Università degli Studi di Padova

Dipartimento di Fisica e Astronomia

"Galileo Galilei"

Corso di Laurea in Astronomia

Molecole Organiche nelle Atmosfere Esoplanetarie: Metodi, Strumenti e Prospettive Astrobiologiche

Relatore

Dr. Tiziano Zingales

Laureanda

Anna Filippi

Correlatore

Prof. Giampaolo Piotto

Anno Accademico 2024-2025

Sommario

La tesi analizza l'origine e la rilevabilità delle molecole organiche nelle atmosfere esoplanetarie, ponendo particolare attenzione alle implicazioni astrobiologiche e ai limiti osservativi imposti dalle tecnologie attuali. Per avere un quadro completo viene descritta la formazione delle molecole organiche in diversi ambienti, dalla sintesi delle COMs (molecole organiche complesse) fino alla chimica prebiotica. Introducendo le tipologie di atmosfere planetarie e i principi fondamentali della spettroscopia, vengono esposti i punti critici dell'interpretazione delle firme spettrali di tali molecole, rappresentate da linee e bande la cui riconoscibilità varia a seconda delle condizioni osservative. La parte centrale è infatti dedicata all'identificazione spettroscopica delle molecole (non solo organiche) sottolineando l'importanza assunta dalle banche dati spettrali (come HITRAN ed ExoMol) e le difficoltà relative alla modellizzazione di spettri atmosferici in cui sono presenti molecole poliatomiche. La tesi esamina quindi i criteri fisici e chimici per la selezione di potenziali biofirme e analizza in dettaglio i relativi limiti biologici, computazionali e osservativi. Infine, vengono discusse le prospettive future per questo ambito di ricerca che unisce astrofisica, chimica e biologia. I telescopi JWST, Ariel, E-ELT e infine HWO, attraverso un miglioramento della sensibilità spettroscopica e una maggiore copertura statistica, amplieranno in modo sostanziale le possibilità di rilevazione di molecole organiche nelle atmosfere extrasolari e permetteranno di analizzarne accuratamente la presenza contestualmente all'ambiente planetario in cui vengono rilevate.

Indice

1 Introduzione: Atmosfere Planetarie e Metodi Osservativi Spettroscopici **3**

1.1 Atmosfere Planetarie: Classificazione Morfologica dei Pianeti Extrasolari . . . 3

1.2 Linee e bande molecolari 5

1.3 Tecniche spettroscopiche 6

1.3.1 Spettroscopia di transito 6

1.3.2 Spettroscopia di emissione termica e riflessione 8

1.3.3 Spettroscopia di osservazione diretta 10

1.3.4 L'equazione del trasporto radiativo 11

1.4 Strumenti osservativi 14

1.4.1 Telescopi a terra 14

1.4.2 Telescopi spaziali 14

2 Firme spettrali di molecole organiche: selezione e rilevanza astrobiologica **17**

2.1 Definizione e formazione delle molecole organiche 17

2.1.1 Formazione delle molecole organiche nei dischi protoplanetari 17

2.1.2 Formazione delle molecole organiche sulle superfici planetarie 20

2.2 Identificazione di molecole organiche in spettroscopia 21

2.2.1 Esempi di banche dati spettrali 22

2.3 Biomarcatori gassosi: criteri di selezione 22

3 Limiti di interpretazione e falsi positivi **27**

3.1 Limiti biologici 27

3.2 Limiti computazionali 28

3.3 Limiti Osservativi 28

3.4 Lista di potenziali biofirme 32

4 Conclusioni **35**

4.1 Missioni in corso: JWST 35

4.2 Missioni future: HWO, Ariel e E-ELT 35

4.3 Prospettive future 37

Elenco delle figure

1.1 Spettro di trasmissione di LHS 1140 b per due transiti 8
1.2 La curva di fase completa di GJ 1214 b 9
1.3 Schema dell'estinzione dell'intensità luminosa passante attraverso un mezzo . . 12

2.1 Struttura del disco di HD 100546 18
2.2 Processi di formazione e distribuzione di molecole organiche nel disco protoplanetario 19
2.3 Schema che illustra il processo di selezione di molecole volatili che rappresentano potenziali biofirme 23

3.1 Un singolo transito di una super-Terra calda con CO_2 presente in atmosfera . . 30
3.2 200 transiti di un pianeta di classe super-Terra temperato con CO_2 presente in atmosfera 31
3.3 Spettri del contrasto pianeta/stella che simulano l'effetto delle molecole considerate, modelli di super-Terra ad alta (2400 K) e media (320 K) temperatura 31

Capitolo 1

Introduzione: Atmosfere Planetarie e Metodi Osservativi Spettroscopici

Negli ultimi 30 anni lo sviluppo delle tecnologie osservative ha permesso di individuare la presenza di 7819 pianeti (Catalogue of Exoplanets 2025) orbitanti stelle nei dintorni solari entro il limite di $\sim$1 kpc, con rari casi a distanze massime di $\sim$8 kpc (NASA, Exoplanet Science Institute 2025). I pianeti finora rilevati presentano grande varietà nelle loro caratteristiche macroscopiche (massa, raggio, temperatura superficiale) e nei loro parametri orbitali, andando dai giganti gassosi caldi, più massicci di Giove e in orbite estremamente ravvicinate alla stella ospite, fino ai pianeti rocciosi di dimensioni terrestri. Il livello attuale delle tecnologie osservative permette di investigare, oltre alla semplice morfologia, la composizione chimica delle atmosfere di alcuni dei pianeti presenti in questo ampio catalogo. Le tecniche di analisi spettroscopica impiegate sono uno strumento fondamentale non solo per acquisire dati sulla presenza di una specie chimica, ma anche sulla sua relativa abbondanza, fornendo informazioni sulla composizione e sulle condizioni di formazione del pianeta.

1.1 Atmosfere Planetarie: Classificazione Morfologica dei Pianeti Extrasolari

Gli esopianeti possono essere raggruppati in cinque grandi categorie (Cloutier 2024). A ciascuna di queste è associato un range di rapporto massa/raggio del pianeta (il fattore più rilevante per determinare la capacità di trattenere un involucro gassoso) e una composizione prevalente della sua atmosfera (idrogeno, elio, elementi volatili più pesanti):

- I **giganti gassosi** hanno atmosfere composte principalmente da idrogeno ed elio, con massa compresa tra 100-4000 M$\oplus$

  - I giganti gassosi caldi ($\sim$400-2000 K) hanno opacità elevate e forti gradienti termici dovuti all'irraggiamento stellare intenso a causa della loro distanza orbitale ridotta (< 0.1 UA). Uno degli oggetti più studiati (in particolare con JWST) è WASP-39 b, pianeta in cui è stata rilevata la presenza di CO (Esparza-Borges et al. 2023) e successivamente diossido di zolfo (Powell et al. 2024);
  - I giganti gassosi freddi ($\lesssim$ 400 K) hanno periodi orbitali maggiori e presentano un involucro di idrogeno ed elio arricchito da volatili più pesanti come H_2O, CH_4 e NH_3. Come Urano e Nettuno nel Sistema Solare, possiedono nuclei massicci circondati da mantelli di ghiacci volatili. Tra gli oggetti finora rilevati, quelli più assimilabili alle caratteristiche dei giganti gassosi presenti nel sistema solare sono TOI-4600 b-c, con temperature di equilibrio rispettivamente di 347 e 191 K (Mireles et al. 2023);

- I **sub-nettuniani** (o mini-Nettuni) comprendono pianeti con inviluppi gassosi più sottili ma comunque sostanziali rispetto alle super-Terre, spesso in orbita a distanze < 1 UA. Hanno caratteristiche di transizione fra pianeti dominati dal gas (densità < 1.9 $\frac{g}{cm^3}$) e pianeti dominati dal nucleo solido (densità > 3.0 $\frac{g}{cm^3}$), utili per comprendere i limiti della formazione planetaria e della perdita atmosferica: un esempio ampiamente studiato è GJ 1214 b (Charbonneau et al. 2009), pianeta di raggio 2.7 R$\oplus$ e massa 8.2 M$\oplus$;
- Le **super-Terre** sono la classe di pianeti con massa 2-10 M$\oplus$ e raggio 1.5-2 R$\oplus$. Possono avere atmosfere secondarie di CO_2, N_2 o H_2O, oppure residui primordiali di H–He se non vi è stata una completa perdita atmosferica: un caso estremamente recente è il pianeta GJ 251 c (Beard et al. 2025), localizzato nella zona abitabile di una stella nana di classe M e un candidato promettente per future osservazione spettroscopiche data la sua vicinanza (5.5 pc) ;
- I **pianeti rocciosi** di tipo terrestre (massa < 2 M$\oplus$, raggio < 1.5 R$\oplus$) finora rilevati mostrano generalmente atmosfere sottili o assenti a causa dell'interazione con la radiazione solare. L'intero sistema planetario TRAPPIST 1 (b-h) ricade in questa categoria (Espinoza et al. 2025).

A seguito della rilevazione e delle successive conferme della presenza di un esopianeta, ulteriori indagini sulle sue caratteristiche non sarebbero possibili senza un'efficace modellizzazione dell'interazione tra la radiazione stellare e l'atmosfera planetaria. La quantità di energia ricevuta per unità di tempo e di area dipende dalla luminosità e dalla tipologia spettrale della stella ospite e dalla distanza orbitale, due proprietà che possono essere determinate in modo relativamente semplice dalle osservazioni. La distribuzione spettrale della stella ospite ha un ruolo fondamentale perchè i fotoni nel visibile e nell'infrarosso sono la principale fonte di riscaldamento per un'atmosfera, specialmente a pressioni superiori a circa 1 microbar (Madhusudhan, Agúndez

et al. 2016), mentre i fotoni ultravioletti portano alla ionizzazione e dissociazione dei composti chimici presenti in essa. Allo stesso tempo, la distanza orbitale determina la quantità di energia ricevuta dal lato esposto del pianeta.
Da tenere in considerazione è il fatto che i dati attualmente disponibili da cui sono tratte le proprietà di ciascuna classe sono fortemente influenzati dalle tecniche di rilevazione, che privilegiano pianeti con periodi orbitali brevi, come descritto nel Capitolo 1.3.1.

1.2 Linee e bande molecolari

La rilevabilità di specie chimiche nelle atmosfere varia fortemente a seconda della tipologia planetaria e della tecnica spettroscopica impiegata. La presenza di molecole in un'atmosfera si rileva attraverso linee isolate e bande (linee ravvicinate che si sovrappongono formando una banda continua e allargata) di assorbimento o emissione. La posizione e l'intensità delle linee dipendono dal potenziale di transizione, dalla popolazione degli stati energetici (che a sua volta dipende da temperatura e pressione), e dal profilo della riga (modificato da allargamento Doppler, pressione, turbolenza). In generale, una significatività di almeno 3σ è richiesta per affermare con certezza la rilevazione di una feature spettrale (Marcell et al. 2013). Per generare un modello accurato dell'atmosfera osservata è necessario quindi l'uso di liste di linee molecolari estese e precise, in modo da simulare lo spettro osservato e confrontarlo con i dati ottenuti (Capitolo 2.2).
Ad esempio, in un'atmosfera calda (>1000 K), molte molecole sono eccitate in livelli roto-vibrazionali molto alti, e ogni transizione genera una linea spettrale. Il risultato è un numero enorme di linee, molto più fitto rispetto a un'atmosfera fredda. Inoltre, condizioni locali lontane dall'equilibrio termico (non-LTE) possono modificare ulteriormente intensità e profili delle linee. (Tennyson, Yurchenko, Al-Refaie et al. 2016)
In spettroscopia, soprattutto per quanto riguarda le linee molecolari, emergono diversi aspetti critici:

Rapporto segnale-rumore (SNR): è il rapporto tra il segnale rilevato e il rumore presente in una misura: maggiore è l'SNR, più facilmente sono distinguibili le linee molecolari dal rumore. Per rilevare linee deboli o bande di molecole presenti in tracce è necessario un SNR elevato. Il rumore può essere strumentale o casuale (fotonico). Per il rumore fotonico, più misurazioni (ad esempio nel caso sia possibile osservare più transiti dello stesso pianeta, Cap. 1.3.1) permettono di diminuire l'incertezza di un fattore $\frac{1}{\sqrt{N}}$, con N numero di misurazioni;

Risoluzione spettrale: la capacità di distinguere linee vicine tra loro dipende dalla risoluzione $R = \lambda/\Delta\lambda$. A bassa risoluzione molte linee si fondono, formando delle bande. La

spettroscopia ad alta risoluzione ($R > 50000$) permette di risolvere le numerose transizioni molecolari e separare segnali planetari da quelli stellari o tellurici.

Attività stellare e contaminazione: la variabilità della stella ospite, ad esempio a causa di macchie, brillamenti e oscuramento al bordo, può introdurre segnali che si sovrappongono o mascherano quelli planetari, modificando sia la profondità che la forma della feature spettrale. L'interferenza della superficie stellare non uniforme può anche simulare la presenza di molecole. Il raggiungimento del livello di precisione che permetta di identificare la presenza di molecole con abbondanze nell'ordine di poche decine di parti per milione è fortemente limitato dalle tracce lasciate dall'attività stellare sugli oggetti osservati, e la corretta rimozione di queste interferenze è un campo di ricerca attivo (Bruno e Deleuil 2021).

