



# Universidad Nacional Autónoma de México

Posgrado en Astrofísica  
Instituto de Ciencias Nucleares

Falsos positivos de bioseñales generados por una fulguración en  
atmósferas con  $\text{CO}_2$  de planetas en la zona habitable de estrellas  
enanas M

T E S I S

que para optar por el grado de  
Maestro en Ciencias (Astrofísica)

PRESENTA:

**Antonio Arturo Miranda Rosete**

Tutora:

**Dra. Antígona Segura Peralta**  
Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM

Ciudad Universitaria,  
CDMX, México.  
(Agosto) 2021



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Jurado

Dr. Pablo Fabián Velázquez Brito  
Dra. Yilen Gómez Maqueo Chew  
Dra. María Leticia Carigi Delgado  
Dra. Sandra Ramírez Jiménez  
Dr. Victor Hugo de la Luz Rodríguez

# Dedicatoria

*A mi familia.  
A mis amigas.  
A aquellas que osan.  
A aquellas que sueñan.*



# Agradecimientos

Quiero empezar por agradecer a mi asesora, la Dr. Antígona Segura. Sin su guía y apoyo este trabajo no habría sido posible. Gracias por tomar el salto de fe cuando me aceptaste como alumno para hacer mi tesis de licenciatura, por todo lo que me has enseñado y continuar trabajando conmigo.

Gracias a mis astrohermanitas, Paty, Marion, Laura, Mónica y Alejandra, por la compañía, el apoyo y lo que me han permitido aprender de ustedes y enseñarles. Han hecho llevaderos los días con demasiado trabajo y entretenidos los congresos que duran demasiadas horas.

Al CONACYT, por el apoyo económico que por su medio el país da a los estudiantes de posgrado.

A los integrantes del posgrado en astrofísica de la UNAM, tanto académicos como clericales. Gracias por su apoyo técnico y personal. Por ayudarme e inspirarme en los últimos dos años a entender la clase de científico y persona que quiero ser, así como la que no.

Gracias a mis amistades, a les que entendieron que un posgrado es un trabajo mal pagado que se alimenta de esperanzas y sueños. Y a les que no, que intentaron incluirme en las reuniones y aventuras aunque no tuviera tiempo para nada. A aquellos que me dieron su humor, simpatía y ánimo; decir que me mantuvieron cuerdo sería decir que alguna vez lo estuve. Sin importar si me obligaron a ir al cine para distraerme o admitieron su participación en una conspiración a nivel mundial para que robots tomen control del planeta con la intención de hacerme reír, gracias por estar a mi lado. Solo espero haber y continuar dándoles el mismo apoyo que ustedes me han dado.

A mis hermanas, ya sea que nacieron siéndolo o la vida les trajo a mi, gracias por su apoyo y amor; soy mejor persona por tenerlas en mi vida.

A mis padres, por todo. No hay nada que no haga que no espere hacerlos sentirse orgullosos, esto no es la excepción.

# Resumen

En este trabajo se modificó un código fotoquímico (ATMOS) para estudiar los efectos que produce una fulguración de una enana tipo M sobre la atmósfera de un planeta tipo Tierra prebiótica. Se busca determinar si la interacción entre la estrella y la atmósfera planetaria pudiera generar un falso positivo en la búsqueda de vida fuera del Sistema Solar con acumulación de oxígeno y ozono en la atmósfera. Para esto se creó una capa de código para controlar los datos de ingreso del modelo (atmósfera, flujo estelar, tiempo) durante la duración de la fulguración. Con eso se pudo ver los efectos en la química de un planeta tipo Tierra a una ua equivalente de distancia a su estrella anfitriona (AD Leo).

Durante la fulguración se observó la pérdida de  $O_2$  y  $O_3$  en cantidades difíciles de detectar con las capacidades técnicas actuales mediante espectroscopía de tránsito. Esta pérdida se recuperó alrededor de 300 años antes de que la atmósfera regresara a un estado de equilibrio, regresando a las abundancias iniciales.

Se contempla trabajo posterior con múltiples fulguraciones debido a la alta actividad que presentan las enanas tipo M y distintos tipos espectrales.



# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>v</b>
<b>1. Marco teórico</b>	<b>1</b>
1.1. Contexto histórico . . . . .	1
1.2. Estrellas enanas M . . . . .	5
1.2.1. Actividad y fulguraciones . . . . .	6
1.3. Habitabilidad planetaria y definición de trabajo de vida . . . . .	10
1.4. Bioseñales . . . . .	11
1.4.1. Tipos . . . . .	12
1.4.2. Detección . . . . .	14
1.4.3. Falsos positivos y mecanismos abióticos que los producen . . . . .	17
1.5. La atmósfera durante el Arqueano . . . . .	21
1.6. Trabajos anteriores en el área . . . . .	23
1.7. Objetivo del trabajo . . . . .	27

---

<b>2. Metodología</b>	<b>29</b>
2.1. Flare-mos (atmos+fulguraciones)	29
2.1.1. El modelo	30
2.1.2. Cambios del modelo respecto al trabajo anterior	31
2.1.3. Modificaciones realizadas al modelo	32
2.1.4. Tratamiento de las fulguraciones	34
Multiflare	35
2.2. Entrada del modelo	36
<b>3. Resultados</b>	<b>41</b>
3.1. Hidrógeno	42
3.2. Oxígeno	44
3.3. Ozono	53
3.4. Hidrógeno atómico (H)	62
3.5. Agua	69
<b>4. Discusión</b>	<b>77</b>
4.1. Detectabilidad	78
<b>5. Conclusiones</b>	<b>81</b>
<b>A. Especies químicas en el modelo</b>	<b>89</b>

---

<b>B. Reacciones químicas del modelo fotoquímico</b>	<b>95</b>
<b>C. Modelos fotoquímicos</b>	<b>113</b>
C.1. Ecuaciones del modelo en diferencias finitas . . . . .	116
C.2. Solución del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias . . . . .	118
C.3. Condiciones de frontera . . . . .	120
C.4. Matrices de producción y pérdida química . . . . .	122
C.5. Especies de vida corta y vida larga, y matrices en condiciones adversas . . . . .	123
C.6. Rayos y lluvia . . . . .	124
C.7. Fotólisis y transferencia radiativa . . . . .	126



# Índice de figuras

1.1. Distribución de exoplanetas conocidos. . . . .	3
1.2. Distribución de radios planetarios para periodos orbitales entre 2 y 50 días. . . . .	7
1.3. Ilustración de tránsitos y ocultaciones. . . . .	16
1.4. Ejemplos de espectros de reflexión simulados. . . . .	16
1.5. Ejemplo de espectro de transmisión como observado por LUVOIR . . . . .	17
1.6. Composición atmosférica de la Tierra a lo largo de los eones . . . . .	24
1.7. La Tierra como exoplaneta . . . . .	25
2.1. Comparación de la composición atmosférica con el trabajo anterior . . . . .	33
2.2. Flujo estelar basal de AD Leo. . . . .	38
2.3. Curva de luz de AD Leo. . . . .	39
2.4. Flujos de AD Leo durante la fulguración. . . . .	39
3.1. Cambio fraccional de la profundidad de columna de oxígeno molecular para las atmósferas con razón de mezcla de H <sub>2</sub> fija. . . . .	45

3.2. Cambio fraccional de la profundidad de columna de oxígeno molecular para las atmósferas con flujo de H <sub>2</sub> fijo . . . . .	46
3.3. Cambio fraccional de la profundidad de columna de oxígeno molecular (sin H <sub>2</sub> O). En naranja punteado se marcan el máximo y final de la fulguración, izquierda y derecha, respectivamente. . . . .	46
3.4. Razón de mezcla del oxígeno molecular (O <sub>2</sub> ) para atmósferas con 3 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	47
3.5. Razón de mezcla del oxígeno molecular (O <sub>2</sub> ) para atmósferas con 10 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	48
3.6. Razón de mezcla del oxígeno molecular (O <sub>2</sub> ) para atmósferas con 30 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	49
3.7. Razón de mezcla del oxígeno molecular (O <sub>2</sub> ) para atmósferas con 60 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	50
3.8. Razón de mezcla del oxígeno molecular (O <sub>2</sub> ) para atmósferas con 90 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	51
3.9. Razón de mezcla del oxígeno molecular (O <sub>2</sub> ) para la atmósfera desecada. . . . .	52
3.10. Cambio fraccional de la profundidad de columna de ozono para las atmósferas con razón de mezcla de H <sub>2</sub> fija. . . . .	54
3.11. Cambio fraccional de la profundidad de columna de ozono para las atmósferas con flujo de H <sub>2</sub> fijo. . . . .	55
3.12. Cambio fraccional de la profundidad de columna de ozono (sin H <sub>2</sub> O). . . . .	55
3.13. Densidad numérica del ozono (O <sub>3</sub> ) para atmósferas con 3 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	56
3.14. Densidad numérica del ozono (O <sub>3</sub> ) para atmósferas con 10 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	57
3.15. Densidad numérica del ozono (O <sub>3</sub> ) para atmósferas con 30 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	58
3.16. Densidad numérica del ozono (O <sub>3</sub> ) para atmósferas con 60 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	59
3.17. Densidad numérica del ozono (O <sub>3</sub> ) para atmósferas con 90 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	60
3.18. Densidad numérica del ozono (O <sub>3</sub> ) para la atmósfera desecada. . . . .	61

---

3.19. Razón de mezcla del hidrógeno (H) para atmósferas con 3 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	63
3.20. Razón de mezcla del hidrógeno (H) para atmósferas con 10 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	64
3.21. Razón de mezcla del hidrógeno (H) para atmósferas con 30 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	65
3.22. Razón de mezcla del hidrógeno (H) para atmósferas con 60 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	66
3.23. Razón de mezcla del hidrógeno (H) para atmósferas con 90 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	67
3.24. Razón de mezcla del hidrógeno (H) para la atmósfera desecada. . . . .	68
3.25. Razón de mezcla del agua (H <sub>2</sub> O) para atmósferas con 3 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	70
3.26. Razón de mezcla del agua (H <sub>2</sub> O) para atmósferas con 10 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	71
3.27. Razón de mezcla del agua (H <sub>2</sub> O) para atmósferas con 30 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	72
3.28. Razón de mezcla del agua (H <sub>2</sub> O) para atmósferas con 60 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	73
3.29. Razón de mezcla del agua (H <sub>2</sub> O) para atmósferas con 90 % de CO <sub>2</sub> . . . . .	74
3.30. Razón de mezcla del agua (H <sub>2</sub> O) para la atmósfera desecada. . . . .	75



# Índice de tablas

1.1. Observatorios en construcción o planeación que resultan relevantes para la caracterización de planetas potencialmente habitables. . . . .	4
1.2. Tipos de bioseñales y ejemplos. . . . .	13
2.1. Condiciones de frontera usadas en las simulaciones . . . . .	37
2.2. Detalles misceláneos de AD Leo y el Sol. . . . .	38
3.1. Razón de mezcla superficial del H <sub>2</sub> . . . . .	43
3.2. Profundidad de columna de oxígeno . . . . .	45
3.3. Profundidad de columna de ozono . . . . .	54
4.1. Profundidad de columna de ozono y oxígeno para atmósferas simuladas. . . . .	80
4.2. Razón señal-ruido requerida para detectar características espectrales de absorción con un nivel de confianza $3\sigma$ para una misión con resolución espectral $\lambda/\Delta\lambda = 75$ . . . . .	80
A.1. Especies químicas incluidas en el modelo. . . . .	89
B.1. Reacciones químicas incluidas en el modelo. . . . .	95



# Capítulo 1

## Marco teórico

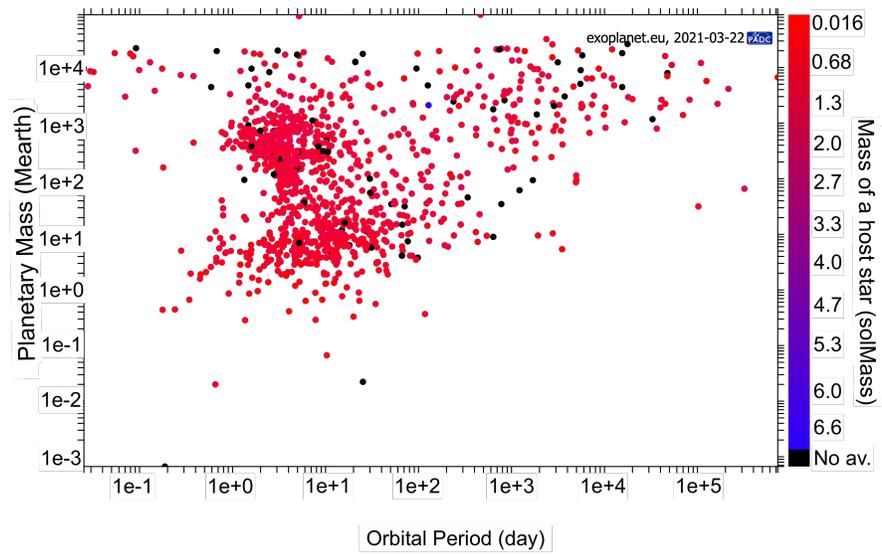
### 1.1. Contexto histórico

Nuestra capacidad técnico observacional no ha hecho sino aumentar desde las primeras observaciones que hemos realizado. La primer detección de un exoplaneta por Mayor y Queloz (1995) detectó un Júpiter caliente con  $0.46 M_{\text{Júpiter}}$  ( $146 M_{\oplus} = 8.73 \times 10^{26} \text{ kg}$ ), esto fue hace 26 años y desde entonces hemos detectado 4700 planetas (en 3472 sistemas distintos), con 2487 candidatos en espera de confirmación (E. Team, 2021). En 2015 se detectó el primer planeta potencialmente rocoso (Jenkins et al., 2015), esta supertierra con  $1.6 R_{\oplus}$  (10200 km) orbita en la zona habitable de Kepler-452, aunque estudios posteriores (Mullally et al., 2018) encontraron que podría ser mas masivo ( $5 M_{\oplus}$ ) al punto de poder ser un mini Neptuno.

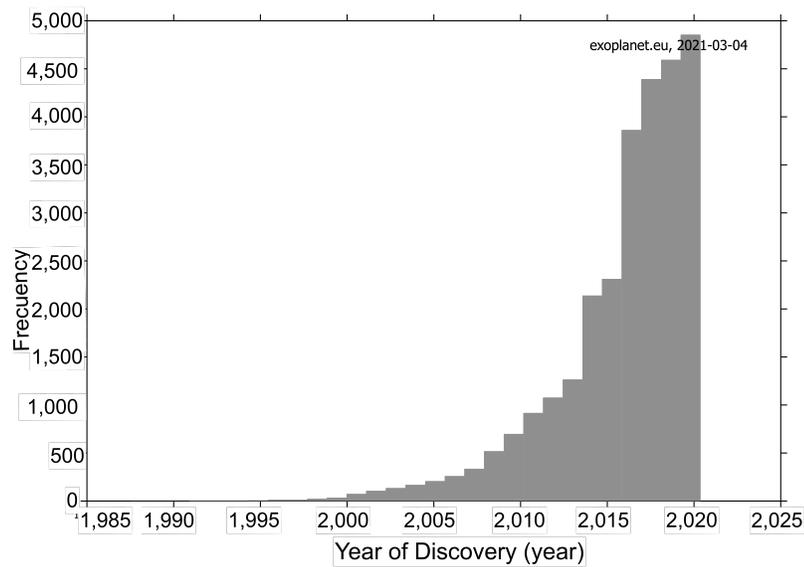
En la figura 1.1 se puede ver la distribución de la masa de exoplanetas como función de su periodo orbital (1.1a) y el histograma con la cantidad de exoplanetas conocidos como función del tiempo (1.1b). Cabe destacar que la mayoría de los planetas conocidos se concentran en periodos cortos y por debajo de  $M_{\text{Júpiter}}$ , y que orbitan estrellas similares al Sol o menos masivas; también es notable que la cantidad de exoplanetas que conocemos ha crecido año con año.

La capacidad técnica de las misiones que ponemos en órbita o construimos en tierra ha aumentado constantemente desde que se detectó el primer exoplaneta. Este aumento ha llegado al punto donde el James Webb Space Telescope (JWST), Roman Space Telescope (RST), o la misión Atmospheric Remote-sensing Infrared Exoplanet Large-survey (ARIEL) serán capaces de caracterizar exo-atmósferas en exoplanetas similares a la Tierra (rocosos, con radio entre 0.5 y  $1.25 R_{\oplus}$ ). Cerca del 10% de los planetas conocidos tiene entre 0.5 y  $1.25 R_{\oplus}$  (403 de 4700 según se lista en E. Team (2021)), por lo que el estudio y caracterización de esta población de planetas es cada vez mas cercana.

En la tabla 1.1 se condensan las futuras misiones en construcción o planeación que son relevantes para el estudio y caracterización de exoplanetas. Además, cabe mencionar los futuros proyectos que actualmente se encuentran en evaluación. De parte de la NASA, tres conceptos de misión insignia se encuentran bajo análisis que incluyen la búsqueda de bioseñales como parte de su eje de diseño: (1) Habitable Exoplanet Imaging Mission (HabEx), (2) Large UltraViolet, Optical and InfraRed surveyor (LUVOIR), y (3) Origins Space Telescope (OST). OST será un



(a)



(b)

Figura 1.1: (a) Dispersión de exoplanetas por su masa contra su periodo orbital. El color está dado por la masa de la estrella anfitriona. (b) Cantidad de exoplanetas conocidos, de forma acumulativa, desde 1985 hasta la actualidad. Figuras realizadas con la herramienta gráfica de <http://exoplanet.eu/diagrams/>

telescopio en órbita con un espejo de 5.9 m; con tres instrumentos a bordo, OST será capaz de tomar espectros de transmisión entre 2.8 y 20  $\mu\text{m}$ . LUVOIR está pensado como un telescopio de 8 o 15 m (la propuesta contempla ambos posibles tamaños), con la capacidad espectroscópica de analizar objetos en el Sistema Solar, discos estelares, exoplanetas, etc; se trata de un instrumento general, con capacidad de estudio del ultravioleta al infrarrojo cercano. HabEx está diseñado para estudiar exoplanetas orbitando estrellas similares al Sol, para obtención de espectros y imágenes directas, también será sensible a otros tipos de exoplanetas.

Es dentro de este contexto que la investigación sobre los posibles mecanismos abióticos que pueden producir falsos positivos en la búsqueda de vida fuera del Sistema Solar se vuelve relevante. Conforme nuestras capacidades técnicas mejoran, la necesidad de tener predicciones contra las que constatarlas aumenta. Al final, estos instrumentos son el laboratorio en que se prueban las predicciones de los modelos fotoquímicos.

Tabla 1.1: Observatorios en construcción o planeación que resultan relevantes para la caracterización de planetas potencialmente habitables. Tabla adaptada de Fuji et al. (2018), se agrega la información sobre la misión Ariel de Focardi et al. (2018), Morgante et al. (2018) y Pace et al. (2016).

	Inicio	Ubicación	Método de medición	Longitud de onda [ $\mu\text{m}$ ]
JWST (Gardner et al., 2006)	31 oct 2021	Espacio	espectroscopía	600–28500
SPHEREx (Doré et al., 2015)	2024	Orbita baja	espectroscopía	750–4800
NGRST (Green et al., 2012)	2025	L <sub>2</sub> (S-L)	coronografía y espectroscopía	600–950
ELT	2025	Chile	espectroscopía y coronografía	0.4-2.45

*cont.*

	Inicio	Ubicación	Método de medición	Longitud de onda [nm]
PLATO (Rauer et al., 2014)	2026	L <sub>2</sub> (S-L)	Fotometría	500–1050
ARIEL (Pace et al., 2016)	2029	L <sub>2</sub> (S-L)	espectroscopía	500–7800
GMT	2029	Chile	espectroscopía y coronografía	0.32-25
TMT	2027	Hawaii	fotometría y espectroscopía	0.31-14

## 1.2. Estrellas enanas M

Se define al tipo espectral M como las estrellas con masas entre 0.60 y 0.075  $M_{\odot}$  y luminosidades entre 0.015 y 7.2%  $L_{\odot}$  (Kaltenegger & Traub, 2009). Las enanas M se encuentran en el extremo tardío de la secuencia principal y son los objetos menos masivos capaces de sostener procesos de fusión nuclear en su interior a lo largo de su vida. Además de ser las estrellas menos masivas, también es dentro de esta categoría espectral que se encuentra el límite de masa que separa a una estrella con el interior completamente convectivo ( $<0.35M_{\odot}$ ) (Reiners & Basri, 2009). Un interior entera o principalmente convectivo es responsable de disminuir la tasa en la que se acumula He en el núcleo estelar (o evita esta acumulación por completo), esto tiene como consecuencia que las enanas M tengan vidas dentro de la secuencia principal de  $10^{13}$  años (Shields et al., 2016).

Por su tamaño, las enanas M tienen ventajas observacionales frente a otros tipos espectrales al buscar exoplanetas similares a la Tierra: la razón entre masa planetaria y estelar

produce un mayor corrimiento Doppler al estudiar el espectro estelar frente a tipos espectrales más tempranos; la razón de radios produce una mayor profundidad fotométrica durante un tránsito al observar la curva de luz de la estrella en comparación con estrellas más grandes. Y por su baja temperatura y luminosidad, la zona habitable alrededor de una enana M se encuentra muy cerca en comparación con enanas G (similares al Sol), lo que incrementa la probabilidad geométrica de observar un tránsito (Gould et al., 2003; Nutzman & Charbonneau, 2008). En la figura 1.2 se aprecia una correlación entre el tipo espectral y la probabilidad de detectar un planeta en órbita de una estrella de este tipo; el tipo espectral M presenta el máximo de planetas detectados en el intervalo de periodos orbitales observados (2 a 50 días) según es reportado por Mulders et al. (2015), con detecciones de planetas con radios similares al de la Tierra.

### 1.2.1. Actividad y fulguraciones

Las enanas M presentan actividad magnética producto de la interacción de sus atmósferas con campos magnéticos producidos por el interior altamente convectivo que tienen. Esta interacción provoca fulguraciones, liberaciones repentinas de energía electromagnética que van de  $10^{29}$  erg (minifulguraciones) a  $10^{34}$  erg (Hawley et al., 2014; Hawley & Pettersen, 1991) que puede o no estar acompañada por una emisión de partículas cargadas.

Para entender la actividad cromosférica se requiere estudiar a una estrella desde múltiples ángulos. Mediciones fotométricas de la luminosidad nos pueden permitir inferir la actividad,

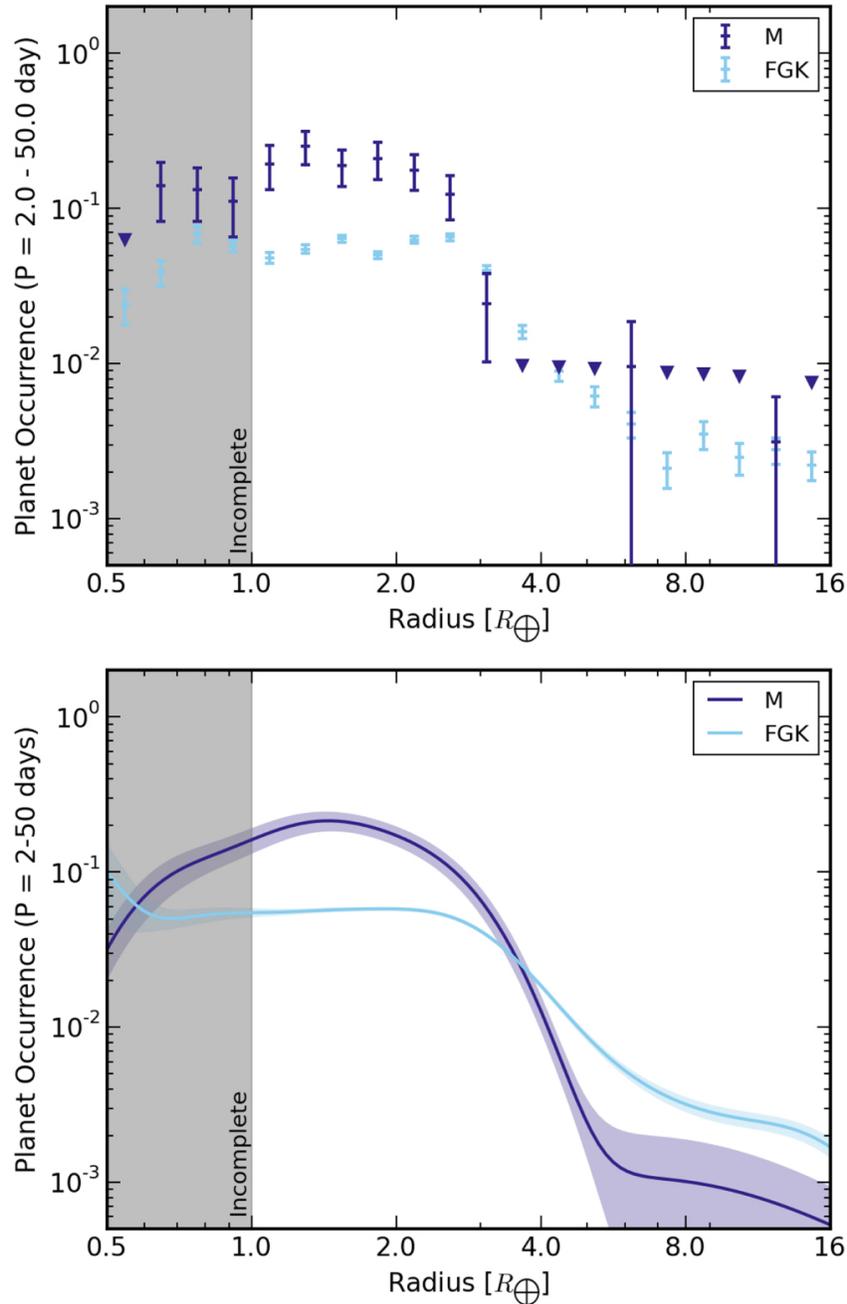


Figura 1.2: Distribución de radios planetarios para periodos orbitales entre 2 y 50 días alrededor de estrellas enanas M (azul) y estrellas de la secuencia principal FGK. El panel principal muestra las tasas de ocurrencia encasilladas, donde los triángulos denotan límites superiores  $1\sigma$ . El panel inferior muestra la curva de regresión basada en una estimación de densidad de kernel gaussiana. La región sombreada es el intervalo de confianza  $1\sigma$  basado en las estadísticas de conteo de Poisson. Las tasas de ocurrencia de los planetas son incompletas para radios  $\leq 1 R_{\oplus}$ . Gráfica tomada de Mulders et al. (2015)

mientras que las eyecciones de masa requieren un detector de partículas o que se resuelva la superficie estelar para observar fulguraciones. Gracias al acceso que tenemos a él, el Sol es la estrella mejor estudiada. Boro Saikia et al. (2018) señalan que el Sol es un ejemplo típico, a partir del cual podemos generalizar, por lo que es común utilizar la relación entre la energía de una fulguración solar con las partículas emitidas en la eyección de masa acompañante. Sin embargo, evidencia reciente parece indicar que este escalamiento no es correcto en el caso de las enanas M, con la cantidad de partículas emitidas durante una fulguración siendo mucho menor de lo esperado debido a los fuertes campos magnéticos de estas estrellas y su topología específica (Muheki et al., 2020).

Típicamente, una fulguración consiste de 3 fases, delineadas por Gibson (1973) y Syrovatskii (1972): 1. precursora: se desencadena la liberación de energía, la emisión de energía sucede en rayos X. 2. impulsiva: sucede la aceleración de las partículas cargadas hasta energías en exceso de MeV, durante esta fase se emite radiación a lo largo del espectro electromagnético. 3. de decaimiento: durante la fase final se observa un aumento y disminución de los rayos X emitidos. Cada una de estas fases puede durar desde unos cuantos segundos hasta varias horas.

Hawley et al. (2014) encontraron las siguientes relaciones empíricas entre la energía, la frecuencia por día y la duración de una fulguración al analizar las observaciones hechas por Kepler de una muestra de enanas M, magnéticamente activas. Las relaciones que encontraron son:

$$\log_{10} \frac{\Delta F_u}{F_u} = 0.7607 \log_{10} E - 25.855 \quad (1.1)$$

$$\log_{10}\nu = -1.01 \log_{10}E + 31.65 \quad (1.2)$$

$$\log_{10}t = 0.395 \log_{10}E - 9.269 \quad (1.3)$$

Donde  $F_U$  es el flujo estelar en la banda U de Johnson (banda centrada en 365 nm con  $FWHM = 65$  nm),  $E$  es la energía total de la fulguración en *ergs*,  $\nu$  es la frecuencia de las fulguraciones en fulguraciones acumulativas por día y  $t$  es la duración de la fulguración en segundos.

Es debido a la abundancia de enanas M y de planetas orbitando estas estrellas en la vecindad solar, así como las ventajas observacionales mencionadas, que se opta por utilizar una estrella de esta clase espectral para este trabajo. Sin embargo, la alta actividad magnética presentada por las enanas M puede ser un posible inconveniente para la búsqueda de vida (como se detalla en la sección §1.4.3).

### 1.3. Habitabilidad planetaria y definición de trabajo de vida

Al pensar en una búsqueda científica de vida fuera de la Tierra, dos conceptos básicos surgen inmediatamente: ¿qué es la vida? y ¿dónde podemos encontrar vida?. La respuesta a ambas se encuentran íntimamente relacionadas, sin un consenso de la definición de vida (Mariscal & Doolittle, 2020; Tsokolov, 2009), los límites de donde sería plausible encontrarla se vuelven inciertos. Y sin mas ejemplos de vida, discernir las características particulares de la vida en la Tierra de las características generales de la vida resulta imposible.

Entonces, el objetivo no es definir la vida como un concepto biológico que describa al fenómeno, sino definir un concepto operacional que nos permita guiar la investigación (Oliver & Perry, 2006). Seager et al. (2012) analizan los productos del metabolismo en la Tierra y la forma en que son producidos. Con eso, los autores argumentan que desde un punto de vista astrofísico podemos reducir a la vida a una caja negra a la que entran algunos compuestos y salen otros. Bajo una óptica similar, Jones y Linewaver (2010) reducen las características de la vida a: energía, solventes, y composición elemental común. La vida en la Tierra está compuesta entre un 45 y 50 % por carbono (Schlesinger, 1991), el carbono es el cuarto elemento mas abundante en el universo (Crowell, 1996) y la versatilidad química que tiene el carbono para formar enlaces químicos entre sí y con otros compuestos (Varios, 1965-2012), apoyan a una generalización de la vida basada en el carbono y la química que se puede realizar con el

elemento, definición de trabajo que ha sido adoptada por la NASA y ESA por igual (Hays, 2015; Horneck et al., 2016). El agua, formada por el primer y tercer elementos más abundantes (Crowell, 1996), es uno de los solventes más versátiles, al punto de que definimos a la zona habitable, el concepto que guía la búsqueda de planetas que pueden sustentar a la vida, con base en su disponibilidad.

Así, definimos a la zona habitable de una estrella como el anillo alrededor esta en el cual la presencia a largo plazo de agua líquida superficial no puede ser descartada en un planeta rocoso con atmósfera (e.g. Abe et al., 2011; Kasting et al., 1993).

## 1.4. Bioseñales

Cualquier sistema químico autosustentado se diferenciará de su medio ambiente por necesidad, la evolución no hará sino amplificar esta diferencia; por esto McKay (2004) propone esta diferencia química como señal universal de la vida y método de detección por excelencia. A esta diferencia química se le denomina bioseñal.

Se define una bioseñal como cualquier elemento, molécula, sustancia, o característica que pueda ser utilizada como evidencia de vida pasada o presente y es distinta de un fondo abiogénico (Domagal-Goldman et al., 2016).

### 1.4.1. Tipos

Hay múltiples formas de clasificar a las bioseñales, tomando distintos criterios en cuenta para hacer la categorización. Domagal-Goldman et al. (2016) clasifican a las bioseñales con base en el acceso que tenemos a ellas para estudiarlas, *remotas* e *in situ*. Las bioseñales *in situ* son aquellas a las que tendríamos acceso directo y su estudio requiere el uso de sondas, robots o misiones tripuladas; esto las pone fuera del alcance si pensamos en la búsqueda de vida fuera del Sistema Solar. Las bioseñales remotas son aquellas que podemos estudiar por medio de telescopios y análisis espectrográficos; lo que las hace candidatas ideales en la misma búsqueda. Estas bioseñales se dividen a su vez en espectrales, resueltas espacialmente y de emisión electromagnética, como se puede ver en la tabla 1.2.

Meadows (2005, 2008) propone una categorización tomando en cuenta el efecto que tiene, dividiendo a las bioseñales espectrales mencionadas por Domagal-Goldman et al. (2016) en tres categorías: 1. gaseosas: productos metabólicos directos o indirectos que constituyen parte de la atmósfera planetaria. 2. superficiales: características espectrales que resultan de la reflexión o dispersión de radiación electromagnética por bio-pigmentos o estructuras físicas de la vida y 3. temporales: modulaciones en cantidades medibles que pueden ser relacionadas con acciones, y/o patrones dependientes del tiempo, de la vida.

Hay una subclasificación de Seager et al. (2012) para las bioseñales atmosféricas (gaseosas según Meadows (2005)), en aquellas producto de la química redox dentro de organismos y aquellas que son producidas de manera secundaria. Ambas categorías son susceptibles de ser

modificadas por procesos abióticos posteriores.

Tabla 1.2: Tipos de bioseñales y ejemplos. Tabla adaptada de Domagal-Goldman et al. (2016)

	Tipo	Bioseñal	Ejemplo
<i>in situ</i>	Bioseñales visuales	Observación directa de vida	Estructuras celulares (Posiblemente observadas moviéndose o reproduciéndose)
		Fósiles	Células fosilizadas
		Artefactos de vida	Estromatolitos o microboros endolíticos
	Bioseñales químicas	Macromoléculas biológicas	Proteínas o polímeros de ácido nucleico
		Evidencia molecular de metabolismo	Fraccionamiento isotópico o homoquiralidad
	Desequilibrio termodinámico o cinético dentro del medio ambiente	Gradientes de especies redox en columnas de agua de lago	
	Biominaerales	Algunos minerales de silicato, carbonato o hierro, o enriquecimiento metálico	
<i>remotas</i>	Bioseñales espectrales	Desequilibrio ambiental a gran escala	Desequilibrio atmosférico, e.g. O <sub>2</sub> o CH <sub>4</sub>
	Bioseñales resueltas espacialmente	Estructuras geométricas de vida inteligente	Caminos, ciudades, agricultura, modificación de paisaje a gran escala
	Emisión electromagnética	Emisiones inteligentes	Señales ópticas o de radio de una civilización, cambios en el espectro de su estrella, e.g esfera/enjambre de Dyson

Seager et al. (2012) hacen una categorización de las bioseñales atmosféricas en base a la relación que mantienen con el metabolismo que las genera, en productos de la bioquímica

redox y productos secundarios (cuya cantidad producida no se correlaciona con la química de las moléculas o el número o masa de los organismos generadores). Los autores remarcan la posibilidad de que cualquiera de estos subproductos sea a su vez transformado por un proceso abiótico secundario posterior a su producción biótica.

### 1.4.2. Detección

El estudio de cada una de las bioseñales mencionadas en la tabla 1.2 dependerá fuertemente del tipo específico al que nos refiramos. Las bioseñales *in situ* se estudian por cualquier método disponible; la única limitación es el acceso a muestras. Para exoplanetas, esto descarta su estudio hasta que algún avance tecnológico/teórico permita viajar a otros sistemas estelares en periodos de tiempo razonables para la vida humana. Dentro del sistema solar, esto nos limita a técnicas cuyas herramientas puedan formar parte de una sonda o rover, las muestras que pudiéramos regresar a la Tierra, o que pudieran formar parte del instrumental de una misión tripulada (Domagal-Goldman et al., 2016).

