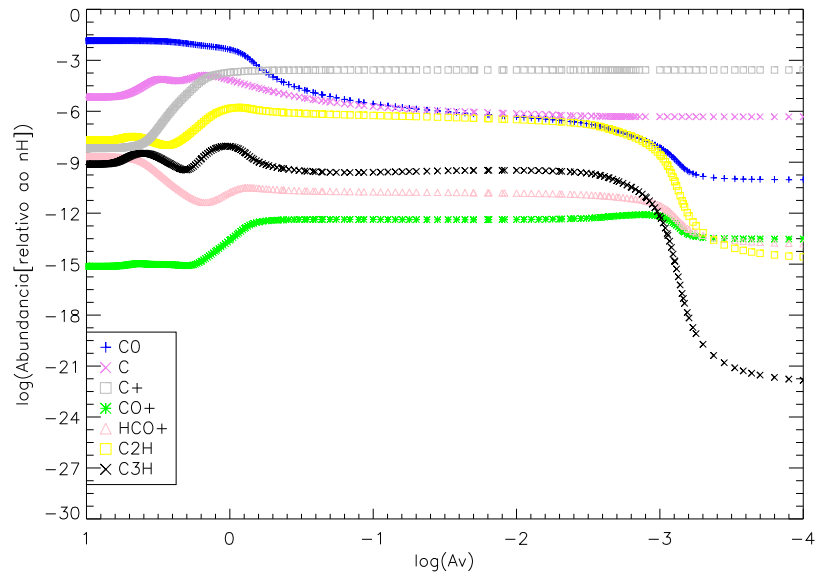


Figura 3.8: Abundâncias de algumas espécies CHO ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo, usando apenas o arquivo de química, de 2006, do próprio banco de dados do código PDR Meudon.

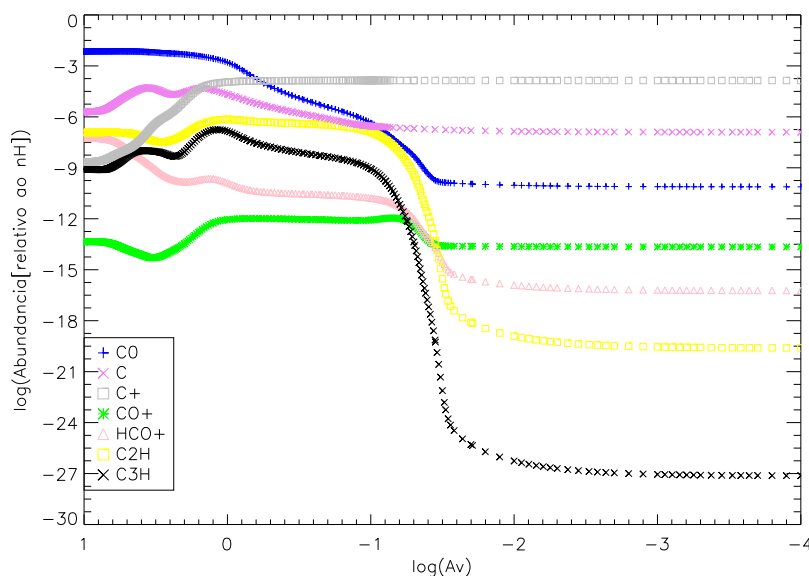


Figura 3.9: Abundância de algumas espécies CHO ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo, usando o arquivo de química do próprio banco de dados do código PDR Meudon, atualizado em 2008.

esperada a discrepância encontrada na região central onde ocorre a mudança do regime de densidade.

Deve-se observar, ademais, o efeito da base de dados da química adotada. Os resultados da figura 3.7 incluem nossas atualizações da química. Já em uma simulação usando o arquivo de química datado de 2006, conforme mostra a figura 3.8, vemos que as moléculas se mantêm com maior abundância até $A_V \simeq 10^{-3}$ mag, o que não ocorre quando se usa um arquivo de química com uma rede de reações mais ampla.

A figura 3.9 mostra a abundância das mesmas moléculas para um arquivo de química mais recente, obtido em 2008. Percebe-se que a queda da abundância das moléculas acontece muito mais próximo ao centro da nuvem, em $\log(A_V) = 0.8 - 0.9$ mag. Este resultado é obtido mesmo sem usar o arquivo de química mais complexo e com reações de formação e destruição de moléculas mais complexas, como mostrado na figura 3.7.

Na próxima seção, será investigado o que os modelos com um perfil de gradiente de densidade de gás predizem e se os resultados seriam mais compatíveis com aqueles encontrados na literatura.

3.2.5 Moléculas Nitrogenadas Simples: CN, HCN e HNC

Após o teste de algumas propriedades físicas características da região da HHN, pode-se, enfim, começar a análise do comportamento de algumas moléculas chaves para a química prebiótica. Para isso, o estudo inicial envolveu as moléculas CN, CN^+ , CN^- , HCN e HNC, dada a relevância destas para a formação de moléculas orgânicas nitrogenadas de importância biológica. As abundâncias obtidas, em relação ao CN, estão representadas no gráfico 3.10.

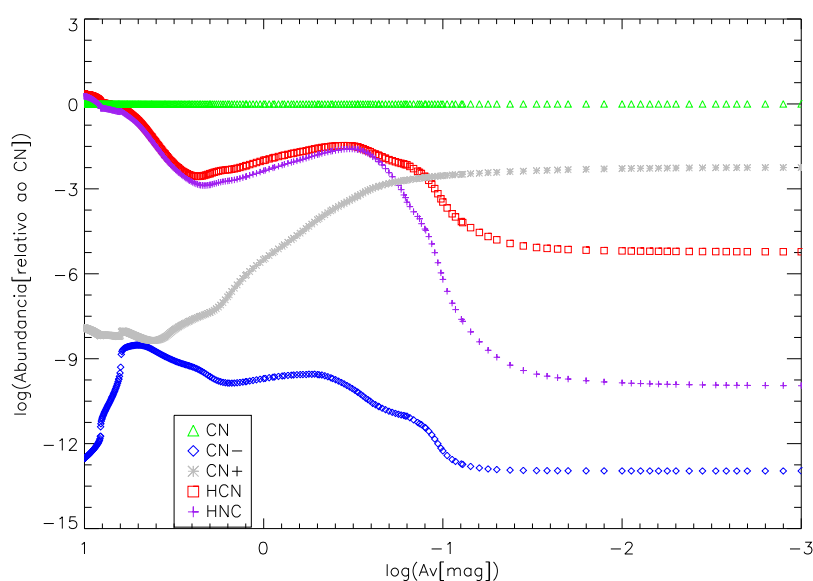


Figura 3.10: Abundâncias do CN, CN^+ , CN^- , HCN e HNC em relação ao CN ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavallo, para o modelo com densidade do gás constante.

Estes primeiros resultados são importantes, pois representam o primeiro passo em direção ao cálculo das abundâncias dos heterocíclicos nitrogenados. A partir deles pode-se prever e comparar as abundâncias de moléculas de relevância biológica, já que as abundâncias das moléculas orgânicas fundamentais estão diretamente relacionadas com os processos de formação e destruição destas três moléculas: CN, HCN e HNC.

É notável a diferença da abundância entre as moléculas HCN e HNC, mas este fato é compatível com o esperado já que estas moléculas possuem diferentes processos de formação e o HCN é mais facilmente formado, pois a razão entre o número de vezes em que o HCN aparece em reações de formação sobre o número de vezes em que é destruído é $\frac{f}{d} = 0.88$, enquanto a do HNC é de apenas $\frac{f}{d} = 0.32$, como pode ser observado no apêndice B.2.

Há de se considerar ainda que a baixa abundância do CN^- pode ser devida às poucas reações de formação e destruição conhecidas e estudadas para este ânion no meio interestelar. Já o CN^+ tem uma rede de reações mais completa, o que implica em uma abundância mais condizente com a realidade.

3.3 Modelo Isobárico

No modelo isobárico, o programa calcula o balanço térmico a partir da temperatura inicial. A pressão é definida como $P = n_H \times T \text{ cm}^{-3}K$.

A figura 3.11 mostra previsões para a temperatura, densidade do gás e pressão para o modelo com pressão constante como função da profundidade da PDR. A queda na temperatura no centro da nuvem provoca um aumento na densidade, como pode ser visto na figura 3.11. Além disso, o perfil do gradiente de densidade é proporcional a r^{-3} , até $n_H \simeq 10^5$.

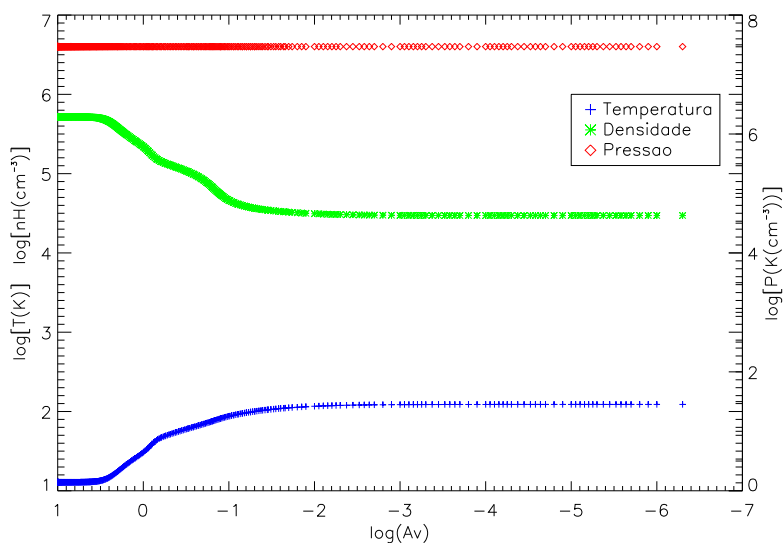


Figura 3.11: Variação dos parâmetros densidade do gás, temperatura e pressão para o modelo isobárico.

Segundo Le Petit (2009), os modelos isobáricos podem apresentar algumas instabilidades numéricas devido à variação tanto da densidade como também da temperatura. Realmente pode-se observar uma instabilidade nos parâmetros da figura 3.11 no intervalo

entre $\log(A_V) = -0.5$ e $\log(A_V) = -1.5$ mag.

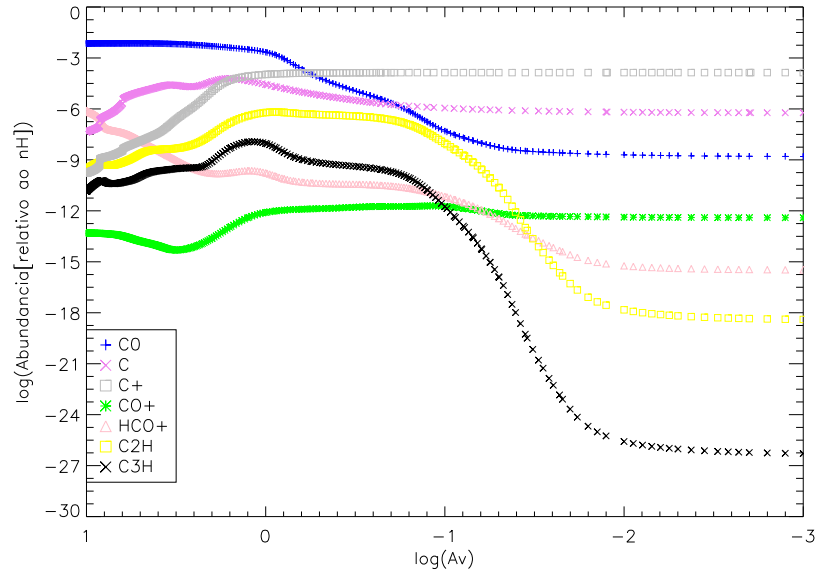


Figura 3.12: Abundâncias de algumas espécies CHO ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavallo para o modelo isobárico.

Para este modelo, as abundâncias das espécies CHO mostradas na figura 3.12 quando se compara com os dados gerados por Gerin et al. (2009) e Goicoechea et al. (2009), é compatível com estes trabalhos, apresentando o mesmo comportamento da curva de densidade e valores semelhantes, principalmente próximo ao núcleo da nebulosa.

De fato, Habart et al. (2005), em seu trabalho usando o código Meudon também para a HHN, comparando seus dados a emissões observadas por algumas espécies, também chega a conclusão que o modelo isobárico representa melhor os dados observados. Porém, como neste trabalho foram usadas apenas reações em fase gasosa, desconsiderando as que envolvem grãos, ambos modelos geram resultados semelhantes de abundâncias, como prevê Le Petit (2009).

O gráfico 3.13, referente ao modelo isobárico, possui o mesmo perfil de abundância para as espécies CN , CN^+ , CN^- , HCN e HNC que o gráfico 3.10 obtido para o modelo de densidade de gás constante. Os valores das abundâncias são bastante compatíveis entre si. Há, neste caso, um comportamento com oscilações no perfil da abundância nas reações mais internas da nebulosa, entre $A_V = 0.5$ e $A_V = 10$ magnitude, que se trata, praticamente da mesma região de instabilidade apresentada para os próprios parâmetros físicos do modelo,

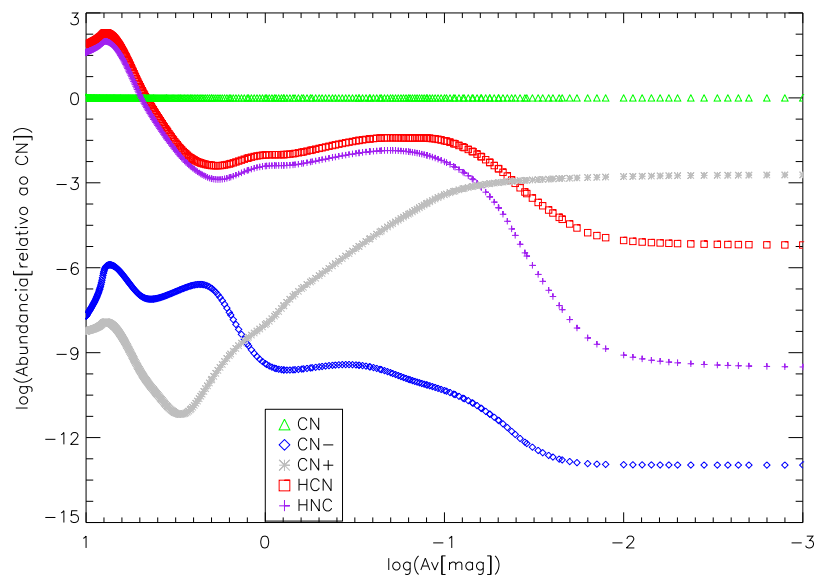


Figura 3.13: Abundância do CN, HCN e HNC para o modelo isobárico ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo.

como visto na figura 3.11.

3.4 Modelo Isotérmico

No caso do modelo isotérmico, o programa calcula o balanço térmico, porém, a densidade do gás também permanece constante. A figura 3.14 mostra previsões para a temperatura, densidade do gás e pressão para o modelo com temperatura constante como função da profundidade da PDR.

A figura 3.14 mostra uma queda da pressão próximo ao centro da nuvem. Esta queda deve-se, principalmente, à transição entre hidrogênio neutro e ionizado, já que a densidade é definida aqui como a densidade total de prótons $n_H = n(H) + 2n(H_2) + n(H^+)$ (Le Petit, 2009). O modelo isotérmico foi obtido apenas para comparação com os outros modelos, já que a física usada aqui é bastante simples, considerando apenas a pressão como variável, ainda assim, considerando apenas o hidrogênio para o cálculo de n_H . Este modelo é pouco plausível, o que justifica o fato dele ter sido pouco utilizado para PDRs (uma exceção é Cordiner et al. (2007b)).

Para o caso do modelo isotérmico, a abundância destas moléculas apresenta a mesma

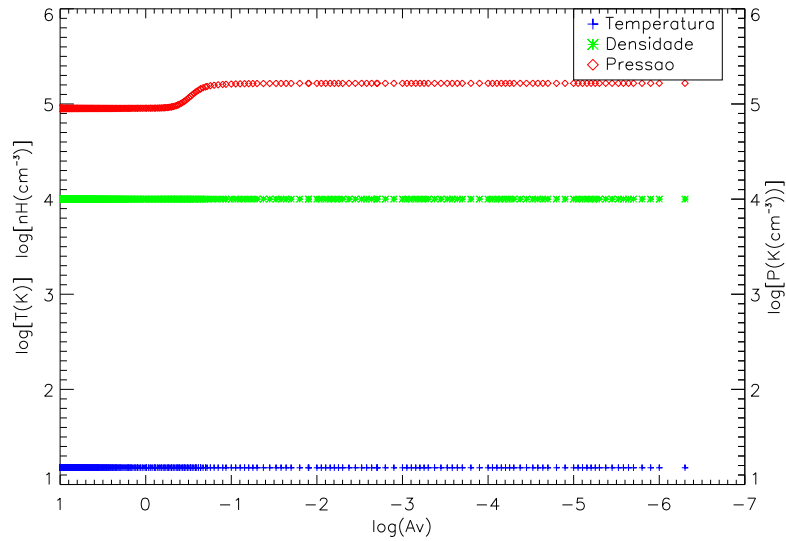


Figura 3.14: Variação dos parâmetros densidade do gás, temperatura e pressão para o modelo isotérmico.

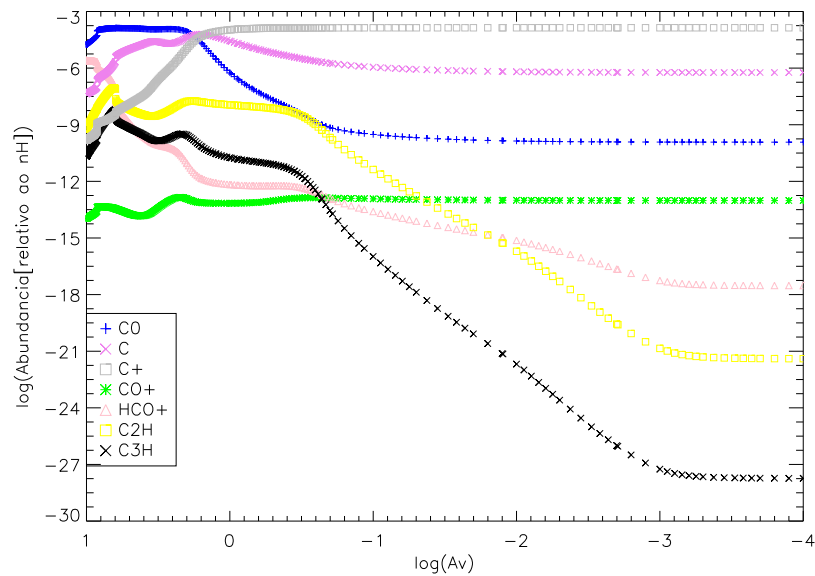


Figura 3.15: Abundâncias de algumas espécies CHO, relativo à densidade, para o modelo isotérmico ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavallo.

discrepância de até duas ordens de grandeza quando comparadas aos trabalhos de Gerin et al. (2009) e Goicoechea et al. (2009), mas a física envolvida neste modelo é mais simples que a usada nos demais. Dessa forma, já era esperado alguma diferença com outros dados.

Mesmo assim, as abundâncias encontradas são bastante semelhantes ao modelo com densidade constante.

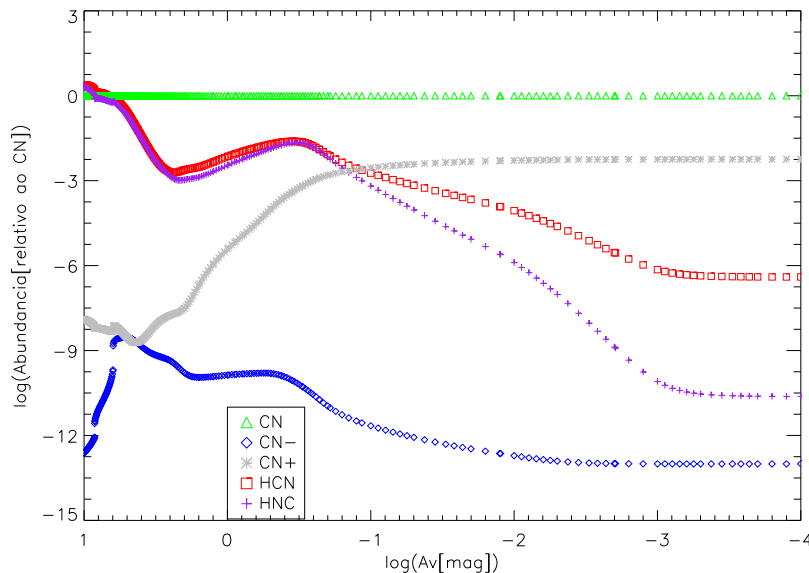


Figura 3.16: Abundância de CN, HCN e HNC para o modelo isotérmico ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavallo.

Embora o modelo isotérmico seja bastante simples, a figura 3.16 apresentou resultados bastante similares aos outros dois modelos, se bem que haja uma evidente instabilidade para as moléculas HCN e HNC próximo à $\log(A_V) = -1$ mag e o pico do HCN seja menor, chegando a coincidir com o pico do HNC, fato que não ocorre para os demais modelos.

Em todos os cálculos a seguir utilizamos o modelo isobárico, por ser o mais plausível do ponto de vista físico.

3.5 Nitrilas

Algumas moléculas simples contendo nitrogênio foram analisadas, pois através da reação destas é que o nitrogênio se torna disponível para a formação de moléculas mais complexas e que são fundamentais para a vida como a conhecemos. Desta forma, foram escolhidas para análise as moléculas C_2N , C_3N , C_5N , C_2N_2 , HC_3N -cianoacetileno, HC_5N -cianodiacetileno e H_3C_3N -acrilonitrila, bem como seus cátions, exceto para a acrilonitrila. Conduzimos uma atualização para os arquivos de química do código *Meudon* para

incluir uma série de nitrilas. Como ilustração, a tabela 3.3 apresenta as reações químicas e seus respectivos parâmetros para a inclusão da acrilonitrila (H_3C_3N). As abundâncias destas moléculas são apresentadas nas figuras 3.17 e 3.18.

Tabela 3.3 - Reações químicas, parâmetros e tipos de reação usados na modelagem da Nebulosa Cabeça de Cavalo para a acrilonitrila (C_3H_3N).

Reagentes		Produtos		γ	α	β
c5h5n	photon	c2h2	c3h3n	4.00e-12	0.00	1.8
c+	c3h3n	c3h2+	hcn	9.84e-10	0.00	0.0
c+	c3h3n	c3h3+	cn	1.80e-09	0.00	0.0
c3h3n	phosec	c2h3	cn	1.30e-17	0.00	375.0
c3h3n	photon	c2h3	cn	1.00e-10	0.00	1.7
cn	c2h4	c3h3n	h	1.25e-10	0.70	30.0

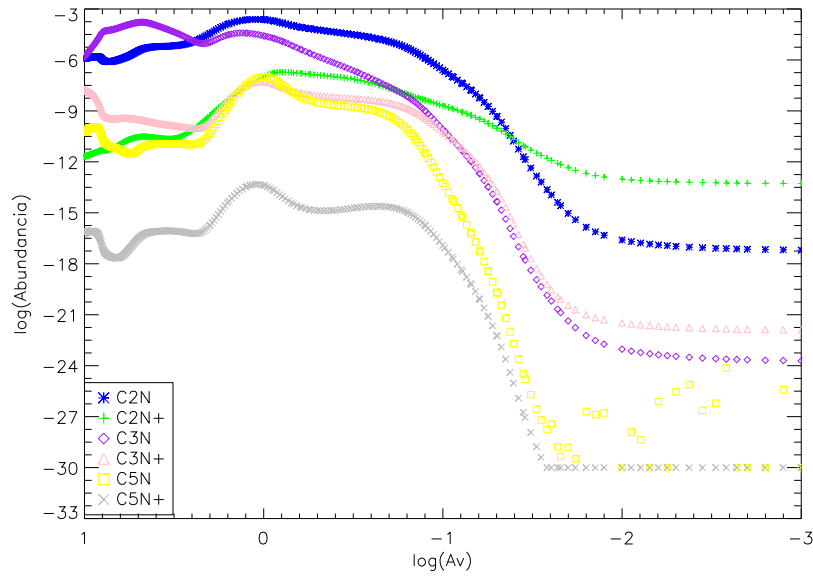


Figura 3.17: Abundância de algumas moléculas nitrogenadas ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo.

Algumas dessas moléculas nitrogenadas apresentam um comportamento singular. As abundâncias dos C_5N , C_5N^+ , HC_3N , HC_5N e do HC_5N^+ apresentam um platô em sua abundância em 10^{-30} (formalmente zero em nossas simulações), indicando que suas

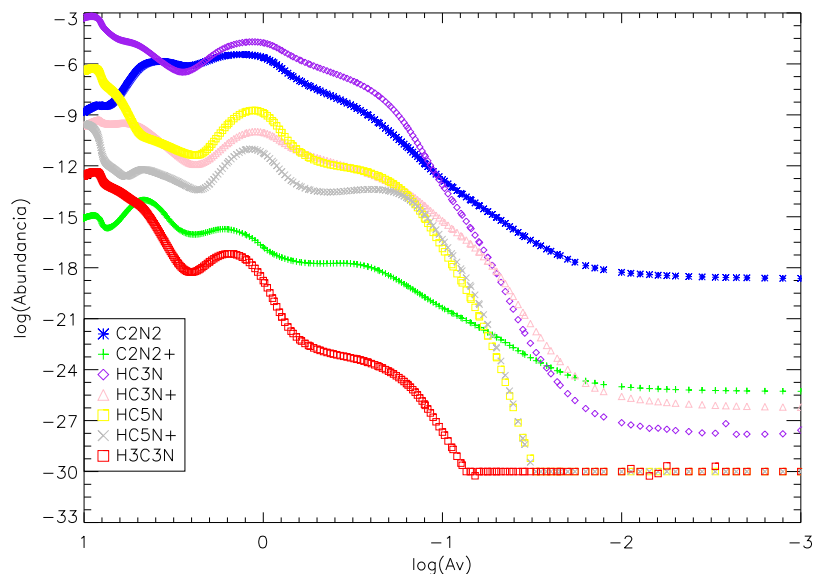


Figura 3.18: Abundância de algumas moléculas nitrogenadas na extensão da Nebulosa Cabeça de Cavalo.

abundâncias caem rapidamente em direção à borda da nebulosa, concentrando-se ao redor da sua região central.

Tanto o C_5N como o HC_3N apresentam ainda uma flutuação no limite do zero em suas abundâncias, assinalando alguma instabilidade na dinâmica das reações. Essa instabilidade deve ser corrigida quando suas reações químicas de formação e destruição nos ambientes interestelares e circum-estelares forem estudadas mais profundamente.

Um resultado significativo é observado para as moléculas C_2N , C_3N e HC_3N , pois suas espécies neutras começam mais abundantes, porém, ainda no começo da nuvem as espécies iônicas se tornam mais abundantes. Este comportamento é esperado devido à diminuição da radiação ultravioleta distante que ocorre dentro da nuvem, mantendo os cátions mais estáveis e abundantes depois de serem formados.

3.6 Íons

Alguns poucos ânions já possuem algumas reações de formação e de destruição conhecidas, assim como seus parâmetros quânticos usados nos cálculos de taxa de reação. Essas poucas moléculas também foram estudadas e são mostradas nas figuras 3.19 e 3.20.

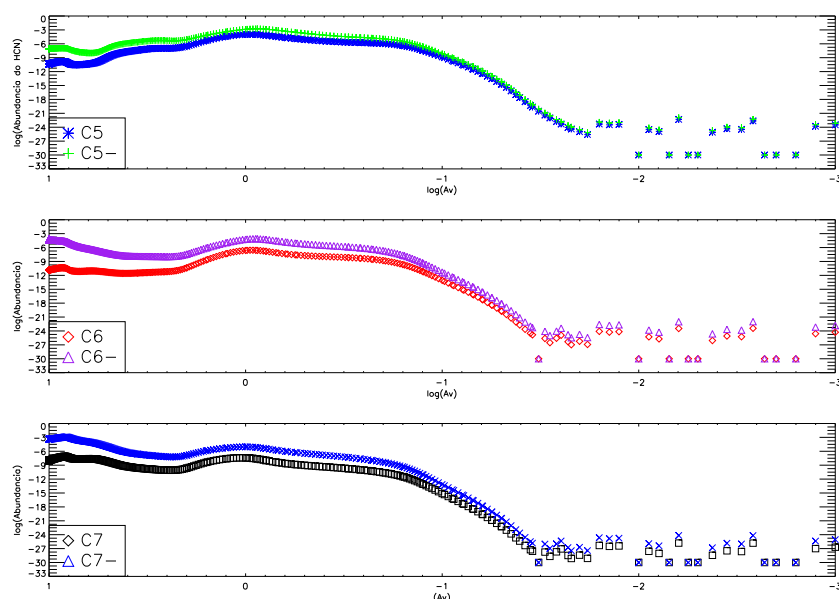


Figura 3.19: Abundância de alguns ânions ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo.

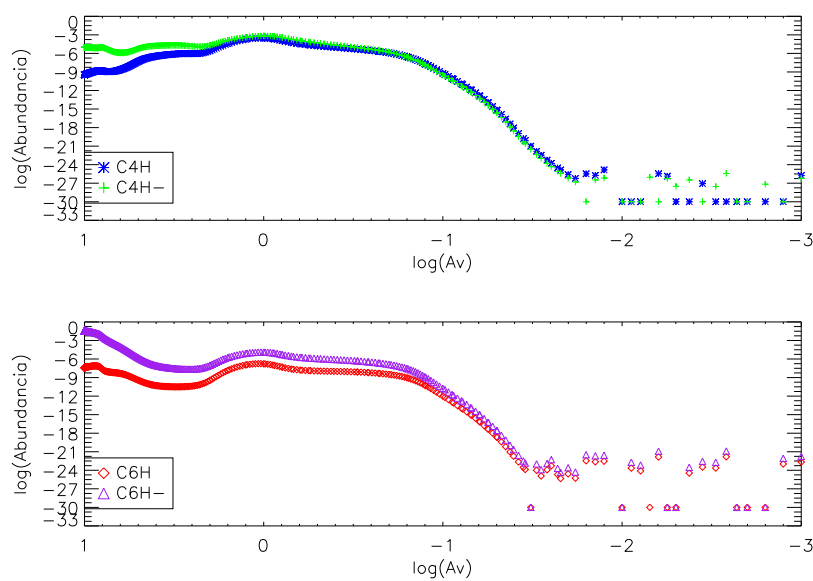


Figura 3.20: Abundância de ânions ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo.

Todas as espécies estudadas mostraram flutuações em suas abundâncias mínimas e todos eles chegam a praticamente zero de abundância rapidamente. Isto mostra que suas reações ainda não estão bem definidas e que existe um problema dinâmico que tem que ser melhor estudado, afetando a borda, como também aconteceu no caso das nitrilas.

Os ânions das nitrilas não foram abordados, pois nenhum deles, com exceção do CN^- , teve as reações de formação e destruição estudadas. Portanto, esperam-se estudos destas reações para um melhor conhecimento daquelas importantes moléculas.

3.7 Benzeno

Muitas moléculas cíclicas têm importantes funções pré-bióticas. O benzeno (C_6H_6) é uma delas, já que este composto é uma das moléculas mais simples com anel capazes de formar algumas espécies maiores e com maior importância biótica. A substituição de dois átomos de carbono no anel do benzeno por dois nitrogênios produz pirimidinas. A pirimidina ($c - C_4H_4N_2$) é o análogo do anel não substituído para as três bases do DNA e do RNA: timina, citosina e uracila, que é, portanto, uma molécula de importância extrema para a Astrobiologia (Kuan et al., 2004).

O resultado obtido no estudo do benzeno é mostrado na figura 3.21. Para chegarmos a este resultado foi usada a rede de reações químicas de formação e destruição do benzeno que é exibida na tabela 3.4.

Tabela 3.4 - Reações químicas, parâmetros e tipos de reação usados na modelagem da Nebulosa Cabeça de Cavalo para o benzeno.

Reagentes		Produtos		γ	α	β
c6h7+	electr	c6h6	h	5.00e-07	-0.50	0.0
c+	c6h6	c3h3+	c4h3	1.44e-10	0.00	0.0
c2h3+	c6h6	c6h7+	c2h2	1.60e-09	0.00	0.0
c3h5+	c6h6	c6h7+	c3h4	1.15e-10	0.00	0.0
ch5+	c6h6	c6h7+	ch4	2.00e-09	0.00	0.0
h3+	c6h6	c6h7+	h2	3.90e-09	0.00	0.0
h3o+	c6h6	c6h7+	h2o	1.30e-09	0.00	0.0
hco+	c6h6	c6h7+	co	1.60e-09	0.00	0.0
he+	c6h6	c6h5+	he	7.00e-10	0.00	0.0
he+	c6h6	c5h5+	ch	7.00e-10	0.00	0.0

Claramente, a abundância do benzeno cai a zero na borda da nuvem muito rapidamente e sua abundância é desde o início bastante pequena. Este é um fato esperado e facilmente

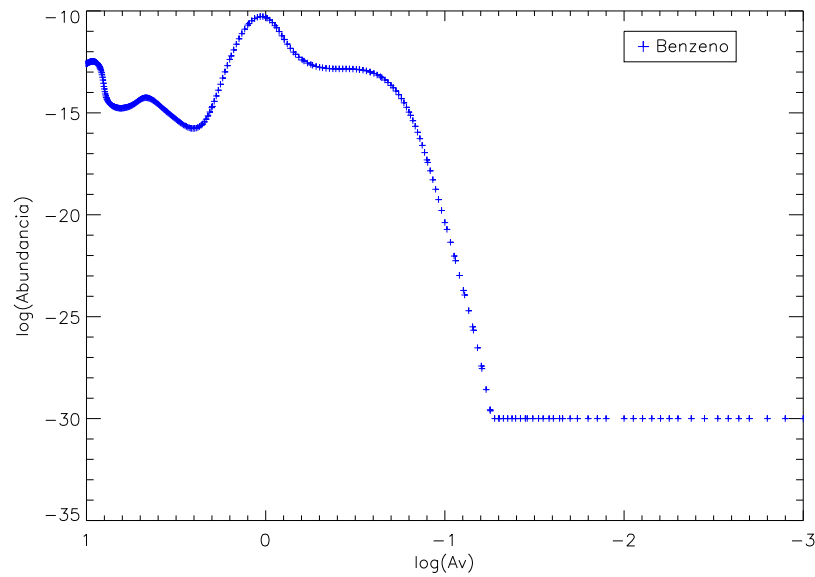


Figura 3.21: Abundância do benzeno ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo.

explicado, pois esta molécula possui apenas uma reação de formação na sua rede de reações conhecidas, enquanto ela é destruída por diversas reações que produzem outras moléculas. Por ser uma molécula prebiótica tão importante, sua rede de reações deverá ser estendida para um estudo mais detalhado.

Porém, não é apenas o fato de não ter suas reações para o meio interestelar explicitadas que torna este composto tão pouco abundante, mas o fato deste modelo não estar considerando as reações em grãos na formação de moléculas complexas. Moléculas complexas detectadas na atualidade não podem ser contabilizadas em reação de fase gasosa, já que elas sofrem depleção nas superfícies dos grãos. As rotas de formação deste tipo de moléculas complexas têm sido recentemente propostas usando reações no corpo de grãos de gelo reguladas pela fotoquímica de fótons ultravioletas (D'Hendecourt, 2011). Além disso, os modelos de Woods et al. (2002) indicam que quando a extinção cai para 10 mag a uma distância de $\sim 10^{16} \text{cm}$ da estrela central, a abundância de moléculas como o benzeno cai rapidamente, indicando destruição por fótons UV interestelares.

3.8 Pirrol

O pirrol (C_4H_5N) é uma molécula heterocíclica fundamental. Ela é um importante bloco construtor biomolecular. Esta molécula e suas derivadas são essenciais para as funções biológicas vitais, como a hemoglobina e a clorofila. Em astrobiologia, acredita-se compostos orgânicos com anéis, incluindo N-heterocíclicos, podem ter desempenhado um importante papel na evolução da vida terrestre e na química prebiótica de ambientes planetários. Com isso em mente, Titã, com uma atmosfera substancial composta principalmente por nitrogênio e metano, é um objeto cativante para a comunidade científica. De fato, estes orgânicos (tanto hidrocarbonetos como nitrilas), estão presentes na atmosfera de baixa temperatura e gás fotoativo, permitindo analogias com a Terra primitiva. Na tentativa de simular Titã e a química prebiótica em experimentos de laboratório, pirrol e piridina foram identificados como moléculas chave adicionadas a outras espécies moleculares, incluindo compostos policíclicos aromáticos contendo N (Soorkia et al., 2010).

Todavia, as respectivas funções (bio)químicas do pirrol e da piridina podem ser profundamente diferentes devido às suas diferenças estruturais intrínsecas. Tanto o pirrol como a piridina seguem a regra de Hückel's (a qual estima se uma molécula em anel planar terá propriedades aromáticas; uma molécula em anel segue a regra de Hückel quando o número dos seus elétrons é igual a $4n + 2$), portanto têm propriedades aromáticas. Mas, a principal diferença é que o par solitário de elétrons no átomo de nitrogênio na piridina não está localizada no anel aromático, como está no pirrol (Soorkia et al., 2010).

Pirrol e piridina fornecem exemplos arquetípicos de como as propriedades físicas e químicas fundamentais poderiam ser significativamente diferentes para duas moléculas cíclicas que se diferem por apenas um átomo de carbono. Espécies N-herocíclicas pequenas como o pirrol e a piridina estão entre aquelas que provavelmente são as mais importantes do ponto de vista astrobiológico. As reações dessas moléculas com radicais e/ou espécies iônicas subsequentemente podem fornecer espécies carbonadas maiores contendo nitrogênio. A inclusão do N em PAHs poderia promover a formação de anéis hidrocarbonetos adicionais (Soorkia et al., 2010) e, assim, essas moléculas poderiam contribuir para a formação de PANHs muito grandes, que se acredita desempenhar um importante papel na química interestelar. Infelizmente, a procura no meio interestelar por pirrol e piridina, entre outros compostos, não tem obtido êxito.

Utilizaremos, nesta seção e na próxima, os resultados de Soorkia et al. (2010), assim como aqueles do modelo fotoquímico de Krasnopolsky (2009) para a atmosfera de Titã. Os resultados para o pirrol estão mostrados nas figuras 3.22 e 3.23.

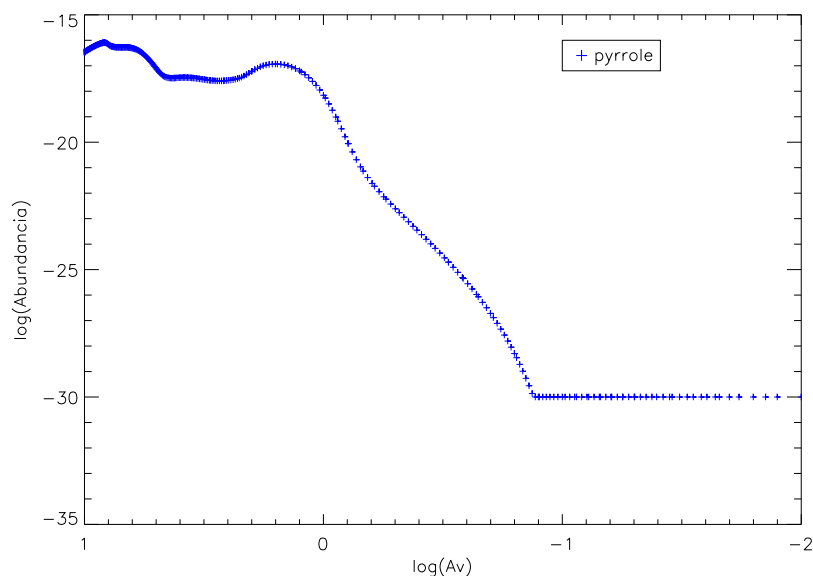


Figura 3.22: Abundância do pirrol ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavallo.

Como o pirrol é uma molécula de extrema importância prebiótica, é altamente relevante tentar estimar sua abundância na HHN, porém os resultados obtidos para este composto constituem apenas estimativas, já que ele ainda não teve estudada suas reações em condições análogas às do meio interestelar.

O único canal para a produção de pirrol no modelo de Krasnopolsky (2009) para a atmosfera de Titã é a reação $N^* + C_4H_6 \rightarrow C_4H_5N + H$ onde N^* é o nitrogênio atômico no estado metaestável 2D , $N(^2D)$. N^* é produzido por fotodissociação ou dissociação por fótons, elétrons e raios cósmicos do N_2 . De acordo com Nicolas et al. (2003), a fotodissociação radiativa do N_2 produz principalmente $N^+ + N^*$. Como o N^* decai para o estado fundamental com uma taxa de $1.06 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, sendo muito rápido para os processos em uma nuvem interestelar, esse canal de produção de pirrol pode não ser relevante para a Nebulosa Cabeça de Cavallo.

Um possível progenitor para o pirrol é o butenal (Jacques Le Boulout, comunicação privada), visto que o propenal e o propanal já foram observados no meio interestelar

(Hollis et al., 2004). Assim, resultados foram obtidos a partir de uma reação de formação conhecida em laboratório, estimando-se os parâmetros de sua taxa de destruição no meio interestelar levando-se em consideração que este tipo de reação tem, conforme a tabela 2.2, valor médio para a constante de reação $\kappa \simeq 10^{-11}(cm^3/s)$ e a partir de reações de destruição estimadas causadas por fótons UV e por raios cósmicos, sendo os produtos da fotodissociação distribuídos entre cinco canais, como pode ser visto na tabela 3.5.

Tabela 3.5 - Reações químicas, parâmetros e tipos de reação para a produção do pirrol a partir do butenal para a HHN.

Reagentes		Produtos			γ	α	β
c4h6o	nh3	c4h5n	h2o	h2	5.00e-07	0.5	0.0
c4h5n	phosec	c2h5	c2n		2.00e-18	0	1000.0
c4h5n	phosec	h2cn	c3h3		2.00e-18	0	1000.0
c4h5n	phosec	hc3n	ch4		2.00e-18	0	1000.0
c4h5n	phosec	h3c2n	c2h2		2.00e-18	0	1000.0
c4h5n	phosec	c3h4	hcn		2.00e-18	0	1000.0
c4h5n	photon	c2h5	c2n		2.00e-12	0	1.8
c4h5n	photon	h2cn	c3h3		2.00e-12	0	1.8
c4h5n	photon	hc3n	ch4		2.00e-12	0	1.8
c4h5n	photon	h3c2n	c2h2		2.00e-12	0	1.8
c4h5n	photon	c3h4	hcn		2.00e-12	0	1.8

Tendo em vista a pouca quantidade da molécula progenitora butenal, (C_4H_6O), a pequena abundância encontrada para o pirrol é esperada. Há de se considerar, ainda, que também para o pirrol, assim como discutido para o caso do benzeno, é uma molécula complexa que deve ter suas rotas de formação ligadas à poeira e aos grãos de gelo, que ainda deverão ser estudadas.