1.3 Tecniche spettroscopiche

1.3.1 Spettroscopia di transito

La tecnica più utilizzata per la caratterizzazione atmosferica degli esopianeti è la spettroscopia di transito. Con questo metodo, il pianeta viene osservato quando si interpone tra la propria stella ospite e l'osservatore lungo la linea di vista. La luminosità complessiva del sistema (pianeta sovrapposto alla stella) viene misurata nel tempo, producendo una curva di luce del transito in funzione della lunghezza d'onda.
Durante il transito, il pianeta oscura una piccola frazione del flusso stellare, proporzionale al rapporto tra l'area proiettata del pianeta e quella della stella. Questa diminuzione della luminosità è detta profondità del transito (δ).

$$\delta = \frac{(R_p + nH)^2}{R_s^2} - \frac{R_p^2}{R_s^2} \tag{1.1}$$

con R_p raggio del pianeta, R_s raggio della stella. La scala di altezza (H) è definita come la variazione di altitudine per la quale la pressione atmosferica decresce di un fattore e. Assumendo l'equilibrio idrostatico e applicando la legge dei gas ideali, essa può essere espressa come:

$$H = \frac{T_{eq} K_b}{g\mu} \tag{1.2}$$

dove K_b è la costante di Boltzmann, T_{eq} la temperatura di equilibrio del pianeta, μ la massa molecolare media dell'atmosfera e g l'accelerazione di gravità superficiale. Il principio alla base di questa tecnica è la dipendenza della profondità del transito dalla lunghezza d'onda. Alle lunghezze d'onda in cui l'atmosfera del pianeta è più opaca a causa dell'assorbimento da parte di specifici atomi o molecole, il pianeta appare con un diametro maggiore e blocca una quantità

maggiore di luce stellare. Per misurare queste variazioni, la curva di luce osservata viene suddivisa in canali spettroscopici di diversa lunghezza d'onda, e ciascun canale viene analizzato separatamente mediante un modello di transito. L'insieme delle profondità di transito misurate in funzione della lunghezza d'onda costituisce lo spettro di trasmissione.
È possibile ottenere una stima approssimativa dell'ampiezza delle caratteristiche spettrali osservabili in uno specifico pianeta a partire dalla scala di altezza atmosferica (H), che quantifica l'estensione verticale della sua atmosfera. Questo perchè i pianeti che presentano alte temperature di equilibrio, bassa massa molecolare media e bassa gravità superficiale hanno maggiori scale di altezza e quindi righe spettrali caratteristiche più marcate nei loro spettri di trasmissione.

Già dal 2007, il telescopio spaziale Hubble Space Telescope (HST) è stato in grado di rilevare la presenza di molecole nelle atmosfere di giganti gassosi caldi grazie alle osservazioni nella banda del vicino infrarosso (NIR). Le principali molecole identificate in questa fase iniziale sono state H_2O, CO, CH_4 e CO_2, (Swain et al. 2009) sebbene la limitata sensibilità e copertura spettrale di HST ne abbia reso difficile una quantificazione precisa. Le sue osservazioni spettroscopiche si estendevano dall'ultravioletto al vicino infrarosso (fino a 1,8 μm), mentre con Spitzer Space Telescope è stato possibile spingersi fino al medio infrarosso tra 3,6 e 4,5 μm. I risultati ottenuti con HST e Spitzer hanno posto le basi per la caratterizzazione atmosferica degli esopianeti (Madhusudhan, Agúndez et al. 2016). In particolare la rilevazione di H_2O è stata possibile grazie all'utilizzo dello spettrografo di HST denominato Wide Field Camera (WFC3). Esso lavora nella banda NIR tra 1.1 e 1.7 um, ed è quindi in grado di rilevare la forte riga di assorbimento dell'acqua presente in questo intervallo di lunghezze d'onda. La prima detection che ha dimostrato una grande abbondanza di acqua nei pianeti giganti è stata durante il transito del gigante gassoso HD189733b (Tinetti et al. 2007). Misurazioni di questa precisione, con HST, sono possibili solo per atmosfere di giganti gassosi che transitano di fronte stelle molto luminose, a meno che non sia possibile osservare più transiti di fronte a stelle di media luminosità.

A partire dal 2022, le osservazioni effettuate con il James Webb Space Telescope (JWST) sono state rivoluzionarie:

- maggiore intervallo di lunghezze d'onda rilevabili, con un intervallo spettrale complessivo di 0.6–28 μm. Per la caratterizzazione atmosferica degli esopianeti le osservazioni si concentrano tipicamente tra 0.6 e 12 μm, dove la sensibilità degli spettrografi NIRISS, NIRSpec e MIRI consente la rilevazione di molecole;

- maggiore sensibilità dato che le osservazioni spettroscopiche di JWST sono state progettate per operare nel regime photon-limited, in cui il principale contributo al rumore deriva dalle fluttuazioni statistiche del numero di fotoni raccolti. Tuttavia solo nelle osservazioni di transito di pianeti giganti intorno a stelle brillanti, utilizzando NIRISS e NIRSpec,

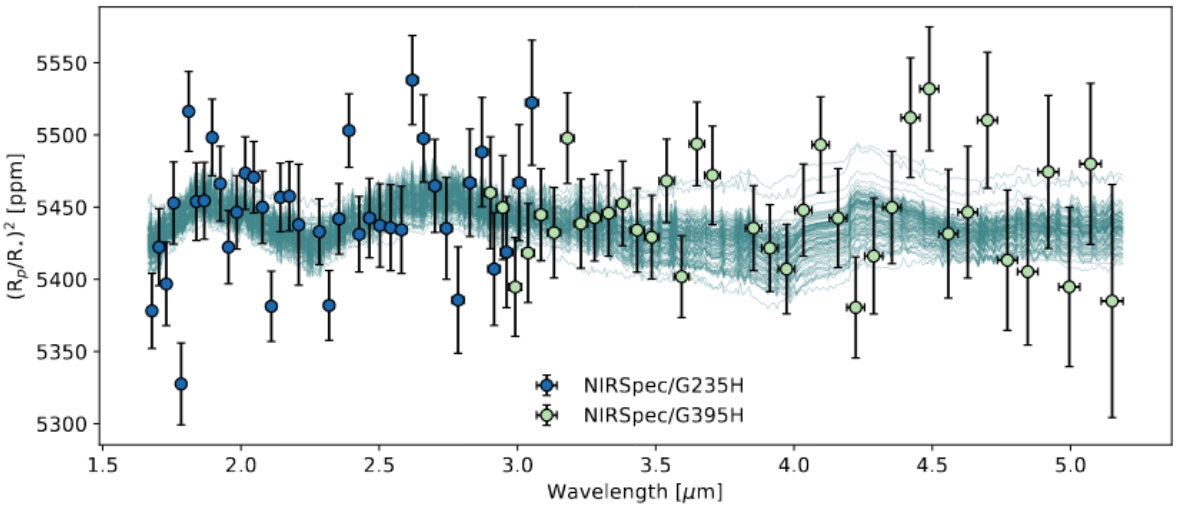

Figura 1.1: Spettro di trasmissione di LHS 1140 b. Le due osservazioni di transito sono codificate per colore: blu per il grating G235H e verde per il grating G395H (entrambi appartenti a NIRSpec). I modelli sottostanti mostrati corrispondono allo scenario con composizione atmosferica N_2-H_2O e nubi spesse. La correzione in flusso fra i due transiti applicata è di $\sim$50 ppm. Figura tratta da Damiano et al. 2024

JWST raggiunge precisioni fotometriche prossime al limite teorico.

JWST ha avuto un ruolo importante non solo nel far progredire le conoscenze relative a giganti gassosi, ma anche pianeti sub nettuniani e super-Terre. Un esempio è dato dal caso di K2-18b: recenti osservazioni con JWST suggeriscono la presenza di metano, mentre le stesse strutture spettrali erano state precedentemente interpretate come acqua con HST. Le evidenze non sono ancora definitive (Wogan et al. 2024). Per quanto concerne i pianeti di piccola massa (minore o uguale a quella terrestre), la loro osservazione è possibile nel caso orbitino stelle di classe M. Data la distanza orbitale ridotta (che implica maggiore erosione atmosferica da venti stellari ed emissioni ad alte energie) necessaria per osservare uno o più transiti di questi pianeti, non è stata finora rilevata con certezza nessuna atmosfera. Un esempio è la super-Terra LHS 1140 b (Damiano et al. 2024), per la quale è stato possibile escludere la presenza di un'atmosfera leggera (H_2). Anche se rimane possibile la presenza di un'atmosfera pesante (N_2), le righe di assorbimento rilevate potrebbero essere prodotte da irregolarità della stella ospite.

1.3.2 Spettroscopia di emissione termica e riflessione

La spettroscopia di emissione termica è utilizzata quando il pianeta sta entrando in fase di eclissi secondaria (occultazione da parte della stella ospite). Il pianeta osservato con questa tecnica è completamente illuminato. Questo metodo ha il vantaggio di fornire informazioni anche sul profilo di temperatura media del lato illuminato del pianeta. Questo perché il rapporto tra il

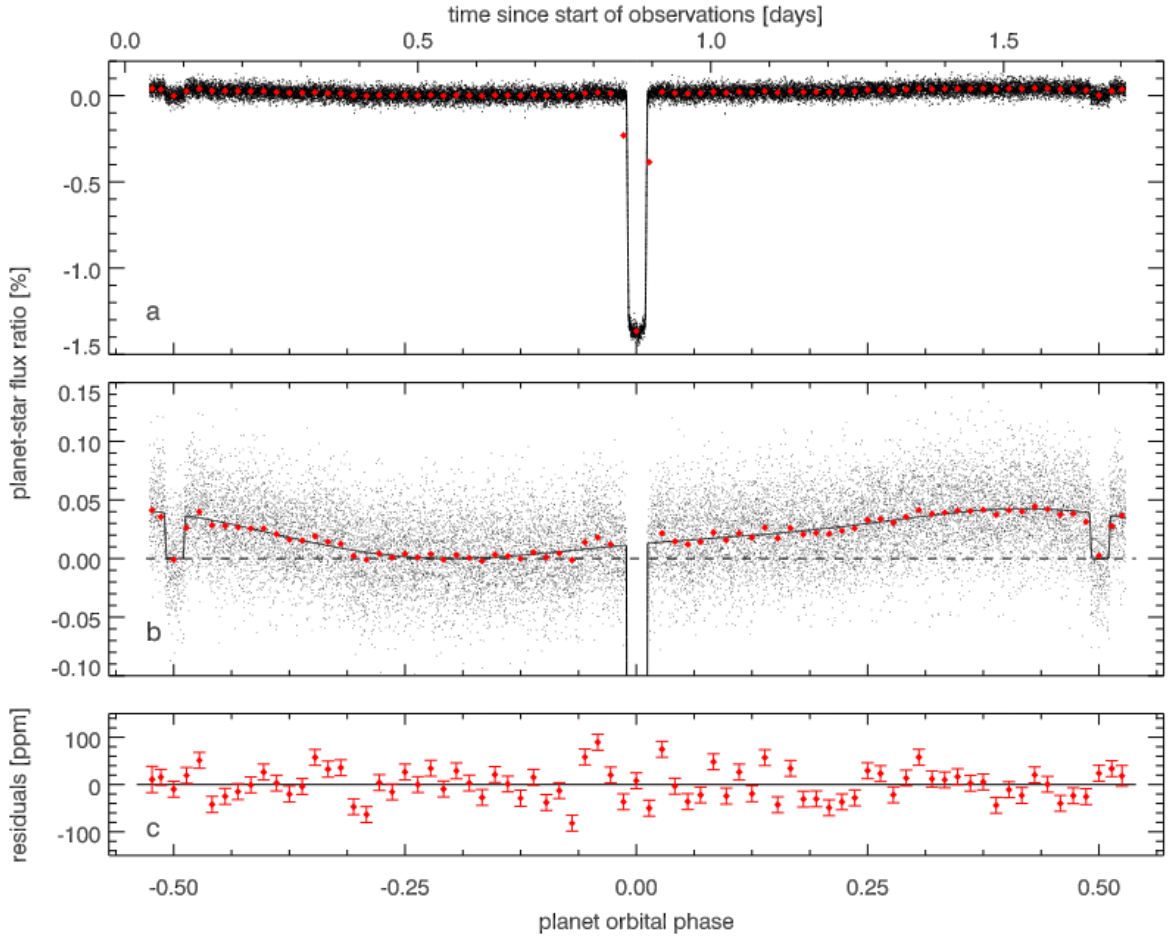

Figura 1.2: La curva di fase completa di GJ 1214 b. **a**) Curva di fase integrata da 5 a 12 μm dopo la sottrazione degli errori sistematici strumentali. Il transito e le due eclissi sono chiaramente visibili alle fasi 0.0 e ±0.5 rispettivamente. I punti rossi rappresentano una suddivisione in bins di 5 gradi della fase orbitale. La linea nera rappresenta il modello astrofisico di best-fit, che include il transito primario, le eclissi secondarie e l'emissione termica variabile. **b**) Grafico a ingrandito per mettere in evidenza la variazione in flusso (in funzione della fase) dell'emissione termica del pianeta. La linea nera tratteggiata indica il flusso stellare (assunto costante) in assenza di qualunque emissione proveniente dal pianeta. **c**) Residui dei dati raggruppati rispetto al modello astrofisico, con barre d'errore a 1σ.

flusso del pianeta e della stella dipende sia dalla lunghezza d'onda che dalla temperatura di emissione:

$$\frac{Fp}{Fs} = \frac{B(\lambda, T_{eq})}{B(\lambda, T_s)} \left(\frac{R_p}{R_s}\right)^2 \tag{1.3}$$

con $B(\lambda, T)$ emissione di corpo nero alla temperatura T, R_p il raggio del pianeta e R_s il raggio della stella. Il rapporto tra i flussi può variare anche di tre ordini di grandezza all'aumentare della lunghezza d'onda. Ciò che effettivamente permette di studiare la variazione di temperatura con la profondità dell'atmosfera è il fatto che l'altezza della fotosfera del pianeta (la superficie di emissione della luce) varia con il coefficiente di assorbimento k_ν, permettendo quindi di rilevare diverse temperature di equilibrio osservando a diverse lunghezze d'onda e conseguentemente profondità. La caratterizzazione del profilo di temperatura permette di rilevare eventuali inversioni del gradiente di temperatura nell'atmosfera.