Las señales *remotas*, por otra parte, requieren del uso de telescopios, tanto espaciales como en tierra y en particular de espectroscopía en el infrarrojo o visible para bioseñales atmosféricas (Fuji et al., 2018).

Para caracterizar bioseñales atmosféricas se puede utilizar el espectro de transmisión, reflexión, o emisión del planeta. En la figura 1.3 se esquematiza un planeta orbitando a su

estrella anfitriona, aquí resaltan tres momentos: 1. durante el tránsito principal (**transit**) hay un oscurecimiento de la estrella, tanto por la parte sólida del planeta, como por la atmósfera; aquí es donde se podría medir un espectro de transmisión de la atmósfera planetaria. 2. entre ambos tránsitos el planeta refleja parte de la luz estelar, mientras más cerca del tránsito secundario (**occultation**) más del lado diurno del planeta está en la línea de visión. Este lado diurno es el que está reflejando la luz estelar y donde podríamos hacer la medición de un espectro de reflexión.

Usando un coronógrafo entre ambos tránsitos se puede bloquear la luz proveniente de la estrella, y obtener el espectro combinado de emisión y reflexión. De forma similar, se puede usar interferometría para extraer el espectro combinado.

En la figura 1.4 se puede ver un ejemplo de espectros de reflexión simulados para varios planetas en unidades de la razón del flujo planeta a estrella. Mientras que en la figura 1.5 se ve un espectro de transmisión de TRAPPIST-1e si fuera un planeta terrestre con océano global junto con simulaciones de observaciones de 50 tránsitos con varios instrumentos. En la figura 1.5 se incluye un simulacro de como se verían estas observaciones con LUVOIR y JWST, mostrando las limitaciones que tendría la siguiente generación de telescopios espaciales para detectar algunas bioseñales; aquellas que implican variaciones temporales, por ejemplo, se enfrentan a la precisión de los instrumentos y a la necesidad de múltiples tránsitos.

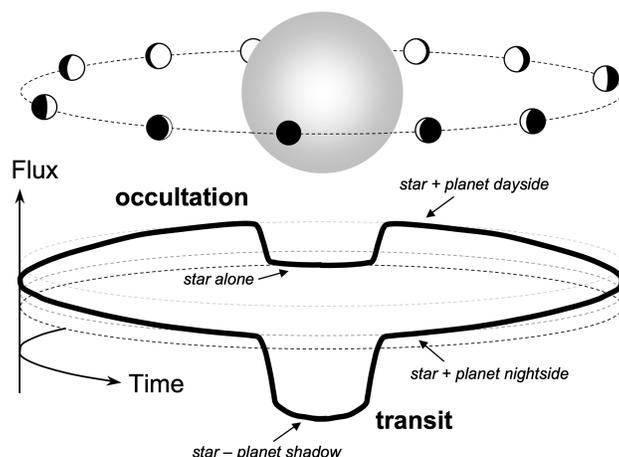


Figura 1.3: Ilustración de tránsitos y ocultaciones. Solo se observa el flujo combinado de la estrella y el planeta. Durante un tránsito, el flujo baja porque el planeta bloquea una fracción de la luz estelar. Después el flujo sube conforme el lado diurno del planeta entra en visión. El flujo vuelve a caer cuando el planeta es ocultado por la estrella. Ilustración tomada de Winn (2014).

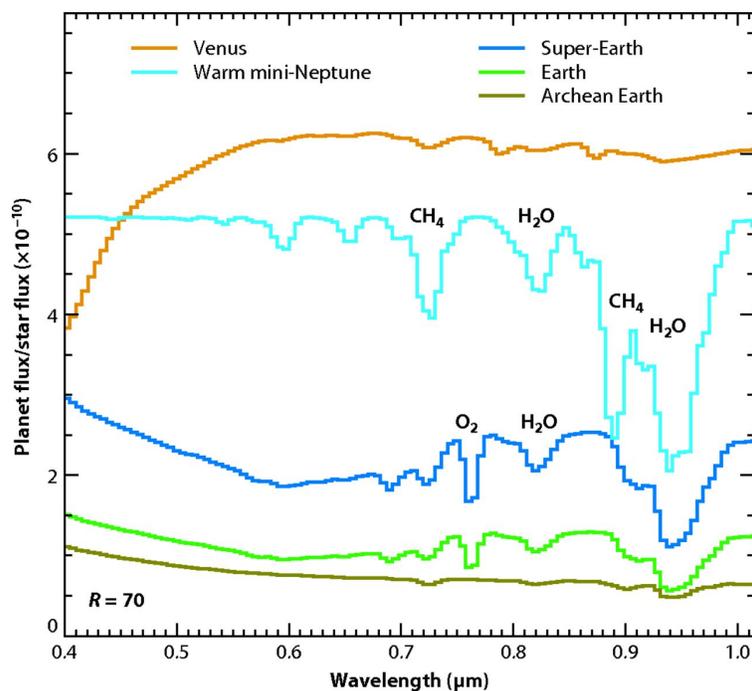


Figura 1.4: Espectros de luz reflejada son presentados en unidades de la razón del flujo planeta a estrella y son de la resolución espectral anticipada para exoTierras con futuros telescopios espaciales capaces de bloquear la luz estelar. Ilustración tomada de Seager y Bains (2015).

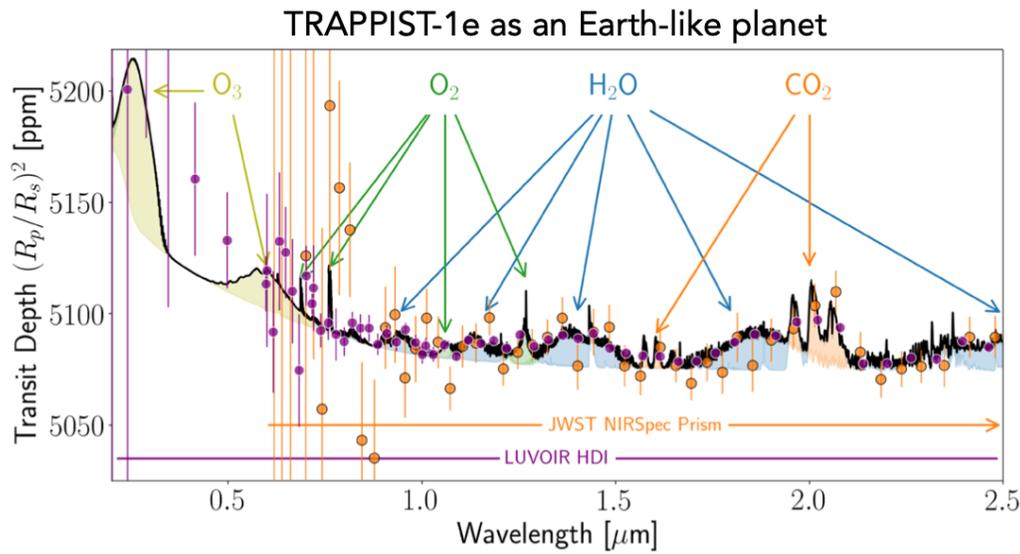


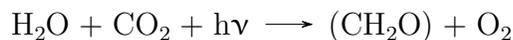
Figura 1.5: LUVOIR puede observar planetas transitando enanas M en el UV, Visible e infrarrojo, complementando observaciones de JWST y telescopios en tierra. Se muestra un posible espectro de transmisión de TRAPIPIST-1e como un planeta cubierto por océanos con 1 bar de atmósfera. Las observaciones simuladas suponen 50 tránsitos medidos con los instrumentos LUVOIR/HDI y JWST/NIRSpec prism. Figura tomada de T. L. Team (2019).

### 1.4.3. Falsos positivos y mecanismos abióticos que los producen

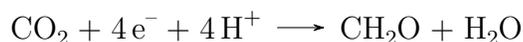
Si bien en el contexto de la vida terrestre entendemos como ésta afecta y deja evidencia de su existencia en su entorno, no todos los planetas tienen las mismas condiciones, por lo que aquello que es evidencia aquí en la Tierra, no necesariamente se puede entender como una evidencia universal. Por esto, es necesario estudiar y entender los procesos abióticos que pueden producir la misma características aparentes que una bioseñal.

En la Tierra, la acumulación de  $O_2$  y  $O_3$  atmosféricas es considerada una bioseñal por excelencia (Meadows, 2017, 2018). El proceso biótico que en la Tierra que convierte energía lumínica en energía química y genera  $O_2$  como producto secundario se conoce como fotosíntesis

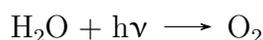
oxigénica. Seager et al. (2012) resumen a la fotosíntesis oxigénica en términos de la ecuación química:



Donde  $(\text{CH}_2\text{O})$  representa algún carbohidrato que después será convertido en biomolécula. Esta reacción incluye la colecta de luz y la creación de biomasa mediante la fijación de carbono. Podemos separar estas reacciones para puntualizar el proceso metabólico y sus eventuales sub-productos.



Al separar la generación de electrones de la síntesis de carbohidratos se hace evidente la generación de oxígeno como subproducto que usa el  $\text{H}_2\text{O}$  como donador de electrones. Se puede resumir la fotosíntesis oxigénica como:



Así, el oxígeno es la principal bioseñal en la Tierra, en parte por la cantidad de radiación solar incidente y la disponibilidad de agua para la vida superficial. Sin embargo, aunque la Tierra temprana tenía radiación incidente, agua y  $\text{CO}_2$  no había aún una bioseñal de  $\text{O}_2$ , porque la vida no había evolucionado la capacidad de fijar  $\text{CO}_2$  al obtener electrones de la fotólisis del agua.

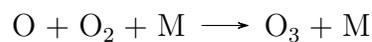
La acumulación de  $O_2$  resulta una buena bioseñal atmosférica pues la molécula tiene una vida lo suficientemente larga frente a sumidero fotoquímicos como para poder acumularse; pero lo suficientemente corta como para que haya una recombinación con otras moléculas. Esto hace que su observación indique la presencia de un mecanismo de producción constante, lo que sugería vida (Catling et al., 2005; Lèger et al., 2011).

El oxígeno atmosférico entra en lo que se conoce como el ciclo de Chapman, un ciclo oxígeno-ozono que depende de la radiación estelar en el UV, por lo que el ozono se convierte en un acompañante del oxígeno como bioseñal. Las reacciones químicas que conforman al ciclo de Chapman son:

- El oxígeno molecular es fotolizado por un fotón UV ( $\lambda < 242\text{nm}$ ).



- Después, el oxígeno atómico participa en una reacción de tres cuerpos donde choca con una molécula que no sufre cambio químico y obtienen la energía suficiente para reaccionar con oxígeno molecular y producir ozono, o reaccionar con un ozono y producir oxígeno molecular.



- El ozono es fotolizado por un fotón UV ( $\lambda < 240\text{-}310\text{nm}$ ).



Sin embargo, se conocen hoy en día algunos mecanismos abióticos que pueden causar esta acumulación sin necesidad de vida. Por ejemplo, en la atmósfera ( $\text{N}_2\text{-CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ ) de un planeta en la zona habitable con alto contenido de  $\text{CO}_2$  (90%) se podría acumular  $\text{O}_2$  (y  $\text{O}_3$ ) bajo la presencia de un océano superficial y si el espectro UV de la estrella anfitriona favorece la fotólisis del  $\text{CO}_2$  (Domagal-Goldman et al., 2014; Harman et al., 2015; Tian et al., 2014). La cantidad de oxígeno u ozono que se termina acumulando depende fuertemente de otras condiciones, como flujo de compuestos con hidrógeno (reducidos). Atmósferas pobres en gases no condensables y sin trampa fría (Wordsworth & Pierrehumbert, 2014) o una fase extendida de efecto invernadero posterior a la formación planetaria debida a la prolongada evolución superluminosa de las enanas M (Luger & Barnes, 2015; Tian, 2015) podrían facilitar el escape de  $\text{H}_2$  y acumulación de  $\text{O}_2$ . Estos escenarios de acumulación de  $\text{O}_2$  no necesitarían agotar la reserva de  $\text{H}_2\text{O}$  del planeta, pero podrían saturar algún sumidero del compuesto (e.g. FeII en la corteza).

Otro mecanismo que podría llevar a la acumulación de  $\text{O}_2$  y  $\text{O}_3$  es que la falta de acumulación de OH en atmósferas secas causa una inhibición de la recombinación del  $\text{CO}_2$  y esto lleva a la acumulación (Gao et al., 2015).

Por su parte, Narita et al. (2015) encontraron que la presencia de reservas superficiales

de TiO, junto con océanos superficiales poco profundos y un emisión elevada de UV cercano por parte de la estrella anfitriona pueden provocar que la fotólisis del H<sub>2</sub>O genere grandes cantidades de O<sub>2</sub>.

Si bien la caracterización de atmósferas fuera del Sistema Solar de planetas similares a la Tierra se encuentra a la espera del lanzamiento de la próxima generación de telescopios espaciales. Es mediante la simulación de estas que preparamos las predicciones con las que contrastar observaciones. Trabajos como el presente permitirán, en un futuro, falsear posibles detecciones de vida. Mas aún, estos trabajos permitirán informar la planeación y construcción de las futuras misiones que busquen caracterizar atmósferas planetarias fuera del Sistema Solar.

## 1.5. La atmósfera durante el Arqueano

Originalmente se definió al Arqueano como el periodo de tiempo entre el surgimiento de la vida en la Tierra hasta el advenimiento de O<sub>2</sub> libre, entre hace 4 y 2.5 Ga (Cloud, 1972). En ese sentido, podemos pensar en el Archeano como el eón donde surge la vida, pero aún no aparecen los organismos que producen oxígeno como desecho. En la figura 1.6 (panel izquierdo) se pueden ver como han cambiado las abundancias de sustancias importantes en la atmósfera terrestre, la predominancia del oxígeno no sucede sino después de hace 2.5Ga y coincide con la disminución del CO<sub>2</sub> y esto se ha explicado por el surgimiento de organismos que liberan O<sub>2</sub> como subproducto de su metabolismo.

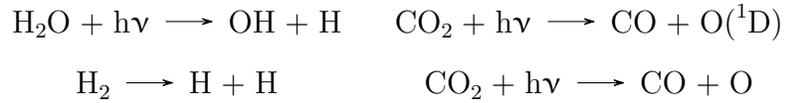
La atmósfera durante el Arqueano era fundamentalmente distinta de la atmósfera moderna. Esta atmósfera era con mayor cantidad de compuestos reducidos, como  $H_2$  y  $CH_4$ , etc. Poco oxígeno del que hablar y, esencialmente, nada de ozono (Catling & Zahnle, 2020).; la mayoría de estos compuestos tienen sus abundancias acotadas por la evidencia fósil y mineral que se ha encontrado, sin embargo, como los autores señalan, el  $CO_2$  está pobremente acotado entre 0.0025 y 0.8 bar, lo que da espacio para considerar distintas concentraciones de  $CO_2$  al realizar simulaciones.

También en la figura 1.6 (panel derecho) se aprecia como los cambios en composición atmosférica han modificado las características espectrales de la Tierra. La disminución del metano atmosférico ha hecho la presencia de agua más evidente, mientras que la evolución y expansión de organismos fotosintéticos oxigénicos aumenta el de oxígeno y ozono a cantidades detectables en el espectro, haciéndose más prominentes con el tiempo.

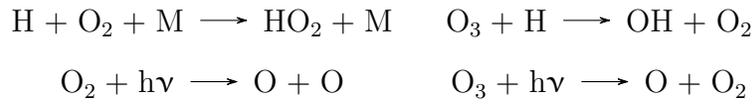
Aun sin la presencia de vida, la composición atmosférica de un planeta está íntimamente ligada a su estrella anfitriona. En la figura 1.7 podemos apreciar la abundancia de compuestos que son de nuestro interés para un planeta con condiciones de frontera similares a la Tierra Moderna pero orbitando AD Leonis. La diferencia en los flujos emitidos por estas dos estrellas con el Sol causan diferencias en las composiciones atmosféricas, en particular la diferencia en la cantidad de  $O_3$  y  $CH_4$  debido a la particular emisión en el UV (100-350 nm) de las enanas M (Segura et al., 2005).

El aumento de flujo estelar provoca un aumento en la tasa de fotolización de algunas

especies. Lo que lleva a la acumulación, en particular, de hidrógeno y oxígeno atómico mediante las siguientes reacciones químicas:



Al mismo tiempo, se inicia una fotólisis de  $\text{H}_2\text{O}$  a gran escala que lleva a una acumulación de OH e H en la atmósfera. Conforme crece la cantidad de H en la atmósfera aumenta la destrucción de oxígeno molecular y ozono. Las principales reacciones de destrucción de estos compuestos son, en orden de importancia para cada especie:



Estas reacciones se volverán importantes durante las simulaciones debido al aumento de flujo que conlleva una fulguración.

## 1.6. Trabajos anteriores en el área

Estudios previos de los efectos en la habitabilidad y en la búsqueda de vida por el clima espacial han sido realizados desde múltiples enfoques. Por ejemplo, Luger y Barnes (2015) mostraron que la radiación UV extrema en la zona habitable de enanas M puede actuar como mecanismo de escape atmosférico de grandes cantidades de  $\text{H}_2\text{O}$  si los planetas se forman con

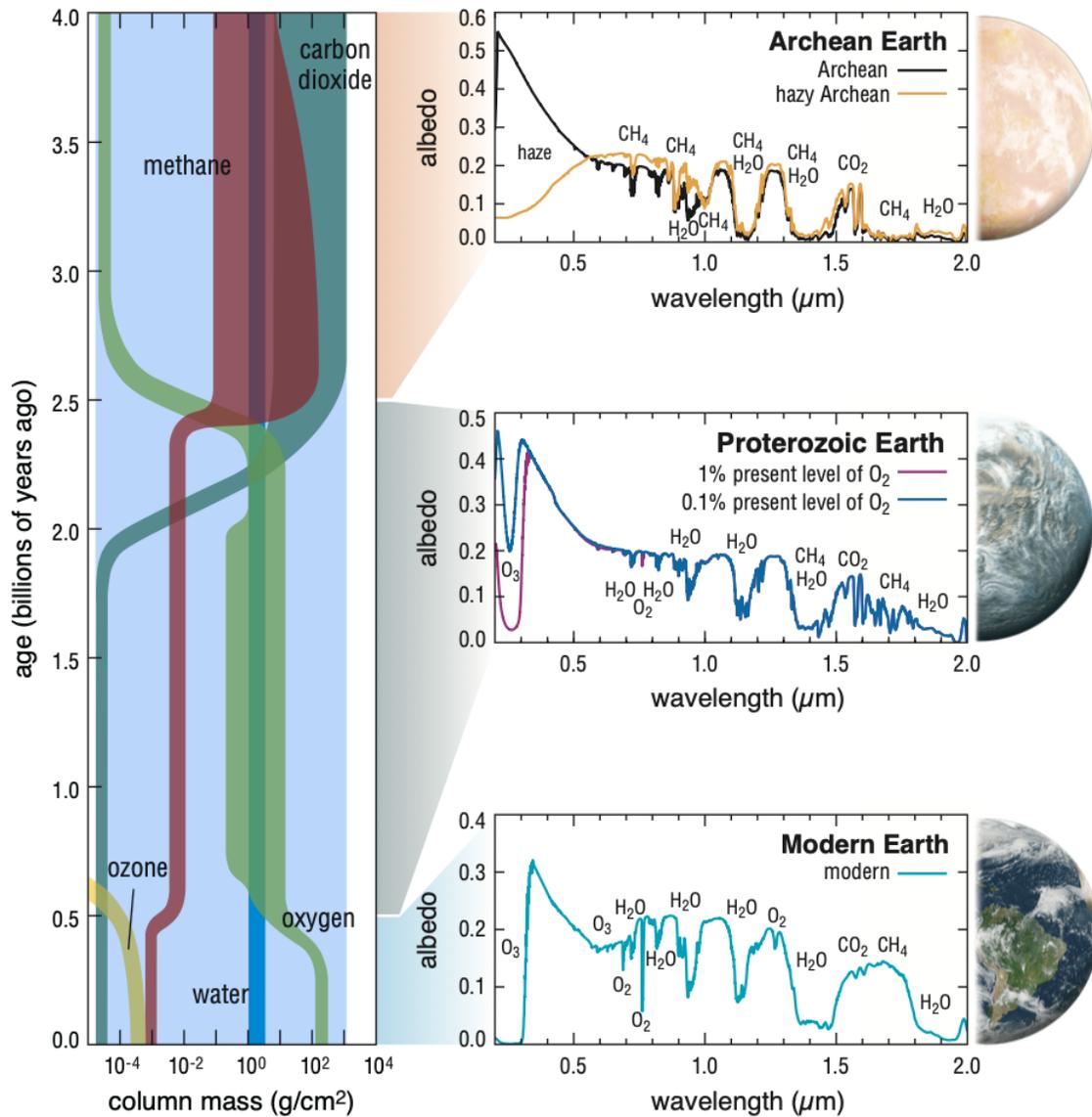


Figura 1.6: La composición atmosférica de la Tierra ha cambiado significativamente a lo largo de su historia (panel izquierdo), así como sus características espectrales observables (panel derecho). Por ejemplo, las bioseñales canónicas de la Tierra Moderna (e.g. O<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>) no eran visibles durante el eon Arcaico. Figura tomada de T. L. Team (2019).

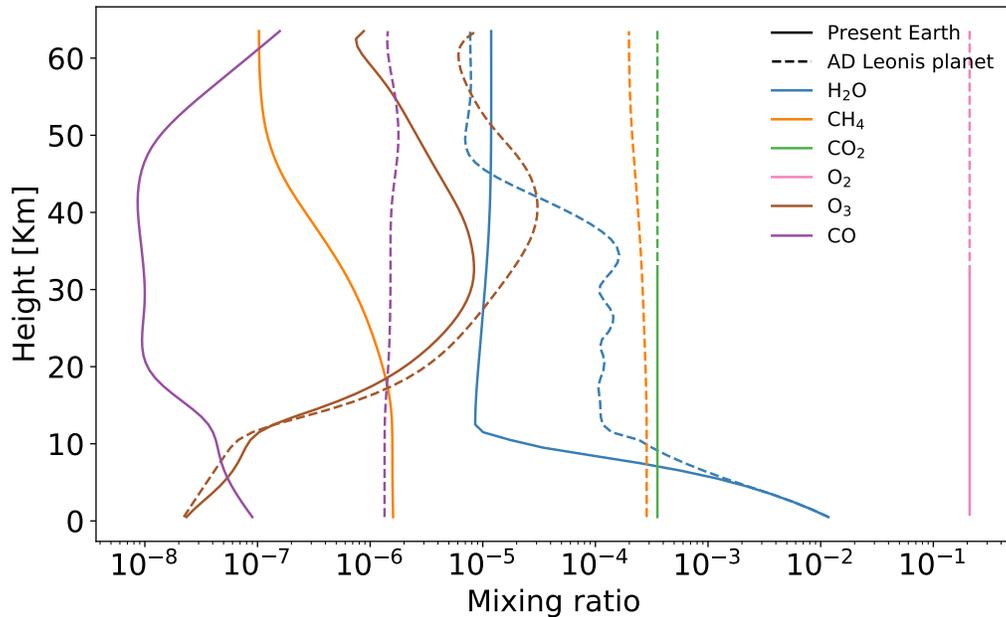


Figura 1.7: Abundancias de compuestos de interés en simulaciones de modelos que consideran a la Tierra como un exoplaneta, en comparación con la Tierra moderna como modelada. Datos tomados de Segura y Kaltenegger (2010) y Segura et al. (2003), respectivamente.

abundante agua superficial. Por lo que la fase superlumínica temprana de las enanas M puede actuar en detrimento de la habitabilidad planetaria aun dentro de la zona habitable tradicional.

Segura et al. (2010) fue el primer trabajo en estudiar los efectos de una fulguración en la composición química y evolución de una atmósfera en un planeta habitable; este trabajo utiliza la fulguración (con energía total de  $\approx 10^{34}$  erg) medida por Hawley y Pettersen (1991) el 12 de abril de 1985 actuando sobre un planeta similar a la Tierra moderna (78%  $N_2$  y 21%  $O_2$ ). Los resultados de este trabajo señalan que la radiación UV emitida durante la fulguración no tiene un efecto significativo sobre la profundidad de columna del ozono. Mientras que con la inclusión de partículas cargadas ( $5.9 \times 10^8$  partículas  $cm^{-2} s^{-1} sr^{-1}$  con energías  $> 10 MeV$ ) los autores encuentran un agotamiento del ozono de hasta 94% en un planeta sin campo magnético,

sin embargo, esto no presenta un peligro directo para la vida.

Vida et al. (2017) analizan el sistema de TRAPPIST-1 con información obtenida con Kepler/K2. Un análisis de la curva de luz les permite mostrar que la estrella emite un promedio de 0.75 fulguraciones al día, con energías entre  $1.26 \times 10^{30}$  y  $1.24 \times 10^{33}$  erg. Tras hacer una comparación con las conclusiones de Segura et al. (2010), los autores concluyen que la energía recibida por el planeta es suficiente para generar dudas sobre la posible habitabilidad en el sistema TRAPPIST-1.

O'Malley-James y Kaltenegger (2017) encontraron que el estado óxico de la atmósfera es esencial para proteger la superficie de la emisión UV de su estrella anfitriona. Para esto los autores simulan la interacción de TRAPPIST-1 con tres de sus planetas que se encuentran dentro de la zona habitable (e, f, g). Para esto utilizan: 1. una atmósfera similar a la terrestre actual, con una capa protectora de ozono similar a la terrestre y a 0.1 y 1 bar de presión, y 2. una atmósfera anóxica ( $\sim 10\%$  CO<sub>2</sub>,  $\sim 90\%$  N<sub>2</sub>, sin O<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, o N<sub>2</sub>O) a 1 bar. Los autores concluyen que la presencia de ozono podría indicar que el planeta es superficialmente habitable; mientras que en ausencia de la capa de ozono, la irradiación superficial de UV haría el planeta inhabitable hasta para extremófilos terrestres (e.g. *D. radiodurans*).

Estrela y Valio (2018) estudian el impacto de una súper-fulguración ( $1.81 \times 10^{35}$  erg) emitida por Kepler-96 en una Tierra hipotética circundando a la estrella. Encuentran que dos ejemplos de vida bacteriana (*E. coli* y *D. radiodurans*) podrían sobrevivir la súper-fulguración si el planeta cuenta con una capa de ozono, o a 28 y 12 m de profundidad en un océano si esta

capa no existiera. Y que incluso *D. radiodurans* podría sobrevivir en la superficie del planeta fulguraciones menos energéticas.

Tilley et al. (2018) expandieron el trabajo de Segura et al. (2010) al incluir múltiples fulguraciones y eventos de partículas cargadas en el estudio de la habitabilidad de Tierras M (planetas rocosos similares a la Tierra que orbitan una enana M). Este trabajo aprovecha el trabajo de Davenport et al. (2014) y Hawley et al. (2014) para mejorar la forma de la curva de luz usada para las fulguraciones y la frecuencia con la que suceden estas.

Dado que sabemos que la radiación UV tiene un efecto en la producción de  $O_2$  y  $O_3$  que puede resultar en falsos positivos, entonces resulta relevante estudiar el efecto particular que tienen las fulguraciones al presentar un incremento en la emisión de UV. Además, ninguno de los estudios anteriores considera atmósferas de  $H_2$ - $N_2$ - $CO_2$  similares a las de la Tierra prebiótica durante el Arqueano, que es la atmósfera mas temprana de la que tenemos evidencia clara de su composición en la Tierra.

## 1.7. Objetivo del trabajo

El objetivo de este trabajo es explorar la producción abiótica de oxígeno y ozono en la atmósfera de una Tierra M con composición similar a la atmósfera terrestre durante el Arqueano (compuesta por  $N_2$  y  $CO_2$ ) bajo la influencia del flujo estelar de una enana M durante una fulguración.



# Capítulo 2

## Metodología

### 2.1. Flare-mos (atmos+fulguraciones)

En este trabajo se utilizó **atmos**, este código consiste en un modelo fotoquímico 1-dimensional que calcula las abundancias de especies químicas como función de la altitud en base a condiciones de frontera especificadas por el usuario; la última versión pública del código está detallada por Arney et al. (2016).

En la sección 2.1.1 se hace una revisión general de un modelo fotoquímico y la estructura del código computacional. Las modificaciones que sufrió el código entre la versión pública y aquella usada en este trabajo son detalladas brevemente en §2.1.2. La actualización del código **atmos** con respecto al detallado por Arney et al. (2016) significó que se necesitara adaptar

nuevamente el código para trabajar con una fulguración, como se hizo previamente en Miranda Rosete (2019). Esta adaptación está detallada en §2.1.3.

### 2.1.1. El modelo

El modelo fotoquímico consiste en una atmósfera de 100 km de altura, dividida en 200 capas plano-paralelas de 0.5 km de grosor. El esquema prebiótico utilizado en este trabajo incluye 74 especies químicas relacionadas entre sí por 392 reacciones químicas (se incluye una lista completa de las especies en el anexo A y de la red de reacciones químicas en el anexo B), de estas especies 11 son de vida corta y solamente el  $N_2$  se considera como inerte. Las especies de vida corta son consideradas como en equilibrio fotoquímico, lo que permite despreciar su transporte atmosférico y excluirlas de la matriz Jacobiana que se resuelve a cada paso de tiempo. La densidad numérica para cada una de las especies se calcula resolviendo ecuaciones de flujo y continuidad de masa en cada una de las capas de la atmósfera de forma simultánea por medio del método de Euler inverso. Para el transporte vertical se considera difusión molecular y de eddys. Las condiciones de frontera de cada una de las especies se pueden establecer en la superficie y borde superior de la atmósfera. Para la transferencia radiativa se utiliza un método de  $\delta$  2-corrientes según está detallado por Toon et al. (1989).

### 2.1.2. Cambios del modelo respecto al trabajo anterior

En comparación con la versión pública de **atmos** publicada por Arney et al. (2016), la rama utilizada en este trabajo incorpora una versión en progreso del código detallado en Lincowski et al. (2018) con las modificaciones detalladas por Ranjan et al. (2020).

De los cambios detallados en Lincowski et al. (2018), son relevantes para este trabajo los siguientes: 1. Se expandió la rejilla de la longitud de onda para incluir longitudes de onda menores que Ly- $\alpha$  (121.567 nm) y una resolución aumentada a  $100 \text{ cm}^{-1}$ , por lo que se pasan de 118 a 750 cajones en el flujo. 2. Se actualizaron las secciones eficaces de múltiples moléculas (Lincowski et al., 2018, ver Tabla 6), entre las que se encuentran  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_3$ ,  $\text{SO}_3$ , etc. 3. Se actualizó el rendimiento cuántico del  $\text{O}_3$  conforme al ajuste hecho por Matsumi et al. (2002) y Nishida et al. (2004), lo que permite extender la fotoquímica a bajas temperaturas. 4. Se modificó el perfil del vapor de agua para que fuese tratada como cualquier otra especie de vida larga, en vez de estar fija a un perfil adiabático húmedo (como lo es en la Tierra). 5. Y, de forma similar, se modificó el tratamiento del  $\text{CO}_2$  para que también sea tratado como especie de vida larga. Este es uno de los cambios mas relevantes para este trabajo porque ambos compuestos influyen en la producción y destrucción de oxígeno y ozono abióticos. El  $\text{CO}_2$  en el modelo anterior funcionaba como una fuente infinita de átomos de O.

Además de estos cambios, Ranjan et al. (2020) realizaron otra serie de modificaciones al código: 1. Se identificaron y corrigieron una serie de errores en la red química que llevaban a la supresión de  $\text{CO}_2$  por parte del  $\text{SO}_2$ . 2. también identificaron un problema con el perfil de

presión-temperatura auto consistente. Este perfil presenta una estratosfera caliente debido al calentamiento estratosférico de onda corta causado por neblinas de gran altitud. Estas neblinas provienen de una emisión biogénica alta de  $\text{CH}_4$ . Esto conduce a una estratosfera húmeda y una alta tasa de fotólisis del  $\text{H}_2\text{O}$ . Sin embargo, en un planeta abiótico, la falta de producción vigorosa de metano provoca que no se espere la formación de neblinas y se espere que sus estratosferas sean secas y frías (Arney et al., 2016; DeWitt et al., 2009; Guzmán-Marmolejo et al., 2013). 3. Por último, se midieron las secciones eficaces del  $\text{H}_2\text{O}$  en el UV cercano ( $>200\text{nm}$ ) a 292 K, estas secciones son mayores a lo que se consideraba previamente. Por lo que se elevará la producción de OH debido a fotoionización, con mayor cantidad de OH disponible en la atmósfera habrá una recombinación más eficiente de CO y  $\text{O}_2$ .

En la figura 2.1 se puede ver una comparación entre las atmósferas iniciales usadas en el trabajo anterior (Miranda Rosete, 2019) y este trabajo para el caso con 30% de  $\text{CO}_2$  con razón de mezcla de  $\text{H}_2$  fija. Algunas de las diferencias son producto de una selección de condiciones de frontera distintas, otras son producto de los cambios listados en esta sección; en particular, la atmósfera de este trabajo presenta una cantidad menor de agua por encima de los 15 km, gracias a la sección eficaz medida por Ranjan et al. (2020).

### 2.1.3. Modificaciones realizadas al modelo

La razón por la que **atmos** no puede resolver la fotoquímica durante una fulguración *prima facie* radica en que el código no tiene forma de tratar con el cambio en el flujo estelar que

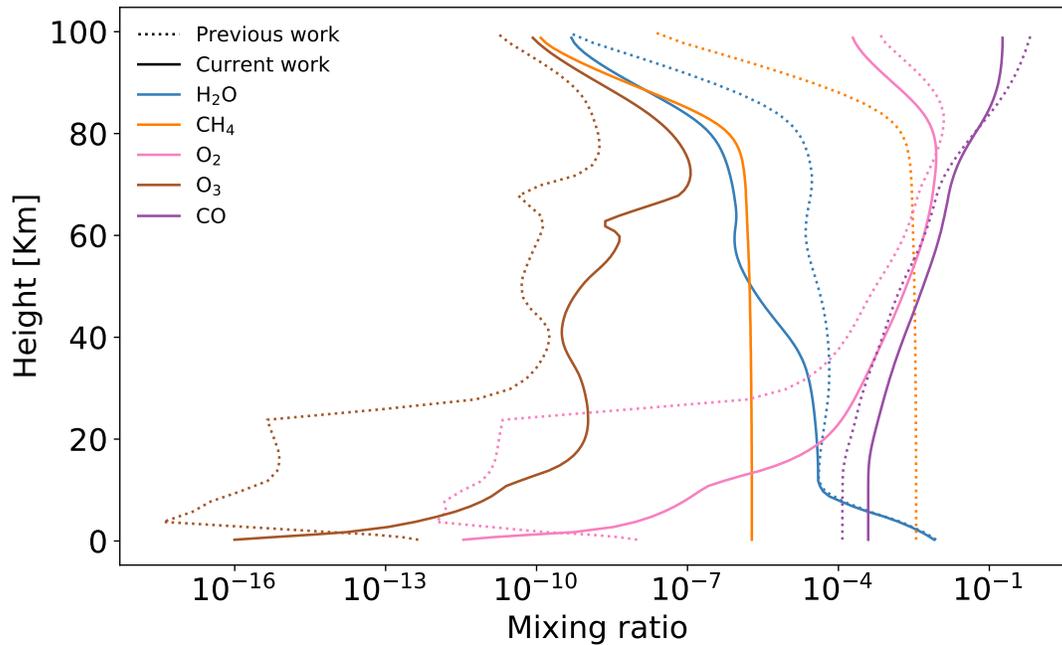


Figura 2.1: Comparación de la composición atmosférica inicial entre el trabajo actual y el trabajo anterior (Miranda Rosete, 2019).

ocurre durante una fulguración, no tiene forma de controlar el tiempo para dar pasos temporales que coincidan con el muestreo que se tiene de la curva de luz, o forma de retro-alimentar la solución de uno de estos tiempos para poder continuar con el siguiente paso de la fulguración.