Devido à importância do pirrol, a necessidade de estudar mais amplamente as reações de formação desta molécula se tornou evidente. Desta forma, baseando-se no trabalho de Peeters et al. (2005) sobre a piridina e o pirrol, onde comparece a *s-triazina*, exploramos um outro canal de formação do pirrol tendo a *s-triazina* como reagente. Para isto, foi necessário ainda considerar que as moléculas reajam efetivamente com o CH para a formação de compostos mais estáveis, conforme Soorkia et al. (2010).

Desta forma, precisou-se incluir alguns compostos que não possuem suas reações e taxas de reações conhecidas para condições do meio interestelar, como por exemplo, a própria s-triazina e, assim como para o canal de produção a partir do C_4H_6O fomos obrigados a fazer estimativas das taxas de reação e de reações de destruição causadas por fótons UV e por raios cósmicos. As reações usadas neste modelo são vistas na tabela 3.6. O resultado obtido, acrescentando as reações da tabela 3.5 às da tabela 3.6, é mostrado na figura 3.23.

Tabela 3.6 - Reações químicas, parâmetros e tipos de reação usados na estimativa do pirrol a partir da s-triazina para a HNN.

Reagentes			Produtos			γ	α	β
c2n2	ch3n	c3h3n3	photon			5.00e-07	0.50	0.0
c3h3n3	phosec	hcn	hcn	hcn		1.00e-17	0.00	0.0
c3h3n3	photon	hcn	hcn	hcn		9.00e-11	0.00	1.8
ch	c3h3n3	c4h4n	n2			5.00e-07	0.50	0.0
c4h4n	phosec	c2h2	c2h2	n		3.30e-18	0.00	1000.0
c4h4n	phosec	c3h3	hcn			3.30e-18	0.00	1000.0
c4h4n	phosec	c3h3	hnc			3.30e-18	0.00	1000.0
c4h4n	photon	c2h2	c2h2	n		3.30e-12	0.00	1.8
c4h4n	photon	c3h3	hcn			3.30e-12	0.00	1.8
c4h4n	photon	c3h3	hnc			3.30e-12	0.00	1.8
ch	c4h4n	c4h5n	c			5.00e-07	0.50	0.0

O novo resultado obtido aumenta em até quatro ordens de grandeza a abundância do pirrol no estado gasoso, como mostra a figura 3.24. Este fato é significativo, pois ainda que não conheçamos todas as reações de formação e destruição deste composto, podemos ver que adicionando apenas mais uma reação de formação temos uma abundância muito maior e que, assim, seria mais facilmente detectada.

Porém, em regiões de gás e poeira em envelopes de estrelas velhas, a polimerização do acetileno pode produzir benzeno, PAHs e grandes cadeias de carbono em partículas de poeira (Cherchneff et al., 1992). N-heterocíclicos podem ser formados como produtos da polimerização do acetileno. A substituição do intermediário C_2H_2 pelo HCN pode levar a incorporação direta de um átomo de nitrogênio dentro de um anel aromático (Ricca et al., 2001), formando piridinas. Devido à pequena fração HCN/C_2H_2 encontrada nestes en-

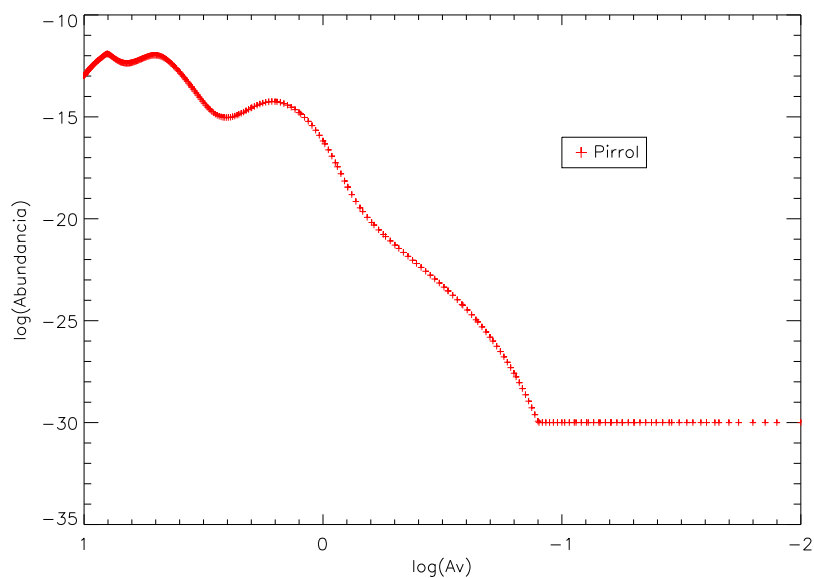


Figura 3.23: Abundância do pirrol, acrescentando a produção a partir da s-triazina, ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo.

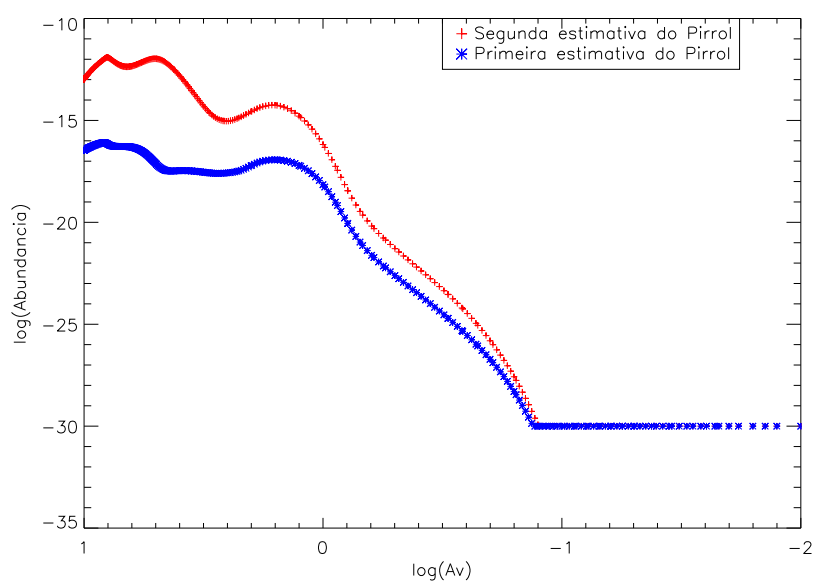


Figura 3.24: Diferença entre a abundância do pirrol quando estimado apenas pelas reações vistas na tabela 3.5 e quando estimado incluindo as reações da tabela 3.6.

velopes, este cenário prediz menores abundâncias de moléculas aromáticas contendo mais de um átomo de nitrogênio por anel, como a pirimidina (dois nitrogênios) e a s-triazina (três nitrogênios) (Peeters et al., 2005). Tendo isto em vista, embora o cenário que contém

a formação do pirrol incluindo as reações da tabela 3.6 produza maior abundância desta molécula, ele ainda é limitado, já que ele envolve reações com a s-triazina.

Contudo, este resultado é bastante expressivo, pois mostra a possibilidade de fazermos inferências para a química interestelar a partir de atmosferas planetárias, em particular de Titã, que possui uma atmosfera densa e fria, na qual Soorkia et al. (2010) estudou os processos de reação do CH na fase gasosa que podem levar a formação de piridina a partir do pirrol.

3.9 Piridina

A piridina (C_5H_5N) é precursora de importantes nucleobases. Como o pirrol (C_4H_5N) e a piridina são as moléculas aromáticas heterocíclicas mais simples de 5 e 6 membros, a sua investigação é fundamental para a compreensão da síntese de espécies cíclicas mais complexas do meio interestelar. São compostos bastante semelhantes ao benzeno, porém a inclusão do nitrogênio em seu anel aromático induz um momento de dipolo permanente, que permite que esta molécula seja observada com um espectro puramente rotacional (Peeters et al., 2005).

Para esta importante molécula, no modelo fotoquímico de Krasnopolsky (2009) há uma única fonte dada pela reação do etano com o radical C_3N , conforme mostrado na tabela 3.7. Dessa forma, foi acrescentada tal reação no modelo para a Nebulosa Cabeça de Cavalo e obteve-se o resultado apresentado na figura 3.25.

Tabela 3.7 - Formação da piridina a partir do etano para Nebulosa Cabeça de Cavalo.

Reagentes		Produtos		γ	α	β
c3n	c2h6	c5h5n	h	4.00e-10	0.00	0.0

Como podemos ver da figura 3.25 as abundâncias derivadas para a piridina são praticamente nulas, o que decorre do fato da abundância do etano na Nebulosa Cabeça de Cavalo ser bastante baixa, como podemos ver na figura 3.26, que permite verificar a importância dos principais hidrocarbonetos na Nebulosa Cabeça de Cavalo.

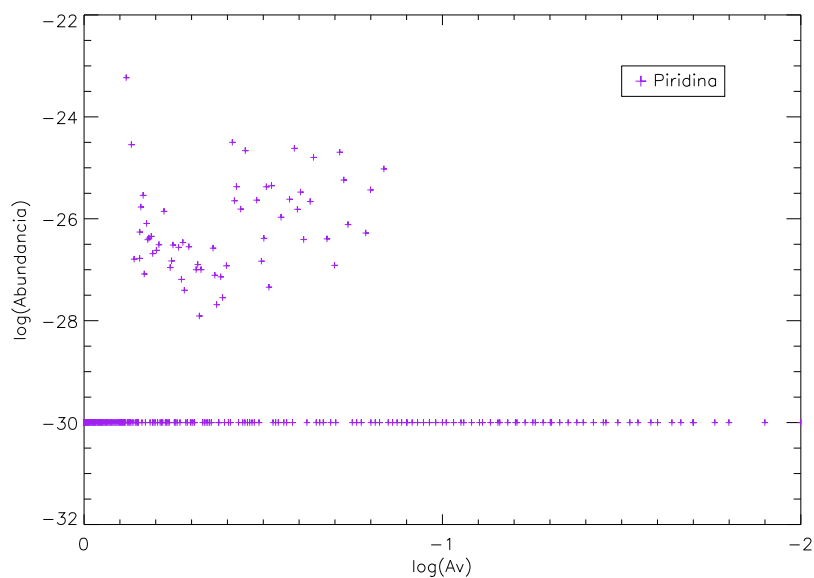


Figura 3.25: Abundância da piridina a partir do etano ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo.

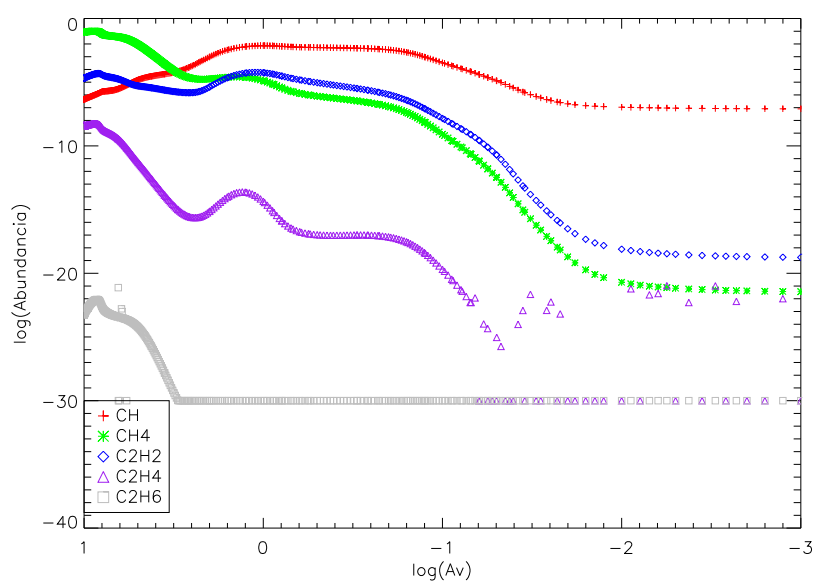


Figura 3.26: Abundância dos principais hidrocarbonetos na Nebulosa Cabeça de Cavalo (incluindo o CH).

Os resultados obtidos para o etano, mostram que realmente a abundância deste para a Nebulosa Cabeça de Cavalo é a menor abundância dentre os hidrocarbonetos comuns com dois carbonos, e de fato, sua abundância não seria capaz de produzir uma quantidade

significativa de piridina na região. No caso dos estudos realizados por Krasnopolsky (2009), estes se referem à atmosfera de Titã, onde a abundância desta espécie é muito maior devido à atmosfera desta lua ser rica em hidrocarbonetos.

Contudo, uma importante reação de formação da piridina, através da reação do CH com o pirrol, foi estudada por Soorkia et al. (2010), que derivou uma constante de reação $\kappa = 4 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Embora as reações de formação e destruição envolvendo estas moléculas não sejam bem conhecidas no meio interestelar, há alguns experimentos de laboratório com a piridina que foram realizados com vista às condições do meio interestelar ou podem ser aplicados nessas condições.

A seção de choque para a dissociação da piridina foi calculada por Peeters et al. (2005) como $1.2 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ em cerca de 1800 \AA para a lâmpada de fluxo de hidrogênio utilizada em seus experimentos (Cottin et al., 2003). Contudo o trabalho não distingue os fragmentos e nem a faixa de comprimentos de onda $\Delta\lambda$ em que ocorre a fotodissociação. Essas propriedades, contudo, podem ser derivadas de outros trabalhos (Lin et al. (2005), Ni et al. (2007) e Vall-Ilosera et al. (2008)). Assim, podemos adotar $\Delta\lambda = 500 \text{ \AA}$, o que implica uma taxa de fotodissociação total de $1.2 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$. Há também vários canais para a fotodestruição. Lin et al. (2005) identificou, em termos de massa dos fragmentos, seis canais, mas nem todos com os produtos univocamente determinados em virtude da dificuldade em se discernir entre isômeros de mesma massa. Consideramos neste trabalho os três canais principais, com produção de CH_2CN , HC_3N e CH_2CHCN .

Em uma primeira aproximação, supomos a produção igual para esses três canais, assim, $\kappa = 4 \times 10^{-12} \text{ s}^{-1}$ para cada um deles. A tabela 3.8 mostra um sumário para as reações usadas e as taxas de reações para a estimativa da piridina. E os resultados obtidos são mostrados na figura 3.27.

Tabela 3.8 - Reações químicas, parâmetros e tipos de reação usados na produção da piridina a partir do pirrol, para a HNN.

Reagentes		Produtos		γ	α	β
ch	c4h5n	c5h5n	h	4.00e-10	0.00	0.0
c5h5n	photon	c3h3	c2h2n	4.00e-12	0.00	1.8
c5h5n	photon	c2h4	hc3n	4.00e-12	0.00	1.8
c5h5n	photon	c2h2	c3h3n	4.00e-12	0.00	1.8

Continua na próxima página...

Tabela 3.8 - Continuação

Reagentes	Produtos	γ	α	β
-----------	----------	----------	----------	---------

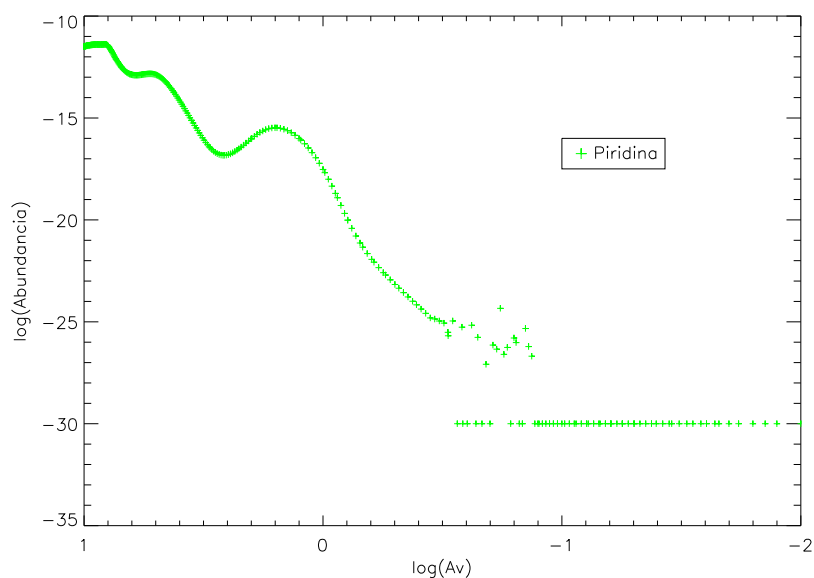


Figura 3.27: Abundância da piridina ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo.

Assim como no caso do pirrol e do benzeno, a baixa abundância da piridina é justificada por haver apenas uma reação de formação para algumas reações de destruição deste composto. Além disso, como nos casos anteriores deve-se levar em consideração a limitação do modelo em usar apenas reações na fase gasosa, não considerando a fase de grãos, que constituiriam o sítio de formação privilegiada para uma molécula tão complexa como esta.

A instabilidade apresentada no gráfico 3.27 para abundância abaixo de 10^{-25} é característica de espécies com abundância próxima de zero, para as quais a rede de reações acaba por fornecer incrementos e decréscimos discretos associados aos processos de formação e destruição envolvendo pequenas quantidades que se anulam de um passo de cálculo para outro e que a seguir voltam a ser não-nulas.

Apesar das baixas abundâncias obtidas, este resultado já é um bom ponto de partida para futuros modelos e para buscas observacionais que possam ser realizadas, haja vista a importância pré-biótica destas espécies.

3.10 O Papel dos PAHs

Os PAHs podem conter uma grande fração do carbono presente no meio interestelar, tipicamente da ordem de 20% (Joblin et al., 1992). Acredita-se que sejam os responsáveis pelas assim chamadas "Bandas Aromáticas no Infravermelho" (AIBs, na sigla em inglês), um conjunto de linhas de emissão estreitas que dominam o espectro infra-vermelho de muitos objetos galácticos e extragalácticos. Cerca de 20% da luminosidade emitida pela poeira é devida a estas linhas (Li et al., 2004). As AIBs mais fortes estão a $3.3 \mu\text{m}$, $6.2 \mu\text{m}$, $7.7 \mu\text{m}$, $8.6 \mu\text{m}$, $11.3 \mu\text{m}$ e $12.7 \mu\text{m}$. A característica em $3.3 \mu\text{m}$ é associada com os modos de estiramento do CH, enquanto que o modo estiramento do CC é associado com as bandas em $6.2 \mu\text{m}$ e $7.7 \mu\text{m}$, sendo que as outras AIBs são associadas com vários modos de deformação angular da ligação CH, tanto no plano como fora do plano (Allamandola et al., 1989).

A emissão interestelar por PAHs em 6.2 mm é provavelmente dominada por espécies com dimensões entre 60 e 90 átomos de carbono (Hudgins et al., 2005). Portanto, neste trabalho, seguindo Flower e Pineau des Forêts (2003), adotamos o circum-coroneno, $C_{54}H_{18}$, como representativo do PAH interestelar. Este PAH pertence à família dos PAHs mais compactos, os pericondensados de simetria D_{6h} (fórmula $C_{6n^2}H_{6n}$), que minimizam o número de átomos de hidrogênio por átomo de carbono (Puget e Leger, 1989).

Consideramos a abundância inicial de PAH como 10^{-6} partículas de $C_{54}H_{18}$ em relação ao hidrogênio, o que corresponde a uma fração de carbono em PAHs no meio interestelar de 15%.

3.10.1 Benzeno

Também consideramos uma abundância inicial para o benzeno de 10^{-6} partículas em relação ao hidrogênio, extrapolando para pequenos valores de N_C (o número de carbonos em um PAH) uma lei de densidade $n(N_C) \propto N_C^{-2.25}$ (Silva et al., 1998), válida desde $N_C = 6$ até $N_C = 486$ (o pericondensado $C_{486}H_{54}$ ou $n = 9$ na sequencia $C_{6n^2}H_{6n}$).

A suposição de alta densidade inicial para o benzeno leva a uma descontinuidade em $A_V \sim 3$, provavelmente ligada à mudança do regime de opacidade, como visto na figura 3.28. Comparando com as densidades anteriormente calculadas para o benzeno há um incremento de densidade na borda da nuvem que depois cai, a medida que penetra na

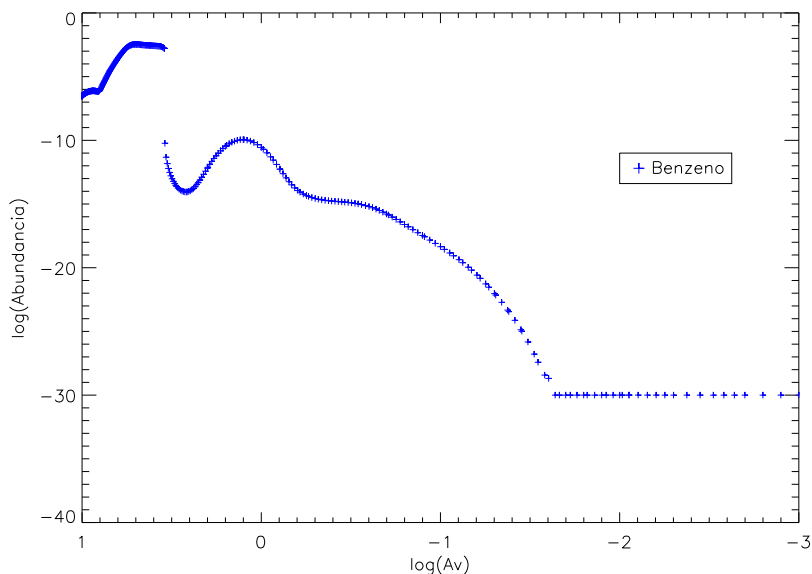


Figura 3.28: Abundância do benzeno quando considera-se uma abundância inicial de 10^{-6} para o mesmo.

nuvem a valores abaixo dos iniciais para o benzeno, em $A_V \simeq -0.1$. Após, a nova densidade cresce e em $A_V \simeq 1$, torna-se maior do que a anterior. Finalmente, em $A_V \sim 3$ há uma descontinuidade marcando uma mudança de regime e o novo valor sempre se coloca acima de 5 ordens de magnitude (as vezes 8 ordens de magnitude) mais abundante do que o inicial. Nas regiões mais internas, a abundância do benzeno fica bastante alta, ainda como reflexo das condições iniciais.

3.10.2 PAHs, PANHs e Heterocíclicos Nitrogenados (Pirrol e Piridina)

Além de PAHs, o meio interestelar deve conter também heterocíclicos nitrogenados aromáticas policíclicos (PANHs, na sigla em inglês). Hudgins et al. (2005) interpreta a variação do perfil da AIB a $6.2 \mu m$ (devida a uma ligação CC) em relação ao esperado de um PAH simples, como indicando a substituição de um carbono por um nitrogênio. No artigo, testa-se hipóteses alternativas sem êxito: substituição por O ou Si; complexos PAH-íon metálico; e grandes PAHs assimétricos. Conclui-se que ao menos 1-2% do nitrogênio cósmico foi sequestrado em PAHs. Ademais, se o N substituído for localizado na periferia do PAH, o PANH resultante é significativamente reativo, o que pode levar à produção posterior de outros heterocíclicos nitrogenados. Assim testamos um canal de produção de

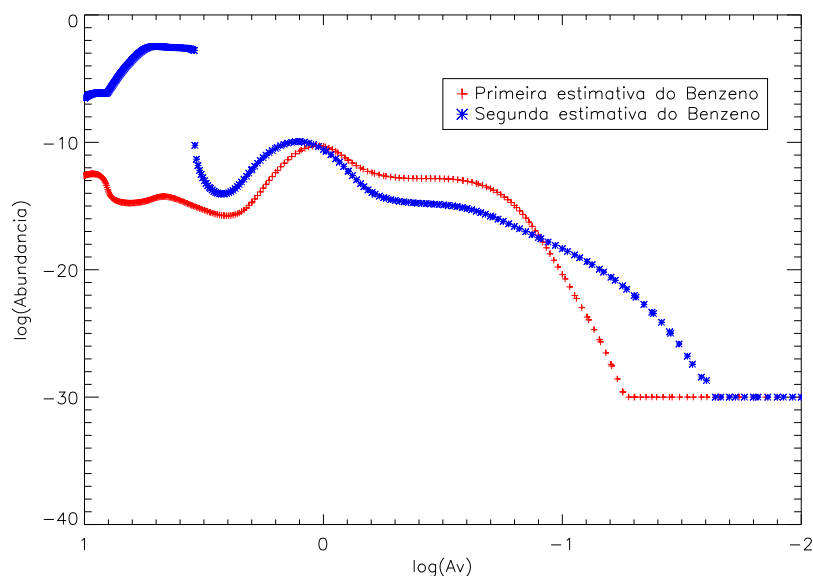


Figura 3.29: Comparação entre a abundância do benzeno quando considera-se uma abundância inicial de 10^{-6} ou de zero para o mesmo.

pirrol e piridina via PANHs derivados de PAHs.

Em conformidade a sequência de passos para a incorporação de um átomo de nitrogênio em policíclicos aromáticos proposta por Ricca et al. (2001), adotamos o conjunto de reações da tabela 3.9 para obtermos canais adicionais para a produção de piridina.

Tabela 3.9 - Reações químicas, parâmetros e tipos de reação para a produção de pirrol e piridina com a participação de PAHs.

Reagentes	Produtos		γ	α	β
c54h18	h	c54h17 h2	5.00e-08	0.50	0.0
c54h18	c2h	c54h17 c2h2	5.00e-08	0.50	0.0
c54h17	hcn	c55h18n photon	5.00e-07	0.50	0.0
c55h18n	c2h2	c57h19n h	5.00e-07	0.50	0.0
c57h19n	ch4	c54h18 c4h5n	5.00e-07	0.50	0.0
c57h19n	c2h4	c54h18 c5h5n	5.00e-07	0.50	0.0

No caso dos heterocíclicos nitrogenados também ocorre uma descontinuidade para altos valores da densidade do pirrol e da piridina, como podemos ver nas figuras 3.30, 3.31, 3.32 e 3.33. O mesmo comportamento descontínuo da densidade que era apresentado para o benzeno é repetido para estas espécies.

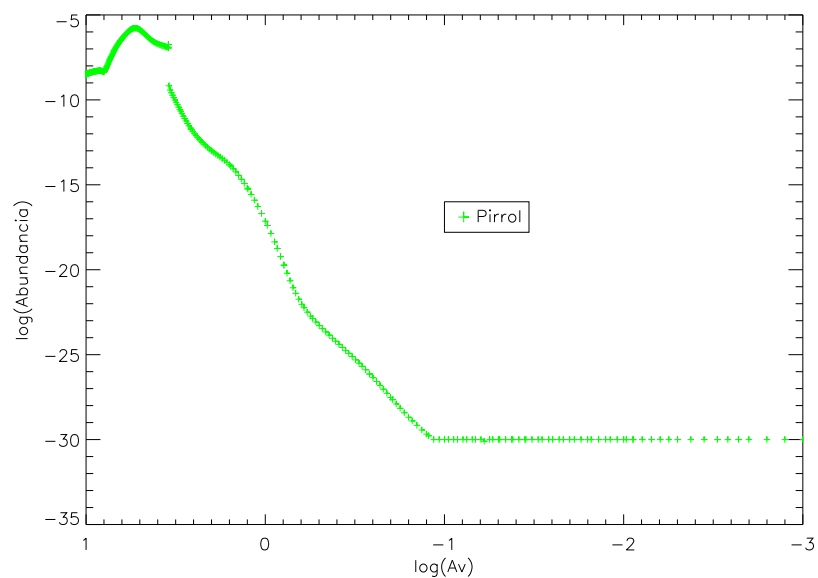


Figura 3.30: Abundância do pirrol quando se introduz um PAH com uma dada abundância inicial e formação a partir de PANHs.

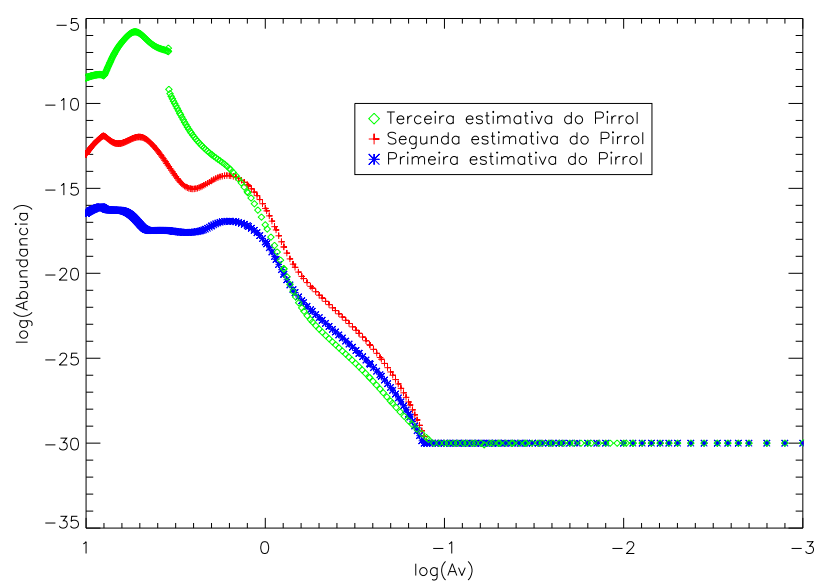


Figura 3.31: Comparação entre as abundâncias do pirrol quando se introduz um PAH com uma dada abundância inicial e formação através de PANHs.

Um ponto importante é que o PAH ($C_{54}H_{18}$) atua como um catalizador que promove a reunião de espécies comuns como o HCN e hidrocarbonetos para gerar os heterocíclicos nitrogenados. O comportamento do pirrol e da piridina se distingue daquele do benzeno

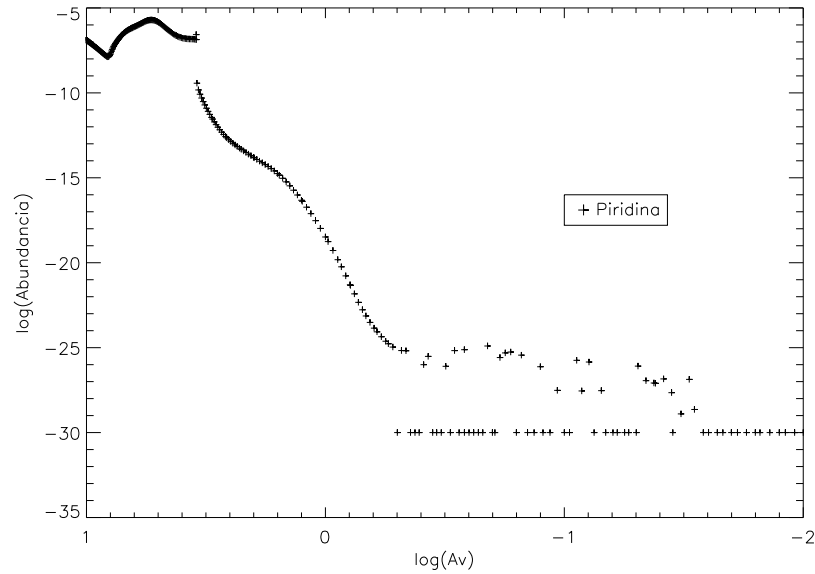


Figura 3.32: Abundância da piridina quando se introduz um PAH com uma dada abundância inicial e formação de PANHs.

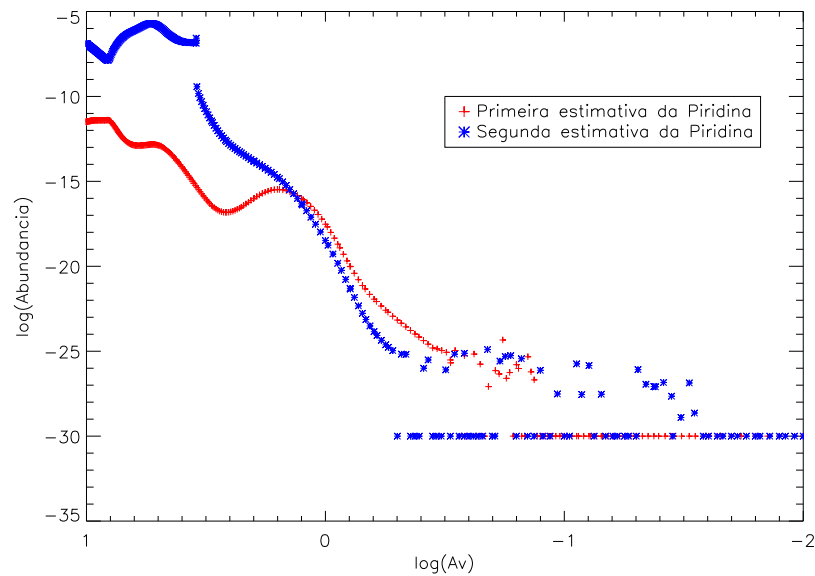


Figura 3.33: Comparação entre as abundâncias da piridina quando introduz-se um PAH com uma dada abundância inicial e formação de PANHs.

peço fato de que, após um ligeiro rebaixamento em relação às densidades dessas espécies geradas sem o PAH, nas bordas da nebulosa ($A_V < 1$), o crescimento da densidade é acentuado em direção ao centro e depois ocorre a descontinuidade. Incluindo-se a produção

através de PAHs (as espécies $C_{55}H_{18}N$ e $C_{57}H_{19}N$ da tabela 3.9), as abundâncias da piridina e do pirrol aumentam ordens de magnitude, ilustrando o poder deste canal de produção.

É interessante observar que na região mais interna ($A_V > 3$), a abundância da piridina é maior do que a do pirrol (figura 3.34). Maiores abundâncias da piridina em relação ao pirrol já haviam sido obtidas no modelo fotoquímico de Krasnopolsky (2009) para a atmosfera de Titã.

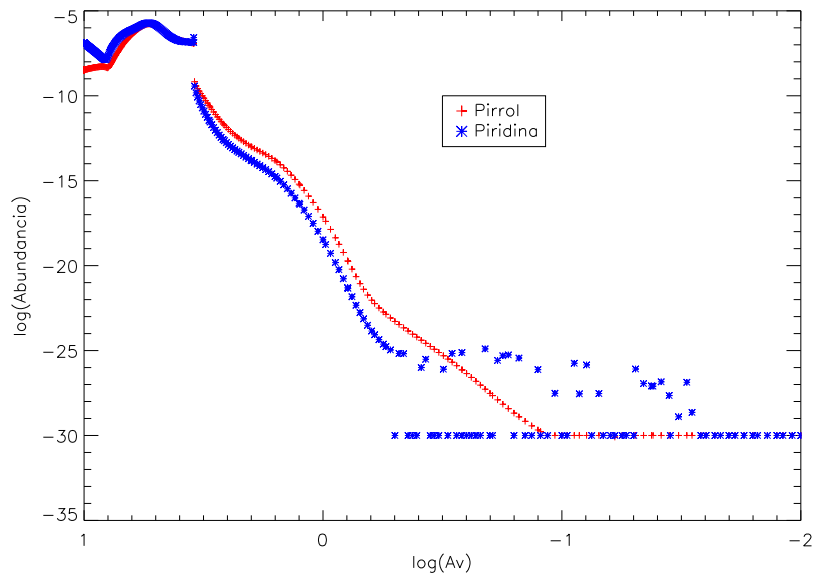


Figura 3.34: Comparação entre as abundância do pirrol e da piridina quando se introduz um PAH com uma dada abundância inicial e formação a partir de PANHs.

Os modelos incluindo PAH anteriores, com abundância inicial dada $[PAH] = 10^{-6}$ representam apenas uma primeira exploração das possibilidades da produção de heterocíclicos nitrogenados via PAHs, inclusive com uma superestimativa das taxas de produção dos heterocíclicos nitrogenados dadas pelos valores da Tabela 3.9. Também não foram incluídas reações de destruição dos PAHs e dos PANHs. Agora consideraremos uma situação mais realística envolvendo os PAHs. Um grande problema encontrado é que para as espécies consideradas não há cálculos ou dados experimentais, obrigando-nos a recorrer a estimativas.

Os PAHs são extremamente resistentes ao campo de radiação interestelar, devido ao fato de que a energia de ligação dos átomos de carbono é 8 eV, e que a energia de um

fóton UV incidente é distribuída sobre a rede de átomos de carbono do PAH em diversos modos de vibração (Leger et al., 1989). Assim, um PAH com 50 átomos de carbono pode sobreviver 1,1 Ganos no campo de radiação Galáctico (Allain et al., 1996b). Isto é muito mais longo que o tempo de vida de uma nebulosa típica, como é a HNN. O comportamento de um PAH é praticamente o mesmo de um elemento cuja abundância é constante. Assim, consideraremos nos próximos modelos a abundância dos PAH como fixa (em relação ao hidrogênio).

Contudo, embora o PAH possa ser considerado uma “unidade indivisível”, ele pode perder ou ganhar hidrogênios, pois a energia necessária para a perda de um átomo de hidrogênio é 4,5 eV (Leger et al., 1989). Assim, um parâmetro adicional que descreve um PAH é o seu grau de hidrogenação, $\alpha_{H/C}$.

O número de átomos de hidrogênio ligados na periferia de um PAH depende de sua história e do ambiente. Campos de radiação mais duros e intensos resultam em uma desidrogenação do PAH e em uma redução de $\alpha_{H/C}$. O grau de hidrogenação irá afetar a razão entre as bandas vibracionais devidas ao CH e CC. Assim, a razão de fluxos nas linhas $F(8.6\mu m)/F(7.7\mu m)$ pode ser usada como um diagnóstico de desidrogenação, já que que a linha $7.7 \mu m$ é devida a ligações CC enquanto que a linha $8.6 \mu m$ é devida a ligações CH. Os valores observados dessa razão excluem uma desidrogenação maior que 50% para a maioria das fontes (Schutte et al., 1993).

Em grandes PAHs, a desidrogenação torna-se ineficaz por causa de sua alta densidade de modos vibracionais nos quais a energia do fóton absorvido é rapidamente dissipada. A taxa de fotodissociação do PAH decresce fortemente com o seu tamanho. Assim, para o campo de Draine, (Allain et al., 1996a), encontram que a fotodissociação do coroneno ($C_{24}H_{12}$) pela perda de um H tem uma taxa de $2.56 \times 10^{-9} s^{-1}$, enquanto que a taxa de fotodissociação de um PAH com 50 átomos de carbono é $2.27 \times 10^{-16} s^{-1}$. Como o nosso PAH ($C_{54}H_{18}$) é apenas representativo da população de PAHs podemos escolher o coeficiente da reação para a fotodissociação do $C_{54}H_{18}$ no $C_{54}H_{17}$ como qualquer valor nesse intervalo. Adotamos, como pode ser visto na Tabela 3.10, $10^{-11} s^{-1}$. Este também foi o valor adotado para o coeficiente de fotodissociação dos PANHs.

Um outro ponto a ser considerado é que a fotodissociação torna-se mais fácil para

Tabela 3.10 - Reações químicas, parâmetros e tipos de reação para a produção de pirrol e piridina com a participação de PAHs.

Reagentes		Produtos		γ	α	β
c54h18	h	c54h17	h2	1.00e-10	0.00	0.0
c54h18	c2h	c54h17	c2h2	1.00e-10	0.00	0.0
c54h17	hcn	c55h18n	photon	1.00e-10	0.00	0.0
c55h18n	c2h2	c57h19n	h	1.00e-10	0.00	0.0
c57h19n	c2h4	c54h18	c5h5n	1.00e-10	0.00	0.0
c54h18	photon	c54h17	h	1.00e-11	0.00	1.5
c57h19n	photon	c54h18	hc3n	1.00e-11	0.00	1.5
c55h18n	photon	c54h17	hcn	1.00e-11	0.00	1.5

PAHs previamente desidrogenados (Allain et al., 1996b). Assim, toda uma hierarquia de graus de hidrogenação deveria ser considerada em um trabalho completo. Neste trabalho, estamos considerando apenas o PAH totalmente hidrogenado ($C_{54}H_{18}$) e o desidrogenado uma única vez ($C_{54}H_{17}$).

Como respeito às taxas das reações binárias, adotamos um coeficiente de reação de $10^{-10} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$, em conformidade com os valores típicos para reações íon-neutro de $10^{-9} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$, para reações neutro-neutro de $10^{-11} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$, e radical-neutro de $10^{-10} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ (Le Page et al. (2001); Vuong e Foing (2000)). Finalmente excluimos o canal de produção do pirrol envolvendo a reação $C_{57}H_{19}N + CH_4$, já que a baixa entalpia de formação do CH_4 (-15.97 kcal/mol) torna essa reação termodinamicamente desfavorável.

Os resultados obtidos estão apresentados nas figuras 3.35, 3.36, 3.37, 3.38 e 3.39.

Como podemos ver da Figura 3.35, os PAHs são dehidrogenados ao longo da maior parte da HHN, exceto na região mais interna ($A_V \geq 5$), onde a forma inteiramente hidrogenada do PAH predomina. As formas nitrogenadas (PANHs) têm abundâncias nulas nas bordas da nuvem e depois crescem em direção ao centro. O PANH mais abundante é o $C_{57}H_{19}N$, o precursor imediato da piridina. Sua abundância chega a superar a dos PAHs no centro da nuvem, onde A_V é próximo de 10.

Na rede de reações da Tabela 3.10, não é produzido pirrol a partir dos PANHs, e assim a sua abundância é reduzida aos valores anteriores à introdução dos PAHs. A figura 3.36 mostra esse retorno das abundâncias do pirrol àqueles resultados dos canais de produção das tabelas 3.5 e 3.6.

Já a introdução dos PAHs representa um canal de produção de piridina bastante efi-

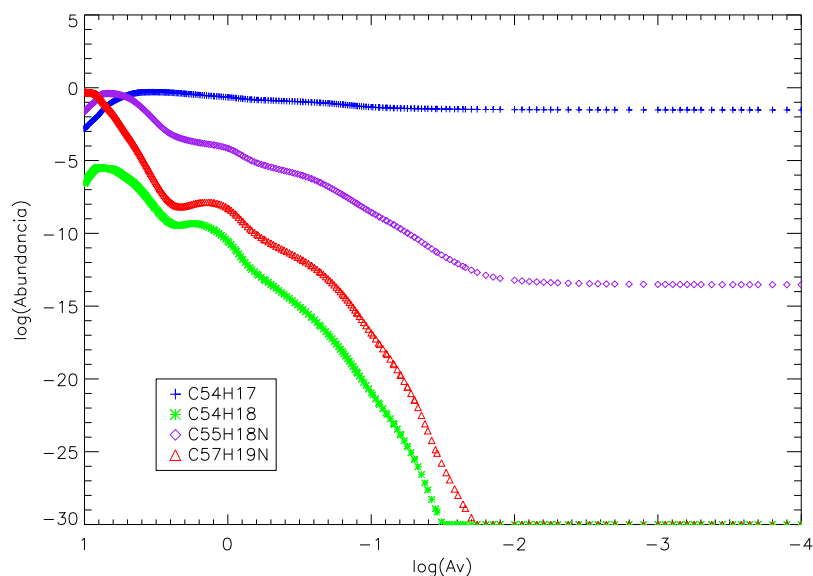


Figura 3.35: Abundância dos PAHs e PANHs ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo, para uma abundância fixa do PAH e a rede de reações da Tabela 3.10.