Già con HST è stato possibile osservare spettri di emissione termica di pianeti gioviani caldi, anche se per la maggior parte dei corpi osservati non sono state rilevate chiare features molecolari (quindi con significatività $> 3\sigma$). Per quanto riguarda JWST, un caso particolarmente rilevante è la curva di fase completa di GJ 1214b, un pianeta sub-nettuniano. Una curva di fase viene ricavata con una serie continua di osservazioni fotometriche e spettroscopiche durante il periodo orbitale del pianeta, usando il flusso misurato durante l'eclissi secondaria come livello base (ossia il solo flusso della stella). È uno strumento di indagine atmosferica importante perchè permette di osservare una maggiore estensione dell'atmosfera, non limitata alla zona del terminatore come nel caso dei transiti. Le prime osservazioni in trasmissione con HST di GJ 1214 b (Berta et al. 2012) hanno mostrato uno spettro piatto, interpretato come evidenza di una spessa copertura nuvolosa che nasconde le firme molecolari. Successivamente, JWST ha osservato il pianeta in emissione termica tramite una curva di fase completa ottenuta con MIRI. Queste misure hanno rivelato una piccola variazione di temperatura tra emisfero diurno e notturno e un albedo elevato, indicando un'atmosfera spessa, densa e fortemente nuvolosa. Sebbene non siano state rilevate righe spettrali distinte, i risultati confermano l'esistenza di un'atmosfera e forniscono vincoli diretti sulla struttura termica del pianeta.

1.3.3 Spettroscopia di osservazione diretta

La spettroscopia per mezzo di osservazione diretta di un esopianeta è una tecnica con una differenza sostanziale rispetto alle precedenti: con questa la caratterizzazione dello spettro può avvenire simultaneamente alla prima rilevazione del pianeta, mentre per la spettroscopia di transito e di riflessione è prima necessario rilevare la presenza del pianeta per mezzo di surveys fotometriche. Attualmente gli unici pianeti osservabili attraverso direct imaging sono giovani

giganti gassosi con grande separazione orbitale (> 10 AU) (Currie et al. 2023) dato che la loro dimensione permette di alzare il rapporto tra il flusso del pianeta e della stella e la distanza minimizza le interferenze della stella ospite. Queste sono le prime immagini ricavate con l'uso di coronografi installati su HST. L'imaging limitato dalla diffrazione con HST a lunghezze d'onda ottiche, oppure con telescopi di classe 8–10 m come VLT e Keck a lunghezze d'onda nel vicino infrarosso (IR), sarebbe teoricamente sufficiente per risolvere oggetti a separazioni angolari simili a quelle Terra-Sole fino a una distanza di 10–20 pc. Tuttavia, la luce dell'alone stellare deve essere ridotta fino a un rapporto di 10^{-10} per rendere rilevabile la luce di un pianeta con simili caratteristiche.

I dati relativi al sistema esoplanetario HIP 65426 suggeriscono che JWST sta superando le prestazioni nominalmente previste, consentendo il rilevamento di pianeti con raggio fino a un minimo di 0,8 R_{Giove} se localizzati oltre le 100 UA (Carter et al. 2023). Questo è il limite che può raggiungere il direct imaging con le tecnologie attuali. Per le prime osservazioni dirette di pianeti di raggio e massa inferiori sarà necessario attendere gli strumenti ottimizzati per la rilevazione di esopianeti appartenenti a tali classi.

1.3.4 L'equazione del trasporto radiativo

Essenziale è fare riferimento all'equazione del trasporto radiativo, che nella sua forma più semplice indica la diminuzione dell'intensità della radiazione in funzione della lunghezza d'onda λ quando attraversa un mezzo omogeneo (K. N. Liou 2002). Un fascio di radiazione che attraversa un mezzo viene attenuato dalle interazioni con la materia. Se l'intensità della radiazione I_λ diventa $I_\lambda + dI_\lambda$ dopo aver attraversato uno spessore ds nella direzione di propagazione, allora:

$$dI_\lambda = -k_\lambda \, \rho \, I_\lambda ds \tag{1.4}$$

dove ρ è la densità del materiale e k_λ è la sezione efficace di estinzione di massa (in unità di area per massa) per radiazione di lunghezza d'onda λ. La riduzione dell'intensità è dovuta sia all'assorbimento sia alla diffusione da parte del materiale. D'altra parte, l'intensità della radiazione può aumentare a causa dell'emissione del materiale e della diffusione multipla da tutte le altre direzioni verso il fascio considerato. Viene definito il coefficiente della funzione sorgente j_λ in modo tale che l'incremento di intensità dovuto all'emissione e alla diffusione multipla sia:

$$dI_\lambda = j_\lambda \rho \, ds \tag{1.5}$$

dove j_λ ha la stessa unità di misura di k_λ. Combinando le due equazioni precedenti, si ottiene l'equazione differenziale del trasporto radiativo:

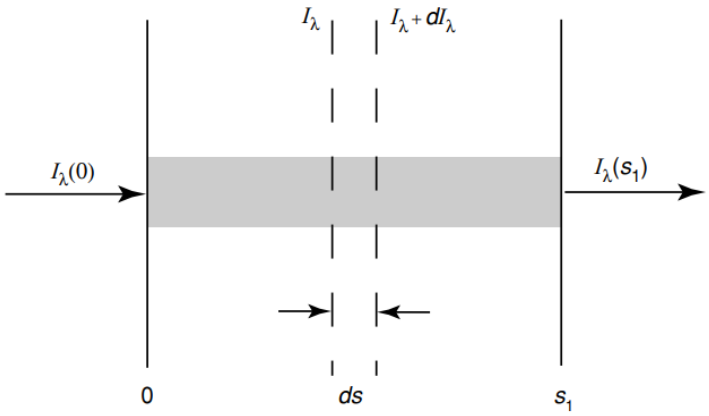

Figura 1.3: Schema dell'estinzione dell'intensità luminosa passante attraverso un mezzo. Figura tratta dal testo K. N. Liou 2002

$$dI_\lambda = -k_\lambda \rho I_\lambda + j_\lambda \rho \, ds \tag{1.6}$$

Inoltre, è utile definire la funzione sorgente S_λ come:

$$S_\lambda = j_\lambda / k_\lambda \tag{1.7}$$

Se il mezzo si trova in equilibrio termico la funzione sorgente S_λ può essere sostituita dalla planckiana $B_\lambda(T)$.

Le atmosfere planetarie non possono essere generalmente considerate mezzi omogenei, per cui per definire il cammino ottico del raggio luminoso si utilizza l'approssimazione dei piani paralleli. In questa approssimazione l'atmosfera è suddivisa in strati paralleli tra loro, e le variazioni dei parametri atmosferici (come la temperatura e i profili di densità delle specie gassose) avvengono solo in direzione verticale, in funzione dell'altitudine. Questo modello monodimensionale è sufficientemente accurato per la maggior parte delle osservazioni.
Nel caso della spettroscopia di **transito**, dato che la radiazione osservata è solamente quella proveniente dalla stella ospite, l'equazione risulta essere la forma dell'equazione di trasporto radiativo in presenza di una funzione sorgente nulla:

$$\frac{dI_\lambda}{k_\lambda \rho \, ds} = -I_\lambda \tag{1.8}$$

che nell'approssimazione della Legge di Beer-Lambert può essere integrata come:

$$I_\nu(\tau_\nu) = I_\nu(0) e^{-\tau_\nu(s_1,0)} \tag{1.9}$$

calcolata integrando lungo il cammino ottico s:

$$\tau_\nu(b) = \int \kappa_\nu(r)\rho(r)ds \tag{1.10}$$

con *b* la distanza del punto di tangenza dal centro del disco, $\kappa_\nu(r)$ il coefficiente di assorbimento, $\rho(r)$ la densità del gas ed r la distanza radiale dal centro del pianeta in un punto generico del cammino ottico. Secondo questa legge la diminuzione dell'intensità luminosa segue l'andamento di una semplice funzione esponenziale.

Nella spettroscopia di **emissione termica**, la configurazione è differente. Dato che si osserva l'emissione del pianeta nell'infrarosso, e si assume equilibrio termico locale in ognuno degli strati paralleli dell'atmosfera, è un caso in cui la funzione sorgente può essere sostituita dalla funzione di Planck:

$$I_\nu = \int_0^\infty B_\nu[T(z)]e^{-\tau_\nu(z)}\frac{d\tau_\nu(z)}{dz}dz \tag{1.11}$$

con z l'altezza dello strato. Il termine di assorbimento $e^{-\tau_\nu(z)}$ è necessario dato che la radiazione proveniente dagli strati più profondi viene attenuata dagli strati superiori. Questo approccio, detto trasporto radiativo in emissione, permette di ricostruire la struttura termica atmosferica. Lo scattering è generalmente trascurato per atmosfere calde, ma può essere incluso tramite *two-stream o multi-stream approximation* (per trattare la diffusione della luce in più direzioni) se sono presenti nubi o aerosol.

Infine, nel caso dell'**imaging diretto**, il problema del trasporto radiativo risulta più complesso poiché la radiazione osservata combina emissione termica del pianeta e luce stellare riflessa e diffusa dall'atmosfera. La forma differenziale può essere così descritta (ignorando gli effetti di scattering multiplo):

$$\mu\frac{dI(\tau,\mu)}{d\tau} = I(\tau,\mu) - \tilde{\omega}\,\frac{F_0}{4\pi}\,e^{-\tau} + (1-\tilde{\omega})\,B[T(\tau)] \tag{1.12}$$

Il termine μ si riferisce al coseno dell'angolo zenitale (direzione del fascio incidente in geometria tridimensionale), $I(\tau,\mu)$ l'intensità luminosa in funzione della profondità ottica e del coseno dell'angolo, e $\tilde{\omega}$ l'albedo di singolo scattering.
Il secondo termine a destra dell'equazione rappresenta la prima diffusione della luce stellare (F_0 = flusso stellare, $e^{-\tau}$ = attenuazione della radiazione diretta secondo la legge di Beer–Lambert, $\frac{1}{4\pi}$ = fattore di conversione da flusso a intensità). Il terzo termine rappresenta invece l'emissione termica ridotta dallo scattering, ed è il fattore più rilevante in caso di atmosfere a temperatura elevata che emettono nell'infrarosso. Al contrario, in atmosfere più fredde in cui prevale il fattore di diffusione della luce stellare riflessa (nel visibile) si può considerare solo il secondo

termine. L'imaging diretto richiede la forma più generale dell'equazione del trasporto radiativo e fornisce informazioni aggiuntive rispetto alla spettroscopia di transito ed emissione, come l'albedo spettrale, le proprietà di scattering e la distribuzione termica superficiale.

1.4 Strumenti osservativi

Come descritto finora, per ottenere risultati significativi sono necessari strumenti estremamente avanzati. L'approccio osservativo può passare sia per i telescopi a terra che per i telescopi in orbita, ma entrambi presentano limitazioni fisiche e tecniche.

1.4.1 Telescopi a terra

Il vantaggio più evidente per le osservazioni a terra è la grandezza che possono raggiungere gli specchi primari, permettendo di raccogliere segnali estremamente deboli. In riferimento a questo, l'alta risoluzione (R>50 000) degli spettrografi associati ai telescopi di ultima generazione ha permesso di rilevare le firme spettrali di svariate molecole (CO, H_2O, TiO, HCN, CH_4, NH_3, C_2H_2, OH) in pianeti gioviani e sub-nettuniani, come descritto in Rukdee 2024. Un altro aspetto è la differenza nei costi associati al tempo di osservazione rispetto ai telescopi in orbita: seppure entrambi elevati è sicuramente più vantaggioso eseguire grandi surveys per la ricerca di esopianeti (e candidati per successive osservazioni spettroscopiche mirate) da terra. Alcune tecniche pionieristiche (come la trasmissione multi-banda) si approcciano a raggiungere la precisione dei telescopi spaziali, ma rimane invalicabile il limite imposto dall'assorbimento dell'atmosfera nel medio infrarosso (MIR) e nell'ultravioletto (UV). I telescopi a terra di ultima generazione (come E-ELT/GMT/TMT) potranno arrivare a fare imaging diretto con coronografi appositamente studiati e un'ottica adattiva avanzata; per ora l'analisi spettroscopia con questa tecnica rimane limitata ai gioviani caldi, ma l'obiettivo è arrivare al livello minimo di contrasto necessario per l'imaging diretto di pianeti di classe terrestre/super-Terre (Kasper et al. 2021). Infine, strumenti stabili a bassa risoluzione su telescopi 8–10 m (ESPRESSO, CRIRES+, HARPS) sono utili per identificare e seguire target prioritari ed effettuare misure della velocità radiale ad alta precisione, ottenendo informazioni su massa e densità degli esopianeti, essenziali per interpretare correttamente gli spettri atmosferici (Pepe et al. 2021).

1.4.2 Telescopi spaziali

Il primo vantaggio è l'ampliamento del range osservativo data l'assenza di assorbimenti atmosferici su tutto lo spettro elettromagnetico. Con le osservazioni spaziali si risolvono anche i problemi relativi alla turbolenza atmosferica e alle emissioni provenienti da terra. Rilevante è il fattore di stabilità termica e ambientale in orbita (soprattutto in orbite L2 dove le interferenze

del sistema Sole-Terra-Luna sono minimizzate) rispetto ai telescopi a terra, soggetti a condizioni ambientali più varie e instabili. La missione spaziale JWST sta rivoluzionando questo campo d'indagine astrofisica grazie all'ampia copertura spettrale e sensibilità, tuttavia non è dotato degli strumenti e della stabilità necessaria per osservare pianeti con contrasto (rapporto tra la luce residua della stella dopo la soppressione ottica e la luce del pianeta che si vuole rilevare) minore di 10^{-5}(Carter et al. 2023). Rimangono per questa tipologia di telescopi le limitazioni date dai costi di produzione, lancio e mantenimento; in particolare aumentare la dimensione degli specchi rappresenta una sfida a livello tecnologico oltre che economico. Dati gli evidenti vantaggi, sono previste nel prossimo futuro missioni dedicate come Ariel (Atmospheric Remote-sensing Infrared Exoplanet Large-survey) di ESA, e proposte di missioni come HWO (Habitable World Observer) della NASA (NASA Science 2023).

