

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

Jullian Henrique Barbosa dos Santos

**A evolução de galáxias vista pela emissão de
PAHs**

São Paulo

2016

Jullian Henrique Barbosa dos Santos

A evolução de galáxias vista pela emissão de PAHs

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

Versão Corrigida. O original encontra-se disponível
na Unidade.

Área de Concentração: Astronomia

Orientador: Prof. Dr. Amâncio César Santos

Friaça

São Paulo

2016

Aos meus pais, Ana Lúcia e Beto, com muito amor, aos meus irmãos Betinho e Mário, à Samy, minha menina, à Dona Maria e, agora, ao meu afilhado Henrique.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer primeiramente à meus pais, Ana Lúcia e Beto, com muito amor e dedicação me trouxeram, quase pela mão, até aqui. Sem sua dedicação minha pessoa não seria possível. Sem seus incentivos seria apenas um ser amargurado. Meu pai quem primeiro me incentivou na busca pelo saber. Minha mãe, sempre um céu de ternura, com seus frequentes conselhos filosóficos. Mais que minha vida, vocês me deram uma alma.

À Samy, pelos anos de companheirismo que se seguem, por tudo que juntos já passamos, pela paciência de lidar comigo, pela atenção diária. Uma das partes mais doces desses anos que me dediquei a essa empresa, assim como muitos dos meus mais tranquilos momentos. Pelo amor que tanto me dedicou e que muito me esforço para retribuir.

Ao meu irmãozinho Betinho, que recentemente nos deu uma linda criança de presente, pela preocupação de irmão mais velho sempre demonstrada (algumas vezes até demais), pela companhia que me fez durante os longos anos de infância, pelas enrascadas que me tirou (e também pelas que me pôs), pela alegria que comigo compartilhou.

Ao meu irmão Mário, mesmo eu sendo ausente te levo junto comigo; à todos os meus tios, primos, minha madrinha Rê e meu padrinho Márcio que sempre me acolheram tão calorosamente. E agora também à minha cunhada.

À minha Avó Maria, e também ao Seu Dito e a Dona Almerinda que já não estão cá conosco, pelo amor de mãe que me emprestou durante toda a minha vida, pelo tanto que me cuidou e pela serenidade que me vem nas bucólicas paisagens de Cachoeira Paulista.

Ao Amâncio, pelo longo tempo que me emprestou para a confecção deste trabalho e de mim mesmo, quanto um aspirante a astrônomo. Pelo muito que me ensinou e pelo muito à me ensinar. Pelo sorriso sempre animador.

Aos professores Eduardo Cypriano, Cláudia, Antônio Mário, Jorge Meléndez e Ademir

e seus cursos que tanto ajudaram, tanto como formação acadêmica quanto humanista, meus mais sinceros agradecimentos. À Professora Betriz Barbuy e Eduardo Janot, com quem tive a oportunidade de estagiar em duas áreas bastante distintas e que tanto me ensinaram. À Professora Silvia Rossi que pela atenção que dá a todos deve ser campeã de agradecimentos.

Aos meus colegas de sala: Larissa Takeda e Marcelo Sime, que tanto me aguentaram com música alta e repentinos surtos de mau humor. Pela atenção que me deram quando as coisas não funcionavam. Pelas dicas, conselhos e sugestões.

Ao pessoal de casa: Matheus, Mineiro, Higa e Hud, por todo carinho que dão. Turminha da pesada!;

À tchurminha da física, seus lindos!

À toda a turma do IAG, colegas nessa valorosa empresa.

Aos meus amigos perdidos pelo mundo Junico, Bixo, Naná, Naty, Bunda, TC, Arthur, Alan, Gui e tantos mais que nem cabem aqui. Paratodos!

À luz que veio numa chuvosa noite de domingo.

Às CPG e a Secretaria do Departamento, por sempre ser tão solícitos, tão dispostos a ajudar.

Ao IAG e a USP pela infraestrutura.

À CNPq, pelo apoio financeiro.

*“Oh! Oh! Seu Moço!
Do Disco Voador
Me leve com você
Prá onde você for
Oh! Oh! Seu Moço!
Mas não me deixe aqui
Enquanto eu sei que tem
Tanta estrela por aí ...”*

Raul Santos Seixas

*“Quem quer passar além do Bojador
Tem que passar além da dor.
Deus ao mar o perigo e o abismo deu,
Mas nele é que espelhou o céu.”*

Fernando Pessoa

“A verdade é filha do tempo, e não da autoridade.”

Galileu Galilei

Resumo

Este trabalho apresenta um estudo sobre o papel da emissão dos hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs) como traçadores da evolução galáctica. O principal instrumento da presente pesquisa é um modelo de evolução quimiodinâmica que é usado para simular a evolução de galáxias de grande porte que podem ser vistas como ULIRGs tanto no universo local como a altos redshifts. O modelo fornece as propriedades das estrelas e dos componentes gasoso e de poeira do meio interestelar ao longo do tempo em cada ponto do objeto. Uma interface de transporte radiativo acoplada ao modelo permite obter a emissão infravermelha devida a grãos de poeira e PAHs aquecidos e excitados pelas estrelas. A resultante distribuição espectral de energia (SED) que emerge da galáxia carrega informação tanto sobre a física dos grãos e PAHs como da evolução da galáxia.

O presente estudo focou as features dos PAHs no Infravermelho Médio. Verificou-se a sensibilidade das features dos PAH a fatores físicos como flutuações de temperatura e ionização dos PAHs. Concluiu-se que flutuações de temperatura são essenciais para explicar o espectro atribuído a PAHs de várias fontes, mas que tanto PAHs neutros como ionizados são permitidos pelas observações.

Investigou-se como as linhas dos PAHs podem revelar a natureza e evolução da galáxia. Como é de se esperar, a luminosidade das linhas escala com a massa da galáxia, embora não linearmente. Além disso, para uma galáxia bastante massiva, as razões linha/contínuo assinalaram um *starburst* tardio que este objeto apresenta. A eficiência de produção de poeira também tem um impacto, embora menor, na luminosidade das linhas de PAHs. Encontrou-se que razões linha/contínuo são mais sensíveis à eficiência de formação estelar e outras propriedades da galáxia, enquanto que as razões linha/linha podem ser usadas para indicar não somente a presença de um *starburst* mas também parâmetros físicos como

a ionização dos PAHs. A maioria das ULIRGs a altos redshifts apresenta razões de linha $L(7.7\mu m)/L(11.2\mu m)$ elevadas, embora com grande dispersão, favorecendo PAHs neutros, enquanto que algumas poucas ULIRGs a redshifts mais baixo apresentam baixos valores dessa razão, o que sugere a prevalência de PAHs ionizados.

Abstract

This work presents a study on the role of emission of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) as a tracer of galactic evolution. The main instrument of this research is a chemodynamical evolution model that is used to simulate the evolution of massive galaxies that can be seen as ULIRGs both in the local universe as at high redshift. The model provides the properties of stars and gas and dust components of the interstellar medium over time at each point of the object. A radiative transfer interface coupled to the model allows to obtain the infrared emission due to dust grains and PAHs heated and excited by stars. The resulting spectral energy distribution (SED) that emerges from the galaxy carries information about both the physics of grains and PAHs and the evolution of the galaxy.

The present study focused on the PAH features in the Medium Infrared. It was assessed the sensitivity of the PAH features to physical factors such as temperature fluctuations and ionization of PAHs. It was found that temperature fluctuations are essential to explain the spectrum assigned to PAH from various sources, but both neutral and ionized PAH are allowed by the observations.

It was investigated how the PAH lines can reveal the nature and evolution of the galaxy. As expected, the line luminosity scales with the mass of the galaxy, though not linearly. In addition, for a very massive galaxy, the line/continuum ratios signaled a late starburst displayed by this object. The dust production efficiency also has an impact, although smaller, on the intensity of the PAHs lines. It was found that line/continuum ratios are more sensitive to star formation efficiency and other properties of the galaxy, while the line/line ratios can be used to investigate not only the presence of a starburst but also physical parameters such as the PAH ionization. Most ULIRGs at high redshifts show

$L(7.7 \text{ } \mu\text{m})/L(11.2 \text{ } \mu\text{m})$ ratios that are high, albeit with a great dispersion, favoring neutral PAH, while a few ULIRGs at lower redshifts, have low values for this reason, suggesting the prevalence of ionized PAHs.

Lista de Figuras

| | | |
|------|--|----|
| 2.1 | Lyman Break | 27 |
| 2.2 | Estados alotrópicos do carbono. | 39 |
| 2.3 | Exemplos de moléculas aromáticas | 41 |
| 2.4 | PAHs Pericondensados e catacondensados | 42 |
| 2.5 | Heterocíclicos nitrogenados | 46 |
| 2.6 | Bases Nitrogenadas | 47 |
| 3.1 | Evolução da densidade | 52 |
| 3.2 | Evolução do campo de velocidade | 53 |
| 3.3 | Evolução da temperatura | 54 |
| 3.4 | Evolução da SFR | 56 |
| 3.5 | Evolução da abundância de O | 58 |
| 3.6 | Evolução da abundância de Fe | 60 |
| 3.7 | SED estelar à alto <i>redshift</i> | 61 |
| 3.8 | SED estelar à alto e baixo <i>redshift</i> | 62 |
| 3.9 | Evolução da massa de poeira | 68 |
| 3.10 | Modelo de distribuição espacial da poeira | 70 |
| 3.11 | Excesso de cor previsto por vários modelos | 71 |
| 3.12 | Modelo de distribuição de poeira | 73 |
| 3.13 | Eficiência de absorção do grafite | 80 |
| 3.14 | Eficiência de absorção do gelo de água | 80 |
| 3.15 | Eficiência de absorção do coroneno | 83 |
| 3.16 | Eficiência de absorção aglomerado de PAHs | 84 |
| 3.17 | Eficiência de absorção dos PAHs corrigida para o EUV | 85 |

| | | |
|------|---|-----|
| 3.18 | Eficiência de absorção do neutro vs. PAH ionizado | 88 |
| 3.19 | Eficiência de absorção do neutro vs. PAH ionizado (AIB) | 88 |
| 3.20 | Identificação dos carbonos para o método aditivo | 91 |
| 3.21 | Flutuações de temperatura dos PAHs e dos pequenos grãos na galáxia fidu- cial em 0.3 Gyr e à 1.0 kpc do centro. | 93 |
| 3.22 | Flutuações de temperatura dos PAHs e dos pequenos grãos na galáxia fidu- cial em 0.3 Gyr e à 8.0 kpc do centro. | 94 |
| 3.23 | Flutuações de temperatura dos PAHs e dos pequenos grãos na galáxia fidu- cial em 1.5 Gyr e à 1.0 kpc do centro. | 94 |
| 3.24 | Flutuações de temperatura dos PAHs e dos pequenos grãos na galáxia fidu- cial em 1.5 Gyr e à 8.0 kpc do centro. | 95 |
| 4.1 | SED comparativa sobre efeitos de flutuações temperatura de 0.1 à 1 Ganos . | 98 |
| 4.2 | SED comparativa sobre efeitos de flutuações temperatura de 2.6 à 13.0 Ganos | 99 |
| 4.3 | Região das bandas aromáticas os para $2 \times 10^{11} M_{\odot}$, caso A e entre os tempos 0.1 e 1.5 Ganos | 100 |
| 4.4 | Região das bandas aromáticas os para $2 \times 10^{11} M_{\odot}$, caso A e entre os tempos 2.6 e 13.0 Ganos | 102 |
| 4.5 | Variação temporal da razão L/C e $L(7.7)/L(11.2)$ (μm) para galáxia de $2 \times 10^{11} M_{\odot}$ | 103 |
| 4.6 | SED comparativa entre galáxias de massa e $2 \times 10^{11} M_{\odot}$ e $1 \times 10^{12} M_{\odot}$ entre 0.1 à 1 Ganos | 105 |
| 4.7 | SED comparativa entre galáxias de massa e $2 \times 10^{11} M_{\odot}$ e $1 \times 10^{12} M_{\odot}$ entre 2.6 à 13.0 Ganos | 106 |
| 4.8 | Região das bandas aromáticas os para $1 \times 10^{12} M_{\odot}$, caso A e entre os tempos 0.1 e 1.5 Ganos | 107 |
| 4.9 | Região das bandas aromáticas os para $1 \times 10^{12} M_{\odot}$, caso A e entre os tempos 2.6 e 13.0 Ganos | 108 |
| 4.10 | Variação temporal da razão L/C e $L(7.7)/L(11.2)$ (μm) para galáxia de $1 \times 10^{12} M_{\odot}$ | 109 |
| 4.11 | SED comparativa sobre o caso de produção de poeira A e B de 0.1 à 1 Ganos | 110 |

| | |
|---|-----|
| 4.12 SED comparativa sobre o caso de produção de poeira A e B de 2.6 à 13.0 | |
| Ganos | 111 |
| 4.13 Região das bandas aromáticas os para $2 \times 10^{11} M_{\odot}$, caso B e entre os tempos | |
| 0.1 e 1.5 Ganos | 112 |
| 4.14 Região das bandas aromáticas os para $2 \times 10^{11} M_{\odot}$, caso A e entre os tempos | |
| 2.6 e 13.0 Ganos | 113 |
| 4.15 Variação temporal da razão L/C e L(7.7)/L(11.2) (μm) para galáxia de | |
| $2 \times 10^{11} M_{\odot}$ no caso B | 114 |
| 4.16 L(7.7)/L(11.2) (μm) pela SFR. | 115 |

Lista de Tabelas

| | | |
|-----|--------------------------------|----|
| 2.1 | <i>Features</i> PAHs | 44 |
| 3.1 | Biblioteca de PAHs | 81 |
| 3.2 | <i>Features</i> PAHS | 86 |