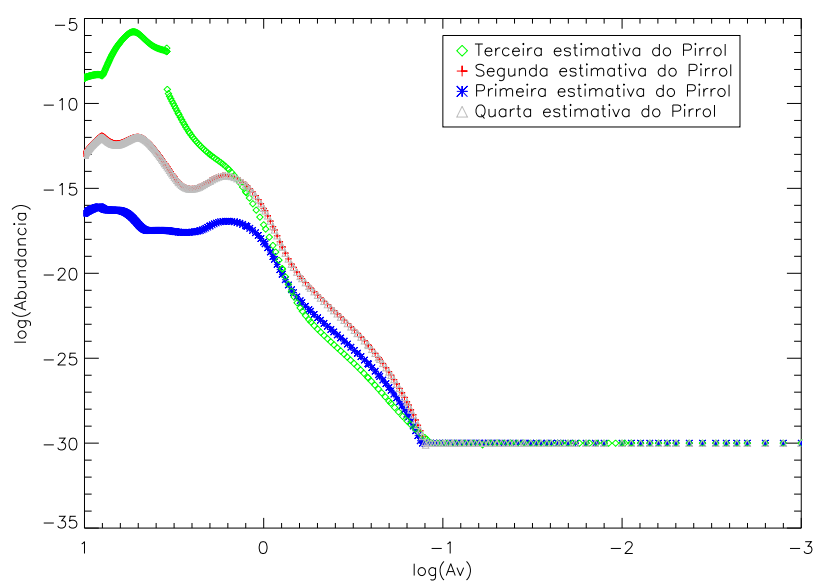


Figura 3.36: Comparação entre as abundâncias do pirrol para uma abundância fixa do PAH e a rede de reações da Tabela 3.10.

ciente (figuras 3.37 e 3.38). Esse canal de produção é mais relevante do que a produção a partir do pirrol (Tabela 3.8) para as regiões mais internas da nuvem, $A_V > 5$, onde ele acarreta um aumento de mais de sete ordens de magnitude das abundâncias da piridina.

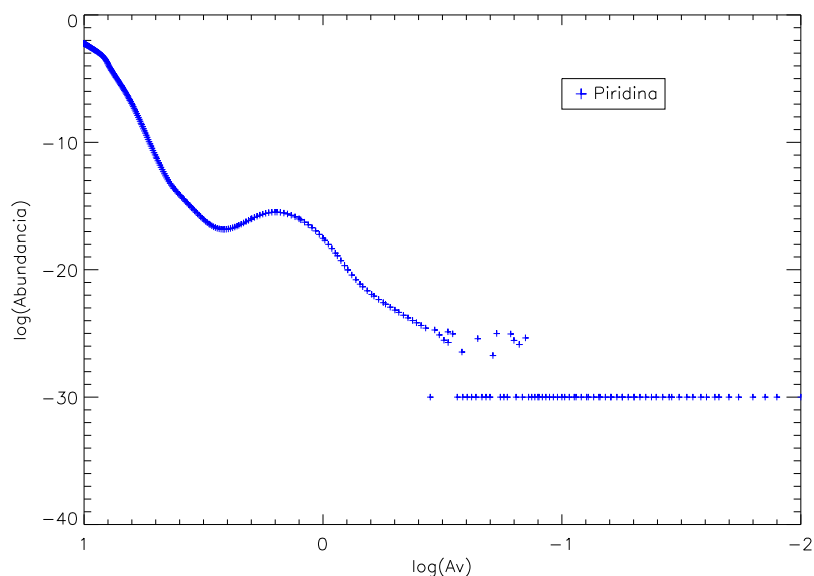


Figura 3.37: Abundância da piridina para uma abundância fixa do PAH e a rede de reações da Tabela 3.10.

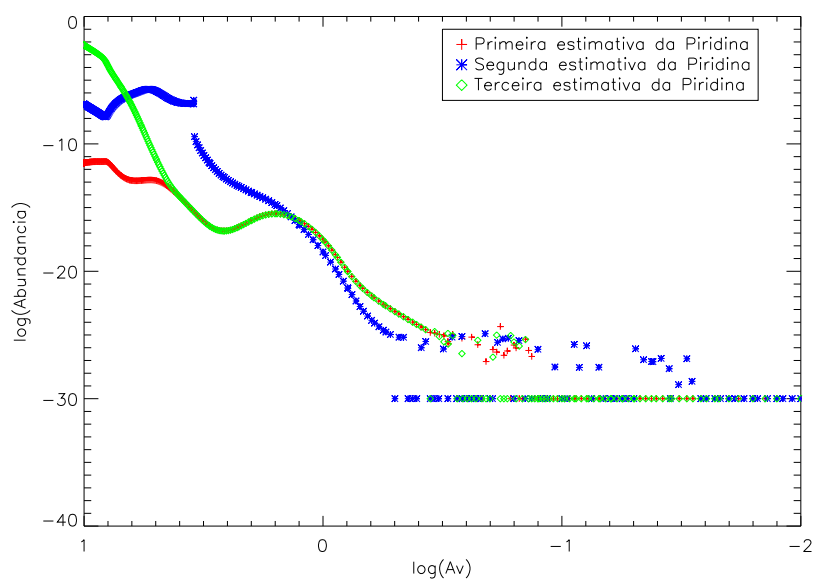


Figura 3.38: Comparação entre as abundâncias da piridina para uma abundância fixa do PAH e a rede de reações da Tabela 3.10.

A abundância resultante da piridina é maior nas regiões centrais da HHN (Figura 3.37). A inclusão do canal adicional da produção de piridina via PAH leva à abundâncias significativas dessa espécie em $A_V = 10$ enquanto que as abundâncias do pirrol permanecem

muito baixas.

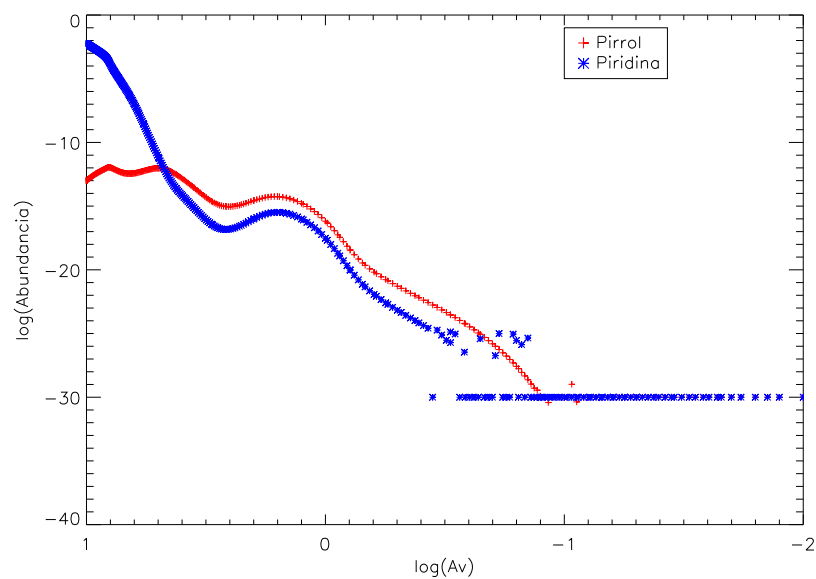


Figura 3.39: Comparação entre as abundâncias do pirrol e da piridina para uma abundância fixa do PAH e a rede de reações da Tabela 3.10.

Análise

O nitrogênio é um dos mais abundantes elementos do Universo e um ingrediente fundamental da vida. Desse modo, é necessário fazer um inventário das várias formas de nitrogênio presentes no Universo para se mapear as possíveis químicas alternativas para a vida. Durante a formação de um anel aromático, um átomo de carbono pode ser substituído por um de nitrogênio em reações de fase gasosa com moléculas nitrogenadas, tais como o HCN, produzindo uma molécula heterocíclica nitrogenada. Um levantamento dos heterocíclicos interestelares pode fornecer um quadro mais abrangente de sua história química e de possíveis papéis pré-bióticos dos heterocíclicos no surgimento da vida na Terra. O presente capítulo pretende fornecer algumas contribuições nesse sentido.

4.1 *Inventário do Nitrogênio no Meio Interestelar*

As figuras 4.1, 4.2 e 4.3 mostram que dentre as moléculas, o CN é o maior reservatório de nitrogênio na Nebulosa Cabeça de Cavalo. Fora da região central da Nebulosa nota-se, porém, que este elemento apresenta-se em sua maior parte na forma de nitrogênio atômico. A figura 4.3 indica, ainda, que no centro da nuvem o nitrogênio apresenta-se em maior quantidade no HCN, HNC e HC_3N , supondo a concentração do CN. A maior concentração de N no centro da HHN em moléculas maiores decorre destas estarem mais blindadas contra a radiação UV nesta região.

As tabelas 4.1, 4.2 e 4.3 apresentam as razões de densidade de coluna, relativas ao CN, para algumas espécies nitrogenadas simples, hidretos de nitrogênio e para o cianeto e seus derivados.

Nitrogênio é o terceiro elemento quimicamente ativo mais abundante no Universo. Nas

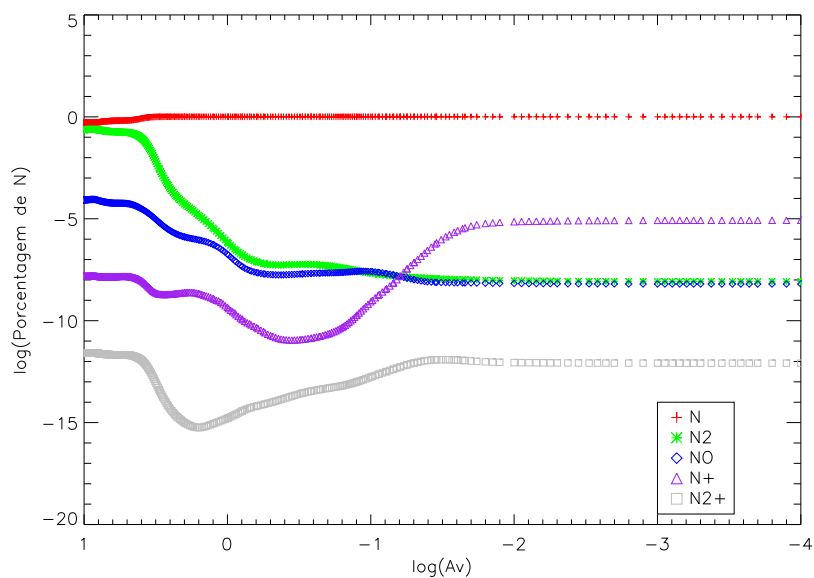


Figura 4.1: Fração de N em algumas formas simples de nitrogênio ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo.

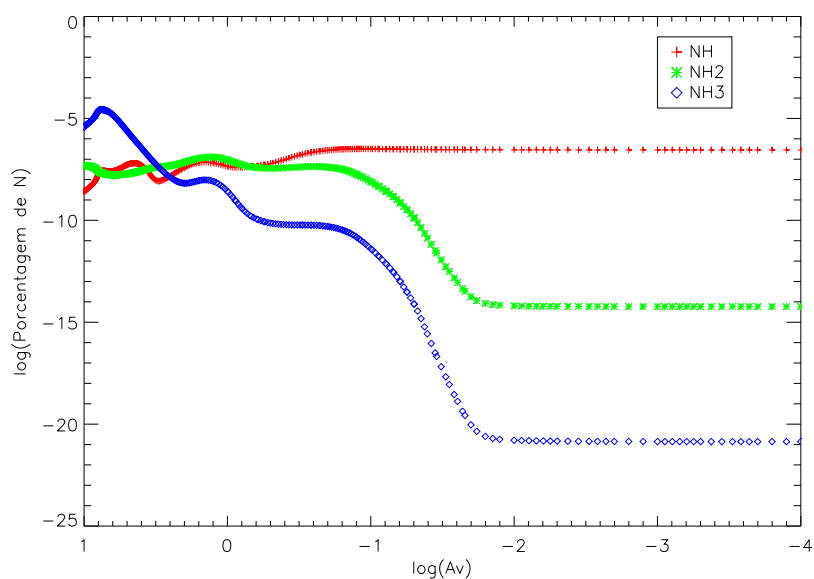


Figura 4.2: Fração de N em alguns hidretos de nitrogênio ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavalo.

atmosferas planetárias, como na Terra e Titã, o nitrogênio molecular é a molécula dominante. Também no meio interestelar, espera-se que o N_2 seja uma espécie nitrogenada abundante. Como se vê da Tabela 4.1 e da figura 4.1 isso é o que ocorre, pois o N_2 , depois

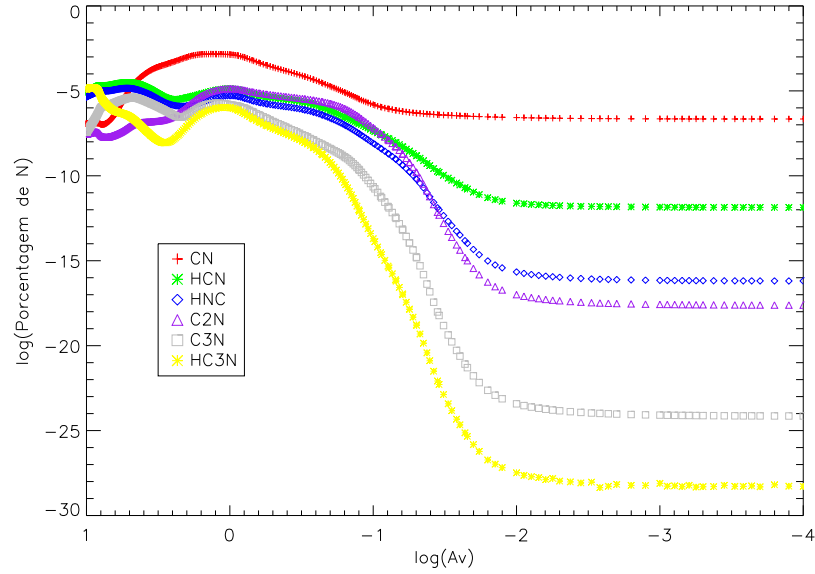


Figura 4.3: Fração de N em cianeto e seus derivados ao longo da Nebulosa Cabeça de Cavallo.

do nitrogênio atômico, torna-se a forma nitrogenada dominante em $A_V > 1$. Contudo, o N_2 não possui transições vibracionais ou rotacionais visíveis no IR e, assim, sua abundância no meio interestelar é pouco conhecida. No entanto, a sua abundância pode ser inferida do N_2H^+ . Maret et al. (2006), a partir de observações de nuvens moleculares escuras, encontraram que a abundância do nitrogênio atômico é maior do que aquela do nitrogênio molecular, em conformidade com os nossos resultados.

Tabela 4.1 - Razões de densidade de coluna (cm^{-2}), em relação ao CN, do N_2 e NO e dos íons N^+ e N_2^+ .

Molécula	$A_V = 1$ mag	$A_V = 3$ mag	$A_V = 10$ mag
$N(CN)$	6.44×10^{13}	3.42×10^{14}	3.75×10^{14}
$N(N_2)/N(CN)$	2.94×10^{-4}	0.29	496
$N(NO)/N(CN)$	8.84×10^{-5}	1.69×10^{-3}	0.17
$N(N^+)/N(CN)$	4.02×10^{-4}	7.72×10^{-5}	1.08×10^{-4}
$N(N_2^+)/N(CN)$	2.05×10^{-10}	4.30×10^{-11}	5.6×10^{-9}

Os hidretos de nitrogênio são importantes moléculas para compreender a química do nitrogênio porque eles estão entre as primeiras moléculas neutras formadas em um gás com

a composição inicial dominada por hidrogênio e hélio. Amônia foi a primeira molécula interestelar detectada em direção ao centro da Galáxia (Cheung et al., 1968) e espera-se que domine os hidretos de nitrogênio em nuvens escuras. Essa tendência é bem reproduzida pelos nossos resultados, como podemos ver da figura 4.2 e da tabela 4.2, para $A_V = 10$. Existe, contudo, um problema em relação à razão $NH : NH_2$ que persiste para vários modelos em relação à comparação de dados observacionais com precisão de modelos, pois a razão $NH : NH_2$ prevista pelas simulações é muito baixa. Observações da protoestrela IRAS 16293-2422, indicam $NH : NH_2 : NH_3 \sim 5 : 1 : 300$, enquanto que o modelo prevê 1:1:200 para $A_V = 10$. Essa discrepância entre observações e modelos para estas razões já havia sido assinalada por Hily-Blant et al. (2010). Aparentemente alguma química hidrogênio-nitrogênio adicional é necessária.

Tabela 4.2 - Razões de densidade de coluna (cm^{-2}), em relação ao CN, para hidretos de nitrogênio.

Molécula	$A_V = 1$ mag	$A_V = 3$ mag	$A_V = 10$ mag
N(CN)	6.44×10^{13}	3.42×10^{14}	3.75×10^{14}
$N(NH)/N(CN)$	2.87×10^{-4}	8.71×10^{-5}	1.52×10^{-4}
$N(NH_2)/N(CN)$	9.58×10^{-5}	8.53×10^{-5}	1.55×10^{-4}
$N(NH_3)/N(CN)$	7.45×10^{-7}	1.04×10^{-5}	3.25×10^{-2}

Tabela 4.3 - Razões de densidade de coluna (cm^{-2}), em relação ao CN, para cianetos e seus derivados.

Molécula	$A_V = 1$ mag	$A_V = 3$ mag	$A_V = 10$ mag
N(CN)	6.44×10^{13}	3.42×10^{14}	3.75×10^{14}
$N(HCN)/N(CN)$	1.14×10^{-2}	7.16×10^{-3}	6.11×10^{-2}
$N(HNC)/N(CN)$	4.56×10^{-3}	2.81×10^{-3}	2.93×10^{-2}
$N(C_2N)/N(CN)$	1.45×10^{-2}	5.91×10^{-3}	5.57×10^{-3}
$N(C_3N)/N(CN)$	9.64×10^{-4}	9.33×10^{-4}	5.71×10^{-3}
$N(HC_3N)/N(CN)$	5.22×10^{-4}	3.54×10^{-4}	1.24×10^{-2}

4.2 Rotas para a Produção de Heterocíclicos

A tabela 4.4 lista a densidade de coluna (cm^{-2}) do pirrol e da piridina para distintos canais de produção em diversos pontos da HHN. *Pirrol** refere-se aos cálculos de produção deste somente com as reações da tabela 3.5 e *Piridina** refere-se à quantidade de piridina produzida apenas a partir do etano (reações da tabela 3.7). A densidade de coluna do CN é tomada como referência. Também foram incluídos o CN^+ , CN^- , HCN e o HNC. *Pirrol†* e *Piridina†* referem-se à densidade de coluna destes quando inclui-se um PAH com uma dada abundância inicial no arquivo de química. *Pirrol§* e *Piridina§* referem-se aos resultados com a abundância do PAH fixa e as reações da Tabela 3.10.

Tabela 4.4 - Densidade de Coluna (cm^{-2}) do pirrol e da piridina para distintos canais de produção em diversos pontos da HHN. *Pirrol** refere-se aos cálculos de produção deste somente com as reações da tabela 3.5 e *Piridina** refere-se à quantidade de piridina produzida apenas a partir do etano (reações da tabela 3.7). *Pirrol†* e *Piridina†* referem-se à densidade de coluna destes quando inclui-se um PAH com uma dada abundância inicial no arquivo de química. A densidade de coluna do CN é tomada como referência. *Pirrol§* e *Piridina§* referem-se aos resultados com a abundância do PAH fixa e as reações da Tabela 3.10.

Molécula	$A_V = 1$ mag	$A_V = 3$ mag	$A_V = 10$ mag
CN	6.44×10^{13}	3.42×10^{14}	3.75×10^{14}
CN^+	3.45×10^7	3.50×10^7	3.50×10^7
CN^-	1.89×10^4	2.56×10^7	2.96×10^7
HCN	7.37×10^{11}	2.45×10^{12}	2.29×10^{13}
HNC	2.94×10^{11}	9.60×10^{11}	1.10×10^{13}
<i>Pirrol*</i>	3.71×10^{-4}	6.17×10^{-2}	9.88×10^{-1}
Pirrol	2.85×10^{-2}	25.30	1.37×10^4
<i>Pirrol†</i>	2.71×10^{-3}	1.58×10^4	8.52×10^9
<i>Pirrol§</i>	2.85×10^{-2}	25.30	1.37×10^4
<i>Piridina*</i>	2.14×10^{-10}	2.51×10^{-9}	3.29×10^{-5}
Piridina	1.19×10^{-3}	1.20	3.40×10^4
<i>Piridina†</i>	1.15×10^{-4}	2.01×10^3	1.14×10^{10}
<i>Piridina§</i>	1.19×10^{-3}	1.20	1.50×10^{13}

A abundância de CN^+ já é baixa nas regiões centrais da nuvem, como é de se esperar, o que justifica o fato de sua densidade de coluna não crescer quando se vai a profundidades

maiores (de $A_V = 1$ para 10 mag). Por outro lado, a abundância do CN^- é muito baixa em relação às observações. Agúndez et al. (2010) encontraram $CN^-/CN = 2.5 \times 10^{-3}$ para o envelope da estrela IRC+10216, um valor muito acima da razão prevista de 10^{-7} . Além do fato do código Meudon não se prestar a modelizar envelopes circum-estelares, essa subestimativa indica que a química do CN está muito incompleta, pois mesmo modelos projetados para envelopes estelares preveem razões ordens de magnitude abaixo das observadas (Agúndez et al., 2010).

A grande maioria dos trabalhos relacionados à heterocíclicos no meio interestelar têm se focado na destruição dessas espécies pela radiação UV ou raios cósmicos (Peeters et al. (2005), Ruiterkamp et al. (2005) e Cottin et al. (2003)). Uns poucos trabalhos se dedicaram à síntese de heterocíclicos, em geral, em gelos irradiados por radiação ultravioleta que destrói algum heterocíclico complexo já presente (ver Nuevo et al. (2012) em relação à piridina). Assim, a investigação de novas rotas para a produção de heterocíclicos, como resumida na tabela 4.4, é fundamental. Vimos que os grandes PAHs podem exercer o papel de catalisador na formação de outros PAHs. O processo de incorporação de um átomo de nitrogênio em um PAH, seguindo os passos sugeridos por Ricca et al. (2001) permitiu definir uma nova rota para a produção dos heterocíclicos nitrogenados pirrol e piridina.

Tendo em vista a presença constante de PAHs e de PANHs em ambientes interestelares e circum-estelares, essas espécies podem catalizar a formação não só de heterocíclicos com um átomo de nitrogênio incorporado, mas com dois átomos, como a pirimidina, a pirimidona e a uracila. Nesse caso, contudo, a abundância esperada deve ser menor.

Como vemos da tabela 4.4, a densidade de coluna da piridina é cerca de 10^{13} cm^{-2} para a rota de produção via PAHs. As entradas *Pirrol*[†] e *Piridina*[†] fornecem densidades de coluna que não pretendem ser realísticas, mas apenas servem para verificar a plausibilidade do mecanismo de produção de heterocíclicos nitrogenados via PAHs. Já as densidades de coluna do *Pirrol*[§] e *Piridina*[§] foram calculadas em condições mais realísticas. Se escalonarmos a densidade de coluna do CN da HHN, para Sgr B2, que apresenta fontes com $N(CN) \sim 3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ (Adande e Ziurys, 2012), obteremos densidades de coluna da ordem de 10^{14} cm^{-2} , para a piridina. Esse valor é elevado em relação aos limites superiores das observações visando detectar esta molécula, indicando que houve uma superestimativa no cálculo da sua taxa de produção. Por outro lado, a alta abundância obtida para essa

molécula torna-se um alvo para futuras observações, mesmo após correções da sua química. Nesse sentido, a investigação de Titã e dos corpos gelados do Sistema Solar poderá fornecer um laboratório local para testar a química e a física do meio interestelar. É interessante que no caso de Titã (Krasnopolsky, 2009) a piridina apresente maiores abundâncias do que o pirrol, exatamente como o modelo prevê para a HHN. Deve-se, porém, notar que, dentro dos canais examinados aqui, não se encontrou a produção de pirrois via PAHs.

Ao se considerar PAHs de abundância fixa, a abundância da piridina aumentou acentuadamente, atingindo uma densidade de coluna acima dos limites superiores determinados por observações (Simon e Simon, 1973). Isso sugere que a constante de reação para sua formação a partir do $C_{54}H_{19}N$ (Tabela 3.10) tenha sido superestimada. Por outro lado, não houve um canal adicional para a produção do pirrol via PAHs e sua abundância permaneceu baixa, em conformidade com as observações (Myers et al., 1980). Contudo, deve-se observar que poucos canais de produção foram investigados. Pode surgir, em uma exploração mais ampla de possibilidades, por exemplo, um canal adicional para o pirrol. Também a consideração de canais adicionais deverá elevar a abundância da piridina.

Algo que não foi levado em consideração na rede de reações envolvendo os PAHs são os cátions. A introdução de espécies PAH^+ deverá elevar a taxa de produção de várias espécies, pois as taxas de reação cátion-neutros tem coeficientes tipicamente da ordem de $10^{-9} s^{-1}cm^{-3}$ (Vuong e Foing, 2000), em vez do valor $10^{-10} s^{-1}cm^{-3}$ adotado aqui como típico para reações radical-neutro (Le Page et al., 2001).

Outro fator que poderia aumentar a produção de heterocíclicos nitrogenados seria um maior número de sítios desidrogenados no PAH. De fato, aqui somente consideramos a ejeção de apenas um átomo de H, enquanto pode haver mais de um. Uma hierarquia de PAHs com múltiplos graus de desidrogenação deveria comparecer em um modelo completo. Em nossos cálculos para a espécie representativa, o $C_{54}H_{18}$, ele aparece essencialmente como a forma desidrogenada uma vez $C_{54}H_{17}$. Isso corresponde a um grau de hidrogenação $x_H = 17/18 = 94\%$, ou seja, em média, o PAH não está desidrogenado.

Infelizmente, as observações das linhas de emissão no infravermelho atribuídas aos PAHs, as AIBs, não permitem decidir esta questão. Não se distingue $x_H = 100\%$, 95% , 90% ou 75% . No máximo, pode-se dizer que a maior parte das observações é compatível com $x_H > 50\%$ (Schutte et al., 1993). As AIBs não fornecem uma assinatura de quando os

PAHs responsáveis pela emissão em infravermelho estão totalmente hidrogenados, mas apenas de quando estão quase totalmente desidrogenados. Esta última situação ocorre para campos de radiação muito intensos como, por exemplo, de um núcleo ativo de galáxia. Neste caso, pode-se encontrar $x_H < 0.1$ (Siebenmorgen e Kruegel, 1992). Outra possível assinatura dos PAHs seriam as Bandas Interestelares Difusas (DIBs, na sigla em inglês), um conjunto de linhas de absorção largas ($FWMM \geq 1\text{Å}$) observadas no visível e infravermelho próximo (Leger e D'Hendecourt (1985), Herbig (1995), Draine (2003)). O fato das bandas serem muito largas exclui moléculas com menos de 5 átomos na fase gasosa e, portanto é mais provável que as DIBs sejam associadas com as populações de grãos e poeira. Entre estas populações, a de PAHs foi sugerida por vários estudos. Em particular, a DIB mais forte, a 4430Å , foi atribuída ao cátion do coroneno duplamente desidrogenado $C_{24}H_{10}^+$ (Duley, 2006). Esta identificação permitiria o conhecimento de pelo menos um estado de desidrogenação de um PAH. Infelizmente, experimentos de laboratório com o $C_{24}H_{10}^+$ (Useli-Bacchitta et al., 2010) revelaram, além de uma transição eletrônica a 442 nm que seria identificada com a DIB a 4430Å , uma mais forte a 458 nm, o que exclui o $C_{24}H_{10}^+$ como portador da DIB a 4430Å . Portanto, até o momento, a distribuição detalhada dos estados de desidrogenação dos PAHs é desconhecida, o que nos dá uma maior liberdade para explorar uma faixa maior de PAHs desidrogenados.

Um outro resultado das nossas simulações é que essencialmente todo PAH está na forma de PANHs no centro da nuvem. Isso é compatível com as previsões de Hudgins et al. (2005) de que mais de 1-2% de todo nitrogênio cósmico está sequestrado na população de PAHs interestelares. De fato, dada a abundância $[PAH] = 10^{-6}$ e a abundância do nitrogênio no meio interestelar $[N] = 7.95 \times 10^{-5}$, obtemos que 1.3% do nitrogênio está na população de PAH - PANHs. Como Hudgins et al. (2005) estabelece apenas um limite inferior para o total de nitrogênio presentes em PAHs, podemos a princípio, ter dois ou mais sítios dopados do nitrogênio no nosso PAH típico $C_{54}H_{18}$, um limite consistente com o conhecimento sobre o grau de desidrogenação de PAHs e que permitiria multiplicar pelo número de sítios desidrogenados-nitrogenados a taxa de produção de heterocíclicos nitrogenados.

4.3 Busca por Moléculas em Ambientes Interestelares e Circum-estelares

Há cada vez mais sugestões de que várias moléculas que constituem as unidades básicas da vida são mais facilmente sintetizadas no meio interestelar do que na Terra, e que o nosso planeta foi posteriormente enriquecido por essas moléculas que vieram bombardeadas por cometas. Os cometas são reservatórios de moléculas que contém poeira da nuvem primitiva que originou o Sistema Solar e, além disso, podem ser considerados como intermediários entre o meio interestelar e o Sistema Solar. Buscas por grandes moléculas de relevância biológica no meio interestelar têm sido conduzidas por décadas e resultou na identificação de aproximadamente 170 moléculas no meio interestelar e circum-estelar - lista que pode ser aumentada em cerca de 10% se incluir as detecção não confirmadas - desde moléculas diatômicas a fulerenos. Outras moléculas importantes que foram detectadas nesta árdua busca foram aldeídos, como o propenal (CH_2CHCHO) e o propanal (CH_3CH_2CHO) (Hollis et al., 2004), como também um açúcar simples, o glicolaldeído (CH_2OHCHO) (Hollis et al. (2000); Hollis et al. (2004)), e mesmo um precursor do açúcar ribose, presente na estrutura dos ácidos nucleicos, a molécula cíclica óxido de etileno ($c - C_2H_4O$) (Dickens et al., 1997). Além do conhecimento de moléculas nitrogenadas, aquelas das espécies oxigenadas-aldeídos, alcoois, açúcares etc. - é também fundamental para o entendimento da química pré-biótica. Nesse sentido, observações de regiões ricas destas moléculas, como o Centro Galáctico (Requena-Torres et al., 2008) são de grande importância astrobiológica.

Com a expectativa de aumentar o nosso conhecimento do conteúdo molecular do Universo, o Telescópio *Herschel*, lançado em 14 de maio de 2009, já demonstra seus primeiros resultados. Com alta resolução no Infravermelho, em três cores, foi realizada uma foto de M51, a ‘*Whirlpool galaxy*’, como mostra a figura 4.4. Vermelho, verde e azul corresponde a $160\mu m$, $100\mu m$ e $70\mu m$, respectivamente. O aparelho utilizado foi o *Herschel’s Photo-conductor Array Camera and Spectrometer*, PACS. É possível analisar, ainda, a resolução deste equipamento, quando comparamos a imagem de M51 com uma do *Spitzer Telescope*. A imagem do *Herschel* tem uma definição muito maior e mais nítida, como mostra a figura 4.4.

Os PAHs devem constituir o maior reservatório de moléculas orgânicas no meio interestelar, além de desempenharem um papel essencial na formação de moléculas mais com-



Figura 4.4: Foto de M51 tirada pelo *Herschel* (direita) e a mesma galáxia comparando as imagens do *Herschel* e do *Spitzer Telescope* (esquerda) (Science e Technology, 2011).

plexas, mas a busca por bandas de PAHs no Infravermelho-distante (FIR) é um projeto difícil, já que se prevê que as bandas fracas e nossa habilidade para observá-las dependerá de quão diversas são as misturas dos PAHs interestelares. O *Herschel* oferece a possibilidade de investigar esta questão graças a características e a faixa espectral que seus instrumentos cobrem. SOFIA e ALMA, que estão agora entrando em cena, podem também trazer novos *insights* dentro deste tópico. A próxima missão espacial no FIR/sulmilimétrico será o SPICA (com data de lançamento prevista para 2018). Mas, nenhuma destas missões permitirá cobrir toda a faixa espectral do *Herschel* e, então, nós poderíamos tentar uma busca árdua por estas bandas de PAH com o *Herschel*. Como demonstramos no capítulo 3, PAHs desidrogenados podem ser cruciais para a formação de compostos heterocíclicos e, portanto, o grau de desidrogenação dos PAHs deve ser investigado pela comparação entre linhas produzidas por ligações CH e as produzidas por ligações CC.

A previsão das bandas e perfis de bandas dos PAHs é uma tarefa teórica fundamental, e vários modelos têm buscado esse objetivo como, por exemplo, o de Ceccarelli et al. (2001), que inclui resfriamento por cascata e detalha propriedades moleculares (anarmocidade, rotação etc.). Neste cômputo, há ainda muito trabalho de laboratório a ser feito e isto não é tarefa fácil para experimentos ou cálculos teóricos. Do ponto de vista experimental, há a necessidade de espectroscopia no infravermelho-distante para as moléculas de PAH. Os cálculos da matriz de parâmetros anarmônicos com cálculos da química quântica usando

a teoria da densidade funcional (DFT) são muito complicados. Para altas temperaturas, alternativas têm sido encontradas, tais como dinâmicas moleculares com esquema de aproximação DFT (Porezag et al., 1995), mas necessita cálculos para baixas temperaturas. Um grande esforço ainda é necessário em relação a este assunto, tanto observacional como do ponto de vista de laboratório.

Uma classe de moléculas astrobiologicamente interessantes é a constituída pelos compostos heterocíclicos. Foi isto que motivou as simulações no capítulo 3 com essas espécies. Na bioquímica terrestre, os heterocíclicos das classes das pirimidinas (citosina, timina e uracila) e das purinas (adenina e guanina) são as nucleobases usadas no maquinário informacional do DNA e RNA. Moléculas heterocíclicas simples poderiam ser buscadas através de observações desde a faixa do rádio até o infravermelho de ambientes interestelares e circustelares. Compostos heterocíclicos simples, similarmente aos PAHs, devem ser abundantes, pois ambos os tipos de moléculas são resistentes à radiação UV (Peeters et al. 2005). Algumas dessas espécies poderiam ser alvos de futuras jornadas observacionais: oxazol (C_3H_3NO), furano (C_4H_4O), também o pirrol (C_4H_4NH) e a piridina (C_5H_5N). O Oxazol é de especial interesse porque, além de ser uma molécula relativamente pequena (com 8 átomos), o seu derivado, amino-oxazol ($C_3H_2NH_2NO$), foi proposto como o precursor dos ribonucleotídeos de pirimidinas, no cenário do “Mundo do RNA” para a origem da vida na Terra (Powner et al., 2009). Além disso, o amino-oxazol pode ser montado a partir de moléculas detectadas no meio interestelar: a cianamida e do glicolaldeído (CH_2OHCHO) (Hollis et al., 2000), (Hollis et al., 2004), (Halfen et al., 2006). Neste trabalho, a seção 4.2 demonstrou que a piridina pode ter abundâncias suficientemente altas para serem alvos de missões observacionais futuras.

Com a disponibilidade de dados observacionais para transições de moléculas desde o infravermelho até o rádio proporcionadas tanto por instrumentos espaciais (Spitzer e Herschel) como de solo (o VIZIR e o MIDI, instalados no VLT, e o ALMA), o estudo de moléculas complexas no meio interestelar tanto da Galáxia como de outras galáxias deverá experimentar uma grande expansão. A faixa do milimétrico é bastante promissora, haja vista a recente detecção no milimétrico da uréia ($(NH_2)_2CO$), que desempenha um importante papel na química pré-biótica (Kuo et al., 2010). Finalmente, a participação brasileira no VLT e no ALMA (em especial, através do projeto LLAMA) tornará exequíveis

projetos nacionais voltados para a detecção de moléculas em vários contextos astrofísicos.

As presentes simulações apresentaram como a exploração de uma pequena gama de possíveis canais de produção de heterocíclicos já resultou em abundâncias significativas para ao menos uma espécie de heterocíclicos nitrogenados, a piridina. Excursões sistemáticas pelos diversos canais de produção deverão revelar mais espécies para serem alvos destas buscas.

Conclusões e Perspectivas

O objetivo deste estudo foi investigar a abundância de algumas moléculas de relevância pré-biótica que podem ser formadas no meio interestelar, o que deverá trazer contribuições para elucidar os cenários de origem da vida na Terra e outros lugares do Universo.

Para tanto, optou-se por estudar uma região fotodominada (PDR - do inglês *photon-dominated region*) por ser uma região de formação molecular. Modelos para PDRs foram usados para computar os parâmetros físicos e químicos de nuvens interestelares geometricamente simples, expostas à radiação ultravioleta distante (FUV). Devido à sua geometria e campo de radiação FUV serem bem conhecidos, a Nebulosa Cabeça de Cavalo (HHN - do inglês *Horsehead Nebula*) representa um arquétipo de PDRs e fornece bons modelos numéricos para formação de moléculas na região. Por isso a HHN foi escolhida como objeto teste neste trabalho.

Para tais modelos foi usado o código *PDR Meudon*, pois é um código disponível publicamente e é um dos recursos dos programas a serem conduzidos com o observatório *Herschel* (Le Petit et al., 2006). Além disso, este código é amplamente usado porque permite definir e ajustar os parâmetros que descrevem o sistema como melhor convir. Porém, como todo modelo numérico, este apresenta uma série de aproximações que restringem o programa. Entre essas restrições, neste trabalho, considerou-se no modelo apenas reações de formação e destruição de moléculas na fase gasosa, desprezando aquelas em grãos. Outras duas importantes restrições que devem ser consideradas são os valores das constantes definidas que podem ter incertezas e, a suposição de estado estacionário que impede que o modelo seja aplicado a regiões que não estejam em equilíbrio.

Procuramos comparar nossos modelos para a HHN com as simulações de Gerin et al.

(2009) e Goicoechea et al. (2009), já conhecidos na literatura, de modo a termos segurança em relação às previsões sobre as abundâncias de moléculas prebióticas relevantes. Foram considerados os casos de densidade do gás constante, de pressão constante e isotérmico.

O modelo isobárico revelou-se o mais plausível e com previsões comparáveis aos resultados de Gerin et al. (2009) e Goicoechea et al. (2009).

Ao fazer comparações com observações, deve-se levar em conta que o modelo considera apenas reações de formação e destruição de moléculas na fase gasosa, sem incluir reações que envolvam grãos de poeira e gelo.

Estabelecido o modelo a ser usado, foram simuladas as abundâncias de moléculas que tenham potencial importância astrobiológica, como o CN e seus íons, o HCN e o HNC, que estão na base de reações de formação de moléculas de importância biológica como as pirimidinas, que entram na composição dos ácidos nucleicos. As moléculas contendo nitrogênio são essenciais para a produção de bases nitrogenadas, que são responsáveis pela transferência da informação nos seres vivos da Terra. Investigamos a formação e a abundância do benzeno, a molécula aromática arquetípica, capaz de produzir pirimidinas, e dos heterocíclicos nitrogenados pirrol e piridina.

O pirrol e a piridina são as primeiras moléculas heterocíclicas aromáticas com anéis de cinco e seis membros, respectivamente. Devido à sua simplicidade e robustez são as mais prováveis de serem descobertas em buscas por moléculas pré-bióticas no espaço. Investigamos vários canais para a produção destas moléculas, e uma rota de síntese bastante promissora foi aquela onde estão presentes os PAHs, que atuam como catalisadores no processo de produção dos N-heterocíclicos.

5.1 *Precisamos de uma Revolução Molecular*

A lista de moléculas detectadas que é dada na tabela A.1 tem crescido de ano para ano, mas apenas incrementalmente e graças, principalmente, ao desenvolvimento de novos instrumentos. Porém, a taxa de crescimento do número de detecções de novas moléculas está longe de ser elevada. A investigação sobre as espécies moleculares no espaço é um esforço meticuloso, e o número de regiões astronômicas com espectros de alto sinal-ruído é pequeno. Novas espécies são descobertas por pesquisas metódicas e a detecção de novas moléculas é, muitas vezes, demorada, uma vez que é necessária a confirmação de várias

transições da mesma molécula em bandas de diferentes frequências. Frequentemente apenas linhas fracas são identificadas, misturadas com transições muito próximas.

Uma coisa é certa: o inventário atual de moléculas está longe de ser abrangente. O avanço no campo da astroquímica precisa de um salto para atender as demandas da astrobiologia.

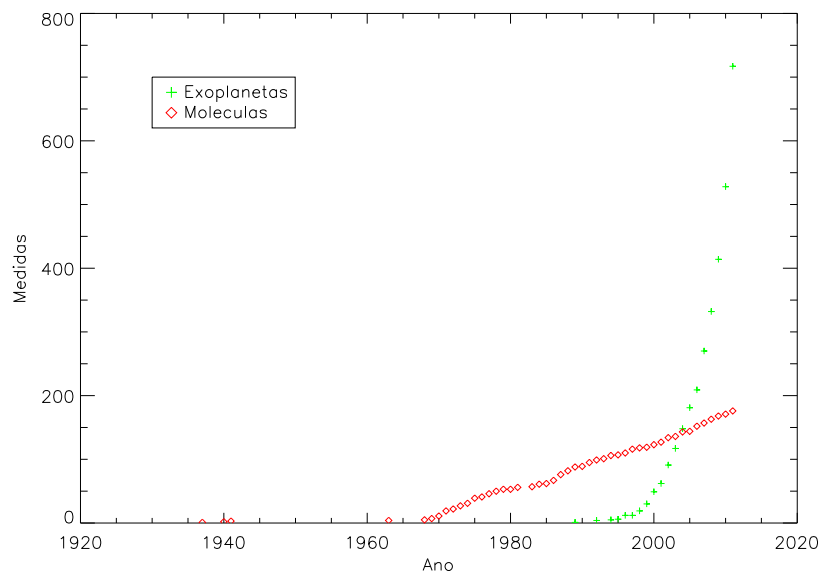


Figura 5.1: Moléculas e exoplanetas detectados ao longo dos anos.

A figura 5.1 mostra uma comparação entre o número cumulativo de moléculas detectadas no espaço e do número de exoplanetas descobertos em função do tempo. Uma característica impressionante destes dados é que a taxa de detecção de exoplanetas foi se acelerando com o tempo, enquanto a taxa de detecção das moléculas se manteve mais ou menos constante. No final de 2011 havia um total de 170 moléculas detectadas e confirmadas e 717 exoplanetas já descobertos (Physikalisches, 2012), (Cologne, 2012), (NRAO, 2012) e (Encyclopaedia, 2012).

O crescimento exponencial do número de exoplanetas se assemelha à lei de Moore, segundo a qual a densidade de transistores no interior de um microchip dobra, aproximadamente, a cada dois anos (Moore, 1965). A aceleração do número de planetas descobertos é devido aos novos avanços tecnológicos - os satélites CoRoT e Kepler, espectrógrafos como o *HARPS* e o *Sophie*, metodologias de tratamento de dados mais sofisticadas e um es-

forço concentrado da comunidade científica internacional na busca de exoplanetas. Este comportamento exponencial é característico de vários desenvolvimentos tecnológicos da humanidade, por exemplo emissões de dióxido de carbono, e não poderá ser sustentado para sempre devido aos recursos finitos disponíveis para a pesquisa ou em virtude do tamanho finito da população objeto. Mais cedo ou mais tarde, a taxa de detecção de exoplanetas vai chegar a um estágio de aumento apenas discreto. Mas o que acontece com a pesquisa de espécies moleculares no espaço é que ela nunca experimentou fase exponencial e mantém um ritmo linear, uma vez que a primeira molécula interestelar (CH) foi identificada em 1937 (Swings e Rosenfeld, 1937).