Capitolo 2

Firme spettrali di molecole organiche: selezione e rilevanza astrobiologica

2.1 Definizione e formazione delle molecole organiche

Una molecola organica è una molecola che contiene atomi di carbonio legati tra loro o ad altri elementi, principalmente idrogeno, ossigeno, azoto, zolfo e fosforo. Esse formano la base della chimica della vita. I complessi organici prebiotici sono insiemi di molecole organiche semplici come amminoacidi, acidi carbossilici o basi azotate che si formano spontaneamente in assenza di processi biologici e rappresentano i precursori chimici delle biomolecole. Questi complessi costituiscono la materia prima per il processo evolutivo che conduce alle prime strutture autoreplicanti (come RNA e membrane protocellulari) (Schrum, Zhu e Szostak 2010).

2.1.1 Formazione delle molecole organiche nei dischi protoplanetari

Durante il processo di formazione stellare, il collasso di una nube molecolare porta alla nascita di una protostella circondata da un disco circumstellare di gas e polvere. Esso ha una composizione simile a quella della propria stella ospite, quindi prevalentemente idrogeno ed elio, con tracce di elementi più pesanti come ossigeno, carbonio e azoto. Questi elementi combinati tra loro formano semplici molecole come idrogeno, ossigeno e azoto molecolare, acqua, monossido e diossido di carbonio, metano e ammoniaca. Tuttavia questo disco non è chimicamente omogeneo: la distribuzione delle specie molecolari al suo interno dipende dalle condizioni di temperatura, densità e radiazione, che variano con la distanza dal centro del sistema. Questi gradienti determinano in quali regioni tali specie possono trovarsi in fase gassosa o solida. I corpi che si formano oltre le snow-lines (le linee di sublimazione, distanza radiale al di sotto della quale una specie molecolare passa dallo stato solido a gassoso) incorporano maggiori quantità di ghiacci, risultando ricchi in elementi volatili, mentre quelli

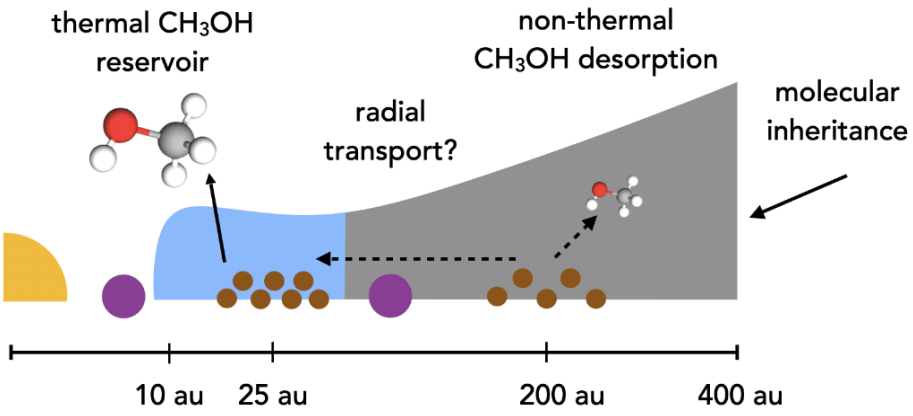

Figura 2.1: Struttura del disco di HD 100546 che mostra le regioni in cui il CH_3OH è stato rilevato e i diversi meccanismi fisici e chimici ipotizzati. Figura tratta da Booth et al. 2021

che si formano più vicino alla stella sono composti principalmente da materiale refrattario (silicati e metalli). In ambito astrobiologico, particolarmente rilevanti sono i processi che avvengono nella zona fredda del disco (T < 20 K), (Booth et al. 2021). In queste zone la maggior parte delle specie chimiche volatili è allo stato solido sotto forma di ghiaccio sulla superficie di grani di polvere che, attraverso processi di idrogenazione e reazioni indotte da radiazione cosmica, possono produrre molecole organiche complesse (denominate COMs) come CH_3OH, H_2CO, HCOOH e CH_3CN. Questi ghiacci organici rappresentano una riserva di materiale prebiotico che è alla base della formazione di molecole biologiche di complessità maggiore.

Le osservazioni fatte in banda millimetrica e sub-millimetrica con ALMA hanno permesso di mappare la distribuzione di queste molecole chiave (CO, H_2CO, CH_3OH, CN, HCN, CH_3CN), nei dischi protoplanetari, mostrando come la composizione chimica vari tra sistemi appartenenti a protostelle T Tauri (protostelle di piccola massa, $0.8\,\mathrm{M}_\odot \lesssim M \lesssim 2\,\mathrm{M}_\odot$) e Herbig Ae/Be (protostelle di massa media, $M \lesssim 8\,\mathrm{M}_\odot$). I dischi attorno alle stelle Herbig Ae/Be, in accordo con i modelli chimici, sono generalmente poveri di CO rispetto ai loro omologhi T Tauri, a causa delle temperature più elevate e dei maggiori livelli di irraggiamento ultravioletti prodotti da tale classe stellare. Il monossido di carbonio è necessario per la produzione di metanolo attraverso il processo di idrogenazione formando successivamente HCO (CO+H→HCO), formaldeide (HCO+H→H_2CO), radicale metossile (H_2CO+H→CH_3O) oppure radicale idrossimetile (H_2CO+H→CH_2OH) e infine il metanolo (CH_3O+H→CH_3OH oppure CH_2OH+H→CH_3OH). I sistemi planetari formatisi attorno a stelle di media massa dovrebbero avere una presenza di COMs nettamente inferiore a quelli di stelle di massa quasi solare. Tuttavia, evidenze recenti dimostrano che questa teoria non può da sola spiegare la distribuzione di composti chimici nei dischi protoplanetari. In particolare la rilevazione

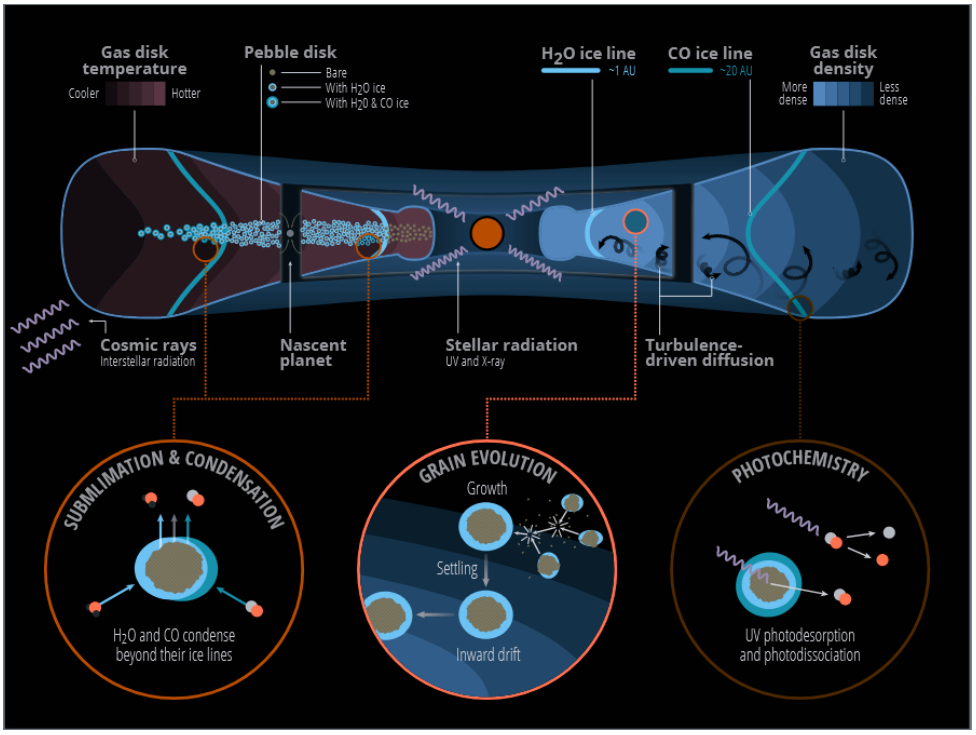

Figura 2.2: Processi di formazione e distribuzione molecole organiche nel disco protoplanetario: il gradiente di temperatura verso l'interno, indicato in rosa, crea una serie di snow-lines. Il gradiente di densità verso l'interno è indicato in azzurro. Le superfici del disco sono dominate da processi fotochimici. Al contrario, i piani mediani del disco sono freddi e poveri di radiazione UV, e i principali serbatoi di volatili (esclusi H_2 e He) si trovano nei mantelli ghiacciati di grani di polvere. Figura tratta da Öberg e Bergin 2021

del metanolo nel disco che circonda una protostella di classe A (HD100546) a temperature significativamente superiori a quelle massime per la formazione della molecola, ci suggerisce che alcune molecole organiche originano da una fase precedente, sopravvivendo al processo di formazione stellare.

Ciò significa che la composizione chimica degli esopianeti e delle rispettive atmosfere non dipende unicamente dall'abbondanza relativa iniziale di specie chimiche del disco protoplanetario, ma anche da una complesso insieme di processi di trasporto che avvengono durante l'evoluzione del disco stesso. Lo schema 2.1 rappresenta la conformazione del disco protoplanetario in accordo con le evidenze presentate in Booth et al. 2021

Successivamente alle fasi più fredde dei nuclei pre-stellari (T $\approx$ 20 K, n $\approx$ 10^4–10^6cm^{-3}) descritte finora, le condizioni fisiche del sistema cambiano drasticamente. Il collasso del core porta alla nascita della protostella, e l'aumento di temperatura (>100 K) nelle zone interne causa la sublimazione dei ghiacci, rilasciando le molecole formatesi sui grani di polvere ghiacciati nel gas, dando origine alle regioni note come hot corinos. Tali regioni, che si collocano

a distanza <100 UA, presentano alte temperature (100-300 K) e densità ($10^7 cm^{-3}$) e sono ricchi di complessi organici prebiotici. Studi osservativi (Jorgensen, Belloche e Garrod 2020) mostrano che tale chimica è sorprendentemente simile in ambienti di massa iniziale diversa, suggerendo processi universalmente applicabili. Nella successiva fase di evoluzione del disco protoplanetario, le COMs continuano a modificarsi: la radiazione UV e X proveniente dalla giovane stella induce reazioni fotochimiche e desorbimento non termico (rilascio di gas da una superficie senza che l'innalzamento delle temperature causi la sublimazione dei ghiacci), mentre le basse temperature del piano mediano non colpito direttamente dalla radiazione favoriscono ulteriore sintesi nei ghiacci (Walsh et al. 2014). I modelli chimici mostrano in queste zone abbondanze di metanolo, formaldeide e formiato di metile fino a 10^{-6} in rapporto all'idrogeno, compatibili con quelle osservate nelle comete. Questi risultati richiedono una continuità tra la chimica interstellare e quella dei sistemi planetari, stabilendo le condizioni fisiche di densità, temperatura e radiazione necessari per la formazione e la sopravvivenza delle COMs.

2.1.2 Formazione delle molecole organiche sulle superfici planetarie

La generazione di molecole prebiotiche sulle superfici planetarie può avvenire attraverso diversi processi chimici e fisici che coinvolgono l'atmosfera, la superficie solida e le fonti energetiche disponibili. Un punto di riferimento storico è l'esperimento di Miller e Urey (Zahnle et al. 2020), che dimostrò come una miscela gassosa riducente soggetta a scariche elettriche potesse sintetizzare amminoacidi e altre molecole organiche semplici. Sebbene le condizioni atmosferiche della Terra primordiale fossero probabilmente meno riducenti di quanto originariamente ipotizzato, vari studi successivi hanno confermato che scariche elettriche, radiazione UV e shock termici possono comunque avviare la formazione di composti organici in un'ampia gamma di atmosfere planetarie (Zahnle et al. 2020).
Oltre ai processi atmosferici, un ruolo cruciale è svolto dalle superfici minerali. Minerali come feldspati, argille, pirite, magnetite e ossidi metallici possono fungere da catalizzatori. Le superfici minerali possono facilitare reazioni che in fase gassosa o in soluzione sarebbero inefficienti, come la polimerizzazione, la formazione di peptidi e la sintesi di molecole organiche complesse (Hurowitz et al. 2025).
Ambienti ad alta energia presenti sulla superficie di giovani pianeti possono contribuire ulteriormente. Le regioni idrotermali, sia superficiali che sottomarine, offrono gradienti termici e chimici favorevoli, nonché superfici reattive come solfuri e silicati che promuovono reazioni redox. Modelli e simulazioni hanno mostrato che tali ambienti possono facilitare la formazione di amminoacidi, nucleotidi, lipidi protocellulari e molecole contenenti zolfo e azoto rilevanti per la chimica prebiotica (Martin et al. 2008).

Anche gli impatti cometari e meteoritici possono apportare molecole organiche aggiuntive o attivare reazioni di sintesi mediante shock termici. In particolare, le meteoriti carbonacee contengono una grande varietà di amminoacidi, basi azotate e composti aromatici, mostrando che gli impatti possono arricchire le superfici planetarie con materiale organico complesso (Osinski et al. 2020).
Le condizioni fisiche del pianeta (composizione atmosferica, minerale, disponibilità di acqua liquida, flussi energetici) determinano quali percorsi possano svilupparsi più efficientemente.