Sumário

| | |
|--|----|
| 1. <i>Introdução</i> | 21 |
| 2. <i>Contexto: gás e poeira no Universo</i> | 23 |
| 2.1 <i>Evolução Galáctica</i> | 23 |
| 2.1.1 <i>Nascimento</i> | 24 |
| 2.1.2 <i>Galáxias à alto redshift</i> | 26 |
| 2.1.3 <i>Propriedades físicas</i> | 28 |
| 2.1.4 <i>Meio Interestelar</i> | 29 |
| 2.2 <i>Poeira</i> | 32 |
| 2.2.1 <i>Extinção</i> | 33 |
| 2.2.2 <i>Criação e Destruição</i> | 35 |
| 2.2.3 <i>Constituintes principais</i> | 37 |
| 2.2.3.1 <i>Silicatos</i> | 38 |
| 2.2.3.2 <i>Grafite</i> | 38 |
| 2.2.3.3 <i>Gelos</i> | 39 |
| 2.3 <i>PAHs</i> | 40 |
| 2.3.1 <i>O que são?</i> | 40 |
| 2.3.2 <i>Propriedades</i> | 43 |
| 2.3.3 <i>Heterocíclicos</i> | 45 |
| 2.3.4 <i>Astrobiologia</i> | 46 |
| 3. <i>Modelização</i> | 49 |
| 3.1 <i>Modelo Quimiodinâmico</i> | 50 |
| 3.1.1 <i>Modelo hidrodinâmico</i> | 50 |

| | | |
|---------|--|-----|
| 3.1.2 | Formação estelar | 55 |
| 3.1.3 | Evolução Química | 57 |
| 3.1.4 | Emissão Estelar | 59 |
| 3.2 | Poeira | 62 |
| 3.2.1 | Evolução química do meio interestelar | 63 |
| 3.2.2 | Evolução da poeira | 65 |
| 3.2.3 | Criação e Destruição | 66 |
| 3.2.4 | Distribuição Espacial da Poeira | 69 |
| 3.2.4.1 | Extinção no Meio Interestelar: Modelo de Multitelas | 70 |
| 3.2.4.2 | Emissão pelo Meio Interestelar: Modelo de Nuvens Moleculares | 72 |
| 3.2.5 | Propriedades físicas dos grãos | 74 |
| 3.2.5.1 | Eficiência de Absorção | 75 |
| 3.2.5.2 | Distribuição de tamanho | 78 |
| 3.2.5.3 | Gelos | 79 |
| 3.3 | PAHs | 81 |
| 3.3.1 | Espécies de PAHs | 81 |
| 3.3.2 | Propriedades ópticas | 82 |
| 3.3.3 | Ionização | 87 |
| 3.3.4 | Flutuações de temperatura | 88 |
| 4. | <i>Simulações</i> | 97 |
| 4.1 | Efeitos dos parâmetros físicos | 97 |
| 4.1.1 | Flutuações de temperatura | 98 |
| 4.1.2 | Estágio de ionização | 101 |
| 4.1.3 | Evolução das linhas de PAHs | 102 |
| 4.2 | Efeitos dos parâmetros galácticos | 104 |
| 4.2.1 | Massa da galáxia | 104 |
| 4.2.2 | Eficiência da produção de poeira | 108 |
| 4.3 | Evolução das linhas de PAHs como indicador de evolução galáctica | 111 |
| 5. | <i>Conclusões</i> | 117 |

Referências 121

Introdução

Desde sua gênese, o Universo cria estruturas complexas a partir de unidades simples. Passando por diversas fases desde o Big Bang, temos o desacoplamento das forças fundamentais, a bariogênese, a nucleossíntese primordial, o desacoplamento matéria-radiação e a recombinação, até a formação das estrelas e galáxias. Após a morte da primeira geração de estrelas, o Universo pode conhecer os “elementos pesados” (como carbono e oxigênio), possibilitando a formação de moléculas, planetas, cometas, asteróides e, por fim, a vida.

Vemos hoje o resultado de quase 14 bilhões de anos de evolução e crescimento da complexidade no Universo. Ao nosso redor reconhecemos diversas formas e essências, tudo cá formado e cá pertencente, composto pela mesma matéria que compõe o firmamento e que dele veio. Ainda ao observar o firmamento, devido à velocidade finita da luz, temos a oportunidade de visualizar o passado do cosmos e entender de onde tal formas vieram.

Há cerca de 3.8 bilhões de anos, como resultado (talvez inevitável) de todo esse processo surge uma estrutura complexa auto-replicante a qual chamamos vida. Um dos resultados finais de tal evolução somos nós mesmos.

Neste trabalho lançamos um olhar ao crescimento da complexidade no Universo, mais precisamente a evolução de galáxias e do meio interestelar assinalado pela emissão infravermelha dos PAHs. Esta família de moléculas é muito abundante no Universo, tanto o próximo quanto o distante, e geralmente sua presença é facilmente identificável e mensurável no Infravermelho, sendo esta assinatura bastante sensível à natureza do ambiente contendo os PAHs, o que lhe concede um grande interesse astrofísico.

Diversos trabalhos estudam a emissão dos PAHs no infravermelho com vistas a obter informações sobre a fauna intergaláctica e interestelar composta por AGNs, SBG, SFR, PDRs, GMC e mais toda uma gama de objetos.

Para tal estudo utilizamos o modelo quimodinâmico de Friaça & Terlevich, já usado para investigar a evolução de galáxias, acoplado à um modelo de poeira contendo silicatos, grafite e PAHs (DUST). O modelo quimodinâmico é multizonal, simulando a evolução do meio interestelar e da população estelar da galáxia. O DUST calcula a produção de poeira e o processamento da radiação emitida pelas estrelas e re-emitida pela poeira.

Em nossas simulações, consideramos em geral a emissão de uma galáxia de $2 \times 10^{11} M_{\odot}$ e obtivemos a emissão dos *features* dos PAHs. Analisamos os efeitos das flutuações de temperatura de pequenos grãos, do estado de ionização, da massa da galáxia e da eficiência de produção de poeira.

No capítulo 2 desenvolveremos o background teórico, tanto sobre evolução galáctica e as características de alguns objetos de interesse, quanto do meio interestelar e características da poeira. No 3 será descrito o modelo que utilizaremos e suas principais consequências. O capítulo 4 contém as simulações e sua análise. No capítulo 5 se discute os resultados e perspectivas do presente trabalho.

Contexto: gás e poeira no Universo

Neste capítulo discutiremos as bases teóricas nas quais se assentam o trabalho. Serão abordados conceitos essenciais sobre nascimento e evolução de galáxias, mas antes se faz necessária uma brevíssima introdução à cosmologia, visto que tanto a idade quanto o mecanismo de formação de estruturas é altamente dependente da cosmologia. Salvo quando especificado o contrário, utilizamos neste trabalho o modelo Λ - CDM (modelo padrão).

Como o escopo deste trabalho é a evolução do Meio Interestelar (daqui em diante ISM, do inglês *InterStellar Medium*) como um aspecto da evolução galáctica, também serão descritas algumas propriedades do ISM que nos são mais relevantes. Daremos atenção especial para a poeira, devido à sua grande influência no espectro galáctico, explicando sua origem, ciclo de vida, propriedades físicas e composição, tal como alguns efeitos como a extinção da luz estelar e emissão no infravermelho (daqui em diante IR, do inglês *InfraRed*). Neste capítulo consideraremos os Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (daqui em diante PAHs, do inglês *Polycyclic Aromatic Hydrocarbons*) como um importante componente da poeira.

2.1 Evolução Galáctica

Ao se observar objetos distantes uma das grandezas mensuráveis é *redshift*, z , que permite a determinação da distância e também da época em que o objeto observado se encontra. A conversão do *redshift* em unidades físicas (distância e tempo) é dependente do modelo adotado. O modelo em maior concordância com as observações é o Λ - CDM (constante cosmológica, Λ , mais matéria escura fria, *Cold Dark Matter* em inglês), apoiado pelos testes com a radiação cósmica de fundo (CMB, do inglês *Cosmic Microwave Back-*

ground), supernova Ia (SNIa) e oscilações acústicas de bárions (BAOs, do inglês *Baryon Acoustic Oscillations*). Consideramos um Universo descrito pelo Λ - CDM, ou seja, plano ($\Omega_K = 0.0$), com parâmetro de densidade desprezível para radiação ($\Omega_{M\gamma} \simeq 0.0$), para a constante cosmológica $\Omega_\Lambda \simeq 0.7$ e para a matéria $\Omega_M \simeq 0.3$, mais a constante de Hubble $H_0 \simeq 70 \text{ km/s/Mpc}$.

Vale salientar que a opção da cosmologia é muito mais importante do que transformações de espaço e tempo e influencia profundamente na dinâmica do Universo, acarretando diferenças profundas nos cenários de formação de estruturas.

Esta seção é apenas uma brevíssima introdução à formação e evolução de estruturas, baseada parcialmente nos livros *How Did the First Stars and Galaxies Form* (Loeb, 2010); e *Galaxy formation and evolution* (Mo et al., 2010), os quais abrangem ao tema desde a cosmologia até a astronomia extragaláctica de baixos *redshifts*.

2.1.1 Nascimento

No Universo primitivo, a matéria bariônica estava acoplada à radiação e esta dominava a dinâmica do sistema. Porém, quando ocorre o desacoplamento ($z \approx 1100$) o gás de fótons se desprende do de bárions, criando a CMB e fazendo-os aproximadamente não mais interagentes entre si. A temperatura do gás de fótons cai proporcionalmente à expansão cósmica, enquanto a temperatura do gás de bárions se mantém aproximadamente constante com o tempo ($T \approx 10^4 \text{ K}$). Note que na nucleossíntese primordial apenas elementos leves foram forjados e que a ausência de metais (e em menor escala pelo gás ser neutro) ocasiona a carência de mecanismos eficientes para o resfriamento.

Na cosmologia Λ - CDM (modelo padrão), durante o acoplamento os bárions e os fótons eram bastante homogêneos, porém a matéria escura não interagia (exceto gravitacionalmente) com ambos e pequenas inhomogeneidades presentes (talvez) no Big Bang evoluíram para as “sementes” das estruturas atuais. Em torno de $z \approx 10$ o gás de bárions já está ligado ao potencial gravitacional dos poços de matéria escura.

A alta temperatura do gás de bárions (aproximadamente a mesma do desacoplamento) impossibilita o colapso sobre os poços de matéria escura. Um mecanismo de resfriamento para esse gás proposto por Bromm e Loeb (2003), ainda que de pouca eficiência, é a formação de H_2 em reações entre hidrogênio atômico e raios cósmicos. A produção de H_2 é ineficiente na ausência de grãos (que apenas podem existir em ambientes com metais),

portanto, apenas uma pequena quantia desta molécula pode ser formada. Quando a metalicidade alcança aproximadamente 0.1% da solar o resfriamento por metais já se torna o efeito dominante. Mesmo em pequena porção, o H_2 deve ter sido o suficiente para conduzir o resfriamento, colapso e fragmentação do gás, criando as primeiras estrelas e galáxias.

É importante salientar que estas estruturas eram bastante distintas do que se observa hoje. No modelo padrão espera-se que apenas pequenos halos de matéria escura se formem e que as grandes galáxias nasçam por *mergers* destes halos (com os bárions já acoplados). No Universo jovem, as distâncias entre as estruturas eram menores, tornando os encontros deste tipo mais comuns. As primeiras estrelas eram livres de metais e de altíssima massa (a chamada *População estelar III*), pois a ineficiência do resfriamento permitiu a formação apenas destes objetos. Estrelas da População III vivem pouco e explodem em Super Novas, SNe, devolvendo ao ISM gás enriquecido com os primeiros metais do Universo. Sua existência ocupou um curto intervalo de tempo na história do Universo, pois os metais que elas sintetizaram facilitaram o colapso das próximas gerações estelares, permitindo estrelas menores (*População II*). Nunca se observou qualquer estrela sem metais e a verificação da existência da População III ainda aguarda confirmação observacional.

Este cenário em que pequenas estruturas se formam antes e então elas formam as maiores é chamado hierárquico e é determinado pela CDM. Um modelo alternativo é o HDM (*Hot Dark Matter* em inglês, significa "matéria escura quente"), no qual os halos de matéria escura se formam após a desacoplamento e o colapso se dá rapidamente já formando as grandes estruturas (cenário monolítico, onde as grandes estruturas se formam antes). Aqui fica clara a importância da cosmologia adotada.

Nosso modelo é um modelo multizonal, não sendo monolítico mas antes híbrido, visto que o colapso não se dá em um tempo curto em toda a galáxia. Embora ele não seja o padrão normalmente adotado pela cosmologia Λ – CDM, estudos mais recentes indicam um cenário híbrido com preponderância do cenário hierárquico.

É importante salientar que as galáxias não possuem um modelo único de formação e evolução. Colisões entre galáxias devem ter desempenhado papel fundamental no universo jovem já que as galáxias se encontravam mais perto uma das outras o que pode justificar parcialmente a grande variedade de formas que as galáxias apresentam. Espera-se que a nova geração de telescópios (GMT e ELT) possa lançar luz sobre essas questões.

2.1.2 Galáxias à alto redshift

Observar objetos distantes nos informa como eles eram no passado. Sendo o Universo e suas estruturas entes dinâmicos, existem grandes diferenças entre os objetos atuais e os distantes. Na cosmologia Λ - CDM, com os parâmetros descritos em 2.1, o universo atual possui aproximadamente 13.5 Gyr ($z = 0$). Uma galáxia observada em $z = 1$ é percebida como ela era quando o Universo tinha cerca de 5.8 Gyr e em $z = 5$ aproximadamente 1.1 Gyr, épocas em que muitas estruturas observadas hoje ainda estavam se formando. Como consequência as classificações morfológicas, tais como a de Hubble e de Sandage, não descrevem muito bem o Universo a alto *redshift*.

Objetos do Universo jovem passaram por poucas gerações de estrelas de forma que menos gás foi processado nas estrelas. O resultado é, em geral, objetos de baixa metalicidade e galáxias com mais gás, já que episódios como *outflows*, AGNs e formação estelar ainda não tiveram tempo para consumi-lo.

Após a rápida evolução das primeiras estrelas, o excesso de gás, que neste momento já possui elementos pesados, colapsa novamente em estrelas, gerando Surtos de Formação Estelar (SBs, do inglês *Star Bursts*). A População II era composta tanto por objetos massivos (não tanto quanto os da População III) quanto pelos de baixa massa, com largo predomínio do último. Também grãos são formados com os elementos sintetizados pelas SNe das primeiras estrelas. A poeira absorve a radiação estelar no UV e óptico e reemite no IR e o seu acúmulo aumenta a opacidade da galáxia.

Quando se compara o ISM das galáxias jovens ao atual encontra-se que aquele possuía mais gás que este e que ambos apresentam distintas distribuições de elementos químicos, composições e distribuições de tamanho de grão. Portanto, não há razões físicas para supor que a curva de extinção em alto *redshift* seja igual à do universo próximo, o que torna as investigações sobre esses objetos bastante complexas, pois é difícil interpretar tanto os observáveis no óptico e UV quanto no IR.