Como provocar uma revolução exponencial na busca de moléculas no espaço?

As revoluções são inflamadas pela frustração, e temos a grande frustração na realização a tarefa básica de identificação de uma substância dentro da floresta de linhas interestelares, que se estende de UV para o rádio. As características não identificadas em espectros interestelares têm sido observadas quase que desde os primórdios da astroquímica. Recentemente, o número de tais linhas tem aumentado rapidamente em paralelo com a maior sensibilidade e ampla faixa de frequência de novos instrumentos de observação. Muitas vezes, as linhas têm sua origem em moléculas grandes com espectros densos. Assim, não houve um aumento no número de moléculas “detectadas”. No entanto, a explosão no número de recursos é muito mais rápida do que o número de identificações. É extremamente difícil distinguir uma molécula nova no espectro complexo que envolve muitas vezes iterações com estados vibracionais das moléculas. Questões ainda permanecem sem resposta. Por exemplo, as Bandas Aromáticas no Infravermelho (AIBs) são atribuídas a PAHs do meio interestelar com uma certeza razoável. No entanto, não sabemos a distribuição nem os tamanhos dos PAHs que lhes deu origem. Nós temos uma identificação positiva de apenas um primeiro PAH, o benzeno (C_6H_6), e ainda não foram amplamente aceitas as detecções do naftaleno ($C_{10}H_8$) e do antraceno ($C_{14}H_{10}$) (Iglesias-Groth et al., 2008), (Iglesias-Groth et al., 2010). Não há pistas observacionais dos próximos membros da série, os PAHs de quatro anéis, tais como pireno ($C_{16}H_{10}$), criseno ($C_{18}H_{12}$), ou tetraceno ($C_{18}H_{12}$). E o desafio é ainda maior quando se tenta identificar os complexos compostos heterocíclicos da bioquímica.

O problema fundamental é que o aumento dos resultados observacionais está longe de

acelerar o crescimento dos bancos de dados em um ritmo rápido. Extrair as assinaturas de novas espécies moleculares do abundante material observacional envolve vários aspectos: i) observações; ii) cálculos quânticos teóricos de química básica e dos processos físicos, iii) experimentos de laboratório (com ambas as fases, gasosa e sólida); iv) e simulações dos ambientes que dão origem às linhas. Este esforço representa um projeto de longo prazo. Um reforço adicional de observação nos ajudará a melhor compreender a complexidade do universo molecular. Os novos sistemas de observação, tanto no espaço como no solo - Spitzer, Herschel, SOFIA, ALMA, JWST, Spica - abrirão novas janelas no infravermelho e no milimétrico/submilimétrico, para bases de frequência mais completas que permitirão identificações mais confiáveis de novas espécies moleculares. Neste caso, os mesmos instrumentos que são usados para examinar as origens do universo hoje também poderão nos ajudar a desvendar as origens da vida.

5.2 Próximos Passos em Simulações

O presente trabalho representa os passos iniciais no estudo da astroquímica pré-biótica. Dados experimentais assim como evidências observacionais devem ser levados em conta para o avanço desta pesquisa. Para tanto, a continuação deste trabalho deve envolver um avanço nas simulações, considerando principalmente as reações de formação e destruição de moléculas em grãos de poeira e gelo e a inclusão menos aproximada de PAHs.

Além disso, nessa fase do projeto é essencial um trabalho em laboratório que permita reproduzir a formação destas importantes moléculas em ambientes interestelares. Uma opção seria utilizar o Laboratório de AstroBiologia (AstroLab) do Observatório Abrahão de Moraes para simular a produção de compostos orgânicos em gelos e grãos interestelares. Em particular, é preciso investigar os processos de química de estado sólido e de superfície em grãos, com determinações mais precisas das escalas de tempo dos saltos das moléculas adsorvidas entre sítios na superfície dos grãos. Também é preciso um melhor conhecimento da evaporação de voláteis de mantos de gelo de grãos interestelares, principalmente na presença de radiação ultravioleta e de raios cósmicos, assim como dos fatores de aderência de alcatrões nos gelos. Irradiação por radiação ultravioleta com comprimentos de onda bem definidos será possível graças ao Laboratório Nacional de Luz Síncrotron. Canhões de elétrons e de prótons permitirão simular os raios cósmicos. Experimentos com gelos têm

sido bastante comuns, mas há uma carência muito grande de experimentos envolvendo a fase gasosa, que exigirão montagens experimentais engenhosas. Os experimentos de laboratório são um passo importante para definir estratégias observacionais com instrumentos capacitados para encontrar estes tipos de molécula, como o ALMA e o Herschel, de forma a aumentar a quantidade de dados para construir um modelo padrão confiável de estimativas de abundâncias de espécies químicas.

Em todo caso, o avanço deste trabalho torna evidente a necessidade do aumento nos bancos de dados, no que diz respeito ao cálculo dos parâmetros quânticos das taxas de reações para a formação e destruição de moléculas importantes no meio interestelar, principalmente para moléculas maiores e mais complexas, assim como também ampliar os estudos sobre quais são estas reações. Em particular são necessários os parâmetros fundamentais – seções de choque, constantes de reação, entalpias e comprimentos de onda de transições – para grandes moléculas, com mais de 10 átomos ou até mais de 20 átomos. Isso já pode estar sendo necessário para realizar o garimpo de espécies químicas dentro da floresta de linhas que está emergindo das observações por detectores com maior sensibilidade.

Um ponto importante é estender a faixa de temperatura das bases de dados que frequentemente se restringe à temperatura ambiente terrestre, enquanto é necessário ter dados a temperaturas muito baixas para se determinar com segurança a dependência com a temperatura dos coeficientes de reação. Outro tópico crítico é que teoricamente se sabe que a química em grãos de tamanho finito pode ser diferente daquela em superfícies infinitas. Como investigar esse comportamento em laboratório? Poderia se utilizar algum dispositivo que levitasse um grão individual por um longo período de tempo?

Além dos cálculos quânticos e dos experimentos de laboratório, muito *insight* referente à química do meio interestelar pode ser obtido utilizando ambientes próximos de nós, no próprio Sistema Solar, como padrões para aferir processos a baixas temperaturas no meio interestelar. Isso já foi feito parcialmente neste trabalho ao recorrermos a modelos fotoquímicos de Titã. Os fenômenos em corpos gelados do Sistema Solar constituem referências para a compreensão dos gelos em nebulosas, regiões circum-estelares e no meio interestelar difuso. Em particular, os cometas são laboratórios cósmicos nos quais muitos dos processos relevantes à astroquímica e astrobiologia estão ocorrendo suficientemente

perto de nós para serem observados em detalhe e mesmo visitados *in situ*.

Sem estes estudos mais aprofundados, as simulações das abundâncias de importantes moléculas que poderiam ter originado a vida irão pouco além de estimativas cruas, limitando nosso conhecimento sobre a origem da vida na Terra e sua distribuição no Universo.

5.3 Perspectivas Observacionais

Devido aos parâmetros físicos e as abundâncias químicas nas PDRs, tais como a HHN, uma comparação acurada de observações com os modelos não pode ser realizada sem a informação das intensidades das linhas moleculares. Em virtude das pequenas escalas espaciais envolvidas, a interferometria (sub)milimétrica parece ser o melhor método para obter a informação espacial necessária para a resolução das quantidades físicas e químicas. De qualquer modo, muitas espécies interessantes mostram linhas relativamente fracas, mas que podem ser detectadas numa fonte forte e próxima como a HHN. Para acessar uma amostra mais completa de linhas moleculares, instrumentos mais sensíveis são necessários, como os fornecidos pelo ALMA, que é capaz de detectar algumas das moléculas mais relevantes em astrobiologia, como mostrado na tabela 5.1, onde assinalamos as bandas do ALMA que podem ser utilizadas para a observação dessas espécies.

Tabela 5.1 - Transições de moléculas observáveis com o ALMA.

Molécula (Transição)	Frequência (GHz)	Banda do ALMA	Frequência (GHz)
CN ($N = 1 - 0/N = 2 - 1$)	113.5/226.8	3/6	84 - 119/211 - 275
HCN ($J = 3 - 2$)	265-267	6	211-27
HNC ($J = 1 - 0$)	87.32	3	84-119
Piridina ($J = 45 - 44$)	269.247	6	211 - 27
Pirrol ($9_{09} - 8_{08}$)	86.109	3	84 - 119

Além das moléculas usualmente observadas em nuvens moleculares, como o CN, HCN e HNC (Krips et al., 2011), a piridina tem uma transição rotacional característica ($J = 45 - 44$) a 269,247 GHz (Ye et al., 2005), dentro da banda 6 do ALMA e o pirrol outra característica ($9_{09} - 8_{08}$), a 86,109 GHz (Myers et al., 1980), que cai na banda 3 do ALMA.

Já se suspeita há tempos que anéis sejam menos abundantes do que cadeias de moléculas (Myers et al., 1980), o que tem frustrado as buscas por heterocíclicos no meio interestelar (Huang et al., 2005), mas a nova geração de instrumentos como o ALMA e o Herschel deverá permitir em breve converter a frustração em excitação pela busca.

Referências Bibliográficas

- Adande G. R., Ziurys L. M., Millimeter-wave Observations of CN and HNC and Their ^{15}N Isotopologues: A New Evaluation of the $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ Ratio across the Galaxy, *ApJ*, 2012, vol. 744, p. 194
- Agúndez M., Cernicharo J., Guélin M., Kahane C., Roueff E., Kłos J., Aoiz F. J., Lique F., Marcelino N., Goicoechea J. R., González García M., Gottlieb C. A., McCarthy M. C., Thaddeus P., Astronomical identification of CN^- , the smallest observed molecular anion, *A&A*, 2010, vol. 517, p. L2
- Allain T., Leach S., Sedlmayr E., Photodestruction of PAHs in the interstellar medium. I. Photodissociation rates for the loss of an acetylenic group., *A&A*, 1996a, vol. 305, p. 602
- Allain T., Leach S., Sedlmayr E., Photodestruction of PAHs in the interstellar medium. II. Influence of the states of ionization and hydrogenation., *A&A*, 1996b, vol. 305, p. 616
- Allamandola L. J., Tielens A. G. G. M., Barker J. R., Interstellar polycyclic aromatic hydrocarbons - The infrared emission bands, the excitation/emission mechanism, and the astrophysical implications, *ApJS*, 1989, vol. 71, p. 733
- Anders E., Grevesse N., Abundances of the elements - Meteoritic and solar, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 1989, vol. 53, p. 197
- Astrochemistry K. D., KIDA. <http://kida.obs.u-bordeaux1.fr>, 2012
- Briggs G., Center for Mars Exploration (CMEX Mars) - NASA. <http://cmex.ihmc.us/cmex/Astrobiology>

- Ceccarelli C., Baudry A., Caux E., Tielens A. G. G. M., Joblin C. e. a., HIFI Survey of Water Lines from Protostars. In *The Promise of the Herschel Space Observatory*, vol. 460 of ESA Special Publication, 2001, p. 219
- Cecchi-Pestellini C., Mallocci G., Mulas G., Joblin C., Williams D. A., The role of the charge state of PAHs in ultraviolet extinction, *A&A*, 2008, vol. 486, p. L25
- Chela-Flores J., *The New Science of Astrobiology – From Genesis of the Living Cell to Evolution of Intelligent Behavior in the Universe*. Kluwer Academic Publishers, 2001, 251 p.
- Chemeo High Quality Chemical Properties. <http://www.chemeo.com/38-987-5>, 2012
- ChemSpider The free chemical database. <http://www.chemspider.com/Search.aspx>, 2012
- Cherchneff I., Barker J. R., Tielens A. G. G. M., Polycyclic aromatic hydrocarbon formation in carbon-rich stellar envelopes, *ApJ*, 1992, vol. 401, p. 269
- Cheung A. C., Rank D. M., Townes C. H., Thornton D. D., Welch W. J., Detection of NH₃ Molecules in the Interstellar Medium by Their Microwave Emission, *Physical Review Letters*, 1968, vol. 21, p. 1701
- Cologne University of Cologne. <http://www.astrochymist.org/astrochymist_ism.html>, 2012
- Cordiner M. A., Millar T. J., Herbst E., Chuimin R. N., Walsh C., Molecular anion chemistry in interstellar and circumstellar environments, 2007a
- Cordiner M. A., Millar T. J., Herbst E., Chuimin R. N., Walsh C., Molecular anion chemistry in interstellar and circumstellar environments. In *Molecules in Space and Laboratory*, 2007b
- Cottin H., Moore M. H., Bénilan Y., Photodestruction of Relevant Interstellar Molecules in Ice Mixtures, *ApJ*, 2003, vol. 590, p. 874
- D'Hendecourt L. S., Molecular complexity in astrophysical environments: From astrochemistry to astrobiology?, 2011

- Dickens J. E., Irvine W. M., Ohishi M., Ikeda M., Ishikawa S., Nummelin A., Hjalmarson A., Detection of Interstellar Ethylene Oxide (c-C₂H₄O), *ApJ*, 1997, vol. 489, p. 753
- Draine B. T., Photoelectric heating of interstellar gas, *ApJS*, 1978, vol. 36, p. 595
- Draine B. T., Interstellar Dust Grains, *ARA&A*, 2003, vol. 41, p. 241
- Duley W. W., Dehydrogenated Cations of Coronene, C₂₄H^{+_x}: The Source of Many Diffuse Interstellar Bands, *ApJ*, 2006, vol. 643, p. L21
- Ehrenfreund P., Rasmussen S., Cleaves J., Chen L., Experimentally Tracing the Key Steps in the Origin of Life: The Aromatic World, *Astrobiology*, 2006, vol. 6, p. 490
- Encyclopaedia T. E. P., The Extrasolar Planets Encyclopaedia. <http://http://exoplanet.eu/catalog-all.php>, 2012
- Flower D. R., Pineau des Forêts G., The influence of grains on the propagation and structure of C-type shock waves in interstellar molecular clouds, *MNRAS*, 2003, vol. 343, p. 390
- Friça A., A vida num Contexto Cósmico. Notas de Aula, 2012
- Gerin M., Pety J., Goicoechea J. R., The Horsehead Nebula, a Template Source for Interstellar Physics and Chemistry. In *Submillimeter Astrophysics and Technology: a Symposium Honoring Thomas G. Phillips*, vol. 417 of *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, 2009, p. 165
- Gilmour I., Sephton M. A., *An introduction to Astrobiology*. Cambridge, 2004, 364 p.
- Goicoechea J. R., Pety J., Gerin e. a., The ionization fraction gradient across the Horsehead edge: an archetype for molecular clouds, *A&A*, 2009, vol. 498, p. 771
- Goos E., Burcat A., Ruscic B., *Extended Third Millenium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables*, 2012, vol. 1, p. 133
- Habart E., Abergel A., Walmsley C. M., Teyssier D., Pety J., Density structure of the Horsehead nebula photo-dissociation region, *A&A*, 2005, vol. 437, p. 177

- Habing H. J., The interstellar radiation density between 912 Å and 2400 Å, *Bull. Astron. Inst. Netherlands*, 1968, vol. 19, p. 421
- Halfen D. T., Apponi A. J., Woolf N., Polt R., Ziurys L. M., A Systematic Study of Glycolaldehyde in Sagittarius B2(N) at 2 and 3 mm: Criteria for Detecting Large Interstellar Molecules, *ApJ*, 2006, vol. 639, p. 237
- Helling C., Jorgensen U. G., Plez B., Johnson H. R., Formation of PAHs, polyynes, and other macromolecules in the photosphere of carbon stars., *A&A*, 1996, vol. 315, p. 194
- Herbig G. H., The Diffuse Interstellar Bands, *ARA&A*, 1995, vol. 33, p. 19
- Herbst E., Interstellar Chemistry Gas-phase Model. http://www.physics.ohio-state.edu/~eric/research_files/osu012009, 2012
- Herbst E., Klemperer W., The Formation and Depletion of Molecules in Dense Interstellar Clouds, *ApJ*, 1973, vol. 185, p. 505
- Herzberg G., Historical Remarks on the Discovery of Interstellar Molecules, *JRASC*, 1988, vol. 82, p. 115
- Hily-Blant P., Maret S., Bacmann A. e. a., Nitrogen hydrides in the cold envelope of IRAS 16293-2422, *A&A*, 2010, vol. 521, p. L52
- Hollenbach D., Kaufman M. J., Bergin E. A., Melnick G. J., Water, O₂, and Ice in Molecular Clouds, *ApJ*, 2009, vol. 690, p. 1497
- Hollis J. M., Jewell P. R., Lovas F. J., Remijan A., Green Bank Telescope Observations of Interstellar Glycolaldehyde: Low-Temperature Sugar, *ApJ*, 2004, vol. 613, p. L45
- Hollis J. M., Jewell P. R., Lovas F. J., Remijan A., Møllendal H., Green Bank Telescope Detection of New Interstellar Aldehydes: Propenal and Propanal, *ApJ*, 2004, vol. 610, p. L21
- Hollis J. M., Lovas F. J., Jewell P. R., Interstellar Glycolaldehyde: The First Sugar, *ApJ*, 2000, vol. 540, p. L107

- Huang H.-C., Kuan Y.-J., Charnley S. B., Hirano N., Takakuwa S., Bourke T. L., Organic molecules in the hot corinos and circumstellar disks of IRAS 16293-2422, *Advances in Space Research*, 2005, vol. 36, p. 146
- Hudgins D. M., Bauschlicher Jr. C. W., Allamandola L. J., Variations in the Peak Position of the 6.2 μm Interstellar Emission Feature: A Tracer of N in the Interstellar Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Population, *ApJ*, 2005, vol. 632, p. 316
- Hudson R. L., Moore M. H., Reactions of nitriles in ices relevant to Titan, comets, and the interstellar medium: formation of cyanate ion, ketenimines, and isonitriles, *Icarus*, 2004, vol. 172, p. 466
- Iglesias-Groth S., Manchado A., García-Hernández D. A., González Hernández J. I., Lambert D. L., Evidence for the Naphthalene Cation in a Region of the Interstellar Medium with Anomalous Microwave Emission, *ApJ*, 2008, vol. 685, p. L55
- Iglesias-Groth S., Manchado A., Rebolo R., González Hernández J. I., García-Hernández D. A., Lambert D. L., A search for interstellar anthracene towards the Perseus anomalous microwave emission region, *MNRAS*, 2010, vol. 407, p. 2157
- Joblin C., Leger A., Martin P., Contribution of polycyclic aromatic hydrocarbon molecules to the interstellar extinction curve, *ApJ*, 1992, vol. 393, p. L79
- Joyce G. F., "Foreward" In *Origins of Life: The Central Concepts*, D.W. Deamer & G.R. Fleischacker (eds.), Jones and Bartlett Publishers, Boston, pp. xi-xii, 1994
- Kaler University of Illinois. <http://stars.astro.illinois.edu/sow/sigmaori.html>, 2012
- Karplus M., Porter R. N., *Atoms and molecules; an introduction for students of physical chemistry*, 1970
- Krasnopolsky V. A., A photochemical model of Titan's atmosphere and ionosphere, *Icarus*, 2009, vol. 201, p. 226
- Krips M., Martin S., Eckart A., Neri R. e. a., Submillimeter array plateau de bure interferometer multiple line observations of the nearby Seyfert 2 Galaxy NGC 1068: shock-related gas kinematics and heating in the central 100 pc?, *Ap&SS*, 2011, p. 27

- Kuan Y.-J., Charnley S. B., Huang H.-C., Kisiel Z., Ehrenfreund P., Tseng W.-L., Yan C.-H., Searches for interstellar molecules of potential prebiotic importance, *Advances in Space Research*, 2004, vol. 33, p. 31
- Kuo H.-L., Remijan A. J., Snyder L. E., Looney L. W., Friedel D. N., Lovas F. J., McCall B. J., Hollis J. M., Detection of Interstellar Urea. In "Midwest Astrochemistry Meeting 2010, held 5-6 November at the University of Illinois at Urbana-Champaign. <http://midwest.astrochemistry.us/MWAM10/> article #P09" , 2010, p. 9
- Lafleur L. J., *Astrobiology*, Leaflet of the Astronomical Society of the Pacific, 1941, vol. 3, p. 333
- Le Page V., Snow T. P., Bierbaum V. M., Hydrogenation and Charge States of PAHS in Diffuse Clouds. I. Development of a Model, *ApJS*, 2001, vol. 132, p. 233
- Le Petit F., Documentation Run PDR models. The Meudon PDR Code, 2009
- Le Petit F., The Meudon PDR Code. <http://pdr.obspm.fr/PDRcode.html>, 2012
- Le Petit F., Nehmé C., Le Bourlot J., Roueff E., A Model for Atomic and Molecular Interstellar Gas: The Meudon PDR Code, *ApJS*, 2006, vol. 164, p. 506
- Le Teuff Y. H., Millar T. J., Markwick A. J., The UMIST database for astrochemistry 1999. In *IAU Joint Discussion* , vol. 1 of *IAU Joint Discussion*, 2000
- Leger A., D'Hendecourt L., Are polycyclic aromatic hydrocarbons the carriers of the diffuse interstellar bands in the visible?, *A&A*, 1985, vol. 146, p. 81
- Leger A., D'Hendecourt L., Boissel P., Desert F. X., Photo-thermo-dissociation. I - A general mechanism for destroying molecules, *A&A*, 1989, vol. 213, p. 351
- Li A., Witt A. N., Clayton G. C., T. D. B., *Astrophysics of Dust*, ASP Conference Series, 2004, vol. 309
- Lide D., Baysinger G., Berger L., Goldberg R., Haynes W., *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. National Institute of Standards and Technology, 2008, 2692 p.

- Lin M. F., Dyakov A. Y., Tseng C. M., Mebel M. A., et al. L. H. S., Photodissociation dynamics of pyridine, *The Journal of Chemical Physics*, 2005, vol. 123
- Lunine J., *Astrobiology a multidisciplinary approach*. Pearson Addison Wesley, 2005, 586 p.
- Maciel W., *Astrofísica do Meio Interestelar*. São Paulo; Edusp, 2002, 368 p.
- Maret S., Bergin E. A., Lada C. J., A low fraction of nitrogen in molecular form in a dark cloud, *Nature*, 2006, vol. 442, p. 425
- Moore G. E., Cramming more components onto integrated circuits, 1965, vol. 38
- Myers P. C., Thaddeus P., Linke R. A., A search for interstellar pyrrole - Evidence that rings are less abundant than chains, *ApJ*, 1980, vol. 241, p. 155
- Napier W. M., Wickramasinghe J. T., Wickramasinghe N. C., The origin of life in comets, *International Journal of Astrobiology*, 2007, vol. 6, p. 321
- NASA APOD - NASA. <http://apod.nasa.gov/apod/ap050321.html>, 2010
- Ni K. C., Lin M. F., Tseng C. M., Dyakov A. Y., Photodissociation Dynamics of Small Aromatic Molecules Studied by Multimass Ions Imaging, *The Journal of Physics and Chemistry B*, 2007, vol. 111, p. 12631
- Nicolas C., Alcaraz C., Thissen R., Vervloet M., Dutuit O., Dissociative photoionization of N₂ in the 24-32 eV photon energy range, *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, 2003, vol. 36, p. 2239
- NIST N. I. o. S. . T., NIST - National Institute of Standards and Technology. <http://webbook.nist.gov/chemistry>, 2012
- NRAO National Radio Astronomy Observatory. <http://www.cv.nrao.edu/~awootten/allmols.html>, 2012
- Nuevo M., Milam S. N., Sandford S. A., Nucleobases and Prebiotic Molecules in Organic Residues Produced from the Ultraviolet Photo-Irradiation of Pyrimidine in NH₃ and H₂O+NH₃ Ices, *Astrobiology*, 2012, vol. 12, p. 295

- Peeters Z., Botta O., Charnley S. B., Kisiel Z., Kuan Y.-J., Ehrenfreund P., Formation and photostability of N-heterocycles in space. I. The effect of nitrogen on the photostability of small aromatic molecules, *A&A*, 2005, vol. 433, p. 583
- Physikalisches I., Universität zu Köln. <http://www.astro.uni-koeln.de/cdms/molecules>, 2012
- Platts N., *Astrobiology Magazine*. *Astrobiology Magazine*, 1992 - <http://www.astrobio.net/index.php?option=com/interviewtask/detailid/1992>
- Plützer C., Nir E., de Vries M. S., Kleinerhanns K., IR UV double-resonance spectroscopy of the nucleobase adenine, *Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions)*, 2001, vol. 3, p. 5466
- Porezag D., Frauenheim T., Köhler T., Seifert G., Kaschner R., Construction of tight-binding-like potentials on the basis of density-functional theory, *Physical Review B*, 1995, vol. 1, p. 12947
- Powner M. W., Gerland B., Sutherland J. D., Synthesis of activated pyrimidine ribonucleotides in prebiotically plausible conditions, *Nature International weekly journal of science*, 2009, vol. 1, p. 239
- Prasad S. S., Tarafdar S. P., UV radiation field inside dense clouds - Its possible existence and chemical implications, *ApJ*, 1983, vol. 267, p. 603
- Puget J. L., Leger A., A new component of the interstellar matter - Small grains and large aromatic molecules, *ARA&A*, 1989, vol. 27, p. 161
- Röllig M., Abel N. P., Bell e. a., A photon dominated region code comparison study, *A&A*, 2007, vol. 467, p. 187
- Röllig M., Abel N. P., Bell T., et al. B., A photon dominated region code comparison study, *A&A*, 2007, vol. 467, p. 187
- Reaxys [reaxys.com](http://www.reaxys.com). <http://www.reaxys.com/reaxys/secured/start.do>, 2012
- Requena-Torres M. A., Martín-Pintado J., Martín S., Morris M. R., The Galactic Center: The Largest Oxygen-bearing Organic Molecule Repository, *ApJ*, 2008, vol. 672, p. 352

- Ricca A., Bauschlicher C. W., Bakes E. L. O., A Computational Study of the Mechanisms for the Incorporation of a Nitrogen Atom into Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in the Titan Haze, *Icarus*, 2001, vol. 154, p. 516
- Ruiterkamp R., Peeters Z., Moore M. H., Hudson R. L., Ehrenfreund P., A quantitative study of proton irradiation and UV photolysis of benzene in interstellar environments, *A&A*, 2005, vol. 440, p. 391
- Rybicki G. B., Lightman A. P., Radiative process in Astrophysics. IAG-USP, 1979, 382 p.
- Schutte W. A., Tielens A. G. G. M., Allamandola L. J., Theoretical modeling of the infrared fluorescence from interstellar polycyclic aromatic hydrocarbons, *ApJ*, 1993, vol. 415, p. 397
- Science Technology <http://sci.esa.int/science-e/www/object/index.cfm?fobjectid=45075>. Science Programme European Space Agency, 2011
- Siebenmorgen R., Kruegel E., Dust model containing polycyclic aromatic hydrocarbons in various environments, *A&A*, 1992, vol. 259, p. 614
- Silva L., Granato G. L., Bressan A., Danese L., Modeling the Effects of Dust on Galactic Spectral Energy Distributions from the Ultraviolet to the Millimeter Band, *ApJ*, 1998, vol. 509, p. 103
- Simon M. N., Simon M., Search for Interstellar Acrylonitrile, Pyrimidine, and Pyridine, *ApJ*, 1973, vol. 184, p. 757
- Soorkia S., Taatjes C. A., Osborn D.-L., Selby T. M., Trevitt A. J., Wilson K.-R., Leone S.-R., Direct detection of pyridine formation by the reaction of CH (CD) with pyrrole: a ring expansion reaction, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2010, vol. 12, p. 8649
- Swings P., Rosenfeld L., Considerations Regarding Interstellar Molecules, *ApJ*, 1937, vol. 86, p. 483
- UDFA The UMIST Database for Astrochemistry. <http://www.udfa.net>, 2012

- Useli-Bacchitta F., Bonnamy A., Mulas G., Mallocci G., Toublanc D., Joblin C., Visible photodissociation spectroscopy of PAH cations and derivatives in the PIRENEA experiment, *Chemical Physics*, 2010, vol. 371, p. 16
- Vall-Iloera G., Coreno M., Erman P., Huels M. A., Jakubowska K. e. a., VUV photoinisation of free azabezenes: Pyridine, pyrazine, pyrimidine, pyridazine and s-triazine, *International Journal of Mass Spectrometry*, 2008, vol. 275, p. 55
- Vuong M. H., Foing B. H., Dehydrogenation of polycyclic aromatic hydrocarbons in the diffuse interstellar medium, *A&A*, 2000, vol. 363, p. L5
- Wickramasinghe N. C., Wallis J., Wallis D. H., Schild R. E., Gibson C. H., Life-bearing primordial planets in the solar vicinity, *Ap&SS*, 2012, p. 191
- Woods P. M., Millar T. J., Zijlstra A. A., Herbst E., The Synthesis of Benzene in the Proto-planetary Nebula CRL 618, *ApJ*, 2002, vol. 574, p. L167
- Ye E., Bettens R.-P., De Lucia F. C., Petkie T. D., Albert S., Millimeter and submillimeter wave rotational spectrum of pyridine in the ground and excited vibrational states, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 2005, vol. 232, p. 61

Apêndice

Apêndice A

Moléculas Encontradas em Ambientes Interestelares e Circum-estelares

Tabela A.1 - Moléculas encontradas em ambientes interestelares e circumestelares.

2 atoms	H_2	AlF	AlCl	C_2	CH	CH^+
	CN	CO	CO^+	CP	SiC	HCl
	KCl	NH	NO	NS	NaCl	OH
	PN	SO	SO^+	SiN	SiO	SiS
	CS	HF	HD	FeO (?)	O_2	CF^+
	SiH (?)	PO	AlO	OH^+	CN^-	SH^+
	LiH	SH	N_2	S_2^\dagger	$N_2^{+\dagger}$	$CN^{+\dagger}$
3 atoms	C_3	C_2H	C_2O	C_2S	CH_2	HCN
	HCO	HCO^+	HCS^+	HOC^+	H_2O	H_2S
	HNC	HNO	MgCN	MgNC	N_2H^+	N_2O
	NaCN	OCS	SO_2	$c-SiC_2$	CO_2	NH_2
	H_3^+	H_2D^+	HD_2^+	SiCN	AlNC	SiNC
	HCP	CCP	AlOH	H_2O^+	H_2Cl^+	KCN
	FeCN	OCN^-	CO_2^+	H_2S^+	CN_2	HDO
	CS_2^\dagger					
4 atoms	$c-C_3H$	$l-C_3H$	C_3N	C_3O	C_3S	C_2H_2
	NH_3	HCCN	$HCNH^+$	HNCO	HNCS	$HOCO^+$
	H_2CO	H_2CN	H_2CS	H_3O^+	$c-SiC_3$	CH_3
	C_3N^-	$PH_3(?)$	HCNO	HOCN	HSCN	H_2O_2
	$C_4(??)$					
5 atoms	C_5	C_4H	C_4Si	$l-C_3H_2$	$c-C_3H_2$	H_2CCN
	CH_4	HC_3N	HC_2NC	HCOOH	H_2CNH	H_2C_2O
	H_2NCN	HNC_3	SiH_4	H_2COH^+	C_4H^-	HC(O)CN
6 atoms	C_5H	$l-H_2C_4$	C_2H_4	CH_3CN	CH_3NC	CH_3OH
	CH_3SH	HC_3NH^+	HC_2CHO	NH_2CHO	C_5N	$l-HC_4H$
	$l-HC_4N$	$c-H_2C_3O$	$H_2CCNH(?)$	C_5N^-		

Continua na próxima página. . .

Tabela A.1 - Continuação

7 atoms	C_6H $c - C_2H_4O$	CH_2CHCN H_2CCHOH	CH_3C_2H C_6H^-	HC_5N	CH_3CHO	CH_3NH_2
8 atoms	CH_3C_3N $l - HC_6H$	$HC(O)OCH_3$ $CH_2CHCHO(?)$	CH_3COOH CH_2CCHCN	C_7H H_2NCH_2CN	H_2C_6 $C_2H_6^\dagger$	CH_2OHCHO $(NH_2)_2CO(?)$
9 atoms	CH_3C_4H $CH_3C(O)NH_2$	CH_3CH_2CN C_8H^-	$(CH_3)_2O$ C_3H_6	CH_3CH_2OH	HC_7N	C_8H
10 atoms	CH_3C_5N	$(CH_3)_2CO$	$(CH_2OH)_2$	CH_3CH_2CHO	$NH_2CH_2COOH(?)^\dagger$	
11 atoms	HC_9N	CH_3C_6H	C_2H_5OCHO			
12 atoms	C_6H_6	$C_2H_5OCH_3?$	$n - C_3H_7CN$	$CO(CH_2OH)_2(?)$		
> 12 atoms	$HC_{11}N$	$C_{10}H_8^+$	$C_{14}H_{10}^+(?)$	$C_{24}(?)$	C_{60}	C_{70}

? Detecção incerta, mas provável.

?? Detecção não confirmada.

† Detectada em cometas.

Apêndice B

Moléculas e reações químicas usadas na modelagem da Nebulosa Cabeça de Cavalo

Tabela B.1 - Elementos usados no modelo da Nebulosa Cabeça de Cavalo e seus parâmetros.

Número	Espécie	Codificação da Composição Atômica						Abundância Inicial	Entalpia de Formação - kJ/mol
1	h	1	0000	0000	00000	000000	0	9.900e-01	51.634
2	h2	2	0000	0000	00000	000000	0	5.000e-03	0.000
3	he	0	0001	0000	00000	000000	0	1.000e-01	0.000
4	c	0	1000	0000	00000	000000	0	0.060e-04	169.980
5	ch	1	1000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	141.600
6	ch2	2	1000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	93.900
7	ch3	3	1000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	34.800
8	ch4	4	1000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	-15.970
9	o	0	0010	0000	00000	000000	0	3.020e-04	58.980
10	o2	0	0020	0000	00000	000000	0	0.0e-00	0.000
11	oh	1	0010	0000	00000	000000	0	0.0e-00	9.250
12	h2o	2	0010	0000	00000	000000	0	0.0e-00	-57.100
13	co	0	1010	0000	00000	000000	0	0.0e-00	-27.200
14	hco	1	1010	0000	00000	000000	0	0.0e-00	10.700
15	h2co	2	1010	0000	00000	000000	0	0.0e-00	-25.000
16	co2	0	1020	0000	00000	000000	0	0.0e-00	-93.965
17	c2	0	2000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	198.200
18	c2h	1	2000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	113.300
19	c2h2	2	2000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	54.320
20	c3	0	3000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	194.000
21	c3h	1	3000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	170.000*
22	c3h2	2	3000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	119.000*
23	n	0	0100	0000	00000	000000	0	7.950e-05	112.530
24	nh	1	0100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	90.000
25	nh2	2	0100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	46.200
26	nh3	3	0100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	-9.299

Continua na próxima página. . .

Tabela B.1 - Continuação

Número	Espécie	Codificação da Composição Atômica						Abundância Inicial	Entalpia de Formação - kJ/mol
27	cn	0	1100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	103.200
28	hcn	1	1100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	32.390
29	hnc	1	1100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	48.000
30	n2	0	0200	0000	00000	000000	0	0.0e-00	0.000
31	no	0	0110	0000	00000	000000	0	0.0e-00	21.460
32	s	0	0000	0000	00000	001000	0	1.64e-06	65.600
33	sh	1	0000	0000	00000	001000	0	0.0e-00	32.600
34	h2s	2	0000	0000	00000	001000	0	0.0e-00	-4.230
35	cs	0	1000	0000	00000	001000	0	0.0e-00	63.000
36	h2cs	2	1000	0000	00000	001000	0	0.0e-00	25.000
37	so	0	0010	0000	00000	001000	0	0.0e-00	1.200
38	so2	0	0020	0000	00000	001000	0	0.0e-00	-70.300
39	ocs	0	1010	0000	00000	001000	0	0.0e-00	-34.000
40	fe	0	0000	0000	00000	000001	0	0.0e-00	98.700
79	h+	1	0000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	365.200
41	h2+	2	0000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	355.700
42	h3+	3	0000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	265.000
43	he+	0	0001	0000	00000	000000	1	0.0e-00	567.000
44	c+	0	1000	0000	00000	000000	1	1.320e-04	429.700
45	ch+	1	1000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	387.000
46	ch2+	2	1000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	331.000
47	ch3+	3	1000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	262.000
48	ch4+	4	1000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	272.000
49	ch5+	5	1000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	216.000*
50	o+	0	0010	0000	00000	000000	1	0.0e-00	373.000
51	o2+	0	0020	0000	00000	000000	1	0.0e-00	278.400
52	oh+	1	0010	0000	00000	000000	1	0.0e-00	309.000
53	h2o+	2	0010	0000	00000	000000	1	0.0e-00	233.700
54	h3o+	3	0010	0000	00000	000000	1	0.0e-00	143.000
55	co+	0	1010	0000	00000	000000	1	0.0e-00	295.970
56	hco+	1	1010	0000	00000	000000	1	0.0e-00	197.300*
56	hoc+	1	1010	0000	00000	000000	1	0.0e-00	230.000*
57	hco2+	1	1020	0000	00000	000000	1	0.0e-00	141.000*
58	c2+	0	2000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	476.000
59	c2h+	1	2000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	404.000
60	c2h2+	2	2000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	317.500
61	c2h3+	3	2000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	267.900
62	c2h4+	4	2000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	256.800
63	c3+	0	3000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	479.000*
64	c3h+	1	3000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	381.000*
65	c3h2+	2	3000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	330.000*
66	c3h3+	3	3000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	282.000*
67	n+	0	0100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	447.690

Continua na próxima página...

Tabela B.1 - Continuação

Número	Espécie	Codificação da Composição Atômica						Abundância Inicial	Entalpia de Formação - kJ/mol
68	nh+	1	0100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	401.100
69	nh2+	2	0100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	302.700
70	nh3+	3	0100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	224.900
71	nh4+	4	0100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	151.000*
72	cn+	0	1100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	429.300
73	c2n+	0	2100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	387.000*
74	hcn+	1	1100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	346.000
75	hnc+	1	1100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	336.000
76	hcnh+	2	1100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	226.000* **
77	h2nc+	2	1100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	265.000*
78	n2+	0	0200	0000	00000	000000	1	0.0e-00	359.298
79	n2h+	1	0200	0000	00000	000000	1	0.0e-00	247.500*
80	no+	0	0110	0000	00000	000000	1	0.0e-00	235.330
81	hno+	1	0110	0000	00000	000000	1	0.0e-00	256.800**
82	s+	0	0000	0000	00000	001000	1	1.860e-06	304.000*
83	sh+	1	0000	0000	00000	001000	1	0.0e-00	271.800*
84	h2s+	2	0000	0000	00000	001000	1	0.0e-00	237.000*
85	h3s+	3	0000	0000	00000	001000	1	0.0e-00	190.000*
86	cs+	0	1000	0000	00000	001000	1	0.0e-00	324.000*
87	hcs+	1	1000	0000	00000	001000	1	0.0e-00	243.000*
88	so+	0	0010	0000	00000	001000	1	0.0e-00	239.200*
89	hso+	1	0010	0000	00000	001000	1	0.0e-00	150.000***
90	hso2+	1	0020	0000	00000	001000	1	0.0e-00	143.000*
91	hocs+	1	1010	0000	00000	001000	1	0.0e-00	181.000*
92	h2co+	2	1010	0000	00000	000000	1	0.000e+00	225.800
93	h3co+	3	1010	0000	00000	000000	1	0.000e+00	168.800
94	h2cs+	2	1000	0000	00000	001000	1	0.000e+00	240.000
95	h3cs+	3	1000	0000	00000	001000	1	0.000e+00	208.000
97	fe+	0	0000	0000	00000	000001	1	1.500e-08	280.240
120	h:	1	0000	0000	00000	000000	0	1.000e-20	51.634
121	h2:	2	0000	0000	00000	000000	0	1.000e-20	0.000
150	c2h4	4	2000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	52.470
151	c2h3	3	2000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	299.000
152	hc3	1	3000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	172.300*
153	h2c3	2	3000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	130.000***
154	c4	0	4000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	232.000
155	c4h	1	4000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	290.000***
156	c4h2	2	4000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	105.000*
157	c3h3	3	3000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	339.000
158	c3h4	4	3000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	185.400
159	c5h2	2	5000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	690.360
160	c4h3	3	4000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	501.829*
161	c6h	1	6000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	991.800

Continua na próxima página...

Tabela B.1 - Continuação

Número	Espécie	Codificação da Composição Atômica						Abundância Inicial	Entalpia de Formação - kJ/mol
162	c6h2	2	6000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	696.000
163	c5h	1	5000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	853.430
164	c5h4	4	5000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	557.214
165	c5	0	5000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	1061.18
166	c6	0	6000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	1216.08
167	c7	0	7000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	1309.34
168	c7h	1	7000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	1080.1
169	c8	0	8000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	1487
170	c8h	1	8000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	1218.5
171	c9	0	9000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	1554
172	c8h2	2	8000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	891.800
173	c6h6	6	6000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	100.410
174	hno	1	0110	0000	00000	000000	0	0.0e-00	109.809
175	c2h5	5	2000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	130.773
176	c2n	0	2100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	674.474
177	h2cn	2	1100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	242.229
178	c3n	0	3100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	629.000
179	hc3n	1	3100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	351.000
180	h3c2n	3	2100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	169.982
181	c4n	0	4100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	754.800
182	c2h4o	4	2010	0000	00000	000000	0	0.0e-00	-155.7
183	ch4o	4	1010	0000	00000	000000	0	0.0e-00	-190.11
184	c2h4o2	4	2020	0000	00000	000000	0	0.0e-00	-344.396
185	c4h6o2	6	4020	0000	00000	000000	0	0.0e-00	-308.273
186	c4h5n	5	4100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	124.857
187	c7n	0	7100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	1000
188	c5n	0	5100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	850.000
189	c2n2	0	2200	0000	00000	000000	0	0.0e-00	307.342
191	c2h2n	2	2100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	260.540
192	hc5n	1	5100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	600.000
193	hc7n	1	7100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	1000
194	ch2o2	2	1020	0000	00000	000000	0	0.0e-00	-378.6
195	ch3no	3	1110	0000	00000	000000	0	0.0e-00	-178.241
196	ch3ns	3	1100	0000	00000	100000	0	0.0e-00	-100
197	c3h3ns	3	3100	0000	00000	100000	0	0.0e-00	-170
198	ch3n	3	1100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	96.616
199	c3h3n3	3	3300	0000	00000	000000	0	0.0e-00	100
200	c4h4n	4	4100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	195
201	c5h5n	5	5100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	156.922
202	c2h6	6	2000	0000	00000	000000	0	0.0e-00	-68.232
203	c3h3n	3	3100	0000	00000	000000	0	0.0e-00	190.874
300	o2h+	1	0020	0000	00000	000000	1	0.0e-00	264.900
301	h2c3+	2	3000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	330.000*

Continua na próxima página...