Para resolver estos problemas empezamos con convertir al programa principal del modelo fotoquímico de **atmos** en una subrutina, creando un programa por encima de este que se encarga del control de input y temporal que necesitamos. Además, una descripción más detallada de en qué consiste un modelo fotoquímico es incluida en el anexo C.

La subrutina fotoquímica funciona en 4 modos distintos, (1) primero, la subrutina toma la atmósfera inicial y el espectro basal estelar y corre hasta que transcurran  $10^{18}$  años, que es el tiempo al que normalmente llega el código al alcanzar el estado estacionario. Como

la atmósfera se corre previamente hasta el estado estacionario, este primer modo finaliza en unos 100 pasos de tiempo. El resultado final de este paso se guarda para el siguiente paso del programa; (2) aquí es donde empieza la fulguración(nes), más adelante se detalla la diferencia entre una y varias fulguraciones, pero la subrutina se comporta de igual manera: para cada uno de los espectros hay un tiempo de corte asociado que le indica al código hasta donde correr antes de parar, guardar la atmósfera resultante, cambiar de espectro y repetir; (3) después de la fulguración empieza el tiempo de recuperación de la atmósfera, durante el cual se regresa al flujo basal estelar pero se sigue controlando el tiempo durante el cual corre la subrutina. El tiempo de corte se calcula como:

$$T_{corte} = 5 \times 10^3 \times \left(10^{\Delta \cdot \text{paso temporal}}\right)$$

para poder muestrear la atmósfera durante la recuperación y ver la evolución de las distintas especies que nos interesan. Al final se guarda la atmósfera para el siguiente paso. Al final se cierran los archivos abiertos y se produce el output final.

#### 2.1.4. Tratamiento de las fulguraciones

La curva de luz de la estrella durante la fulguración es muestreada en 30 tiempos distintos, discretizando la curva y produciendo 30 espectros distintos a los que es necesario exponer la atmósfera.

Para el caso de una fulguración se preparan previamente los espectros de cada uno de estos pasos y se alimentan uno por uno durante la fase de la corrida mientras se encuentra en la fulguración. Cuando el programa llega a la fulguración, a la rutina fotoquímica se le informa del tiempo en el que tiene que detenerse y lee un archivo con el flujo estelar en función de la longitud de onda.

### **Multiflare**

El hecho de tratar una serie de fulguraciones de la misma manera que una única fulguración se vuelve mas complicado conforme crece el número de fulguraciones. Cada fulguración está muestreada en 30 tiempos distintos, que tendrían que ser preparados con antelación. La alternativa por la que optamos es utilizar factores de escala para cada uno de los muestreos que permitan escalar el espectro, duración y máximo de la fulguración para cada una de las fulguraciones en la serie. De esta manera se hace un doble escalamiento, primero de la fulguración según vayan cambiando durante la serie y, después, del espectro a lo largo de cada una de las fulguraciones. Se realizó el trabajo de preparación del código para poder simular múltiples fulguraciones, sin embargo, aún no se realizan estas simulaciones.

## 2.2. Entrada del modelo

El modelo fotoquímico requiere de condiciones iniciales, un conjunto de especies fotoquímicas que hacer reaccionar, una lista de reacciones químicas para operar y un espectro estelar para impulsar la fotoquímica. En la tabla 2.1 se listan algunas de las especies involucradas en el modelo, así como su condición de frontera, en el anexo A se enlistan todas las especies y sus condiciones de frontera. Mientras que en el anexo B se enlistan las reacciones que conforman la red química del modelo.

En total se hicieron 11 simulaciones diferentes, se variaron el  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2$ , y el flujo de  $\text{H}_2$ . El  $\text{CO}_2$  se varió con concentraciones de: 3, 10, 30, 60 y 90% de fracción por volumen. En dos variantes, con un flujo de  $\text{H}_2$  de  $3 \times 10^{10}$  partículas  $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-2}$  (Tian et al., 2005) o 1 partícula  $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-2}$  (nominalmente un flujo nulo). Por último, se realizó una simulación donde la atmósfera fue desecada previamente al hacer la altura de la troposfera igual a cero; esta atmósfera se preparó con 90%  $\text{CO}_2$  y flujo de  $\text{H}_2$  nulo.

Como fuente del espectro estelar y la curva de luz durante la fulguración se utilizó la estrella AD Leonis (AD Leo, Gl 388), una enana roja (tipo espectral M) que se encuentra en la constelación de Leo a 4.9026 pc de la Tierra. En la tabla 2.2 se presentan algunas características de AD Leo y del Sol como punto de comparación.

Para el espectro basal de AD Leo se utilizó el representado en la gráfica 2.2. Este espectro fue escalado de manera que nuestro planeta hipotético reciba la misma energía integrada

Tabla 2.1: Condiciones de frontera usadas en las simulaciones

Corrida	CO <sub>2</sub>	$v_{\text{dep}}$ (cm/s)*	H <sub>2</sub>	
			Flujo superficial (s <sup>-1</sup> cm <sup>-2</sup> )	Razón de mezcla superficial fija
	Tierra presente			$5.5 \times 10^{-7}$
1	a	0.03		$5.0 \times 10^{-4}$
	b	0.03	0.0	1.0
2	a	0.1		$5.0 \times 10^{-4}$
	b	0.1	0.0	1.0
3	a	0.3		$5.0 \times 10^{-4}$
	b	0.3	0.0	1.0
4	a	0.6		$5.0 \times 10^{-4}$
	b	0.6	0.0	1.0
5	a	0.9		$5.0 \times 10^{-4}$
	b	0.9	0.0	1.0
	c	0.9	0.0	1.0

\*Velocidad de depositación constante.

de AD Leo que la Tierra del Sol, lo que se conoce como una unidad astronómica equivalente.

Durante la fulguración, se siguió el procedimiento detallado en Tilley et al. (2018) para mejorar la curva de luz medida por Hawley y Pettersen (1991) de una fulguración de  $10^{34}$  erg de la estrella AD Leonis. Los autores aprovecharon una serie de resultados estadísticos obtenidos de las observaciones de GJ 1243 (M4) realizadas por Kepler para extender el rango de longitudes de onda que abarca el perfil de flujo estelar durante la fulguración. Además, se incorporó una

Tabla 2.2: Detalles misceláneos de AD Leo y el Sol. Se incluyen: información de la estrella, distancia a la que orbita un planeta hipotético, usado para este trabajo, que recibe la misma energía promedio que la Tierra del Sol y la energía emitida en Ly- $\alpha$ . Tabla adaptada de Domagal-Goldman et al. (2014)

Estrella	Tipo espectral	$T_{ef}$ (K)	Luminosidad ( $L_{\odot}$ )	Distancia (pc)	Semieje mayor (AU)	Ly $\alpha$ (erg/cm <sup>2</sup> /s)
Sol	G2V	5770	1	0.0	1	8.17
AD Leo	M3.5V	3400	0.023	4.9	0.16	390

serie de relaciones empíricas entre el flujo, la energía total y la frecuencia de las fulguraciones obtenida por Davenport et al. (2014) y Hawley et al. (2014). Este procedimiento produjo la curva de luz representada en 2.3 y la serie de espectros representados en la figura 2.4.

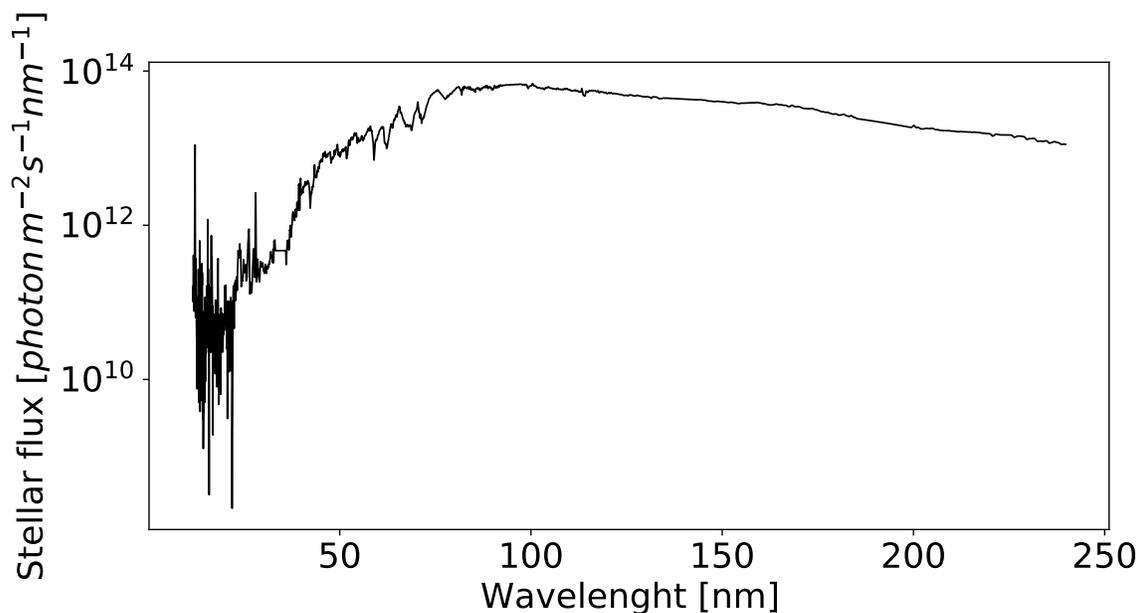


Figura 2.2: Flujo estelar basal de AD Leo.

En el caso de una serie de fulguraciones, se aprovechó la curva de luz detallada por Davenport et al. (2014) que incluye una serie de fulguraciones, para escalar las fulguraciones

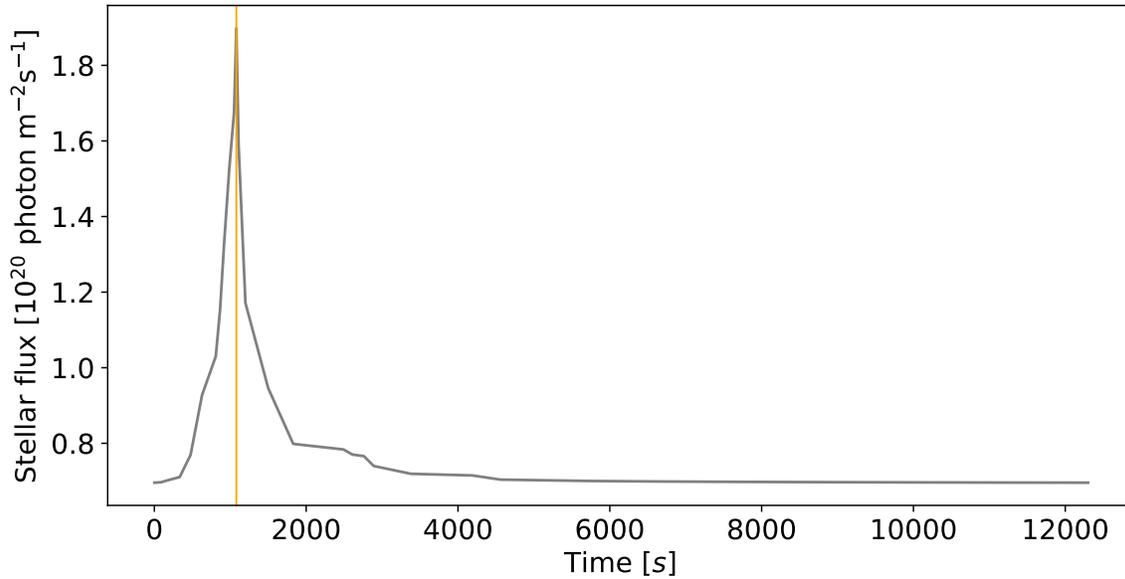


Figura 2.3: Curva de luz de AD Leo durante la fulguración usada como input del código fotoquímico. En naranja punteado se señala el máximo de la fulguración, que corresponde a 4500 segundos después de que inicia.

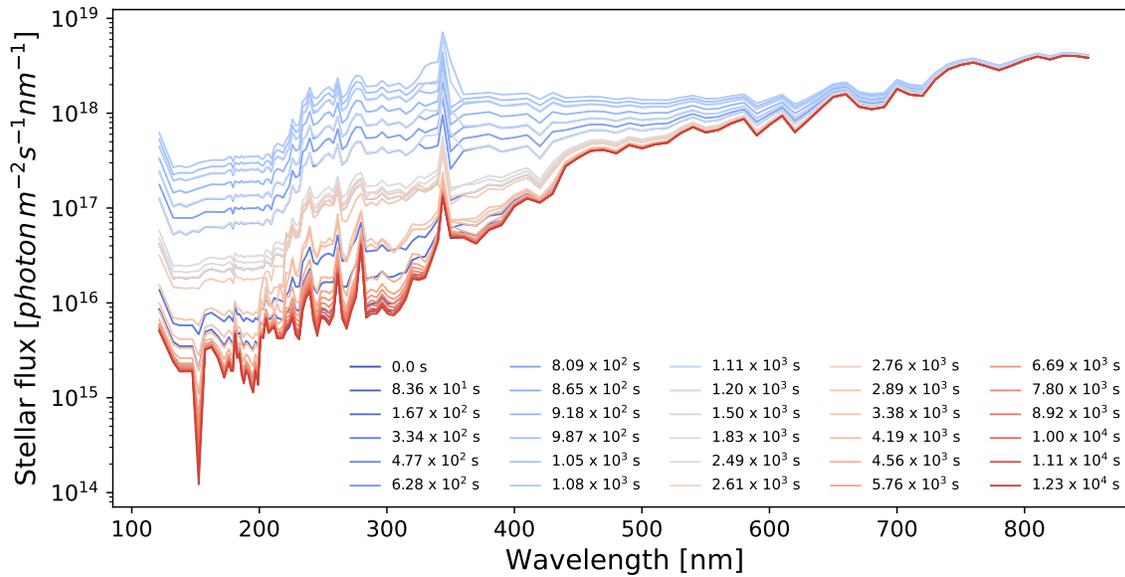


Figura 2.4: Flujos de AD Leo durante la fulguración.

y flujos anteriores. Esto se traduce en factores de escala que permiten modificar el espectro de entrada y el tiempo en el que se usa a lo largo de la fulguración y en una serie de duraciones y máximos que permiten escalar las fulguración de acuerdo a una frecuencia de fulguraciones determinada.

# Capítulo 3

## Resultados

Se hicieron 11 corridas en total del programa: 5 cantidades distintas de  $\text{CO}_2$  atmosférico, con 2 condiciones de frontera distintas para el  $\text{H}_2$  y el caso extremo en el que se retiró el agua de la atmósfera. Todo esto para una única fulguración. Durante cada una de esas simulaciones se permitió que la atmósfera inicial llegase al equilibrio bajo el flujo estelar basal de AD Leo. Después se expuso a la atmósfera a la fulguración, durante lo cual se controló el tiempo de corte del código para que coincidiera con el muestreo de la fulguración. Después se permitió que la atmósfera regresara al equilibrio mientras que se hacía un control temporal para muestrear la recuperación.

Se presentan dos parámetros principales para caracterizar los efectos de la fulguración en la atmósfera, la profundidad de columna del oxígeno molecular y el ozono. Esta profundidad

se representa por medio del cambio fraccional:

$$\text{Cambio fraccional de la profundidad de columna de } O_x = \frac{O_x - O_{x, \text{inicial}}}{O_{x, \text{inicial}}}. \quad (3.1)$$

Además, se presentan las evoluciones temporales de la abundancia de  $H_2O$  y las abundancias de  $O_2$ ,  $O_3$  y  $H$ , todas como función de la altura.

### 3.1. Hidrógeno

Como se vio en la tabla 2.1, se escogieron dos distintos tipos de condiciones iniciales para el hidrógeno, una con razón de mezcla fija, y otra con velocidad de depositación y flujo superficiales constantes. Esto lleva a distintas cantidades iniciales de hidrógeno en las atmósferas, que nos permite agruparlas en dos categorías, con mas y menos hidrógeno. En la tabla 3.1 se pueden ver las razones de mezcla iniciales de hidrógeno para las distintas atmósferas, así como la razón de mezcla después de la fulguración. En todos los casos, la atmósfera regresa al estado inicial después de la fulguración.

Tabla 3.1: Razón de mezcla superficial del  $H_2$  antes de la fulguración (inicial) y ya que la atmósfera regresa al equilibrio (final). Se incluye el valor de la Tierra presente como referencia.

CO <sub>2</sub>	Razón de mezcla superficial de H <sub>2</sub>	
	Inicial	Final
Tierra presente	$5.5 \times 10^{-7}$	
<i>mas H<sub>2</sub></i>		
0.03	$5.0 \times 10^{-4}$	$5.0 \times 10^{-4}$
0.1	$5.0 \times 10^{-4}$	$5.0 \times 10^{-4}$
0.3.	$5.0 \times 10^{-4}$	$5.0 \times 10^{-4}$
0.6.	$8.3 \times 10^{-4}$	$8.3 \times 10^{-4}$
0.9.	$8.2 \times 10^{-4}$	$8.2 \times 10^{-4}$
<i>menos H<sub>2</sub></i>		
0.03	$2.6 \times 10^{-5}$	$2.6 \times 10^{-5}$
0.1	$2.8 \times 10^{-4}$	$2.8 \times 10^{-4}$
0.3.	$4.7 \times 10^{-4}$	$4.7 \times 10^{-4}$
0.6.	$5.0 \times 10^{-4}$	$5.0 \times 10^{-4}$
0.9.	$5.0 \times 10^{-4}$	$5.0 \times 10^{-4}$
<i>Atmósfera desecada</i>		
0.9	$3.1 \times 10^{-6}$	$3.1 \times 10^{-6}$

## 3.2. Oxígeno

En las figuras 3.1 a 3.3 se presenta el cambio fraccional de la profundidad de columna de oxígeno molecular, en la tabla 3.2 se presenta la profundidad de columna inicial del oxígeno. Mientras que en las figuras 3.4 a 3.9 se presenta su densidad numérica y evolución. Estas gráficas consisten en tres paneles que representan la densidad numérica del oxígeno desde el inicio de la fulguración hasta su máximo (panel superior), del máximo de la fulguración a que esta termina (panel central), y durante la recuperación (panel inferior).

En las figuras 3.1 y 3.2 se puede ver como el oxígeno en la atmósfera presenta una pérdida durante el periodo de la fulguración, esta pérdida es inversamente proporcional a la cantidad de CO<sub>2</sub> atmosférico. Las atmósferas con menos hidrógeno se recuperan al estado inicial dentro de  $\approx 10^6$  s (11.6 días). En aquellas con más hidrógeno, las atmósferas con más del 50 % de CO<sub>2</sub> se recuperan dentro de  $\approx 10^5$  s (27.8 h), mientras que aquellas con menos CO<sub>2</sub> tardan hasta  $\approx 10^{10}$  s (317 años).

Tabla 3.2: Profundidad de columna inicial de oxígeno ( $N_{O_2}$ ) [ $cm^{-2}$ ] y profundidad de columna de oxígeno cuando la diferencia, tanto en ganancia como en pérdida, con el valor inicial es máximo ( $\Delta_{max}$ ). Se incluye el valor actual como referencia.

<i>Tierra presente</i> $4.65 \times 10^{24}$				
	<i>mas</i> $H_2$		<i>menos</i> $H_2$	
$CO_2$	Inicial	$N_{O_2}(\Delta_{max})$	Inicial	$N_{O_2}(\Delta_{max})$
0.03	$8.04 \times 10^{19}$	$-6.45 \times 10^{19}$	$1.16 \times 10^{20}$	$-9.83 \times 10^{19}$
0.1	$1.67 \times 10^{20}$	$-1.45 \times 10^{20}$	$1.75 \times 10^{20}$	$-1.52 \times 10^{20}$
0.3	$2.08 \times 10^{20}$	$-1.77 \times 10^{20}$	$2.10 \times 10^{20}$	$-1.89 \times 10^{20}$
0.6	$5.73 \times 10^{20}$	$-4.52 \times 10^{20}$	$1.23 \times 10^{21}$	$-1.1 \times 10^{21}$
0.9	$7.62 \times 10^{20}$	$-6.33 \times 10^{20}$	$1.45 \times 10^{21}$	$-1.32 \times 10^{21}$
0.9 (sin $H_2O$ )			$5.53 \times 10^{24}$	$5.53 \times 10^{24}$

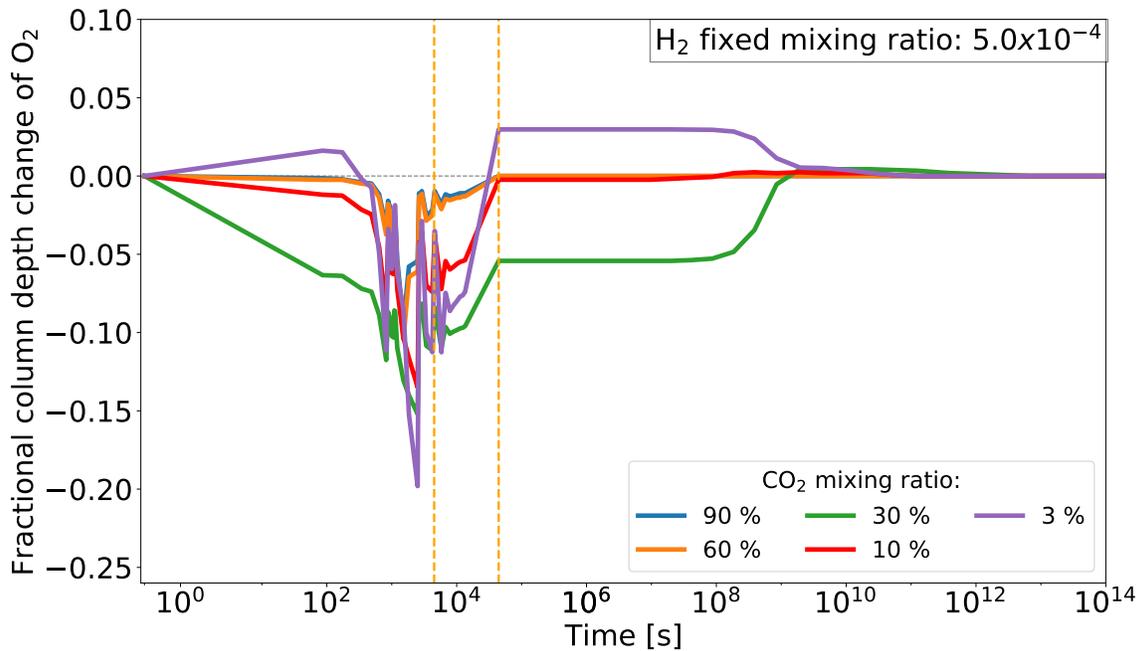


Figura 3.1: Cambio fraccional de la profundidad de columna de oxígeno molecular para las atmósferas con razón de mezcla de  $H_2$  fija. En naranja punteado se marcan el máximo y final de la fulguración, izquierda y derecha, respectivamente.

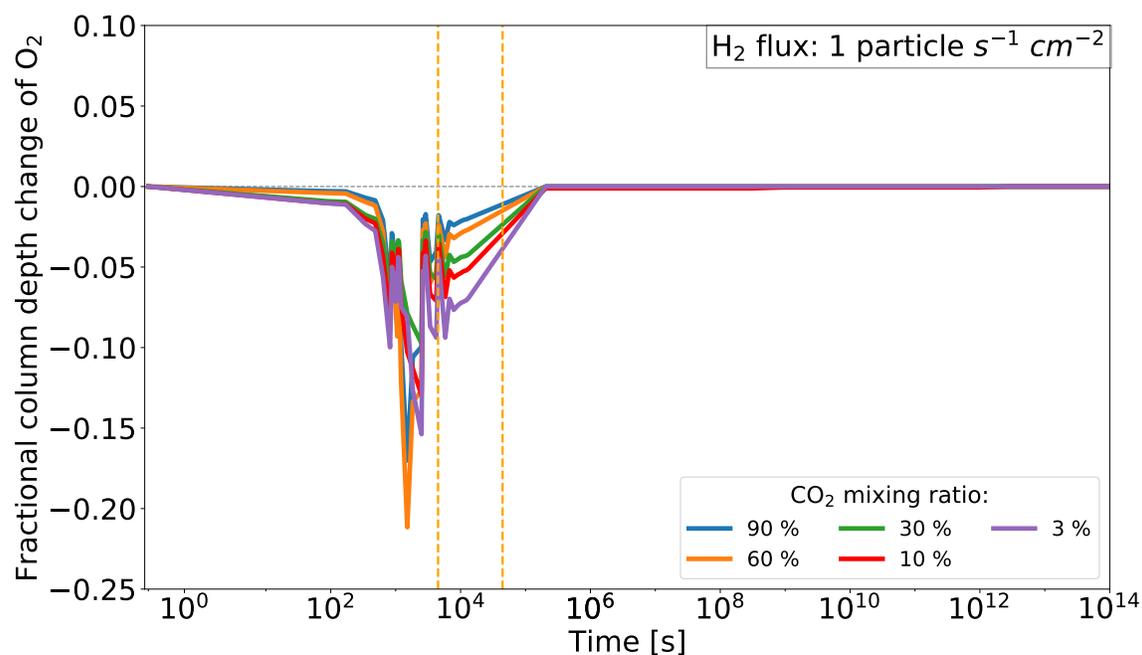


Figura 3.2: Cambio fraccional de la profundidad de columna de oxígeno molecular para las atmósferas con flujo de  $H_2$  fijo. En naranja punteado se marcan el máximo y final de la fulguración, izquierda y derecha, respectivamente.

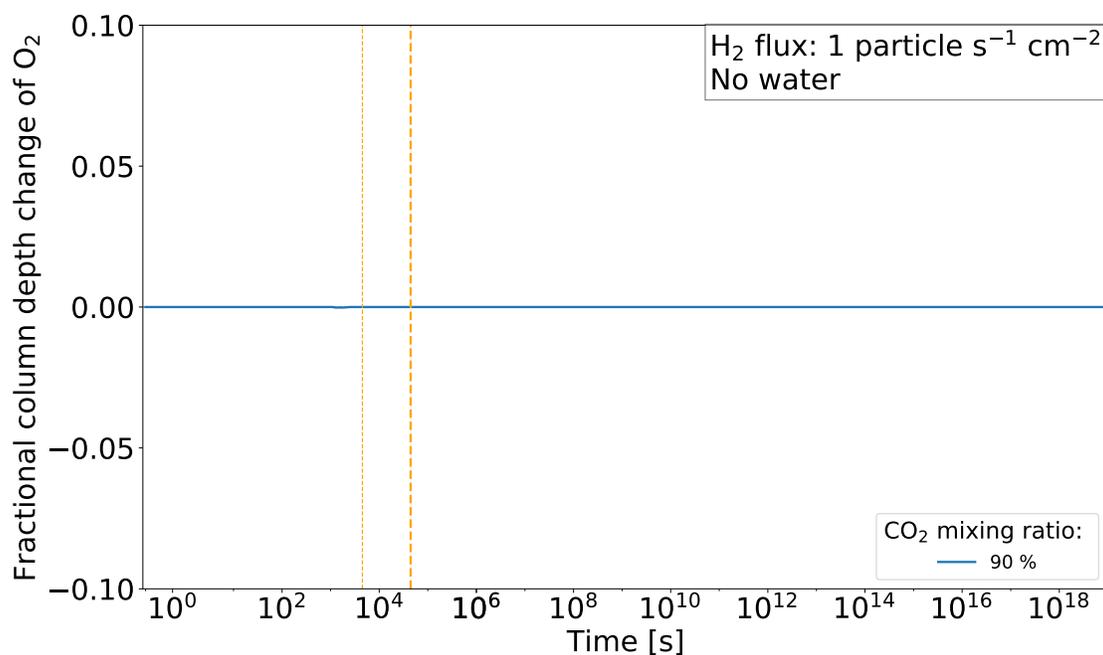
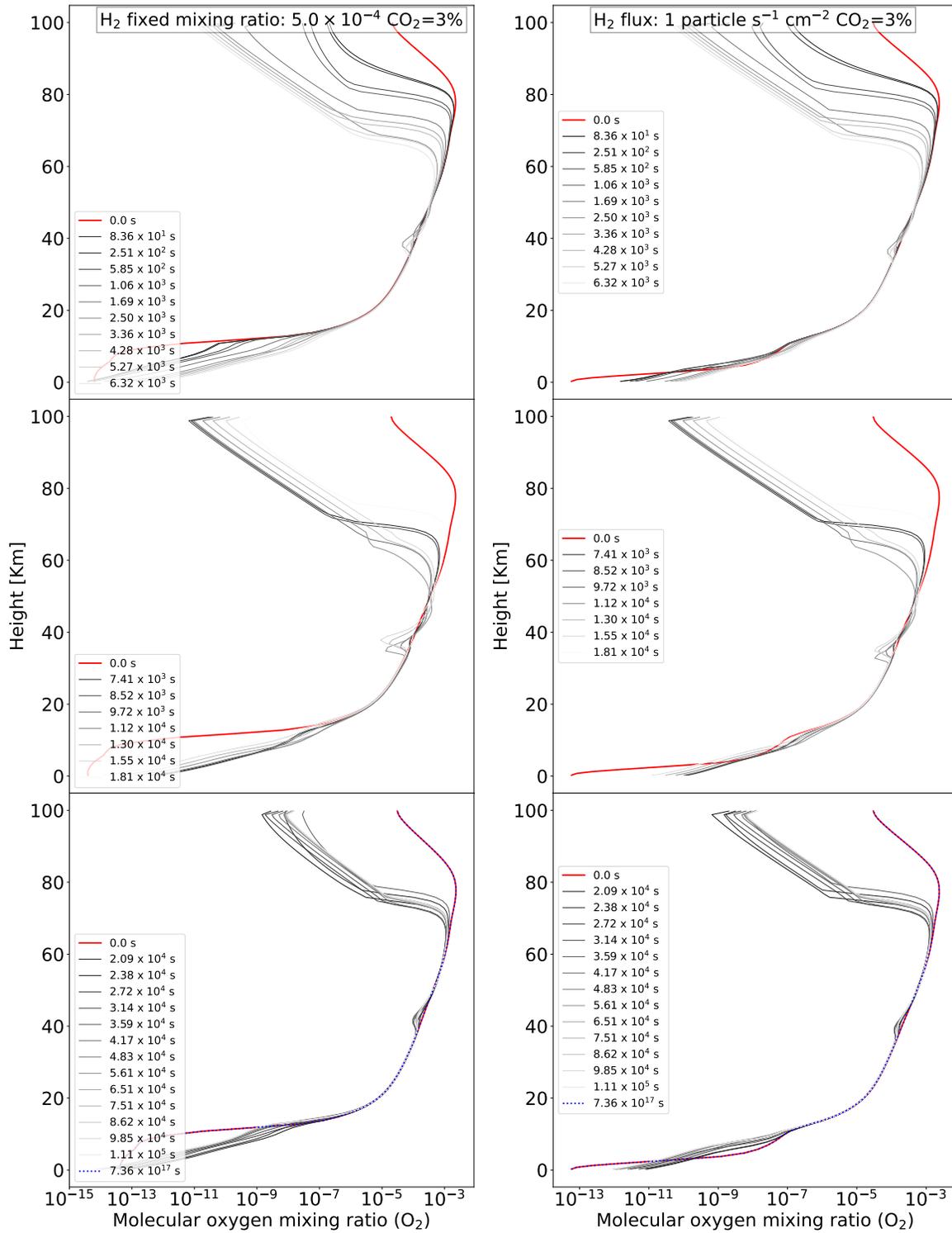


Figura 3.3: Cambio fraccional de la profundidad de columna de oxígeno molecular (sin  $H_2O$ ). En naranja punteado se marcan el máximo y final de la fulguración, izquierda y derecha, respectivamente.



(a) CO<sub>2</sub>: 3% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$

(b) CO<sub>2</sub>: 3% H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$

Figura 3.4: Razón de mezcla del oxígeno molecular (O<sub>2</sub>) para atmósferas con 3% de CO<sub>2</sub>.