Contrário à visão de Kant, as galáxias não são Universos Ilhas, pois interagem entre si e com o gás que as circundam. Este é o chamado Meio Intergaláctico (IGM, do inglês *Inter Galactic Medium*), composto essencialmente por hidrogênio ionizado no qual estão imersas nuvens de hidrogênio neutro de baixa metalicidade (a chamada Lyman Alpha Forest). Este gás, quando na linha de visada, gera linha de absorção no espectro da galáxia observada,

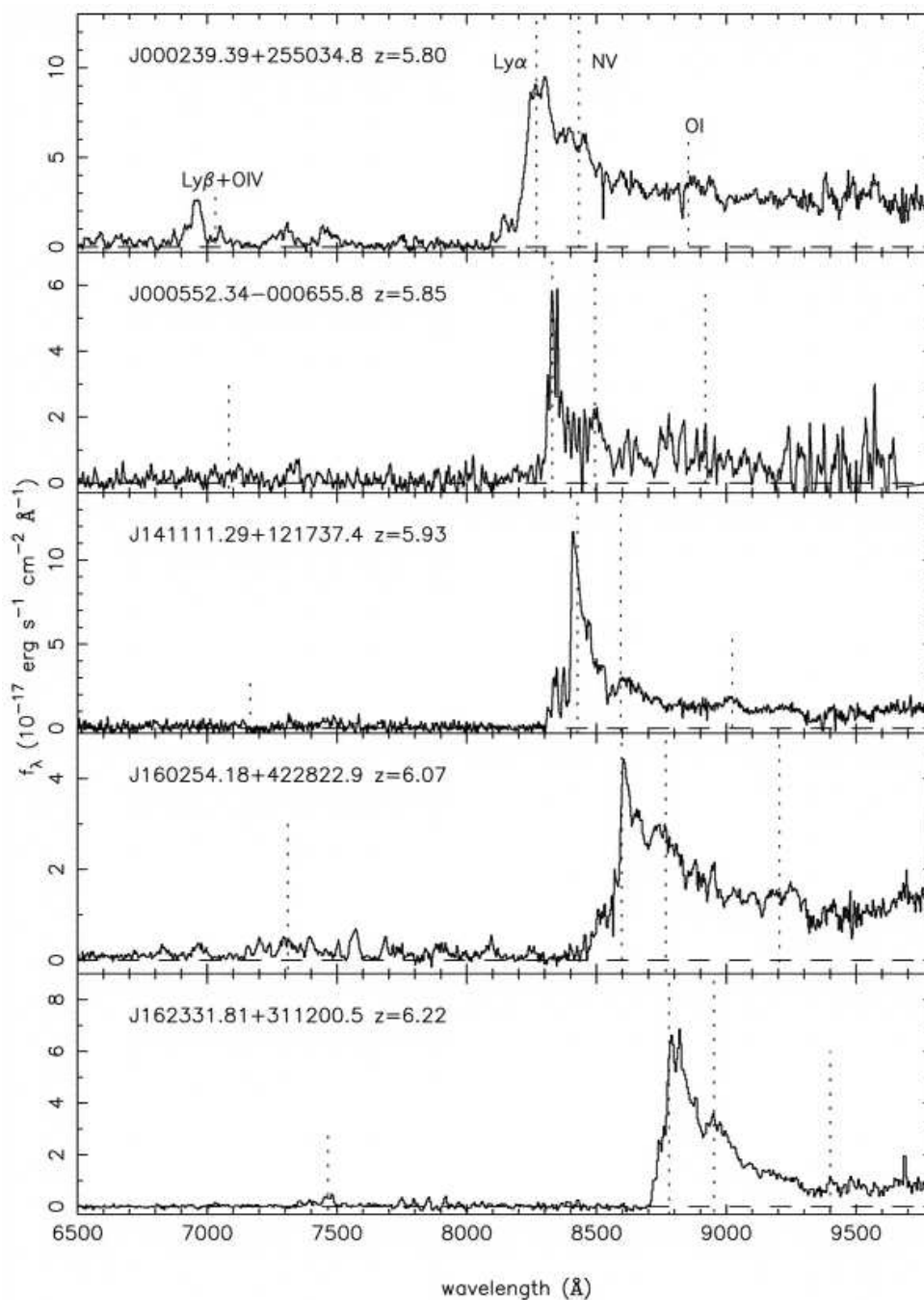


Figura 2.1: Espectro de Quasares (AGNs) em $z > 5.7$. O espectro se encontra no referencial do observador e em todos os espectros está indicada $Ly\alpha$. É imediato notar a quebra à esquerda da linha. Retirado de Fan et al. (2004).

criando entidades como as Lyman Break Galaxies (LBG), que são caracterizadas por uma quebra abrupta no espectro em comprimentos de onda inferiores ao limite de Lyman devido à absorção do UV pelo hidrogênio neutro. A Figura 2.1 mostra exemplos de espectro de LBG, no referencial do observador, em diversos *redshifts*, indicando a quebra no espectro

e o limite de Lyman. É fácil notar a quebra se deslocando no sentido do vermelho quando se aumenta o *redshift*.

Este gás frequentemente “cai” na galáxia (os *inflows*), impregnando-a novamente com gás de menor metalicidade. Os *inflows* mudam o fluxo hidrodinâmico podendo acarretar no acúmulo de material na região central criando os Núcleo Ativos de Galáxias (AGN, do inglês *Active Galactic Nuclei*), pela interação entre o gás e o buraco negro que habita o núcleo galáctico. Os AGNs podem ofuscar a galáxia hospedeira e são classificados em diversos tipos, segundo as propriedades que exibem (Quasares, QSO e Seyfert, entre outros), embora todos estes tipos possam ser compreendidos pela alimentação de um buraco negro supermassivo (o Modelo Unificado).

2.1.3 Propriedades físicas

Basicamente os ingredientes fundamentais das galáxias são fótons, matéria bariônica e a escura. A maioria delas também possui um buraco negro supermassivo em seu núcleo.

A matéria escura interage exclusivamente (ou quase exclusivamente) gravitacionalmente. Sua interação eletromagnética com fótons ou não ocorre ou é muito fraca. Sua composição se mantém uma incógnita, porém é um componente fundamental para explicar a curva de rotação das galáxias espirais e diversos resultados com lentes gravitacionais (ambos preveem uma quantidade de massa muito maior que o medido com a componente visível). Não realiza pressão nem interage colisionalmente com outros componentes e estima-se que sua abundância em massa no Universo seja seis vezes maior que a da matéria bariônica.

A matéria bariônica interage através das quatro forças conhecidas (Gravitacional, Eletromagnética e Nucleares Forte e Fraca), exerce pressão (embora possa ser muitas vezes desprezada) e se encontra principalmente nas estrelas e no ISM (como gás e poeira). A diversidade do ISM é imensa, compreendendo um meio interestelar difuso, nuvens moleculares, nuvens de reflexão, nebulosas planetárias e restos de supernovas. As estrelas ainda existentes hoje são separadas nas *População II* e *I*, sendo estas mais jovens e com maior metalicidade, características do disco das galáxias espirais, e aquelas mais velhas e com metalicidade menor, presentes em toda a galáxia de todos os tipos.

O material do ISM e das estrelas são intercambiáveis: estrelas se formam em nuvens moleculares gigantes e quando morrem devolvem parte do gás para o ISM em forma de

restos de supernovas ou nebulosas planetárias. O gás devolvido ao ISM retorna mais rico em elementos pesados e ocasionalmente formará novas estrelas, o que implica um crescimento da metalicidade em função do tempo. A temperatura e o tempo de vida das estrelas dependem de sua massa, sendo o tempo de vida menor para as estrelas mais massivas. Sua emissão é aproximadamente a de um corpo negro, de forma que galáxias com população estelar jovem são azuladas, enquanto populações antigas mais avermelhadas. O tom azulado da galáxia é geralmente devido ao fluxo ser muito maior nas estrelas massivas (ofuscando as menos massivas) e não por serem maiores em número.

Estrelas de baixa massa possuem o tempo de vida da ordem da idade do Universo ou maior, de modo que o material capturado nestes objetos basicamente não é devolvido ao meio. Mesmo após o colapso em anã branca uma parcela do material permanece encerrada por longas eras.

As galáxias experimentam eventos de *inflow* e *outflow*, AGNs, interações com o IGM e galáxias vizinhas, SB, entre outros, o que cria uma grande variedade de objetos dos mais variados tamanhos.

A grosso modo, podemos classificar as galáxias em elípticas, espirais e irregulares. As elípticas geralmente são encontradas em áreas de grande densidade de galáxias, o que sugere que tenham se formado por interações com outros objetos. Suas estrelas são tipicamente velhas, “como” regra possuem pouco gás.

As espirais são objetos mais complexos e apresentam estruturas distintas como o disco, halo, bojo e núcleo. São geralmente observadas em regiões de baixa densidade e aparentemente foram formadas com menos interações com outros objetos. Sua população estelar tem idade variada, sendo que as estrelas jovens se concentram no disco. O halo e bojo apresentam grande dispersão de velocidades, porém no disco as estrelas se encontram em rotação em torno do núcleo. Possuem também maiores reservatórios de gás e maior taxa de formação estelar (SFR, do inglês *Star Formation Rate*) que as elípticas.

Galáxias Irregulares geralmente são resultado de interações com outros objetos, finalizadas ou não. São objetos bastante variados.

2.1.4 Meio Interestelar

O Meio interestelar é um ambiente muito rico e variado, contendo muitos componentes interagentes entre si. Por muito tempo o ISM foi tido como um ambiente simples, onde a

única “utilidade” seria a formação estelar. Este cenário caiu no ostracismo após a detecção de diversas fases e componentes para o meio.

O ISM é composto basicamente por H e He. Os demais elementos são apenas traços, mas impactam violentamente na dinâmica do meio, determinando a curva de resfriamento, criando diversos tipos de grãos e moléculas, auxiliando no processo de formação estelar, entre tantas coisas. Carbono, oxigênio, nitrogênio, silício e ferro abrem uma imensidão de possibilidades, das estrelas à planetas rochosos, dos cometas à vida.

Podemos distinguir no ISM as regiões HII, as nuvens moleculares, as nuvens de reflexão, as regiões de fotodissociação (PDRs, do inglês *Photodissociation regions*), os restos de supernovas e as nebulosas planetárias. As regiões HII podem ser compactas, originadas por intensos campos de radiação, ou difusas, permeando a galáxia e a região entre nuvens. Sua marca é a forte presença de hidrogênio (e outros elementos) ionizado (HII) e a ausência de moléculas. No óptico sua emissão é marcada pelas linhas proibidas de [OII], [OI] e [NII] e em muitos casos, emissão térmica no rádio contínuo (devido às interações *free-free* do gás ionizado) e emissões de poeira “morna” no IR.

As nuvens de reflexão são azuladas por refletirem a luz de estrelas brilhantes próximas, não se observando a luz emitida pelo seu próprio gás quente, mas apenas a da fonte estelar. Elas exibem uma emissão IR similar à da região HII, porém menos intensa e sem a emissão em rádio e estrelas *early type* podem ser formadas pelo mesmo gás que originou a estrela.

Com nome autoexplicativo, as nuvens moleculares são nuvens frias e escuras, com grande profundidade óptica onde podem existir moléculas complexas. São muitas vezes vistas longe de estrelas, onde o campo de radiação estelar não consegue evaporá-las; outras vezes estão justamente na região de formação estelar (onde estão se evaporando). As nuvens moleculares gigantes (GMC, do inglês *Giant Molecular Cloud*) são os berçários de estrela, onde as estrelas e os aglomerados estelares nascem. Durante o processo o gás que não foi transformado em estrelas é evaporado pela forte radiação de estrelas O e B.

Comumente associadas com nuvens moleculares e regiões HII, as PDRs são a interface entre essas duas fases. A radiação emitida por uma estrela jovem ioniza a parte da nuvem próxima à estrela (região HII) levando à atenuação do campo. Nas camadas mais internas, o campo dissocia moléculas e ioniza tanto moléculas e átomos. Grande parte do FUV interage com os grãos pelo efeito fotoelétrico. Os íons e elétrons livres gerados mais o campo estelar atenuado provocam importantes reações químicas que enriquecem o meio

com novas espécies moleculares. Fenômenos de transporte carregam moléculas formadas na PDR para o interior da nuvem, onde o FUV não alcança. As PDRs emitem no contínuo IR de poeira, em linhas de estrutura-fina referentes ao resfriamento dos gases e também em linhas moleculares.

Outros constituintes também são importantes, entre os quais destacamos o gás atômico neutro, o ionizado o gás coronal e o molecular, a poeira e grandes moléculas. As grandes moléculas desempenham papel similar aos pequenos grãos no ISM e os integrantes notáveis desse grupo são os PAHs. Ambos serão tratados nas próximas seções deste capítulo.

Para se traçar a distribuição do gás atômico neutro é comum usar a linha hiperfina de 21cm do H neutro (dado que este é de longe o elemento mais abundante), ou linhas de absorção de diversos elementos quando a nuvem está na linha de visada de uma estrela. O meio neutro é organizado em nuvens frias difusas e em um meio inter nuvens morno.

O gás ionizado é traçado por linhas de absorção no óptico e UV contra fontes de fundo e por emissões de linhas de recombinação de H_α . Este gás morno e difuso responde pela maioria do gás ionizado e a debilidade da linha $\lambda = 6300\text{\AA}$ de [OI] indica que o meio difuso é quase todo ionizado. Não é muito claro o responsável por tal ionização, mas estrelas do tipo O são os melhores candidatos (apesar dos fótons dessas estrelas precisarem “escapar” das regiões HII e viajar centenas de parsecs sem ser absorvidos pelo hidrogênio neutro com sua grande seção de choque).

O quente gás coronal ($\approx 10^5 - 10^6 K$) é assinalado por linhas de absorção de UV emitidas por espécies muito ionizadas (como CIV, SVI, NV e OVI) e observadas contra uma fonte brilhante. Este plasma emite tanto no contínuo (bremsstrahlung e recombinação radiativa) quanto em linhas (excitação colisional e recombinação) na região do UV extremo (EUV) e do raio-X. O gás quente preenche o meio inter nuvens e a maior parte do volume do halo. Seu aquecimento se deve à choques originados de ventos estelares de estrelas massivas e a SNe. Ocasionalmente se resfria e “chove” sobre a galáxia.

O hidrogênio molecular, H_2 , é o componente molecular dominante no ISM porém virtualmente indetectável, justificando o uso da transição CO $J = 1-0$ (2.1mm) como traçadora da componente molecular (embora a razão H_2/CO seja da ordem de $10^4 - 10^5$). Muito de sua massa está alocada em GMCs. Cerca de 200 espécies moleculares já foram detectadas. A maioria delas são simples, frequentemente insaturadas, incluindo radicais ou íons e cerca de 3/4 delas são orgânicas. As nuvens moleculares blindam as moléculas

dos campos de radiação e sua detecção é geralmente feita pelas bandas rotacionais do sub-milimétrico. A dificuldade em medir moléculas complexas pode estar relacionada tanto à pequena abundância quanto na impossibilidade de discernir espécies simples e complexas.

2.2 Poeira

A condensação de elementos refratários em ambientes astrofísicos gera grãos que compõe a poeira cósmica, os quais, mesmo respondendo apenas por aproximadamente 1% da massa do ISM, influem drasticamente no ambiente que os contém. Grãos interagem com o campo de radiação local (seja estelar ou AGNs) por absorção e espalhamento com mais eficiência que o gás, processando fótons UV e visíveis e reemitindo-os no IR, resultando no avermelhamento e extinção da radiação estelar. Na presença de campos magnéticos grãos alongados se alinham às linhas de campo polarizando a radiação incidente. Estima-se que a principal forma dos elementos refratários (como C, Si, Mg, Fe, Al, Ti e Ca) seja a poeira.

Sua emissão IR e a curva de extinção fornecem informações sobre a constituição, tamanho, geometria e abundância dos grãos. Espera-se que a poeira seja formada por espécies de geometria complexa e que sejam intrinsecamente variadas, as quais diferem em composição, tamanho e distribuição de tamanho. O ambiente influi dinamicamente nas características da poeira que contém, devido a efeitos de sublimação, condensação e choques ou a diferenças na metalicidade e composição química o resultado é um sistema complexo de difícil descrição. As investigações sobre a natureza dos grãos são feitas por observações (que impõe vínculos sobre possíveis composições e condições astrofísicas), experimentos em laboratórios (bastante limitados pela impossibilidade de simular os extremos ambientes astrofísicos) e simulações computacionais (que não dão conta de cálculos de grãos realistas com geometrias fractais e composição não uniforme).