Tabela B.1 - Continuação

Número	Espécie	Codificação da Composição Atômica						Abundância Inicial	Entalpia de Formação - kJ/mol
302	c4+	0	4000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	522.000
303	c4h+	1	4000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	381.000***
304	c4h2+	2	4000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	340.000*
305	c4h3+	3	4000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	291.000*
306	h3c3+	3	3000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	282.000*
307	c4h5+	5	4000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1085.3
308	c3h5+	5	3000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	945.000
309	c6h3+	3	6000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1188
310	c6h4+	4	6000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1271.8
311	c6h5+	5	6000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1148.98
312	c5h5+	5	5000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1116.8
313	c5h4+	4	5000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1332
314	c6h2+	2	6000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	159.000
315	c4h4+	4	4000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	126.000
316	c6h+	1	6000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1000*
317	c8h2+	2	8000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1741
318	c9h+	1	9000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1390*
319	c9+	0	9000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	2451
320	c3h4+	4	3000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1194.5
321	c6h7+	7	6000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	892.200
322	c-	0	1000	0000	00000	000000	-1	0.0e-00	589.785
323	h-	1	0000	0000	00000	000000	-1	0.0e-00	143.200
324	o-	0	0010	0000	00000	000000	-1	0.0e-00	105.400
325	oh-	1	0010	0000	00000	000000	-1	0.0e-00	-137.7
326	cn-	0	1100	0000	00000	000000	-1	0.0e-00	63.975
327	c4h-	1	4000	0000	00000	000000	-1	0.0e-00	206.000
328	c5-	0	5000	0000	00000	000000	-1	0.0e-00	821.000
329	c6-	0	6000	0000	00000	000000	-1	0.0e-00	776.000
330	c7-	0	7000	0000	00000	000000	-1	0.0e-00	1015
331	c6h-	1	6000	0000	00000	000000	-1	0.0e-00	820.000
332	c4n+	0	4100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1878.616
333	ch5o+	5	1010	0000	00000	000000	1	0.0e-00	585.970
334	c2h5o2+	5	2020	0000	00000	000000	1	0.0e-00	-190.11
335	c2h4o2+	4	2020	0000	00000	000000	1	0.0e-00	895.815
338	c5n+	0	5100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1800
339	c7n+	0	7100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	2000
340	c2nh+	1	2100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	526.552
341	hc3n+	1	3100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1474
342	c2n2+	0	2200	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1594.8
343	c2h2n+	2	2100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	360.590
344	hc5n+	1	5100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1800
345	c5h+	1	5000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	620.000
346	c7h+	1	7000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	800.000

Continua na próxima página...

Tabela B.1 - Continuação

Número	Espécie	Codificação da Composição Atômica						Abundância Inicial	Entalpia de Formação - kJ/mol
337	c3n+	0	3100	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1400
338	c2h6+	6	2000	0000	00000	000000	1	0.0e-00	1036.130*

(*) Medida a 298K.

(**) Isômeros mais estáveis.

(***) Entalpia incomum.

Tabela B.2 - Reações químicas, parâmetros e tipos de reação usados na modelagem da HNN.

Reagentes			Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
h:	h:	h2			1.00e+00	0	0.00	11
h	grain	h:			1.00e+00	0	0.00	13
h:	grain	h			1.00e-00	0	350.00	18
h2	grain	h2:			1.00e+00	0	0.00	113
h2:	photon	h2			1.00e-00	0	0.00	117
h2:	grain	h2			1.00e-00	0	450.00	118
h	crp	h+	electr		4.60e-01	0	0.0	1
he	crp	he+	electr		5.00e-01	0	0.0	1
h2	crp	h+	h	electr	4.00e-02	0	0.0	1
h2	crp	h	h		1.50e-00	0	0.0	1
h2	crp	h2+	electr		9.60e-01	0	0.0	1
c	crp	c+	electr		1.80e+00	0	0.0	1
o	crp	o+	electr		2.80e+00	0	0.0	1
c	phosec	c+	electr		5.10e+02	0	0.0	2
ch	phosec	c	h		7.56e+02	0	0.0	2
ch2	phosec	ch2+	electr		5.00e+02	0	0.0	2
ch3	phosec	ch2	h		5.00e+02	0	0.0	2
ch3	phosec	ch3+	electr		5.00e+02	0	0.0	2
ch4	phosec	ch2	h2		2.34e+03	0	0.0	2
ch+	phosec	c	h+		1.76e+02	0	0.0	2
oh	phosec	o	h		0.51e+03	0	0.0	2
h2o	phosec	oh	h		0.97e+03	0	0.0	2
o2	phosec	o2+	electr		1.17e+02	0	0.0	2
o2	phosec	o	o		0.75e+03	0	0.0	2
co2	phosec	co	o		1.71e+03	0	0.0	2
c2	phosec	c	c		2.37e+02	0	0.0	2
c2h	phosec	c2	h		5.00e+03	0	0.0	2

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
c2h2	phosec	c2h	h	5.15e+03	0	0.0	2
c2h2	phosec	c2h2+	electr	1.31e+03	0	0.0	2
c3	phosec	c2	c	1.12e+03	0	0.0	2
c3h	phosec	c3	h	5.00e+03	0	0.0	2
c3h2	phosec	c3h	h	5.00e+03	0	0.0	2
co	phosec	c	o	6.80e+02	1.2	0.0	2
co	phosec	co+	electr	3.00e+00	0	0.0	2
hco	phosec	co	h	4.21e+02	0	0.0	2
hco	phosec	hco+	electr	1.17e+03	0	0.0	2
h2co	phosec	co	h2	2.66e+03	0	0.0	2
o	h2	oh	h	1.55e-13	2.8	2980.0	4
o2	h	oh	o	1.63e-09	-0.9	8750.0	4
oh	h	o	h2	7.00e-14	2.8	1950.0	4
oh	h2	h2o	h	9.54e-13	2	1490.0	4
h2o	h	oh	h2	5.24e-12	1.9	9265.0	4
c	h2	ch	h	1.16e-09	0.5	14100.0	4
ch	h2	ch2	h	2.38e-10	0	1760.0	4
ch2	h2	ch3	h	5.18e-11	0.17	6400.0	4
ch3	h2	ch4	h	3.00e-10	0	5460.0	4
c2	h2	c2h	h	1.60e-10	0	1419.0	4
c2h	h2	c2h2	h	1.14e-11	0	950.0	4
ch	h	c	h2	1.16e-09	0.5	2200.0	4
ch2	h	ch	h2	4.70e-10	0	370.0	4
ch3	h	ch2	h2	5.18e-11	0.17	5600.0	4
ch4	h	ch3	h2	3.00e-10	0	6560.0	4
o2	c	co	o	3.30e-11	0.5	0.0	4
oh	co	co2	h	4.40e-13	-1.15	390.0	4
oh	c	co	h	3.10e-11	-0.36	0.0	4
oh	o	o2	h	3.10e-11	-0.36	0.0	4
ch	o	hco+	electr	2.40e-14	0.5	0.0	4
ch	o	co	h	9.50e-11	0.5	0.0	4
ch2	o	co	h	2.00e-11	0.5	0.0	4
ch3	o	co	h2	1.80e-20	0.5	0.0	4
ch3	o	h2co	h	1.40e-10	0	0.0	4
c2	o	co	c	5.00e-11	0.5	0.0	4
c2h	o	co	ch	1.00e-10	0	250.0	4
c2h	o2	co2	ch	1.00e-10	0	2000.0	4
c3	o	co	c2	5.00e-12	0	900.0	4
c3h	o	c2h	co	1.70e-11	0	0.0	4
c3h2	o	c2h2	co	5.00e-11	0.5	0.0	4
c	ch2	c2h	h	1.00e-10	0	0.0	4
c	ch3	c2h2	h	1.00e-10	0	0.0	4
c	c2h	c3	h	1.00e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
c	c2h2	c3h	h	2.90e-10	-0.12	0.0	4
c	c2h2	c3	h2	1.45e-10	-0.12	0.0	4
c+	h2	ch+	h	1.50e-10	0	4640.0	4
ch+	h	c+	h2	1.50e-10	0	0.0	4
ch+	h2	ch2+	h	1.20e-09	0	0.0	4
ch2+	h	ch+	h2	1.20e-09	0	2700.0	4
ch2+	h2	ch3+	h	7.00e-10	0	0.0	4
ch3+	h	ch2+	h2	7.00e-10	0	10560.0	4
ch3+	h2	ch4+	h	2.00e-10	0	32500.0	4
ch4+	h	ch3+	h2	2.00e-10	0	0.0	4
ch4+	h2	ch5+	h	3.30e-11	-1.35	23.0	4
ch5+	h	ch4+	h2	4.00e-11	0	2200.0	4
h+	h2	h2+	h	6.40e-10	0	21300.0	4
h2+	h	h+	h2	6.40e-10	0	0.0	4
h2+	h2	h3+	h	2.10e-09	0	0.0	4
h3+	h	h2+	h2	2.10e-09	0	20000.0	4
h+	o	o+	h	1.66e-10	0.139	227.0	4
h+	o2	o2+	h	1.20e-09	0	0.0	4
h+	oh	oh+	h	1.60e-08	-0.5	0.0	4
h+	h2o	h2o+	h	7.30e-09	-0.5	0.0	4
h+	hco	co+	h2	1.30e-09	-0.5	0.0	4
h+	hco	h2+	co	1.30e-09	-0.5	0.0	4
h+	hco	hco+	h	1.30e-09	-0.5	0.0	4
h+	ch	ch+	h	1.40e-08	-0.5	0.0	4
h+	ch2	ch+	h2	1.14e-09	-0.5	0.0	4
h+	ch2	ch2+	h	1.14e-09	-0.5	0.0	4
h+	ch3	ch3+	h	3.40e-09	0	0.0	4
h+	ch4	ch3+	h2	2.28e-09	0	0.0	4
h+	ch4	ch4+	h	1.52e-09	0	0.0	4
h+	co2	hco+	o	4.20e-09	0	0.0	4
h+	h2co	hco+	h2	4.60e-09	-0.5	0.0	4
h+	h2co	h2co+	h	4.60e-09	-0.5	0.0	4
h2+	c	ch+	h	2.40e-09	0	0.0	4
h2+	o	oh+	h	1.50e-09	0	0.0	4
h2+	co	hco+	h	2.16e-09	0	0.0	4
h2+	co	co+	h2	6.44e-10	0	0.0	4
h2+	co2	co+	h2o	1.40e-09	0	0.0	4
h2+	co2	hco2+	h	2.35e-09	0	0.0	4
h2+	oh	oh+	h2	7.60e-10	0	0.0	4
h2+	oh	h2o+	h	7.60e-10	0	0.0	4
h2+	h2o	h2o+	h2	3.90e-09	0	0.0	4
h2+	h2o	h3o+	h	3.40e-09	0	0.0	4
h2+	ch	ch+	h2	7.10e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação		
h2+	ch	ch2+	h	7.10e-10	0	0.0	4		
h2+	ch2	ch3+	h	1.00e-09	0	0.0	4		
h2+	ch2	ch2+	h2	1.00e-09	0	0.0	4		
h2+	ch4	ch3+	h	h2	2.30e-09	0	0.0	4	
h2+	ch4	ch4+	h2	1.40e-09	0	0.0	4		
h2+	ch4	ch5+	h	1.10e-10	0	0.0	4		
h3+	o	oh+	h2	8.00e-10	0	0.0	4		
h3+	oh	h2o+	h2	9.50e-09	-0.5	0.0	4		
h3+	h2o	h3o+	h2	4.50e-09	-0.5	0.0	4		
h3+	co	hco+	h2	1.70e-09	0	0.0	4		
h3+	co	hoc+	h2	9.44e-11	0	0.0	4		
h3+	co2	hco2+	h2	2.00e-09	0	0.0	4		
h3+	c	ch+	h2	2.00e-09	0	0.0	4		
h3+	ch	ch2+	h2	8.50e-09	-0.5	0.0	4		
h3+	ch2	ch3+	h2	1.40e-09	-0.5	0.0	4		
h3+	ch3	ch4+	h2	2.10e-09	0	0.0	4		
h3+	ch4	ch5+	h2	1.90e-09	0	0.0	4		
h3+	h2co	h3co+	h2	6.30e-09	-0	0.0	4		
he+	h	h+	he	1.90e-15	0	0.0	4		
he+	h2	h+	h	he	1.10e-13	-0.24	0.0	4	
he+	h2	h2+	he	9.60e-15	0	0.0	4		
he+	oh	oh+	he	5.50e-10	0	0.0	4		
he+	oh	o+	h	he	5.50e-10	0	0.0	4	
he+	h2o	oh+	h	he	2.30e-10	-0.94	0.0	4	
he+	h2o	h2o+	he	4.86e-11	-0.94	0.0	4		
he+	h2o	h+	oh	he	1.64e-10	-0.94	0.0	4	
he+	hco	ch+	o	he	6.90e-10	-0.5	0.0	4	
he+	hco	co+	h	he	6.90e-10	-0.5	0.0	4	
he+	co	c+	o	he	1.50e-09	0	0.0	4	
he+	o2	o+	o	he	1.00e-09	0	0.0	4	
he+	co2	co+	o	he	7.70e-10	0	0.0	4	
he+	co2	o+	co	he	1.80e-10	0	0.0	4	
he+	co2	c+	o2	he	4.00e-11	0	0.0	4	
he+	ch	c+	h	he	1.10e-09	0	0.0	4	
he+	ch	ch+	he	3.83e-09	-0.5	0.0	4		
he+	ch2	c+	h2	he	7.50e-10	0	0.0	4	
he+	ch2	ch+	h	he	7.50e-10	0	0.0	4	
he+	ch3	ch+	h2	he	9.00e-10	0	0.0	4	
he+	ch3	ch2+	h	he	9.00e-10	0	0.0	4	
he+	ch4	h+	ch3	he	4.00e-10	0	0.0	4	
he+	ch4	ch+	h2	h	he	2.56e-10	0	0.0	4
he+	ch4	ch2+	h2	he	8.48e-10	0	0.0	4	
he+	ch4	ch3+	h	he	8.00e-11	0	0.0	4	

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
he+	ch4	ch4+	he	1.60e-11	0	0.0	4
he+	h2co	co+	h2	2.40e-09	-0.5	0.0	4
he+	h2co	hco+	h	2.40e-09	-0.5	0.0	4
c+	oh	co+	h	2.90e-09	-0.33	0.0	4
c+	oh	h+	co	8.00e-10	0	0.0	4
c+	h2o	hco+	h	8.90e-10	-0.5	0.0	4
c+	h2o	hoc+	h	1.80e-09	-0.5	0.0	4
c+	hco	ch+	co	6.70e-10	-0.5	0.0	4
c+	hco	hco+	c	6.70e-10	-0.5	0.0	4
c+	o2	o+	co	5.15e-10	0	0.0	4
c+	o2	co+	o	3.15e-10	0	0.0	4
c+	co2	co+	co	1.10e-09	0	0.0	4
c+	ch	c2+	h	2.70e-09	-0.5	0.0	4
c+	ch	ch+	c	2.70e-09	-0.5	0.0	4
c+	ch2	c2h+	h	4.34e-10	-0.5	0.0	4
c+	ch2	ch2+	c	4.34e-10	-0.5	0.0	4
c+	ch3	c2h+	h2	1.00e-09	0	0.0	4
c+	ch3	c2h2+	h	1.00e-09	0	0.0	4
c+	ch3	ch3+	c	1.00e-09	0	0.0	4
c+	ch4	c2h2+	h2	3.25e-10	0	0.0	4
c+	ch4	c2h3+	h	9.75e-10	0	0.0	4
c+	h2co	ch2+	co	1.50e-09	-0.5	0.0	4
c+	h2co	hco+	ch	6.50e-10	-0.5	0.0	4
c+	h2co	h2co+	c	9.60e-10	-0.5	0.0	4
ch2+	c	c2h+	h	1.20e-09	0	0.0	4
ch2+	o	hco+	h	7.50e-10	0	0.0	4
ch2+	ch	c2h2+	h	7.20e-10	0	0.0	4
ch2+	o2	hco+	oh	9.10e-10	0	0.0	4
ch2+	o2	hco2+	h	4.70e-10	0	0.0	4
ch2+	oh	hco+	h2	7.40e-10	0	0.0	4
ch2+	ch4	c2h4+	h2	9.10e-10	0	0.0	4
ch3+	o	hco+	h2	3.10e-10	0	0.0	4
ch3+	o	hoc+	h2	2.05e-10	0	0.0	4
ch3+	o	h3+	co	1.30e-11	0	0.0	4
ch3+	oh	h2co+	h2	5.40e-09	-0.5	0.0	4
ch3+	o2	hco+	h2o	4.30e-11	0	0.0	4
ch3+	c	c2h+	h2	1.20e-09	0	0.0	4
ch3+	c	c2h2+	h	1.20e-09	0	0.0	4
ch3+	c2h	c3h3+	h	1.20e-09	-0.5	0.0	4
ch3+	c2h2	c3h3+	h2	1.20e-09	0	0.0	4
ch3+	c3h	c3h+	ch3	3.80e-09	-0.5	0.0	4
ch3+	h2co	hco+	ch4	2.90e-09	-0.5	0.0	4
ch4+	o	ch3+	oh	1.00e-09	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
ch4+	co	hco+	ch3	1.40e-09	0	0.0	4
ch4+	o2	o2+	ch4	4.00e-10	0	0.0	4
ch4+	co2	hco2+	ch3	1.20e-09	0	0.0	4
ch4+	h2o	h3o+	ch3	2.50e-09	0	0.0	4
ch4+	h2co	h2co+	ch4	1.62e-09	0	0.0	4
ch4+	h2co	h3co+	ch3	1.98e-09	0	0.0	4
ch5+	c	ch+	ch4	1.00e-09	0	0.0	4
ch5+	c	c2h3+	h2	1.00e-09	0	0.0	4
ch5+	c	c2h4+	h	1.00e-09	0	0.0	4
ch5+	o	h3o+	ch2	2.16e-10	0	0.0	4
ch5+	co	hco+	ch4	9.90e-10	0	0.0	4
ch5+	h2o	h3o+	ch4	3.70e-09	0	0.0	4
ch5+	h2co	h3co+	ch4	2.70e-09	-0.5	0.0	4
o+	h	h+	o	1.04e-10	0.39	0.0	4
o+	h2	oh+	h	1.20e-09	0	0.0	4
o+	ch	ch+	o	3.50e-10	0	0.0	4
o+	ch	co+	h	3.50e-10	0	0.0	4
o+	ch4	ch3+	oh	1.10e-10	0	0.0	4
o+	ch4	ch4+	o	8.90e-10	0	0.0	4
o+	o2	o2+	o	3.00e-11	0	0.0	4
o+	oh	o2+	h	3.60e-10	0	0.0	4
o+	oh	oh+	o	3.60e-10	0	0.0	4
o+	h2o	h2o+	o	3.20e-09	0	0.0	4
o+	co2	o2+	co	1.10e-09	0	0.0	4
o2+	c	co+	o	5.20e-11	0	0.0	4
o2+	c	c+	o2	5.20e-11	0	0.0	4
o2+	c2	co+	co	4.10e-10	0	0.0	4
o2+	ch	ch+	o2	3.10e-10	0	0.0	4
o2+	ch	hco+	o	3.10e-10	0	0.0	4
o2+	ch2	ch2+	o2	4.30e-10	0	0.0	4
o2+	ch2	h2co+	o	4.30e-10	0	0.0	4
o2+	hco	hco+	o2	3.60e-10	0	0.0	4
o2+	h2co	hco+	o2	2.30e-10	0	0.0	4
o2+	h2co	h2co+	o2	9.90e-10	0	0.0	4
oh+	h2	h2o+	h	1.01e-09	0	0.0	4
oh+	c	ch+	o	1.20e-09	0	0.0	4
oh+	o	o2+	h	7.10e-10	0	0.0	4
oh+	ch	ch+	oh	3.50e-10	0	0.0	4
oh+	ch	ch2+	o	3.50e-10	0	0.0	4
oh+	co	hco+	o	1.00e-09	0	0.0	4
oh+	o2	o2+	oh	5.90e-10	0	0.0	4
oh+	oh	h2o+	o	7.00e-10	0	0.0	4
oh+	ch2	ch2+	oh	4.80e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
oh+	ch2	ch3+	o	4.80e-10	0	0.0	4
oh+	co2	hco2+	o	1.40e-09	0	0.0	4
oh+	h2o	h2o+	oh	1.50e-09	0	0.0	4
oh+	h2o	h3o+	o	1.30e-09	0	0.0	4
oh+	ch4	h3o+	ch2	1.40e-09	0	0.0	4
oh+	ch4	ch5+	o	1.95e-10	0	0.0	4
h2o+	h2	h3o+	h	8.30e-10	0	0.0	4
h2o+	c	ch+	oh	1.10e-09	0	0.0	4
h2o+	o	o2+	h2	4.00e-11	0	0.0	4
h2o+	ch	ch2+	oh	3.40e-10	0	0.0	4
h2o+	co	hco+	oh	5.00e-10	0	0.0	4
h2o+	o2	o2+	h2o	4.30e-10	0	0.0	4
h2o+	oh	h3o+	o	6.90e-10	0	0.0	4
h2o+	h2o	h3o+	oh	2.10e-09	0	0.0	4
h2o+	ch4	h3o+	ch3	1.30e-09	0	0.0	4
h3o+	h	h2o+	h2	6.10e-10	0	20500.0	4
h3o+	c	hco+	h2	1.00e-11	0	0.0	4
h3o+	ch	ch2+	h2o	6.80e-10	0	0.0	4
h3o+	ch2	ch3+	h2o	9.40e-10	0	0.0	4
h3o+	h2co	h3co+	h2o	0.26D-08	-0.5	0.0	4
co+	h2	hco+	h	1.30e-09	0	0.0	4
co+	h2	hoc+	h	7.50e-10	0	0.0	4
co+	h	h+	co	7.50e-10	0	0.0	4
co+	o	o+	co	1.40e-10	0	0.0	4
co+	ch	hco+	c	3.20e-10	0	0.0	4
co+	o2	o2+	co	1.20e-10	0	0.0	4
co+	oh	oh+	co	3.10e-10	0	0.0	4
co+	oh	hco+	o	3.10e-10	0	0.0	4
co+	ch2	ch2+	co	4.30e-10	0	0.0	4
co+	ch2	hco+	ch	4.30e-10	0	0.0	4
co+	h2o	h2o+	co	1.70e-09	0	0.0	4
co+	h2o	hco+	oh	8.80e-10	0	0.0	4
co+	ch4	hco+	ch3	4.55e-10	0	0.0	4
co+	ch4	ch4+	co	7.93e-10	0	0.0	4
hco+	h	co+	h2	1.30e-09	0	24500.0	4
hco+	c	ch+	co	1.10e-09	0	0.0	4
hco+	ch	ch2+	co	6.30e-10	0	0.0	4
hco+	ch2	ch3+	co	8.60e-10	0	0.0	4
hco+	ch3	ch4+	co	1.40e-09	0	9060.0	4
hco+	ch4	ch5+	co	9.90e-10	0	4920.0	4
hco+	h2o	h3o+	co	2.50e-09	0	0.0	4
hco+	h2co	h3co+	co	2.40e-09	-0.5	0.0	4
hco+	oh	hco2+	h	1.00e-09	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação	
hco+	o2	hco2+	o	1.00e-09	0	1450.0	4	
hco+	co2	hco2+	co	1.00e-09	0	5000.0	4	
hoc+	co	hco+	co	4.00e-10	0	0.0	4	
hoc+	h2	hco+	h2	1.00e-11	0	0.0	4	
hco2+	o	hco+	o2	1.00e-09	0	0.0	4	
hco2+	h	hco+	oh	1.00e-09	0	7500.0	4	
hco2+	co	hco+	co2	1.00e-09	0	0.0	4	
hco2+	ch4	ch5+	co2	7.80e-10	0	0.0	4	
h2co+	h2	h3co+	h	1.00e-19	0	0.0	4	
h3co+	ch	ch2+	h2co	4.40e-09	-0.5	0.0	4	
c2+	h2	c2h+	h	1.40e-09	0	0.0	4	
c2+	h2	h+	c2h	1.50e-09	0	1260.0	4	
c2h+	h2	c2h2+	h	1.70e-09	0	0.0	4	
c2h2+	h2	c2h3+	h	5.00e-10	0	800.0	4	
c3+	h2	c3h+	h	3.00e-10	0	0.0	4	
c3h+	h2	c3h2+	h	1.00e-09	0	500.0	4	
c3h2+	h2	c3h3+	h	1.00e-10	0	2000.0	4	
h+	c2	c2+	h	3.10e-09	0	0.0	4	
h+	c2h	c2+	h2	3.70e-09	-0.5	0.0	4	
h+	c2h	c2h+	h	3.70e-09	-0.5	0.0	4	
h+	c2h2	c2h+	h2	2.00e-09	0	0.0	4	
h+	c2h2	c2h2+	h	2.00e-09	0	0.0	4	
h+	c3	c3+	h	4.00e-09	0	0.0	4	
h+	c3h	c3h+	h	1.22e-08	-0.5	0.0	4	
h+	c3h	c3+	h2	1.22e-08	-0.5	0.0	4	
h+	c3h2	c3h+	h2	5.89e-09	-0.5	0.0	4	
h+	c3h2	c3h2+	h	5.89e-09	-0.5	0.0	4	
h2+	c2h	c2h+	h2	1.00e-09	0	0.0	4	
h2+	c2h	c2h2+	h	1.00e-09	0	0.0	4	
h2+	c2h2	c2h2+	h2	4.80e-09	0	0.0	4	
h2+	c2h2	c2h3+	h	4.80e-10	0	0.0	4	
he+	c2h	c+	ch	he	5.10e-10	0	0.0	4
he+	c2h	ch+	c	he	5.10e-10	0	0.0	4
he+	c2h	c2+	h	he	5.10e-10	0	0.0	4
he+	c2h2	ch+	ch	he	7.70e-10	0	0.0	4
he+	c2h2	c2+	h2	he	1.61e-09	0	0.0	4
he+	c2h2	c2h+	h	he	8.75e-10	0	0.0	4
he+	c2h2	c2h2+	he		2.45e-10	0	0.0	4
he+	c3	c+	c2	he	1.00e-09	0	0.0	4
he+	c3	c2+	c	he	1.00e-09	0	0.0	4
he+	c3h	c3+	h	he	2.00e-09	0	0.0	4
he+	c3h2	c3h+	h	he	1.00e-09	0	0.0	4
he+	c3h2	c3+	h2	he	1.00e-09	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
h3+	c2h	c2h2+	h2	4.50e-09	-0.5	0.0	4
h3+	c2h2	c2h3+	h2	2.90e-09	0	0.0	4
h3+	c3	c3h+	h2	2.00e-09	0	0.0	4
h3+	c3h	c3h2+	h2	1.48e-08	-0.5	0.0	4
h3+	c3h2	c3h3+	h2	6.98e-09	-0.5	0.0	4
c+	c2h	c3+	h	2.60e-09	-0.5	0.0	4
c+	c2h2	c3h+	h	2.20e-09	0	0.0	4
ch+	c	c2+	h	1.20e-09	0	0.0	4
ch+	o	co+	h	3.50e-10	0	0.0	4
ch+	ch	c2+	h2	7.40e-10	0	0.0	4
ch+	ch2	c2h+	h2	1.00e-09	0	0.0	4
ch+	ch4	c2h2+	h2	1.40e-10	0	0.0	4
ch+	ch4	c2h3+	h2	1.10e-09	0	0.0	4
ch+	ch4	c2h4+	h	6.50e-11	0	0.0	4
ch+	o2	co+	oh	1.00e-11	0	0.0	4
ch+	o2	hco+	o	9.70e-10	0	0.0	4
ch+	oh	co+	h2	7.50e-10	0	0.0	4
ch+	h2o	hco+	h2	2.90e-09	0	0.0	4
ch+	h2o	h3o+	c	5.80e-10	0	0.0	4
ch+	co2	hco+	co	1.60e-09	0	0.0	4
ch+	c2	c3+	h	1.00e-09	0	0.0	4
ch+	c2h2	c3h2+	h	1.20e-09	0	0.0	4
ch2+	ch2	c2h3+	h	1.00e-09	0	0.0	4
ch2+	c2	c3h+	h	1.00e-09	0	0.0	4
ch2+	c2h	c3h2+	h	4.75e-10	0	0.0	4
ch3+	ch2	c2h3+	h2	8.21e-10	-0.5	0.0	4
ch3+	c2h	c3h2+	h2	6.00e-10	-0.5	0.0	4
ch4+	c2h2	c2h2+	ch4	1.10e-09	0	0.0	4
ch4+	c2h2	c2h3+	ch3	1.40e-09	0	0.0	4
ch4+	c2h2	c3h3+	h2	6.25e-11	0	0.0	4
c2+	c	c+	c2	1.10e-10	0	0.0	4
c2+	o	co+	c	3.10e-10	0	0.0	4
c2+	ch	ch+	c2	3.20e-10	0	0.0	4
c2+	ch	c3+	h	3.20e-10	0	0.0	4
c2+	ch2	ch2+	c2	4.50e-10	0	0.0	4
c2+	ch2	c3h+	h	4.50e-10	0	0.0	4
c2+	ch4	c2h+	ch3	2.38e-10	0	0.0	4
c2+	ch4	c2h2+	ch2	1.82e-10	0	0.0	4
c2+	ch4	c3h+	h2	1.96e-10	0	0.0	4
c2+	ch4	c3h2+	h2	5.74e-10	0	0.0	4
c2+	ch4	c3h3+	h	2.10e-10	0	0.0	4
c2+	c2	c3+	c	8.70e-10	0	0.0	4
c2h+	c	c3+	h	1.10e-09	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
c2h+	ch	ch2+	c2	3.20e-10	0	0.0	4
c2h+	ch	c3h+	h	3.20e-10	0	0.0	4
c2h+	ch2	ch3+	c2	4.40e-10	0	0.0	4
c2h+	ch2	c3h2+	h	2.20e-10	0	0.0	4
c2h+	ch4	c2h2+	ch3	3.74e-10	0	0.0	4
c2h+	ch4	c3h3+	h2	1.87e-10	0	0.0	4
c2h+	h2co	h3co+	c2	1.10e-09	0	0.0	4
c2h2+	c	c2h2	c+	1.10e-09	0	0.0	4
c2h2+	c	c3+	h2	1.10e-09	0	0.0	4
c2h2+	c	c3h+	h	1.10e-09	0	0.0	4
c2h2+	o	hco+	ch	5.00e-11	0	0.0	4
c2h2+	o	hoc+	ch	5.00e-11	0	0.0	4
c2h2+	ch	c3h2+	h	2.30e-09	-0.5	0.0	4
c2h2+	ch2	c3h3+	h	3.66e-10	-0.5	0.0	4
c2h2+	o2	hco+	hco	9.80e-13	0	0.0	4
c2h2+	hco	hco+	c2h2	5.70e-10	-0.5	0.0	4
c2h2+	hco	c2h3+	co	4.30e-10	-0.5	0.0	4
c2h2+	h2o	h3o+	c2h	2.20e-10	0	0.0	4
c2h2+	h2co	h2co+	c2h2	1.60e-09	-0.5	0.0	4
c2h3+	h	c2h2+	h2	6.80e-11	0	0.0	4
c2h3+	c	c3h+	h2	1.00e-09	0	0.0	4
c2h3+	c	c3h2+	h	5.00e-10	0	0.0	4
c2h3+	o	ch3+	co	5.00e-12	0	0.0	4
c2h3+	c2h	c2h2+	c2h2	6.80e-10	-0.5	0.0	4
c2h3+	c3h	c3h2+	c2h2	2.09e-09	-0.5	0.0	4
c2h3+	c3h2	c3h3+	c2h2	1.01e-09	-0.5	0.0	4
c2h3+	h2o	h3o+	c2h2	1.11e-09	0	0.0	4
c2h4+	h	c2h3+	h2	3.00e-10	0	0.0	4
c2h4+	c	c3h2+	h2	1.00e-09	0	0.0	4
c2h4+	c	c3h3+	h	1.00e-09	0	0.0	4
c2h4+	o	hco+	ch3	8.40e-11	0	0.0	4
c2h4+	o	ch3+	hco	1.08e-10	0	0.0	4
c2h4+	c2h	c3h3+	ch2	1.00e-09	-0.5	0.0	4
c2h4+	c2h2	c3h3+	ch3	6.30e-10	0	0.0	4
c3h+	h2o	hco+	c2h2	2.48e-10	0	0.0	4
c3h+	h2o	c2h3+	co	2.02e-10	0	0.0	4
c3h+	ch4	c2h3+	c2h2	6.12e-10	0	0.0	4
c3h2+	h	c3h+	h2	6.00e-11	0	0.0	4
c3h2+	o	hco+	c2h	2.00e-10	0	0.0	4
c3h3+	o	c2h3+	co	4.50e-11	0	0.0	4
o+	c2	c2+	o	4.80e-10	0	0.0	4
o+	c2	co+	c	4.80e-10	0	0.0	4
o+	c2h	co+	ch	4.60e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
o+	c2h	c2h+	o	4.60e-10	0	0.0	4
co+	c2	c2+	co	8.40e-10	0	0.0	4
co+	c2h	hco+	c2	3.90e-10	0	0.0	4
hco+	c2h	c2h2+	co	7.80e-10	0	0.0	4
hco+	c2h2	c2h3+	co	1.36e-09	0	0.0	4
hco+	c3	c3h+	co	1.40e-09	0	0.0	4
hco+	c3h	c3h2+	co	1.40e-09	0	0.0	4
hco+	c3h2	c3h3+	co	1.40e-09	0	0.0	4
oh+	c2	c2+	oh	4.80e-10	0	0.0	4
oh+	c2	c2h+	o	4.80e-10	0	0.0	4
oh+	c2h	c2h+	oh	4.50e-10	0	0.0	4
oh+	c2h	c2h2+	o	4.50e-10	0	0.0	4
h2o+	c2	c2+	h2o	4.70e-10	0	0.0	4
h2o+	c2	c2h+	oh	4.70e-10	0	0.0	4
h2o+	c2h	c2h+	h2o	4.40e-10	0	0.0	4
h2o+	c2h	c2h2+	oh	4.40e-10	0	0.0	4
h3o+	c2h	c2h2+	h2o	2.20e-10	0	4100.0	4
h3o+	c2h2	c2h3+	h2o	1.00e-09	0	7330.0	4
h3o+	c3h	c3h2+	h2o	2.00e-09	0	0.0	4
h3o+	c3h2	c3h3+	h2o	3.00e-09	0	0.0	4
h+	fe	fe+	h	7.40e-09	0	0.0	4
h3+	fe	fe+	h2	4.90e-09	0	0.0	4
c+	fe	fe+	c	2.60e-09	0	0.0	4
ch+	fe	fe+	ch	2.60e-10	0	0.0	4
ch3+	fe	fe+	ch3	2.40e-09	0	0.0	4
o+	fe	fe+	o	2.90e-09	0	0.0	4
o2+	fe	fe+	o2	1.10e-09	0	0.0	4
h2o+	fe	fe+	h2o	1.50e-09	0	0.0	4
h3o+	fe	fe+	h2o	3.10e-09	0	0.0	4
hco+	fe	fe+	co	1.90e-09	0	0.0	4
hoc+	fe	fe+	co	1.90e-09	0	0.0	4
c2h2+	fe	fe+	c2h2	2.00e-09	0	0.0	4
c	h	ch	photon	1.00e-17	0	0.0	3
c	c	c2	photon	1.00e-17	0	0.0	3
c	o	co	photon	2.10e-19	0	0.0	3
ch	h2	ch3	photon	3.25e-17	-0.6	0.0	3
h+	h	h2+	photon	2.00e-20	1	0.0	3
c+	h	ch+	photon	7.00e-17	0	0.0	3
c+	h2	ch2+	photon	1.70e-15	0	0.0	3
c+	o	co+	photon	2.50e-18	0	0.0	3
ch3+	h2	ch5+	photon	1.30e-14	-1	0.0	3
c2h2+	h	c2h3+	photon	7.00e-15	-1.5	0.0	3
c2h2+	h2	c2h4+	photon	1.50e-14	-1	0.0	3

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
c3+	h	c3h+	photon	7.00e-16	-1.5	0.0	3
c3h+	h	c3h2+	photon	2.00e-14	-1.5	0.0	3
c3h+	h2	c3h3+	photon	3.00e-13	-1	0.0	3
c3h2+	h	c3h3+	photon	4.00e-15	-1.5	0.0	3
nh3	c2h4+	c2h4	nh3+	1.80e-09	0	0.0	4
c2h4	phosec	c2h2	h2	3.00e-09	0	1.7	2
ch3	ch3	c2h4	h2	1.66e-08	0	16556.0	4
o	c2h4	hco	ch3	1.52e-12	1.55	215.0	4
ch2	ch2	c2h3	h	3.32e-08	0	0.0	4
oh	c2h3	c2h2	h2o	5.00e-11	0	0.0	4
o	c2h4	c2h3	oh	2.42e-13	2.13	1338.0	4
c2h3	phosec	c2h2	h	1.00e-09	0	1.7	2
hc3	phosec	c3	h	8.16e+03	0	0.0	2
h2c3	phosec	hc3	h	8.16e+03	0	0.0	2
hc3	o	c2h	co	1.70e-11	0	0.0	4
o	c4h	hc3	co	8.50e-12	0	0.0	4
c	c2h2	hc3	h	1.45e-10	-0.12	0.0	4
c	hc3	c4	h	1.00e-10	0	0.0	4
h2c3+	electr	hc3	h	1.50e-07	-0.5	0.0	4
h3c3+	electr	hc3	h2	3.15e-07	-0.5	0.0	4
h+	hc3	c3h+	h	1.58e-08	-0.5	0.0	4
h+	hc3	c3+	h2	1.58e-08	-0.5	0.0	4
he+	hc3	c3+	h	2.00e-09	0	0.0	4
h3+	hc3	h2c3+	h2	1.92e-08	-0.5	0.0	4
c+	hc3	c4+	h	1.07e-08	-0.5	0.0	4
ch3+	hc3	c3h+	ch3	4.90e-09	-0.5	0.0	4
ch3+	hc3	c4h2+	h2	4.35e-09	-0.5	0.0	4
hco+	hc3	h2c3+	co	1.40e-09	0	0.0	4
h3o+	hc3	h2c3+	h2o	2.00e-09	0	0.0	4
c2h3+	hc3	h2c3+	c2h2	2.71e-09	-0.5	0.0	4
c2h4+	hc3	c4h2+	ch3	5.34e-09	-0.5	0.0	4
c3h+	no	no+	hc3	8.65e-11	-0.5	0.0	4
c3h+	nh3	nh3+	hc3	2.79e-10	-0.5	0.0	4
hc3	photon	c3	h	1.00e-09	0	1.70	5
h2c3	photon	hc3	h	1.00e-09	0	1.7	5
h2c3	o	c2h2	co	5.00e-11	0.5	0.0	4
c	h2c3	c4h	h	1.00e-10	0	0.0	4
h3c3+	electr	h2c3	h	3.15e-07	-0.5	0.0	4
h+	h2c3	c3h+	h2	7.11e-09	-0.5	0.0	4
h+	h2c3	h2c3+	h	7.11e-09	-0.5	0.0	4
he+	h2c3	c3h+	h	1.00e-09	0	0.0	4
he+	h2c3	c3+	h2	1.00e-09	0	0.0	4
h3+	h2c3	h3c3+	h2	8.42e-09	-0.5	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação	
c+	h2c3	c4+	h2	2.10e-09	-0.5	0.0	4	
c+	h2c3	c4h+	h	2.10e-09	-0.5	0.0	4	
ch3+	h2c3	c4h3+	h2	4.02e-09	-0.5	0.0	4	
hco+	h2c3	h3c3+	co	1.40e-09	0	0.0	4	
h3o+	h2c3	h3c3+	h2o	3.00e-09	0	0.0	4	
c2h3+	h2c3	h3c3+	c2h2	1.21e-09	-0.5	0.0	4	
c2h4+	h2c3	c4h3+	ch3	2.69e-09	-0.5	0.0	4	
c4h3+	o	hco+	h2c3	2.50e-11	0	0.0	4	
h2c3	photon	c3	h2	1.00e-09	0	1.7	5	
c4	phosec	c3	c	2.00e+03	0	0.0	2	
c4h	phosec	c4	h	1.00e+04	0	0.0	2	
o	c4	co	c3	1.00e-10	0	0.0	4	
c	c3h	c4	h	1.00e-10	0	0.0	4	
c4h+	electr	c4	h	1.20e-07	-0.5	0.0	4	
c4h2+	electr	c4	h2	1.50e-07	-0.5	0.0	4	
h+	c4	c4+	h	4.00e-09	0	0.0	4	
he+	c4	c+	c3	he	6.70e-10	0	0.0	4
he+	c4	c2+	c2	he	6.70e-10	0	0.0	4
he+	c4	c3+	c	he	6.70e-10	0	0.0	4
h3+	c4	c4h+	h2	2.00e-09	0	0.0	4	
hco+	c4	c4h+	co	1.40e-09	0	0.0	4	
h3o+	c4	c4h+	h2o	1.10e-09	0	0.0	4	
c4h+	c4h	c4h2+	c4	8.35e-10	-0.5	0.0	4	
c	c3	c4	photon	1.00e-10	0	0.0	3	
c4	photon	c2	c2	2.00e-10	0	2.3	5	
c4	photon	c3	c	2.00e-10	0	2.3	5	
c4h	photon	c4	h	1.00e-09	0	1.7	5	
c4h2	phosec	c4h	h	3.46e+03	0	0.0	2	
o	c4h	c3h	co	8.50e-12	0	0.0	4	
c	c3h2	c4h	h	1.00e-10	0	0.0	4	
c4h2+	electr	c4h	h	1.50e-07	-0.5	0.0	4	
c4h3+	electr	c4h	h2	1.50e-07	-0.5	0.0	4	
h+	c4h	c4+	h2	4.20e-09	-0.5	0.0	4	
h+	c4h	c4h+	h	4.20e-09	-0.5	0.0	4	
he+	c4h	c2h+	c2	he	2.10e-09	-0.5	0.0	4
he+	c4h	c4+	h	he	2.10e-09	-0.5	0.0	4
hco+	c4h	c4h2+	co	1.90e-09	-0.5	0.0	4	
h3o+	c4h	c4h2+	h2o	2.23e-09	-0.5	0.0	4	
c2h3+	c4h	c4h2+	c2h2	6.60e-10	-0.5	0.0	4	
c4h+	fe	fe+	c4h	1.00e-09	0	0.0	4	
c4h	photon	c2h	c2	1.00e-09	0	1.7	5	
c4h	photon	c4	h	1.00e-09	0	1.7	5	
c4h2	photon	c4h	h	1.13e-09	0	1.6	5	