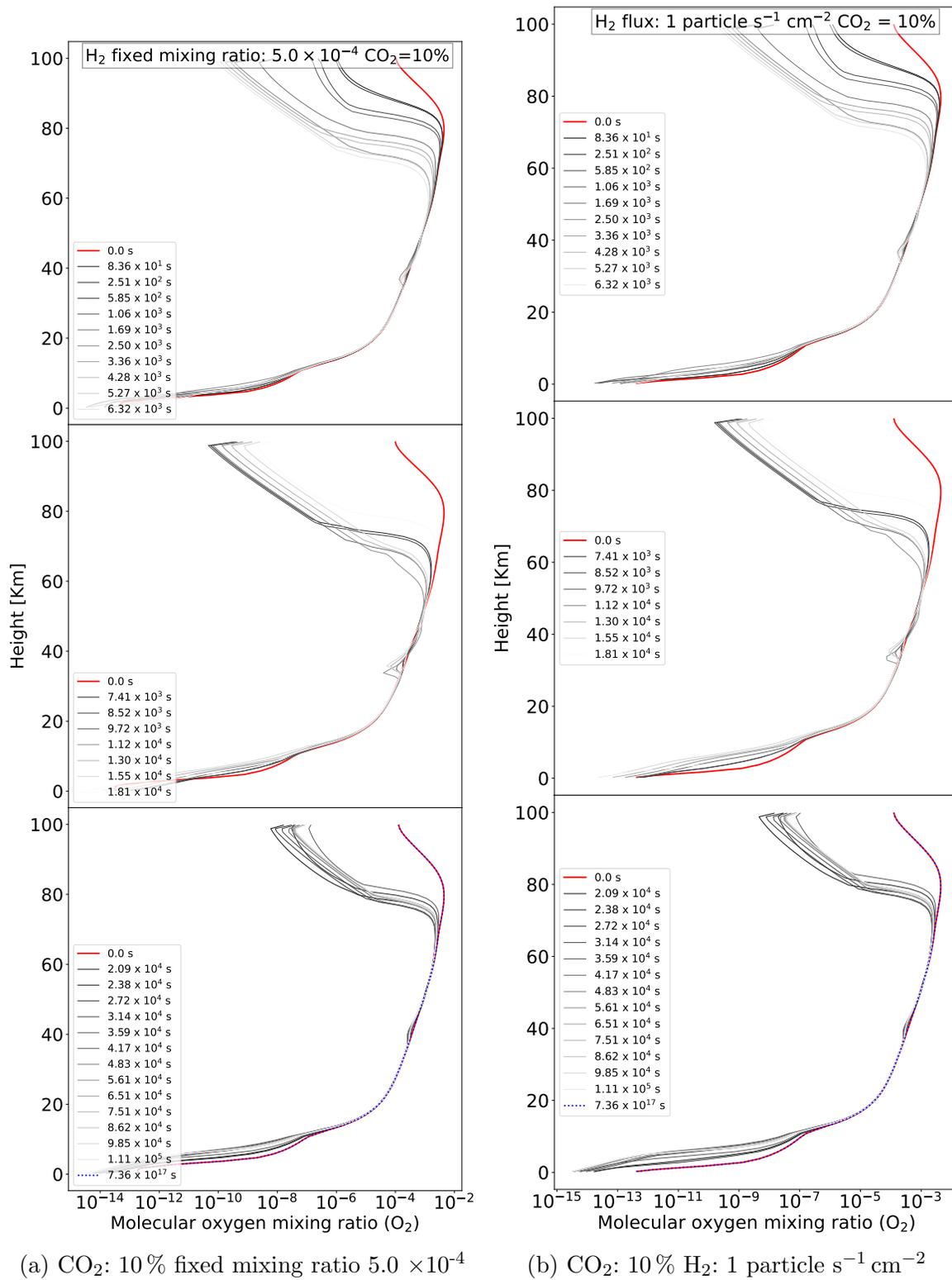
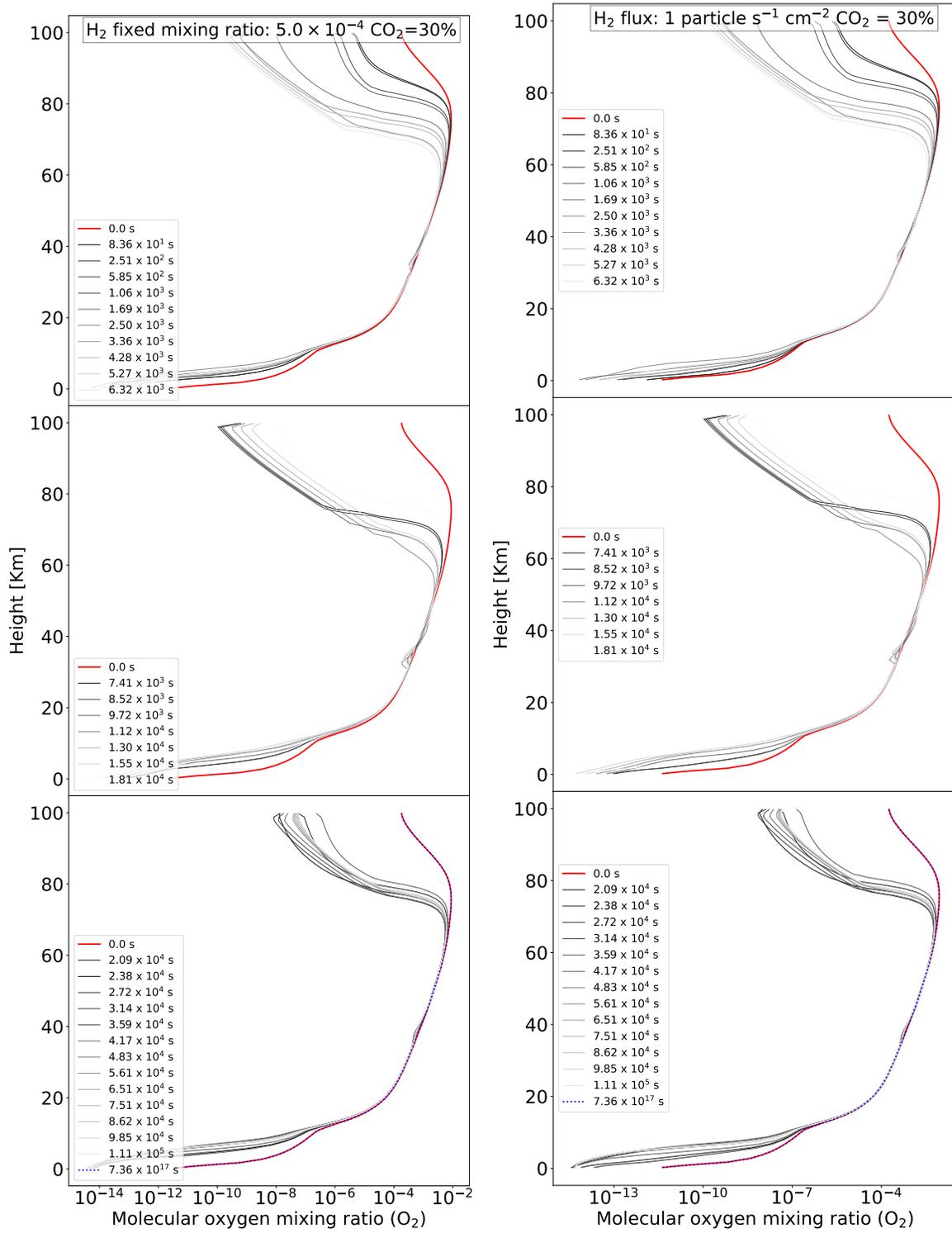


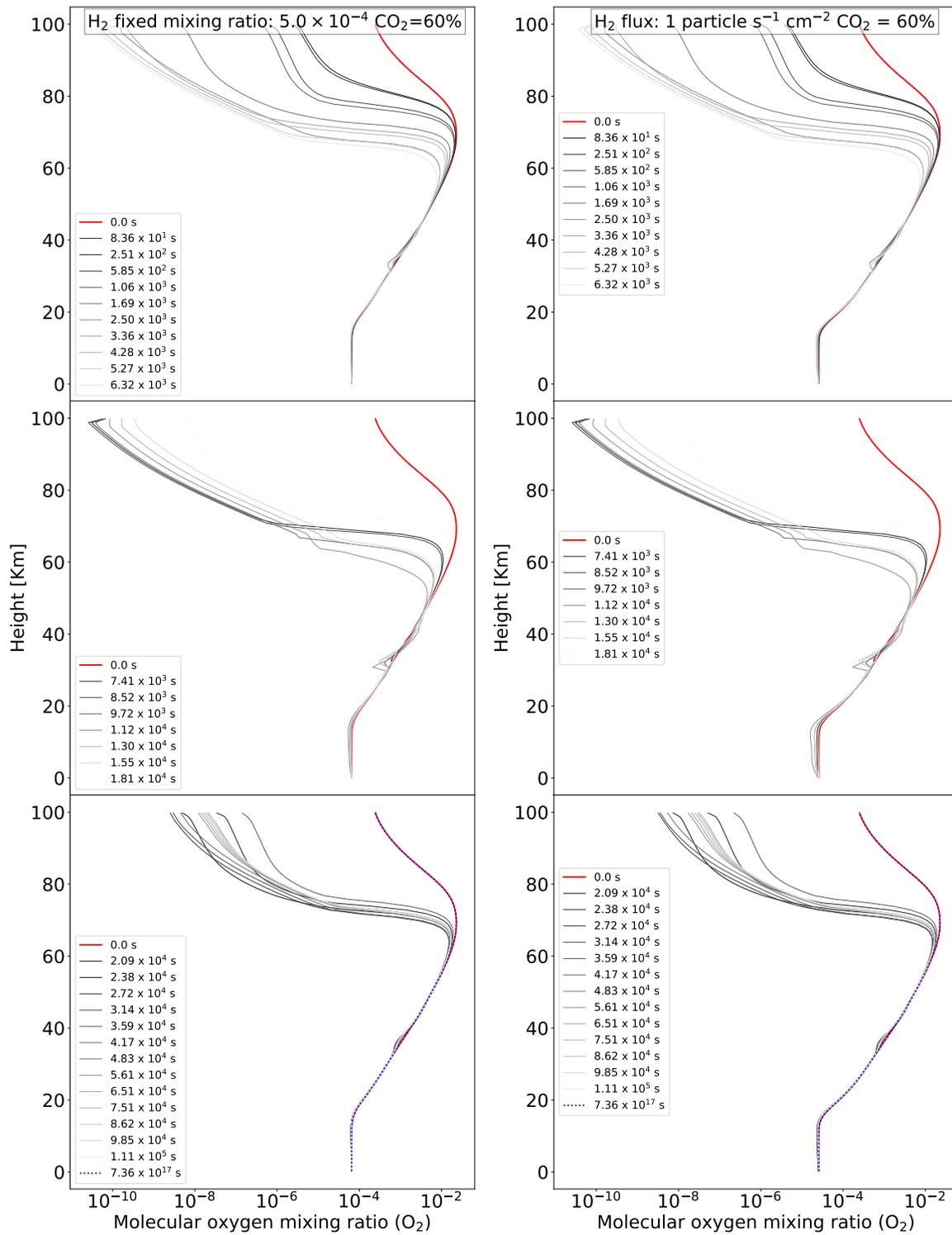
Figura 3.5: Razón de mezcla del oxígeno molecular ( $\text{O}_2$ ) para atmósferas con 10% de  $\text{CO}_2$ .

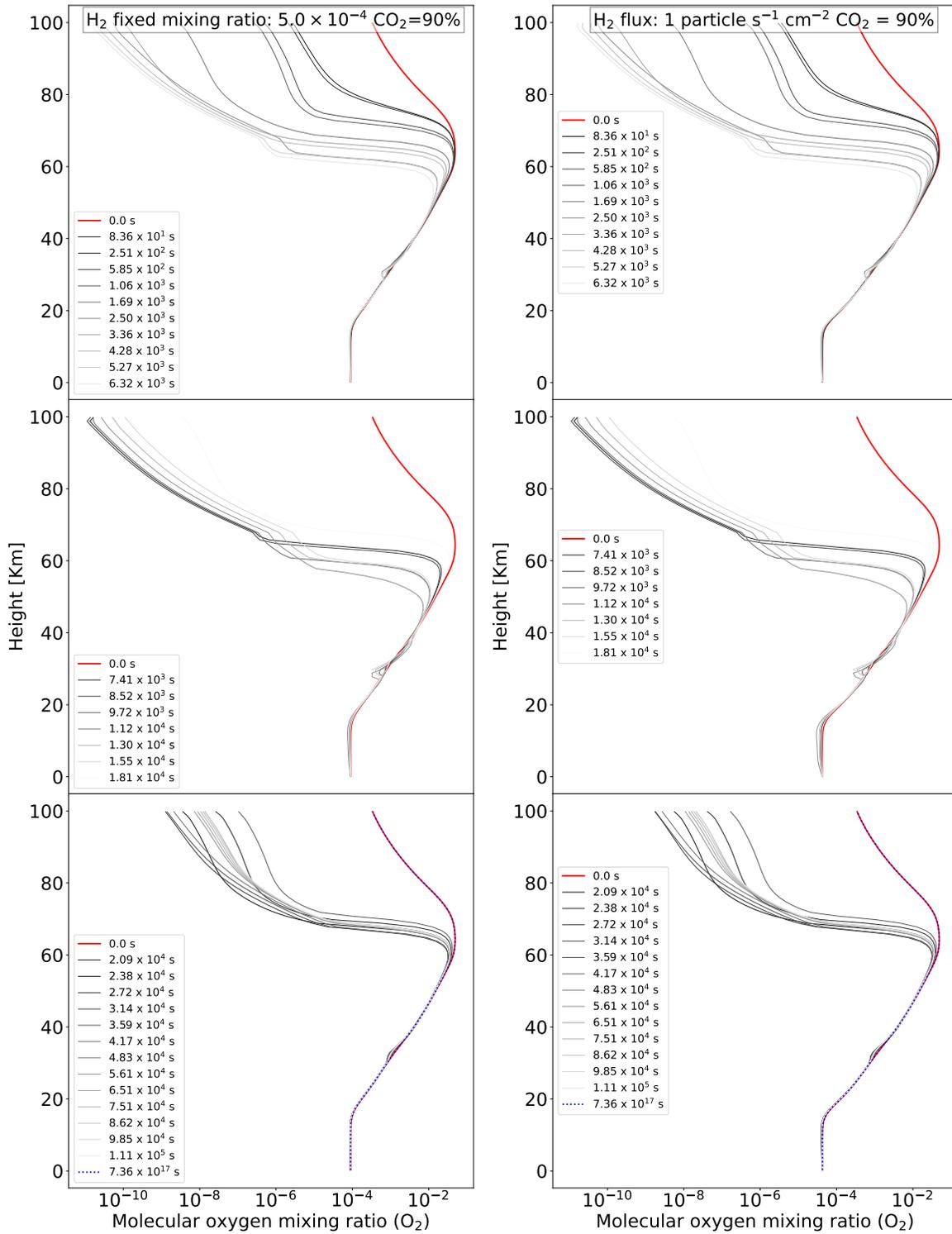


(a)  $CO_2$ : 30% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$

(b)  $CO_2$ : 30%  $H_2$ :  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$

Figura 3.6: Razón de mezcla del oxígeno molecular ( $O_2$ ) para atmósferas con 30% de  $CO_2$ .

(a) CO<sub>2</sub>: 60% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$ (b) CO<sub>2</sub>: 60% H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ Figura 3.7: Razón de mezcla del oxígeno molecular (O<sub>2</sub>) para atmósferas con 60% de CO<sub>2</sub>.



(a) CO<sub>2</sub>: 90% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$

(b) CO<sub>2</sub>: 90% H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$

Figura 3.8: Razón de mezcla del oxígeno molecular (O<sub>2</sub>) para atmósferas con 90% de CO<sub>2</sub>.

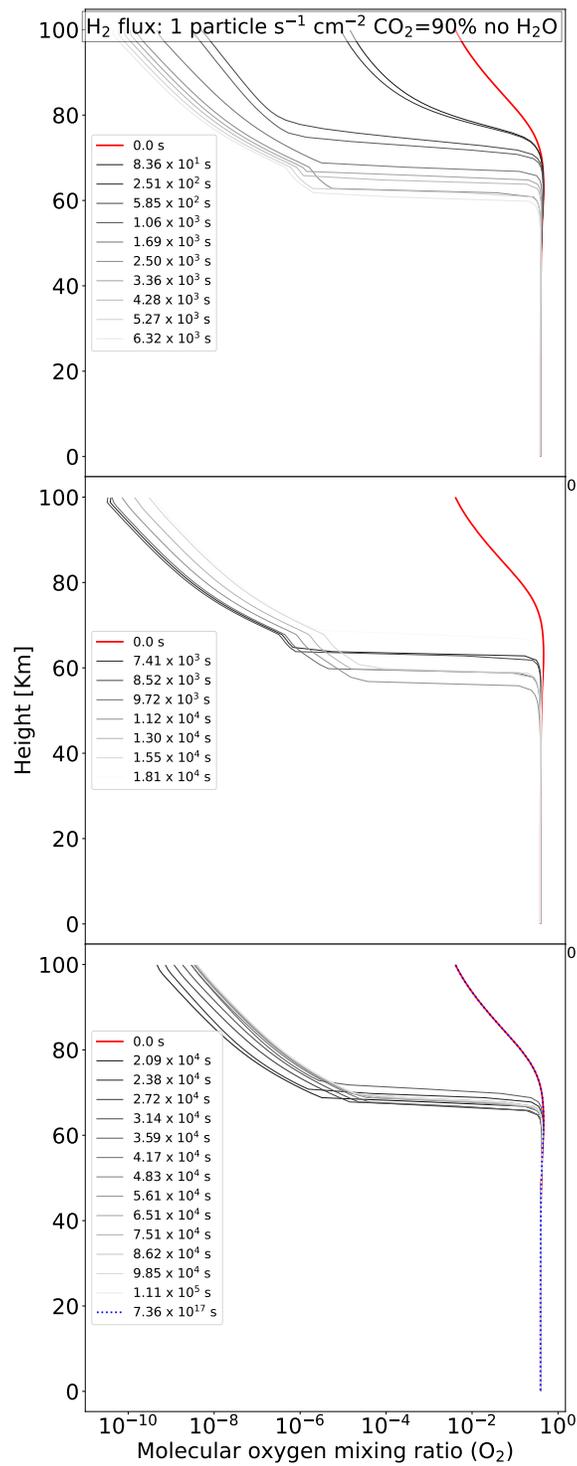
(a) CO<sub>2</sub>: 90% H<sub>2</sub>: 1 particle s<sup>-1</sup> cm<sup>-2</sup> no H<sub>2</sub>O

Figura 3.9: Razón de mezcla del oxígeno molecular (O<sub>2</sub>) para la atmósfera desecada.

### 3.3. Ozono

En las figuras 3.10 a 3.12 se presenta el cambio fraccional de la profundidad de columna de ozono. Mientras que en las figuras 3.13 a 3.18 se presenta la densidad numérica y su evolución.

La profundidad de columna de ozono presenta dos comportamientos distintos. Las atmósferas con más del 50 % de CO<sub>2</sub> muestran acumulación de ozono durante la fulguración, mientras que aquellas con menos del 50 % de CO<sub>2</sub> muestran pérdida del ozono durante la fulguración. Sin importar el flujo de H<sub>2</sub>, aquellas atmósferas en que se acumula ozono lo hacen proporcionalmente al CO<sub>2</sub> atmosférico y regresan al estado inicial dentro de  $\approx 10^5$  s (27.8 h). En el caso de las atmósferas en que se pierde ozono y no tiene flujo de hidrógeno, regresan al estado inicial en el mismo tiempo; mientras que aquellas que pierden ozono y tienen flujo de hidrógeno tomarán hasta  $\approx 10^{10}$  s (317 años).

La densidad numérica del ozono nos permite ver que en todas las atmósferas se destruye ozono por encima de los 70 km. La diferencia apreciable entre aquellas en las que se presenta una acumulación de ozono y aquellas en las que se presenta una pérdida es la cantidad de ozono cerca de la superficie planetaria. Aquellas atmósferas con pérdida tienen una caída en el ozono en la atmósfera por debajo de los 10 km que se ve acrecentada durante la fulguración; mientras que las atmósferas con acumulación tendrán acumulación por debajo de los 10 km durante la fulguración.

Tabla 3.3: Profundidad de columna de ozono inicial ( $\text{cm}^{-2}$ ) y profundidad de columna del ozono ( $\text{N}_{\text{O}_3}$ ) cuando la diferencia, tanto en ganancia como en pérdida, con el valor inicial es máximo ( $\Delta_{max}$ ). Se incluye el valor actual como referencia.

<i>Tierra presente</i> $8.61 \times 10^{18}$					
		<i>mas H<sub>2</sub></i>		<i>menos H<sub>2</sub></i>	
CO <sub>2</sub>	Inicial	$\text{N}_{\text{O}_3}(\Delta_{max})$	Inicial	$\text{N}_{\text{O}_3}(\Delta_{max})$	
0.03	$5.22 \times 10^{14}$	$+6.03 \times 10^{14}$	$1.48 \times 10^{15}$	$-2.20 \times 10^{14}$	
0.1	$1.51 \times 10^{15}$	$-0.43 \times 10^{15}$	$1.71 \times 10^{15}$	$-4.75 \times 10^{14}$	
0.3	$1.58 \times 10^{15}$	$-0.45 \times 10^{15}$	$1.61 \times 10^{15}$	$-5.08 \times 10^{14}$	
0.6	$9.30 \times 10^{15}$	$+1.72 \times 10^{16}$	$2.43 \times 10^{16}$	$-2.39 \times 10^{16}$	
0.9	$1.13 \times 10^{16}$	$+2.18 \times 10^{16}$	$2.47 \times 10^{16}$	$-2.44 \times 10^{16}$	
0.9 (sin H <sub>2</sub> O)			$1.13 \times 10^{16}$	$+2.18 \times 10^{16}$	

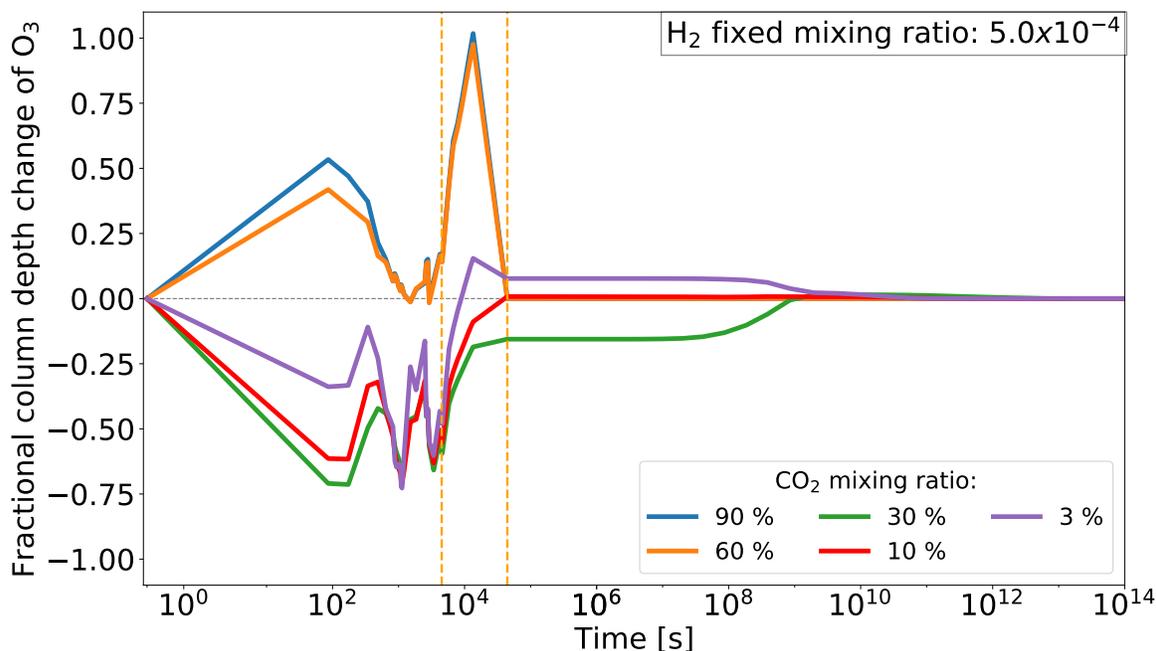


Figura 3.10: Cambio fraccional de la profundidad de columna de ozono para las atmósferas con razón de mezcla de  $\text{H}_2$  fija. En naranja punteado se marcan el máximo y final de la fulguración, izquierda y derecha, respectivamente.

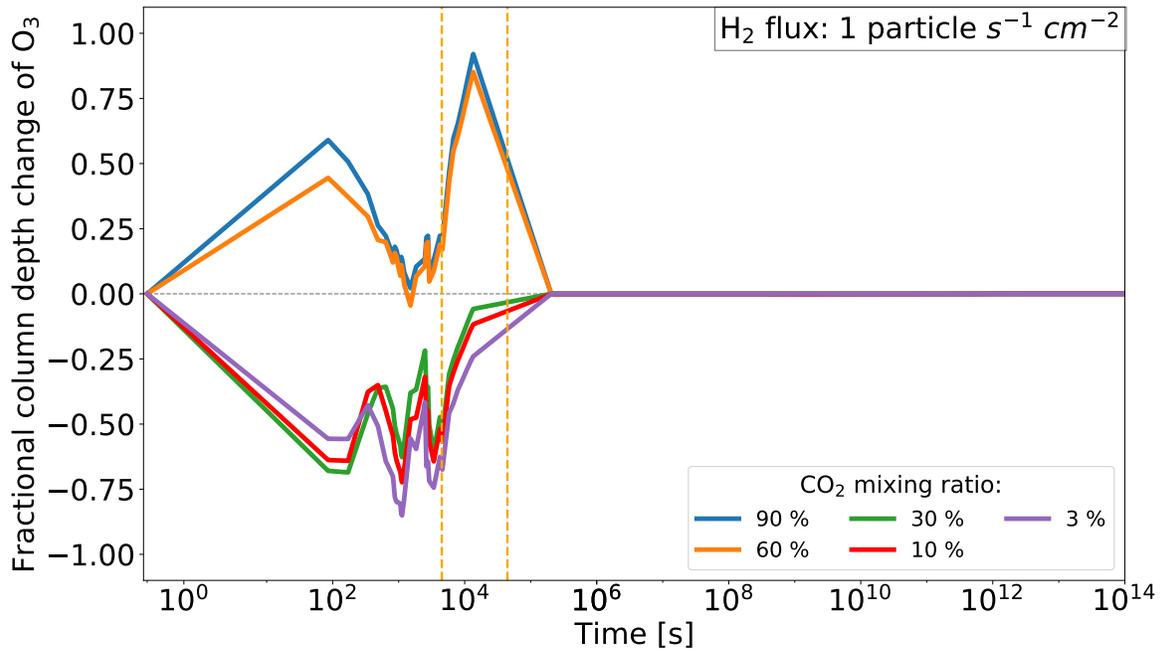


Figura 3.11: Cambio fraccional de la profundidad de columna de ozono para las atmósferas con flujo de H<sub>2</sub> fijo. En naranja punteado se marcan el máximo y final de la fulguración, izquierda y derecha, respectivamente.

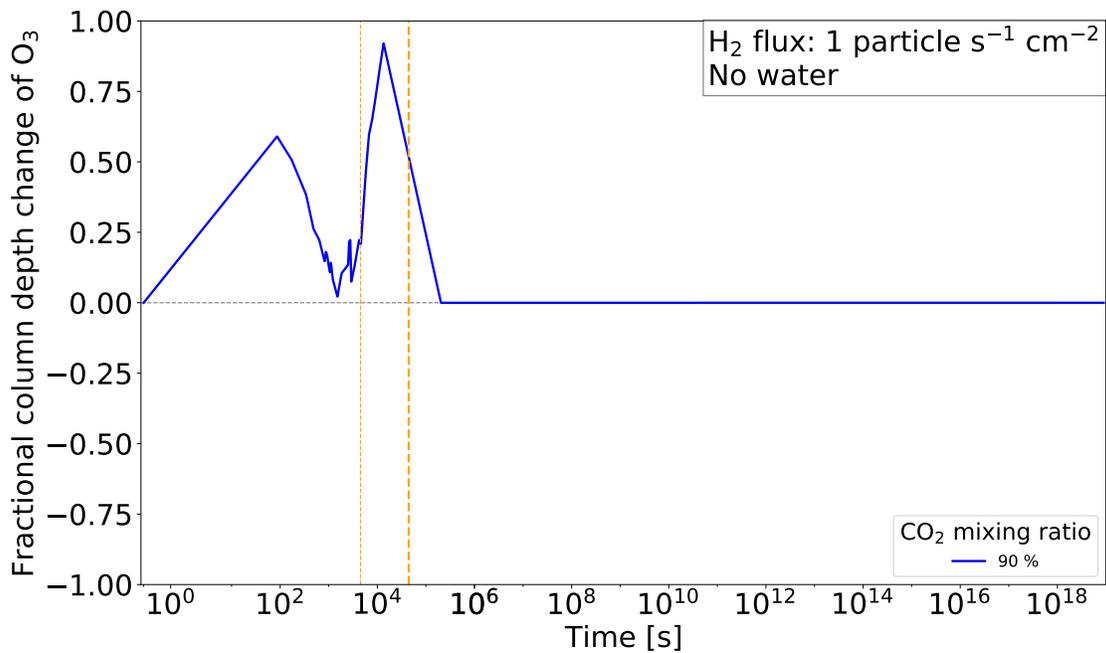


Figura 3.12: Cambio fraccional de la profundidad de columna de ozono (sin H<sub>2</sub>O). En naranja punteado se marcan el máximo y final de la fulguración, izquierda y derecha, respectivamente.

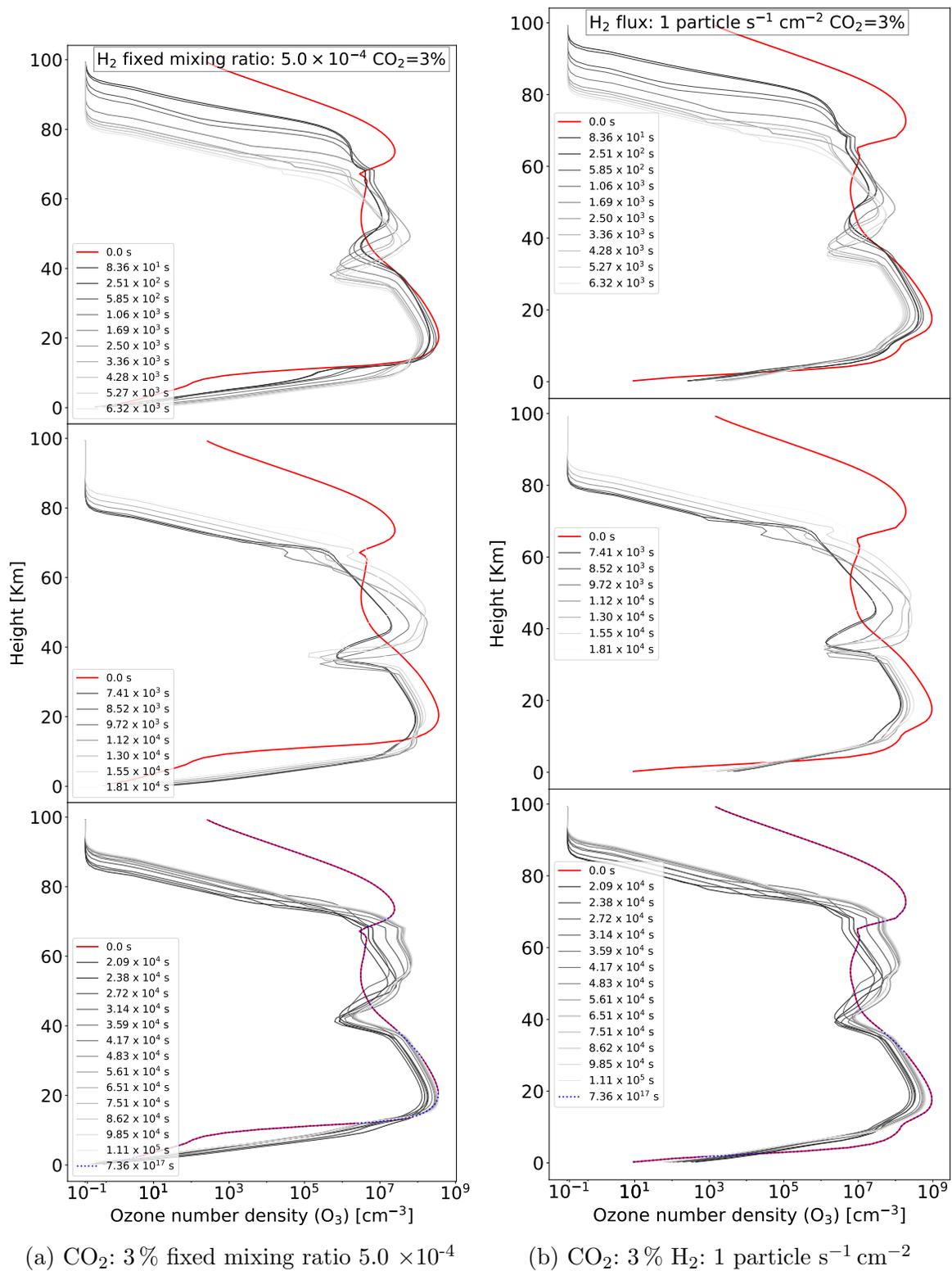
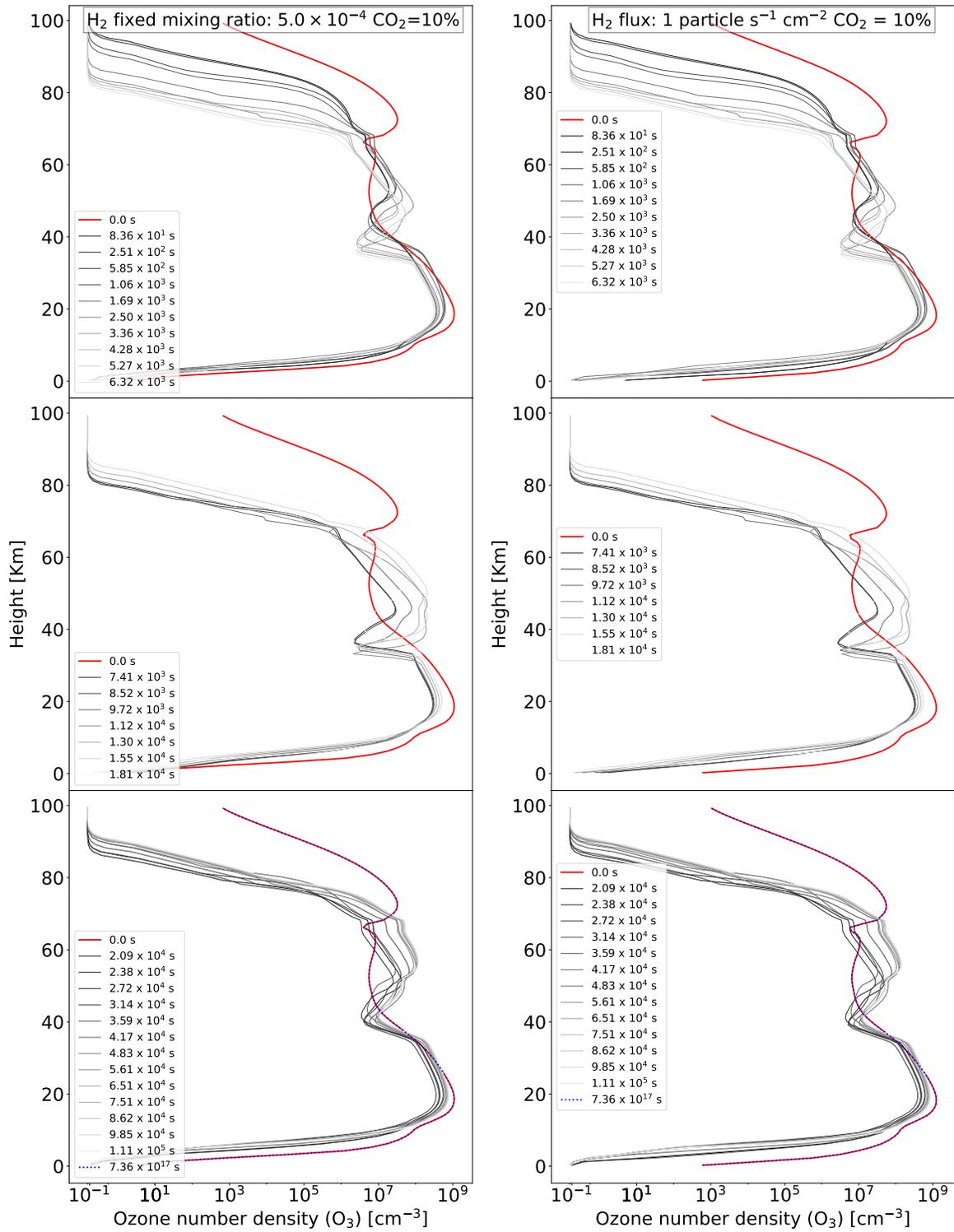


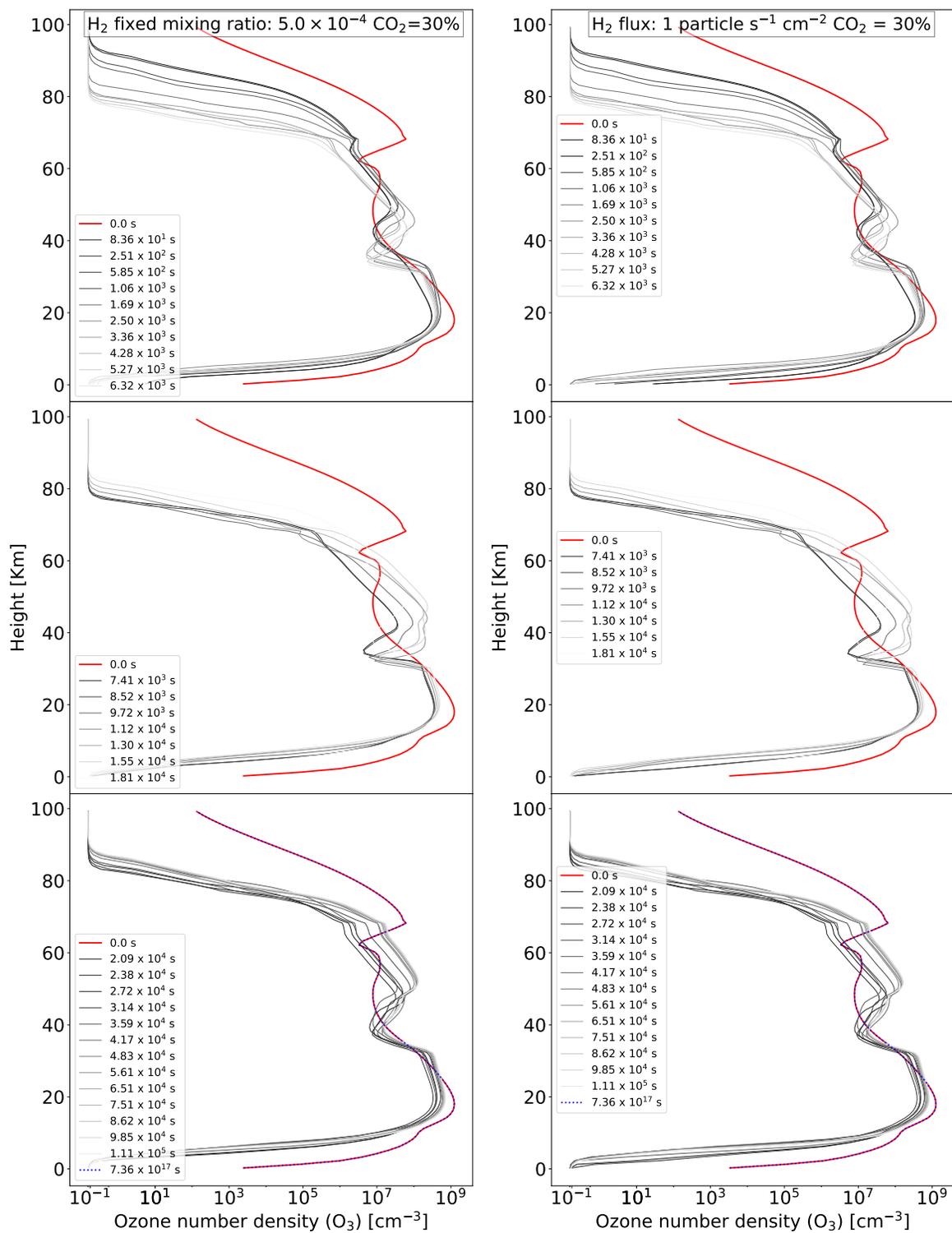
Figura 3.13: Densidad numérica del ozono ( $\text{O}_3$ ) para atmósferas con 3% de  $\text{CO}_2$ .