2.2 Identificazione di molecole organiche in spettroscopia

Particolare rilevanza deve essere data alle molecole organiche volatili, ovvero specie che si trovano in fase gassosa a pressione e temperatura standard e che possono essere trasportate ed accumulate nell'atmosfera. Queste molecole rappresentano potenziali biofirme gassose perché molti processi biologici producono composti volatili come sottoprodotti metabolici. Il riconoscimento affidabile della loro presenza richiede la conoscenza dettagliata delle loro proprietà spettroscopiche: posizione e intensità delle linee di assorbimento ed emissione, dipendenza da temperatura e pressione, eventuali effetti di allargamento e sovrapposizione con altre specie chimiche. Questi parametri sono generalmente ottenuti attraverso misure sperimentali o calcoli quantomeccanici che vengono raccolti in database dedicati (come HITRAN, ExoMol e GEISA). Solo disponendo di queste informazioni è possibile confrontare in modo rigoroso gli spettri osservati con quelli attesi, distinguere segnali reali da artefatti strumentali o interferenze atmosferiche e valutare l'eventuale origine biologica delle molecole rilevate.
Le banche dati spettrali possono contenere i seguenti dati (Gordon et al. 2022):

- **Parametri spettroscopici riga-per-riga**:
  Ogni molecola ha migliaia o milioni di transizioni roto-vibrazionali, ognuna delle quali genera una linea spettrale a una lunghezza d'onda specifica. A ciascuna linea sono associati valori come frequenza, intensità, fattori di allargamento.

- **Sezioni d'urto**:
  Per molecole molto complesse (ad esempio grandi composti organici), costruire un catalogo riga-per-riga è tecnicamente difficile, perché il numero di transizioni diventa enorme. In questi casi si misura sperimentalmente l'assorbimento complessivo in funzione della lunghezza d'onda e lo si fornisce sotto forma di "sezione d'urto", cioè un valore medio che descrive quanto la molecola assorbe in ogni punto dello spettro. È una rappresentazione meno dettagliata, ma indispensabile quando il catalogo linea-per-linea non è disponibile.

- **Assorbimento indotto da collisioni**:
  Alcune coppie di molecole, come N_2–N_2, O_2–O_2, N_2–O_2, H_2–H_2, che individualmente non assorbono in certe bande spettrali, possono invece assorbire quando collidono e formano un dipolo temporaneo. Questo fenomeno, importante in atmosfere dense, produce bande larghe e caratteristiche.
- **Indici di rifrazione degli aerosol**:
  Gli aerosol (polveri, gocce, particelle solide) diffondono e assorbono la luce. Per modellare correttamente la propagazione della radiazione in presenza di aerosol serve conoscere il loro indice di rifrazione.
- **Funzioni di partizione**:
  Per calcolare l'intensità di una riga spettrale in funzione della temperatura serve conoscere la distribuzione statistica dei livelli energetici della molecola. Ciò viene descritto dalla funzione di partizione.

2.2.1 Esempi di banche dati spettrali

HITRAN: Il database HITRAN raccoglie parametri spettroscopici molecolari ad alta risoluzione utili a simulare la trasmissione e l'emissione della radiazione in mezzi gassosi. Viene ampiamente utilizzato per sottrarre accuratamente le emissioni dell'atmosfera terrestre dalle osservazioni astronomiche. L'edizione più recente, HITRAN2020, con liste di righe per 55 molecole, rappresenta un importante avanzamento nella qualità e completezza dei dati spettrali. (Gordon et al. 2022)

ExoMol: Il progetto ExoMol mira a fornire una copertura completa delle proprietà spettroscopiche delle molecole considerate rilevanti negli ambienti astrofisici caldi. Questi dati sono utilizzati per modellare le atmosfere di esopianeti, stelle con temperature superficiali minori di 5000 K e altri oggetti astronomici, oltre che in numerose applicazioni terrestri. L'aggiornamento del 2024 (Tennyson, Yurchenko, Zhang et al. 2024) riporta lo stato attuale del database, che contiene liste di righe per 91 molecole e 224 isotopologi.

2.3 Biomarcatori gassosi: criteri di selezione

Nel contesto dell'astrofisica atmosferica esoplanetaria, gli indicatori di possibile attività biologica possono essere divisi in due macrocategorie:

1. Gas prodotti da attività biologica sulla Terra che potrebbero essere rilevati se prodotti in quantità sufficiente

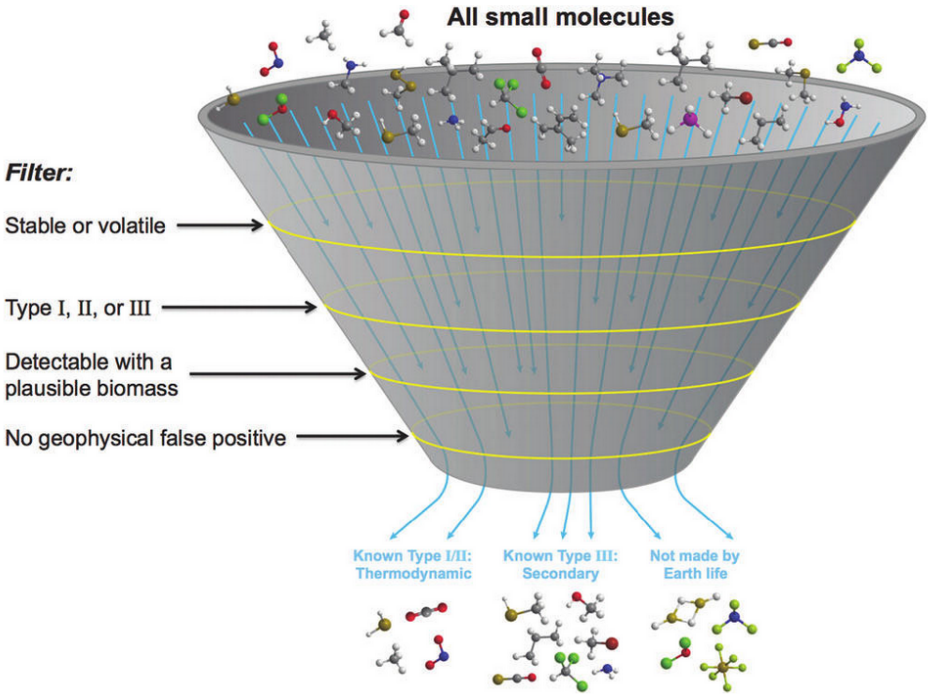

Figura 2.3: Schema che illustra il processo di selezione di molecole volatili che rappresentano potenziali biofirme

(a) **Tipo I**: prodotti dell'estrazione di energia

(b) **Tipo II**: prodotti di funzioni biologiche specifiche

(c) **Tipo III**: specie chimiche di Tipo I/II ulteriormente processate

2. Coppie di gas in forte disequilibrio termodinamico che solo un processo continuo di produzione potrebbe mantenere.

In particolare, la simultanea rilevazione di ossigeno (O_2) e metano (CH_4) in assenza di CO è stata indicata come una biofirma con forte validità per pianeti simili alla Terra. In presenza di O_2, CH_4 dovrebbe essere ossidato rapidamente ($CH_4 + 2\ O_2 \rightarrow CO_2 + 2\ H_2O$) quindi la loro coesistenza richiede un continuo rifornimento di CH_4 o O_2. Inoltre, processi geologici o fotolitici che generano CH_4 o O_2 tendono anche a produrre CO. In modo analogo, sono state proposte combinazioni di disequilibrio come CH_4–O_2, N_2–O_2 e N_2O–O_2–CH_4.

In alternativa, si possono prendere in considerazione molecole che vengono prodotte unicamente da processi biologici. La vita sulla Terra produce migliaia di gas diversi: alcuni esempi sono riportati nella tabella 2.1. Per massimizzare le possibilità di riconoscere tali biofirme, è utile considerare inizialmente tutte le molecole organiche che potrebbero essere prodotte da processi biologici alternativi a quelli terrestri. Per stilare una lista comprensiva di tutti i possibili marcatori, è utile limitarsi alle combinazioni degli atomi della lista "CNOPSH"

(Carbonio, Azoto, Ossigeno, Fosforo, Zolfo, Idrogeno). Una volta formata una lista completa, ogni molecola deve superare una serie di criteri di selezione riassunti in Figura 2.3. Viene posto un limite al numero di atomi (n = 6 escludendo l'idrogeno) che compongono la molecola dato che un numero troppo elevato ne compromette la volatilità e quindi la rilevabilità per mezzo di indagine atmosferica. Sempre riguardo alla volatilità, il limite alla temperatura di ebollizione delle molecole candidate deve essere posto al di sotto dei 150°C, temperatura oltre la quale la maggior parte delle molecole organiche diventa instabile, impedendo quindi l'esistenza di forme di vita a base di carbonio. Un altro limite è imposto dalla stabilità in condizioni standard di temperatura e pressione (ovvero le condizioni sulla superficie terrestre) e la reattività con l'acqua, dove avvengono la maggior parte delle reazioni biochimiche. Tra tutte le molecole raccolte in S. Seager, Bains e Petkowski 2016 in accordo con i parametri appena descritti, solo il 25% risulta prodotto dagli organismi terrestri. Esempi di queste molecole non prodotte da processi biologici sulla Terra è presente nella Tabella 2.2

Nome molecola	**Formula**	**Concentrazione atmosferica**	**Fonte primaria sulla Terra**	**Esempio di produzione biologica**
Azoto	N_2	78%	Processi geologici primordiali	Batteri denitrificanti
Ossigeno	O_2	21%	Fotosintesi	Fotosintesi
Ozono	O_3	1 ppm	Processazione fotochimica ossigeno	Non prodotto
Acqua	H_2O	1- 4%	Evaporazione	Respirazione cellulare
Diossido di carbonio	CO_2	350 ppm	Outgassing, Attività antropica	Respirazione
Ammoniaca	NH_3	0.1-3 ppb	Attività antropica	Batteri nitrificanti
Metano	CH_4	1.7 ppm	Processi di organismi anaerobi	Metanogenesi ($CO_2 \rightarrow CH_4$)
Ossido di azoto	N_2O	320 ppb	Processi biologici	Batteri nitrificanti
Monossido di carbonio	CO	125 ppb	Fotochimica	Combustione
Dimetilsolfuro	$(CH_3)_2S$	5-60 ppt	Biologica	Plankton
Cloruro di metile	CH_3Cl	612 ppt	Biologica	Batteri oceanici
Bromometano	CH_3Br	22 ppt	Biologica	Alghe
Isoprene	C_5H_8	1-3 ppb	Biologica	Piante
Etano	C_2H_6	0.2-3 ppb	Combustione	Batteri oceanici, sottoprodotto della degradazione del DMS;

Tabella 2.1: Molecole presenti nell'atmosfera terrestre collegate a processi biologici

Nome IUPAC	**Formula molecolare**	**Peso mol. [Da]**	**T ebollizione [°C]**
Buta-2,3-dien-1-ammina	C_4H_7N	69.1	88
3-Buten-2-ammina	C_4H_9N	71.12	73
2-Ossirancarbaldeide	$C_3H_4O_2$	72.06	96
Amino(idrossiammino)metanolo	$C_1H_6N_2O_2$	78.07	221
Ciclopropilmetantiolo	C_4H_8S	88.17	111
1,3-Ditietan-1-ossido	$C_2H_4OS_2$	108.18	198
Metil idrogenocarbonotrithioato	$C_2H_4S_3$	124.25	200

Tabella 2.2: Esempi di molecole appartenenti alla lista CNOPSH non prodotte da processi biologici sulla Terra.

Nome IUPAC	**Formula molecolare**	**Peso mol. [Da]**	**T ebollizione [°C]**
Bromotriclorometano	$CBrCl_3$	198.27	105
Bromodiiodometano	$CHBrI_2$	346.73	221.5
Clorotribromometano	CBr_3Cl	287.18	156
Tricloroacetonitrile	C_2Cl_3N	144.38	84
1-Fluoropropano	C_3H_7F	62.09	–3
Tetrafluorometano	CF_4	88	–130
Cloruro cianico	CNCl	61.47	13
2-Bromo-1,1-dicloroetene	C_2HBrCl_2	175.84	109
Esafluoruro di zolfo	SF_6	146.06	–64
Tricloramina	NCl_3	120.37	71

Tabella 2.3: Lista CNOPSH estesa ai composti alogenati

Capitolo 3

Limiti di interpretazione e falsi positivi

3.1 Limiti biologici

Il limite più grande imposto alla rilevazioni di biofirme gassose ruota attorno al fatto che le specie chimiche prodotte in abbondanza (**Tipo I/III**) sono anche le stesse che possono essere prodotte da processi abiotici (geochimici o fotochimici). Questo genera inevitabilmente un grande numero di falsi positivi. Al contrario i gas prodotti da funzioni biologiche specifiche (**Tipo II**) sono prodotti in quantità troppo ridotte per essere rilevate con le tecnologie attuali (con concentrazioni nell'ordine di ppb o ppt), soprattutto nel contesto fisico dei pianeti sub nettuniani e terrestri.

Un altro aspetto interessa la lista 2.2, costruita assumendo che i processi biologici usino l'acqua come solvente. Un esempio per mostrare i limiti di tale assunzione è la seguente: le molecole piccole formate da legami covalenti sono costituite da atomi con valenze comprese tra 2 e 5, in grado di costruire reti di legami e diverse strutture. Tuttavia, per evitare che queste strutture diventino illimitate (come i polimeri), le molecole necessitano di atomi monovalenti che coprano le valenze libere. Sulla Terra questo ruolo è quasi sempre svolto dall'idrogeno. In ambienti con scarsa presenza d'acqua, la vita potrebbe scegliere il cloro come atomo monovalente nelle sue costruzioni molecolari, come suggerito da (S. Seager, Bains e Petkowski 2016).
Forme di vita originate in ambienti fisico-chimici molto diversi potrebbero selezionare insiemi di atomi e legami più adatti a tali condizioni. Ad esempio, il legame C–F è uno dei legami semplici più forti che si conoscano. Una vita che evolvesse a temperature molto più alte potrebbe impiegare un maggior numero di legami C–F per compensare la maggiore instabilità delle molecole soggette a quelle temperature. Per questi motivi S. Seager, Bains e Petkowski 2016 propone una lista estesa CNOPSH che include anche gli alogeni (Tabella 2.3).