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
c4h2	phosec	c2h	c2h	3.46e+03	0	0.0	2
c4h2	phosec	c4h2+	electr	2.24e+03	0	0.0	2
c4h3+	electr	c4h2	h	1.50e-07	-0.5	0.0	4
h+	c4h2	c4h+	h2	2.00e-09	0	0.0	4
h+	c4h2	c4h2+	h	2.00e-09	0	0.0	4
he+	c4h2	c2h+	c2h	1.00e-09	0	0.0	4
he+	c4h2	c4+	h2	1.00e-09	0	0.0	4
he+	c4h2	c4h+	h	1.00e-09	0	0.0	4
c+	c4h2	c3h+	c2h	1.45e-10	0	0.0	4
c+	c4h2	c4h2+	c	1.40e-09	0	0.0	4
ch3+	c4h2	c3h3+	c2h2	1.20e-09	0	0.0	4
ch3+	c4h2	h3c3+	c2h2	1.20e-09	0	0.0	4
hco+	c4h2	c4h3+	co	1.40e-09	0	0.0	4
h3o+	c4h2	c4h3+	h2o	1.10e-09	0	0.0	4
c2h3+	c4h2	c4h3+	c2h2	3.00e-10	0	0.0	4
s+	c4h2	c3h2+	cs	1.20e-10	0	0.0	4
s+	c4h2	h2c3+	cs	1.20e-10	0	0.0	4
s+	c4h2	c4h+	sh	1.60e-10	0	0.0	4
s+	c4h2	c4h2+	s	7.20e-10	0	0.0	4
c4h2	photon	c2h	c2h	1.13e-09	0	1.6	5
c4h2	photon	c4h2+	electr	2.60e-10	0	2.3	5
nh+	o2	o2h+	n	1.60e-10	0	0.0	4
h2c3+	electr	c2	ch2	3.00e-08	-0.5	0.0	4
h2c3+	electr	c3	h	6.00e-08	-0.5	0.0	4
h2c3+	electr	c3	h2	1.50e-07	-0.5	0.0	4
h2c3+	electr	c2h2	c	3.00e-08	-0.5	0.0	4
ch+	c2h2	h2c3+	h	1.20e-09	0	0.0	4
ch2+	c2h	h2c3+	h	4.75e-10	0	0.0	4
ch3+	c2h	h2c3+	h2	6.00e-10	-0.5	0.0	4
c2+	ch4	h2c3+	h2	5.74e-10	0	0.0	4
c2h+	ch2	h2c3+	h	2.20e-10	0	0.0	4
c2h2+	ch	h2c3+	h	2.30e-09	-0.5	0.0	4
c2h3+	c	h2c3+	h	5.00e-10	0	0.0	4
c2h4+	c	h2c3+	h2	5.00e-10	0	0.0	4
h2c3+	c	c4h+	h	1.00e-09	0	0.0	4
h2c3+	h	c3h+	h2	6.00e-11	0	0.0	4
h2c3+	o	hco+	c2h	2.00e-10	0	0.0	4
c4h2+	o	h2c3+	co	1.10e-10	0	0.0	4
c3h+	h	h2c3+	photon	2.00e-14	-1.5	0.0	3
h2c3+	h	h3c3+	photon	4.00e-15	-1.5	0.0	3
h2c3+	photon	c3+	h2	1.00e-10	0	3.0	5
c3h+	h2	h3c3+	photon	3.00e-13	-1	0.0	3
ch3+	c2h	h3c3+	h	6.00e-10	-0.5	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos			γ	α	β	Tipo de Reação
ch4+	c2h2	h3c3+	h2	h	6.25e-11	0	0.0	4
c2+	ch4	h3c3+	h		2.10e-10	0	0.0	4
c2h+	ch4	h3c3+	h2		1.87e-10	0	0.0	4
c2h2+	ch2	h3c3+	h		3.66e-10	-0.5	0.0	4
c2h4+	c	h3c3+	h		5.00e-10	0	0.0	4
c2h4+	c2h	h3c3+	ch2		5.00e-10	-0.5	0.0	4
c2h4+	c2h2	h3c3+	ch3		3.15e-10	0	0.0	4
h3c3+	c	c4h+	h2		1.00e-09	0	0.0	4
h3c3+	c	c4h2+	h		1.00e-09	0	0.0	4
h3c3+	o	c2h3+	co		4.50e-11	0	0.0	4
h2c3+	h	h3c3+	photon		4.00e-15	-1.5	0.0	3
h3c3+	photon	c3h+	h2		1.00e-10	0	3.0	5
c4+	h2	c4h+	h		1.30e-10	0	0.0	4
c4+	electr	c2	c2		1.75e-07	-0.5	0.0	4
c4+	electr	c3	c		2.75e-07	-0.5	0.0	4
c+	c3h	c4+	h		9.50e-09	-0.5	0.0	4
c+	c3h2	c4+	h2		2.10e-09	-0.5	0.0	4
c+	h2c3	c4+	h2		2.10e-09	-0.5	0.0	4
c+	c3	c4+	photon		1.00e-13	-1	0.0	3
c4h+	electr	c2h	c2		9.00e-08	-0.5	0.0	4
c4h+	electr	c3h	c		4.50e-08	-0.5	0.0	4
c4h+	electr	c3	ch		4.50e-08	-0.5	0.0	4
c4h+	electr	c4	h		1.20e-07	-0.5	0.0	4
c+	c3h2	c4h+	h		2.10e-09	-0.5	0.0	4
c+	h2c3	c4h+	h		2.10e-09	-0.5	0.0	4
c2+	c2h2	c4h+	h		1.70e-09	0	0.0	4
c3h2+	c	c4h+	h		1.00e-09	0	0.0	4
c4h+	o	hco+	c3		2.00e-10	0	0.0	4
c4h+	h2	c4h2+	h		1.65e-10	0	0.0	4
c3h3+	c	c4h+	h2		1.00e-09	0	0.0	4
c4h+	h	c4h2+	photon		6.00e-14	-1.5	0.0	3
ch3+	c3h	c4h2+	h2		4.35e-09	-0.5	0.0	4
c2h+	c2h2	c4h2+	h		1.70e-09	0	0.0	4
c2h2+	c2h	c4h2+	h		2.10e-09	-0.5	0.0	4
c2h2+	c2h2	c4h2+	h2		5.20e-10	0	0.0	4
c2h3+	c2h	c4h2+	h2		6.80e-10	-0.5	0.0	4
c2h4+	c3h	c4h2+	ch3		5.34e-09	-0.5	0.0	4
c3h3+	c	c4h2+	h		1.00e-09	0	0.0	4
c4h2+	o	c3h2+	co		1.10e-10	0	0.0	4
c4h2+	o	h2c3+	co		1.10e-10	0	0.0	4
c4h2+	h	c4h3+	photon		7.00e-11	-0.1	0.0	3
ch3+	c3h2	c4h3+	h2		4.02e-09	-0.5	0.0	4
c2h2+	c2h2	c4h3+	h		8.80e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação	
c2h3+	c2h	c4h3+	h	6.80e-10	-0.5	0.0	4	
c2h3+	c2h2	c4h3+	h2	7.20e-10	0	0.0	4	
c2h4+	c2h	c4h3+	h2	1.00e-09	-0.5	0.0	4	
c2h4+	c3h2	c4h3+	ch3	2.23e-09	-0.5	0.0	4	
c3h+	ch4	c4h3+	h2	5.50e-11	0	0.0	4	
c4h3+	o	hco+	c3h2	2.50e-11	0	0.0	4	
c2	ch4	c3h3	h	1.50e-11	0	0.0	4	
c+	c3h3	c4h+	h2	1.00e-09	0	0.0	4	
c	c2h4	c3h3	h	3.00e-10	-0.11	0.0	4	
c3h3	phosec	c3h	h2	1.30e-17	0	2500.0	2	
c2h2	c2h4+	c4h5+	h	1.93e-10	0	0.0	4	
c4h5+	electr	c4h2	h2	h	1.50e-07	-0.5	0.0	4
ch3+	c3h3	c4h5+	h	4.00e-09	0	0.0	4	
c2h2+	c2h4	c4h5+	h	3.17e-10	0	0.0	4	
c	c3h3	h2c4	h	1.00e-10	0	0.0	4	
c3h3	phosec	c3h2	h	1.30e-17	0	2500.0	2	
c3h3	photon	c3h	h2	1.00e-09	0	1.7	5	
c3h3	photon	c3h2	h	1.00e-09	0	1.7	5	
ch4	c2h3+	c3h5+	h2	2.00e-10	0	0.0	4	
ch4	c2h2+	c3h5+	h	6.64e-10	0	0.0	4	
c3h5+	electr	c3h3	h2	1.50e-07	-0.5	0.0	4	
n	c3h5+	c2h4+	hcn	1.10e-10	0	0.0	4	
c2h4+	c2h4	c3h5+	ch3	7.11e-10	0	0.0	4	
ch3+	c2h4	c3h5+	h2	5.24e-10	0	0.0	4	
c3h5+	electr	c3h4	h	1.50e-07	-0.5	0.0	4	
c	c3h4	c4h2	h2	4.00e-20	0	0.0	4	
c4h5+	electr	c3h4	ch	1.50e-07	-0.5	0.0	4	
c+	c3h4	c4h2+	h2	5.70e-10	0	0.0	4	
c+	c3h4	c2h2+	c2h2	1.90e-10	0	0.0	4	
c3h4	photon	c3h2	h2	2.25e-10	0	1.7	5	
c2h	c3h2	c5h2	h	1.06e-10	-0.25	0.0	4	
c5h2	photon	c3h	c2h	1.00e-11	0	1.7	5	
he+	c5h2	c3h+	c2h	he	1.00e-09	0	0.0	4
c2	c2h4	c4h3	h	3.50e-10	0	0.0	4	
c4h3	c	c5h2	h	3.10e-10	0	0.0	4	
c	c3h4	c4h3	h	2.70e-10	-0.11	0.0	4	
h+	c4h3	c4h2+	h2	2.00e-09	0	0.0	4	
he+	c4h3	c3h2+	ch	he	6.70e-10	0	0.0	4
he+	c4h3	c4h2+	he	h	6.70e-10	0	0.0	4
he+	c4h3	c3h3+	c	he	6.70e-10	0	0.0	4
c+	c4h3	c3h2+	c2h	3.10e-10	0	0.0	4	
c	c5h2	c6h	h	5.30e-10	0	0.0	4	
c6h	phosec	c3h	c3	1.30e-17	0	2500.0	2	

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
c6h	phosec	c4	c2h	1.30e-17	0	2500.0	2
c2h	c4h2	c6h2	h	1.06e-10	-0.25	0.0	4
c2h2	c4h	c6h2	h	1.50e-10	0	0.0	4
he+	c6h2	c4h+	c2h	1.00e-09	0	0.0	4
c	c4h2	c5h	h	6.50e-10	0	0.0	4
c5h2	photon	c5h	h	1.00e-11	0	1.7	5
n	c6h	cn	c5h	1.00e-13	0	0.0	4
o	c6h	c5h	co	1.70e-13	0	0.0	4
o	c5h	c4h	co	1.70e-11	0	0.0	4
c5h	photon	c3	c2h	1.00e-11	0	1.7	5
c5h	photon	c3h	c2	1.00e-11	0	1.7	5
he+	c5h	c3h+	c2	1.50e-09	0	0.0	4
c5h	phosec	c3h	c2	1.30e-17	0	2500.0	2
c5h	phosec	c3	c2h	1.30e-17	0	2500.0	2
c2h2	c4h2+	c6h3+	h	7.00e-12	0	0.0	4
c2h2+	c4h2	c6h3+	h	1.40e-10	0	0.0	4
c2h3	c4h+	c6h3+	h	2.00e-09	0	0.0	4
c2h3	c4h2+	c6h3+	h2	3.00e-10	0	0.0	4
c2h3+	c4h	c6h3+	h	4.00e-10	0	0.0	4
o	c6h3+	c5h2	hco+	2.00e-10	0	0.0	4
c6h3+	electr	c6h2	h	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c6h3+	electr	c6h	h2	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c2h2	c4h2+	c6h4+	photon	1.00e-09	0	0.0	4
c2h3	c4h2+	c6h4+	h	1.20e-09	0	0.0	4
c2h3+	c4h2	c6h4+	h	3.00e-10	0	0.0	4
c2h4	c4h+	c6h4+	h	7.50e-10	0	0.0	4
c3h2	c3h3+	c6h4+	h	1.00e-09	0	0.0	4
c6h4+	electr	c6h2	h2	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c6h4+	electr	c6h	h2	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c2h3	c4h3+	c6h5+	h	5.00e-10	0	0.0	4
c2h4	c4h2+	c6h5+	h	8.00e-10	0	0.0	4
c3h3+	c3h3	c6h5+	h	1.50e-09	0	0.0	4
c6h5+	electr	c6h2	h2	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c6h5+	electr	c6h	h2	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c2h3+	c3h3	c5h5+	h	1.00e-09	0	0.0	4
c2h4	c3h2+	c5h5+	h	4.40e-10	0	0.0	4
c2h4	c3h3+	c5h5+	h2	1.10e-19	0	0.0	4
c2h4+	c3h2	c5h5+	h	5.00e-10	0	0.0	4
c2h4+	c3h3	c5h5+	h2	8.00e-10	0	0.0	4
c5h5+	electr	c5h2	h2	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c5h5+	electr	c5h4	h	3.00e-07	-0.5	0.0	4
c5h4	photon	c4h	ch3	2.00e-11	0	1.7	5
c5h4	phosec	c4h	ch3	1.30e-17	0	750.0	2

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
c	c5h4	c6h2	h2	6.50e-10	0	0.0	4
h3+	c5h4	c5h5+	h2	2.50e-09	0	0.0	4
hco+	c5h4	c5h5+	co	2.00e-09	0	0.0	4
c2h2+	c3h3	c5h4+	h	1.00e-09	0	0.0	4
c2h3	c3h2+	c5h4+	h	6.00e-10	0	0.0	4
c2h3	c3h3+	c5h4+	h2	1.50e-09	0	0.0	4
c2h4+	c3h	c5h4+	h	6.30e-10	0	0.0	4
ch4	c4h2+	c5h4+	h2	2.00e-10	0	0.0	4
c5h4+	electr	c5h2	h2	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c5h4+	electr	c5h	h2	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c	c4h	c5	h	1.00e-10	0	0.0	4
c5h	phosec	c5	h	1.30e-17	0	2500.0	2
c5h	photon	c5	h	1.00e-11	0	1.7	5
c5	phosec	c3	c2	1.30e-17	0	500.0	2
c5	phosec	c4	c	1.30e-17	0	500.0	2
he+	c5	c3+	c2	1.00e-09	0	0.0	4
n	c5	cn	c4	1.00e-10	0	0.0	4
c	c5h	c6	h	1.00e-10	0	0.0	4
c6h	phosec	c6	h	1.30e-17	0	2500.0	2
he+	c6	c4+	c2	1.40e-09	0	0.0	4
o	c6	c5	co	1.00e-10	0	0.0	4
c6	phosec	c5	c	1.30e-17	0	500.0	2
n	c6	cn	c5	1.00e-10	0	0.0	4
c	c6	c2	c5	1.00e-13	0	0.0	4
c+	c5h4	c6h2+	h2	7.50e-10	0	0.0	4
c2h	c4h2+	c6h2+	h	1.30e-09	0	0.0	4
c2h2	c4h+	c6h2+	h	1.50e-09	0	0.0	4
c2h2+	c4h	c6h2+	h	1.00e-09	0	0.0	4
c2h2+	c4h2	c6h2+	h2	1.00e-17	0	0.0	4
c2h	c4h2+	c6h2+	h	1.30e-09	0	0.0	4
c6h2+	electr	c6	h2	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c6h2+	electr	c6h	h	1.00e-06	-0.3	0.0	4
h	c4h3+	c4h4+	photon	6.00e-14	-0.7	0.0	4
h3+	c4h3	c4h4+	h2	1.00e-09	0	0.0	4
h3o+	c4h3	c4h4+	h2o	1.00e-09	0	0.0	4
hco+	c4h3	c4h4+	co	9.00e-10	0	0.0	4
c2h2	c4h4+	c6h5+	h	9.00e-11	0	0.0	4
c2h2	c4h4+	c6h4+	h2	1.20e-11	0	0.0	4
c4h4+	electr	c4h3	h	3.30e-07	-0.5	0.0	4
h2c4	c4h4+	c6h4+	c2h2	7.00e-10	0	0.0	4
c2h	c4h+	c6h+	h	6.00e-10	0	0.0	4
c2h2	c4+	c6h+	h	1.41e-09	0	0.0	4
c2h2+	c4h	c6h+	h2	1.00e-09	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
h+	c6h	c6h+	h	2.00e-09	0	0.0	4
h+	c6h2	c6h+	h2	2.00e-09	0	0.0	4
he+	c6h2	c6h+	h	1.00e-09	0	0.0	4
h2	c6h+	c6h2+	h	1.30e-12	0	0.0	4
c6h+	electr	c6	h	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c6h+	electr	c5h	c	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c6h	phosec	c6	h	1.30e-17	0	0.0	4
c	c6h	c7	h	2.00e-10	0	0.0	4
c7	phosec	c6	c	1.30e-17	0	500.0	2
c7	photon	c6	c	1.00e-09	0	1.7	5
n	c7	cn	c6	1.00e-13	0	0.0	4
o	c7	c6	co	5.00e-12	0	900.0	4
c	c6h2	c7h	h	7.40e-10	0	0.0	4
he+	c7h	c5h+	c2	2.00e-09	0	0.0	4
o	c7h	c6h	co	1.70e-11	0	0.0	4
c7h	phosec	c7	h	1.30e-17	0	2500.0	2
c7h	photon	c7	h	1.00e-09	0	1.7	5
c2h2	c6h+	c8h2+	h	5.80e-10	0	0.0	4
c2h2+	c6h	c8h2+	h	1.20e-09	0	0.0	4
c2h2+	c6h2	c8h2+	h2	5.00e-10	0	0.0	4
c2h3+	c6h	c8h2+	h2	5.00e-10	0	0.0	4
c4h	c4h2+	c8h2+	h	1.30e-09	0	0.0	4
c4h+	c4h2	c8h2+	h	1.50e-09	0	0.0	4
c	c8h2+	c9h+	h	5.00e-10	0	0.0	4
c	c8h2+	c9+	h2	5.00e-10	0	0.0	4
c8h2+	electr	c8h	h	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c8h2+	electr	c8	h2	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c8h	phosec	c8	h	1.30e-17	0	2500.0	2
c8h	photon	c8	h	1.00e-09	0	1.7	5
c9+	electr	c8	c	1.00e-06	-0.3	0.0	4
o	c9	c8	co	5.00e-12	0	900.0	4
n	c9	cn	c8	1.00e-13	0	0.0	4
c9	photon	c8	c	1.00e-09	0	1.7	5
c	c8	c2	c7	1.00e-13	0	0.0	4
c+	c8	c9+	photon	1.00e-09	0	0.0	4
c8	phosec	c7	c	1.30e-17	0	500.0	4
c8	photon	c7	c	1.00e-09	0	1.7	2
n	c8	cn	c7	1.00e-10	0	0.0	4
o	c8	c7	co	1.00e-10	0	0.0	4
c2h2+	c7h	c9h+	h2	2.00e-09	0	0.0	4
c3h2+	c6h	c9h+	h2	5.00e-10	0	0.0	4
h2	c9+	c9h+	h	4.10e-11	0	0.0	4
h3+	c9	c9h+	h2	2.00e-09	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
hco+	c9	c9h+	co	1.40e-09	0	0.0	4
c9h+	electr	c9	h	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c9h+	electr	c8h	c	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c9h+	o	c8	hco+	2.00e-10	0	0.0	4
c+	c8h	c9+	h	1.40e-09	0	0.0	4
c9	photon	c9+	electr	2.00e-10	0	2.5	4
h+	c9	c9+	h	4.00e-09	0	0.0	4
h+	c9h	c9+	h2	3.50e-09	0	0.0	4
he+	c9h	c9+	h	2.50e-09	0	0.0	4
c9+	electr	c7	c2	1.00e-06	-0.3	0.0	4
c8h2	phosec	c8h	h	1.30e-17	0	875.0	2
c8h2	photon	c8h	h	1.00e-09	0	1.7	5
c	c8h	c9	h	2.00e-10	0	0.0	4
h3+	c8h	c8h2+	h2	2.50e-09	0	0.0	4
hco+	c8h	c8h2+	co	2.00e-09	0	0.0	4
he+	c8h	c6h+	c2	1.50e-09	0	0.0	4
n	c8h	cn	c7h	1.00e-10	0	0.0	4
o	c8h	c7h	co	1.70e-11	0	0.0	4
c9	phosec	c8	c	1.30e-17	0	500.0	2
c2h	c6h2	c8h2	h	1.06e-10	-0.25	0.0	4
c+	c8h2	c9h+	h	1.20e-09	0	0.0	4
c+	c8h2	c9+	h2	1.20e-09	0	0.0	4
h+	c8h2	c8h2+	h	2.00e-09	0	0.0	4
he+	c8h2	c6h+	c2h	1.00e-09	0	0.0	4
c	c3h4+	c4h2+	h2	1.00e-09	0	0.0	4
c	c3h4+	c4h3+	h	1.00e-09	0	0.0	4
c+	c3h4	c3h4+	c	5.70e-10	0	0.0	4
c2h2	c3h4+	c5h5+	h	4.90e-10	0	0.0	4
c2h2+	c3h4	c3h4+	c2h2	5.00e-10	0	0.0	4
c2h3+	c3h3	c3h4+	c2h2	1.00e-09	0	0.0	4
c2h4	c3h2+	c3h4+	c2h2	6.60e-10	0	0.0	4
ch3+	c2h3	c3h4+	h2	6.00e-10	0	0.0	4
c3h4	phosec	c3h4+	electr	1.30e-17	0	2652.5	2
c3h4	photon	c3h4+	electr	2.20e-09	0	2.4	5
c3h4+	c3h4	c6h5+	h2	8.80e-11	0	0.0	4
c3h4+	c3h4	c3h5+	c3h3	1.98e-10	0	0.0	4
c3h4+	electr	c2h3	ch	4.40e-08	-0.67	0.0	4
c3h4+	electr	c3h2	h	1.48e-07	-0.67	0.0	4
c3h4+	electr	ch3	c2h	2.60e-07	-0.67	0.0	4
c3h4+	electr	c3h3	h	2.56e-06	-0.67	0.0	4
ch4	c2h+	c3h4+	h	1.32e-10	0	0.0	4
ch4	c2h2+	c3h4+	h2	1.76e-10	0	0.0	4
h	c3h4+	c3h3+	h2	2.40e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos			γ	α	β	Tipo de Reação
h+	c3h4	c3h4+	h		2.00e-09	0	0.0	4
h3+	c3h3	c3h4+	h2		2.00e-09	0	0.0	4
h3o+	c3h3	c3h4+	h2o		2.00e-09	0	0.0	4
hco+	c3h3	c3h4+	co		1.40e-09	0	0.0	4
o	c3h4+	hco+	c2h3		2.00e-10	0	0.0	4
c2h4	c6h5+	c6h7+	c2h2		8.50e-11	0	0.0	4
c6h7+	electr	c6h2	h2	h2 h	5.00e-07	-0.5	0.0	4
c3h4	c3h5+	c6h7+	h2		3.50e-10	0	0.0	4
c3h4+	c3h4	c6h7+	h		7.48e-10	0	0.0	4
h2	c6h5+	c6h7+	photon		6.00e-11	0	0.0	4
c6h7+	electr	c6h6	h		5.00e-07	-0.5	0.0	4
c+	c6h6	c3h3+	c4h3		1.44e-10	0	0.0	4
c2h3+	c6h6	c6h7+	c2h2		1.60e-09	0	0.0	4
c3h5+	c6h6	c6h7+	c3h4		1.15e-10	0	0.0	4
ch5+	c6h6	c6h7+	ch4		2.00e-09	0	0.0	4
h3+	c6h6	c6h7+	h2		3.90e-09	0	0.0	4
h3o+	c6h6	c6h7+	h2o		1.30e-09	0	0.0	4
hco+	c6h6	c6h7+	co		1.60e-09	0	0.0	4
he+	c6h6	c6h5+	he	h	7.00e-10	0	0.0	4
he+	c6h6	c5h5+	ch	he	7.00e-10	0	0.0	4
c	electr	c-	photon		2.25e-15	0	0.0	4
c+	c-	c	c		2.30e-07	0	0.0	4
c-	c	c2	electr		5.00e-10	0	0.0	4
c-	ch	c2h	electr		5.00e-10	0	0.0	4
c-	ch2	c2h2	electr		5.00e-10	0	0.0	4
c-	co2	co	co	electr	4.70e-10	0	0.0	4
c-	fe+	fe	c		2.30e-07	-0.5	0.0	4
c-	h2o	h2co	electr		5.00e-10	0	0.0	4
c-	n	cn	electr		5.00e-10	0	0.0	4
c-	n+	n	c		2.30e-07	-0.5	0.0	4
c-	nh	hcn	electr		5.00e-10	0	0.0	4
c-	o	co	electr		5.00e-10	0	0.0	4
c-	o+	o	c		2.30e-07	-0.5	0.0	4
c-	o2	co2	electr		5.00e-11	0	0.0	4
c-	oh	hco	electr		5.00e-10	0	0.0	4
c-	phosec	c	electr		2.40e-07	0	0.9	2
h	c-	ch	electr		5.00e-10	0	0.0	4
h+	c-	c	h		2.30e-07	-0.5	0.0	4
h2	c-	ch2	electr		1.00e-13	0	0.0	4
he+	c-	c	he		2.30e-13	-0.5	0.0	4
hco	no	hno	co		1.20e-11	0	0.0	4
nh	o2	hno	o		6.88e-14	2.07	3281.0	4
nh	oh	hno	h		3.32e-11	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
o	nh2	hno	h	4.56e-11	0	-10.0	4
ch	hno	no	ch2	1.73e-11	0	0.0	4
ch2	hno	no	ch3	1.70e-11	0	0.0	4
ch3	hno	no	ch4	3.32e-12	0	0.0	4
cn	hno	no	hcn	3.00e-11	0	0.0	4
co	hno	co2	nh	3.32e-12	0	6170.0	4
h	hno	oh	nh	2.40e-09	-0.5	9010.0	4
h	hno	no	h2	4.50e-11	0.72	329.0	4
h	hno	nh2	o	1.05e-09	0.3	14730.0	4
h+	hno	no+	h2	4.00e-09	0	0.0	4
hco	hno	h2co	no	1.00e-12	0	1000.0	4
he+	hno	no+	he	1.00e-09	0	0.0	4
he+	hno	no	he	1.00e-09	0	0.0	4
hno	phosec	no	h	1.30e-17	0	500.0	2
hno	photon	no	h	1.70e-10	0	0.5	5
n	hno	no	nh	2.94e-12	0.5	1000.0	4
o	hno	o2	nh	2.94e-12	0.5	3500.0	4
o	hno	no	oh	6.00e-11	0	0.0	4
oh	hno	no	h2o	4.44e-12	1.37	-169.0	4
ch3	ch3	c2h5	h	1.46e-11	0.1	5335.0	4
c	c2h5	c3h4	h	2.00e-10	0	0.0	4
c+	c2h5	c3h3+	h2	5.00e-10	0	0.0	4
c2h5	phosec	c2h3	h2	1.30e-17	0	1881.0	2
c2h5	photon	c2h3	h2	1.00e-09	0	1.7	5
h+	c2h5	c2h3+	h2	3.06e-09	0	0.0	4
h+	c2h5	c2h4+	h2	1.65e-09	0	0.0	4
he+	c2h5	c2h3+	he	5.00e-10	0	0.0	4
he+	c2h5	c2h4+	he	5.00e-10	0	0.0	4
n	c2h5	c2h4	nh	7.15e-11	0	0.0	4
o	c2h5	h2co	ch3	2.67e-11	0	0.0	4
oh	c2h5	c2h4	h2o	4.00e-11	0	0.0	4
n	c2h	c2n	h	1.70e-11	0	0.0	4
c	c2n	c2	cn	1.00e-10	0	0.0	4
c2n	phosec	c2	n	1.30e-17	0	500.0	2
c2n	phosec	cn	c	1.30e-17	0	500.0	2
c2n	photon	cn	c	5.00e-10	0	1.7	5
c2n	photon	c2	n	5.00e-10	0	1.7	5
he+	c2n	cn	c+	8.00e-09	0	0.0	4
n	c2n	cn	cn	1.00e-10	0	0.0	4
o	c2n	co	cn	6.00e-12	0	0.0	4
n	c2h5	h2cn	ch3	3.85e-11	0	0.0	4
n	ch3	h2cn	h	7.40e-11	0.26	8.4	4
c	h2cn	c2n	h2	2.00e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação	
h	h2cn	hcn	h2	1.00e-10	0	0.0	4	
n	h2cn	hcn	nh	1.00e-10	0	200.0	4	
o	h2cn	ocn	h2	1.00e-10	0	0.0	4	
h	electr	h-	photon	3.00e-16	0.85	0.0	4	
h	electr	h-	photon	3.70e-15	0	0.0	4	
h	electr	h-	photon	4.81e-16	0.52	0.0	4	
h2	phosec	h+	h-	3.90e-21	0	0.0	2	
h+	h-	h	h	2.30e-07	-0.5	0.0	4	
h-	c	ch	electr	1.00e-09	0	0.0	4	
h-	c+	c	h	2.30e-07	-0.5	0.0	4	
h-	c2	c2h	electr	1.00e-09	0	0.0	4	
h-	c2h	c2h2	electr	1.00e-09	0	0.0	4	
h-	ch	ch2	electr	1.00e-10	0	0.0	4	
h-	ch2	ch3	electr	1.00e-09	0	0.0	4	
h-	ch3	ch4	electr	1.00e-09	0	0.0	4	
h-	cn	hcn	electr	1.00e-10	0	0.0	4	
h-	co	hco	electr	5.00e-11	0	0.0	4	
h-	fe+	fe	h	2.30e-07	-0.5	0.0	4	
h-	h	h2	electr	1.30e-09	0	0.0	4	
h-	h2+	h2	h	2.30e-07	-0.5	0.0	4	
h-	h3+	h2	h2	2.30e-07	-0.5	0.0	4	
h-	h3o+	oh	h2	h	2.30e-07	-0.5	0.0	4
h-	h3o+	h2o	h2	2.30e-07	-0.5	0.0	4	
h-	hco	h2co	electr	1.00e-09	0	0.0	4	
h-	hco+	co	h2	2.30e-07	-0.5	0.0	4	
h-	he+	he	h	2.30e-07	-0.5	0.0	4	
h-	n	nh	electr	1.00e-09	0	0.0	4	
h-	n+	n	h	2.30e-07	-0.5	0.0	4	
h-	nh	nh2	electr	1.00e-10	0	0.0	4	
h-	nh2	nh3	electr	1.00e-09	0	0.0	4	
h-	nh4+	nh3	h2	2.30e-07	-0.5	0.0	4	
h-	o	oh	electr	1.00e-09	0	0.0	4	
h-	o+	o	h	2.30e-07	-0.5	0.0	4	
h-	oh	h2o	electr	1.00e-10	0	0.0	4	
h-	phosec	h	electr	2.40e-07	0	0.5	2	
c-	o2	co	o-	4.00e-10	0	0.0	4	
o	electr	o-	photon	1.50e-15	0	0.0	4	
c	o-	co	electr	5.00e-10	0	0.0	4	
ch	o-	hco	electr	5.00e-10	0	0.0	4	
ch2	o-	h2co	electr	5.00e-10	0	0.0	4	
h	o-	oh	electr	5.00e-10	0	0.0	4	
h2	o-	h2o	electr	7.00e-10	0	0.0	4	
n	o-	no	electr	2.20e-10	0	0.0	4	

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
o-	co	co2	electr	6.50e-10	0	0.0	4
o-	no	no2	electr	3.10e-10	-0.83	0.0	4
o-	o	o2	electr	1.90e-10	0	0.0	4
o-	phosec	o	electr	2.40e-07	0	0.5	2
h-	h2o	oh-	h2	3.80e-09	0	0.0	4
h2	o-	oh-	h	3.00e-11	0	0.0	4
o-	ch4	oh-	ch3	1.00e-10	0	0.0	4
c	oh-	hco	electr	5.00e-10	0	0.0	4
ch	oh-	h2co	electr	5.00e-10	0	0.0	4
h	oh-	h2o	electr	1.40e-09	0	0.0	4
oh-	phosec	oh	electr	2.40e-07	0	0.9	2
c-	no	cn-	o	1.00e-09	0	0.0	4
cn-	phosec	cn	electr	2.40e-07	0	0.9	2
h	cn-	hcn	electr	1.30e-09	0	0.0	4
h-	hcn	cn-	h2	3.80e-09	0	0.0	4
o-	cn	cn-	o	1.00e-09	0	0.0	4
o-	hcn	cn-	oh	1.20e-09	0	0.0	4
oh-	cn	cn-	oh	1.00e-09	0	0.0	4
oh-	hcn	cn-	h2o	1.20e-09	0	0.0	4
c4h	electr	c4h-	photon	2.00e-09	-0.5	0.0	4
c4h-	photon	c4h	electr	1.80e-09	0	2.0	5
c6h	electr	c6h-	photon	6.00e-08	-0.5	0.0	4
c6h-	photon	c6h	electr	1.50e-09	0	2.0	5
c5	electr	c5-	photon	3.30e-08	-0.5	0.0	4
c5-	photon	c5	electr	3.00e-09	0	1.5	5
c6	electr	c6-	photon	1.70e-07	-0.5	0.0	4
c7	electr	c7-	photon	5.00e-07	-0.5	0.0	4
c6-	photon	c6	electr	1.30e-09	0	2.0	5
c7-	photon	c7	electr	2.40e-09	0	1.5	5
n	c3h	c3n	h	1.70e-11	0	0.0	4
c	c3n	c3	cn	1.00e-13	0	0.0	4
c3n	phosec	cn	c2	1.30e-17	0	875.0	2
c3n	photon	cn	c2	5.00e-10	0	1.8	5
he+	c3n	cn	c2+	8.00e-09	0	0.0	4
hcn	c3+	c4n+	h	1.04e-09	0	0.0	4
c+	hc3n	c4n+	h	1.40e-09	0	0.0	4
c4n+	electr	c3n	c	1.50e-07	-0.5	0.0	4
c4n+	electr	c2n	c2	1.50e-07	-0.5	0.0	4
ch4	c4n+	c2h3+	ch3n	1.43e-10	0	0.0	4
ch4	c4n+	c4h3+	hcn	1.71e-10	0	0.0	4
h2	c4n+	c3h+	hcn	2.20e-11	0	0.0	4
h2o	c4n+	hc3n	hco+	7.50e-10	0	0.0	4
ch3	cn	h3c2n	photon	1.00e-16	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação	
ch3	cn-	h3c2n	electr	1.00e-09	0	0.0	4	
c+	h3c2n	c2h3+	cn	1.06e-09	0	0.0	4	
c2h2+	h3c2n	c3h5+	cn	1.06e-09	0	0.0	4	
h3c2n	phosec	cn	ch3	1.30e-17	0	2388.0	2	
h3c2n	photon	cn	ch3	3.40e-09	0	2.0	5	
h+	h3c2n	ch3+	hcn	3.00e-09	0	0.0	4	
he+	h3c2n	cn	ch3+	he	1.20e-09	0	0.0	4
he+	h3c2n	cn+	ch3	he	1.20e-09	0	0.0	4
o+	h3c2n	no	c2h3+	1.26e-09	0	0.0	4	
n	c4h	c4n	h	1.70e-11	0	0.0	4	
c4n	phosec	c3	cn	1.30e-17	0	750.0	2	
c4n	photon	c3	cn	5.00e-10	0	1.7	5	
c4n	photon	c4	n	1.00e-09	0	1.7	5	
n	c4n	cn	c3n	1.00e-10	0	0.0	4	
o	c4n	c3n	co	6.00e-12	0	0.0	4	
o	c2h5	c2h4o	h	1.33e-10	0	0.0	4	
oh	c2h3	c2h4o	photon	5.00e-21	0	10.0	4	
ch3+	c2h4o	h3co+	c2h4	1.98e-09	0	0.0	4	
c2h4o	phosec	hco	ch3	1.30e-17	0	263.5	2	
c2h4o	phosec	co	ch4	1.30e-17	0	263.5	2	
c2h4o	photon	hco	ch3	1.10e-09	0	1.5	5	
c2h4o	photon	co	ch4	1.10e-09	0	1.5	5	
c2h4o	h3+	c2h3+	h2	h2o	8.97e-10	0	0.0	4
c2h4o	h3+	h3o+	c2h4	1.04e-09	0	0.0	4	
h3+	c2h4o	ch5+	h2co	8.28e-10	0	0.0	4	
he+	c2h4o	hco	ch3+	he	3.00e-09	0	0.0	4
ch3	oh-	ch4o	electr	1.00e-09	0	0.0	4	
c2h4o	h3+	ch4o	ch3+	1.45e-09	0	0.0	4	
c+	ch4o	hco	ch3+	2.08e-09	0	0.0	4	
c+	ch4o	h3co+	ch	5.20e-10	0	0.0	4	
ch	ch4o	ch3	h2co	2.49e-10	-1.93	0.0	4	
ch+	ch4o	h3co+	ch2	2.90e-10	0	0.0	4	
ch+	ch4o	h2co	ch3+	1.45e-09	0	0.0	4	
ch3+	ch4o	h3co+	ch4	2.30e-09	0	0.0	4	
ch4o	c3h+	h3co+	c3h2	2.20e-10	0	0.0	4	
ch4o	phosec	oh	ch3	1.30e-17	0	752.0	2	
ch4o	phosec	h2co	h2	1.30e-17	0	1584.0	2	
ch4o	photon	h2co	h2	6.00e-10	0	1.8	5	
ch4o	photon	oh	ch3	6.00e-10	0	1.8	5	
ch4o	photon	h3co+	h	electr	1.30e-10	0	2.6	5
h+	ch4o	h3co+	h2	3.84e-09	0	0.0	4	
h+	ch4o	hco+	h2	h2	8.85e-10	0	0.0	4
h+	ch4o	ch3+	h2o	5.90e-10	0	0.0	4	

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos			γ	α	β	Tipo de Reação
h3+	ch4o	ch3+	h2o	h2	3.71e-09	0	0.0	4
he+	ch4o	oh+	ch3	he	1.10e-09	0	0.0	4
he+	ch4o	oh	ch3+	he	1.10e-09	0	0.0	4
n+	ch4o	no	ch3+	h	1.24e-10	0	0.0	4
n+	ch4o	h3co+	nh		4.96e-10	0	0.0	4
n+	ch4o	no+	ch3	h	3.10e-10	0	0.0	4
n+	ch4o	h2co+	nh	h	9.30e-10	0	0.0	4
o+	ch4o	h3co+	oh		1.33e-09	0	0.0	4
o+	ch4o	h2co+	h2o		9.50e-11	0	0.0	4
o2+	ch4o	h3co+	h	o2	5.00e-10	0	0.0	4
ch3+	h2o	ch5o+	photon		2.00e-12	0	0.0	4
ch+	ch4o	ch5o+	c		1.16e-09	0	0.0	4
ch4o	c4h3+	ch5o+	c4h2		3.00e-10	0	0.0	4
ch4+	ch4o	ch5o+	ch3		1.20e-09	0	0.0	4
h2co+	ch4o	ch5o+	hco		2.16e-09	0	0.0	4
h3+	ch4o	ch5o+	h2		8.40e-10	0	0.0	4
h3co+	ch4o	ch5o+	h2co		1.90e-09	0	0.0	4
h3o+	ch4o	ch5o+	h2o		2.50e-09	0	0.0	4
hco+	ch4o	ch5o+	co		2.70e-09	0	0.0	4
ch5o+	electr	ch2	h2o	h	1.87e-07	-0.59	0.0	4
ch5o+	electr	ch4o	h		2.67e-08	-0.59	0.0	4
ch5o+	electr	ch3	oh	h	4.45e-07	-0.59	0.0	4
ch5o+	electr	h2co	h2	h	8.90e-08	-0.59	0.0	4
ch5o+	electr	ch3	h2o		8.01e-08	-0.59	0.0	4
h2co	ch5o+	c2h5o2+	h2		2.10e-11	0	0.0	4
c2h5o	2+ electr	ch4o	hco		1.50e-07	0	0.0	4
c	c7n	c7	cn		1.00e-13	0	0.0	4
c2h4o2	c2h2	c4h6o2	photon		5.00e-07	-0.50	0.0	
c4h6o2	phosec	c4h2	h2o	h2o	3.30e-18	0.00	1000.0	
c4h6o2	photon	c4h2	h2o	h2o	3.30e-12	0.00	1.7	
c4h6o2	phosec	c2h4	hco	hco	3.30e-18	0.00	1000.0	
c4h6o2	phosec	c3h3	ch3	o2	3.30e-18	0.00	1000.0	
c4h6o2	photon	c2h4	hco	hco	3.30e-12	0.00	1.8	
c4h6o2	photon	c3h3	ch3	o2	3.30e-12	0.00	1.8	
c4h6o2	nh3	c4h5n	h2o	h2o	5.00e-07	-0.50	0.0	
c4h5n	phosec	c2h5	c2n		2.00e-18	0.00	1000.0	
c4h5n	phosec	h2cn	c3h3		2.00e-18	0.00	1000.0	
c4h5n	phosec	hc3n	ch4		2.00e-18	0.00	1000.0	
c4h5n	phosec	h3c2n	c2h2		2.00e-18	0.00	1000.0	
c4h5n	phosec	c3h4	hcn		2.00e-18	0.00	1000.0	
c4h5n	photon	c2h5	c2n		2.00e-12	0.00	1.8	
c4h5n	photon	h2cn	c3h3		2.00e-12	0.00	1.8	
c4h5n	photon	hc3n	ch4		2.00e-12	0.00	1.8	