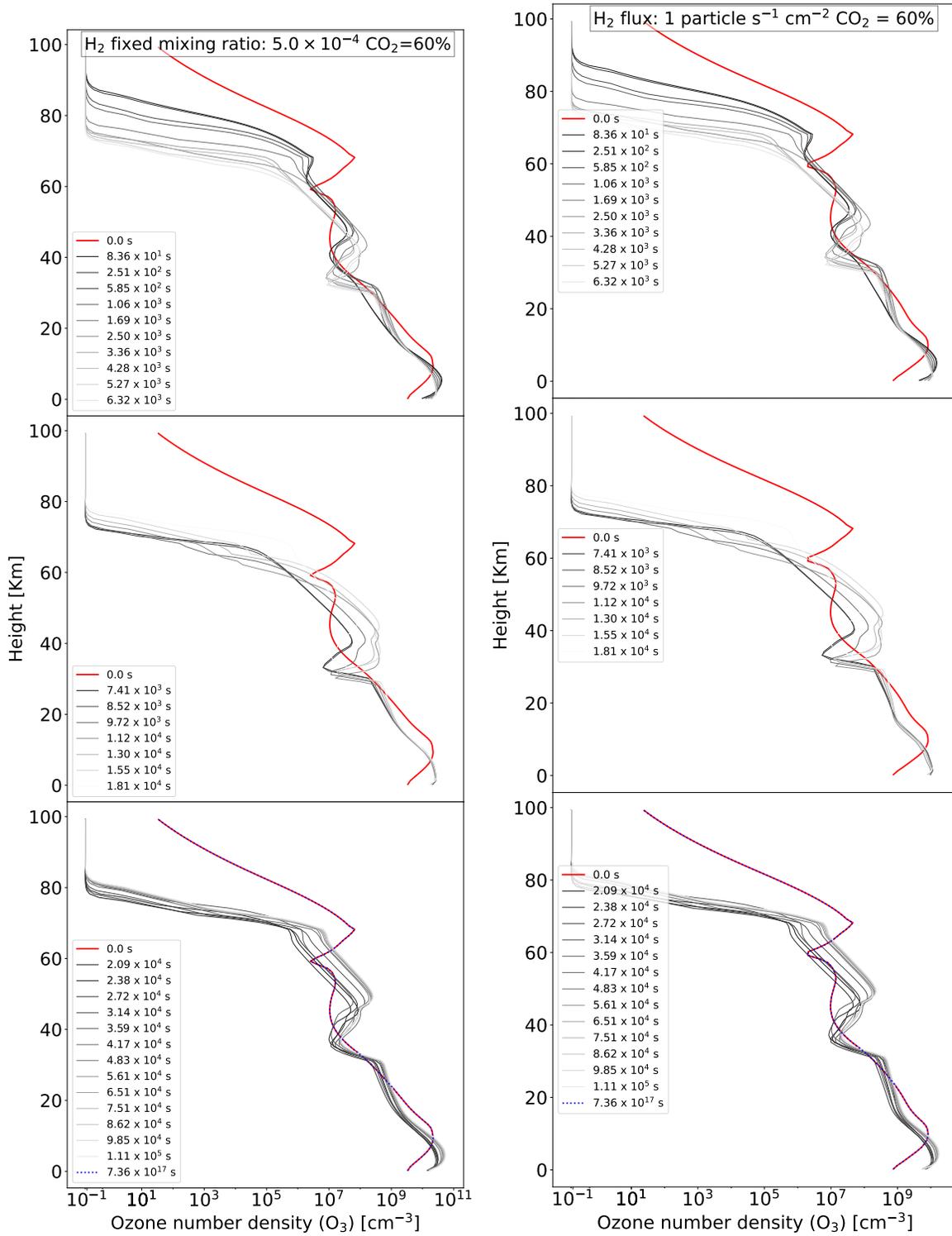


(a) CO<sub>2</sub>: 10% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$

(b) CO<sub>2</sub>: 10% H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$

Figura 3.14: Densidad numérica del ozono (O<sub>3</sub>) para atmósferas con 10% de CO<sub>2</sub>.

(a)  $\text{CO}_2$ : 30% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$ (b)  $\text{CO}_2$ : 30%  $\text{H}_2$ :  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ Figura 3.15: Densidad numérica del ozono ( $\text{O}_3$ ) para atmósferas con 30% de  $\text{CO}_2$ .



(a) CO<sub>2</sub>: 60% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$

(b) CO<sub>2</sub>: 60% H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$

Figura 3.16: Densidad numérica del ozono ( $\text{O}_3$ ) para atmósferas con 60% de CO<sub>2</sub>.

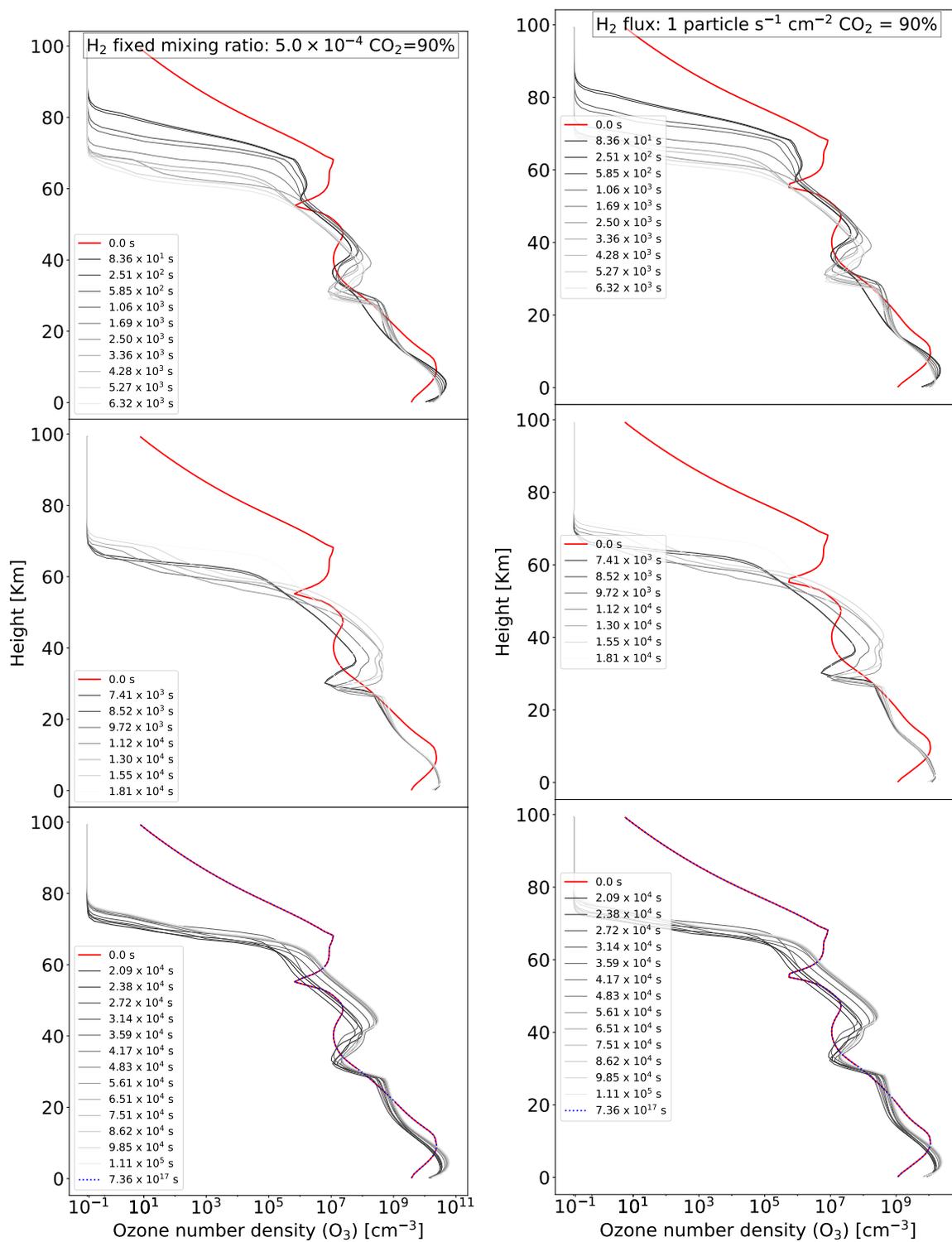
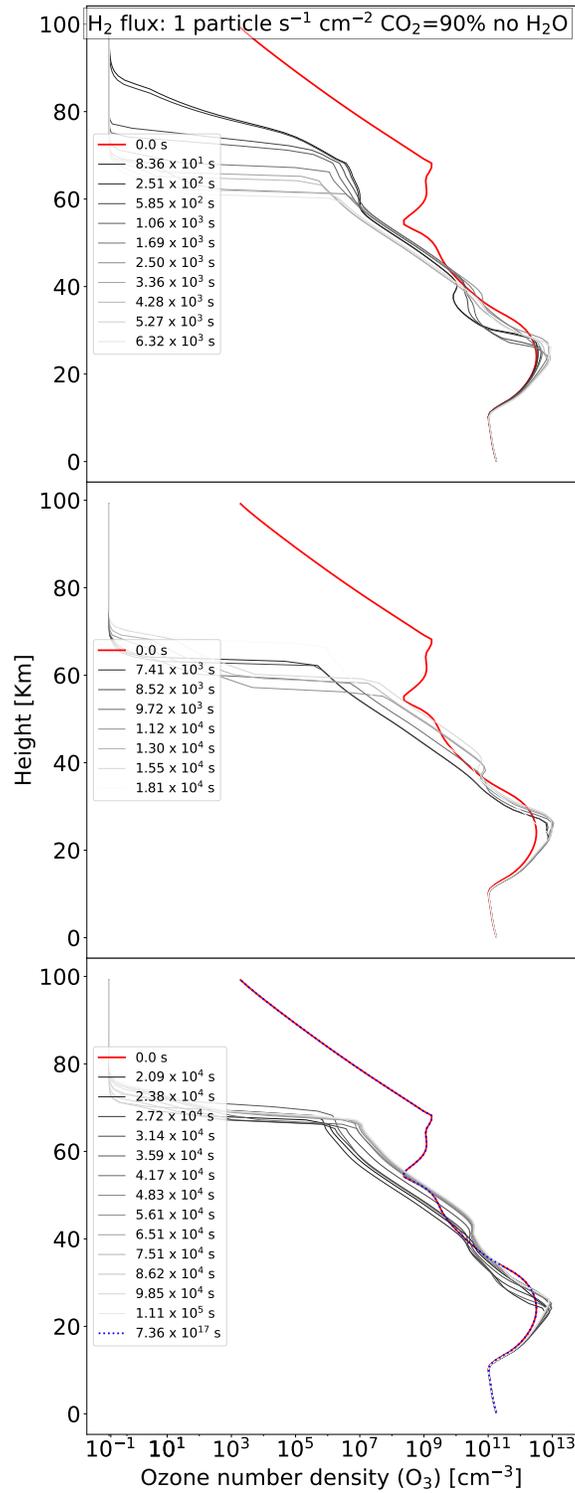


Figura 3.17: Densidad numérica del ozono ( $\text{O}_3$ ) para atmósferas con 90% de  $\text{CO}_2$ .



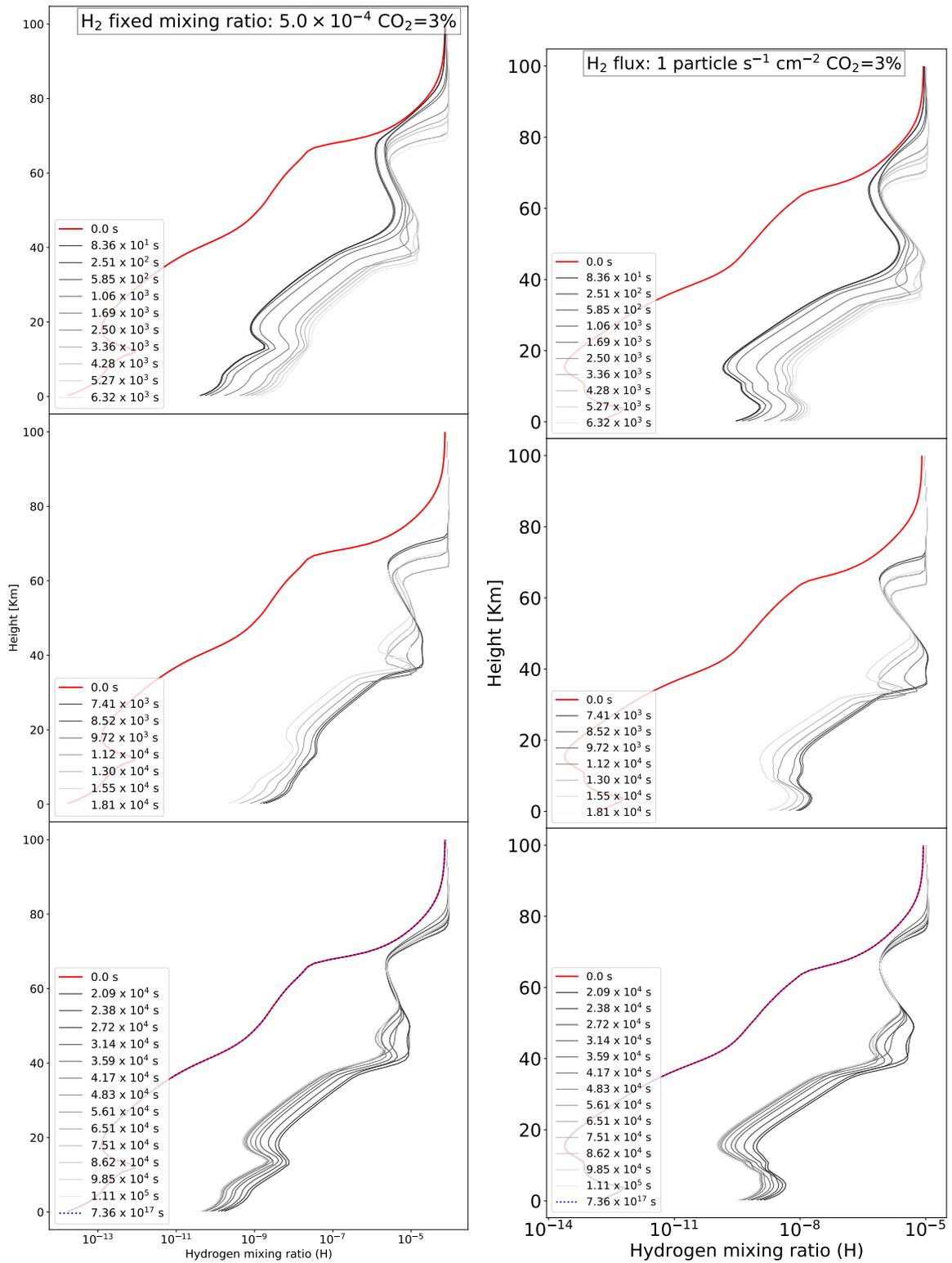
(a) CO<sub>2</sub>: 90 % H<sub>2</sub>: 1 particle s<sup>-1</sup> cm<sup>-2</sup> no H<sub>2</sub>O

Figura 3.18: Densidad numérica del ozono (O<sub>3</sub>) para la atmósfera desecada.

### 3.4. Hidrógeno atómico (H)

Debido a su importancia en la destrucción del  $O_2$  y  $O_3$ , en las figuras 3.19 a 3.24 se presenta la evolución de la abundancia de hidrógeno atómico (H).

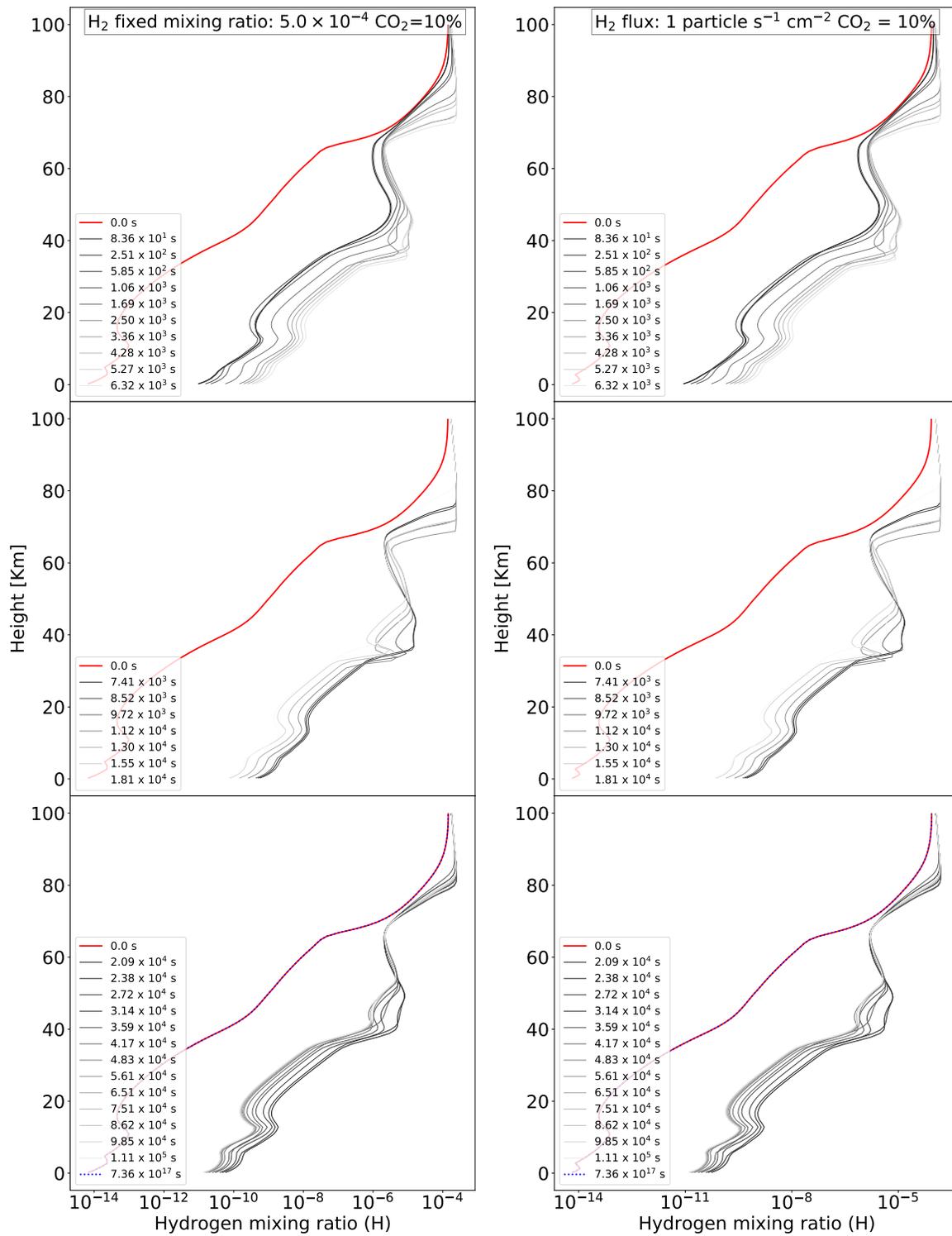
Para el hidrógeno podemos observar una acumulación desde la superficie y hasta cerca de 80 km de toda la atmósfera conforme comienza la fulguración (fig. 3.19 a 3.24). Durante la fulguración, esta acumulación se mantendrá con mínimas variaciones.

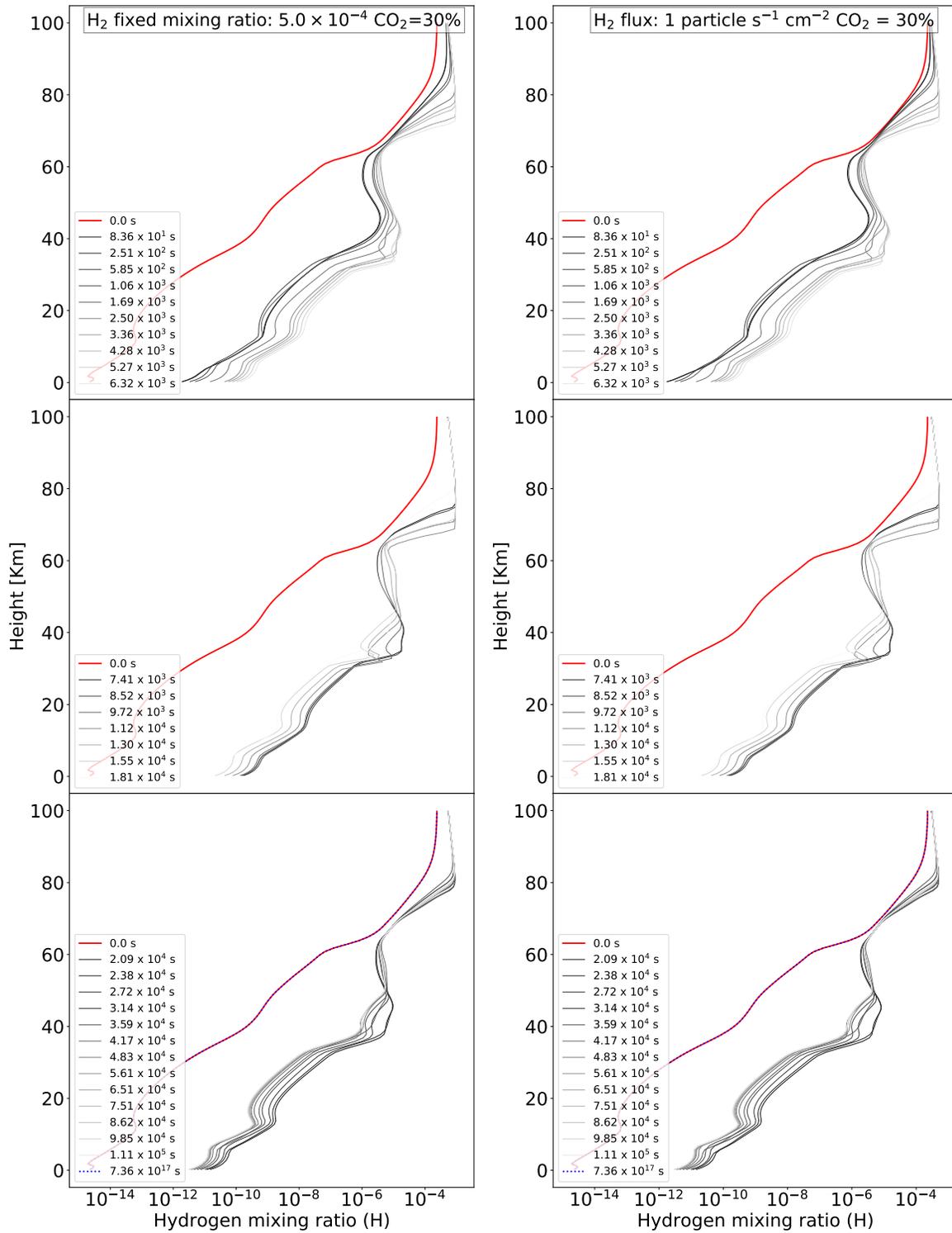


(a) CO<sub>2</sub>: 3% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$

(b) CO<sub>2</sub>: 3% H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$

Figura 3.19: Razón de mezcla del hidrógeno (H) para atmósferas con 3% de CO<sub>2</sub>.

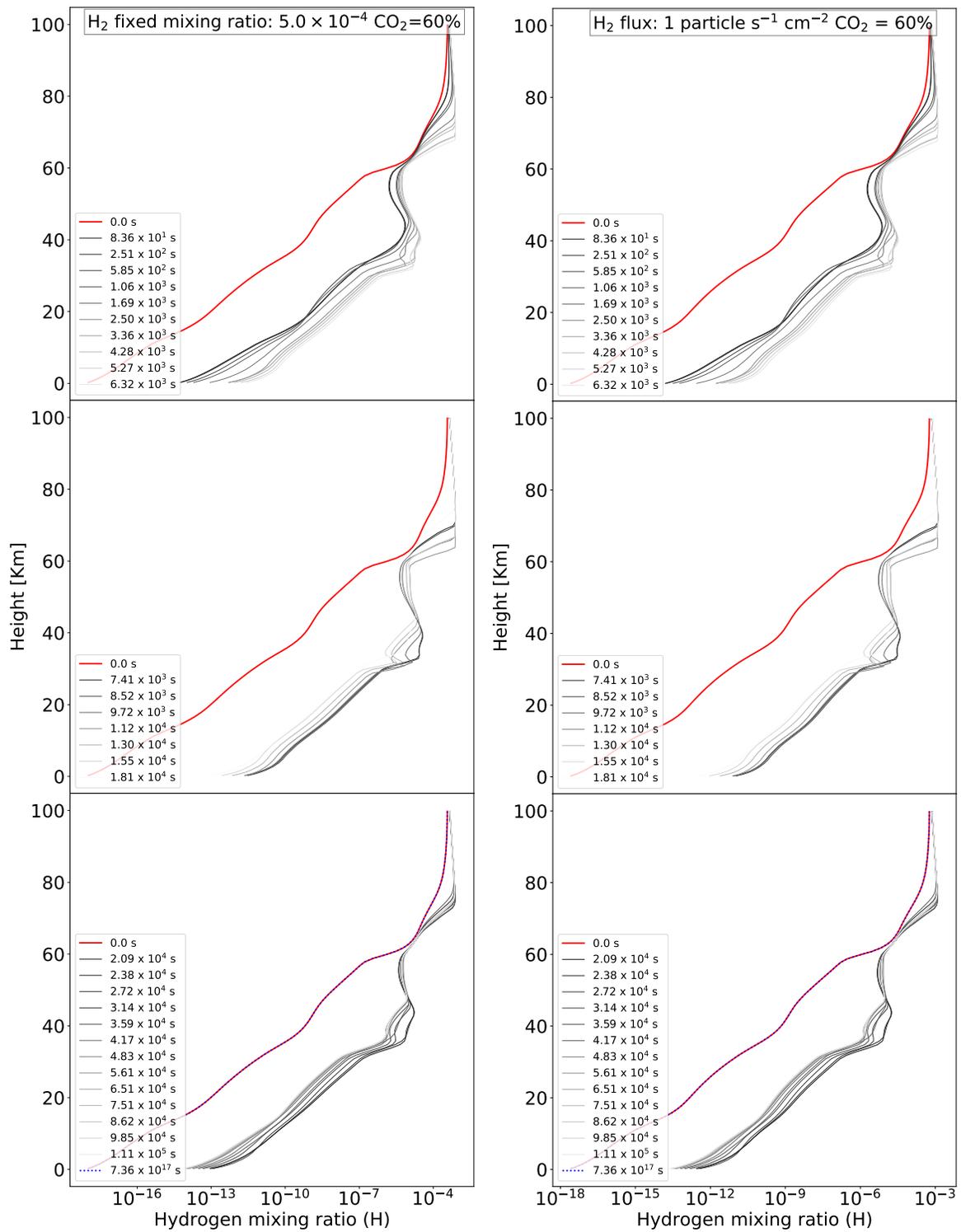
(a) CO<sub>2</sub>: 10% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$ (b) CO<sub>2</sub>: 10% H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ Figura 3.20: Razón de mezcla del hidrógeno (H) para atmósferas con 10% de CO<sub>2</sub>.

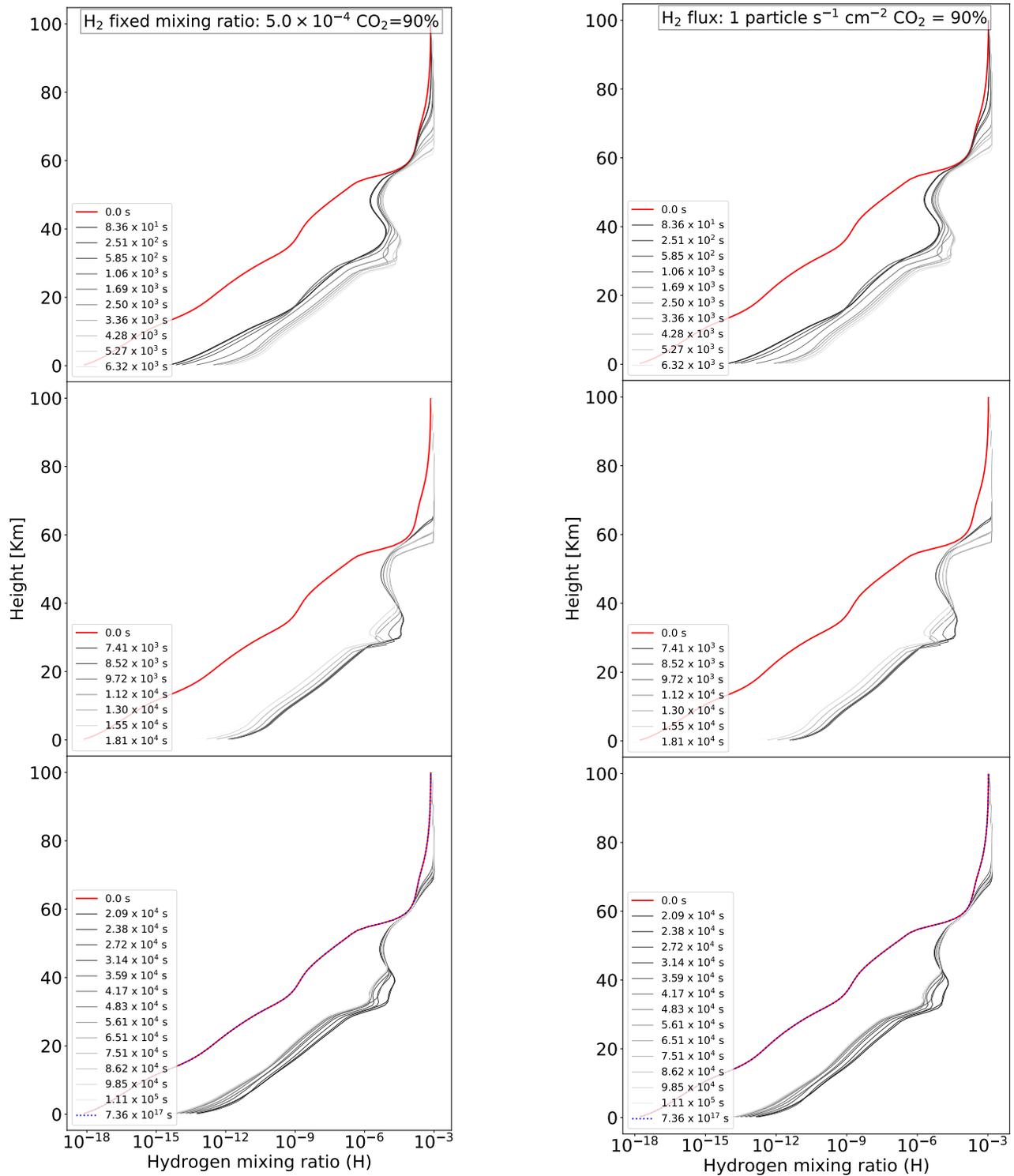


(a) CO<sub>2</sub>: 30% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$

(b) CO<sub>2</sub>: 30% H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$

Figura 3.21: Razón de mezcla del hidrógeno (H) para atmósferas con 30% de CO<sub>2</sub>.

(a) CO<sub>2</sub>: 60% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$ (b) CO<sub>2</sub>: 60% H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ Figura 3.22: Razón de mezcla del hidrógeno (H) para atmósferas con 60% de CO<sub>2</sub>.



(a) CO<sub>2</sub>: 90 % fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$

(b) CO<sub>2</sub>: 90 % H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$

Figura 3.23: Razón de mezcla del hidrógeno (H) para atmósferas con 90 % de CO<sub>2</sub>.