Os grãos oferecem ainda uma superfície catalítica na qual reações químicas produzem diversas moléculas, como H_2 que se forma (quase) exclusivamente em suas superfícies, aumentando a complexidade química do ISM. Substâncias voláteis se condensam em torno dos Grandes grãos (principalmente dos silicatos) na forma de gelos astrofísicos.

2.2.1 Extinção

A poeira interestelar é a principal causa da extinção no visível e UV. O espalhamento por pequenos grãos refratários é descrito pelo espalhamento Rayleigh que é mais eficaz para pequenos comprimentos de onda. A poeira é completamente caracterizada por sua composição, morfologia, distribuição de tamanho de grãos e pela abundância de elementos químicos (Zubko et al. (2004)).

Nas curvas de extinção estão registradas (embora não univocamente) as características da poeira presentes no ambiente. O total de extinção oferece informações sobre a razão gás-poeira se a densidade de coluna de hidrogênio for conhecida e a dependência da quantidade de luz espalhada com o comprimento de onda fornece informações sobre a distribuição do tamanho dos grãos. Medições da extinção relativa entre o visual e o FUV indicam que a variação na distribuição do tamanho de grãos é grande mesmo na nossa Galáxia.

Atualmente existem diversas receitas para a poeira do ISM. Optamos pelo modelo clássico MRN, Mathis et al. (1977), pela simplicidade e por possuir farto acervo disponível na literatura. Algumas modificações foram feitas tanto por nós quanto por outros autores, como Draine e Lee (1984). Na receita MNR considera-se poeira formada por Grafite (C), Carbetto de Silício (SiC), Fe e alguns de seus óxidos como Magnetita (Fe_3O_4), com tamanhos entre 1100Å e $1\mu m$. Quaisquer combinações destes componentes se ajustam bem aos dados desde que o Grafite estivesse presente. Logo considerara-se que o grafite é o principal contribuinte para a extinção, seguido pelos Silicatos.

O modelo de Draine e Lee (1984) é um MNR modificado com propriedades ópticas melhoradas e dependentes da temperatura e com ajustes para extinção em comprimentos de onda mais longos. Foram introduzidos também “Silicatos Astronômicos”, que não existem na Terra, com a função de ajustar o visível e o IR da curva de extinção em relação à curva do Trapézio da Nebulosa de Órion. Mesmo com os silicatos e o grafite, ainda foi observado excesso de emissão em $12\mu m$ e $25\mu m$ em relação ao esperado pela poeira aquecida pelo campo interestelar. Foi proposto por Draine e Anderson (1985) que o limite inferior da distribuição de grãos do modelo MNR fosse diminuído para $\sim 5\text{Å}$, os quais interagem com fótons individuais, causando flutuações de temperatura.

Leger e Puget (1984) e Allamandola et al. (1985) propuseram como constituintes dos pequenos grãos os PAHs, devido à existência de linhas aromáticas como $3.3\mu m$, $6.7\mu m$,

$7.7\mu\text{m}$ e $11.3\mu\text{m}$ presentes nos mais diversos ambientes astrofísicos. Dwek et al. (1997) obteve evidências indiretas da existência de PAHs no meio interestelar difuso com observações do DIRBE (*Diffuse Infrared Background Experiment*) e FIRAS (*Far Infrared Absolute Spectrophotometer*) a bordo do satélite COBE (*Cosmic Background Explorer*) no comprimento de onda $3.5\mu\text{m}$ à $1000\mu\text{m}$.

Todos os modelos de grãos citados possuem problemas em reproduzir a extinção e a emissão no IR considerando a composição do ISM. Espera-se que um modelo de grãos satisfaça vínculos observacionais com base no tamanho, composição, propriedades ópticas, estrutura fina, geometria e distribuição de tamanho dos grãos. Dwek (2004) sugere que um modelo de grãos deve ajustar os seguintes vínculos:

- 1) A extinção e o avermelhamento da luz estelar;
- 2) Emissão infravermelha das distintas fases do meio interestelar (regiões HII, HI difusa, MC, entre outras);
- 3) As abundâncias e depleções do ISM;
- 4) Emissão vermelha estendida de algumas nebulosas;
- 5) Raios -X, UV e halos visuais verificados em volta de fontes variáveis (Sistemas binários, Novas e SNe);
- 6) A presença de estruturas nas bordas de absorção de raios-X nos espectros de fontes raios-X;
- 7) Reflexão e polarização da luz estelar;
- 8) Emissão em micro-ondas devido à rotação dos grãos;
- 9) A poeira e anomalias isotópicas observadas em meteoritos e no Sistema Solar;
- 10) O efeito fotoelétrico necessário para se aquecer PDRs;
- 11) Emissão no IR devido ao plasma que também é fonte de raios-X.

Devido à complexidade e heterogeneidade do sistema e mais as limitações computacionais, não existe um modelo que atenda todos os requisitos simultaneamente. Os modelos atuais optam por determinadas características que se dispuseram a representar, utilizando parâmetros físicos reais, como propriedades ópticas e composição do grão, e a abundância do ambiente que está tentando se investigar. Outra abordagem é tentar simular sistemas completos com simplificações em alguns pontos, como geometria e distribuição dos grãos, e com suposições acerca dos vínculos observacionais ainda não muito bem definidos.

A elaboração de modelos de poeira é um trabalho muito laborioso realizado por gerações de astrônomos. A composição dos grãos deve se atentar à abundância cósmica dos elementos produzidos, à facilidade de coagulação do gás contido no ISM em cada componente da poeira e à resiliência do grão em ambientes astrofísicos. Determinações das propriedades físicas e químicas de muitos candidatos são obtidas tanto em laboratórios na Terra, quanto simulações computacionais da estrutura de diversas substâncias realizadas, e então comparados com observações. Geralmente os modelos são construídos baseados na análise de sólidos bem conhecidos e ajustando sua distribuição de tamanho e abundância a dados observacionais como extinção interestelar média, polarização e emissão no IR. Por fim, se atesta a verossimilhança do modelo com relação à dependência do albedo com o comprimento de onda (Dwek (2004)).

Draine (2003), em um excelente *review*, discute algumas variações que os efeitos atribuídos à poeira apresentam ao longo da linha de visada em nossa galáxia, entre eles citamos a variação da intensidade do *bump* em 2175\AA , presença de gelos e minerais próximos às estrelas desenvolvidas (ausentes no meio difuso) e variação do perfil de depleção nas diversas fases do ISM. Essas variações são esperadas pois nos diversos ambientes astrofísicos existe dominância de um ou outro processo de eficiência distinta para a produção e evaporação de grãos. Também é preciso considerar estilhaçamento térmico, coagulação e acreção dos grãos decorrentes das interações no ISM, o que altera a curva de extinção e emissão IR de uma galáxia.

2.2.2 Criação e Destruição

Existem diversos mecanismos propostos para o ciclo de vida da poeira, e qual a relevância de cada um ainda é objeto de debate. O entendimento destes mecanismos é importante para descrever os variados ambientes físicos e suas peculiaridades, como ausência de linhas aromáticas em AGNs e a abundância em *star burst*, o mesmo valendo para regiões HII e PDRs. A variedade observada na curva de extinção e na região IR indica que o ciclo de vida da poeira dependa de diversos fatores e fontes.

Segundo Franceschini (2000) os principais sítios de criação de poeira são:

- 1) Envelopes protoestelares: Grãos de silicatos podem se formar durante a formação estelar, na nebulosa que surge próximo a estrelas novas. Os grãos são expulsos durante a fase T Tauri.

2) Estrelas evoluídas frias: A atmosfera fria das gigantes evoluídas produz grãos de carbono (estrelas carbonadas) e silicatos (estrelas OH-IR). Os grãos podem ocasionar fortes ventos estelares. Estrelas de massa $< 8M_{\odot}$ contribuem bastante, enquanto as mais massivas apresentam maior perda de massa (como Wolf-Rayet) e são muito raras.

3) Supernovas tipo Ia: Não há evidências diretas de sua contribuição, porém ela pode ser um agente importante para a depleção do ferro. Seu papel ainda é controverso. Nozawa et al. (2011) encontrou, em simulações, formação de grãos carbonáceos seguida por destruição, enquanto Gomez et al. (2012) não encontrou evidências observacionais de poeira jovens nos restos *Kepler* e *Tycho* com o instrumento *Herschel*.

4) Supernovas tipo II: Talvez a mais importante fonte de produção de poeira. O estudo da SNe 1987a fornece evidências diretas da formação de grãos de grafite e silicatos, assim como manchas escuras na nebulosa do Caranguejo. O mapeamento no IR realizado pelo ISO de Cassiopeia-A resolveu a emissão de nódulos em rápido movimento. Outras evidências como o excesso de IR na curva de luz e extinção em estrelas de fundo também apontam fortemente para a importância deste sítio.

5) Meio interestelar: A partir de núcleos menores deve haver a condensação de material formando grãos maiores. PAHs podem se condensar em grafites e o choque de grafite pode gerar grãos de PAHs, dependendo da velocidade do grão em meios turbulentos. Gelos também podem se formar na superfície de grandes grãos (silicatos principalmente) em nuvens moleculares devido à baixa temperatura destes objetos e proteção contra FUV e raios cósmicos.

Dentre os sítios citados o meio interestelar (ISM) merece atenção extra, já que ele não é homogêneo intrinsecamente e também não o é em cada fase. A maior parte dos processos físicos que o grão sofre é no ISM, gerando sua alteração, coagulação, destruição e depleção. Seu ambiente geralmente é decisivo para determinar suas propriedades, como a distribuição de tamanho, composição e massa da poeira. A modelagem deste tipo de evento é bastante complexa, visto que é necessário reproduzir objetos bastante variados.

No meio neutro e morno os grãos são processados pelas fortes ondas de choque de SNe, onde o gás quente pode expulsar átomos do grão. No gás quente, colisões de grãos em alta velocidade podem estilhaçar, vaporizar ou ocasionar alguma mudança de fase neles. No meio difuso e nuvens moleculares colisões podem levar à coagulação de grãos pequenos em grãos maiores e a destruição do grão é menos provável. Porém, nas proximidades de

estrelas jovens e protoestrelas o grão pode ser evaporado também. É importante destacar que um grão tem um tempo de ciclo de vida médio no ISM de $\approx 3 \times 10^7$ anos e que mesmo nos ambientes frios os grãos são processados, destruídos e coagulados.

Os gelos podem ser processados por UV e raios cósmicos, ao invés de ser destruídos, formando também compostos mais complexos se a intensidade de ambos não for excessiva. Embora falte evidências experimental para esse processo e sua possível importância, observações o apoiam moderadamente. De qualquer forma, gelos de água e amônia reagindo com grãos PAHs são uma fonte promissora de crescimento da complexidade molecular, principalmente para moléculas pré-bióticas, visto que os quatro elementos mais importantes para a vida estão presentes.

2.2.3 Constituintes principais

Quando se estima a abundância de alguns elementos baseado em linhas de absorção se encontra que muitos elementos possuem abundância suprassolar ou de estrelas próximas. Presume-se que essas diferenças se devam devido ao material sólido (poeira) não mensurável por esse método (embora ainda deva se considerar o tipo da estrela usada para comparar).

Geralmente a fração de massa total de poeira pela de hidrogênio é inferior a 10^{-2} , aqui é preciso lembrar que a massa do ^{12}C é 12 vezes maior que do hidrogênio, ou seja, a razão por número de átomos é ainda inferior. Por exemplo, com exceção do carbono, supondo que todo o elemento pesado está na forma de poeira e eles sempre são óxidos, ainda assim apenas cerca de 20 % do oxigênio atômico estaria envolvido.

Gases nobres, nitrogênio, zinco e enxofre são espécies que geralmente estão na forma gasosa. Refratários geralmente encontram-se na forma de poeira. A depleção de alguns desses refratários é muito eficiente (cálcio e alumínio são depletados por um fator de magnitude 3), o que indica a ação de um processo bastante eficiente no ISM.

Geralmente assume-se como componentes dominantes grafite, PAHs e silicato. Eles assim como gelos serão tratados separados. Os demais componentes relevantes são:

- Carbonos amorfos: Grãos de carbono não organizados de um modo específico e variável de grão para grão. Devem responder pela *feature* a $3.4\mu\text{m}$, causado por uma ligação alifática C-H. O tamanho destes grãos não é muito bem definido, porém se ele contribui para o *bump* de 2175\AA deve ter raio em torno de 50\AA à 200\AA .

- Diamante: Grão homonuclear e sem modos de vibração no IR, embora apresente

pequena atividade próximo ao pico de sua distribuição de fônons por volta de $5\mu m - 8\mu m$. Impurezas, como o H, podem induzir emissão no IR medível por volta de $3.4\mu m$. Essa espécie é encontrada em apenas alguns ambientes (como o circunstelar), porém pode ocorrer dela não poder ser detectado em outros ambientes por conta de estar desidrogenada.

-Nanopartículas de silício: Este grão possui diâmetro entre 15Å e 50Å e é formado por um núcleo de silício coberto por um manto de SiO.

-Carbonáceo: Encontrado em algumas estrelas AGB ricas em C devido a linha $11.3\mu m$ de SiC, porém não foi encontrado no ISM. Algumas AGB de baixa metalicidade apresentam linha próximo à $21\mu m$ atribuída à TiC, porém também não foi observado no ISM.

Vale mencionar também estudos em poeira estelar condensada em meteoritos carbonáceos que, usando diversas técnicas de extração, traçam a história isotópica do sítio de formação da estrela que o gerou. As anomalias isotópicas frequentemente excedem ordens de magnitude e provavelmente refletem a composição isotópica do material que formou o meteorito, embora os grãos devam ter sido profundamente alterados e apenas grãos resilientes devem ter sobrevivido o que dificulta esse tipo de análise.

2.2.3.1 Silicatos

As largas linhas de absorção em $9.7\mu m$ e $18\mu m$ são atribuídas à ligação Si –O dos silicatos astronômicos. Geralmente são assumidos como amorfos (cristalização inferior à 5×10^{-3}), embora comumente se adote algumas composições cristalinas, como $(Mg, Fe)_2SiO_4$, $(Mg, Fe)SiO_3$ e SiO_2 , para descrever esses grãos. Tanto sua composição como abundância são variadas, o que ameniza o problema da super abundância de Si, estimada com base na profundidade óptica de seus *features*, em relação ao Sol.

São os primeiros candidatos a autores da polarização no visível, devido às suas propriedades dielétricas. A linha de absorção em $9.7\mu m$ polarizada dicroicamente suporta esta afirmação e cria vínculos importantes para a caracterização da distribuição de tamanho de seus grãos.

2.2.3.2 Grafite

O grafite (assim como o diamante) é um estado alotrópico do carbono. Possui fortes transições de ressonância por volta de 2000Å devido a ligações aromáticas. Esse tipo de transição possui a posição do pico da ressonância bastante sensível ao tamanho, formato,

presença de coberturas e constantes ópticas do grão, de forma que seu efeito é percebido na curva de extinção devido ao *bump* em 2175\AA , o que indica grãos esféricos de 200\AA ou elipsoides prolatos de 30\AA e razão axial de 1.6.