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
c4h5n	photon	h3c2n	c2h2	2.00e-12	0.00	1.8	
c4h5n	photon	c3h4	hcn	2.00e-12	0.00	1.8	
c2h4o2	c3h2	c4h6o2	c	1.00e-08	0.00	0.0	
c2h4o2	c2h3	c4h6o2	h	1.00e-08	0.00	0.0	
c4h6o2	h	c4h3	h2o	1.00e-10	0.00	0.0	h2o
c4h5n	h	h3c2n	c2h3	1.00e-10	0.00	0.0	
c3h3	h3c2n	c4h5n	ch	1.00e-08	0.00	0.0	
c3h2	h3c2n	c4h5n	c	1.00e-08	0.00	0.0	
c7n	photon	c6	cn	5.00e-10	0	1.7	5
n	c7h	c7n	h	1.70e-11	0	0.0	4
n	c7n	c2n	c5n	1.00e-10	0	0.0	4
o	c7n	c6	ocn	4.00e-11	0	0.0	4
c5n+	electr	c3n	c2	3.00e-07	0	0.0	4
n	c5h+	c5n+	h	2.00e-10	0	0.0	4
c	c5n	c5	cn	1.00e-13	0	0.0	4
c5n	phosec	c4	cn	1.30e-17	0	875.0	2
c5n	photon	c4	cn	5.00e-10	0	1.7	5
he+	c5n	c4+	cn	3.00e-09	0	0.0	4
n	c5h	c5n	h	1.70e-11	0	0.0	4
n	c5n	cn	c4n	1.00e-10	0	0.0	4
n	c7n	c2n	c5n	1.00e-10	0	0.0	4
o	c5n	c4n	co	4.00e-11	0	0.0	4
c7n	photon	c7n+	electr	2.00e-10	0	2.5	5
c7n+	electr	c5n	c2	3.00e-07	-0.5	0.0	4
cn	hcn	c2n2	h	2.50e-17	1.71	770.0	4
cn	hcn	c2n2	h	2.00e-10	0	0.0	4
c	c2n2	cn	c2n	3.00e-11	0	0.0	4
h	c2n2	hcn	cn	1.48e-10	0	3588.0	4
he+	c2n2	cn+	cn	2.70e-09	0	0.0	4
n	c2n2	n2	c2n	1.00e-11	0	0.0	4
c2n2	phosec	cn	cn	1.30e-17	0	474.0	2
c2n2	photon	cn	cn	4.70e-11	0	2.6	5
oh	c2n2	hcn	ocn	3.11e-13	0	1450.0	4
c2nh+	electr	c2n	h	3.00e-07	-0.5	0.0	4
ch+	hcn	c2nh+	h	2.40e-10	0	0.0	4
h3+	c2n	c2nh+	h2	9.00e-09	0	0.0	4
n	c2h2+	c2nh+	h	1.50e-10	0	0.0	4
n	c2h3+	c2nh+	h2	2.20e-10	0	0.0	4
nh2	c2+	c2nh+	h	4.60e-10	0	0.0	4
no	c3h+	c2nh+	co	4.20e-10	0	0.0	4
c2h	cn	hc3n	photon	1.00e-16	0	0.0	4
c2h	hcn	hc3n	h	5.30e-12	0	770.0	4
c2h	hnc	hc3n	h	5.30e-12	0	770.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
c2h	c2n2	hc3n	cn	2.00e-13	0	0.0	4
ch4	c4n+	c2h3+	hc3n	1.43e-10	0	0.0	4
cn	c2h2	hc3n	h	2.72e-10	-0.52	19.0	4
h2o	c4n+	hc3n	hco+	7.50e-10	0	0.0	4
n	c3h3	hc3n	h2	8.00e-11	0	0.0	4
c+	hc3n	c3h+	cn	3.25e-09	0	0.0	4
c+	hc3n	c4n+	h	1.40e-09	0	0.0	4
c+	hc3n	c3+	hcn	2.50e-10	0	0.0	4
c2h+	hc3n	c4h+	hcn	7.60e-10	0	0.0	4
c2h+	hc3n	c4h2+	cn	4.56e-10	0	0.0	4
ch3+	hc3n	c3h3+	hcn	1.00e-09	0	0.0	4
hc3n	phosec	cn	c2h	1.30e-17	0	863.5	2
hc3n	photon	cn	c2h	7.40e-09	0	1.8	5
he+	hc3n	cn	c2h+	2.20e-09	0	0.0	4
he+	hc3n	c3h+	n	4.00e-10	0	0.0	4
c2h+	hcn	hc3n+	h	1.35e-09	0	0.0	4
cn	c2h2+	hc3n+	h	9.00e-10	0	0.0	4
h+	hc3n	hc3n+	h	4.00e-09	0	0.0	4
h3+	c3n	hc3n+	h2	9.00e-09	0	0.0	4
h3o+	c3n	hc3n+	h2o	2.00e-09	0	0.0	4
hco+	c3n	hc3n+	co	3.70e-09	0	0.0	4
c2h2	hc3n+	c2h2+	hc3n	1.28e-10	0	0.0	4
c2h2	hc3n+	c4h2+	hcn	5.12e-10	0	0.0	4
c2h4	hc3n+	c2h4+	hc3n	5.36e-10	0	0.0	4
ch4	hc3n+	c3h5+	cn	4.57e-10	0	0.0	4
h2	hc3n+	hcn	c2h2+	2.00e-12	0	0.0	4
hc3n+	electr	c3n	h	6.60e-07	-0.6	0.0	4
hc3n+	electr	hcn	c2	3.60e-07	-0.6	0.0	4
hc3n+	electr	cn	c2h	3.60e-07	-0.6	0.0	4
n	hc3n+	c3h+	n2	9.60e-11	0	0.0	4
nh3	hc3n+	hc3n	nh3+	1.70e-09	0	0.0	4
cn+	hcn	c2n2+	h	3.15e-10	0	0.0	4
n+	c2n2	c2n2+	n	1.40e-09	0	0.0	4
c2h2	c2n2+	c2h2+	c2n2	5.80e-10	0	0.0	4
c2h4	c2n2+	c2h4+	c2n2	1.30e-09	0	0.0	4
c2n2+	electr	cn	cn	1.50e-07	-0.5	0.0	4
c2n2+	electr	c2n	n	1.50e-07	-0.5	0.0	4
h	c2n2+	hcn+	cn	6.20e-10	0	0.0	4
hcn	c2n2+	hcn+	c2n2	5.40e-10	0	0.0	4
n	c2h3	c2h2n	h	6.20e-11	0	0.0	4
c	c2h2n	hc3n	h	1.00e-10	0	0.0	4
he+	c2h2n	cn	ch2+	3.30e-09	0	0.0	4
c2h2n	+ electr	hcn	ch	1.50e-07	-0.5	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação	
c2h2n	+ electr	cn	ch2	1.50e-07	-0.5	0.0	4	
c+	c2h2n	c2h2n+	c	2.00e-09	0	0.0	4	
ch2+	hcn	c2h2n+	h	1.80e-09	0	0.0	4	
ch3+	cn	c2h2n+	h	1.10e-09	0	0.0	4	
h+	c2h2n	c2h2n+	h	6.30e-09	0	0.0	4	
nh	c2h2+	c2h2n+	h	6.50e-10	0	0.0	4	
nh2	c2h+	c2h2n+	h	4.60e-10	0	0.0	4	
nh3	c2h+	c2h2n+	h2	5.50e-10	0	0.0	4	
c4h	c2n2	hc5n	cn	2.00e-13	0	0.0	4	
cn	c4h2	hc5n	h	2.72e-10	-0.52	0.0	4	
n	c5h2	hc5n	h	1.00e-13	0	0.0	4	
hc5n	phosec	c5n	h	1.30e-17	0	875.0	2	
hc5n	phosec	c4h	cn	1.30e-17	0	875.0	2	
hc5n	photon	c5n	h	5.00e-10	0	1.8	5	
hc5n	photon	c4h	cn	5.00e-10	0	1.8	5	
he+	hc5n	c3n	c2h+	he	1.00e-09	0	0.0	4
he+	hc5n	c4h+	cn	he	1.00e-13	0	0.0	4
hc5n+	electr	c5n	h	1.50e-07	-0.5	0.0	4	
c2h+	hc3n	hc5n+	h	1.18e-09	0	0.0	4	
h+	hc5n	hc5n+	h	4.00e-09	0	0.0	4	
h2	c5n+	hc5n+	h	1.50e-09	0	0.0	4	
h3+	c5n	hc5n+	h2	8.00e-09	0	0.0	4	
hcn	c4h+	hc5n+	h	1.23e-09	0	0.0	4	
hco+	c5n	hc5n+	co	3.00e-09	0	0.0	4	
c5h+	electr	c4h	c	1.00e-06	-0.3	0.0	4	
c5h+	electr	c5	h	3.00e-07	-0.5	0.0	4	
o	c5h+	c4	hco+	2.00e-10	0	0.0	4	
c	c4h2+	c5h+	h	5.00e-10	0	0.0	4	
c	c4h3+	c5h+	h2	5.00e-10	0	0.0	4	
c+	c4h3	c5h+	h2	3.10e-10	0	0.0	4	
c+	c4h2	c5h+	h	1.45e-09	0	0.0	4	
c+	hc5n	c5h+	cn	6.00e-09	0	0.0	4	
c2h2	c3+	c5h+	h	1.70e-09	0	0.0	4	
c2h2	c4n+	c5h+	hcn	8.00e-10	0	0.0	4	
c2h2+	c3h	c5h+	h2	1.75e-09	0	0.0	4	
c3+	hc3n	c5h+	cn	3.20e-09	0	0.0	4	
c3h+	c4h2	c5h+	c2h2	1.20e-10	0	0.0	4	
h+	c5h	c5h+	h	3.00e-09	0	0.0	4	
h+	c5h2	c5h+	h2	2.50e-09	0	0.0	4	
h3+	c5	c5h+	h2	2.00e-09	0	0.0	4	
hco+	c5	c5h+	co	2.00e-09	0	0.0	4	
he+	c5h2	c5h+	he	h	1.00e-09	0	0.0	4
he+	c7h	c5h+	c2	he	2.00e-09	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação	
n	c6h2+	c5h+	hcn	1.90e-10	0	0.0	4	
c7h+	electr	c6h	c	1.00e-06	-0.3	0.0	4	
c7h+	electr	c7	h	1.00e-06	-0.3	0.0	4	
n	c7h+	c7n+	h	2.00e-10	0	0.0	4	
o	c7h+	c6	hco+	2.00e-10	0	0.0	4	
c	c6h2+	c7h+	h	5.00e-10	0	0.0	4	
c	c6h3+	c7h+	h2	5.00e-10	0	0.0	4	
c+	c6h2	c7h+	h	1.20e-09	0	0.0	4	
c2h2+	c5h	c7h+	h2	1.75e-09	0	0.0	4	
c3h	c4h+	c7h+	h	1.50e-09	0	0.0	4	
c3h2+	c4h	c7h+	h2	5.00e-10	0	0.0	4	
c7h	photon	c7h+	electr	2.00e-10	0	2.5	4	
h+	c7h	c7h+	h	3.00e-09	0	0.0	4	
h3+	c7	c7h+	h2	2.00e-09	0	0.0	4	
hco+	c7	c7h+	co	1.40e-09	0	0.0	4	
cn	c6h2	hc7n	h	2.72e-10	-0.52	19.0	4	
hc7n	phosec	c6h	cn	1.30e-17	0	875.0	2	
hc7n	photon	c6h	cn	1.00e-09	0	1.7	5	
he+	hc7n	c6h+	cn	he	7.00e-09	0	0.0	4
hc7n+	electr	c7n	h	1.00e-06	-0.3	0.0	4	
hc7n+	electr	c6h	cn	1.00e-06	-0.3	0.0	4	
h+	hc7n	hc7n+	h	1.00e-08	0	0.0	4	
h2	c7n+	hc7n+	h	1.50e-09	0	0.0	4	
h3+	c7n	hc7n+	h2	4.00e-09	0	0.0	4	
hc7n	photon	hc7n+	electr	2.00e-10	0	2.5	5	
hco+	c7n	hc7n+	co	3.00e-09	0	0.0	4	
c2+	hcn	c3n+	h	2.60e-09	0	0.0	4	
c2h+	cn	c3n+	h	9.10e-10	0	0.0	4	
c3n+	electr	cn	c2	3.00e-07	-0.5	0.0	4	
he+	c3n	c3n+	he	8.20e-09	0	0.0	4	
n	c3h+	c3n+	h	2.70e-10	0	0.0	4	
he+	hc3n	c3n+	he	h	2.45e-09	0	0.0	4
h3+	ch2o2	h3o+	co	h2	1.80e-09	0.00	0.0	4
h3+	ch2o2	hco+	h2o	h2	4.30e-09	0.00	0.0	4
ch2o2	phosec	hco	oh	1.30e-17	0.00	0.0	2	
ch2o2	photon	hco	oh	4.10e-10	0.00	1.8	5	
oh	h2co	ch2o2	h	2.00e-13	0.00	0.0	4	
nh	ch2o2	ch3no	o	5.00e-07	0.5	0		
ch3no	phosec	ch3	no	2.00e-18	0	1000		
ch3no	phosec	ch2	hno	2.00e-18	0	1000		
ch3no	phosec	ch2	no	h	2.00e-18	0	1000	
ch3no	phosec	ch	no	h2	2.00e-18	0	1000	
ch3no	phosec	ch	hno	h	2.00e-18	0	1000	

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos			γ	α	β	Tipo de Reação
ch3no	photon	ch3	no		2.00e-12	0	1.8	
ch3no	photon	ch2	hno		2.00e-12	0	1.8	
ch3no	photon	ch2	no	h	2.00e-12	0	1.8	
ch3no	photon	ch	no	h2	2.00e-12	0	1.8	
ch3no	photon	ch	hno	h	2.00e-12	0	1.8	
ch3no	s	ch3ns	o		5.00e-07	0.5	0	
ch3ns	phosec	ch3	n	s	2.00e-18	0	1000	
ch3ns	phosec	h2cs	nh		2.00e-18	0	1000	
ch3ns	phosec	h2s	hnc		2.00e-18	0	1000	
ch3ns	phosec	sh	h2cn		2.00e-18	0	1000	
ch3ns	phosec	h2s	hnc		2.00e-18	0	1000	
ch3ns	photon	ch3	n	s	2.00e-12	0	1.8	
ch3ns	photon	h2cs	nh		2.00e-12	0	1.8	
ch3ns	photon	h2s	hnc		2.00e-12	0	1.8	
ch3ns	photon	sh	h2cn		2.00e-12	0	1.8	
ch3ns	photon	h2s	hnc		2.00e-12	0	1.8	
c2	ch3ns	c3h3ns	"photon "		5.00e-07	0.5	0	
c3h3ns	phosec	h2cs	ch	cn	1.50e-18	0	1000	
c3h3ns	phosec	h2cs	c2h	n	1.50e-18	0	1000	
c3h3ns	phosec	h2cs	c2n	h	1.50e-18	0	1000	
c3h3ns	phosec	h2s	c3h	n	1.50e-18	0	1000	
c3h3ns	phosec	h2s	c3n	h	1.50e-18	0	1000	
c3h3ns	phosec	sh	c3h2	n	1.50e-18	0	1000	
c3h3ns	phosec	sh	c3n	h2	1.50e-18	0	1000	
c3h3ns	photon	h2cs	ch	cn	1.50e-12	0	1.8	
c3h3ns	photon	h2cs	c2h	n	1.50e-12	0	1.8	
c3h3ns	photon	h2cs	c2n	h	1.50e-12	0	1.8	
c3h3ns	photon	h2s	c3h	n	1.50e-12	0	1.8	
c3h3ns	photon	h2s	c3n	h	1.50e-12	0	1.8	
c3h3ns	photon	sh	c3h2	n	1.50e-12	0	1.8	
c3h3ns	photon	sh	c3n	h2	1.50e-12	0	1.8	
c3h3ns	h	h2cs	c2h2	n	1.00e-10	0	0	
ch	nh3	ch3n	h		1.69e-10	-0.41	19	
ch3n	phosec	nh	ch2		1.30e-17	0	500	
ch3n	photon	hnc	h2		3.50e-09	0	1.6	
h+	ch3n	nh2+	ch2		1.00e-09	0	0	
h+	ch3n	nh2	ch2+		1.00e-09	0	0	
he+	ch3n	nh	ch2+	he	1.00e-09	0	0	
c2n2	ch3n	c3h3n3	photon		5.00e-07	0.5	0	
c3h3n3	phosec	hcn	hcn	hcn	1.00e-17	0	0	
c3h3n3	photon	hcn	hcn	hcn	9.00e-11	0	1.8	
ch	c3h3n3	c4h4n	n2		5.00e-07	0.50	0.0	
c4h4n	phosec	c2h2	c2h2	n	3.30e-18	0	1000	

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos			γ	α	β	Tipo de Reação
c4h4n	phosec	c3h3	hcn		3.30e-18	0	1000	
c4h4n	phosec	c3h3	hnc		3.30e-18	0	1000	
c4h4n	photon	c2h2	c2h2	n	3.30e-12	0	1.8	
c4h4n	photon	c3h3	hcn		3.30e-12	0	1.8	
c4h4n	photon	c3h3	hnc		3.30e-12	0	1.8	
ch	c4h4n	c4h5n	c		5.00e-07	0.5	0	
ch	c4h5n	c5h5n	h		4.00e-10	0	0	
c5h5n	photon	c3h3	c2h2n		4.00e-12	0	1.8	
c5h5n	photon	c2h4	hc3n		4.00e-12	0	1.8	
c5h5n	photon	c2h2	c3h3n		4.00e-12	0	1.8	
c+	c3h3n	c3h2+	hcn		9.84e-10	0	0	
c+	c3h3n	c3h3+	cn		1.80e-09	0	0	
c3h3n	phosec	c2h3	cn		1.30e-17	0	375	
c3h3n	photon	c2h3	cn		1.00e-10	0	1.7	
cn	c2h4	c3h3n	h		1.25e-10	0.7	30	
c2h4	c2h6+	c2h6	c2h4+		1.15e-09	0	0	
ch3	ch3	c2h6	photon		1.68e-24	-7	1390	
c2h6+	h2s	h2s+	c2h6		1.98e-09	0	0	
nh3	c2h6+	c2h6	nh3+		6.24e-10	0	0	
oh	c2h5	c2h6	o		1.04e-18	8.8	250	
oh+	c2h6	c2h4	h3o+		1.60e-10	0	0	
oh+	c2h6	c2h6+	oh		4.80e-11	0	0	
oh+	c2h6	c2h4+	oh	h2	1.04e-09	0	0	
c+	c2h6	c3h3+	h2	h	7.10e-10	0	0	
c+	c2h6	c2h4+	ch2		1.16e-10	0	0	
c+	c2h6	c3h2+	h2	h2	1.65e-11	0	0	
c+	c2h6	c2h3+	ch3		4.95e-10	0	0	
c+	c2h6	c2h2+	ch4		8.25e-11	0	0	
c2h2+	c2h6	c2h4+	c2h4		2.48e-10	0	0	
c2h2+	c2h6	c3h5+	ch3		7.45e-10	0	0	
c2h3+	c2h6	c3h5+	ch4		2.48e-10	0	0	
ch	c2h6	c2h4	ch3		1.63e-10	0	0	
ch3+	c2h6	c3h5+	h2	h2	1.57e-10	0	0	
c2h6	phosec	c2h4	h2		1.30e-17	0	1881	
c2h6	phosec	c2h6+	electr		1.30e-17	0	389	
cn	c2h6	c2h5	hcn		4.80e-12	2.08	-484	
h+	c2h6	c2h4+	h2	h	1.40e-09	0	0	
h+	c2h6	c2h3+	h2	h2	2.80e-09	0	0	
h2+	c2h6	c2h6+	h2		2.94e-10	0	0	
h2+	c2h6	c2h4+	h2	h2	2.35e-09	0	0	
h2o+	c2h6	c2h4+	h2o	h2	1.92e-10	0	0	
h2o+	c2h6	c2h6+	h2o		6.40e-11	0	0	
h2o+	c2h6	c2h5	h3o+		1.33e-09	0	0	

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação		
he+	c2h6	c2h2+	he	h2	h2	8.40e-10	0	0	
he+	c2h6	c2h4+	he	h2		4.20e-10	0	0	
he+	c2h6	c2h3+	he	h2	h	1.80e-09	0	0	
c2h2	c2h6+	c3h5+	ch3			9.10e-10	0	0	
c2h6+	electr	c2h4	h2			1.50e-07	-0.5	0	
c2h6+	electr	c2h5	h			1.50e-07	-0.5	0	
c2h6+	h2s	h3s+	c2h5			8.90e-10	0	0	
h2o	c2h6+	c2h5	h3o+			2.95e-09	0	0	
h3+	c2h5	c2h6+	h2			1.40e-09	0	0	
hco+	c2h5	c2h6+	co			1.40e-09	0	0	
nh3	c2h6+	c2h5	nh4+			1.40e-09	0	0	
c3n	c2h6	c5h5n	h			4.00e-10	0	0	
h3+	o2	o2h+	h2			5.00e-09	0	150.0	4
h2+	o2	o2h+	h			1.90e-09	0	0.0	4
o2h+	h2	h3+	o2			6.40e-10	0	0.0	4
o2h+	electr	o2	h			3.00e-07	-0.5	0.0	4
o2h+	ch4	ch5+	o2			1.00e-09	0	0.0	4
o2h+	nh3	nh4+	o2			1.80e-09	0	0.0	4
o2h+	n2	n2h+	o2			8.00e-10	0	0.0	4
o2h+	no	hno+	o2			7.00e-10	0	0.0	4
o2h+	c	ch+	o2			1.00e-09	0	0.0	4
o2h+	o	oh+	o2			6.20e-10	0	0.0	4
o2h+	n	nh+	o2			6.40e-12	0	0.0	4
o2h+	s	sh+	o2			1.10e-09	0	0.0	4
o2h+	ch	ch2+	o2			6.20e-10	0	0.0	4
o2h+	ch2	ch3+	o2			8.50e-10	0	0.0	4
o2h+	nh	nh2+	o2			6.30e-10	0	0.0	4
o2h+	nh2	nh3+	o2			8.70e-10	0	0.0	4
o2h+	oh	h2o+	o2			6.10e-10	0	0.0	4
o2h+	h2o	h3o+	o2			8.20e-10	0	0.0	4
o2h+	c2	c2h+	o2			8.10e-10	0	0.0	4
o2h+	c2h	c2h2+	o2			7.60e-10	0	0.0	4
o2h+	cn	hcn+	o2			8.60e-10	0	0.0	4
o2h+	hcn	hcnh+	o2			9.70e-10	0	0.0	4
o2h+	hnc	hcnh+	o2			9.70e-10	0	0.0	4
o2h+	co	hco+	o2			8.40e-10	0	0.0	4
o2h+	co2	hco2+	o2			1.10e-09	0	0.0	4
n	crp	n+	electr			2.10e+00	0	0.0	1
n2	phosec	n	n			5.00e+00	0	0.0	2
cn	phosec	c	n			1.06e+04	0	0.0	2
nh	phosec	n	h			5.00e+02	0	0.0	2
nh2	phosec	nh	h			8.00e+01	0	0.0	2
nh2	phosec	nh2+	electr			6.50e+02	0	0.0	2