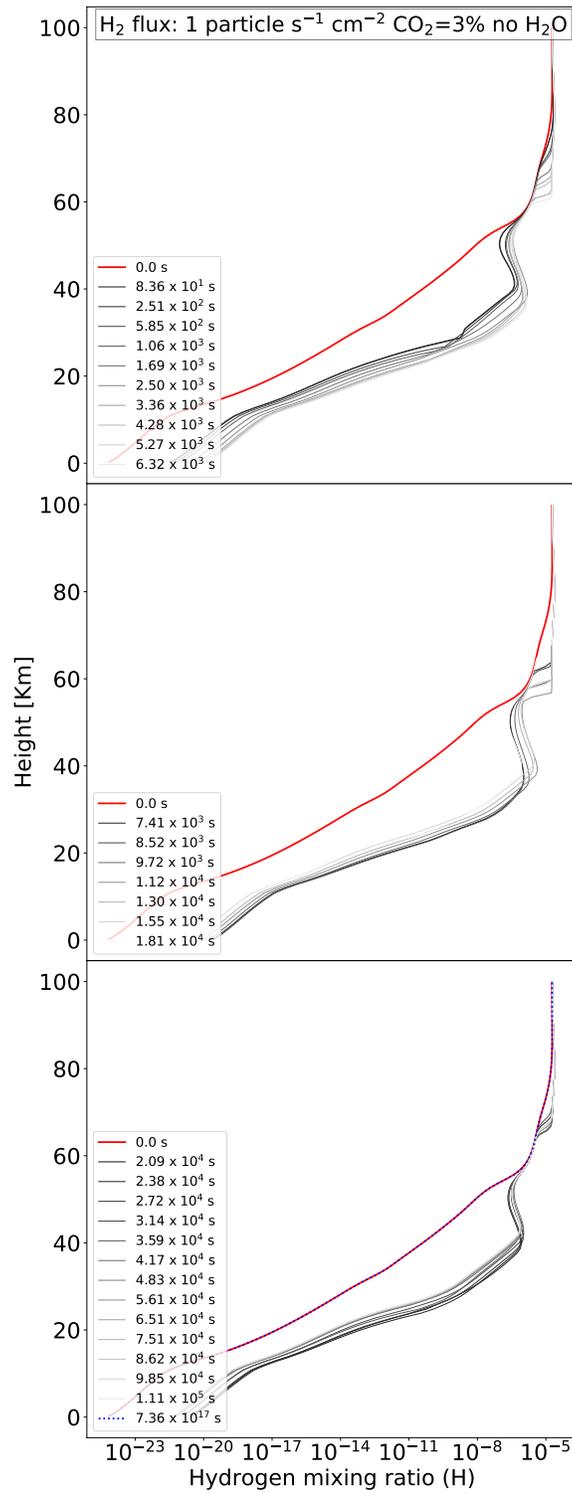
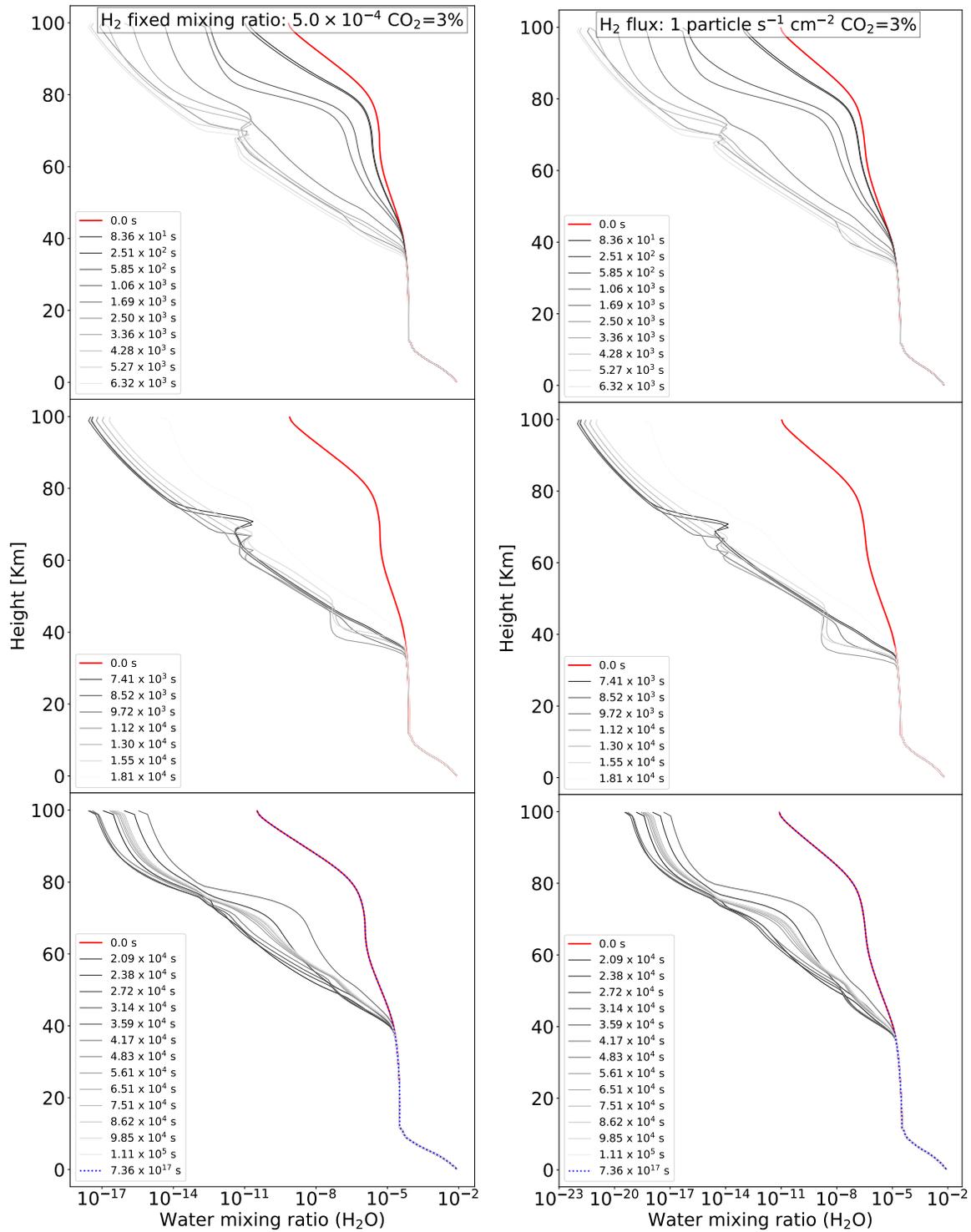
(a) CO<sub>2</sub>: 90% H<sub>2</sub>: 1 particle s<sup>-1</sup> cm<sup>-2</sup> no H<sub>2</sub>O

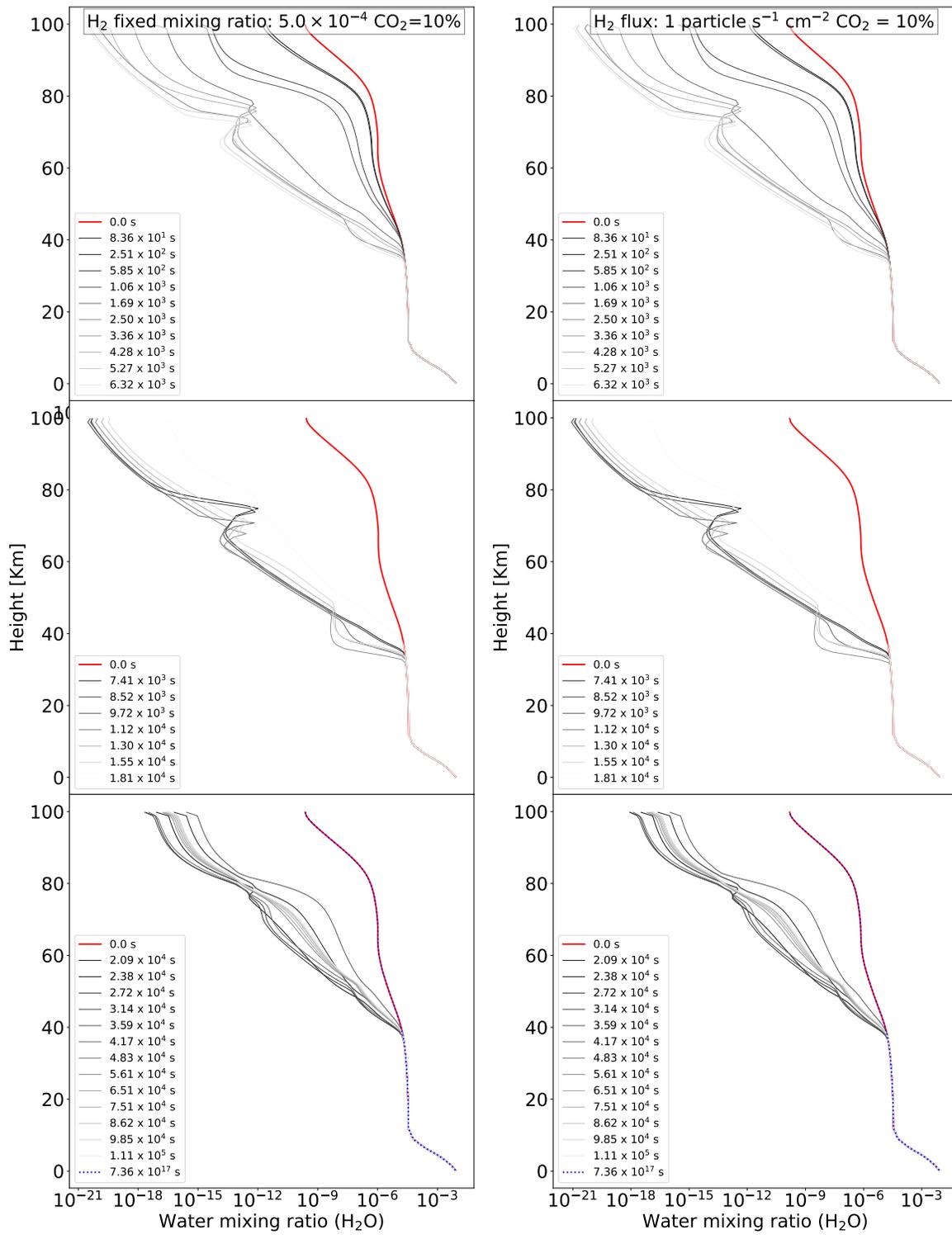
Figura 3.24: Razón de mezcla del hidrógeno (H) para la atmósfera desecada.

## 3.5. Agua

En las figuras 3.25 a 3.30 se presenta la razón de mezcla del agua y su evolución temporal.

En el caso del agua, se puede ver a lo largo de todas las atmósferas una pérdida del agua desde la parte superior de la atmósfera hasta cerca de los 40 km. Esta pérdida es menor en las partes bajas de la atmósfera y se aumenta conforme subimos en la atmósfera. La pérdida de agua depende de la cantidad de  $\text{CO}_2$  en la atmósfera, a mayor  $\text{CO}_2$  mayor es la pérdida de agua, llegando a ser una diferencia de 14 órdenes de magnitud a 90 % de  $\text{CO}_2$ . La diferencia entre ambos casos de flujo de hidrógeno es mayor con 3 % de  $\text{CO}_2$ , como se puede ver en la figura 3.25 y se hace menor conforme aumenta el  $\text{CO}_2$  atmosférico (figuras 3.26 a 3.29).

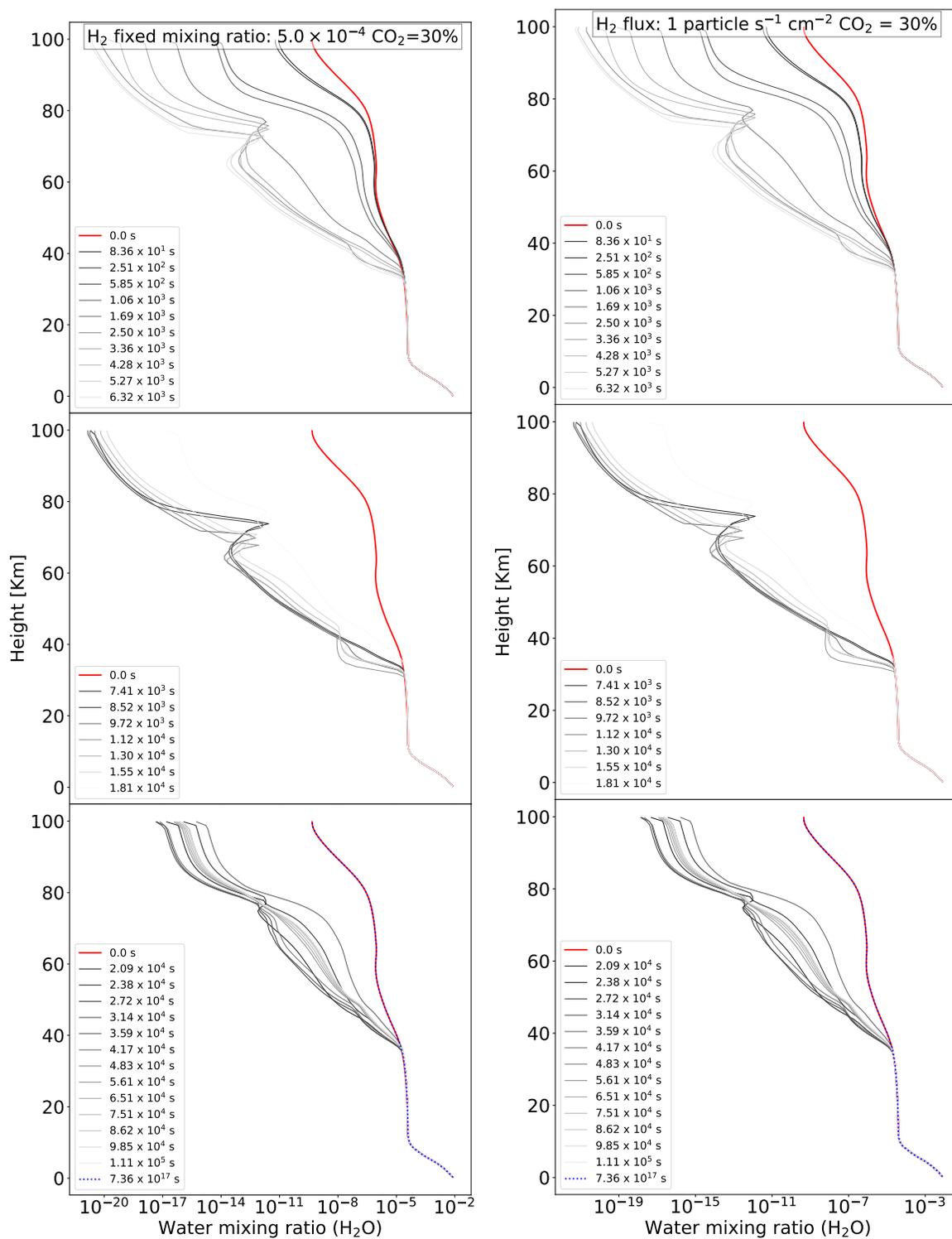
(a) CO<sub>2</sub>: 3% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$ (b) CO<sub>2</sub>: 3% H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ Figura 3.25: Razón de mezcla del agua (H<sub>2</sub>O) para atmósferas con 3% de CO<sub>2</sub>.

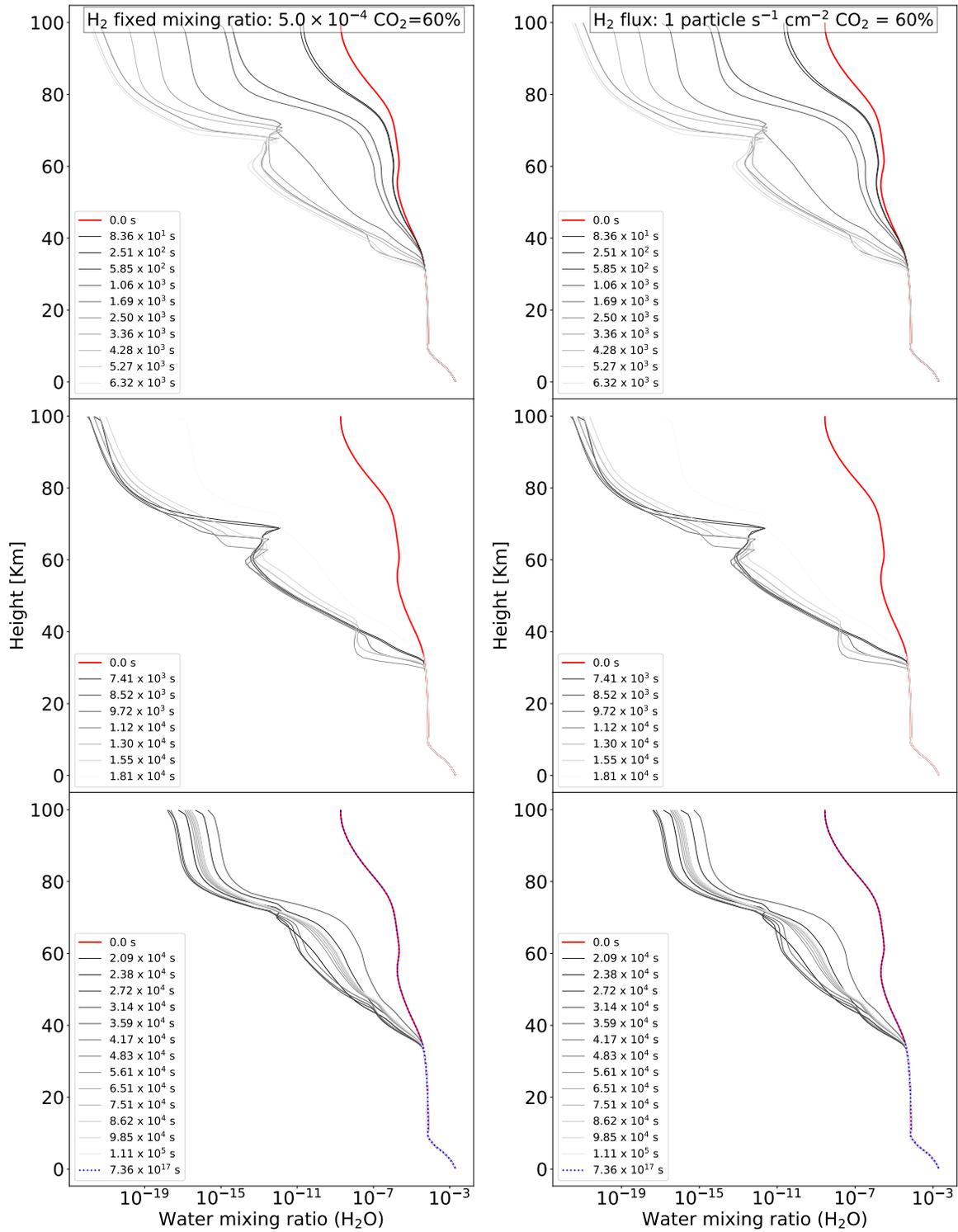


(a) CO<sub>2</sub>: 10% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$

(b) CO<sub>2</sub>: 10% H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$

Figura 3.26: Razón de mezcla del agua (H<sub>2</sub>O) para atmósferas con 10% de CO<sub>2</sub>.

(a) CO<sub>2</sub>: 30% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$ (b) CO<sub>2</sub>: 30% H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ Figura 3.27: Razón de mezcla del agua (H<sub>2</sub>O) para atmósferas con 30% de CO<sub>2</sub>.



(a) CO<sub>2</sub>: 60% fixed mixing ratio  $5.0 \times 10^{-4}$

(b) CO<sub>2</sub>: 60% H<sub>2</sub>:  $1 \text{ particle s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$

Figura 3.28: Razón de mezcla del agua (H<sub>2</sub>O) para atmósferas con 60% de CO<sub>2</sub>.

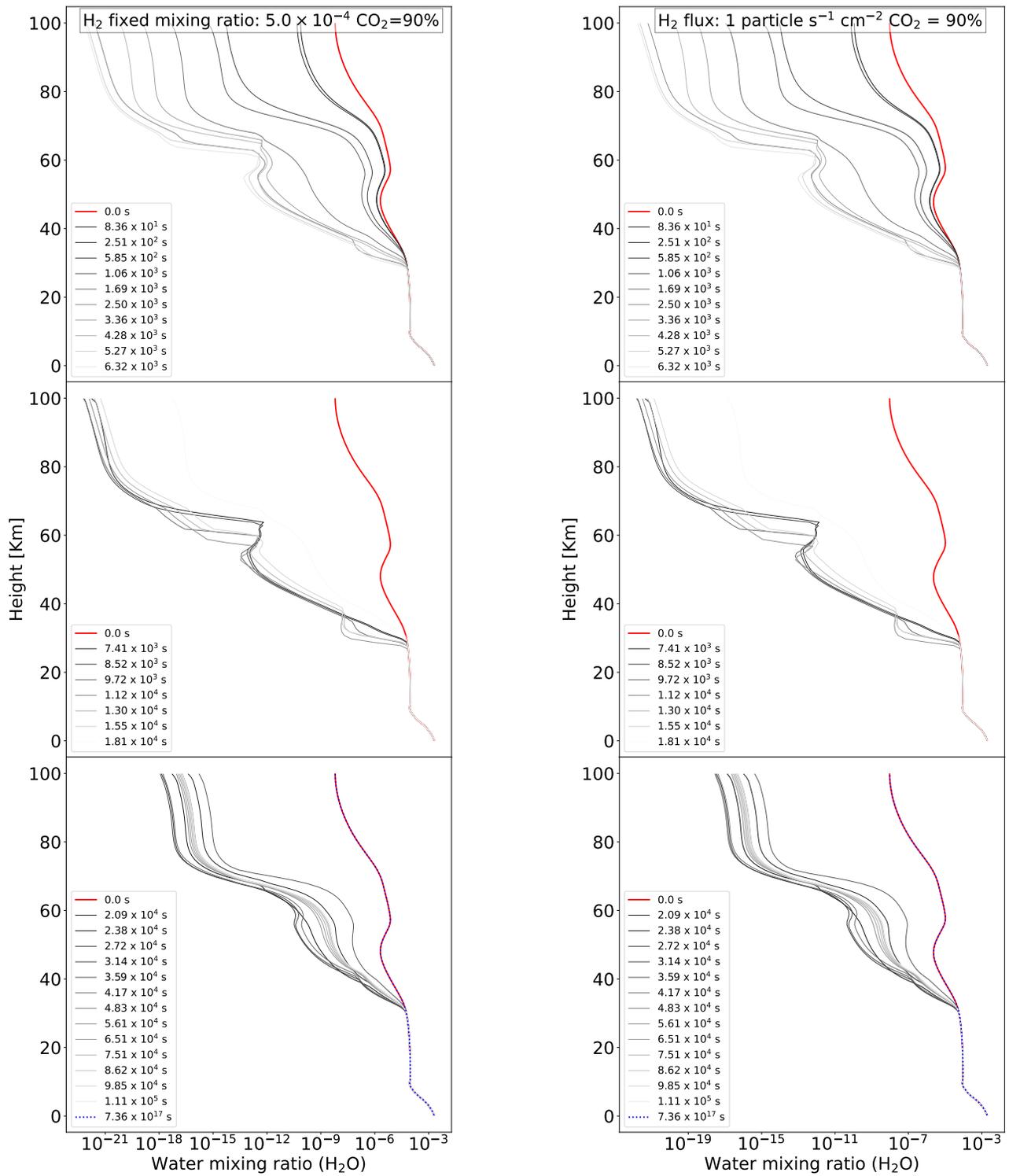
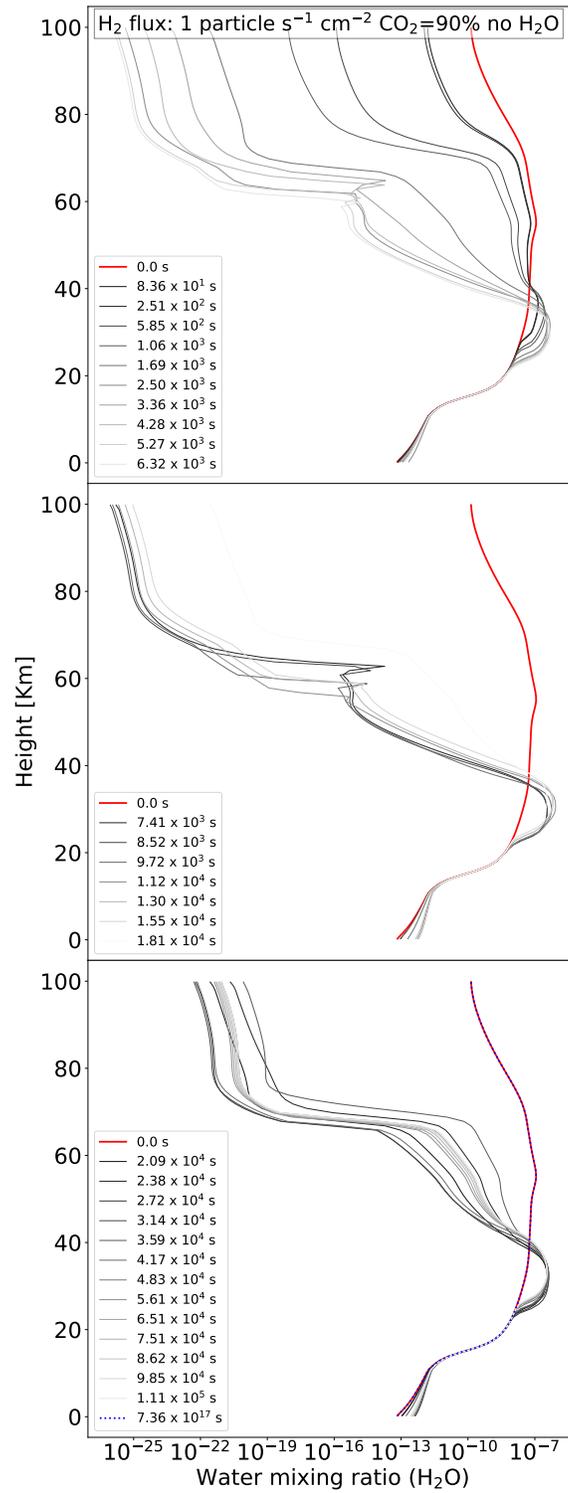


Figura 3.29: Razón de mezcla del agua (H<sub>2</sub>O) para atmósferas con 90% de CO<sub>2</sub>.



(a) CO<sub>2</sub>: 90 % H<sub>2</sub>: 1 particle s<sup>-1</sup> cm<sup>-2</sup> no H<sub>2</sub>O

Figura 3.30: Razón de mezcla del agua (H<sub>2</sub>O) para la atmósfera desecada.



# Capítulo 4

## Discusión

Al inicio de la fulguración, como se puede ver en las figuras 3.1, 3.2, 3.10 y 3.11, el aumento de flujo estelar en la región de UV produce un incremento en la destrucción de oxígeno molecular ( $O_2$ ) y ozono ( $O_3$ ). La destrucción de oxígeno molecular ( $O_2$ ) genera átomos de oxígeno que se recombinan con  $O_2$  para formar ozono. La diferencia en contenido de  $H_2$  en las distintas atmósferas causa que aquellas con menos  $H_2$  destruyan menos oxígeno y ozono (figs. 3.1, 3.2, 3.3, 3.10, 3.11, 3.12, casos con 60% o más  $CO_2$ ).

La fotolización del agua lleva a una acumulación de OH e H como se puede apreciar en las figuras 3.19 a 3.24a. Al mismo tiempo, hay una competencia entre el oxígeno/ozono con el hidrógeno en la atmósfera limitada por la velocidad de reacción. Esta competencia es la responsable del comportamiento poco intuitivo que presentan el oxígeno y ozono, comportamiento

en el que se ven altas y bajas en la diferencia de la profundidad de columna de ambas especies dentro de la tendencia general.

## 4.1. Detectabilidad

Comparando los resultados de las simulaciones realizadas en este trabajo con aquellas realizadas por Domagal-Goldman et al. (2014) podemos tener una idea de la detectabilidad de oxígeno u ozono en nuestro trabajo. En la tabla 4.1 se muestra un resumen hecho por los autores de las cantidades de CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>, y O<sub>3</sub> que se obtuvieron al exponer una Tierra abiótica a distintas estrellas.

En el caso del oxígeno molecular, las atmósferas con más H<sub>2</sub> presentan una profundidad de columna de O<sub>2</sub> entre  $6.45 \times 10^{19}$  y  $7.62 \times 10^{20}$  cm<sup>-2</sup>, lo que las coloca entre las simulaciones realizadas por los autores con  $\epsilon$  Eridani y  $\sigma$  Boötis. Esta cantidad de oxígeno sería detectable por una misión con una razón resolución espectral ( $\lambda/\Delta\lambda$ ) de 75 en la absorción de 0.25  $\mu$ m con una razón señal/ruido entre 380 y 1600 (ver tabla 4.2). Mientras que las atmósferas con menos H<sub>2</sub> presentan la profundidad de columna entre  $9.83 \times 10^{19}$  y  $1.45 \times 10^{21}$  cm<sup>-2</sup>, lo que las coloca entre las simulaciones realizadas por los autores con el Sol y  $\sigma$  Boötis. Esta cantidad de oxígeno sería detectable por una misión con una razón resolución espectral ( $\lambda/\Delta\lambda$ ) de 75 en la absorción de 0.25  $\mu$ m con una razón señal/ruido entre 1600 y 2800. La atmósfera desecada presenta una profundidad de columna de O<sub>2</sub> de  $5.53 \times 10^{24}$  cm<sup>-2</sup>. Al ser este un valor superior

al de la Tierra presente, requería una razón señal-ruido menor a 380.

En el caso del ozono, las atmósferas con más  $H_2$  presentan una profundidad de columna de  $O_2$  entre  $5.22 \times 10^{14}$  y  $2.18 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ , aquellas atmósferas con 1 % o más  $CO_2$  podrían ser detectables con una razón señal-ruido entre 3 y 64 en la absorción de  $0.25 \text{ }\mu\text{m}$  y entre 15 y 2100 en la absorción de  $9.6 \text{ }\mu\text{m}$ . Las atmósferas con menos  $H_2$  presentan entre  $2.2 \times 10^{14}$  y  $2.44 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ , aquellas atmósferas con 1 % o más  $CO_2$  podrían ser detectables con una razón señal-ruido entre 3 y 64 en la absorción de  $0.25 \text{ }\mu\text{m}$ , y entre 15 y 2100 en la absorción de  $9.6 \text{ }\mu\text{m}$ . La atmósfera desecada presenta un comportamiento similar al detallado por Segura et al. (2010, fig. 7), acumulando entre  $1.13 \times 10^{16}$  y  $2.18 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ , lo que supera el acumulado en la simulación con AD Leo por los autores. Este ozono sería detectable en las absorciones de  $0.25$  y  $9.6 \text{ }\mu\text{m}$  con una razón señal-ruido menor a 7.5 y 1000, respectivamente.

En todos los casos, los resultados obtenidos de las simulaciones no indican la presencia de un falso positivo. La mayoría de las simulaciones realizadas resultaron en una pérdida de oxígeno molecular y ozono por igual. Aquellas simulaciones en las que hubo una acumulación de ozono, existen discriminantes para poder diferenciar el estado de la atmósfera de una posible bioseñal, por ejemplo la falta de oxígeno en oposición a lo que se esperaría de una fuente biótica. En particular, la atmósfera desecada puede ser discriminada por la falta de agua (Meadows, 2017).

Tabla 4.1: Profundidad de columna de ozono y oxígeno para atmósferas simuladas. Tabla reproducida de Domagal-Goldman et al. (2014)

Planeta	Estrella	Razón de mezcla del CO <sub>2</sub> [ppm]	Razón de mezcla del CH <sub>4</sub> [ppm]	Profundidad de columna de O <sub>3</sub> [cm <sup>-2</sup> ]	Profundidad de columna de O <sub>2</sub> [cm <sup>-2</sup> ]
Tierra actual	Sol (G2V)	335	1.79	$8.6 \times 10^{18}$	$4.6 \times 10^{24}$
Tierra abiótica	$\sigma$ Boötis (F2V)	500000	$3.6 \times 10^{-4}$	$1.3 \times 10^{18}$	$1.7 \times 10^{21}$
Tierra abiótica	Sol (G2V)	500000	$2.0 \times 10^{-3}$	$4.5 \times 10^{15}$	$9.9 \times 10^{19}$
Tierra abiótica	$\epsilon$ Eridani (K2V)	500000	$1.0 \times 10^{-2}$	$1.0 \times 10^{15}$	$3.4 \times 10^{19}$
Tierra abiótica	AD Leo (M3.5V)	500000	$9.4 \times 10^{-3}$	$8.8 \times 10^{15}$	$7.4 \times 10^{19}$
Tierra abiótica	GJ 876 (M4V)	500000	$8.5 \times 10^{-2}$	$1.8 \times 10^{15}$	$2.7 \times 10^{19}$

Tabla 4.2: Razón señal-ruido requerida para detectar características de absorción con un nivel de confianza  $3\sigma$  para una misión con resolución espectral  $\lambda/\Delta\lambda = 75$ . Tabla reproducida de Domagal-Goldman et al. (2014)

Estrella	0.25 $\mu$ m O <sub>3</sub>	0.25 $\mu$ m O <sub>2</sub>	0.25 $\mu$ m CH <sub>4</sub>	0.25 $\mu$ m CO	0.25 $\mu$ m CH <sub>4</sub>	0.25 $\mu$ m CO	9.6 $\mu$ m O <sub>3</sub>
$\sigma$ Boötis	3	380	570	8.6	1300	3.6	15
Sol	16	2800	430	28	580	11	3000
$\epsilon$ Eridani	64	1600	95	44	120	21	2100
AD Leo	7.5	620	100	27	120	13	1000
GJ 876	38	6600	17	33	25	24	2700

# Capítulo 5

## Conclusiones

Se encontró que en la mayoría de las simulaciones realizadas el aumento de flujo estelar no representa un mecanismo de producción abiótica de  $O_2$  y  $O_3$ . A excepción de la atmósfera desecada, cuando hubo acumulación de  $O_2$  y  $O_3$ . Incluso el caso en donde se observó la presencia de cantidades de oxígeno molecular en niveles mayores a la Tierra en el presente, esta cantidad es independiente de la fulguración, tenemos una señal espectral secundaria (la falta de agua en la atmósfera) con la que poder discriminar. Por lo que esto no representaría un falso positivo. Es necesario continuar el estudio de la interacción entre enanas M y este tipo de atmósferas con un mayor número de fulguraciones a lo largo de un periodo de tiempo.

También, a lo largo de estas simulaciones se encontró que la respuesta atmosférica no es intuitiva. No se esperaba que la variación del  $O_2$  y el  $O_3$  fuera como sucedió, con periodos

de recuperación dentro de una tendencia de destrucción de los compuestos. Es posible que las atmósferas con alto contenido de  $\text{CO}_2$  se encuentren en variación constante de su inventario de  $\text{O}_2$  y  $\text{O}_3$ .

# Bibliografía

- Abe, Y., Abe-Ouchi, A., Sleep, N. H. & Zahnle, K. J. (2011). Habitable Zone Limits for Dry Planets. *Astrobiology*, 11, 443-460 (p. 11).
- Allen, M. & Frederick, J. E. (1982). Effective Photodissociation Cross Sections for Molecular Oxygen and Nitric Oxide in the Schumann-Runge Bands. *J. Atmospheric Sci.*, 39, 2066-2075 (p. 126).
- Arney, G., Domagal-Goldman, S. D., Meadows, V. S., Wolf, E. T., Schwieterman, E., Charnay, B., Claire, M., Hébrard, E. & Trainer, M. G. (2016). The Pale Orange Dot: The Spectrum and Habitability of Hazy Archean Earth. *Astrobiology*, 16(11), 873 (pp. 29, 31-32).
- Boro Saikia, S., Marvin, C. J., Jeffers, S. V., Reiners, A., Cameron, R., Marsden, S. C., Petit, P., Warnecke, J. & Yadav, A. P. (2018). Chromospheric Activity Catalogue of 4454 Cool Stars. Questioning the Active Branch of Stellar Activity Cycles. *Astron. Astrophys.*, 616, A108 (p. 8).
- Borucki, W. J. & Chameides, W. L. (1984). Lighting: Estimates of the Rates of Energy Dissipation and Nitrogen Fixation. *Rev. Geophys. Space Phys.*, 22, 363 (p. 124).
- Catling, D. C., Glein, C. R., Zahnle, K. J. & McKay, C. P. (2005). Hypothesis Paper: Why O<sub>2</sub> Is Required by Complex Life on Habitable Planets and the Concept of Planetary "Oxygenation Time". *Astrobiology*, 5(3) (p. 19).
- Catling, D. C. & Kasting, J. F. (2017, mayo). *Atmospheric Evolution on Inhabited and Lifeless Worlds*. Cambridge University Press. (P. 121).
- Catling, D. C. & Zahnle, K. J. (2020). The Archean atmosphere. *Sci. Adv.*, 6(9), eaax1420 (p. 22).
- Cloud, P. E. (1972). A Working Model of the Primitive Earth. *Am. J. Sci.*, 272, 537-548 (p. 21).
- Croswell, K. (1996). *The Alchemy of Heavens*. Oxford University Press. (Pp. 10-11).
- Davenport, J. R. A., Hawley, S. L., Hebb, L., Wisniewski, J. P., Kowalski, A. F., Johnson, E. C., Malatesta, M., Peraza, J., Keil, M., Silverberg, S. M., Jansen, T. C., Scheffler, M. S., Berdis, J. R., Larsen, D. M. & Hilton, E. J. (2014). Kepler Flares. II. The Temporal Morphology of White-Light Flares on GJ 1243. *Astrophys. J.*, 797, 122 (pp. 27, 38).
- DeWitt, H. L., Trainer, M. G., Pavlov, A. A., Hasenkopf, C. A., Aiken, A. C., Jimenez, J. L., McKay, C. P., Toon, O. B. & Tolbert, M. A. (2009). Reduction in Haze Formation Rate on Prebiotic Earth in the Presence of Hydrogen. *Astrobiology*, 9, 447-453 (p. 32).