Sua estrutura é “laminar”, ou seja, o grafite é formado por “folhas aromáticas” ligadas e sobrepostas (ver figura 2.2), o que a torna a forma alotrópica mais mole do carbono. Possui propriedades próximas à (semi)metais por ser bom condutor. É um bom absorvente de luz, de forma que não produz polarização. Porém, impurezas (H) podem “quebrar” suas características metálicas e causar polarização, o que ocorre com o Carbono hidrogenado amorfo (HAC, *Hydrogenated amorphous carbon*).

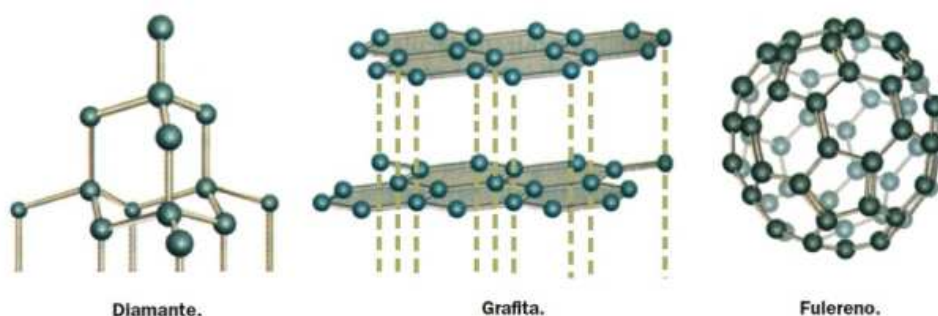


Figura 2.2: Estados alotrópicos do carbono. Da esquerda para a direita: diamante, grafite e fulereno. Tanto o diamante quanto o fulereno formam estruturas compactas e duras, enquanto a estrutura laminar do grafite lhe concede maior moleza e maleabilidade.

2.2.3.3 Gelos

A principal banda observada é a de O–H em $3.1\mu\text{m}$ associada ao gelo d’água. Há outras bandas de gelo relacionadas a CO, CH₄, NH₃ e CH₃OH, *features* não identificados em $6.1\mu\text{m}$ e $6.8\mu\text{m}$, uma banda em $15.2\mu\text{m}$ associada ao CO₂ e uma banda $4.62\mu\text{m}$ atribuída à ligação C≡N de um composto XCN (“X” corresponde à algum grupo ainda não certamente identificado, embora Soifer et al. (1979) e Mispelaer, F. et al. (2012) (assim como diversos outros autores) adotem OCN₋ para explicar a banda).

Abaixo de 17K o CO pode condensar como uma “geada” sobre grãos de poeira (embora essa temperatura possa ser maior dependendo da energia de ligação com o grão, ainda incerta, e se a superfície na qual ocorrerá a condensação é gelo de água ou gelo nu, onde pode condensar à $T > 25\text{K}$, Favre et al. (2013)).

2.3 PAHs

Os PAHs são moléculas orgânicas compostas por carbono e hidrogênio organizadas em anéis benzênicos. São moléculas planares e possuem diversas propriedades de grãos (e também algumas distintas). Acredita-se que estas moléculas são responsáveis pelas onipresentes Bandas Aromáticas no infravermelho (AIBs, *aromatic infrared bands*).

As AIBs são geralmente muito proeminentes e características. Ambientes com grande intensidade de radiação dura podem dissociar ou depletar estas moléculas, mesmo elas possuindo grande resiliência, inclusive ao FUV. Com isso fenômenos e ambientes com distintos eventos podem ser estudados e discriminados, tanto no ISM quando em astronomia extragaláctica. Por tais propriedades, elas são frequentemente usadas no estudos de *starbursts* e por consequência de AGN, pois as suas linhas são quase ausentes nestes e proeminentes naqueles e ambos os fenômenos ocorrem juntos num mesmo objeto com bastante frequência.

Embora sua presença no meio interestelar não seja consenso, ele é considerado um dos principais constituintes do ISM. Há quem argumente em favor dos HACs (Carbono Hidrogenado Amorfo, em inglês *Hydrogenated Amorphous Carbon*), porém a coexistência de ambos é a mais provável alternativa, visto que o ISM deve abrigar uma grande variedade de grãos e moléculas. Um dos argumentos frequentes é a não detecção unívoca de uma molécula, o que decorre da provável presença de diversas espécies de PAHs ocupando o mesmo ambiente, causando a superposição de linhas. Uma biblioteca com cerca de 30 espécies quaisquer representa muito bem a variedade de objetos encontrados no ISM.

2.3.1 O que são?

A habilidade de formar longas cadeias acoplada à tetravalência do carbono permite que ele forme virtualmente infinitos compostos distintos. Isso fica muito claro quando se observa a variedade de proteínas existentes no planeta Terra e a predominância do número de compostos orgânicos sobre os inorgânicos no ISM (basicamente a química orgânica é a química do carbono).

Moléculas orgânicas formadas por carbono e hidrogênio são chamadas hidrocarbonetos. Na presença de outros elementos existe um grande número de funções orgânicas (na presença de oxigênio existem as funções álcool, cetona, ácido carboxílico, éter, entre outras, na presença de nitrogênio amidas, aminas, entre outras, ainda existem funções ligadas aos

halogênios, enxofre, fósforo entre outros).

É comum também moléculas poliatômicas complexas de elementos variados, como é o caso das bases nitrogenadas, constituintes do DNA e RNA, que são formadas por 4 elementos distintos (C, H, N, e O), exceto a Adenina, que não possui O. Porém, mesmo os hidrocarbonetos formam estruturas grandes e complexas, podendo ser alifáticas (estruturas lineares ou ramificadas abertas) ou cíclicas (quando a cadeia se fecha em si mesma, sem fim ou começo), saturadas (carbonos sem ligações duplas) ou insaturadas (carbono com ligações duplas). Os aromáticos são hidrocarbonetos cíclicos insaturados formados por seis átomos de carbono arranjados de modo hexagonal chamado de anel benzênico (ou anel aromático ou simplesmente anel). A figura 2.3 ilustra alguns arranjos aromáticos possíveis, como ramos alifáticos, aglomerados compactos de PAHs ou estruturas formadas por um grupo compacto de anéis e outro ramificado.

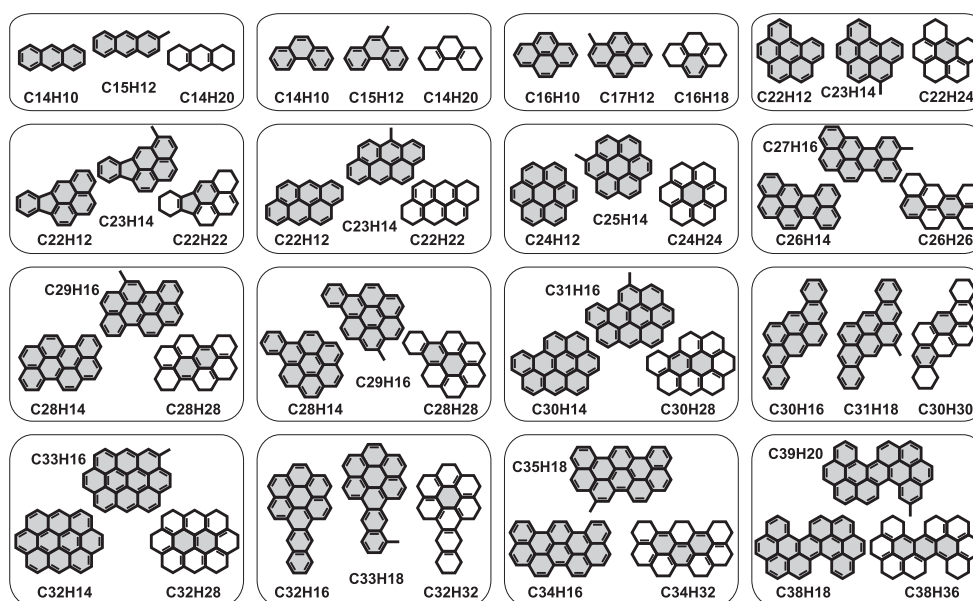


Figura 2.3: Diversos modelos de moléculas aromáticas com usa fórmula molecular. Nota-se que a fórmula da molécula é dependente do arranjo de seus anéis, o que também altera algumas propriedades químicas. Retirado de Steglich et al. (2013).

Os anéis também podem se ligar de diversos modos formando aromáticos policíclicos, os quais podem ser muito variadas. Os aromáticos policíclicos são uma família de moléculas e macromoléculas planar que podem ser pericondensados (quando alguns átomos de carbono pertencem a três anéis), catacondensados (nenhum átomo de carbono pertence a três anéis) e os que são ligados por estruturas alifáticas. A figura 2.4 ilustra alguns exemplos de moléculas pericondensadas e catacondensadas. É interessante notar em 2.3 que algumas

moléculas podem ser formadas por parte pericondensada e parte catacondensada.

O tamanho destas estruturas e formato podem variar muito, desde o mais simples com seis átomos de carbono e seis de hidrogênio, o benzeno (C_6H_6), passando pelo coroneno ($C_{24}H_{12}$) e estruturas com muitos carbonos (centenas) tratadas aqui genericamente de aglomerados. A variedade existe mesmo para moléculas com a mesma fórmula (mesmo número de carbonos e hidrogênios), pois a forma de arranjo dos átomos é diferente. Este fenômeno presente na química orgânica chama-se isomeria e ocorre até entre duas moléculas (isômeros) de funções distintas.

Salama et al. (1996) calcularam 43 isômeros de PAHs compostos por um número entre 20 e 24 carbonos, com cerca de 11 moléculas estáveis e para essas moléculas as propriedades geométricas são tão decisivas quanto o número de carbono e hidrogênio. Essas moléculas ainda podem estar acoplados a radicais que não necessariamente orgânicos, o que torna quase virtualmente infinita a variedade possível.

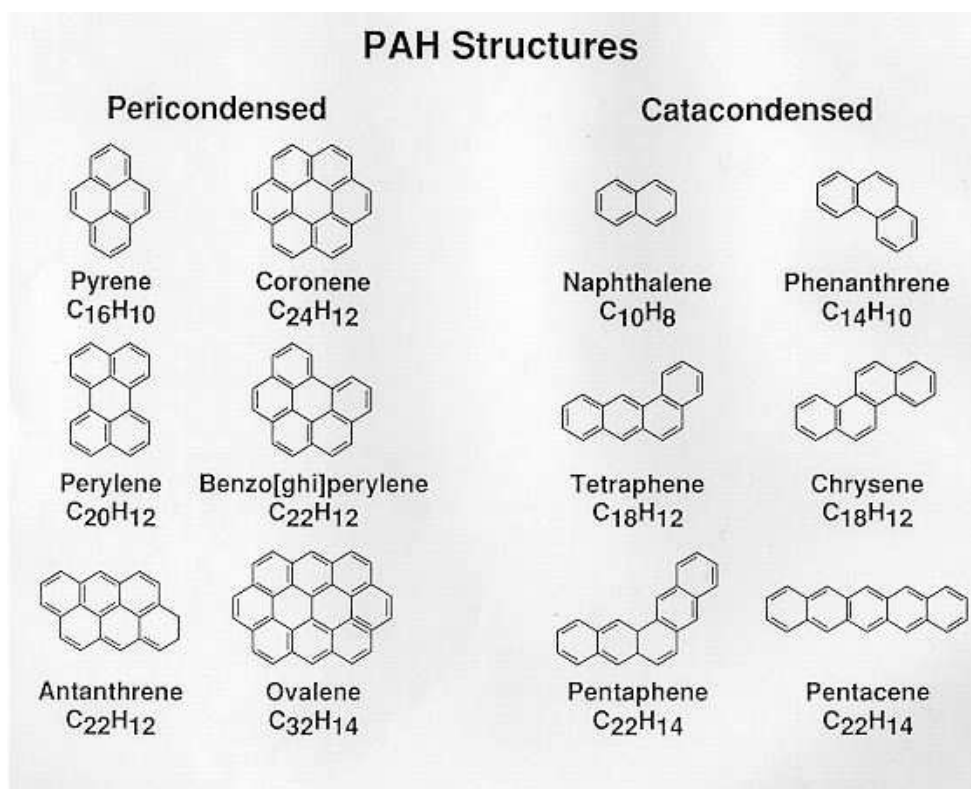


Figura 2.4: Estrutura dos PAHs pericondensados (direita) e catacondensados (esquerda), tipos mais relevantes para este trabalho. Retirado de Salama et al. (1996).

2.3.2 Propriedades

Os PAHs podem ser caracterizados pelo número de carbono, hidrogênio, pela estrutura e por seu grau ionização. A geometria das moléculas pericondensadas é bem descrita por um disco, de forma que é possível atribuir um raio e uma seção de choque geométrica. Já no caso das catacondensadas não é possível fazer alguma aproximação similar, visto que pode ser cadeias “lineares” de anéis aromáticos.

A forma hexagonal do anel aromático amortece e distribui a energia da radiação UV pelas diversas ligações. O amortecimento é mais eficiente nas moléculas policíclicas (e ainda maior quando possuem alta densidade de anéis aromáticos) devido a uma maior distribuição da energia absorvida em suas ligações, o que resulta na maior resistência das moléculas com maior número de carbono e pericondensadas.

Uma espécie pequena de PAH neutro absorve UV apenas em regiões específicas. Os processos de desexcitação de modos variados (fluorescência e modos vibracionais no IR, ionização e fotodissociação). Seus níveis de energia dependem do tamanho dos PAHs (porém não ocorre no FUV; nessa faixa as propriedades de absorção são aproximadamente constantes) e para número de carbonos suficientemente grande ($> 10^4$) se torna um grão de grafite com propriedades ópticas de semimetais. Geralmente essas moléculas são semicondutoras e suas propriedades ópticas no UV são dominadas por transições eletrônicas e no IR por transições vibracionais.

Absorção se dá no UV e FUV enquanto a emissão ocorre no IR como regra, porém as escalas de tempo entre ambos os processos são bem distintas. Devido ao seu pequeno tamanho, cada molécula (o mesmo ocorre nos pequenos grãos) responde a fótons individuais o que leva a flutuações de temperatura, ou seja, num mesmo ambiente existe uma grande variação em torno da temperatura de equilíbrio. As flutuações são maiores para pequenos PAHs.

Seus modos vibracionais são muito característicos no IR. Com *features* bem definidos em 3.3, 6.2, 7.7, 8.6 e 11.3 μm devidos ao modo vibracional *bending* (altera o ângulo entre duas ligações; pode ser *in-plane*, quando a vibração se dá no ângulo da molécula, e *out-of-plane*, quando a vibração ocorre fora do plano da molécula) e *stretching* (quando a vibração ocorre longitudinalmente de forma que não se altera o ângulo das ligações mas apenas o comprimento da ligação) de suas ligações C–C e C–H no MIR, os PAHs dominam a emissão

na região entre $2\mu m$ e $20\mu m$. A posição dos picos de seus *features* dependem do formato da molécula, do número de carbono e hidrogênio, do grau de ionização e de possíveis impurezas presentes em sua estrutura. Na prática o que se observa é o espectro resultante da emissão de diversas espécies, neutras e ionizadas, com identificação inequívoca de uma molécula impossível, pois existe a superposição da emissão das diversas espécies e com linhas muito próximas. As características das principais linhas de emissão aromáticas estão sistematizadas na tabela 2.1. Vijh et al. (2005b) e Vijh et al. (2005a) apresentaram identificação tentativa do pireno e do antraceno em *Red Rectangle* pela sua *blue luminescence* (luminescência no azul), porém Mulas et al. (2006) contestou-os e propôs possibilidade de detecção de emissão ro-vibracional no FIR durante seu resfriamento posterior à absorção de um fóton UV.