3.2 Limiti computazionali

Nonostante i cataloghi siano in continuo aggiornamento, l'estensione delle liste delle linee di transizione richiesta per la caratterizzazione atmosferica è vastissima.
Dato che la probabilità di osservare il transito di un pianeta è:

$$P_{\text{transito}} \simeq \frac{R_s}{a} \tag{3.1}$$

(con R_s raggio della stella ospite, a semiasse maggiore dell'orbita del pianeta), la maggior parte degli esopianeti che JWST ha la possibilità di caratterizzare con la spettroscopia di transito è molto vicina alla propria stella e dunque ha temperature elevate, comprese tra 1500 K e 3000 K. Ciò implica che le liste di linee debbano estendersi ad alti livelli energetici. Per le stelle di tipo M, molto più fredde delle stelle simili al Sole, esiste la possibilità di individuare esopianeti rocciosi situati nella zona abitabile: per queste condizioni osservative i dati spettrali devono essere accurati e completi fino a circa 350 K.
Finora sono stati ottenuti risultati nel calcolo di liste di transizioni accurate (posizioni e probabilità di transizione con la precisione della spettroscopia di laboratorio ad alta risoluzione) e complete (tutte le possibili transizioni a qualsiasi lunghezza d'onda e a qualsiasi temperatura) solo per specie chimiche comuni e di piccole dimensioni (H_2O, NH_3, CO_2, SO_2) e i loro isotopologi, fino a temperature massime di 5000 K (Tennyson, Yurchenko, Zhang et al. 2024).
In S. Seager, Bains e Petkowski 2016 è sottolineato che per la maggior parte delle circa 14 000 molecole considerate che rientrano nei parametri descritti nel Capitolo 2.3, non esistono dati spettrali sperimentali o teorici. Solo circa 1000 hanno spettri di fase gassosa noti (principalmente dal database IR NIST), e meno di un centinaio dispongono di dati completi (dalle banche dati HITRAN, PNNL, ExoMol). Questo impedisce, al tempo attuale, di simulare in modo realistico lo spettro di un'eventuale atmosfera esoplanetaria contenente tali gas. Questo ostacolo è posto dal fatto che molecole con molti atomi hanno spazi rotovibrazionali vastissimi: il numero di stati cresce esponenzialmente con il numero di gradi di libertà (ExoMol 2024 contiene 10^{12} transizioni associate a "solo" 91 molecole). Ricavare dati relativi a tutti i livelli con metodi quantomeccanici ad alta precisione può richiedere tempi di calcolo estremamente alti. Ottenere dati sperimentali di laboratorio per confronti e calibrazioni è altrettanto dispendioso e complesso, soprattutto per molecole instabili.

3.3 Limiti Osservativi

La possibilità di rilevare molecole nelle atmosfere esoplanetarie è fortemente limitata dall'SNR anche per gli strumenti attualmente più avanzati come JWST. Il suo livello minimo di rumore, ovvero l'intensità minima di una feature spettroscopica distinguibile, può essere raggiunto com-

binando diversi transiti. Il valore teorico è di 30 ppm (Sara Seager et al. 2025), che si riferisce al livello minimo di segnale generato da fattori legati al rumore dello strumento e dell'ambiente osservativo (ad esempio fluttuazioni termiche, vibrazioni meccaniche, caratteristiche dei rivelatori). Empiricamente, i limiti osservativi del telescopio (per quanto riguarda le molecole organiche) sembrano essere stati raggiunti con la rilevazione del DMS (dimetilsolfuro) e del DMDS (dimetildisolfuro) nel pianeta sub-nettuniano K2-18b, con significatività ($< 3\sigma$). Tuttavia data la mancanza della sezione d'urto di tali molecole a pressioni inferiori a 1 bar (condizione più rappresentativa per gli strati superiori di un'atmosfera estesa) e dato che le stesse caratteristiche spettrali sono compatibili con altri generici idrocarburi, come l'etano, studi recenti (tra cui Luque et al. 2025) considerano queste evidenze non statisticamente significative.

A riprova di ciò, un esempio di simulazione di uno spettro contenente firme ottenibili attraverso transiti di pianeti della classe delle super-Terre è esposto nell'articolo Marcell et al. 2013. Lo strumento osservativo originariamente considerato è EChO, una proposta di missione dell'Agenzia Spaziale Europea appositamente dedicata all'analisi spettroscopica a media risoluzione di atmosfere esoplanetarie, ottimizzato per ridurre il rumore sistematico. Dato che questo progetto di telescopio spaziale non ha superato la selezione, la missione Ariel può esserne considerata l'erede sia a livello di obiettivi scientifici che di strumentazione utilizzata. Di seguito sono presentati due casi: una super-Terra calda con una temperatura superficiale di $\sim$2400 K e in orbita attorno a una stella di tipo G, e una super-Terra temperata con temperatura superficiale di 320 K, in orbita attorno a una stella di tipo M. Date le diverse temperature, sono previste composizioni atmosferiche differenti. Nel primo caso vengono considerati H_2O, CO e CO_2, mentre nel caso temperato H_2O, CO_2, NH_3 e O_3, per tre diverse abbondanze (10^{-4}= 100 ppm, 10^{-6} = 1 ppm, 10^{-8} = 0.01 ppm). Per analogia con la Terra, viene indicata un'atmosfera dominata da N_2 per la super-Terra temperata, mentre per la super-Terra calda si considera un'atmosfera dominata dal vapore acqueo.

	H_2O		CO_2	NH_3		O_3	
SNR	5–8 μm	11–16 μm	15 μm	6.1 μm	10.5 μm	9.6 μm	14.3 μm
10	10^{-5}	10^{-4}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-5}
5	10^{-5}	10^{-4}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-5}

Tabella 3.1: Super-Terra temperata orbitante una stella di tipo M: abbondanza minima rilevabile per diversi intervalli spettrali a SNR fisso pari a 5 e 10. La composizione atmosferica di fondo nel modello è N_2.

La Figura 3.3 mostra gli spettri simulati per le due tipologie di pianeti e le Tabelle 3.1 e 3.2

	H_2O			CO_2			CO	
SNR	2.8 μm	5–8 μm	11–16 μm	2.8 μm	4.3 μm	15 μm	2.3 μm	4.6 μm
20	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-5}	–	–
10	10^{-4}	10^{-3}	10^{-3}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-4}	–	–
5	10^{-3}	–	–	10^{-4}	10^{-5}	–	–	–

Tabella 3.2: Super-Terra ad alte temperature orbitante una stella di tipo G: abbondanze minime rilevabili per diversi intervalli spettrali a SNR fisso pari a 5, 10 e 20. In questo esempio specifico, il CO non è rilevabile. La composizione atmosferica principale nel modello è H_2O.

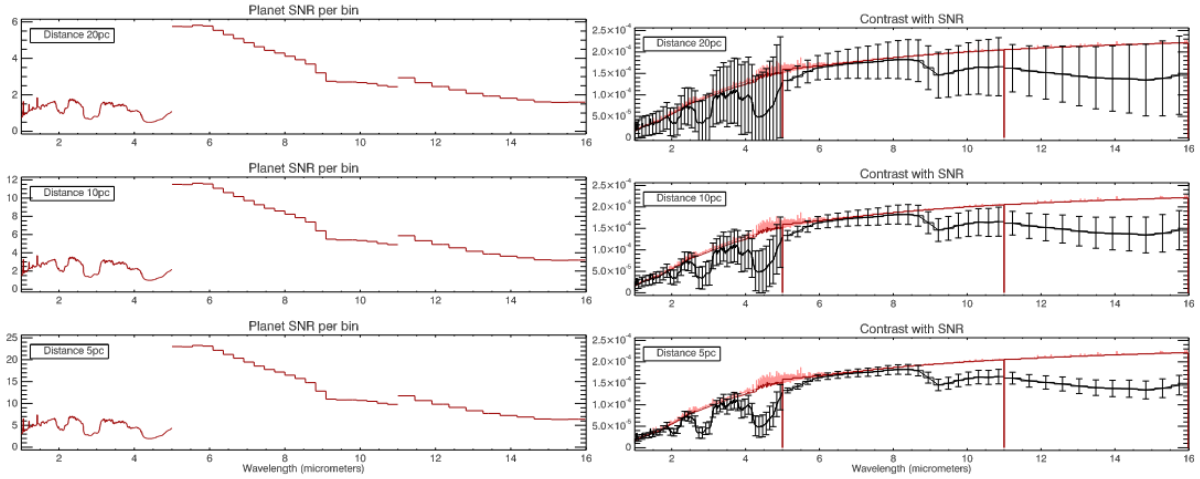

Figura 3.1: Un singolo transito di una super-Terra calda con sola CO_2 presente in atmosfera (abbondanza 10^{-4}). La composizione atmosferica di fondo nel modello è H_2O; si veda la Sezione 3.3 per un confronto tra i principali costituenti atmosferici. Sinistra: SNR per intervallo di risoluzione per un bersaglio a 20, 10 e 5 pc. Destra: Spettri del contrasto pianeta/stella con barre d'errore a 1 σ.

riportano le abbondanze minime rilevabili di alcune semplici specie chimiche a diversi livelli di SRN. Non viene considerato SNR = 20 per la super-Terra temperata dato che non sarebbe raggiungibile con le tecnologie attuali. I grafici riportati in Figura 3.1 e 3.2 mostrano i valori di SNR ottenibili rispettivamente per 1 transito di super-Terra calda e 200 transiti (necessari per avere un SNR comparabile con il caso precedente) di super-Terra temperata a varie distanze.

Un esempio intermedio tra i due precedenti descritti è presentato in Gasman, Min e Chubb 2022: in questo caso il pianeta considerato è HD 97658b, una super-Terra con $T_{eq} \simeq 1000$ K orbitante una stella di classe K, a distanza di 22 parsec dall'osservatore. I modelli presentati sono esplicitamente basati sulle proprietà degli strumenti spettroscopici a bordo di JWST (MIRI, NIRSpec, NIRISS e relativi filtri) e le molecole considerate sono gli idrocarburi acetilene, etilene e metano. Nella tabella 3.3 a ciascuno spettro simulato sono associati lo strumento spettroscopico utilizzato (anche in combinazione tra loro per osservare contemporaneamente in diversi inter-

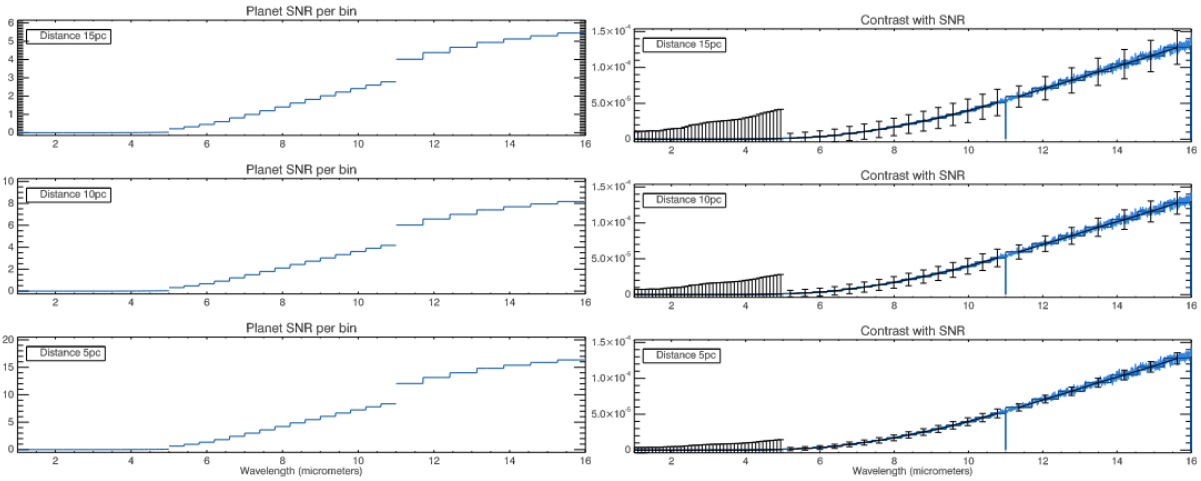

Figura 3.2: 200 transiti di un pianeta di classe super-Terra temperato con sola presente CO_2 in atmosfera (abbondanza 10^{-4}). La composizione atmosferica principale nel modello è N_2; Sinistra: SNR per intervallo di risoluzione per un target a 15, 10 e 5 pc. Destra: Spettri del contrasto pianeta/stella con barre d'errore a 1 σ.