- Domagal-Goldman, S. D., Segura, A., Claire, M. W., Robinson, T. D. & Meadows, V. S. (2014). Abiotic Ozone and Oxygen in Atmospheres Similar to Prebiotic Earth. *Astrophys. J.*, 792, 90 (pp. 20, 38, 78, 80).
- Domagal-Goldman, S. D., Wright, K. E., Adamala, K., de la Rubia, L. A., Bond, J., Dartnell, L. R., Goldman, A. D., Lynch, K., Naud, M.-E., Paulino-Lima, I. G., Singer, K., Walter-Antonio, M., Abrevaya, X. C., Anderson, R., Arney, G., Atri, D., Azúa-Bustos, A., Bowman, J. S., Brazelton, W. J., ... Wong, T. (2016). The Astrobiology Primer v2.0 (S. D. Domagal-Goldman & K. E. Wright, Eds.). *Astrobiology*, 16(8), 561-653 (pp. 11-14).
- Doré, O., Bock, J., Ashby, M., Capak, P., Cooray, A., de Putter, R., Eifler, T., Flagey, N., Gong, Y., Habib, S., Heitmann, K., Hirata, C., Jeong, W.-S., Katti, R., Korngut, P., Krause, E., Lee, D.-H., Masters, D., Mauskopf, P., ... Zemcov, M. (2015, 25 de marzo). *Cosmology with the SPHEREX All-Sky Spectral Survey*. arXiv: 1412.4872 [astro-ph]. (P. 4).
- Estrela, R. & Valio, A. (2018). Superflare Ultraviolet Impact on Kepler-96 System: A Glimpse of Habitability When the Ozone Layer First Formed on Earth. *Astrobiology*, 18(11), 1414-1424 (p. 26).
- Fishman, J. & Crutzen, P. J. (1977). A Numerical Study of Tropospheric Photochemistry Using a One-Dimensional Model. *J. Geophys. Res.*, 82, 5897-5906 (p. 125).
- Focardi, M., Pace, E., Farina, M., Di Giorgio, A. M., Ferrer, J. C., Ribas, I., Roig, C. S., Bote, L. G., Morales, J. C., Amiaux, J., Cara, C., Augures, J. L., Pascale, E., Morgante, G., Da Deppo, V., Pancrazzi, M., Noce, V., Pezzuto, S., Freriks, M., ... Tinetti, G. (2018). The ARIEL Instrument Control Unit Design for the M4 Mission Selection Review of the ESA's Cosmic Vision Program. *Exp Astron*, 46(1), 1-30 (p. 4).
- Fuji, Y., Angerhausen, D., Deitrick, R., Domagal-Goldman, S. D., Grenfell, J. L., Hori, Y., Kane, S. R., Pallé, E., Rauer, H., Siegler, N., Stapelfeldt, K. & Stevenson, K. B. (2018). Exoplanet Biosignatures: Observational Prospects. *Astrobiology*, 18(6), 739-778 (pp. 4, 14).
- Gao, P., Hu, R., Robinson, T. D., Li, C. & Yung, Y. L. (2015). Stability of CO<sub>2</sub> Atmospheres on Dessicated M Dwarf Exoplanets. *Astrophys. J.*, 806(249), 12p (p. 20).
- Gardner, J. P., Mather, J. C., Clampin, M., Doyon, R., Greenhouse, M. A., Hammel, H. B., Hutchings, J. B., Jakobsen, P., Lilly, S. J., Long, K. S., Lunine, J. I., McCaughrean, M. J., Mountain, M., Nella, J., Rieke, G. H., Rieke, M. J., Rix, H.-W., Smith, E. P., Sonneborn, G., ... Wright, G. S. (2006). The James Webb Space Telescope. *Space Sci Rev*, 123(4), 485-606 (p. 4).
- Gibson, E. G. (1973). *The Quiet Sun*. NASA Scientific and Technical Information Office. (P. 8).
- Giorgi, F. & Chameides, W. L. (1985). The Rainout Parametrization in a Photochemical Model. *J. Geophys. Res.*, 90(D5), 7872-7880 (pp. 125-126).
- Gould, A., Pepper, J. & DePoy, D. L. (2003). Sensitivity of Transit Searches to Habitable-Zone Planets. *Astrophys. J.*, 594(1), 533-537 (p. 6).
- Green, J., Schechter, P., Baltay, C., Bean, R., Bennett, D., Brown, R., Conselice, C., Donahue, M., Fan, X., Gaudi, B. S., Hirata, C., Kalirai, J., Lauer, T., Nichol, B., Padmanabhan, N., Perlmutter, S., Rauscher, B., Rhodes, J., Roellig, T., ... Seiffert, M. (2012, 20 de

- agosto). *Wide-Field InfraRed Survey Telescope (WFIRST) Final Report*. arXiv: 1208.4012 [astro-ph]. (P. 4).
- Guzmán-Marmolejo, A., Segura, A. & Escobar-Briones, E. (2013). Abiotic Production of Methane in Terrestrial Planets Full Access. *Astrobiology*, *13*, 550-559 (p. 32).
- Harman, C. E., Schwieterman, E. W., Schottelkotte, J. C. & Kasting, J. F. (2015). Abiotic O<sub>2</sub> Levels on Planets around F, G, K, and M Stars: Possible False Positives for Life? *The Astrophysical Journal*, *812*, 137 (p. 20).
- Hawley, S. L., Davenport, J. R. A., Kowalski, A. F., Wisniewski, J. P., Hebb, L., Deitrick, R. & Hilton, E. J. (2014). Kepler Flares: I. Active and Inactive m Dwarfs. *Astrophys. J.*, *797*(121), 15pp (pp. 6, 8, 27, 38).
- Hawley, S. L. & Pettersen, B. R. (1991). The Great Flare of 1985 April 12 on AD Leonis. *Astrophys. J.*, *378*, 725-741 (pp. 6, 25, 37).
- Hays, L. (2015). *NASA Astrobiology Strategy*. NASA. (P. 11).
- Horneck, G., Walter, N., Westall, F., Grenfell, J. L., Martin, W. F., Gomez, F., Leuko, S., Lee, N., Onofri, S., Tsiganis, K., Saladino, R., Pilat-Lohinger, E., Palomba, E., Harrison, J., Rull, F., Muller, C., Strazzulla, G., Brucato, J. R., Rettberg, P. & Capria, M. T. (2016). AstRoMap European Astrobiology Roadmap. *Astrobiology*, *16*(3), 201-243 (p. 11).
- Jenkins, J. M., Twicken, J. D., Batalha, N. M., Caldwell, D. A., Cochran, W. D., Endl, M., Latham, D. W., Esquerdo, G. A., Seader, S., Bieryla, A., Petigura, E., Ciardi, D. R., Marcy, G. W., Isaacson, H., Huber, D., Rowe, J. F., Torres, G., Bryson, S. T., Buchhave, L., ... Borucki, W. J. (2015). Discovery and Validation of Kepler-452b: A 1.6  $R_{\oplus}$  Super Earth Exoplanet in the Habitable Zone of a G2 Star. *The Astronomical Journal*, *150*, 56 (p. 1).
- Jones, E. G. & Lineweaver, C. H. (2010). Pressure-Temperature Phase Diagram of the Earth. En V. C. du Foresto, D. M. Gelino & I. Ribas (Eds.), *ASP Conference Series* (pp. 145-151). American Physics Society. (P. 10).
- Kaltenegger, L. & Traub, W. A. (2009). Transits of Earth-like Planets. *Astrophys. J.*, *698*(1), 519-527 (p. 5).
- Kasting, J. F., Whitmire, D. P. & Reynolds, R. T. (1993). Habitable Zones around Main Sequence Stars. *Icarus*, *101*, 108-128 (p. 11).
- Lèger, A., Fontecave, M., Labeyrie, A., Samuel, B., Demangeon, O. & Valencia, D. (2011). Is the Presence of Oxygen on an Exoplanet a Reliable Biosignature? *Astrobiology*, *11*(4) (p. 19).
- Lincowski, A. P., Meadows, V. S., Crisp, D., Robinson, T. D., Luger, R., Lustig-Yaeger, J. & Arney, G. N. (2018). Evolved Climates and Observational Discriminants for the TRAPPIST-1 Planetary System. *ApJ*, *867*(1), 76 (p. 31).
- Luger, R. & Barnes, R. (2015). Extreme Water Loss and Abiotic O<sub>2</sub> Buildup on Planets Throughout the Habitable Zones of M Dwarfs. *Astrobiology*, *15*(119) (pp. 20, 23).
- Mariscal, C. & Doolittle, W. F. (2020). Life and life only: A radical alternative to life definitionism. *Synthese*, *197*(7), 2975-2989 (p. 10).
- Martin, R. V., Chance, K., Jacob, D. J., Kurosu, T. P., Spurr, R. J. D., Bucseles, E., Gleason, J. F., Palmer, P. I., Bey, I., Fiore, A. M., Li, Q., Yantosca, R. M. & Koelemeijer,

- R. B. A. (2002). An Improved Retrieval of Tropospheric Nitrogen Dioxide from GOME. *J. Geophys. Res. Atmospheres*, 107, 4437 (p. 124).
- Matsumi, Y., Comes, F. J., Hancock, G., Hofzumahaus, A., Hynes, A. J., Kawasaki, M. & Ravishankara, A. R. (2002). Quantum Yields for Production of O(1D) in the Ultraviolet Photolysis of Ozone: Recommendation Based on Evaluation of Laboratory Data. *Journal of Geophysical Research (Atmospheres)*, 107, 4024 (p. 31).
- Mayor, M. & Queloz, D. (1995). A Jupiter-mass companion to a solar-type star. *Nature*, 378(6555), 355-359 (p. 1).
- McKay, C. P. (2004). What Is Life—and How Do We Search for It in Other Worlds? *Public Libr. Sci. Biol.*, 2, 1260-1263 (p. 11).
- Meadows, V. S. (2005). Modelling the Diversity of Extrasolar Terrestrial Planets. En C. Aime & F. Vakili (Eds.), *IAU Colloq. 200: Direct Imaging of Exoplanets: Science & Techniques* (pp. 25-34). International Astronomical Union. (P. 12).
- Meadows, V. S. (2008). *Exoplanets: Detection, Formation, Properties, Habitability*. Springer. (P. 12).
- Meadows, V. S. (2017). Reflections on O<sub>2</sub> as a Biosignature in Exoplanetary Atmospheres. *Astrobiology*, 17(10), 1022-1052 (pp. 17, 79).
- Meadows, V. S. (2018). Exoplanet Biosignatures: Understanding Oxygen as a Biosignature in the Context of Its Environment. *Astrobiology*, 18(6), 630-662 (p. 17).
- Miranda Rosete, A. A. (2019). *Efectos de Fulguraciones de Enanas Tipo M En Atmósferas de Planetas Tipo Tierra*. UNAM. (Pp. 30, 32-33).
- Morgante, G., Terenzi, L., D'Ascanio, D., Eccleston, P., Crook, M., Hunt, T., Deppo, V. D., Focardi, M., Malaguti, G., Micela, G., Pace, E. & Tinetti, G. (2018). Thermal Architecture of the ESA ARIEL Payload. *Proceedings Volume 10698, Space Telescopes and Instrumentation 2018: Optical, Infrared, and Millimeter Wave*, 10698 (p. 4).
- Muheki, P., Guenther, E. W., Mutabazi, T. & Jurua, E. (2020). High-Resolution Spectroscopy of Flares and CMES on AD Leo\*. *A&A*, 637, A13 (p. 8).
- Mulders, G. D., Pascucci, I. & Apai, D. (2015). An Increase in the Mass of Planetary Systems around Lower-Mass Stars. *Astrophys. J.*, 814(130), 10 pp (pp. 6-7).
- Mullally, F., Thompson, S. E., Coughlin, J. L., Burke, C. J. & Rowe, J. F. (2018). Kepler's Earth-like Planets Should Not Be Confirmed without Independent Detection: The Case of Kepler-452b. *The Astronomical Journal*, 155, 210 (p. 1).
- Narita, N., Enomoto, T., Masaoka, S. & Kusakabe, N. (2015). Titania May Produce Abiotic Oxygen Atmospheres on Habitable Exoplanets. *Sci. Rep.*, 5, 13977 (p. 20).
- Nishida, S., Taketani, F., Takahashi, K. & Matsumi, Y. (2004). Quantum Yield for O(1D) Production from Ozone Photolysis in the Wavelength Range of 193-225 Nm. *Journal of Physical Chemistry A*, 108, 2710-2714 (p. 31).
- Nutzman, P. & Charbonneau, D. (2008). Design Considerations for a Ground-Based Transit Search for Habitable Planets Orbiting M Dwarfs. *Publ. Astron. Soc. Pac.*, 120(865), 317-327 (p. 6).
- Oliver, J. D. & Perry, R. S. (2006). Definitely Life but Not Definitely. *Orig. Life Evol. Biosph.*, 36, 515-521 (p. 10).

- O'Malley-James, J. & Kaltenegger, L. (2017). UV Surface Habitability of the TRAPPIST-1 System. *Mon. Not. R. Astron. Soc. Lett.*, 469(1), L26-L30 (p. 26).
- Pace, E., Micela, G. & Team, t. A. (2016). ARIEL: Atmospheric Remote Sensing Infrared Exoplanet Large Survey. A Porposal for the ESA Cosmic Vision M4. *Mem. Della Soc. Astron. Ital.*, 87, 214 (pp. 4-5).
- Ranjan, S., Schwieterman, E. W., Harman, C., Fateev, A., Sousa-Silva, C., Seager, S. & Hu, R. (2020). Photochemistry of Anoxic Abiotic Habitable Planet Atmospheres: Impact of New H<sub>2</sub>O Cross Sections. *ApJ*, 896(2), 148 (pp. 31-32).
- Rauer, H., Catala, C., Aerts, C., Appourchaux, T., Benz, W., Brandeker, A., Christensen-Dalsgaard, J., Deleuil, M., Gizon, L., Goupil, M.-J., Güdel, M., Janot-Pacheco, E., Mas-Hesse, M., Pagano, I., Piotto, G., Pollacco, D., Santos, N. C., Smith, A., -C., J., ... Zwintz, K. (2014). The PLATO 2.0 Mission. *Exp Astron*, 38(1-2), 249-330 (p. 5).
- Reiners, A. & Basri, G. (2009). On the Magnetic Topology of Partially and Fully Convective Stars. *Astron. Astrophys.*, 496(3), 787-790 (p. 5).
- Schlesinger, W. H. (1991). The Global Carbon Cycle. *Biogeochem. Anal. Glob. Change* (p. 10).
- Seager, S., Schrenk, M. & Bains, W. (2012). An Astrophysical View of Earth-Based Metabolic Biosignature Gases. *Astrobiology*, 12(1), 1-23 (pp. 10, 12-13, 18).
- Seager, S. & Bains, W. (2015). The search for signs of life on exoplanets at the interface of chemistry and planetary science. *Sci. Adv.*, 1(2) (p. 16).
- Segura, A. & Kaltenegger, L. (2010). Search for Habitable Planets. En V. A. Basiuk (Ed.), *Astrobiology: Emergence, Search and Detection of Life* (pp. 341-360). American scientific publishers. (P. 25).
- Segura, A., Kasting, J. F., Meadows, V. S., Cohen, M., Scalo, J., Crisp, D., Buttler, R. A. H. & Tinetti, G. (2005). Biosignatures from Earth-like Planets around M Dwarfs. *Astrobiology* (p. 22).
- Segura, A., Krelove, K., Kasting, J. F., Sommerlatt, D., Meadows, V., Crisp, D., Cohen, M. & Mlawer, E. (2003). Ozone Concentrations and Ultraviolet Fluxes on Earth-Like Planets Around Other Stars. *Astrobiology*, 3, 689-708 (p. 25).
- Segura, A., Walkowicz, L. M., Meadows, V. S., Kasting, J. F. & Hawley, S. L. (2010). The Effect of a Strong Stellar Flare on the Atmospheric Chemistry of an Earth-like Planet Orbiting an M Dwarf. *Astrobiology*, 10(7), 1-22 (pp. 25-27, 79).
- Shields, A. L., Ballard, S. & Johnson, J. A. (2016). The Habitability of Planets Orbiting M-Dwarf Stars. *Phys. Rep.*, 663, 1-38 (p. 5).
- Syrovatskii, S. I. (1972). Solar Flare Time Development: Three Phases. *Comments Astrophys. Space Phys.*, 4, 65 (p. 8).
- Team, E. (2021, 3 de marzo). *The Extrasolar Planet Encyclopaedia — Catalog Listing*. (Pp. 1-2).
- Team, T. L. (2019, 12 de diciembre). *The LUVUOIR Mission Concept Study Final Report*. arXiv: 1912.06219 [astro-ph]. (Pp. 17, 24).
- Tian, F., France, K., Linsky, J. L., Mauas, P. J. D. & Vieytes, M. C. (2014). High Stellar FUV/NUV Ratio and Oxygen Contents in the Atmospheres of Potentially Habitable Planets. *Earth Planet. Sci. Lett.*, 385, 22-27 (p. 20).
- Tian, F., Toon, O. B., Pavlov, A. A. & Sterck, H. D. (2005). A Hydrogen-Rich Early Earth Atmosphere. *Science*, 308, 1014-1017 (p. 36).

- Tian, F. (2015). Atmospheres and Oceans of Rocky Planets In and Beyond the Habitable Zones of M Dwarfs. *3*, 107.05 (p. 20).
- Tilley, M. A., Segura, A., Meadows, V. S., Hawley, S. L. & Davenport, J. R. A. (2018). Modeling Repeated M-Dwarf Flaring at an Earth-like Planet in the Habitable Zone: I. Atmospheric Effects for an Unmagnetized Planet. *Astrobiology*, *19*(1), 64-86 (pp. 27, 37).
- Toon, O. B., McKay, C. P. & Ackerman, T. P. (1989). Rapid Calculation of Radiative Heating Rates and Photodissociation Rates in Inhomogeneous Multiple Scattering Atmospheres. *J. Geophys. Res.*, *94*(D13), 16287-16301 (pp. 30, 126).
- Tsokolov, S. A. (2009). Why Is the Definition of Life So Elusive? Epistemological Considerations. *Astrobiology*, *9*(4), 401-412 (p. 10).
- Varios. (1965-2012). *Chemistry and Physics of Carbon* (Vol. 1-31). Penn State University. (P. 10).
- Vida, K., Kővári, Z., Pál, A., Oláh, K. & Kriskovics, L. (2017). Frequent Flaring in the TRAPPIST-1 System—Unsuited for Life? *ApJ*, *841*(2), 124 (p. 26).
- Winn, J. N. (2014, 24 de septiembre). *Transits and Occultations*. arXiv: 1001.2010 [astro-ph]. (P. 16).
- Wordsworth, R. & Pierrehumbert, R. (2014). Abiotic Oxygen-Dominated Atmospheres on Terrestrial Habitable Zone Planets. *Astrophys. J.*, *785*, 4pp (p. 20).

# Apéndice A

## Especies químicas en el modelo

Tabla A.1: Especies químicas incluidas en el modelo. Se distingue el tipo de tratamiento que se le da a la especie, así como las condiciones de frontera.

Espece	Tipo	Frontera	VDEPO	FIXEDMR	SGFLUX	DISTH
O	LL	0	1.00E+00	0	0	0
O <sub>2</sub>	LL	0	0	1.00E-08	2.00E+11	0
H <sub>2</sub> O	LL	0	0	0	0	0
H	LL	0	1.00E+00	0	0	0
OH	LL	0	1.00E+00	0	0	0
HO <sub>2</sub>	LL	0	1.00E+00	0	0	0
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	LL	0	2.00E-01	0	0	0
H <sub>2</sub>	LL	3	—————revisar tab. 2.1—————			10
CO	LL	3	1.00E-08	4.00E-05	3.00E+08	10
HCO	LL	0	1.00E+00	0	0	0

0 = constant deposition velocity (VDEP)

1 = constant mixing ratio (FIXEDMR)

2 = constant upward flux (SGFLUX)

3 = constant vdep + vertically distributed upward flux (uses both SGFLUX and DISTH)

*cont.*

Especie	Tipo	Frontera	VDEPO	FIXEDMR	SGFLUX	DISTH
H <sub>2</sub> CO	LL	0	2.00E-01	0	0	0
CH <sub>4</sub>	LL	2	0	3.50E-03	3.00E+08	0
CH <sub>3</sub>	LL	0	1.00E+00	0	0	0
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	LL	0	1.00E-05	0	0	0
NO	LL	0	3.00E-04	0	0	0
NO <sub>2</sub>	LL	0	3.00E-03	0	0	0
HNO	LL	0	1.00E+00	0	0	0
O <sub>3</sub>	LL	0	7.00E-02	0	0	0
HNO <sub>3</sub>	LL	0	2.00E-01	0	0	0
N	LL	0	0	0	0	0
C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	LL	0	0	0	0	0
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>	LL	0	0	0	0	0
CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H	LL	0	0	0	0	0
CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>	LL	0	0	0	0	0
C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	LL	0	0	0	0	0
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> CHO	LL	0	0	0	0	0
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	LL	0	0	0	0	0
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	LL	0	0	0	0	0
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	LL	0	0	0	0	0
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH	LL	0	0	0	0	0
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	LL	0	0	0	0	0

0 = constant deposition velocity (VDEP)

1 = constant mixing ratio (FIXEDMR)

2 = constant upward flux (SGFLUX)

3 = constant vdep + vertically distributed upward flux (uses both SGFLUX and DISTH)

*cont.*

Especie	Tipo	Frontera	VDEPO	FIXEDMR	SGFLUX	DISTH
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	LL	0	0	0	0	0
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	LL	0	0	0	0	0
CH	LL	0	0	0	0	0
CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	LL	0	0	0	0	0
CH <sub>3</sub> O	LL	0	0	0	0	0
CH <sub>2</sub> CO	LL	0	0	0	0	0
CH <sub>3</sub> CO	LL	0	0	0	0	0
CH <sub>3</sub> CHO	LL	0	0	0	0	0
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	LL	0	0.1	0	0	0
CH <sub>2</sub> 3	LL	0	0	0	0	0
C <sub>2</sub> H	LL	0	0	0	0	0
C <sub>2</sub>	LL	0	0	0	0	0
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	LL	0	0	0	0	0
HCS	LL	0	0	0	0	0
CS <sub>2</sub>	LL	0	0	0	0	0
CS	LL	0	0	0	0	0
OCS	LL	0	0	2.00E-09	0	0
S	LL	0	0	0	0	0
HS	LL	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> S	LL	3	1.50E-02	0	3.50E+08	10
SO <sub>3</sub>	LL	0	0	0	0	0

0 = constant deposition velocity (VDEP)

1 = constant mixing ratio (FIXEDMR)

2 = constant upward flux (SGFLUX)

3 = constant vdep + vertically distributed upward flux (uses both SGFLUX and DISTH)

*cont.*

Especie	Tipo	Frontera	VDEPO	FIXEDMR	SGFLUX	DISTH
S <sub>2</sub>	LL	0	0	0	0	0
HSO	LL	0	1.00E+00	0	0	0
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	LL	0	0.2	0	0	0
SO <sub>2</sub>	LL	3	1.00E+00	0	3.50E+09	10
SO	LL	0	0	0	0	0
CO <sub>2</sub>	LL	1	0	revisar tab. 2.1	0	0
SO <sub>4(aer)</sub>	LL	0	1.00E-02	0	0	0
S <sub>8(aer)</sub>	LL	0	1.00E-02	0	0	0
HC <sub>(aer)</sub>	LL	0	1.00E-02	0	0	0
HC <sub>(aer2)</sub>	LL	0	1.00E-02	0	0	0

*De vida corta*

HNO <sub>2</sub>	SL
O <sub>1</sub> D	SL
CH <sub>2</sub> 1	SL
C	SL
SO <sub>2</sub> 1	SL
SO <sub>2</sub> 3	SL
HSO <sub>3</sub>	SL
OCS <sub>2</sub>	SL
CS <sub>2</sub> X	SL

0 = constant deposition velocity (VDEP)

1 = constant mixing ratio (FIXEDMR)

2 = constant upward flux (SGFLUX)

3 = constant vdep + vertically distributed upward flux (uses both SGFLUX and DISTH)

*cont.*

Especie	Tipo	Frontera	VDEPO	FIXEDMR	SGFLUX	DISTH
S <sub>3</sub>	SL	0	0	0	0	0
S <sub>4</sub>	SL	0	0	0	0	0
<i>Inertes</i>						
N <sub>2</sub>	IN	0.8				

0 = constant deposition velocity (VDEP)

1 = constant mixing ratio (FIXEDMR)

2 = constant upward flux (SGFLUX)

3 = constant vdep + vertically distributed upward flux (uses both SGFLUX and DISTH)



# Apéndice B

## Reacciones químicas del modelo fotoquímico

Tabla B.1: Reacciones químicas incluidas en el modelo. Se distinguen los reactivos de los productos, y también se señala el tipo de reacción.

Reactivos		Productos		Tipo de reacción
H <sub>2</sub> O	O1D	OH	OH	2BODY
H <sub>2</sub>	O1D	OH	H	2BODY
H <sub>2</sub>	O	OH	H	WEIRD
H <sub>2</sub>	OH	H <sub>2</sub> O	H	2BODY
H	O <sub>3</sub>	OH	O <sub>2</sub>	2BODY
H	O <sub>2</sub>	HO <sub>2</sub>		3BODY
H	HO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	2BODY
H	HO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	O	2BODY
H	HO <sub>2</sub>	OH	OH	2BODY
OH	O	H	O <sub>2</sub>	2BODY
OH	HO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	O <sub>2</sub>	2BODY
OH	O <sub>3</sub>	HO <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	2BODY

*cont.*

Reactivos		Productos			Tipo de reacción
HO <sub>2</sub>	O	OH	O <sub>2</sub>		2BODY
HO <sub>2</sub>	O <sub>3</sub>	OH	O <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	2BODY
HO <sub>2</sub>	HO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>		WEIRD
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	OH	HO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O		2BODY
O	O	O <sub>2</sub>			WEIRD
O	O <sub>2</sub>	O <sub>3</sub>			3BODY
O	O <sub>3</sub>	O <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>		2BODY
OH	OH	H <sub>2</sub> O	O		2BODY
O1D	M	O	M		2BODY
O1D	O <sub>2</sub>	O	O <sub>2</sub>		2BODY
O <sub>2</sub>	hν	O	O1D		PHOTP
O <sub>2</sub>	hν	O	O		PHOTP
H <sub>2</sub> O	hν	H	OH		PHOTX
O <sub>3</sub>	hν	O <sub>2</sub>	O1D		PHOTX
O <sub>3</sub>	hν	O <sub>2</sub>	O		PHOTX
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	hν	OH	OH		PHOTX
CO <sub>2</sub>	hν	CO	O		PHOTX
CO <sub>2</sub>	hν	CO	O1D		PHOTX
CO	OH	CO <sub>2</sub>	H		WEIRD
CO	O	CO <sub>2</sub>			WEIRD
H	CO	HCO			WEIRD
H	HCO	H <sub>2</sub>	CO		2BODY
HCO	HCO	H <sub>2</sub> CO	CO		2BODY
OH	HCO	H <sub>2</sub> O	CO		2BODY

*cont.*

Reactivos		Productos		Tipo de reacción
O	HCO	H	CO <sub>2</sub>	2BODY
O	HCO	OH	CO	2BODY
H <sub>2</sub> CO	hν	H <sub>2</sub>	CO	PHOTX
H <sub>2</sub> CO	hν	HCO	H	PHOTX
HCO	hν	H	CO	2BODY
H <sub>2</sub> CO	H	H <sub>2</sub>	HCO	WEIRD
H	H	H <sub>2</sub>		WEIRD
HCO	O <sub>2</sub>	HO <sub>2</sub>	CO	2BODY
H <sub>2</sub> CO	OH	H <sub>2</sub> O	HCO	2BODY
H	OH	H <sub>2</sub> O		WEIRD
OH	OH	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>		3BODY
H <sub>2</sub> CO	O	HCO	OH	2BODY
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	O	OH	HO <sub>2</sub>	2BODY
HO <sub>2</sub>	hν	OH	O	PHOTX
HNO <sub>2</sub>	hν	NO	OH	2BODY
HNO <sub>3</sub>	hν	NO <sub>2</sub>	OH	PHOTX
NO	hν	N	O	PHOTX
NO <sub>2</sub>	hν	NO	O	PHOTX
CH <sub>4</sub>	OH	CH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O	2BODY
CH <sub>4</sub>	O1D	CH <sub>3</sub>	OH	2BODY
CH <sub>4</sub>	O1D	H <sub>2</sub> CO	H <sub>2</sub>	2BODY
CH <sub>2</sub> 1	CH <sub>4</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	2BODY
CH <sub>2</sub> 1	O <sub>2</sub>	HCO	OH	2BODY
CH <sub>2</sub> 1	M	CH <sub>2</sub> 3	M	2BODY

*cont.*

Reactivos		Productos		Tipo de reacción
CH <sub>2</sub> 3	H <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>	H	2BODY
CH <sub>2</sub> 3	CH <sub>4</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	2BODY
CH <sub>2</sub> 3	O <sub>2</sub>	HCO	OH	2BODY
CH <sub>3</sub>	O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> CO	OH	3BODY
CH <sub>3</sub>	O	H <sub>2</sub> CO	H	2BODY
CH <sub>3</sub>	O <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> CO	HO <sub>2</sub>	2BODY
CH <sub>3</sub>	OH	CO	H <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	2BODY
CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>		WEIRD
CH <sub>3</sub>	hν	CH <sub>2</sub> 3	H	2BODY
CH <sub>3</sub>	H	CH <sub>4</sub>		3BODY
CH <sub>3</sub>	HCO	CH <sub>4</sub>	CO	2BODY
CH <sub>3</sub>	HNO	CH <sub>4</sub>	NO	2BODY
CH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> CO	CH <sub>4</sub>	HCO	WEIRD
H	NO	HNO		WEIRD
N	N	N <sub>2</sub>		WEIRD
N	O <sub>2</sub>	NO	O	2BODY
N	O <sub>3</sub>	NO	O <sub>2</sub>	2BODY
N	OH	NO	H	2BODY
N	NO	N <sub>2</sub>	O	2BODY
NO	O <sub>3</sub>	NO <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	2BODY
NO	O	NO <sub>2</sub>		3BODY
NO	HO <sub>2</sub>	NO <sub>2</sub>	OH	2BODY
NO	OH	HNO <sub>2</sub>		3BODY
NO <sub>2</sub>	O	NO	O <sub>2</sub>	2BODY

*cont.*

Reactivos		Productos		Tipo de reacción	
NO <sub>2</sub>	OH	HNO <sub>3</sub>			3BODY
NO <sub>2</sub>	H	NO	OH		2BODY
HCO	NO	HNO	CO		2BODY
HNO	hν	NO	H		2BODY
H	HNO	H <sub>2</sub>	NO		WEIRD
O	HNO	OH	NO		2BODY
OH	HNO	H <sub>2</sub> O	NO		2BODY
HNO <sub>2</sub>	OH	H <sub>2</sub> O	NO <sub>2</sub>		2BODY
CH <sub>4</sub>	O	CH <sub>3</sub>	OH		2BODY
CH <sub>2</sub> 1	H <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>	H		2BODY
CH <sub>2</sub> 1	H <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> 3	H <sub>2</sub>		2BODY
CH <sub>2</sub> 1	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> CO	CO		2BODY
CH <sub>2</sub> 3	O	HCO	H		2BODY
CH <sub>2</sub> 3	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> CO	CO		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	OH	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H <sub>2</sub> O		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	O	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	OH		WEIRD
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	O1D	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	OH		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	HCO	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	CO		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	HNO	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	NO		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	O <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>	HCO	OH	3BODY
CO	O1D	CO	O		2BODY
CO	O1D	CO <sub>2</sub>			WEIRD
HNO <sub>3</sub>	OH	H <sub>2</sub> O	NO <sub>2</sub>	O	WEIRD
N	HO <sub>2</sub>	NO	OH		2BODY

*cont.*

Reactivos		Productos		Tipo de reacción
HO <sub>2</sub>	NO <sub>2</sub>	HNO <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	2BODY
SO	hν	S	O	PHOTX
H <sub>2</sub> S	hν	HS	H	PHOTX
SO <sub>2</sub>	hν	SO	O	PHOTX
SO <sub>2</sub>	hν	SO <sub>2</sub> 1		PHOTX
SO <sub>2</sub>	hν	SO <sub>2</sub> 3		PHOTX
SO	O <sub>2</sub>	O	SO <sub>2</sub>	2BODY
SO	HO <sub>2</sub>	SO <sub>2</sub>	OH	2BODY
SO	O	SO <sub>2</sub>		WEIRD
SO	OH	SO <sub>2</sub>	H	2BODY
SO <sub>2</sub>	OH	HSO <sub>3</sub>		3BODY
SO <sub>2</sub>	O	SO <sub>3</sub>		3BODY
SO <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>		2BODY
HSO <sub>3</sub>	O <sub>2</sub>	HO <sub>2</sub>	SO <sub>3</sub>	2BODY
HSO <sub>3</sub>	OH	H <sub>2</sub> O	SO <sub>3</sub>	2BODY
HSO <sub>3</sub>	H	H <sub>2</sub>	SO <sub>3</sub>	2BODY
HSO <sub>3</sub>	O	OH	SO <sub>3</sub>	2BODY
H <sub>2</sub> S	OH	H <sub>2</sub> O	HS	2BODY
H <sub>2</sub> S	H	H <sub>2</sub>	HS	2BODY
H <sub>2</sub> S	O	OH	HS	2BODY
HS	O	H	SO	2BODY
HS	O <sub>2</sub>	OH	SO	2BODY
HS	HO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> S	O <sub>2</sub>	2BODY
HS	HS	H <sub>2</sub> S	S	2BODY

*cont.*

Reactivos		Productos		Tipo de reacción
HS	HCO	H <sub>2</sub> S	CO	2BODY
HS	H	H <sub>2</sub>	S	2BODY
HS	S	H	S <sub>2</sub>	2BODY
S	O <sub>2</sub>	SO	O	2BODY
S	OH	SO	H	2BODY
S	HCO	HS	CO	2BODY
S	HO <sub>2</sub>	HS	O <sub>2</sub>	2BODY
S	HO <sub>2</sub>	SO	OH	2BODY
S	S	S <sub>2</sub>		WEIRD
S <sub>2</sub>	O	S	SO	2BODY
HS	H <sub>2</sub> CO	H <sub>2</sub> S	HCO	2BODY
S <sub>2</sub>	hν	S	S	PHOTX
S	S <sub>2</sub>	S <sub>3</sub>		WEIRD
S <sub>2</sub>	S <sub>2</sub>	S <sub>4</sub>		WEIRD
S	S <sub>3</sub>	S <sub>4</sub>		WEIRD
S <sub>4</sub>	S <sub>4</sub>	S <sub>8</sub> AER		WEIRD
S <sub>4</sub>	hν	S <sub>2</sub>	S <sub>2</sub>	PHOTX
S <sub>3</sub>	hν	S <sub>2</sub>	S	PHOTX
SO <sub>3</sub>	hν	SO <sub>2</sub>	O	PHOTX
SO <sub>2</sub> 1	hν	SO <sub>2</sub> 3		2BODY
SO <sub>2</sub> 1	hν	SO <sub>2</sub>		2BODY
SO <sub>2</sub> 1	hν	SO <sub>2</sub> 3	hν	2BODY
SO <sub>2</sub> 1	hν	SO <sub>2</sub>	hν	2BODY
SO <sub>2</sub> 1	O <sub>2</sub>	SO <sub>3</sub>	O	2BODY