Tabela 2.1 - Principais *features* dos PAHs.

| Banda | Assinatura |
|------------------|---|
| $3.3\mu m$ | C-H aromático <i>stretching mode</i> |
| $3.4\mu m$ | C-H alifático <i>stretching mode</i> em grupo metil C-H aromático <i>stretching mode</i> em PAHs hydrogenados banda aromática quente C-H <i>stretching mode</i> |
| $5.2\mu m$ | C-H combinado de <i>stretch</i> e <i>bend</i> |
| $5.65\mu m$ | C-H combinado de <i>stretch</i> e <i>bend</i> |
| $6.0\mu m$ | C-O <i>stretching mode</i> (?) |
| $6.2\mu m$ | C-C aromático <i>stretching mode</i> |
| $6.9\mu m$ | C-H alifático <i>bending mode</i> |
| $7.6\mu m$ | C-C <i>stretching</i> e C-H <i>in-plane bending mode</i> |
| $7.8\mu m$ | C-C <i>stretching</i> e C-H <i>in-plane bending mode</i> |
| $8.6\mu m$ | C-H <i>in-plane bending mode</i> |
| $11.0\mu m$ | C-H <i>out-of-plane bending mode</i> , solo, cátion |
| $11.2\mu m$ | C-H <i>out-of-plane bending mode</i> , solo, neutro |
| $12.7\mu m$ | C-H <i>out-of-plane bending mode</i> , trio, cátion (?) |
| $13.6\mu m$ | C-H <i>out-of-plane bending mode</i> , quarteto |
| $14.2\mu m$ | C-H <i>out-of-plane bending mode</i> , quarteto |
| $16.4\mu m$ | C-C-C <i>in-plane</i> e <i>out-of-plane bending modes</i> em anéis "pingentes" |
| <i>Plateaus</i> | |
| 3.2 – $3.6\mu m$ | superposição e combinação de modos, C-C <i>stretch</i> |
| 6 – $9\mu m$ | superposição de diversos C-C <i>stretch</i> e C-H <i>in-plane bend modes</i> ^a |
| 11 – $14\mu m$ | superposição de diversos C-H <i>out-of-plane bend modes</i> ^a |
| 15 – $19\mu m$ | C-C-C <i>in-plane</i> e <i>out-of-plane bending modes</i> |

^a Em aglomerado de PAHs

Os PAHs têm potencial de ionização entre $6eV$ e $7eV$ (varia de espécie para espécie), de forma que em ambientes intensos em UV os PAHs geralmente estão ionizados. Suas emissões no IR são bastante dependentes do grau de ionização e suas reações de ionização e neutralização influenciam bastante no estado de cargas do gás, principalmente quando o PAH é ânion.

Como já discutido, diversos trabalhos indicam diferenças nas linhas de PAHs conforme o ambiente. O modo mais usual de discriminar entre AGNs e *stars burst* é por diagramas de cores. Porém, com bastante frequência ambos os eventos ocorrem juntos, o que torna o método das cores dúbio. Uma alternativa tem sido a análise do MIR, principalmente na região das AIBs, onde há diferenças substanciais na emissão.

Primeiramente, a forma do contínuo é diferente em AGNs e *stars burst*, sendo que neste ele é menos inclinado que naquele devido ao campo dos AGNs serem mais "duros" que os do *star burst* o que torna mais intensa emissão de poeira quente. Outra característica é a quase ausência de linhas de PAHs em AGNs e grande intensidade em *stars burst*, talvez devido à destruição destas moléculas, talvez devido à depleção no toróide. Porém essa análise ainda não é consensual.

2.3.3 Heterocíclicos

O meio interestelar é repleto de diversas espécies que sofrem constantes reações, de modo que "impurezas" podem aparecer em diversas estruturas. PAHs podem conter outros elementos em sua estrutura, neste caso são chamados de heterocíclicos. Essas moléculas tendem a ser mais instáveis pois o átomo "intruso" não permite o amortecimento do fóton de UV, o que leva à quebra da molécula. Cada átomo intruso enfraquece mais a cadeia.

Peeters et al. (2005) analisa a resiliência de alguns heterocíclicos nitrogenados (PANHs): o benzeno (hidrocarboneto), a piridina, pimidina e triazina, com zero, um dois e três nitrogênios, respectivamente, dentro de um anel benzênico 2.5. A resiliência medida era sempre menor para a molécula mais nitrogenadas, causando a dissociação precoce das mesmas. Os PANHs não são estáveis nem no ISM nem no sistema solar a uma distância de 1UA, porém, como Peeters mesmo argumenta, com exceção da triazina, essas moléculas podem ser formadas e carregadas até o interior da nuvem molecular onde o UV não alcança e sobreviver por longos períodos de tempo.

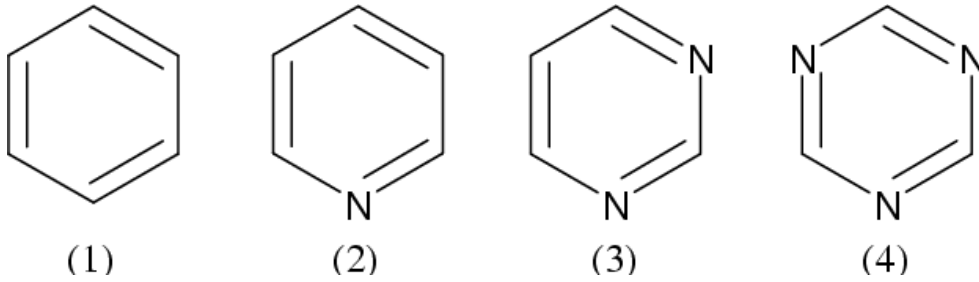


Figura 2.5: Exemplos de PAHs. 1. benzeno (0 N); 2. piridina (1 N); 3. pirimidina (2 N) e 4. 1,3,5, triazina (ou s-triazina). Retirado de Peeters et al. (2005).

Hudgins et al. (2005) estuda o efeito dos heterocíclicos nas linhas de PAHs e conclui que PANHs deslocam o pico da linha de $6.2\mu\text{m}$ para o vermelho e que heterocíclicos podem gerar assimetrias detectáveis nas linhas além da impossibilidade dos PAHs responderem sozinhos por alguns picos observados.

Outros átomos que não o nitrogênio podem compor o heterocíclico como o oxigênio, ferro e enxofre, e algumas dessas espécies foram encontradas em meteoritos (Materese et al., 2015) (Ehrenfreund et al., 2006). Porém em ambientes astrofísicos variados os PAHs são os mais proeminentes, tanto por resiliência quanto por interesses astrobiológicos.

Embora o ISM (exceto as nuvens moleculares) seja um ambiente hostil para essas moléculas, cometas e meteoritos podem abrigá-las e hospedarem reações importantes com água e demais moléculas.

2.3.4 Astrobiologia

O estudo dos PAHs possui importância em diversos contextos astrofísicos e em *redshifts* distintos (Riechers et al., 2013). Seja no estudo da química de PDRs e ISM (Goicoechea et al., 2009), nas propriedades de AGNs (Farrah et al., 2010), *star bursts* (Farrah et al., 2008), ULIRGs (Yan et al., 2005), LBGs (Siana et al., 2009) mas também em astrobiologia.

Sua fotoquímica gera uma grande variedade de compostos orgânicos. Se for um heterocíclico ou na presença de gelos, podem se formar moléculas orgânicas bastante ricas (como a formamida). Os PAHs são vistos como um dos grandes enriquecedores do ISM e com grande potencial prebiótico, principalmente na presença de gelos.

Os heterocíclicos também são muito estudados já que muitas moléculas bióticas importantes são formadas a partir deles, como é o caso das bases nitrogenadas que compõem o DNA. A Timina, Uracila e Citosina são constituídas a partir da pirimidina (por isso

recebem este nome também), enquanto a Adenina e a Guanina são construídas a partir da purina (por isso são chamadas de púricas) que consiste em uma pirimidina acoplada à um heterocíclico de 3 carbonos e 2 nitrogênios em formato pentagonal (piridina acoplada a um anel imidazólico). As nucleobases são compostas majoritariamente por carbono, nitrogênio e hidrogênio (ver figura 2.6). Os PAHs são importantes moléculas biogênicas.

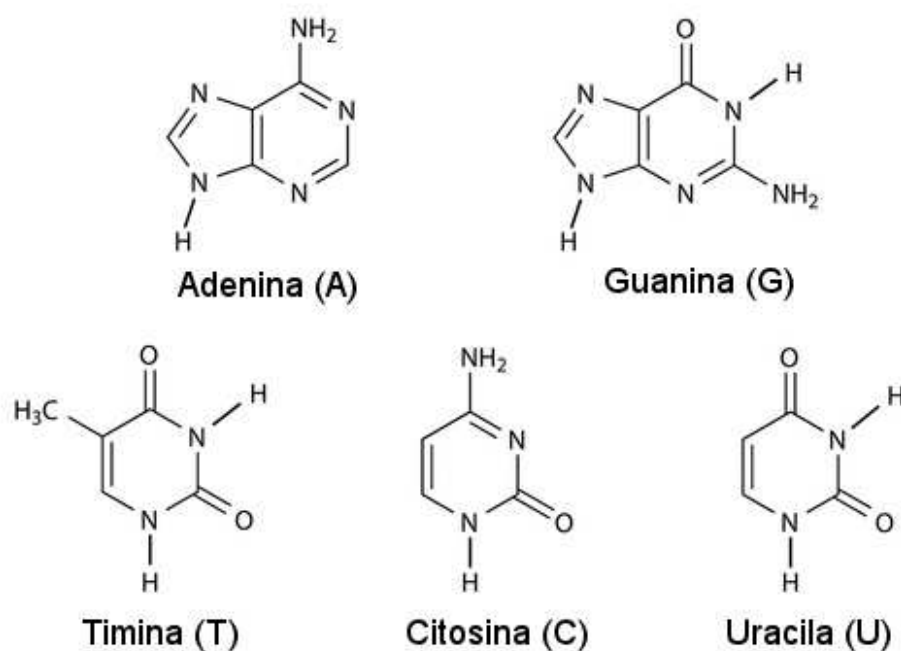


Figura 2.6: As bases formadas por uma purina (piridina acoplada a um anel imidazólico): Adenina e Guanina. Bases formadas por uma pirimidina: Timina, Uracila e Citosina.

Por fim, os próprios PAHs possuem potencial biogênico, pois podem tanto formar estruturas como vesículas (necessárias para “compartimentalizar” a vida) quanto podem armazenar informações (formar um código genético). O material genético primordial das espécies terrestres pode não ter sido o DNA, mas sim o RNA, numa época chamada *RNA World* (Mello e Conte, 2004), porém ainda antes pode ter havido o *Aromatic World* (Ehrenfreund et al., 2006), onde os PAHs dominavam. Embora seja formado apenas por dois elementos é possível formar diversos compostos e estruturas (como os PANHs), cumprindo os pré-requisitos para armazenar informações.

Modelização

A fim de estudar a presença de PAHs tanto no Universo jovem quanto no atual utilizamos o modelo quimiodinâmico de Friaça & Terlevich, já usado para investigar AGNs em galáxias jovens, Blue Core Spheroids, Lyman Alpha Systems, galáxias anãs esferoidais e para testar vínculos e limites para modelos cosmológicos. O modelo simula a evolução de uma galáxia desde o seu nascimento até alguns bilhões de anos no futuro, provando ser uma excelente ferramenta para tratar a evolução da poeira, principalmente suas características e seus efeitos em galáxias jovens e atuais. O modelo acopla um modelo hidrodinâmico, multizonal de evolução galáctica considerando a evolução do gás, um halo de matéria escura, formação estelar e a evolução das mesmas, os elementos produzidos em cada geração de estrelas e o conseqüente enriquecimento do ISM pelos metais ejetados no estágios finais de evolução estelar. As SEDs (Distribuição Espectral de Energia, do inglês *Spectral Energy Distribution*) resultantes também são calculadas, levando em conta o crescimento da metalicidade decorrente de cada geração estelar, partindo de metalicidade zero até os dias atuais.

Acoplado à ele está uma interface que simula uma distribuição de poeira em telas, calculando o transporte de energia em um ISM composto por meio difuso e nuvens moleculares, sendo estas localizadas nos sítios de nascimento das estrelas. Efeitos da absorção e do espalhamento causados pelos grãos estão presentes nesta interface. A distribuição do tamanho dos grãos segue o modelo clássico MNR.

Nossos PAHs são constituídos por 8 espécies pericondensadas (família mais compacta e resistente) de tamanhos para representar a variedade de espécies presentes em ambientes astrofísicos. As flutuações de temperatura que essas moléculas sofrem devido à interação com fótons energéticos individuais são consideradas, assim como o grau de ionização.

Para ilustração do código criou-se um modelo de galáxia (*galáxia fiducial*) com $2 \times 10^{11} M_{\odot}$ que será usada nessa seção para representar o funcionamento do código.

3.1 Modelo Quimiodinâmico

Nosso modelo acopla um modelo hidrodinâmico multizonal (100 zonas) e unidimensional de evolução do gás com dados de evolução estelar de diversas gerações. Ele segue receitas de nucleossíntese estelar dependente da massa e da metalicidade da estrela, considera a produção de grãos em diversos sítios e computa a SED resultante. Friaca e Terlevich (1998) investigaram a relação entre jovens elípticas e QSO, em Friaca e Terlevich (1999) e Friaca e Terlevich (2001) foram estudadas, respectivamente, LBGs e BCSs (*Blue Core Spheroids*), Lanfranchi e Friaca (2003) estudaram DLAs (*Damped Lyman Alpha Systems*) como galáxias anãs, acoplamento entre AGN e esferóide Archibald et al. (2002) e Rosa-Gonzalez et al. (2004) investigaram fontes submilimétricas. O modelo também foi usado para determinar a idade de quasares à alto *redshift*, impondo limites para os parâmetros dos modelos cosmológicos (Friaca et al., 2005). Por fim, ele auxiliou nas investigações das abundâncias de zinco em gigantes vermelhas da galáxia, comparando-as a observadas em DLAS (Barbuy et al., 2015).