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
nh3	phosec	nh	h2	5.40e+02	0	0.0	2
nh3	phosec	nh2	h	1.32e+03	0	0.0	2
nh3	phosec	nh3+	electr	5.75e+02	0	0.0	2
no	phosec	n	o	4.82e+02	0	0.0	2
no	phosec	no+	electr	4.94e+02	0	0.0	2
hcn	phosec	cn	h	3.12e+03	0	0.0	2
hnc	phosec	cn	h	3.00e+03	0	0.0	2
n	h2	nh	h	8.66e-10	0.5	14600.0	4
nh	h2	nh2	h	5.25e-12	0.79	6700.0	4
nh	h	n	h2	8.66e-10	0.5	2400.0	4
nh	c	cn	h	1.10e-10	0.5	0.0	4
nh	o	oh	n	2.90e-11	0.5	0.0	4
nh	n	n2	h	9.20e-11	0	0.0	4
nh2	h	nh	h2	5.25e-12	0.79	2200.0	4
nh2	h2	nh3	h	6.22e-11	0.5	6300.0	4
nh2	o	nh	oh	3.50e-12	0.5	0.0	4
nh3	h	nh2	h2	6.22e-11	0.5	5700.0	4
nh3	o	nh2	oh	2.50e-12	0	3020.0	4
nh3	oh	nh2	h2o	2.30e-12	0	800.0	4
cn	h2	hcn	h	3.53e-13	3.31	756.0	4
cn	o	co	n	1.80e-11	0.5	50.0	4
cn	o2	no	co	2.49e-11	-0.63	0.0	4
cn	n	n2	c	7.30e-10	0	4500.0	4
cn	nh3	nh2	hcn	2.77e-11	-1.1	0.0	4
ch	n	cn	h	2.10e-11	0	0.0	4
oh	n	no	h	5.30e-11	0	50.0	4
o2	n	no	o	3.30e-12	1	3150.0	4
no	c	cn	o	1.10e-10	0.5	0.0	4
no	n	n2	o	3.40e-11	0	50.0	4
no	o	o2	n	7.50e-13	1	16000.0	4
hnc	h	hcn	h	1.00e-10	0.5	200.0	4
hnc	o	co	nh	2.00e-10	0.5	200.0	4
hnc	oh	h2o	cn	2.00e-10	0.5	200.0	4
hnc	o2	co2	nh	2.00e-11	0.5	2000.0	4
nh2	c	hnc	h	2.00e-11	0.5	0.0	4
ch2	n	hcn	h	2.00e-11	0.5	0.0	4
ch3	n	hcn	h2	2.00e-11	0.5	0.0	4
ch5+	hnc	c2h3+	nh3	1.00e-09	0	0.0	4
ch5+	hcn	c2h3+	nh3	1.00e-09	0	5120.0	4
n+	h2	nh+	h	8.40e-10	0	168.5	101
nh+	h2	nh2+	h	1.27e-09	0	0.0	4
nh+	h2	h3+	n	2.25e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
nh2+	h2	nh3+	h	2.70e-10	0	0.0	4
nh3+	h2	nh4+	h	2.40e-12	0	0.0	4
nh+	h	n+	h2	6.52e-10	0	0.0	4
nh2+	h	nh+	h2	1.27e-09	0	24000.0	4
nh3+	h	nh2+	h2	2.25e-10	0	12800.0	4
nh4+	h	nh3+	h2	1.00e-09	0	11000.0	4
cn+	h2	hcn+	h	5.00e-10	0	0.0	4
cn+	h2	hnc+	h	5.00e-10	0	0.0	4
cn+	n	n2+	c	0.61e-09	0	0.0	4
hcn+	h	cn+	h2	1.00e-09	0	15800.0	4
hnc+	h	cn+	h2	1.00e-09	0	15800.0	4
hcn+	h2	hcnh+	h	9.80e-10	0	0.0	4
hcn+	n	ch+	n2	0.22e-09	0	0.0	4
hnc+	h2	hcnh+	h	4.90e-10	0	0.0	4
hnc+	h2	h2nc+	h	4.90e-10	0	0.0	4
hcnh+	h	hcn+	h2	9.80e-10	0	34400.0	4
hcnh+	h	hnc+	h2	4.90e-10	0	29400.0	4
h2nc+	h	hnc+	h2	4.90e-10	0	29400.0	4
c2n+	h2	hcnh+	c	8.10e-10	0	0.0	4
n2+	h2	n2h+	h	2.00e-09	0.24	0.0	4
n2h+	h	n2+	h2	2.10e-09	0	30300.0	4
n2h+	h2	h3+	n2	1.80e-09	0	8300.0	4
h+	hnc	h+	hcn	2.51e-08	-0.5	0.0	4
h+	hcn	h+	hnc	1.00e-09	0	7850.0	4
h+	nh	nh+	h	1.20e-08	-0.5	0.0	4
h+	nh2	nh2+	h	7.30e-09	-0.5	0.0	4
h+	nh3	nh3+	h	5.80e-09	-0.5	0.0	4
h+	cn	cn+	h	2.10e-09	0	6150.0	4
h+	hcn	hcn+	h	2.78e-08	-0.5	0.0	4
h+	hcn	hnc+	h	0.55D-08	0	0.0	4
h+	hnc	hnc+	h	0.11D-07	0	22.0	4
h+	no	no+	h	1.40e-09	-0.5	0.0	4
h2+	n	nh+	h	1.90e-09	0	0.0	4
h2+	n2	n2h+	h	2.00e-09	0	0.0	4
h2+	nh	nh+	h2	7.60e-10	0	0.0	4
h2+	nh	nh2+	h	7.60e-10	0	0.0	4
h2+	nh2	nh2+	h2	2.10e-09	0	0.0	4
h2+	nh3	nh3+	h2	5.70e-09	0	0.0	4
h2+	cn	cn+	h2	1.20e-09	0	0.0	4
h2+	cn	hcn+	h	1.20e-09	0	0.0	4
h2+	cn	hnc+	h	1.20e-09	0	0.0	4
h2+	hcn	hcn+	h2	2.70e-09	0	0.0	4
h2+	hnc	hnc+	h2	2.70e-09	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação	
h2+	no	no+	h2	1.10e-09	0	0.0	4	
h2+	no	hno+	h	1.10e-09	0	0.0	4	
he+	nh	n+	h	he	1.10e-09	0	0.0	4
he+	nh2	nh+	h	he	8.00e-10	0	0.0	4
he+	nh2	n+	h2	he	8.00e-10	0	0.0	4
he+	nh3	nh3+	he		2.64e-10	0	0.0	4
he+	nh3	nh2+	h	he	1.76e-09	0	0.0	4
he+	nh3	nh+	h2	he	1.76e-10	0	0.0	4
he+	cn	c+	n	he	8.80e-10	0	0.0	4
he+	cn	n+	c	he	8.80e-10	0	0.0	4
he+	hcn	cn+	h	he	1.46e-09	0	0.0	4
he+	hcn	ch+	n	he	6.20e-10	0	0.0	4
he+	hcn	c+	nh	he	7.75e-10	0	0.0	4
he+	hcn	n+	ch	he	2.48e-10	0	0.0	4
he+	hnc	cn+	h	he	1.55e-09	0	0.0	4
he+	hnc	c+	nh	he	1.55e-09	0	0.0	4
he+	n2	n+	n	he	7.92e-10	0	0.0	4
he+	n2	n2+	he		4.08e-10	0	0.0	4
he+	no	n+	o	he	1.38e-09	0	0.0	4
he+	no	o+	n	he	2.24e-10	0	0.0	4
h3+	n	nh2+	h		4.50e-20	0	0.0	4
h3+	nh	nh2+	h2		7.50e-09	-0.5	0.0	4
h3+	nh2	nh3+	h2		4.50e-09	-0.5	0.0	4
h3+	nh3	nh4+	h2		3.60e-09	-0.5	0.0	4
h3+	cn	hcn+	h2		8.10e-09	-0.5	0.0	4
h3+	cn	hnc+	h2		8.10e-09	-0.5	0.0	4
h3+	cn	hcnh+	h		1.00e-09	0	0.0	4
h3+	hcn	hcnh+	h2		1.70e-08	-0.5	0.0	4
h3+	hnc	hcnh+	h2		1.50e-08	-0.5	0.0	4
h3+	cn	h2nc+	h		0.10D-08	0	0.0	4
h3+	hnc	h2nc+	h2		0.47D-08	0	0.0	4
h3+	n2	n2h+	h2		1.63e-09	0	0.0	4
h3+	no	hno+	h2		8.50e-10	-0.5	0.0	4
o+	cn	no+	c		1.00e-09	0	0.0	4
o+	n2	no+	n		1.20e-12	0	0.0	4
o+	nh	nh+	o		3.60e-10	0	0.0	4
o+	nh	no+	h		3.60e-10	0	0.0	4
o+	nh2	nh2+	o		1.00e-09	0	0.0	4
o+	hcn	co+	nh		1.20e-09	0	0.0	4
o+	hcn	no+	ch		1.20e-09	0	0.0	4
o+	hcn	hco+	n		1.20e-09	0	0.0	4
o+	hnc	co+	nh		1.20e-09	0	0.0	4
o+	hnc	no+	ch		1.20e-09	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
o+	hnc	hoc+	n	1.20e-09	0	0.0	4
o+	nh3	nh3+	o	1.20e-09	0	0.0	4
oh+	n	no+	h	8.90e-10	0	0.0	4
oh+	cn	hcn+	o	1.00e-09	0	0.0	4
oh+	nh	nh2+	o	3.60e-10	0	0.0	4
oh+	no	no+	oh	3.60e-10	0	0.0	4
oh+	no	hno+	o	6.10e-10	0	0.0	4
oh+	hcn	hcnh+	o	1.20e-09	0	0.0	4
oh+	hnc	hcnh+	o	1.20e-09	0	0.0	4
oh+	nh2	nh2+	oh	5.00e-10	0	0.0	4
oh+	nh2	nh3+	o	5.00e-10	0	0.0	4
oh+	nh3	nh3+	oh	1.20e-09	0	0.0	4
oh+	nh3	nh4+	o	1.20e-09	0	0.0	4
h2o+	n	hno+	h	1.90e-10	0	0.0	4
h2o+	nh	h3o+	n	7.10e-10	0	0.0	4
h2o+	no	no+	h2o	1.20e-09	0	0.0	4
h2o+	hcn	hcnh+	oh	2.10e-09	0	0.0	4
h2o+	hnc	hcnh+	oh	1.10e-09	0	0.0	4
h2o+	nh2	nh2+	h2o	4.90e-10	0	0.0	4
h2o+	nh2	nh3+	oh	4.90e-10	0	0.0	4
h2o+	nh3	nh3+	h2o	2.20e-09	0	0.0	4
h2o+	nh3	nh4+	oh	9.00e-10	0	0.0	4
h3o+	nh3	nh4+	h2o	2.20e-09	0	0.0	4
h3o+	cn	hcnh+	oh	4.50e-09	0	0.0	4
h3o+	hcn	hcnh+	h2o	4.50e-09	0	0.0	4
h3o+	hnc	hcnh+	h2o	2.25e-09	0	0.0	4
h3o+	hnc	h2nc+	h2o	2.25e-09	0	0.0	4
c+	nh	cn+	h	4.60e-09	-0.5	0.0	4
c+	nh2	hcn+	h	2.70e-09	-0.5	0.0	4
c+	nh2	hnc+	h	2.70e-09	-0.5	0.0	4
c+	nh3	nh3+	c	5.29e-10	0	0.0	4
c+	nh3	h2nc+	h	7.80e-10	0	0.0	4
c+	nh3	hcnh+	h	7.80e-10	0	0.0	4
c+	nh3	hcn+	h2	1.04e-10	0	0.0	4
c+	nh3	hnc+	h2	1.04e-10	0	0.0	4
c+	hcn	c2n+	h	4.75e-09	-0.5	0.0	4
c+	hnc	c2n+	h	4.75e-09	-0.5	0.0	4
c+	no	no+	c	4.80e-10	-0.5	0.0	4
c+	no	n+	co	0.90D-09	0	0.0	4
o2+	n	no+	o	7.84e-11	0	0.0	4
o2+	nh2	nh2+	o2	8.70e-10	0	0.0	4
o2+	nh3	nh3+	o2	2.00e-09	0	0.0	4
o2+	no	no+	o2	4.40e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
co+	n	no+	c	8.10e-11	0	0.0	4
co+	nh	nh+	co	3.20e-10	0	0.0	4
co+	nh	hco+	n	3.20e-10	0	0.0	4
co+	no	no+	co	3.30e-10	0	0.0	4
co+	hcn	hcn+	co	3.40e-10	0	0.0	4
co+	nh2	hco+	nh	4.50e-10	0	0.0	4
co+	nh2	nh2+	co	4.50e-10	0	0.0	4
co+	nh3	hco+	nh2	4.12e-11	0	0.0	4
co+	nh3	nh3+	co	2.02e-09	0	0.0	4
hco+	n2	n2h+	co	8.80e-10	0	11200.0	4
hco+	nh	nh2+	co	6.40e-10	0	0.0	4
hco+	nh2	nh3+	co	8.90e-10	0	0.0	4
hco+	nh3	nh4+	co	1.90e-09	0	0.0	4
hco+	hcn	hcnh+	co	3.70e-09	0	0.0	4
hco+	hnc	hcnh+	co	3.70e-09	0	0.0	4
hco+	hnc	h2nc+	co	0.19D-08	0	0.0	4
hoc+	n2	n2h+	co	2.00e-09	0	0.0	4
hco2+	no	hno+	co2	1.00e-10	0	0.0	4
hco2+	n2	n2h+	co2	1.40e-09	0	6400.0	4
h3co+	hnc	hcnh+	h2co	6.52e-09	-0.5	0.0	4
h3co+	hnc	h2nc+	h2co	6.52e-09	-0.5	0.0	4
h3co+	nh2	nh3+	h2co	2.20e-09	-0.5	0.0	4
h3co+	nh3	nh4+	h2co	1.70e-09	-0.5	0.0	4
ch+	n	cn+	h	1.90e-10	0	0.0	4
ch+	cn	c2n+	h	1.10e-09	0	0.0	4
ch+	nh	cn+	h2	7.60e-10	0	0.0	4
ch+	no	no+	ch	7.60e-10	0	0.0	4
ch+	hcn	hcnh+	c	2.40e-09	0	0.0	4
ch+	hnc	hcnh+	c	1.80e-09	0	0.0	4
ch+	nh2	hcn+	h2	1.10e-09	0	0.0	4
ch+	nh3	nh3+	ch	4.59e-10	0	0.0	4
ch+	nh3	nh4+	c	4.05e-10	0	0.0	4
ch2+	n	hcn+	h	4.70e-10	0	0.0	4
ch2+	n	hnc+	h	4.70e-10	0	0.0	4
ch2+	nh	hcnh+	h	7.50e-10	0	0.0	4
ch2+	no	no+	ch2	4.20e-10	0	0.0	4
ch2+	nh2	hcnh+	h2	1.00e-09	0	0.0	4
ch2+	nh3	nh4+	ch	1.30e-09	0	0.0	4
ch3+	n	hcn+	h2	3.35e-11	0	0.0	4
ch3+	n	hnc+	h2	3.35e-11	0	0.0	4
ch3+	n	hcnh+	h	6.70e-11	0	0.0	4
ch3+	n	h2nc+	h	0.22D-10	0	0.0	4
ch4+	nh3	nh3+	ch4	6.90e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação	
ch4+	nh3	nh4+	ch3	6.60e-10	0	0.0	4	
ch4+	nh3	ch5+	nh2	3.00e-11	0	0.0	4	
c2+	nh	c2h+	n	3.30e-10	0	0.0	4	
c2+	nh2	nh2+	c2	4.60e-10	0	0.0	4	
c2+	no	no+	c2	3.40e-10	0	0.0	4	
c2+	hcn	c3h+	n	7.80e-10	0	0.0	4	
c2h+	n	ch+	cn	9.00e-11	0	0.0	4	
c2h+	n	c2n+	h	8.30e-10	0	0.0	4	
c2h+	no	no+	c2h	1.20e-10	0	0.0	4	
c2h+	hcn	c2h2+	cn	1.40e-09	0	0.0	4	
c2h+	hcn	hcnh+	c2	9.50e-10	0	0.0	4	
c2h+	hnc	hcnh+	c2	1.40e-09	0	0.0	4	
c2h+	nh2	nh3+	c2	4.60e-10	0	0.0	4	
c2h+	nh3	nh4+	c2	5.50e-10	0	0.0	4	
c2h2+	n	ch+	hnc	2.50e-11	0	2600.0	4	
c2h2+	n	ch+	hcn	2.50e-11	0	0.0	4	
c2h2+	n	c2n+	h2	7.50e-11	0	0.0	4	
c2h2+	no	no+	c2h2	3.80e-10	-0.5	0.0	4	
c2h2+	nh2	nh3+	c2h	1.10e-09	-0.5	0.0	4	
c2h2+	nh3	nh3+	c2h2	1.20e-09	-0.5	0.0	4	
c2h2+	nh3	nh4+	c2h	5.50e-10	-0.5	0.0	4	
c3h+	no	no+	c3h	1.73e-10	-0.5	0.0	4	
c3h+	nh3	nh3+	c3h	5.78e-10	-0.5	0.0	4	
c3h+	nh3	nh4+	c3	5.57e-10	-0.5	0.0	4	
n+	ch	ch+	n	3.60e-10	0	0.0	4	
n+	ch	cn+	h	3.60e-10	0	0.0	4	
n+	ch4	hcn+	h2	h	5.60e-11	0	0.0	4
n+	ch4	hnc+	h2	h	0.57D-10	0	0.0	4
n+	ch4	ch3+	n	h	4.70e-10	0	0.0	4
n+	ch4	ch3+	nh		4.70e-10	0	0.0	4
n+	ch4	hcnh+	h	h	3.80e-10	0	0.0	4
n+	ch4	hcnh+	h2		3.80e-10	0	0.0	4
n+	ch4	ch4+	n		2.80e-11	0	0.0	4
n+	o2	o2+	n		2.81e-10	0	0.0	4
n+	o2	no+	o		2.37e-10	0	0.0	4
n+	o2	o+	no		3.30e-11	0	0.0	4
n+	co	c+	no		9.02e-10	0	15400.0	4
n+	co	co+	n		8.25e-10	0	0.0	4
n+	co	no+	c		1.46e-10	0	0.0	4
n+	h2co	no+	ch2		2.90e-10	0	0.0	4
n+	h2co	hco+	nh		7.30e-10	0	0.0	4
n+	h2co	h2co+	n		1.90e-09	0	0.0	4
n+	no	no+	n		4.51e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
n+	no	n2+	o	7.95e-11	0	0.0	4
n+	cn	cn+	n	1.10e-09	0	0.0	4
n+	hcn	hcn+	n	1.20e-09	0	0.0	4
n+	hcn	ch+	n2	0.13D-08	0	0.0	4
n+	nh	n2+	h	3.70e-10	0	0.0	4
n+	nh	nh+	n	3.70e-10	0	0.0	4
n+	nh2	nh2+	n	1.00e-09	0	0.0	4
n+	nh3	n2h+	h2	2.20e-10	0	0.0	4
n+	nh3	nh2+	nh	2.20e-10	0	0.0	4
n+	nh3	nh3+	n	2.00e-09	0	0.0	4
n+	oh	oh+	n	3.70e-10	0	0.0	4
n+	c2h	c2h+	n	9.50e-10	0	0.0	4
n+	ch2	ch2+	n	1.00e-09	0	0.0	4
n+	co2	co+	no	2.50e-10	0	0.0	4
n+	h2o	h2o+	n	2.60e-09	0	0.0	4
nh+	c	ch+	n	1.60e-09	0	0.0	4
nh+	n	n2+	h	1.30e-09	0	0.0	4
nh+	o	oh+	n	1.00e-09	0	0.0	4
nh+	c2	c2h+	n	4.90e-10	0	0.0	4
nh+	c2	c2n+	h	4.90e-10	0	0.0	4
nh+	c2	hcn+	c	4.90e-10	0	0.0	4
nh+	ch	ch2+	n	9.90e-10	0	0.0	4
nh+	cn	hcn+	n	1.60e-09	0	0.0	4
nh+	co	hco+	n	1.60e-09	0	0.0	4
nh+	n2	n2h+	n	1.50e-09	0	0.0	4
nh+	nh	nh2+	n	1.00e-09	0	0.0	4
nh+	no	no+	nh	7.10e-10	0	0.0	4
nh+	no	n2h+	o	1.78e-10	0	0.0	4
nh+	o2	no+	oh	2.00e-10	0	0.0	4
nh+	o2	o2+	nh	4.50e-10	0	0.0	4
nh+	oh	h2o+	n	1.00e-09	0	0.0	4
nh+	c2h	c2h2+	n	1.40e-09	0	0.0	4
nh+	ch2	ch3+	n	1.40e-09	0	0.0	4
nh+	co2	hno+	co	3.85e-10	0	0.0	4
nh+	co2	hco2+	n	3.90e-10	0	0.0	4
nh+	h2o	h2o+	nh	1.05e-09	0	0.0	4
nh+	h2o	hno+	h2	3.50e-10	0	0.0	4
nh+	h2o	nh2+	oh	8.75e-10	0	0.0	4
nh+	h2o	h3o+	n	2.10e-09	0	0.0	4
nh+	h2o	nh3+	o	1.75e-10	0	0.0	4
nh+	hcn	hcnh+	n	1.80e-09	0	0.0	4
nh+	hnc	hcnh+	n	1.80e-09	0	0.0	4
nh+	nh2	nh3+	n	1.50e-09	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
nh+	nh3	nh3+	nh	1.80e-09	0	0.0	4
nh+	nh3	nh4+	n	6.00e-10	0	0.0	4
nh2+	co	hco+	nh	6.40e-10	0	6100.0	4
nh2+	n	n2h+	h	9.10e-11	0	0.0	4
nh2+	c2	c2h+	nh	9.70e-10	0	0.0	4
nh2+	ch	ch+	nh2	3.50e-10	0	0.0	4
nh2+	ch	ch2+	nh	3.50e-10	0	0.0	4
nh2+	cn	hcnh+	n	1.00e-10	0	0.0	4
nh2+	cn	h2nc+	n	1.00e-10	0	0.0	4
nh2+	nh	nh3+	n	7.30e-10	0	0.0	4
nh2+	no	no+	nh2	9.40e-10	0	0.0	4
nh2+	c2h	c2h2+	nh	9.10e-10	0	0.0	4
nh2+	ch2	ch2+	nh2	4.90e-10	0	0.0	4
nh2+	ch2	ch3+	nh	4.90e-10	0	0.0	4
nh2+	h2o	h3o+	nh	1.60e-09	0	0.0	4
nh2+	h2o	nh3+	oh	1.00e-10	0	0.0	4
nh2+	h2o	nh4+	o	3.00e-11	0	0.0	4
nh2+	hcn	hcnh+	nh	1.20e-09	0	0.0	4
nh2+	hnc	hcnh+	nh	1.20e-09	0	0.0	4
nh2+	nh2	nh3+	nh	1.00e-09	0	0.0	4
nh2+	nh3	nh3+	nh2	1.50e-09	0	0.0	4
nh2+	nh3	nh4+	nh	1.00e-09	0	0.0	4
nh3+	h2o	nh4+	oh	2.50e-10	0	0.0	4
nh3+	nh3	nh4+	nh2	0.21D-08	-0.5	0.0	4
nh4+	oh	nh3+	h2o	2.50e-10	0	3400.0	4
nh4+	n2	n2h+	nh3	2.30e-09	0	44000.0	4
n2+	n	n+	n2	1.00e-11	0	0.0	4
n2+	o	o+	n2	1.00e-11	0	0.0	4
n2+	o	no+	n	1.40e-10	0	0.0	4
n2+	c2	c2+	n2	8.40e-10	0	0.0	4
n2+	ch	ch+	n2	6.30e-10	0	0.0	4
n2+	cn	cn+	n2	1.00e-10	0	0.0	4
n2+	co	co+	n2	7.00e-11	0	0.0	4
n2+	nh	nh+	n2	6.50e-10	0	0.0	4
n2+	no	no+	n2	4.40e-10	0	0.0	4
n2+	o2	o2+	n2	5.00e-11	0	0.0	4
n2+	oh	oh+	n2	6.30e-10	0	0.0	4
n2+	c2h	c2h+	n2	7.90e-10	0	0.0	4
n2+	ch2	ch2+	n2	8.70e-10	0	0.0	4
n2+	h2o	h2o+	n2	2.20e-09	0	0.0	4
n2+	h2o	n2h+	oh	2.00e-09	0	0.0	4
n2+	hcn	hcn+	n2	1.00e-09	0	0.0	4
n2+	nh2	nh2+	n2	8.90e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
n2+	nh3	nh3+	n2	1.90e-09	0	0.0	4
n2+	ch4	ch2+	h2	7.00e-11	0	0.0	4
n2+	ch4	ch3+	n2	9.30e-10	0	0.0	4
n2h+	c	ch+	n2	1.10e-09	0	0.0	4
n2h+	ch	ch2+	n2	4.50e-09	-0.5	0.0	4
n2h+	ch2	ch3+	n2	0.72D-09	-0.5	0.0	4
n2h+	ch4	ch5+	n2	9.00e-10	0	0.0	4
n2h+	c2	c2h+	n2	8.30e-10	0	0.0	4
n2h+	c2h	c2h2+	n2	0.20D-08	-0.5	0.0	4
n2h+	c2h2	c2h3+	n2	1.40e-09	0	0.0	4
n2h+	nh	nh2+	n2	3.80e-09	-0.5	0.0	4
n2h+	hcn	hcnh+	n2	7.30e-09	-0.5	0.0	4
n2h+	hnc	hcnh+	n2	6.63e-09	-0.5	0.0	4
n2h+	hnc	h2nc+	n2	0.66D-08	-0.5	0.0	4
n2h+	nh2	nh3+	n2	2.20e-09	-0.5	0.0	4
n2h+	o	oh+	n2	1.40e-10	0	3400.0	4
n2h+	oh	h2o+	n2	0.47D-08	-0.5	0.0	4
n2h+	h2o	h3o+	n2	2.60e-09	0	0.0	4
n2h+	co	hco+	n2	8.80e-10	0	0.0	4
n2h+	h2co	h3co+	n2	2.40e-09	-0.5	0.0	4
n2h+	co2	hco2+	n2	1.40e-09	0	0.0	4
n2h+	nh3	nh4+	n2	2.30e-09	0	0.0	4
n2h+	no	hno+	n2	3.40e-10	0	0.0	4
cn+	c	c+	cn	1.10e-10	0	0.0	4
cn+	h	h+	cn	6.40e-10	0	0.0	4
cn+	o	o+	cn	6.50e-11	0	0.0	4
cn+	c2	c2+	cn	8.50e-10	0	0.0	4
cn+	ch	ch+	cn	6.40e-10	0	0.0	4
cn+	co	co+	cn	6.30e-10	0	0.0	4
cn+	nh	nh+	cn	6.50e-10	0	0.0	4
cn+	no	no+	cn	8.10e-10	0	0.0	4
cn+	o2	no+	co	8.60e-11	0	0.0	4
cn+	o2	o2+	cn	7.80e-10	0	0.0	4
cn+	h2o	hcn+	oh	1.60e-09	0	0.0	4
cn+	h2o	hco+	nh	1.60e-10	0	0.0	4
cn+	h2o	h2nc+	o	4.80e-10	0	0.0	4
cn+	hcn	hcn+	cn	2.40e-09	0	0.0	4
cn+	nh2	nh2+	cn	9.10e-10	0	0.0	4
hcn+	c	ch+	cn	1.10e-09	0	0.0	4
hcn+	h	h+	hcn	3.70e-11	0	0.0	4
hcn+	o	o+	hcn	6.50e-11	0	0.0	4
hcn+	c2	c2h+	cn	8.40e-10	0	0.0	4
hcn+	ch	ch2+	cn	6.30e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
hcn+	co	hco+	cn	1.40e-10	0	0.0	4
hcn+	nh	nh2+	cn	6.50e-10	0	0.0	4
hcn+	no	no+	hcn	8.10e-10	0	0.0	4
hcn+	o2	o2+	hcn	3.20e-10	0	0.0	4
hcn+	oh	h2o+	cn	6.30e-10	0	0.0	4
hcn+	c2h	c2h2+	cn	7.90e-10	0	0.0	4
hcn+	ch2	ch3+	cn	8.70e-10	0	0.0	4
hcn+	co2	hco2+	cn	2.10e-10	0	0.0	4
hcn+	h2o	h2o+	hcn	1.80e-09	0	0.0	4
hcn+	h2o	h3o+	cn	8.50e-10	0	0.0	4
hcn+	hcn	hcnh+	cn	1.60e-09	0	0.0	4
hcn+	hnc	hcnh+	cn	1.00e-09	0	0.0	4
hcn+	nh2	nh3+	cn	9.00e-10	0	0.0	4
hcn+	nh3	hcnh+	nh2	8.40e-10	0	0.0	4
hcn+	nh3	nh3+	hcn	1.70e-09	0	0.0	4
hcn+	ch4	hcnh+	ch3	1.04e-09	0	0.0	4
hcn+	ch4	c2h3+	nh2	2.60e-10	0	0.0	4
hnc+	c	ch+	cn	1.10e-09	0	0.0	4
hnc+	c2	c2h+	cn	8.40e-10	0	0.0	4
hnc+	ch	ch2+	cn	6.30e-10	0	0.0	4
hnc+	nh	nh2+	cn	6.50e-10	0	0.0	4
hnc+	no	no+	hnc	8.10e-10	0	0.0	4
hnc+	oh	h2o+	cn	6.30e-10	0	0.0	4
hnc+	c2h	c2h2+	cn	7.90e-10	0	0.0	4
hnc+	ch2	ch3+	cn	8.70e-10	0	0.0	4
hnc+	h2o	h3o+	cn	8.50e-10	0	0.0	4
hnc+	hcn	hcnh+	cn	1.60e-09	0	0.0	4
hnc+	nh2	nh3+	cn	9.00e-10	0	0.0	4
hnc+	nh3	nh3+	hnc	1.70e-09	0	0.0	4
hcnh+	h2o	h3o+	hcn	4.50e-09	0	2460.0	4
hcnh+	h2o	h3o+	hnc	4.50e-09	0	10300.0	4
hcnh+	h2co	h3co+	hcn	2.37e-09	-0.5	0.0	4
hcnh+	nh3	nh4+	hcn	0.88D-09	-0.5	0.0	4
hcnh+	nh3	nh4+	hnc	0.88D-09	-0.5	0.0	4
c2n+	ch4	c2h3+	hcn	4.20e-10	0	0.0	4
c2n+	h2o	hco+	hcn	1.50e-09	0	0.0	4
c2n+	h2o	hcnh+	co	1.30e-10	0	0.0	4
c2n+	c2h2	c3h+	hcn	1.50e-09	0	0.0	4
c2n+	c2h2	hcnh+	c3	1.30e-10	0	0.0	4
c2n+	nh3	n2h+	c2h2	1.90e-10	0	0.0	4
c2n+	nh3	h2nc+	hcn	0.43D-09	0	0.0	4
c2n+	nh3	hcnh+	hcn	1.70e-09	0	0.0	4
c2n+	nh3	hcnh+	hnc	0.43D-09	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
c2n+	nh3	h2nc+	hnc	0.43D-09	0	0.0	4
hno+	c	ch+	no	1.00e-09	0	0.0	4
hno+	co	hco+	no	1.00e-10	0	0.0	4
hno+	co2	hco2+	no	1.00e-10	0	0.0	4
hno+	oh	h2o+	no	6.20e-10	0	0.0	4
hno+	h2o	h3o+	no	2.30e-09	0	0.0	4
hno+	h2co	h3co+	no	2.30e-09	-0.5	0.0	4
n+	fe	fe+	n	1.50e-09	0	0.0	4
nh3+	fe	fe+	nh3	2.30e-09	0	0.0	4
n2+	fe	fe+	n2	4.30e-10	0	0.0	4
no+	fe	fe+	no	1.00e-09	0	0.0	4
c	n	cn	photon	1.00e-17	0	0.0	3
s	phosec	s+	electr	1.00e+03	0	0.0	2
sh	phosec	h	s	5.00e+02	0	0.0	2
cs	phosec	c	s	5.00e+02	0	0.0	2
so	phosec	s	o	5.00e+02	0	0.0	2
ocs	phosec	co	s	5.37e+03	0	0.0	2
h2s	phosec	sh	h	5.07e+03	0	0.0	2
h2s	phosec	h2s+	electr	1.55e+03	0	0.0	2
so2	phosec	so	o	2.00e+03	0	0.0	2
h2cs	phosec	h2	cs	1.50e+03	0	0.0	2
s	h2	sh	h	1.04e-10	0.132	9620.0	4
sh	h2	h2s	h	6.41e-12	0.087	8050.0	4
sh	h	s	h2	2.50e-11	0	0.0	4
h2s	h	sh	h2	1.29e-11	0	860.0	4
so	h	oh	s	5.90e-10	-0.31	11100.0	4
so2	h	so	oh	9.25e-09	-0.74	14700.0	4
ocs	h	sh	co	1.70e-11	0	2000.0	4
sh	o	so	h	1.60e-10	0	100.0	4
sh	o	oh	s	1.70e-11	0.67	950.0	4
h2s	o	sh	oh	1.40e-11	0	1920.0	4
h2s	oh	sh	h2o	6.30e-12	0	80.0	4
cs	o	co	s	2.70e-10	0	760.0	4
cs	oh	ocs	h	1.55e-13	1.12	800.0	4
s	o2	so	o	5.19e-12	0	265.0	4
s	ch3	h2cs	h	1.40e-10	0	0.0	4
so	o	s	o2	6.60e-13	0	2760.0	4
so	o2	so2	o	1.40e-12	0	2820.0	4
so	oh	so2	h	1.96e-10	-0.17	0.0	4
so	n	no	s	1.73e-11	0.5	750.0	4
so	c	co	s	7.20e-11	0	0.0	4
so	c	cs	o	1.70e-10	0	0.0	4
so2	o	so	o2	9.27e-11	-0.46	9140.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação	
ocs	o	so	co	2.60e-11	0	2250.0	4	
ch	s	cs	h	1.10e-12	0	0.0	4	
ch	s	sh	c	1.73e-11	0.5	4000.0	4	
oh	s	so	h	1.00e-10	0	100.0	4	
sh	c	cs	h	2.00e-11	0	0.0	4	
sh	c	ch	s	1.20e-11	0.58	5880.0	4	
sh	co	ocs	h	5.95e-14	1.12	8330.0	4	
s+	h2	sh+	h	2.20e-10	0	9860.0	4	
sh+	h2	h2s+	h	1.90e-10	0	8500.0	4	
sh+	h2	h3s+	photon	1.00e-15	0	0.0	3	
h2s+	h2	h3s+	h	1.40e-11	0	2300.0	4	
cs+	h2	hcs+	h	4.80e-10	0	0.0	4	
sh+	h	s+	h2	1.10e-10	0	0.0	4	
h2s+	h	sh+	h2	2.00e-10	0	0.0	4	
h3s+	h	h2s+	h2	6.00e-11	0	0.0	4	
so+	h	s+	oh	6.10e-10	0	11385.0	4	
h+	s	s+	h	1.00e-15	0	0.0	4	
h+	sh	s+	h2	3.50e-09	-0.5	0.0	4	
h+	sh	sh+	h	3.50e-09	-0.5	0.0	4	
h+	h2s	h2s+	h	3.80e-09	-0.5	0.0	4	
h+	h2cs	h2cs+	h	6.40e-09	-0.5	0.0	4	
h+	cs	cs+	h	1.80e-08	-0.5	0.0	4	
h+	so	so+	h	1.40e-08	-0.5	0.0	4	
h+	ocs	sh+	co	6.50e-09	-0.5	0.0	4	
h2+	h2s	s+	h2	h2	7.70e-10	0	0.0	4
h2+	h2s	sh+	h	h2	8.60e-10	0	0.0	4
h2+	h2s	h2s+	h2	2.70e-09	0	0.0	4	
h3+	s	sh+	h2	2.60e-09	0	0.0	4	
h3+	sh	h2s+	h2	4.20e-09	-0.5	0.0	4	
h3+	h2s	h3s+	h2	2.30e-09	-0.5	0.0	4	
h3+	cs	hcs+	h2	1.10e-08	-0.5	0.0	4	
h3+	so	hso+	h2	8.40e-09	-0.5	0.0	4	
h3+	so2	hso2+	h2	3.72e-09	-0.5	0.0	4	
h3+	ocs	hocs+	h2	3.80e-09	-0.5	0.0	4	
h3+	h2cs	h3cs+	h2	3.80e-09	-0.5	0.0	4	
he+	sh	s+	h	he	3.70e-09	-0.5	0.0	4
he+	h2s	s+	h2	he	1.60e-09	-0.5	0.0	4
he+	h2s	sh+	h	he	2.20e-10	-0.5	0.0	4
he+	h2s	h2s+	he	1.40e-10	-0.5	0.0	4	
he+	h2cs	s+	ch2	he	1.11e-09	-0.5	0.0	4
he+	h2cs	cs+	h2	he	1.11e-09	-0.5	0.0	4
he+	h2cs	ch2+	s	he	1.11e-09	-0.5	0.0	4
he+	cs	c+	s	he	1.30e-09	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação	
he+	cs	s+	c	he	1.30e-09	0	0.0	4
he+	so	o+	s	he	8.30e-10	0	0.0	4
he+	so	s+	o	he	8.30e-10	0	0.0	4
he+	ocs	cs+	o	he	7.60e-10	0	0.0	4
he+	ocs	s+	co	he	7.60e-10	0	0.0	4
he+	ocs	co+	s	he	7.60e-10	0	0.0	4
he+	ocs	o+	cs	he	7.60e-11	0	0.0	4
he+	so2	s+	o2	he	8.60e-10	0	0.0	4
he+	so2	so+	o	he	3.44e-09	0	0.0	4
c+	s	s+	c		1.50e-09	0	0.0	4
c+	sh	cs+	h		2.40e-09	-0.5	0.0	4
c+	h2s	h2s+	c		3.20e-10	-0.5	0.0	4
c+	h2s	hcs+	h		9.50e-10	-0.5	0.0	4
c+	cs	cs+	c		1.60e-09	0	700.0	4
c+	h2cs	ch2+	cs		2.10e-19	-0.5	0.0	4
c+	so	s+	co		1.10e-09	-0.5	0.0	4
c+	so	co+	s		1.10e-09	-0.5	0.0	4
c+	so	cs+	o		1.10e-09	-0.5	0.0	4
c+	so	so+	c		1.10e-09	-0.5	0.0	4
c+	so2	so+	co		2.00e-09	-0.5	0.0	4
c+	ocs	cs+	co		0.16D-08	0	0.0	4
ch+	s	s+	ch		4.70e-10	0	0.0	4
ch+	s	sh+	c		4.70e-10	0	0.0	4
ch+	s	cs+	h		4.70e-10	0	0.0	4
ch+	so	oh+	cs		1.00e-09	0	0.0	4
ch+	so	sh+	co		1.00e-09	0	0.0	4
ch+	h2s	hcs+	h2		6.60e-10	0	0.0	4
ch+	h2s	h3s+	c		6.30e-10	0	0.0	4
ch+	ocs	hcs+	co		1.05e-09	0	0.0	4
ch+	ocs	hocst+	c		8.55e-10	0	0.0	4
ch2+	s	hcs+	h		1.40e-09	0	0.0	4
ch2+	h2s	hcs+	h2	h	1.10e-09	0	0.0	4
ch3+	s	hcs+	h2		1.40e-09	0	0.0	4
ch3+	sh	h2cs+	h2		2.20e-09	-0.5	0.0	4
ch3+	h2s	h3cs+	h2		1.00e-09	-0.5	0.0	4
ch3+	so	hocst+	h2		9.50e-10	0	0.0	4
ch4+	h2s	h2s+	ch4		1.60e-09	0	0.0	4
ch4+	h2s	h3s+	ch3		9.50e-10	0	0.0	4
ch4+	ocs	hocst+	ch3		9.80e-10	0	0.0	4
ch5+	s	sh+	ch4		1.30e-09	0	0.0	4
c2+	s	s+	c2		5.80e-10	0	0.0	4
c2+	s	cs+	c		5.80e-10	0	0.0	4
c2h+	s	s+	c2h		1.20e-09	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
c2h2+	h2s	h2s+	c2h2	9.80e-10	-0.5	0.0	4
c2h2+	h2s	c2h3+	sh	2.00e-11	-0.5	0.0	4
c3h+	h2s	c2h3+	cs	2.98e-10	-0.5	0.0	4
c3h+	h2s	hcs+	c2h2	2.98e-10	-0.5	0.0	4
o+	h2s	h2o	s+	2.20e-10	0	0.0	4
o+	h2s	sh+	oh	4.20e-10	0	0.0	4
o+	h2s	h2s+	o	1.80e-09	0	0.0	4
o+	ocs	s+	co2	2.00e-11	0	0.0	4
o+	so2	o2+	so	8.00e-10	0	0.0	4
oh+	s	s+	oh	4.30e-10	0	0.0	4
oh+	s	sh+	o	4.30e-10	0	0.0	4
oh+	s	so+	h	4.30e-10	0	0.0	4
oh+	h2s	h2s+	oh	1.20e-09	0	0.0	4
oh+	h2s	h3s+	o	8.20e-10	0	0.0	4
h2o+	s	s+	h2o	4.30e-10	0	0.0	4
h2o+	s	sh+	oh	4.30e-10	0	0.0	4
h2o+	s	hso+	h	4.30e-10	0	0.0	4
h2o+	h2s	h2s+	h2o	8.90e-10	0	0.0	4
h2o+	h2s	h3o+	sh	5.90e-10	0	0.0	4
h3o+	s	sh+	h2o	3.20e-10	0	4930.0	4
h3o+	h2s	h3s+	h2o	1.90e-09	0	0.0	4
co+	s	s+	co	1.10e-09	0	0.0	4
co+	h2s	h2s+	co	2.44e-09	0	0.0	4
co+	h2s	hco+	sh	1.56e-10	0	0.0	4
co+	so2	so+	co2	1.70e-09	0	0.0	4
hco+	s	sh+	co	3.30e-10	0	0.0	4
hco+	sh	h2s+	co	8.20e-10	0	0.0	4
hco+	cs	hcs+	co	1.20e-09	0	0.0	4
hco+	so	hso+	co	7.50e-10	0	0.0	4
hco+	h2s	h3s+	co	1.60e-09	0	0.0	4
hco+	ocs	hocs+	co	1.10e-09	0	0.0	4
hco+	h2cs	h3cs+	co	1.50e-09	-0.5	0.0	4
o2+	s	so+	o	5.40e-10	0	0.0	4
o2+	s	s+	o2	5.40e-10	0	0.0	4
o2+	h2s	h2s+	o2	1.40e-09	0	0.0	4
s+	ch	cs+	h	6.20e-10	0	0.0	4
s+	ch2	hcs+	h	7.08e-10	-0.5	0.0	4
s+	c2	cs+	c	8.10e-10	0	0.0	4
s+	oh	so+	h	6.10e-10	0	0.0	4
s+	oh	sh+	o	2.90e-10	0	8820.0	4
s+	sh	sh+	s	9.70e-10	0	350.0	4
s+	o2	so+	o	2.30e-11	0	0.0	4
s+	ch3	h2cs+	h	1.00e-11	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
s+	ch4	h3cs+	h	1.40e-10	0	0.0	4
s+	h2co	h2s+	co	1.10e-09	-0.5	0.0	4
s+	h2co	hco+	sh	1.10e-09	-0.5	0.0	4
s+	hco	sh+	co	5.00e-10	-0.5	0.0	4
s+	hco	hco+	s	5.00e-10	-0.5	0.0	4
s+	h2s	h2s+	s	4.40e-11	-0.5	0.0	4
sh+	o	so+	h	2.90e-10	0	0.0	4
sh+	o	s+	oh	2.90e-10	0	0.0	4
sh+	s	s+	sh	9.70e-10	0	0.0	4
sh+	c	cs+	h	9.90e-10	0	0.0	4
sh+	ch	ch2+	s	5.80e-10	0	0.0	4
sh+	oh	h2s+	o	3.10e-10	0	7500.0	4
sh+	oh	h2o+	s	4.30e-10	0	9200.0	4
sh+	h2o	h3o+	s	6.30e-10	0	0.0	4
sh+	h2s	h2s+	sh	5.00e-10	0	1000.0	4
sh+	h2s	h3s+	s	5.00e-10	0	0.0	4
sh+	ch4	h3cs+	h2	5.40e-10	0	0.0	4
h2s+	o	sh+	oh	3.10e-10	0	0.0	4
h2s+	o	so+	h2	3.10e-10	0	0.0	4
h2s+	c	hcs+	h	1.00e-09	0	0.0	4
h2s+	s	s+	h2s	1.10e-09	0	0.0	4
h2s+	sh	sh+	h2s	5.00e-10	0	0.0	4
h2s+	h2o	h3o+	sh	8.10e-10	0	0.0	4
h3s+	h2co	h3co+	h2s	2.20e-09	0	0.0	4
cs+	c	c+	cs	1.60e-09	0	0.0	4
cs+	o	co+	s	6.00e-11	0	0.0	4
cs+	ch4	hcs+	ch3	5.00e-10	0	0.0	4
hcs+	o	hco+	s	1.00e-09	0	0.0	4
s+	fe	fe+	s	1.80e-10	0	0.0	4
sh+	fe	fe+	sh	1.60e-09	0	0.0	4
so+	fe	fe+	so	1.60e-09	0	0.0	4
h2s+	fe	fe+	h2s	1.80e-09	0	0.0	4
cs+	fe	fe+	cs	1.70e-10	0	0.0	4
s+	nh3	nh3+	s	1.60e-09	0	0.0	4
s+	no	no+	s	3.20e-10	0	0.0	4
sh+	hcn	hcnh+	s	8.90e-10	0	0.0	4
sh+	hnc	hcnh+	s	8.60e-10	0	0.0	4
sh+	no	no+	sh	3.30e-10	0	0.0	4
sh+	nh3	nh3+	sh	5.25e-10	0	0.0	4
sh+	nh3	nh4+	s	9.75e-10	0	0.0	4
h2s+	no	no+	h2s	3.70e-10	0	0.0	4
h2s+	nh3	nh4+	sh	1.36e-09	0	0.0	4
h2s+	nh3	nh3+	h2s	3.40e-10	0	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação	
h3s+	nh3	nh4+	h2s	1.90e-09	0	0.0	4	
h3s+	hcn	hcnh+	h2s	1.50e-09	0	0.0	4	
h3s+	hnc	hcnh+	h2s	1.50e-09	0	0.0	4	
so+	nh3	nh3+	so	1.30e-09	0	0.0	4	
n+	h2s	sh+	nh	5.51e-10	0	0.0	4	
n+	h2s	h2s+	n	1.06e-09	0	0.0	4	
n+	h2s	s+	nh2	0.23D-09	0	0.0	4	
n+	h2s	nh+	sh	0.57D-10	0	0.0	4	
n+	ocs	s+	co	n	3.08e-10	0	0.0	4
n+	ocs	cs+	no	7.00e-11	0	0.0	4	
cn+	s	s+	cn	1.10e-09	0	0.0	4	
hcn+	s	s+	hcn	5.70e-10	0	0.0	4	
hcn+	s	sh+	cn	5.70e-10	0	0.0	4	
hnc+	s	s+	hnc	5.70e-10	0	0.0	4	
hnc+	s	sh+	cn	5.70e-10	0	0.0	4	
nh+	s	s+	nh	6.90e-10	0	0.0	4	
nh+	s	sh+	n	6.90e-10	0	0.0	4	
nh2+	s	s+	nh2	4.40e-10	0	0.0	4	
nh2+	s	sh+	nh	4.40e-10	0	0.0	4	
nh2+	h2s	sh+	nh3	1.80e-10	0	0.0	4	
nh2+	h2s	h2s+	nh2	3.40e-10	0	0.0	4	
nh2+	h2s	h3s+	nh	2.40e-10	0	0.0	4	
nh2+	h2s	nh3+	sh	4.50e-10	0	0.0	4	
nh2+	h2s	nh4+	s	1.80e-10	0	0.0	4	
nh3+	h2s	nh4+	sh	6.00e-10	0	0.0	4	
n2+	s	s+	n2	1.10e-09	0	0.0	4	
n2+	h2s	s+	n2	h2	2.25e-10	0	0.0	4
n2+	h2s	sh+	n2	h	1.13e-09	0	0.0	4
n2+	h2s	h2s+	n2	1.50e-10	0	0.0	4	
n2+	ocs	s+	n2	co	1.04e-09	0	0.0	4
hno+	s	sh+	no	1.10e-09	0	0.0	4	
n2h+	s	sh+	n2	1.10e-09	0	0.0	4	
c2n+	h2s	hcs+	hcn	1.20e-09	0	0.0	4	
o2	photon	o	o	7.90e-10	0	1.80	5	
o2	photon	o2+	electr	7.70e-11	0	3.73	5	
oh	photon	o	h	4.20e-10	0	1.72	5	
oh	photon	oh+	electr	1.60e-12	0	3.10	5	
h2o	photon	oh	h	8.00e-10	0	1.70	5	
h2o	photon	h2o+	electr	3.30e-11	0	3.85	5	
ch	photon	c	h	1.40e-10	0	1.5	5	
ch	photon	ch+	electr	2.90e-10	0	2.8	5	
ch2	photon	ch	h	7.20e-10	0	1.67	5	
ch2	photon	ch2+	electr	3.00e-10	0	2.3	5	

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
ch3	photon	ch2	h	5.00e-10	0	1.88	5
ch3	photon	ch3+	electr	1.00e-10	0	2.1	5
ch4	photon	ch2	h2	1.20e-09	0	2.15	5
ch4	photon	ch4+	electr	6.80e-12	0	4.04	5
c2	photon	c	c	2.30e-10	0	2.09	5
c2	photon	c2+	electr	4.10e-10	0	3.54	5
c2h	photon	c2	h	5.10e-10	0	1.89	5
c2h	photon	c2h+	electr	1.00e-11	0	2.00	5
c2h2	photon	c2h	h	3.20e-09	0	1.84	5
c2h2	photon	c2h2+	electr	3.30e-10	0	3.12	5
c3	photon	c2	c	2.60e-10	0	2.3	5
c3h	photon	c3	h	1.00e-09	0	1.70	5
c3h2	photon	c3h	h	1.90e-09	0	1.79	5
c3h2	photon	c3	h2	1.00e-09	0	1.7	5
h2co	photon	co	h2	1.00e-09	0	1.74	5
hco	photon	co	h	1.10e-09	0	0.80	5
co2	photon	co	o	8.70e-10	0	2.50	5
fe	photon	fe+	electr	2.80e-10	0	1.86	5
h2+	photon	h+	h	5.70e-10	0	1.85	5
h3+	photon	h2+	h	5.00e-13	0	2.3	5
h3+	photon	h+	h2	5.00e-13	0	1.8	5
ch+	photon	h+	c	3.20e-10	0	2.50	5
ch+	photon	c+	h	2.00e-12	0	3.0	5
ch2+	photon	ch+	h	1.70e-09	0	1.7	5
ch3+	photon	ch2+	h	1.00e-09	0	1.7	5
ch3+	photon	ch+	h2	1.00e-09	0	1.7	5
ch4+	photon	ch3+	h	1.00e-09	0	1.7	5
ch4+	photon	ch2+	h2	1.00e-09	0	1.7	5
ch5+	photon	ch4+	h	1.00e-09	0	1.7	5
ch5+	photon	ch3+	h2	1.00e-09	0	1.7	5
c2+	photon	c	c+	1.00e-11	0	1.7	5
o2+	photon	o	o+	1.00e-11	0	1.7	5
oh+	photon	o+	h	1.10e-11	0	2.80	5
h2o+	photon	oh+	h	3.00e-10	0	2.00	5
h2o+	photon	h+	oh	1.00e-10	0	2.00	5
h2o+	photon	h2+	o	1.00e-10	0	2.00	5
h3o+	photon	h2o+	h	1.50e-11	0	2.00	5
h3o+	photon	h2+	oh	5.00e-11	0	2.00	5
h3o+	photon	h2o	h+	5.00e-11	0	2.00	5
co+	photon	c+	o	3.00e-11	0	3.0	5
hco+	photon	co+	h	7.80e-12	0	3.0	5
hco2+	photon	h+	co2	3.00e-10	0	3.0	5
c2h+	photon	c2+	h	1.00e-10	0	2.0	5

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
c2h2+	photon	c2+	h2	1.00e-10	0	2.0	5
c2h3+	photon	c2h+	h2	1.00e-10	0	3.0	5
c3+	photon	c2+	c	1.00e-10	0	3.0	5
c3h+	photon	c3+	h	1.00e-10	0	3.0	5
c3h2+	photon	c3+	h2	1.00e-10	0	3.0	5
c3h3+	photon	c3h+	h2	1.00e-10	0	3.0	5
n2	photon	n	n	2.30e-10	0	3.82	5
nh	photon	n	h	5.00e-10	0	1.97	5
nh	photon	nh+	electr	1.00e-11	0	2.00	5
nh2	photon	nh	h	7.40e-10	0	1.63	5
nh2	photon	nh2+	electr	1.73e-10	0	2.60	5
nh3	photon	nh2	h	1.10e-09	0	1.79	5
nh3	photon	nh3+	electr	2.80e-10	0	2.70	5
cn	photon	c	n	3.00e-10	0	3.07	5
hcn	photon	cn	h	1.50e-09	0	2.08	5
hnc	photon	cn	h	1.50e-09	0	2.08	5
hnc	photon	hnc+	electr	1.00e-11	0	2.00	5
no	photon	n	o	4.70e-10	0	1.71	5
no	photon	no+	electr	2.60e-10	0	2.32	5
nh+	photon	n+	h	5.40e-11	0	1.39	5
nh2+	photon	n+	h2	1.00e-10	0	2.00	5
nh3+	photon	nh+	h2	1.00e-10	0	2.00	5
nh4+	photon	nh3+	h	1.00e-10	0	2.00	5
cn+	photon	c+	n	1.00e-10	0	2.00	5
c2n+	photon	c+	cn	1.00e-10	0	2.00	5
hcn+	photon	cn+	h	1.00e-10	0	2.00	5
hnc+	photon	cn+	h	1.00e-10	0	2.00	5
hcnh+	photon	hcn+	h	1.00e-10	0	2.00	5
hcnh+	photon	hnc+	h	1.00e-10	0	2.00	5
h2nc+	photon	hnc+	h	1.00e-10	0	2.00	5
n2+	photon	n+	n	1.00e-10	0	2.00	5
n2h+	photon	h+	n2	1.00e-10	0	2.00	5
no+	photon	n+	o	1.00e-10	0	2.00	5
hno+	photon	no+	h	1.00e-10	0	2.00	5
s	photon	s+	electr	5.90e-10	0	2.58	5
sh	photon	s	h	9.70e-10	0	1.42	5
h2s	photon	h2s+	electr	7.10e-10	0	2.69	5
h2s	photon	sh	h	3.10e-09	0	1.87	5
cs	photon	c	s	9.70e-10	0	2.03	5
h2cs	photon	cs	h2	1.00e-09	0	1.70	5
so	photon	s	o	3.70e-09	0	1.95	5
so2	photon	so	o	1.90e-09	0	1.88	5
ocs	photon	s	co	3.70e-09	0	1.69	5

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação
sh+	photon	s+	h	2.50e-10	0	1.80	5
cs+	photon	c+	s	1.00e-10	0	2.00	5
hcs+	photon	cs+	h	1.00e-10	0	2.00	5
h2s+	photon	sh+	h	1.00e-10	0	2.00	5
h3s+	photon	h2s+	h	1.00e-10	0	2.00	5
so+	photon	s+	o	1.00e-10	0	2.00	5
hso+	photon	so+	h	1.00e-10	0	2.00	5
hso2+	photon	hso+	o	1.00e-10	0	2.00	5
hocs+	photon	cs+	oh	1.00e-10	0	2.00	5
h+	electr	h	photon	3.61e-12	-0.75	0.0	3
h2+	electr	h	h	1.60e-08	-0.43	0.0	4
h3+	electr	h	h	5.44e-08	-0.5	0.0	4
h3+	electr	h2	h	1.36e-08	-0.5	0.0	4
he+	electr	he	photon	4.50e-12	-0.67	0.0	3
c+	electr	c	photon	4.40e-12	-0.61	0.0	3
ch+	electr	c	h	1.50e-07	-0.42	0.0	4
ch2+	electr	c	h2	7.68e-08	-0.6	0.0	4
ch2+	electr	ch	h	1.60e-07	-0.6	0.0	4
ch2+	electr	c	h	4.03e-07	-0.6	0.0	4
ch3+	electr	c	h2	1.25e-07	-0.65	0.0	4
ch3+	electr	ch	h	6.60e-08	-0.65	0.0	4
ch3+	electr	ch	h2	5.80e-08	-0.65	0.0	4
ch3+	electr	ch2	h	1.66e-07	-0.65	0.0	4
ch4+	electr	ch3	h	3.00e-07	-0.5	0.0	4
ch4+	electr	ch2	h	3.00e-07	-0.5	0.0	4
ch5+	electr	ch	h2	8.40e-09	-0.52	0.0	4
ch5+	electr	ch2	h2	4.76e-08	-0.52	0.0	4
ch5+	electr	ch3	h	1.96e-07	-0.52	0.0	4
ch5+	electr	ch3	h2	1.40e-08	-0.52	0.0	4
ch5+	electr	ch4	h	1.40e-08	-0.52	0.0	4
o+	electr	o	photon	3.40e-12	-0.64	0.0	3
o2+	electr	o	o	2.40e-07	-0.7	0.0	4
oh+	electr	o	h	3.75e-08	-0.5	0.0	4
h2o+	electr	oh	h	7.80e-08	-0.5	0.0	4
h2o+	electr	o	h2	3.38e-08	-0.5	0.0	4
h2o+	electr	o	h	1.48e-07	-0.5	0.0	4
h3o+	electr	h2o	h	1.07e-07	-0.65	0.0	4
h3o+	electr	oh	h2	6.02e-08	-0.65	0.0	4
h3o+	electr	oh	h	2.58e-07	-0.65	0.0	4
h3o+	electr	o	h2	5.59e-09	-0.65	0.0	4
co+	electr	c	o	2.25e-07	-0.46	0.0	4
hco+	electr	co	h	1.00e-07	-0.69	0.0	4
hco+	electr	oh	c	1.00e-07	-0.69	0.0	4

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos		γ	α	β	Tipo de Reação	
hoc+	electr	co	h	2.00e-07	-0.75	0.0	4	
h2co+	electr	co	h	h	5.00e-07	-0.5	0.0	4
h2co+	electr	hco	h	1.00e-07	-0.5	0.0	4	
h3co+	electr	co	h	h2	2.00e-07	-0.5	0.0	4
h3co+	electr	hco	h	h	2.00e-07	-0.5	0.0	4
h3co+	electr	h2co	h	2.00e-07	-0.5	0.0	4	
hco2+	electr	co2	h	2.24e-07	-0.5	0.0	4	
hco2+	electr	co	oh	1.16e-07	-0.5	0.0	4	
c2+	electr	c	c	2.00e-07	-0.5	0.0	4	
c2h+	electr	ch	c	1.35e-07	-0.5	0.0	4	
c2h2+	electr	c2h	h	1.50e-07	-0.5	0.0	4	
c2h2+	electr	ch	ch	3.90e-08	-0.5	0.0	4	
c2h2+	electr	c2	h	h	9.00e-08	-0.5	0.0	4
c2h2+	electr	ch2	c	1.50e-08	-0.5	0.0	4	
c2h2+	electr	c2	h2	6.00e-09	-0.5	0.0	4	
c2h3+	electr	c2h	h	h	2.95e-07	-0.84	0.0	4
c2h3+	electr	c2h	h2	3.00e-08	-0.84	0.0	4	
c2h3+	electr	c2h2	h	1.45e-07	-0.84	0.0	4	
c2h3+	electr	c2	h	h2	1.50e-08	-0.84	0.0	4
c2h3+	electr	ch3	c	3.00e-09	-0.84	0.0	4	
c2h3+	electr	ch2	ch	1.50e-08	-0.84	0.0	4	
c2h4+	electr	c2h2	h	h	4.30e-07	-0.76	0.0	4
c2h4+	electr	c2h2	h2	3.36e-08	-0.76	0.0	4	
c2h4+	electr	c2h	h2	h	5.60e-08	-0.76	0.0	4
c2h4+	electr	ch4	c	5.60e-09	-0.76	0.0	4	
c2h4+	electr	ch3	ch	1.12e-08	-0.76	0.0	4	
c2h4+	electr	ch2	ch2	2.24e-08	-0.76	0.0	4	
c3+	electr	c2	c	3.00e-07	-0.5	0.0	4	
c3h+	electr	c2h	c	1.00e-07	-0.5	0.0	4	
c3h+	electr	c3	h	2.00e-07	-0.5	0.0	4	
c3h2+	electr	c3	h	h	6.00e-08	-0.5	0.0	4
c3h2+	electr	c3h	h	2.63e-07	-0.5	0.0	4	
c3h2+	electr	c3	h2	1.50e-07	-0.5	0.0	4	
c3h2+	electr	c2h	ch	3.75e-08	-0.5	0.0	4	
c3h3+	electr	c3h	h2	3.15e-07	-0.5	0.0	4	
c3h3+	electr	c3h2	h	2.70e-07	-0.5	0.0	4	
c3h3+	electr	c2h	ch2	0.30e-07	-0.5	0.0	4	
fe+	electr	fe	photon	3.70e-12	-0.65	0.0	3	
n+	electr	n	photon	3.80e-12	-0.62	0.0	3	
nh+	electr	n	h	2.00e-07	-0.5	0.0	4	
nh2+	electr	nh	h	1.00e-07	-0.5	0.0	4	
nh2+	electr	n	h	h	2.00e-07	-0.5	0.0	4
nh3+	electr	nh2	h	3.00e-07	-0.5	0.0	4	

Continua na próxima página...

Tabela B.2 - Continuação

Reagentes		Produtos			γ	α	β	Tipo de Reação
nh4+	electr	nh2	h2		1.89e-08	-0.605	0.0	4
nh4+	electr	nh2	h	h	1.23e-07	-0.605	0.0	4
nh4+	electr	nh3	h		8.01e-07	-0.605	0.0	4
n2+	electr	n	n		1.75e-07	-0.3	0.0	4
n2h+	electr	n2	h		0.95e-07	-0.51	0.0	4
n2h+	electr	nh	n		0.05e-07	-0.51	0.0	4
cn+	electr	c	n		1.80e-07	-0.5	0.0	4
hcn+	electr	cn	h		1.50e-07	-0.5	0.0	4
hcn+	electr	ch	n		1.50e-07	-0.5	0.0	4
hnc+	electr	cn	h		1.50e-07	-0.5	0.0	4
hnc+	electr	nh	c		1.50e-07	-0.5	0.0	4
hcnh+	electr	hcn	h		0.93e-07	-0.65	0.0	4
hcnh+	electr	hnc	h		0.93e-07	-0.65	0.0	4
hcnh+	electr	cn	h	h	0.93e-07	-0.65	0.0	4
h2nc+	electr	hnc	h		1.75e-07	-0.5	0.0	4
h2nc+	electr	nh2	c		1.75e-07	-0.5	0.0	4
c2n+	electr	c2	n		1.00e-07	-0.5	0.0	4
c2n+	electr	cn	c		2.00e-07	-0.5	0.0	4
no+	electr	n	o		4.30e-07	-0.37	0.0	4
hno+	electr	no	h		3.00e-07	-0.5	0.0	4
s+	electr	s	photon		3.90e-12	-0.63	0.0	3
sh+	electr	s	h		2.00e-07	-0.5	0.0	4
h2s+	electr	sh	h		1.50e-07	-0.5	0.0	4
h2s+	electr	s	h	h	1.50e-07	-0.5	0.0	4
h2s+	electr	h2s	photon		1.10e-10	-0.7	0.0	3
h3s+	electr	h2s	h		3.00e-07	-0.5	0.0	4
h3s+	electr	sh	h2		1.00e-07	-0.5	0.0	4
cs+	electr	c	s		2.00e-07	-0.5	0.0	4
hcs+	electr	cs	h		7.00e-07	-0.5	0.0	4
so+	electr	s	o		2.00e-07	-0.5	0.0	4
hso+	electr	so	h		2.00e-07	-0.5	0.0	4
hso2+	electr	so	h	o	1.00e-07	-0.5	0.0	4
hso2+	electr	so	oh		1.00e-07	-0.5	0.0	4
hocs+	electr	oh	cs		2.00e-07	-0.5	0.0	4
hocs+	electr	ocs	h		2.00e-07	-0.5	0.0	4
h2cs+	electr	cs	h	h	3.00e-07	-0.5	0.0	4
h3cs+	electr	cs	h	h2	3.00e-07	-0.5	0.0	4
h3cs+	electr	h2cs	h		3.00e-07	-0.5	0.0	4