*cont.*

Reactivos		Productos		Tipo de reacción
SO <sub>2</sub> 1	SO <sub>2</sub>	SO <sub>3</sub>	SO	2BODY
SO <sub>2</sub> 3	hν	SO <sub>2</sub>		2BODY
SO <sub>2</sub> 3	hν	SO <sub>2</sub>	hν	2BODY
SO <sub>2</sub> 3	SO <sub>2</sub>	SO <sub>3</sub>	SO	2BODY
SO	NO <sub>2</sub>	SO <sub>2</sub>	NO	2BODY
SO	O <sub>3</sub>	SO <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	2BODY
SO <sub>2</sub>	HO <sub>2</sub>	SO <sub>3</sub>	OH	2BODY
HS	O <sub>3</sub>	HSO	O <sub>2</sub>	2BODY
HS	NO <sub>2</sub>	HSO	NO	2BODY
S	O <sub>3</sub>	SO	O <sub>2</sub>	2BODY
SO	SO	SO <sub>2</sub>	S	2BODY
SO <sub>3</sub>	SO	SO <sub>2</sub>	SO <sub>2</sub>	2BODY
S	CO <sub>2</sub>	SO	CO	2BODY
SO	HO <sub>2</sub>	HSO	O <sub>2</sub>	2BODY
SO	HCO	HSO	CO	2BODY
H	SO	HSO		3BODY
HSO	hν	HS	O	PHOTX
HSO	NO	HNO	SO	2BODY
HSO	OH	H <sub>2</sub> O	SO	2BODY
HSO	H	HS	OH	2BODY
HSO	H	H <sub>2</sub>	SO	2BODY
HSO	HS	H <sub>2</sub> S	SO	2BODY
HSO	O	OH	SO	2BODY
HSO	S	HS	SO	2BODY

*cont.*

Reactivos		Productos		Tipo de reacción
SO <sub>3</sub>	CO	SO <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>	2BODY
H	OCS	CO	HS	2BODY
HS	CO	OCS	H	2BODY
O	OCS	CO	SO	2BODY
O	OCS	S	CO <sub>2</sub>	2BODY
OCS	S	CO	S <sub>2</sub>	2BODY
OCS	OH	CO <sub>2</sub>	HS	2BODY
S	HCO	OCS	H	2BODY
S	CO	OCS		WEIRD
OCS	hν	CO	S	PHOTX
H <sub>2</sub> S	HO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	HSO	2BODY
OCS	S	OCS <sub>2</sub>		WEIRD
OCS <sub>2</sub>	S	OCS	S <sub>2</sub>	2BODY
S <sub>3</sub>	O	S <sub>2</sub>	SO	2BODY
S <sub>4</sub>	O	S <sub>3</sub>	SO	2BODY
OCS <sub>2</sub>	CO	OCS	OCS	2BODY
CS	O <sub>2</sub>	OCS	O	2BODY
CS	O <sub>2</sub>	CO	SO	2BODY
CS	O <sub>3</sub>	OCS	O <sub>2</sub>	2BODY
CS	O <sub>3</sub>	SO	CO <sub>2</sub>	2BODY
CS	O <sub>3</sub>	CO	SO <sub>2</sub>	2BODY
CS <sub>2</sub>	O	SO	CS	2BODY
CS <sub>2</sub>	O	OCS	S	2BODY
CS <sub>2</sub>	OH	OCS	HS	2BODY

*cont.*

Reactivos		Productos			Tipo de reacción
CS <sub>2</sub> X	M	CS <sub>2</sub>	M		2BODY
CS <sub>2</sub> X	O <sub>2</sub>	CS	SO <sub>2</sub>		2BODY
CS <sub>2</sub> X	CS <sub>2</sub>	CS	CS	S <sub>2</sub>	2BODY
CS	HS	CS <sub>2</sub>	H		WEIRD
CS <sub>2</sub>	O	CO	S <sub>2</sub>		2BODY
CS <sub>2</sub>	SO	OCS	S <sub>2</sub>		2BODY
CS <sub>2</sub>	S	CS	S <sub>2</sub>		WEIRD
CS	O	CO	S		2BODY
CS <sub>2</sub>	hν	CS	S		PHOTX
CS <sub>2</sub>	hν	CS <sub>2</sub> X			PHOTX
CH <sub>4</sub>	HS	CH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> S		2BODY
H	CS	HCS			WEIRD
H	HCS	H <sub>2</sub>	CS		2BODY
S	HCS	H	CS <sub>2</sub>		2BODY
S	HCS	HS	CS		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>			WEIRD
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	H <sub>2</sub>		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	O	CH <sub>3</sub>	HCO	H	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	O	H <sub>2</sub> CO	CH <sub>3</sub>		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	O	CH <sub>3</sub> CHO	H		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	OH	CH <sub>3</sub>	HCO	H <sub>2</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	OH	CH <sub>3</sub> CHO	H <sub>2</sub>		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	OH	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	H <sub>2</sub> O		2BODY

*cont.*

Reactivos		Productos		Tipo de reacción	
CH <sub>2</sub> 1	S <sub>2</sub>	HCS	HS		2BODY
CH <sub>2</sub> 3	S <sub>2</sub>	HCS	HS		2BODY
CH <sub>3</sub>	HCS	CH <sub>4</sub>	CS		2BODY
CH <sub>2</sub> 3	S	HCS	H		2BODY
HS	HCS	H <sub>2</sub> S	CS		2BODY
CH <sub>4</sub>	hν	CH <sub>2</sub> 1	H <sub>2</sub>		PHOTX
CH <sub>4</sub>	hν	CH <sub>3</sub>	H		PHOTX
CH <sub>4</sub>	hν	CH <sub>2</sub> 3	H	H	PHOTX
C	OH	CO	H		2BODY
C	H <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> 3			WEIRD
C	O <sub>2</sub>	CO	O		2BODY
C	HS	CS	H		2BODY
C	S <sub>2</sub>	CS	S		2BODY
CH	H	C	H <sub>2</sub>		2BODY
CH	O	CO	H		2BODY
CH	H <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> 3	H		2BODY
CH	H <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>			WEIRD
CH	O <sub>2</sub>	CO	OH		2BODY
CH	CO <sub>2</sub>	HCO	CO		2BODY
CH	hν	C	H		PHOTX
CH	S	CS	H		2BODY
CH	S <sub>2</sub>	CS	HS		2BODY
CH	CS <sub>2</sub>	HCS	CS		2BODY
OCS	CH	CO	HCS		2BODY

*cont.*

Reactivos		Productos			Tipo de reacción
CH <sub>2</sub> 3	O	CH	OH		2BODY
CH <sub>2</sub> 3	O	CO	H	H	2BODY
CH <sub>2</sub> 3	H	CH <sub>3</sub>			WEIRD
CH <sub>2</sub> 3	H	CH	H <sub>2</sub>		2BODY
CH <sub>3</sub>	O <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub>			3BODY
CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	H	CH <sub>4</sub>	O <sub>2</sub>		2BODY
CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	H	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> CO		2BODY
CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	O	H <sub>2</sub> CO	HO <sub>2</sub>		2BODY
NO	CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> O	NO <sub>2</sub>		2BODY
HCO	H <sub>2</sub> CO	CH <sub>3</sub> O	CO		2BODY
CH <sub>3</sub> O	CO	CH <sub>3</sub>	CO <sub>2</sub>		2BODY
CH <sub>3</sub>	OH	CH <sub>3</sub> O	H		2BODY
CH <sub>3</sub>	O <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> O	O <sub>2</sub>		2BODY
NO	CH <sub>3</sub> O	HNO	H <sub>2</sub> CO		WEIRD
NO <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> O	H <sub>2</sub> CO	HNO <sub>2</sub>		2BODY
O1D	CH <sub>4</sub>	CH <sub>3</sub> O	H		2BODY
CH <sub>3</sub> O	O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> CO	HO <sub>2</sub>		2BODY
CH <sub>2</sub> CO	hν	CH <sub>2</sub> 3	CO		PHOTX
CH <sub>2</sub> 3	CO	CH <sub>2</sub> CO			WEIRD
CH <sub>2</sub> CO	H	CH <sub>3</sub>	CO		2BODY
CH <sub>2</sub> CO	O	H <sub>2</sub> CO	CO		2BODY
CH <sub>3</sub>	CO	CH <sub>3</sub> CO			WEIRD
CH <sub>3</sub> CO	H	CH <sub>4</sub>	CO		2BODY
CH <sub>3</sub> CO	O	H <sub>2</sub> CO	HCO		2BODY

*cont.*

Reactivos		Productos		Tipo de reacción
CH <sub>3</sub> CO	CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	CO	2BODY
CH <sub>3</sub> CO	CH <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> CO	2BODY
CH <sub>2</sub> 3	CH <sub>2</sub> 3	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	hν	C <sub>2</sub> H	H	PHOTOX
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	hν	C <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	PHOTOX
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	OH	CO	CH <sub>3</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H	O <sub>2</sub>	CO	HCO	2BODY
C <sub>2</sub> H	O	CO	CH	2BODY
C <sub>2</sub> H	H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	H	2BODY
C <sub>2</sub> H	CH <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H	H	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>		WEIRD
C <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H	H	2BODY
C <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H	CH <sub>3</sub>	2BODY
C <sub>2</sub>	S	C	CS	2BODY
C <sub>2</sub>	S <sub>2</sub>	CS	CS	2BODY
C <sub>2</sub>	O	C	CO	2BODY
C <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	CO	CO	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	hν	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	PHOTX
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	hν	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	H      H	PHOTX
CH <sub>2</sub> 3	CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	H	2BODY
CH <sub>2</sub> 3	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	H	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>		WEIRD
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	H	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	H	2BODY

*cont.*

Reactivos		Productos		Tipo de reacción
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>3</sub>	WEIRD
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	OH	H <sub>2</sub> CO	CH <sub>3</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	O	HCO	CH <sub>3</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	H	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>		WEIRD
C <sub>2</sub> H	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	2BODY
CH	CH <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	H	WEIRD
CH <sub>2</sub> 3	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	O	CH <sub>2</sub> 3	CO	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	O	CH <sub>2</sub> CO	H	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	OH	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>4</sub>	WEIRD
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	OH	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH		3BODY
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	OH	CH <sub>2</sub> CO	H	WEIRD
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	H	H <sub>2</sub> O	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	H	H <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> CO	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	O	OH	CH <sub>2</sub> CO	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	OH	H <sub>2</sub> O	CH <sub>2</sub> CO	2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	OH	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH		3BODY

*cont.*

Reactivos		Productos			Tipo de reacción
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH	H	H <sub>2</sub> O	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH	H	H <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> CHO		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH	O	OH	CH <sub>3</sub> CHO		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH	OH	H <sub>2</sub> O	CH <sub>3</sub> CHO		2BODY
CH <sub>3</sub> CHO	H	CH <sub>3</sub> CO	H <sub>2</sub>		2BODY
CH <sub>3</sub> CHO	O	CH <sub>3</sub> CO	OH		2BODY
CH <sub>3</sub> CHO	OH	CH <sub>3</sub> CO	H <sub>2</sub> O		2BODY
CH <sub>3</sub> CHO	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> CO	CH <sub>4</sub>		2BODY
CH <sub>3</sub> CHO	hν	CH <sub>3</sub>	HCO		PHOTOX
CH <sub>3</sub> CHO	hν	CH <sub>4</sub>	CO		PHOTOX
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>			WEIRD
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	OH	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	H <sub>2</sub> O		2BODY
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	O	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	OH		WEIRD
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	O1D	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	OH		2BODY
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	H	CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>		2BODY
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	hν	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	H <sub>2</sub>		PHOTOX
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	hν	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	CH <sub>2</sub> 1		PHOTOX
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	hν	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>4</sub>		PHOTOX
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	hν	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub>		PHOTOX
C <sub>2</sub> H	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>		2BODY
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	hν	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>	H	PHOTOX
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	hν	CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>		PHOTOX
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	hν	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> 3		PHOTOX
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	hν	C <sub>2</sub> H	CH <sub>4</sub>	H	PHOTOX

*cont.*

Reactivos		Productos			Tipo de reacción
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> CHO	hν	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	HCO		PHOTX
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>			WEIRD
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	OH	CH <sub>3</sub> CHO	CH <sub>3</sub>		2BODY
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	O	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CO	2BODY
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	H	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>			WEIRD
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	CH <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	CH <sub>4</sub>		2BODY
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	OH	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> CHO	H <sub>2</sub>		2BODY
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	O	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> CHO	H		2BODY
CH	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>	H		WEIRD
CH	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H	H		WEIRD
CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>	H	CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>		WEIRD
CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>	H	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>			WEIRD
CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	H		2BODY
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>		WEIRD
C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	H	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>			WEIRD
C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	H	CH <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>		2BODY
C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>		2BODY
C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	H	CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>		2BODY
CH	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	H		WEIRD
CH <sub>2</sub> 3	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H			WEIRD
CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H	H	CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>		WEIRD
CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H	H	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>			WEIRD
C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	H	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>			WEIRD
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>	H	CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H			WEIRD

*cont.*

Reactivos		Productos			Tipo de reacción
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>	H	CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>			WEIRD
C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	H	CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H	H <sub>2</sub>		2BODY
C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H	CH <sub>4</sub>		2BODY
CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>	H	CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H	H		2BODY
CH <sub>2</sub> 3	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>			WEIRD
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>	hν	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	H		PHOTOX
CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H	hν	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>	H		PHOTOX
CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H	hν	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>		PHOTOX
CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H	hν	CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H		PHOTOX
CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>	hν	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>	H		PHOTOX
CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>	hν	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>		PHOTOX
CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>	hν	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> 3		PHOTOX
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	hν	CH <sub>2</sub> 3	CH <sub>2</sub> 3	H <sub>2</sub>	PHOTOX
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	hν	CH <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> 1		PHOTOX
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	hν	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	PHOTOX
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	hν	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	H	H	PHOTOX
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	hν	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	H <sub>2</sub>		PHOTOX
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	hν	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>		PHOTOX
C <sub>2</sub> H	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	HCAER	H		2BODY
C <sub>2</sub> H	CH <sub>2</sub> CCH <sub>2</sub>	HCAER2	H		2BODY



# Apéndice C

## Modelos fotoquímicos

Un modelo fotoquímico generalmente resuelve una ecuación de continuidad y otra de flujo para cada una de las especies involucradas, estas ecuaciones son:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = P_i - l_i n_i - \frac{d\Phi_i}{dz}, \quad (\text{C.1})$$

$$\Phi_i = -Kn \frac{\partial f_i}{\partial z} - D_i n_i \left( \frac{1}{n_i} \frac{\partial n_i}{\partial z} + \frac{1}{H_i} + \frac{1 + \alpha_{Ti}}{T} \frac{\partial T}{\partial z} \right). \quad (\text{C.2})$$

Donde  $t$  es el tiempo,  $z$  la altitud,  $T$  es la temperatura,  $n_i$  es la densidad numérica de la especie  $i$  (molécula/cm),  $P_i$  es la razón de producción química (moléculas  $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ ),  $l_i$  la frecuencia de pérdida química ( $\text{cm}^{-1}$ ),  $\Phi_i$  el flujo de la especie  $i$ ,  $f_i = \frac{n_i}{n}$  la razón de mezcla de la especie  $i$ ,  $K$  el coeficiente de difusión de *eddys* (torbellinos) ( $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ ),  $n$  la densidad numérica atmosférica

total,  $D_i$  el coeficiente de difusión entre la especie  $i$  y la atmósfera de fondo,  $H_i(= \frac{kT}{m_i g})$  escala de altura de la especie  $i$  y  $\alpha_{T_i}$  el coeficiente de difusión térmica de la especie  $i$  con respecto a la atmósfera de fondo. De las definiciones anteriores:  $k$  la constante de Boltzmann y  $m_i$  la masa molecular de la especie  $i$ .

Debido a las simplificaciones tomadas en la derivación de la ecuación (C.2), esta es válida solo para gases constituyentes menores (que su presión parcial es considerablemente menor con respecto a la del gas constituyente principal) difundiendo dentro de un gas de fondo mas abundante; lo que puede llevar a errores cuando algún gas se convierte en constituyente mayor a alguna altitud. Además, el coeficiente de difusión entre dos gases es de la forma

$$D_{12} = \frac{b_{12}}{n_1 + n_2}. \quad (\text{C.3})$$

Donde  $n_1$  y  $n_2$  son las densidades numéricas de dos gases y  $b_{12}$  es el parámetro binario de difusión. Al tratarse de una mezcla de múltiples componentes, podemos aproximar este coeficiente de forma única para cada especie que nos interese mediante la fórmula:

$$D_i = 1.52 \times 10^{18} \left( \frac{1}{M_i} + \frac{1}{M} \right) \frac{T^{\frac{1}{2}}}{n}. \quad (\text{C.4})$$

Con  $M_i$  el peso molecular de la especie  $i$  y  $M$  el peso molecular promedio de la atmósfera.

Debido a la conveniencia de trabajar en unidades de abundancia (volumen/volumen),

reescribimos el segundo término de la derecha en la ecuación (C.2) usando:

$$\frac{\partial f_i}{\partial z} = \frac{1}{n} \frac{\partial n_i}{\partial z} - \frac{n_i}{n^2} \frac{\partial n}{\partial z}. \quad (\text{C.5})$$

Recordando la ley de gas ideal,  $p = nkT$ , reescribimos la ecuación anterior como

$$\frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial z} = \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial z} + \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z}, \quad (\text{C.6})$$

pero resulta que  $\frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial z} = -\frac{1}{H_a}$ , donde  $H_a$  es la altura de escala; al sustituir esto en (C.6) y usar el resultado en (C.5), obtenemos

$$\frac{\partial f_i}{\partial z} = \frac{1}{n} \frac{\partial n_i}{\partial z} + \frac{n_i}{n} \left( \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{1}{H_a} \right). \quad (\text{C.7})$$

Al despejar  $\frac{\partial n_i}{\partial z}$  de (C.7) y definiendo

$$\mathcal{H}_i \equiv D_i \left( \frac{1}{H_i} - \frac{1}{H_a} + \frac{\alpha_{Ti}}{T} \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad (\text{C.8})$$

podemos reescribir la ecuación (C.2) como:

$$\Phi_i = -(K + D_i)n \frac{\partial f_i}{\partial z} - H_i n f_i. \quad (\text{C.9})$$

Al diferenciar la ecuación (C.9) con respecto a la altitud y notando que en estados estacionarios

se cumple que  $\frac{\partial n}{\partial z} = 0$ , reescribimos la ecuación (C.1) como:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial z} \left[ (K + D_i)n \frac{\partial f_i}{\partial z} + \mathcal{H}_i n f_i \right] + \frac{P_i}{n} - l_i f_i. \quad (\text{C.10})$$

Cabe destacar que la ecuación (C.10) es un sistema de ecuaciones cuando consideramos evaluar para cada una de las especies involucradas en nuestro modelo (indexadas con  $i$ ).

## C.1. Ecuaciones del modelo en diferencias finitas

Para resolver el sistema de ecuaciones presentado en C.10 se necesita, primero, establecer una rejilla unidimensional, en la que se divide la atmósfera en pasos regulares, desde la superficie planetaria hasta la parte superior de la atmósfera. Con una rejilla espaciada regularmente podemos aproximar las derivadas espaciales por ecuaciones de diferencias finitas de segundo orden:

$$\left. \frac{\partial (H_i n f_i)}{\partial z} \right|_j = \frac{(H_i n f_i)^{j+1} - (H_i n f_i)^{j-1}}{2\Delta z}, \quad (\text{C.11})$$

$$\left. \frac{\partial \Phi_i}{\partial z} \right|_j = \frac{\Phi_i^{j+1/2} - \Phi_i^{j-1/2}}{\Delta z}. \quad (\text{C.12})$$

Donde el superíndice  $j$  indica el nivel vertical y los flujos en puntos intermedios de la rendija se evalúan de:

$$\Phi_i^{j+1/2} = (K + D_i)^{j+1/2} n^{j+1/2} \frac{f_i^{j+1} - f_i^j}{\Delta z} + H_i^j n^j f_i^j. \quad (\text{C.13})$$

Así, el sistema de ecuaciones diferenciales parciales (C.10) queda reducido a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\frac{d f_i^j}{d t} = A f_i^{j+1} + B f_i^j + C f_i^{j-1} + D_i^j, \quad (\text{C.14})$$

donde

$$\begin{aligned} A &= \frac{(K + D_i)^{j+1/2}}{n^j (\Delta z)^2} + \frac{(H_i n)^{j+1}}{2n^j \Delta z} \\ B &= \frac{(K + D_i)^{j+1/2}}{n^j (\Delta z)^2} + \frac{(K + D_i)^{j-1/2}}{n^j (\Delta z)^2} \\ C &= \frac{(K + D_i)^{j+1/2}}{n^j (\Delta z)^2} + \frac{(H_i n)^{j-1}}{2n^j \Delta z} \\ D_i^j &= \frac{P_i^j}{n^j} \end{aligned}$$

Para resolver el nuevo sistema de ecuaciones representado por la ecuación (C.14) resulta conveniente reenumerar las ecuaciones. Si  $I$  es el número de especies químicas que tenemos y  $J$  es el número de capas verticales en las que dividimos nuestra atmósfera, sea:

$$x_k = f_i^j \quad k = i + (j - 1) \cdot I \quad i = 1, \dots, I \quad j = 1, \dots, J. \quad (\text{C.15})$$

Lo que nos deja con  $K (= J \cdot I)$  ecuaciones con  $K$  incógnitas  $x_k$ , que pueden ser escritas como:

$$\frac{d x_k}{d t} = A x_{k+1} + B x_k + C x_{k-1} + D_k. \quad (\text{C.16})$$

## C.2. Solución del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

Resolver el sistema de ecuaciones (C.16) podría ser tan sencillo como usar software de solución de EDO's, salvo por una pequeña excepción: las especies de vida corta tienen tasas de reacción tales que ponen sus tiempos de vida en el orden de segundos, mientras que en las especies de vida larga se dan tiempos de vida en las decenas de años. Esto último es comparable con las escalas de tiempo del transporte vertical dentro de la atmósfera en nuestro código. Todo lo anterior hace que sea necesario integrar por periodos en el orden de  $10^9$  s, por lo que resulta muy poco eficiente cubrir periodos de  $10^9$  s en intervalos de tiempo de  $10^{-4}$  s (que se requieren para las especies de vida corta).

Numéricamente se advierte esta dificultad al usar un método de integración implícita en el que parte de la ecuación (C.16) es evaluada en un momento posterior. Para esto requerimos hacer una aproximación del valor futuro de la función, esta aproximación se hace con el método de Euler inverso. Para esto, empezamos reescribiendo el sistema de ecuaciones (C.16):

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{F}(\vec{x}) \quad \vec{x} = (x_1, \dots, x_k). \quad (\text{C.17})$$

Aproximamos la derivada temporal mediante la diferencia:

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \frac{\vec{x}_{m+1} - \vec{x}_m}{\Delta t}, \quad (\text{C.18})$$

donde  $m$  representa el paso temporal. Para un método completamente implícito, la función  $\vec{F}(\vec{x})$  debe ser evaluada un paso adelante, i.e.

$$\vec{x}_{m+1} = \vec{x}_m + \vec{F}(\vec{x}_{m+1})\Delta t \quad (\text{C.19})$$

Pero seguimos sin conocer el valor de  $\vec{x}$ , para evaluar la función hacemos una expansión de Taylor de  $\vec{F}(\vec{x})$  alrededor del punto  $\vec{F}(\vec{x}_m)$  y a primer aproximación:

$$\vec{F}(\vec{x}_{m+1}) \cong \vec{F}(\vec{x}_m) + \left. \frac{d\vec{F}}{d\vec{x}} \right|_m (\vec{x}_{m+1} - \vec{x}_m) + \dots \quad (\text{C.20})$$

Definimos  $\Delta\vec{x} \equiv \vec{x}_{n+1} - \vec{x}_n$  y recordando que la diferencial en la ecuación (C.20) es una matriz Jacobiana:

$$\left. \frac{d\vec{F}}{d\vec{x}} \right|_m \equiv \mathbf{J} = \begin{pmatrix} \partial_1 F_1 & \partial_2 F_1 & \cdots & \partial_n F_1 \\ \partial_1 F_2 & \partial_2 F_2 & \cdots & \partial_n F_2 \\ \vdots & & & \vdots \\ \partial_1 F_n & \partial_2 F_n & \cdots & \partial_n F_n \end{pmatrix}. \quad (\text{C.21})$$

Usando estas definiciones en la ecuación (C.19) obtenemos:

$$\Delta\vec{x} = \left[ \vec{F}(\vec{x}) + \mathbf{J}\Delta\vec{x} \right] \cdot \Delta t. \quad (\text{C.22})$$

Reordenando y dividiendo la ecuación (C.22) por el intervalo temporal, obtenemos:

$$\left( \frac{\mathbb{I}}{\Delta t} - \mathbb{J} \right) \Delta \vec{x} = \vec{F}(\vec{x}_n), \quad (\text{C.23})$$

donde  $\mathbb{I}$  es la matriz identidad. Al resolver la ecuación (C.23) obtenemos el paso  $\Delta \vec{x}$  lo que nos permite avanzar temporalmente con  $\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n + \Delta \vec{x}$ .

### C.3. Condiciones de frontera

Durante la solución de las ecuaciones (C.16) se deben de aplicar condiciones de frontera a cada una de las especies en cada uno de los extremos de los intervalos del modelo. Como usar la ecuación (C.14) implicaría elementos fuera de la rejilla del modelo, reescribimos la ecuación (C.10) en diferencias finitas:

$$\frac{d f_i^j}{d t} = \frac{-1}{n^j \Delta z} \left( \Phi_i^{j+1/2} - \Phi_i^{j-1/2} \right) + \frac{P_i^j}{n^j} - l_i^j f_i^j. \quad (\text{C.24})$$

Consideremos primero la condición inferior,  $j = 1$ : Cerca de la superficie podemos despreciar la difusión molecular en (C.13), y el flujo en  $j - 1/2$  es  $\Phi_{suelo}$ , por lo que la ecuación (C.24) se reduce a:

$$\frac{d f_i^1}{d t} = \frac{1}{n^1 \Delta z} \left[ (Kn)^{3/2} \left( \frac{f_i^2 - f_i^1}{\Delta z} \right) + \Phi_{suelo} \right] + \frac{P_i^1}{n^1} - l_i^1 f_i^1. \quad (\text{C.25})$$

Al reescribir la ecuación (C.25) en términos de las variables  $x_k$  se le puede usar para

imponer las condiciones de frontera al flujo. Para algunas especies, uno simplemente puede fijar el valor del flujo para reflejar su comportamiento como se observa en la atmósfera terrestre moderna (Catling & Kasting, 2017). Adicionalmente, se puede establecer  $\partial f_i^1 / \partial t = 0$  si se conoce la razón de mezcla y el modelo calcula el flujo necesario para mantener la concentración apropiada. Para especies removidas por la superficie o solubles, se hace  $\Phi_{suelo} = -v_{dep}n_i^1 = -v_{dep}n^1 f_i^1$  donde se establece una velocidad de depósito ( $v_{dep}$ ).

Las condiciones de frontera superior son tratadas de manera similar, con la salvedad que al alejarnos de la superficie no podemos despreciar la difusión molecular, que implica utilizar la forma completa de  $\Phi_i^{j-1/2}$  en la ecuación (C.13). El flujo en la parte superior de la rejilla  $\Phi_{up}$  es cero para la mayoría de las especies. En este caso, reescribimos en términos de una velocidad de efusión (si la velocidad de depósito define un flujo hacia el suelo, la velocidad de efusión hace lo contrario, definiendo un flujo hacia la parte superior de la atmósfera) ( $\Phi_{up} = v_{ef}n_i^J = v_{ef}n^J f_i^J$ ) y entonces igualamos esta velocidad ( $v_{ef}$ ) a cero. Para el H y H<sub>2</sub>,  $v_{ef} = D_i/H_a$ ; en el caso de especies que se pueden fotolizar (e.g. O<sub>2</sub>)  $v_{ef}$  tiene un valor negativo para compensar las pérdidas por encima de la casilla de la rejilla tratada. O atómico tiene una velocidad con sentido contrario y el doble de magnitud que de la del O<sub>2</sub>. Similarmente, la fotólisis del CO<sub>2</sub> lleva a flujos descendentes de CO y O.

## C.4. Matrices de producción y pérdida química

Para calcular las tasas de producción y pérdida química para cada una de las especies involucradas; estas tasas aparecen en los términos  $\frac{P_i}{n} - l_i f_i$  de la ecuación (C.10). A razón de evitar posibles errores en la escritura del código necesario para cada uno de los cálculos y hacer el programa flexible a la inclusión de nuevas especies en caso de ser necesario, uno de las entradas del modelo es una lista con las reacciones posibles: numeradas y con los reactivos y productos indicados, e.g.



En el anexo B se especifican los dos reactivos involucrados y hasta tres productos; la mayoría de las reacciones químicas se pueden escribir de esta manera (incluyendo reacciones de 3 cuerpos) y fotólisis. La razón de cada reacción se calcula como:  $T_j = k_j n_1 n_2$  donde  $k_j$  es la constante de razón para la reacción  $j$ , y  $n_1$  y  $n_2$  son las densidades numéricas de los dos reactivos. De los ejemplos en el anexo B, la décima es reacción estándar, la sexta es una reacción de tres cuerpos (donde la densidad del tercer cuerpo es considerada como parte de la constante  $k_j$ ). Y la vigéimoprimer reacción es una reacción de fotólisis, que se puede tratar de la misma manera si el fotón que separa la molécula es considerado como un reactivo mas con una densidad numérica unitaria.

Una vez leída esta lista de reacciones, se crea una matriz de producción química, donde se relaciona cada una de las especies dentro de la atmósfera con todas las reacciones

que la incluyen como un producto. Además, los símbolos de cada especie en las reacciones son remplazados por el índice que se le asignó a esa especie. Con esto, y usando la información en la tabla de reacciones, se calcula la razón de producción de todas las especies. La matriz de pérdida química es similar, pero contiene una capa adicional que guarda los índices (números de especie) de las especies con que reacciona cada una de las especies en la atmósfera.

## C.5. Especies de vida corta y vida larga, y matrices en condiciones adversas

En principio, el trabajo delineado hasta ahora podría resolver el sistema de ecuaciones diferenciales que planteamos en la ecuación (C.23):

$$\left( \frac{\mathbb{I}}{\Delta t} - \mathbf{J} \right) \Delta \vec{x} = \vec{F}(\vec{x}_n)$$

Pero hacerlo podría no ser óptimo y usar demasiados recursos computacionales, por dos motivos:

1. Para especies de vida corta, el transporte es irrelevante. Suponer equilibrio fotoquímico es suficiente para describirlas ( $P_i^j = I_i^j n_i^j$ ) por lo que se puede reducir el jacobiano al removerlas y tratarlas por separado.
2. Mas apremiante, a veces pueden surgir situaciones donde la matriz jacobiana puede encontrarse en condiciones adversas, i.e casi singular, lo que puede llevar a errores al resolver la matriz en la ecuación (C.23). En práctica esto significa que el programa se vuelve incapaz de aumentar el paso de tiempo de forma normal. Esto puede pasar cuando

una especie se desacopla del resto porque su abundancia se hace casi cero (cero dentro de los primeros 15 decimales por la doble precisión con la que hace operaciones el código) en alguna de las capas de la atmósfera, lo que lleva a múltiples filas de la matriz jacobiana donde las derivadas parciales se anulan.

Cuando el segundo de estos problemas ocurre, se puede modificar el esquema químico del modelo, de manera que las especies se mantengan acopladas más estrechamente. Una segunda opción es hacer que las especies que se desacoplan dejen de influir en la determinación del tamaño del paso temporal. Una tercera opción es remover algunas especies de la matriz jacobiana y resolver sus densidades suponiendo equilibrio fotoquímico, mas aún, especies de vida larga, e.g. CO<sub>2</sub>, pueden ser removidas y resueltas suponiendo equilibrio difusivo. Solo especies “neutras” que deberían ser tratadas así en atmósferas reducidas donde el balance redox es un problema.

## C.6. Rayos y lluvia

Adicionalmente, el modelo incluye rayos, lluvia y fotólisis dentro de sus cálculos. Los rayos son una fuente abiótica de compuestos de N en la tropósfera de la Tierra actual y de O<sub>2</sub> troposférico en la atmósfera prebiótica. El código hace el tratamiento de la tasa de producción de NO en la atmósfera moderna es supuesta como a una tasa integrada por columna de 10<sup>9</sup> cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup> (Borucki & Chameides, 1984; Martin et al., 2002). Las tasas para las demás

especies son escaladas a partir de la tasa del oxígeno suponiendo equilibrio termodinámico a una temperatura de “freeze-out” de 3500 K. Los errores producto de esta aproximación no han sido cuantificados, pero no se espera que sean mayores a otras incertidumbres en modelos fotoquímicos de atmósferas tempranas. Se supone que las especies producidas de esta manera están concentradas en la tropósfera baja, siguiendo el perfil de lluvia de Fishman y Crutzen (1977). El balance de óxido-reducción se asegura en atmósferas baja en O<sub>2</sub> al requerir que todas las especies sean producidas en proporciones previamente balanceadas.

La lluvia es tratada según el esquema delíneado en Giorgi y Chameides (1985), donde siguiendo la ley de Henry (C.26) se asigna una solubilidad a la mayoría de las especies.

$$H^{cc} = \frac{c_a}{c_g}, \quad (\text{C.26})$$

donde  $c_a$  es la concentración de la especie en fase acuosa y  $c_g$  es la concentración de la especie en fase gaseosa.

Sin embargo, las especies que se disocian al estar en disolución necesitan solubilidades efectivas dependientes del pH que tome en cuenta la cantidad disuelta de la especie y de todos los productos de la disociación, por lo que es necesario estimar el pH de las gotas de lluvia. Para esto, a cada capa del modelo dentro de la tropósfera, se calcula la química de la lluvia, tomando en cuenta gases relevantes y especies disueltas (típicamente CO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>CO), y usando una aplicación del método de Newton para resolver un sistema de ecuaciones algebraicas. Ya con una solubilidad efectiva para estas especies y las solubilidades obtenidas previamente mediante

la ley de Henry, se continúa con el esquema de Giorgi y Chameides (1985) para calcular las tasas de remoción por lluvia. Dependiendo de la solubilidad de una especie en cuestión, desaparecer de la atmósfera por lluvia puede llevar entre 5 días y varias semanas.

## C.7. Fotólisis y transferencia radiativa

La fotólisis es el proceso que mueve toda la maquinaria fotoquímica en la atmósfera y, por lo mismo, es el proceso fundamental detrás de un modelo fotoquímico. Las tasas de fotólisis dentro de código son calculadas según una aproximación de dos corrientes delíneada en (Toon et al., 1989), que toma en cuenta tanto absorción como dispersión múltiple. El espectro estelar es dividido en 118 casillas, cubriendo desde la longitud de onda Ly  $\alpha$  (121.6 nm) hasta 850 nm. La dispersión de Rayleigh es considerada en todas las longitudes. Mientras que la transferencia radiativa dentro de las bandas de absorción Schumann-Runge (175-205 nm) del oxígeno molecular es manejada usando una serie de exponenciales ajustada al modelo de banda de Allen y Frederick (1982). La precisión de la aproximación de Allen y Frederick no ha sido medida en atmósferas bajas en O<sub>2</sub>.