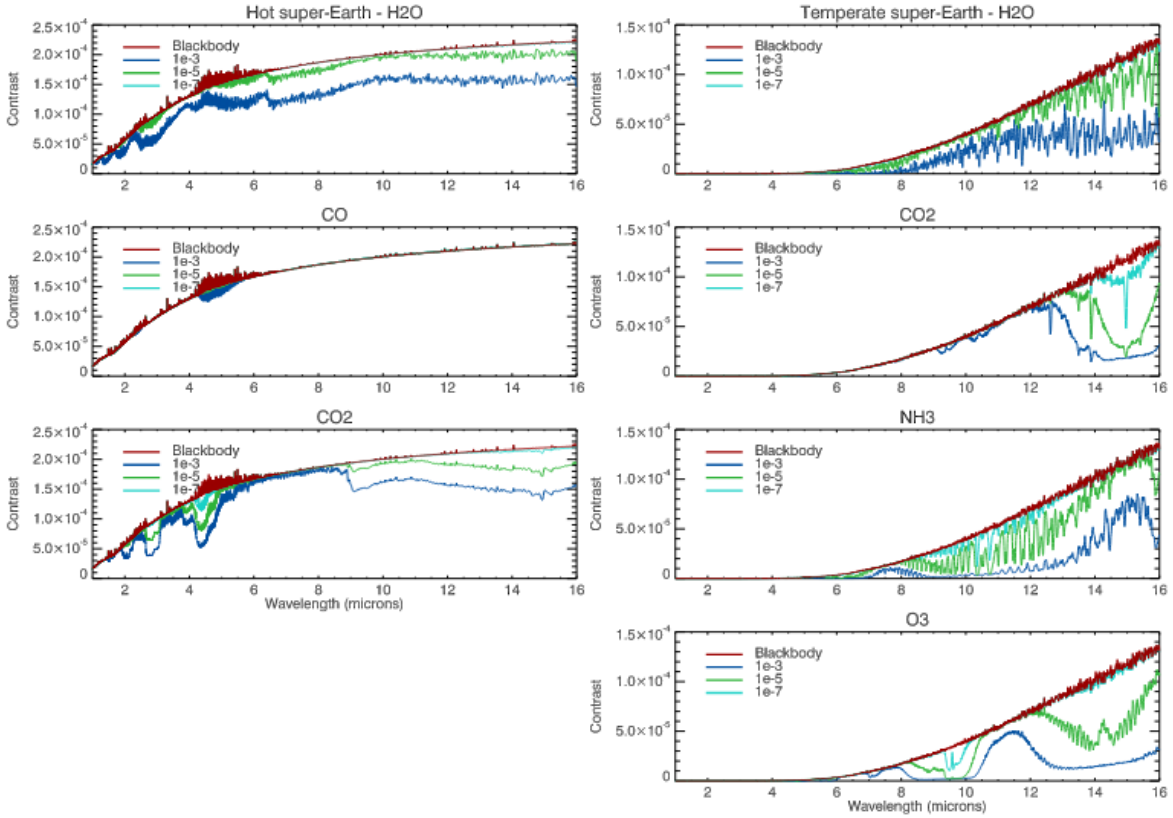

Figura 3.3: super-Terra calda (sinistra) e temperata (destra): spettri del contrasto pianeta/stella che simulano l'effetto delle molecole considerate. Per il pianeta ad alte temperature: H_2O, CO e CO_2; per il caso temperato: H_2O, CO_2, NH_3 e O_3. La linea rossa rappresenta l'emissione del corpo nero planetario priva di molecole, divisa per lo spettro stellare. Le linee in verde-blu mostrano le caratteristiche molecolari alle diverse abbondanze.

Molecole	HD 97658b		
	C_2H_2	C_2H_4	CH_4
MIRI LRS	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}
MIRI LRS (25 transiti)	10^{-5}	10^{-4}	10^{-4}
NIRISS SOSS	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}
NIRISS SOSS (25 transiti)	10^{-5}	10^{-4}	10^{-6}
NIRCam F322W2	10^{-4}	10^{-4}	10^{-5}
NIRCam F322W2 (25 transiti)	10^{-5}	10^{-4}	10^{-6}
NIRSpec G395M	10^{-4}	10^{-4}	10^{-6}
NIRSpec G395M (25 transiti)	10^{-5}	10^{-4}	10^{-6}
NIRISS SOSS + NIRSpec G395M	10^{-4}	10^{-6}	10^{-6}
NIRSpec G395M + MIRI LRS	10^{-4}	10^{-4}	10^{-6}
NIRCam F322W2 + MIRI LRS	10^{-5}	10^{-6}	10^{-6}

Tabella 3.3: Tabella degli spettri simulati di HD 97658 b. Le abbondanze corrispondono a 10^{-4}= 100 ppm, 10^{-6} = 1 ppm. I risultati più accurati corrispondono alla combinazione delle osservazioni di 1 transito con NIRCam F322W2 + MIRI LRS, più accurati anche dei casi di transiti multipli. Risultati tratti da Gasman, Min e Chubb 2022

valli di lunghezza d'onda), il numero di transiti e l'abbondanza minima rilevabile della molecola considerata.
Risulta evidente che solo per le abbondanze più elevate (10^{-4}) è possibile riconoscere con sicurezza la presenza di una molecola, anche utilizzando gli strumenti attualmente più avanzati. Un rapporto segnale rumore molto più elevato ($\sim$10 - 20), tempi di esposizione più lunghi e un maggior numero di misurazioni sarebbero necessari per rilevare la presenza della maggior parte dei prodotti volatili di matrice biologica presenti sulla Terra, facendo riferimento alle abbondanze della Tabella 2.1.

3.4 Lista di potenziali biofirme

Sono descritte nelle seguenti tabelle le caratteristiche delle molecole selezionate come potenziali indicatori di attività biologica e i limiti associati.

Molecola	**Fattori favorevoli**	**Criticità Osservative**
O_2	Molecola molto abbondante nell'atmosfera terrestre	Prodotto anche da processi fotochimici e geochimici
O_3	Indicatore indiretto della presenza di O_2. Lo strato di ozono svolge un ruolo fondamentale nella stratosfera terrestre schermando la radiazione UV solare dannosa.	Bassa concentrazione atmosferica sulla Terra. Può avere origini abiotiche fotochimiche
N_2O	Distrutto da reazioni fotochimiche in atmosfera. Non si conoscono sorgenti abiotiche significative.	Bassa concentrazione atmosferica sulla Terra
NH_3	Breve tempo di vita a causa dell'elevata solubilità in acqua e della fotodissociazione. Può abbondare in ambienti planetari con atmosfere ricche di H_2 dove può avere tempi di vita più lunghi.	Prodotta abioticamente in atmosfere spesse ricche di H_2, come nei giganti gassosi del Sistema Solare. Può essere eliminata troppo efficacemente in presenza di grandi oceani superficiali. Bassa concentrazione atmosferica sulla Terra
PH_3	Soggetta a distruzione tramite reazione con radicali ossigenati e fotodissociazione. Bio firma più efficace in ambienti poveri di ossigeno, incluse atmosfere ricche di H_2 o CO_2	Prodotta abioticamente in atmosfere spesse ricche di H_2, come osservato nei giganti gassosi del Sistema Solare

Tabella 3.4: Tabella riassuntiva delle principali molecole inorganiche che rappresentano potenziali biofirme. Soprattutto in mancanza di un contesto statistico ampio delle caratteristiche delle classi planetarie possono portare a casi di falsi positivi, a meno che non vengano considerati in coppie in disequilibrio termodinamico

Molecola	**Fattori favorevoli**	**Criticità Osservative**
CH_4	Gas biogenico presente nell'atmosfera terrestre fin dalle prime fasi dell'evoluzione del pianeta, molto prima dell'aumento dell'O_2. Viene distrutto per fotodissociazione e le reazioni con radicali ossigenati come OH	Prodotto in quantità ridotte da processi geochimici e da chimica atmosferica se la concentrazione di H_2 è sufficientemente elevata
DMS	Contribuisce alla formazione di aerosol solforati, possibilmente influenzando l'albedo planetaria. Ha tempi di vita brevi in atmosfera dato che è facilmente distrutto dai radicali liberi e dalla fotodissociazione. Non ha sorgenti abiotiche conosciute	Bassa concentrazione atmosferica. Mancanza dati spettrali completi.
CH_3Cl	Tempo di vita breve a causa della riduzione con radicali liberi e fotodissociazione. Non ha sorgenti abiotiche conosciute	Bassa concentrazione atmosferica.
CH_3Br	Analogo bromurato del CH_3Cl	Bassa concentrazione atmosferica
C_5H_8	Distrutto rapidamente da radicali OH, O, O_3 e dalla radiazione UV. Non ha sorgenti abiotiche conosciute	Bassa concentrazione atmosferica. Mancanza dati spettrali completi
C_2H_6	Possibile fattore di conferma presenza DMS. Fattore di conferma se rilevato in rapporti anomali con CH_4	Bassa concentrazione atmosferica.

Tabella 3.5: Tabella riassuntiva delle principali molecole organiche che rappresentano potenziali biofirme. Ad eccezione del metano, non portano a casi di falsi positivi, ma difficilmente possono essere rilevate se vengono prodotte nelle stesse quantità indicate nella Tabella 2.1

Capitolo 4

Conclusioni

4.1 Missioni in corso: JWST

I grandi telescopi spaziali e a terra di ultima generazione hanno aperto la strada verso la ricerca di biomolecole delle atmosfere di esopianeti. Oltre ai giganti gassosi come il già citato WASP 39b (Esparza-Borges et al. 2023), sono accessibili a JWST le atmosfere di diversi pianeti di dimensioni terrestri che orbitano nelle zone abitabili di stelle nane M.
Studi teorici mostrano che l'ozono (O_3) potrebbe essere rilevato, qualora presente nelle atmosfere di alcuni pianeti del sistema TRAPPIST-1 con abbondanza simile a quella terrestre, utilizzando 30–60 transiti, corrispondenti a circa 100–200 ore per pianeta (Barstow e Irwin 2016). Tuttavia, data l'intensità di richieste provenienti dai più diversi campi dell'astrofisica per il tempo di osservazione di JWST, non si tratta di obiettivi dimostrabili sperimentalmente nel prossimo futuro. Finora, le singole osservazioni dei pianeti TRAPPIST-1 non hanno portato a rilevazioni atmosferiche e hanno evidenziato difficoltà legate all'elevata attività della stella e alla possibilità che i pianeti non possiedano atmosfere significative (Espinoza et al. 2025).
Un'alternativa è rappresentata dai pianeti hycean (super-Terre che possiedono grandi oceani di H_2O e atmosfere dominate da H_2), le cui maggiori dimensioni e massa molecolare media minore li rendono più adatti alla rilevazione di caratteristiche spettrali. Le potenziali biofirme in tali atmosfere potrebbero essere rilevate con un numero minore di transiti, nell'ordine delle decine di ore (Madhusudhan, Piette e Constantinou 2021).

4.2 Missioni future: HWO, Ariel e E-ELT

La Decadal Survey of Astronomy and Astrophysics 2020 ha portato la NASA a ideare un progetto di telescopio operante nell'infrarosso, nel visibile e nell'ultravioletto per l'imaging diretto di esopianeti. L'Habitable Worlds Observatory (HWO) è stato progettato per il direct

imaging di pianeti di tipo terrestre nella zona abitabile di stelle di tipo F–K entro 10 pc. Per raggiungere questo obiettivo la missione prevede coronografi interni con soppressione della luce stellare fino a contrasti dell'ordine di 10^{-10} a separazioni angolari di $\leq$2 λ/D, sufficienti a separare un pianeta $\sim$10 miliardi di volte più debole dalla sua stella e a ottenere spettri di riflessione planetaria a bassa risoluzione (R $\sim$ 70–140), anche se vi sono proposte per strumenti a risoluzione maggiore (R $\simeq$ 1000). L'intervallo spettrale candidato, ereditato dagli studi di HabEx e LUVOIR, consente di sondare in un'unica configurazione le principali biofirme gassose: la banda A dell'ossigeno molecolare a 0,76 μm, le bande dell'ozono nell'UV (<0,35 μm) e nel visibile (0,5–0,7 μm), le molteplici bande dell'acqua (0,72–1,4 μm), del metano (0,62–1,7 μm) e del diossido di carbonio (1,6–2,0 μm), permettendo di valutare pattern di disequilibrio redox come descritto nel Capitolo 2.3. In parallelo, il lavoro di definizione del catalogo preliminare di target ha identificato 164 sistemi promettenti in termini di tipo spettrale stellare, distanza e conformazione planetaria, per massimizzare la probabilità di rilevare Exo-Earths accessibili a HWO (Harada et al. 2024).

Con questo scopo, particolarmente utile sarà il lavoro svolto da Ariel, missione prevista per il 2029, che ha l'obiettivo di fornire un contesto statistico solido delle caratteristiche macroscopiche e della composizione atmosferica per gli esopianeti. Ariel rappresenta una transizione fondamentale per la scienza degli esopianeti, che attualmente si basa su osservazioni non sistematiche. La missione crea per la prima volta un catalogo coerente e calibrato di spettri, necessario per testare modelli di evoluzione planetaria, determinare le proprietà chimiche in funzione degli ambienti stellari e identificare i fattori alla base della varietà atmosferica nei sistemi planetari (Changeat et al. 2025)

Infine, il telescopio con specchio primario di 39 metri E-ELT (European-Extremely Large Telescope), (prima luce prevista nel 2029, scientificamente operativo dal 2030) nonostante i limiti descritti nel Capitolo 1.4.1 per i telescopi a terra, con la sua capacità di raccogliere segnali debolissimi potrebbe avere un ruolo importante se dotato di appositi strumenti coronografici. Come descritto nell'articolo (Kasper et al. 2021), la Planetary Camera and Spectrograph (PCS) per l'E-ELT sarà dedicata alla rilevazione e caratterizzazione di esopianeti con dimensioni che vanno dai sub-nettuniani fino a quelle terrestri nelle vicinanze del sistema solare. Questo obiettivo è raggiunto tramite una combinazione di eXtreme Adaptive Optics (XAO), coronografia e spettroscopia ad alta risoluzione. PCS permetterà non solo di ottenere immagini, ma anche di rilevare biofirme con forti features spettrali come l'ossigeno molecolare. Tuttavia, i pianeti temperati di dimensioni terrestri che orbitano attorno a stelle simili al Sole potrebbero non essere mai osservati direttamente da terra a causa del requisito di contrasto pari a 10^{-10}, limite difficilmente superabile a causa del fronte d'onda residuo non correggibile dalla XAO.