3.1.1 Modelo hidrodinâmico

O modelo é esférico e unidimensional, preenchido inicialmente por um gás. A evolução hidrodinâmica de tal sistema é dada pela solução das equações de massa (3.1), momento (3.2) e energia (3.3)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \rho u)}{\partial r} = \alpha \rho_* - \nu \rho \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial r} - \frac{GM}{r^2} - \alpha \frac{\rho_*}{p} u \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + u \frac{\partial U}{\partial r} = \frac{p}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial r} \right) - \frac{GM}{r^2} - \Lambda \rho + \alpha \frac{\rho_*}{\rho} \left(U_{inj} + \frac{u^2}{2} - U - \frac{p}{\rho} \right), \quad (3.3)$$

as variáveis ρ , u , p , U e U_{inj} representam, respectivamente, a densidade, velocidade, pressão, energia interna específica do gás e a energia injetada por SNe e por estrelas

evoluídas. Os termos Λ , ρ_* , ν e α são, respectivamente, a função resfriamento, densidade de massa estelar, formação estelar específica e taxa de retorno do gás. A energia interna específica é dada pela equação de estado para os gases ideais $U = (3/2)p/\rho$ e a energia injetada, U_{inj} , é dada por:

$$U_{int} = \frac{\alpha_{SNI}E_{SNI}/M_{SNI} + \alpha_{SNI}E_{SNI}/M_{SNI} + \alpha_*U_{inj,*}}{\alpha} \quad (3.4)$$

onde $\alpha_{SNI}, \alpha_{SNI}$ e α_* são, respectivamente, as taxas de retorno de gás por SNeI, SNeII e pela perda de massa estelar quiescente e $\alpha = \alpha_{SNI} + \alpha_{SNI} + \alpha_*$. E_{SNI} e M_{SNI} e E_{SNI} e M_{SNI} são a energia cinética e a massa injetadas por SNeI e SNeII, respectivamente.

O gás injetado pelas estrelas por ventos estelares ou nebulosas planetárias é tido como termalizado à temperatura dada pela dispersão de velocidades estelares, portanto, $U_{inj,*} = (3/2)\sigma_*^2$, onde σ_* é a dispersão de velocidades das estrelas.

A massa total do sistema é composta por três componentes: a massa de gás bariônico (M_g), massa estelar (M_*) e a massa do halo de matéria escura (*dark halo*, M_h). Inicialmente existe apenas gás bariônico e matéria escura (apenas hidrogênio e hélio, sem metais; $X = 0.76$, $Y = 0.24$ e $Z = 0.00$), porém enquanto a galáxia evolui devido ao potencial gravitacional, ocorre a fragmentação da nuvem e a formação estelar.

A massa estelar e de gás se intercambiam, com o processo de formação estelar e ejeção de material no meio interestelar devido à atividade estelar. Estrelas de baixíssima massa aprisionam grande parte do gás definitivamente devido ao longuíssimo tempo que vivem. A matéria escura interage apenas gravitacionalmente, e possui uma distribuição de massa estática, descrita por:

$$\rho_h(r) = \frac{\rho_{h0}}{1 + (r/r_h)^2}, \quad r \leq r_t, \quad (3.5)$$

onde $\rho_h(r)$ é densidade do halo, ρ_{h0} a densidade central do halo, r_h o raio de *core* e r_t o raio de maré da galáxia.

As equações hidrodinâmicas são resolvidas pelo método de Euler de diferenças finitas, com as células espaçadas logaritmicamente, tendo entre 150 e 300 células, sendo a largura da primeira de 50 *pc*. O início da primeira célula é um *input* do código, para podermos estudar possíveis efeitos de AGNs, e o limite da última célula está a dois raios de maré. O código simula a viscosidade de Tscharnuter e Winkler (1979), que se baseia nas equações de Navier e Stokes e se anula em contrações homólogas.

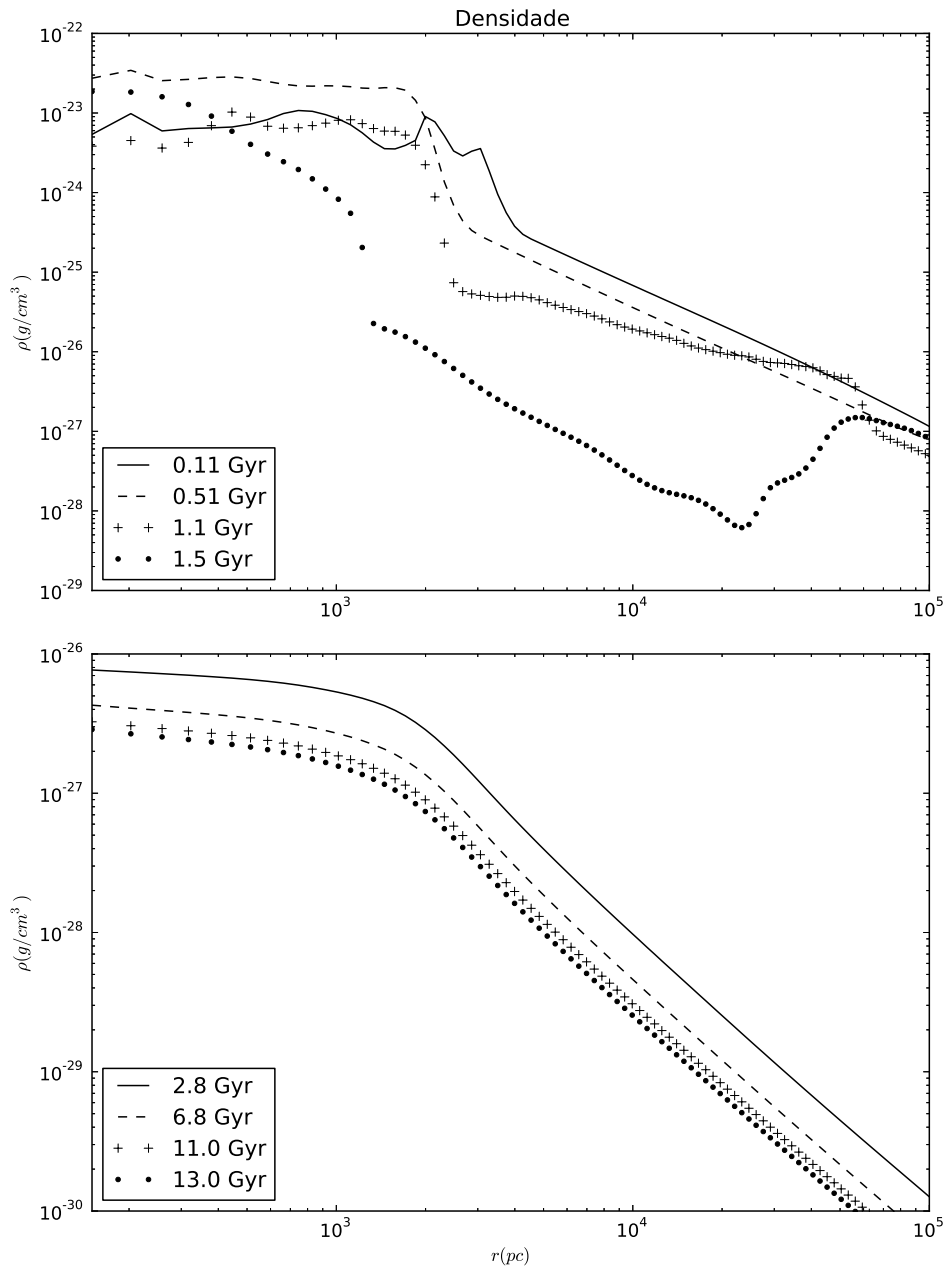


Figura 3.1: Evolução da densidade de gás em função do raio para diversos tempos. No painel superior a linha sólida indica 0.11 Gyr, a tracejada 0.51 Gyr, o + 1.1 Gyr e a pontilhada 1.5 Gyr. No painel inferior a sólida indica 2.8 Gyr, a tracejada 6.8 Gyr, o + 11 Gyr e a pontilhada 14 Gyr. Atenção: o eixo $\rho(r)$ não é igual para o painel superior e inferior.

A figura 3.1 ilustra a evolução do perfil de densidade para nossa galáxia modelo. Inicialmente a densidade de matéria bariônica acompanha a de matéria escura (equação 3.5). A dinâmica do gás e o enclausuramento em estrelas leva à sua rarefação, inicialmente conturbada (painel superior), posteriormente suave. O colapso gera um *inflow* global marcado por um campo de velocidade negativo (ver figura 3.2) no primeiro giga-ano da galáxia, o

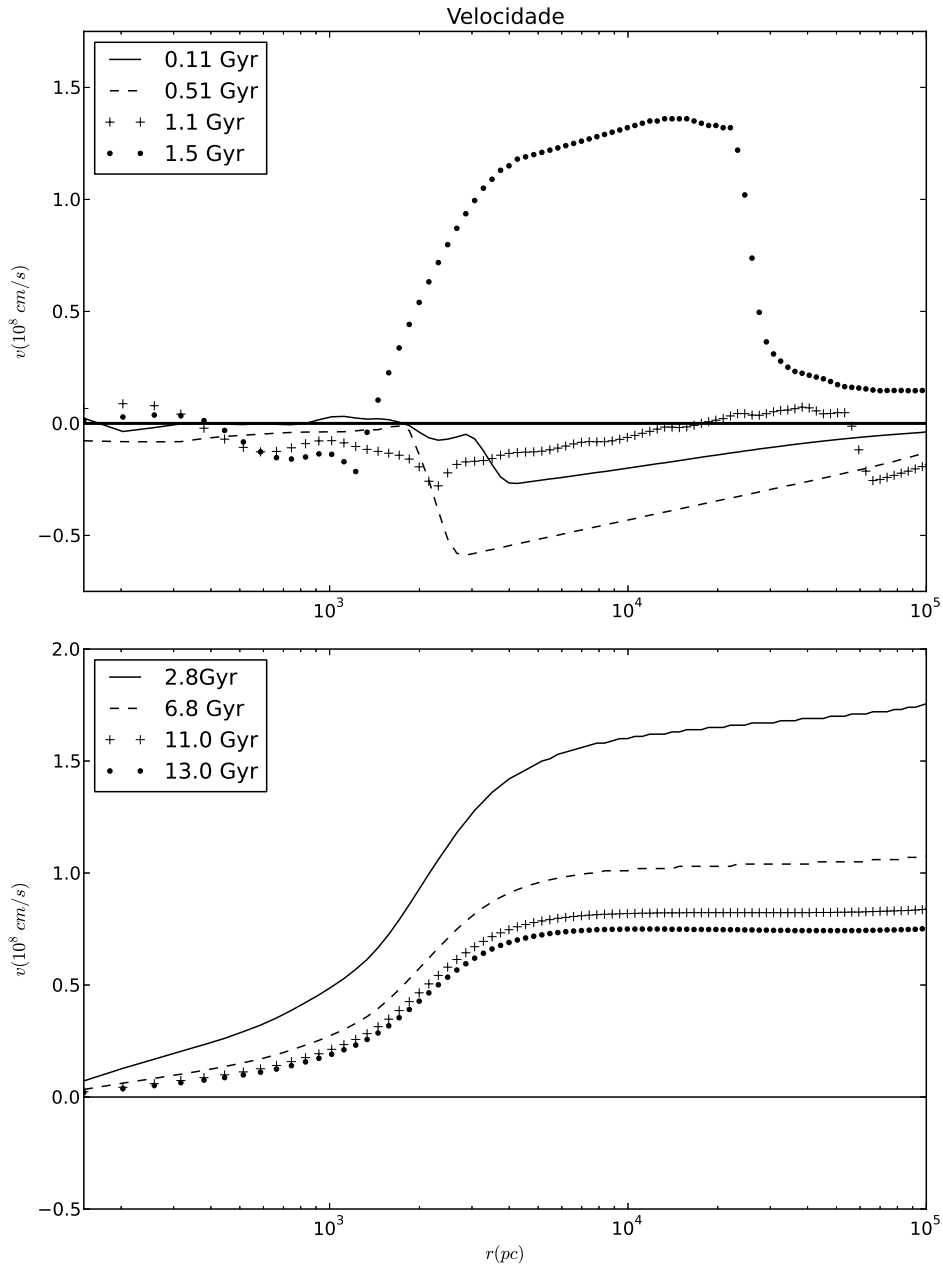


Figura 3.2: Evolução do campo de velocidade do gás em função do raio para diversos tempos. No painel superior a linha sólida indica 0.11 Gyr, a tracejada 0.51 Gyr, o + 1.1 Gyr e a pontilhada 1.5 Gyr. No painel inferior a sólida indica 2.8 Gyr, a tracejada 6.8 Gyr, o + 11 Gyr e a pontilhada 14 Gyr. Atenção: o eixo $v(r)$ não é igual para o painel superior e inferior.

que deve gerar eventos de AGNs seguido por um *outflow* global que perdura por toda a vida da galáxia. Importante lembrar que *infalls* do IGM podem alterar a dinâmica do gás.

Inicialmente o gás se encontra a uma temperatura $T_0 = 10^4 K$ e com $M_* = 0$. A dinâmica e a temperatura do gás evoluem de maneira conturbada no primeiro giga-ano e suave depois (respectivamente painel superior e inferior da figura 3.3). Consideramos

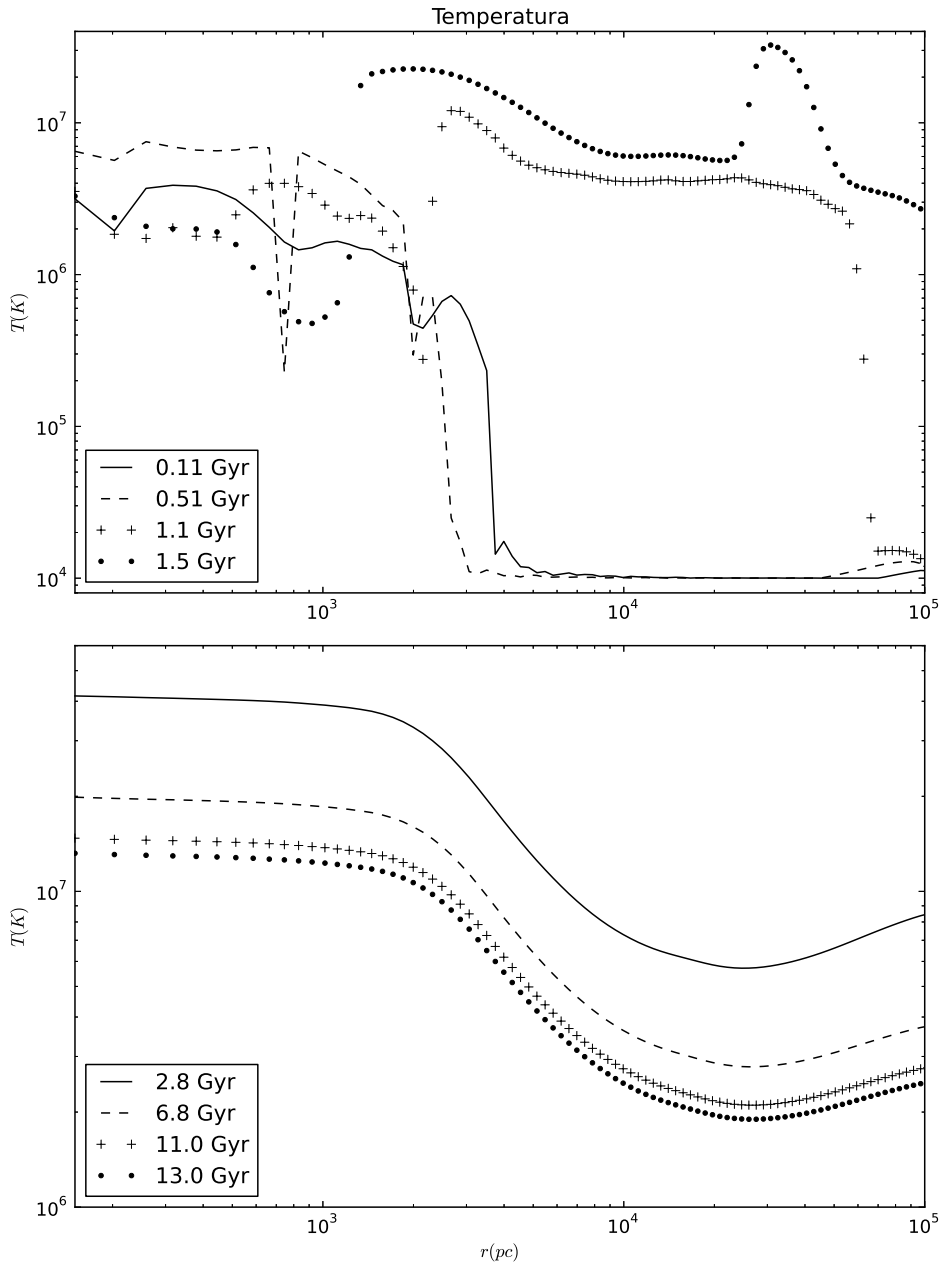


Figura 3.3: Evolução da temperatura do gás em função do raio para diversos tempos. No painel superior a linha sólida indica 0.11 Gyr, a tracejada 0.51 Gyr, o + 1.1 Gyr e a pontilhada 1.5 Gyr. No painel inferior a sólida indica 2.8 Gyr, a tracejada 6.8 Gyr, o + 11 Gyr e a pontilhada 14 Gyr. Atenção: o eixo $T(r)$ não é igual para o painel superior e inferior.