4.3 Prospettive future

L'analisi condotta finora mostra come la ricerca di biofirme sia un obiettivo realistico, ma ancora fortemente limitato da vincoli fisici, computazionali e osservativi. In generale, le atmosfere esoplanetarie costituiscono un elemento estremamente utile di indagine scientifica in quanto sono archivi chimici della formazione di sistemi stellari, dell'evoluzione del mezzo interstellare e delle interazioni con la radiazione cosmica.

Oltre agli studi teorici, i risultati attuali mostrano che gli sviluppi tecnologici in campo osservativo sono prossimi a raggiungere la sensibilità minima necessaria per la rilevazione di molecole organiche a basse concentrazioni in atmosfere di pianeti non giganti, come dimostrato dalle osservazioni di JWST di pianeti sub-nettuniani temperati. Tuttavia, anche i casi più promettenti, come K2-18 b, evidenziano che la significatività del segnale è per ora ai limiti della capacità strumentale e richiede lunghe e ripetute osservazioni (che non è possibile effettuare se non in missioni dedicate), modelli radiativi avanzati e dati spettrali più completi.

Le missioni in fase di sviluppo, come Ariel, forniranno una caratterizzazione sistematica di un ampio campione di atmosfere, permettendo di contestualizzare i casi più complessi all'interno di una cornice statistica. Ciò permetterà ad esempio di identificare con maggiore certezza elementi in disequilibrio, escludendo i processi abiotici più comuni. Il passo decisivo sarà però rappresentato dall'Habitable Worlds Observatory, il primo telescopio progettato appositamente per l'imaging diretto di Exo-Earths e per la rilevazione di biomarcatori.

Bibliografia

Barstow, J. K. e P. G. J. Irwin (giu. 2016). «Habitable Worlds with *JWST* : Transit Spectroscopy of the TRAPPIST-1 System?» In: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters* 461.1, pp. L92–L96. ISSN: 1745-3925, 1745-3933. DOI: 10.1093/mnrasl/slw109.

Beard, Corey et al. (nov. 2025). «Discovery of a Nearby Habitable Zone Super-Earth Candidate Amenable to Direct Imaging». In: *The Astronomical Journal* 170.5, p. 279. ISSN: 0004-6256, 1538-3881. DOI: 10.3847/1538-3881/ae0e20. arXiv: 2510.19956 [astro-ph].

Berta, Zachory K. et al. (mar. 2012). «The Flat Transmission Spectrum of the Super-Earth GJ1214b from Wide Field Camera 3 on the Hubble Space Telescope». In: *The Astrophysical Journal* 747.1, p. 35. ISSN: 0004-637X, 1538-4357. DOI: 10.1088/0004-637X/747/1/35. arXiv: 1111.5621 [astro-ph].

Booth, Alice S. et al. (mag. 2021). «An Inherited Complex Organic Molecule Reservoir in a Warm Planet-Hosting Disk». In: *Nature Astronomy* 5.7, pp. 684–690. ISSN: 2397-3366. DOI: 10.1038/s41550-021-01352-w.

Bruno, Giovanni e Magali Deleuil (apr. 2021). *Stellar Activity and Transits*. DOI: 10.48550/arXiv.2104.06173. arXiv: 2104.06173 [astro-ph].

Carter, Aarynn L. et al. (lug. 2023). «The JWST Early Release Science Program for Direct Observations of Exoplanetary Systems I: High Contrast Imaging of the Exoplanet HIP 65426 b from 2-16 μm». In: *The Astrophysical Journal Letters* 951.1, p. L20. ISSN: 2041-8205, 2041-8213. DOI: 10.3847/2041-8213/acd93e. arXiv: 2208.14990 [astro-ph].

Catalogue of Exoplanets (2025). *Catalogue of Exoplanets*. https://exoplanet.eu/catalog/.

Changeat, Quentin et al. (set. 2025). *On the Synergetic Use of Ariel and JWST for Exoplanet Atmospheric Science*. DOI: 10.48550/arXiv.2509.02657. arXiv: 2509.02657 [astro-ph].

Charbonneau, David et al. (dic. 2009). «A Super-Earth Transiting a Nearby Low-Mass Star». In: *Nature* 462, pp. 891–894. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature08679.

Cloutier, Ryan (set. 2024). *Exoplanet Demographics: Physical and Orbital Properties*. DOI: 10.48550/arXiv.2409.13062. arXiv: 2409.13062 [astro-ph].

Currie, Thayne et al. (lug. 2023). *Direct Imaging and Spectroscopy of Extrasolar Planets*. DOI: 10.48550/arXiv.2205.05696. arXiv: 2205.05696 [astro-ph].

Damiano, Mario et al. (giu. 2024). «LHS 1140 b Is a Potentially Habitable Water World». In: *The Astrophysical Journal Letters* 968.2, p. L22. ISSN: 2041-8205, 2041-8213. DOI: 10.3847/2041-8213/ad5204. arXiv: 2403.13265 [astro-ph].

Esparza-Borges, Emma et al. (set. 2023). «Detection of Carbon Monoxide in the Atmosphere of WASP-39b Applying Standard Cross-correlation Techniques to JWST NIRSpec G395H Data». In: *The Astrophysical Journal Letters* 955.1, p. L19. ISSN: 2041-8205. DOI: 10.3847/2041-8213/acf27b.

Espinoza, Néstor et al. (set. 2025). «JWST-TST DREAMS: NIRSpec/PRISM Transmission Spectroscopy of the Habitable Zone Planet TRAPPIST-1 e». In: *The Astrophysical Journal Letters* 990.2, p. L52. ISSN: 2041-8205, 2041-8213. DOI: 10.3847/2041-8213/adf42e.

Gasman, Danny, Michiel Min e Katy L. Chubb (mar. 2022). «Investigating the Detectability of Hydrocarbons in Exoplanet Atmospheres with JWST». In: *Astronomy & Astrophysics* 659, A114. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/202141468. arXiv: 2202.01151 [astro-ph].

Gordon, I.E. et al. (gen. 2022). «The HITRAN2020 Molecular Spectroscopic Database». In: *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 277, p. 107949. ISSN: 00224073. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107949.

Harada, Caleb K. et al. (giu. 2024). «Setting the Stage for the Search for Life with the Habitable Worlds Observatory: Properties of 164 Promising Planet Survey Targets». In: *The Astrophysical Journal Supplement Series* 272.2, p. 30. ISSN: 0067-0049, 1538-4365. DOI: 10.3847/1538-4365/ad3e81. arXiv: 2401.03047 [astro-ph].

Hurowitz, Joel A. et al. (set. 2025). «Redox-Driven Mineral and Organic Associations in Jezero Crater, Mars». In: *Nature* 645.8080, pp. 332–340. ISSN: 0028-0836, 1476-4687. DOI: 10.1038/s41586-025-09413-0.

Jorgensen, Jes K., Arnaud Belloche e Robin T. Garrod (ago. 2020). «Astrochemistry During the Formation of Stars». In: *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 58.1, pp. 727–778. ISSN: 0066-4146, 1545-4282. DOI: 10.1146/annurev-astro-032620-021927. arXiv: 2006.07071 [astro-ph].

K. N. Liou (2002). *An Introduction to Atmospheric Radiation*. 2ª ed. Academic Press.

Kasper, Markus et al. (2021). «PCS — A Roadmap for Exoearth Imaging with the ELT». In: *Published in The Messenger vol. 182* pp. 38-43, 6 pages. ISSN: 0722-6691. DOI: 10.18727/0722-6691/5221.

Luque, R. et al. (ago. 2025). «Insufficient Evidence for DMS and DMDS in the Atmosphere of K2-18 b. From a Joint Analysis of JWST NIRISS, NIRSpec, and MIRI Observations». In:

Astronomy & Astrophysics 700, A284. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/202555580. arXiv: 2505.13407 [astro-ph].

Madhusudhan, Nikku, Marcelino Agúndez et al. (dic. 2016). «Exoplanetary Atmospheres - Chemistry, Formation Conditions, and Habitability». In: *Space Science Reviews* 205.1-4, pp. 285–348. ISSN: 0038-6308, 1572-9672. DOI: 10.1007/s11214-016-0254-3. arXiv: 1604.06092 [astro-ph].

Madhusudhan, Nikku, Anjali A. A. Piette e Savvas Constantinou (set. 2021). «Habitability and Biosignatures of Hycean Worlds». In: *The Astrophysical Journal* 918, p. 1. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.3847/1538-4357/abfd9c.

Marcell, Tessenyi et al. (nov. 2013). «Molecular Detectability in Exoplanetary Emission Spectra». In: *Icarus* 226.2, pp. 1654–1672. ISSN: 00191035. DOI: 10.1016/j.icarus.2013.08.022. arXiv: 1308.4986 [astro-ph].

Martin, William et al. (nov. 2008). «Hydrothermal Vents and the Origin of Life». In: *Nature Reviews. Microbiology* 6.11, pp. 805–814. ISSN: 1740-1534. DOI: 10.1038/nrmicro1991.

Mireles, Ismael et al. (set. 2023). «TOI-4600 b and c: Two Long-period Giant Planets Orbiting an Early K Dwarf». In: *The Astrophysical Journal* 954, p. L15. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.3847/2041-8213/aceb69.

NASA Science (dic. 2023). *NASA Science | Habitable Worlds Observatory*. https://science.nasa.gov/astrophysics/programs/habitable-worlds-observatory/.

NASA, Exoplanet Science Institute (2025). *NASA Exoplanet Archive*. https://exoplanetarchive.ipac.caltech.edu/.

Öberg, Karin I. e Edwin A. Bergin (gen. 2021). «Astrochemistry and Compositions of Planetary Systems». In: *Physics Reports* 893, pp. 1–48. ISSN: 03701573. DOI: 10.1016/j.physrep.2020.09.004.

Osinski, G.R. et al. (set. 2020). «The Role of Meteorite Impacts in the Origin of Life». In: *Astrobiology* 20.9, pp. 1121–1149. ISSN: 1531-1074. DOI: 10.1089/ast.2019.2203.

Pepe, F. et al. (gen. 2021). «ESPRESSO at VLT - On-sky Performance and First Results». In: *Astronomy & Astrophysics* 645, A96. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/202038306.

Powell, Diana et al. (feb. 2024). «Sulfur Dioxide in the Mid-Infrared Transmission Spectrum of WASP-39b». In: *Nature* 626.8001, pp. 979–983. ISSN: 1476-4687. DOI: 10.1038/s41586-024-07040-9.

Rukdee, Surangkhana (nov. 2024). «Instrumentation Prospects for Rocky Exoplanet Atmospheres Studies with High Resolution Spectroscopy». In: *Scientific Reports* 14.1, p. 27356. ISSN: 2045-2322. DOI: 10.1038/s41598-024-78071-5.

Schrum, J. P., T. F. Zhu e J. W. Szostak (set. 2010). «The Origins of Cellular Life». In: *Cold Spring Harbor Perspectives in Biology* 2.9, a002212–a002212. ISSN: 1943-0264. DOI: 10.1101/cshperspect.a002212.

Seager, S., W. Bains e J.J. Petkowski (giu. 2016). «Toward a List of Molecules as Potential Biosignature Gases for the Search for Life on Exoplanets and Applications to Terrestrial Biochemistry». In: *Astrobiology* 16.6, pp. 465–485. ISSN: 1531-1074, 1557-8070. DOI: 10.1089/ast.2015.1404.

Seager, Sara et al. (set. 2025). «Prospects for Detecting Signs of Life on Exoplanets in the JWST Era». In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 122.39, e2416188122. ISSN: 0027-8424, 1091-6490. DOI: 10.1073/pnas.2416188122.

Swain, M. R. et al. (gen. 2009). «MOLECULAR SIGNATURES IN THE NEAR-INFRARED DAYSIDE SPECTRUM OF HD 189733b». In: *The Astrophysical Journal* 690.2, pp. L114–L117. ISSN: 0004-637X, 1538-4357. DOI: 10.1088/0004-637X/690/2/L114.

Tennyson, Jonathan, Sergei N. Yurchenko, Ahmed F. Al-Refaie et al. (set. 2016). «The ExoMol Database: Molecular Line Lists for Exoplanet and Other Hot Atmospheres». In: *Journal of Molecular Spectroscopy*. New Visions of Spectroscopic Databases, Volume II 327, pp. 73–94. ISSN: 0022-2852. DOI: 10.1016/j.jms.2016.05.002.

Tennyson, Jonathan, Sergei N. Yurchenko, Jingxin Zhang et al. (giu. 2024). *The 2024 Release of the ExoMol Database: Molecular Line Lists for Exoplanet and Other Hot Atmospheres*. DOI: 10.48550/arXiv.2406.06347. arXiv: 2406.06347 [astro-ph].

Tinetti, Giovanna et al. (lug. 2007). «Water Vapour in the Atmosphere of a Transiting Extrasolar Planet». In: *Nature* 448.7150, pp. 169–171. ISSN: 0028-0836, 1476-4687. DOI: 10.1038/nature06002.

Walsh, Catherine et al. (mar. 2014). «Complex Organic Molecules in Protoplanetary Disks». In: *Astronomy & Astrophysics* 563, A33. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201322446.

Wogan, Nicholas et al. (apr. 2024). «JWST Observations of K2-18b Can Be Explained by a Gas-Rich Mini-Neptune Composition». In: *AASTCS10, Extreme Solar Systems V*. Vol. 56, p. 625.15.

Zahnle, Kevin J. et al. (mag. 2020). «Creation and Evolution of Impact-generated Reduced Atmospheres of Early Earth». In: *The Planetary Science Journal* 1.1, p. 11. ISSN: 2632-3338. DOI: 10.3847/PSJ/ab7e2c.