$M_h/M_G = 6$, resultando nos parâmetros de densidade $\Omega_b = 0.043$, para os bárions, e $\Omega_M = 0.3$, para a DM.

A função de resfriamento, $\Lambda(T)$, foi definida de tal modo que $\Lambda(T)\rho^2$ representasse a taxa de resfriamento por unidade de volume. A função de resfriamento é fortemente dependente da abundância química, ou seja, $\Lambda(T)$ assume uma forma diferente para distintas

abundâncias de cada elemento. Por simplicidade, considerou-se apenas O e Fe na determinação de $\Lambda(T)$, já que eles são os principais resfriadores quando $T > 10^5 K$. O modelo considera a variação das abundâncias químicas presente no gás e adota os dados atômicos calculado pelo código AANGABA (Gruenwald e Viegas, 1992) para $\Lambda(T)$. Os elementos considerados na função foram H, He, C, N, O, Ne, Mg, Si, S, Cl, Ar e Fe, todos, a menos de O e Fe, foram normalizados com relação à abundância do O pela seguinte equação:

$$y_i = y_{i,P} + (y_{i,\odot} - y_{i,P})y_0/y_{0,\odot} \quad (3.6)$$

com y_i representando a abundância do elemento de numérica i , $y_{i,P}$ sua abundância primordial, $y_{i,\odot}$ sua abundância solar.

3.1.2 Formação estelar

A taxa de formação estelar é dada por $\psi(r, t) = \nu\rho$, onde ν é a taxa de formação estelar específica (aqui em Gano^{-1}). Utilizou-se a formulação de Schmidt (Schmidt, 1959) (Schmidt, 1963), dada por uma lei de potência da forma:

$$\nu = \nu_{h0} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{n_{sf}} \times b, \quad (3.7)$$

$$b = \begin{cases} (1 + t_{dyn} \max(0, \nabla \cdot u))^{-1}; & \nabla \cdot u > 0 \\ (1 + t_{coo}/t_{dyn})^{-1} & \end{cases}$$

onde ν_0 é a taxa de formação estelar inicial e n_{sf} o expoente do modelo de Schmidt. A função b é o fator de inibição, onde a formação estelar é suprimida se $\nabla \cdot u > 0$, ou seja, se o gás estiver em expansão, ou se o resfriamento é ineficiente, ou seja, se o tempo de resfriamento, $t_{coo} = k_B T / (\mu m_H \Lambda(T) \rho)$ for maior que o tempo dinâmico, $t_{dyn} = (3\pi / (16G\rho))^{1/2}$. Consideramos $n_{sf} = 1/2$ (Larson, 1974).

A distribuição de estrelas segue o perfil de King (3.8), onde ρ_* é a densidade de massa estelar. Este formalismo considera que cada zona estelar formada recentemente se mova radialmente em queda livre ao longo da galáxia. A distribuição estelar também é truncada em r_t , o mesmo do halo de matéria escura (3.5).

$$\rho_* = \frac{\rho_{*0}}{(1 + (r/r_c)^3)^{1/2}}, r \leq r_t, \quad (3.8)$$

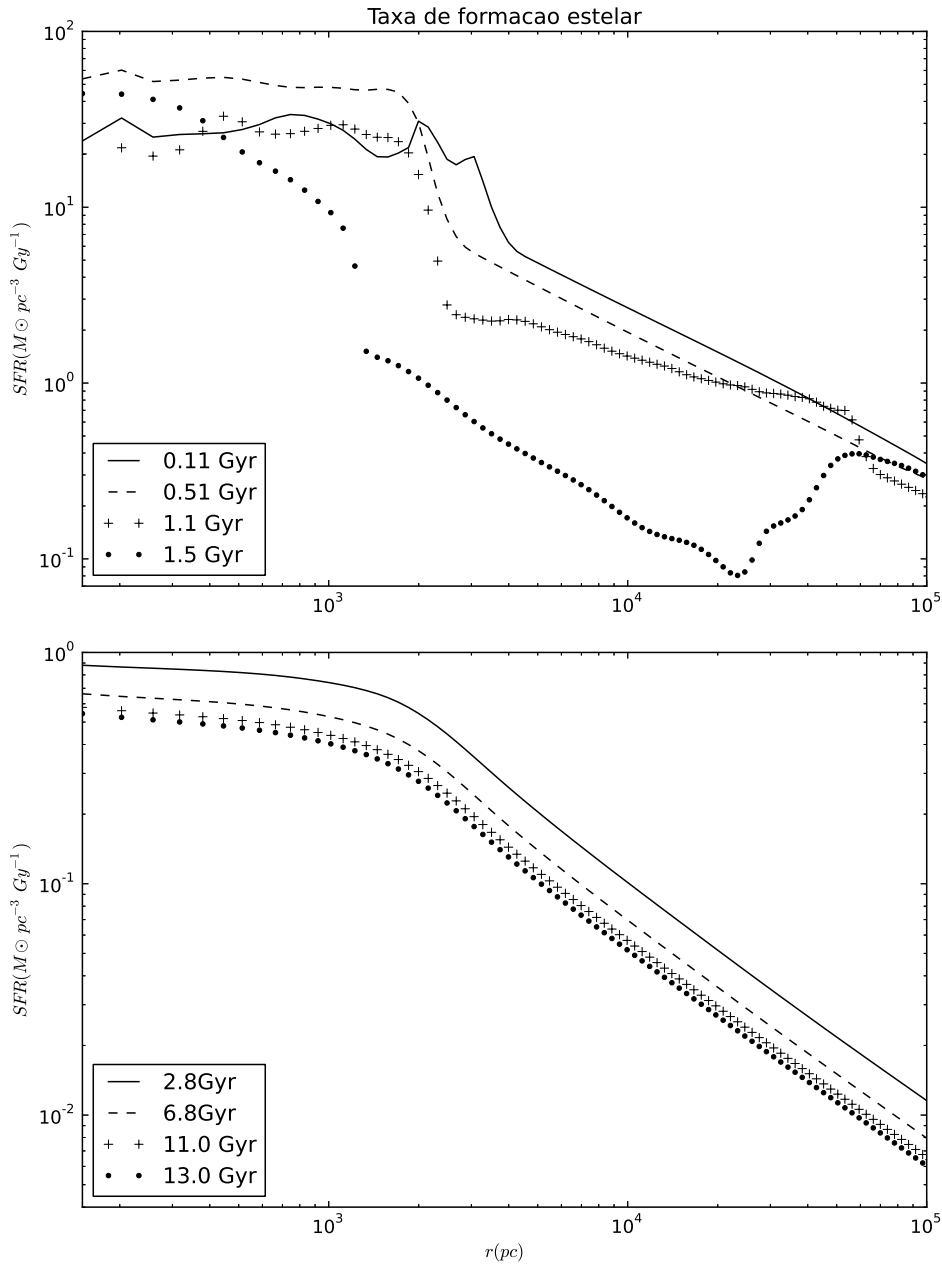


Figura 3.4: Evolução da SFR em função do raio para diversos tempos. No painel superior a linha sólida indica 0.11 Gyr, a tracejada 0.51 Gyr, o + 1.1 Gyr e a pontilhada 1.5 Gyr. No painel inferior a sólida indica 2.8 Gyr, a tracejada 6.8 Gyr, o + 11 Gyr e a pontilhada 14 Gyr. Atenção: o eixo SFR não é igual para o painel superior e inferior.

Consideramos uma IMF invariante no tempo e dada por $\phi(m) = Cm^x$ normalizada no intervalo $0.1 < m < 100M_{\odot}$, onde x é um *input* do programa, preferencialmente $x = 1.35$ (Salpeter). A taxa de formação estelar para uma massa m é dada por $\psi(r,t)\phi(m)$. A SFR está expressa na figura 3.4, onde se nota que ela é muito mais intensa nos primeiros giga-anos e na região central. Após 2.5 Gyr a SFR cai com o tempo e se torna suave com

o raio.

O gás aprisionado nas estrelas é restituído ao meio interestelar após o fim da vida da estrela, porém a taxa de restituição depende da massa estelar. O gás das estrelas de massa muito baixa não é restituído ao meio, pois sua vida é maior que a idade do universo. Mesmo para estrelas de alta massa não se considera restituição instantânea após a supernova, considera-se o tempo de difusão entre a explosão e a restituição do gás.

Estrelas de massa $0.1 < m/M_{\odot} < 8$ terminam suas vidas como nebulosas planetárias e uma anã branca de He ou C–O de massa inferior a $1.4M_{\odot}$. Consideramos supernova Tipo Ib e Tipo II iguais, sendo causadas pelo fim da vida de estrelas de massas superiores a $8M_{\odot}$.

Supernovas Tipo Ia são originadas por sistemas binários de massa total $3 - 16M_{\odot}$, onde a estrela principal é uma anã branca de C–O que atinge a massa de Chandrasekhar devido à transferência de massa da secundária para a anã branca ao acionar a deflagração do carbono (Whelan e Iben Jr, 1973). A fração de massa da IMF capturada em tal sistema foi retirada de Matteucci e Tornambe (1987) e Matteucci (1992).

Uma ressalva importante é preciso ser feita sobre a População III. Acredita-se que as primeiras estrelas deveriam ser muito massivas (algo entre $10^2 - 10^4 M_{\odot}$), devido à dificuldade em perder calor imposta pela metalicidade zero (Nakazato et al., 2006), porém ainda não existe consenso. Esses objetos super massivos devem ter sido um agente importante na reionização (época em que viveram, por volta de $z \sim 10$), porém os objetos mais distantes observados são de $z \sim 6$, por isso ainda não existem dados observacionais sobre a População III e os modelos ainda são especulativos.

Bromm e Loeb (2006) investigando *Gamma-Ray Bursts* (GRBs, Surtos de Raios Gama em português) de alto *redshift* resultantes do que se acredita ser o fim da vida destes objetos, trabalharam com uma IMF tipo Salpeter com limite superior subestimado de $500M_{\odot}$ e limite inferior entre 30 e $100M_{\odot}$. Ohkubo et al. (2006) calculam a nucleossíntese, colapso e explosão desta população para massas de 500 e $1000M_{\odot}$.

A faixa de massa requerida para essas estrelas está muito além da utilizada no modelo. Embora possa ter papel importante na evolução de galáxias, dados sobre a IMF, nucleossíntese, espectro, SNe e vento estelar de tais estrelas ainda não são confiáveis.

3.1.3 Evolução Química

A receita de nucleossíntese estelar para massas intermediárias ($0.8-8M_{\odot}$) são baseadas em Van Den Hoek e Groenewegen (1997), onde se considera a dependência com a metalicidade inicial $Z= 0.001, 0.004, 0.008, 0.02$ e 0.04 , melhoria feita por Lanfranchi e Friaca (2003).

Para estrelas de $m > 8M_{\odot}$ considera-se a síntese de N secundário oriundo do ciclo CNO executado nas camadas do envelope de tais estrelas, a partir do caso B de Talbot e Arnett (1973) (100% de conversão em N dos envelopes de C e O). Enquanto para o intervalo $8 - 10M_{\odot}$ se considera os *yields* de Hillebrandt (1982).

Tanto a SNe II quanto a SNe Ia possuem nucleossíntese dependentes da metalicidade, baseadas em Woosley e Weaver (1995). Foram consideradas estrelas de massa 12, 13,15, 18, 20, 22, 25, 30, 35 e $40 M_{\odot}$ e metalicidade $Z/Z_{\odot} = 0, 10^{-4}, 10^{-2}, 10^{-1}$ e 0. Em Woosley e Weaver (1995), as receitas para SNe oriundas de estrelas com massa $> 30M_{\odot}$ apresentam dependência com a energia cinética no infinito, KE_{∞} , para o pistão da explosão. Para KE_{∞} pequeno há retorno (*fall back*) de parte do material e um buraco negro remanescente, já para grande KE_{∞} não há *fall back* e se ejeta mais Fe (modelos S30B, S35C e S40C). Optamos pelo último caso.

No caso de SNe Ia resultante em anã branca com massa de Chandrasekhar baseou-se na receita de Iwamoto et al. (1999), casos W7 e W70 (repectivamente $Z = 0$ e $Z = Z_{\odot}$).

A relação $M_{inicial}/M_{final}$ para estrelas solitárias com massa na faixa $0.1-8M_{\odot}$ é baseada em Iben Jr e Renzini (1983), deixando uma anã branca após a ejeção de seu envelope em Nebulosa Planetária, enquanto estrelas com massa $> 8M_{\odot}$ explodem em SNe II (SNe Ib e SNeII, aqui tratadas igualmente) e resultam em estrelas de nêutrons de $1.4M_{\odot}$. Considera-se que SNe Ia não deixe remanescentes.

O resultado da nucleossíntese em função do raio está exemplificado nas figuras 3.5 (oxigênio) e 3.6 (ferro) para diversos tempos. Os elementos α (como O, Ne, Mg e Si) são produzidos majoritariamente em queima hidrostática de estrelas massivas, enquanto elementos do pico do Fe (como Ti, Mn, Fe e Zn) são produzidos principalmente em SNe Ia. Calculamos a evolução do He,C,N,O,Mg,Fe Si,S,Ca e Zn.

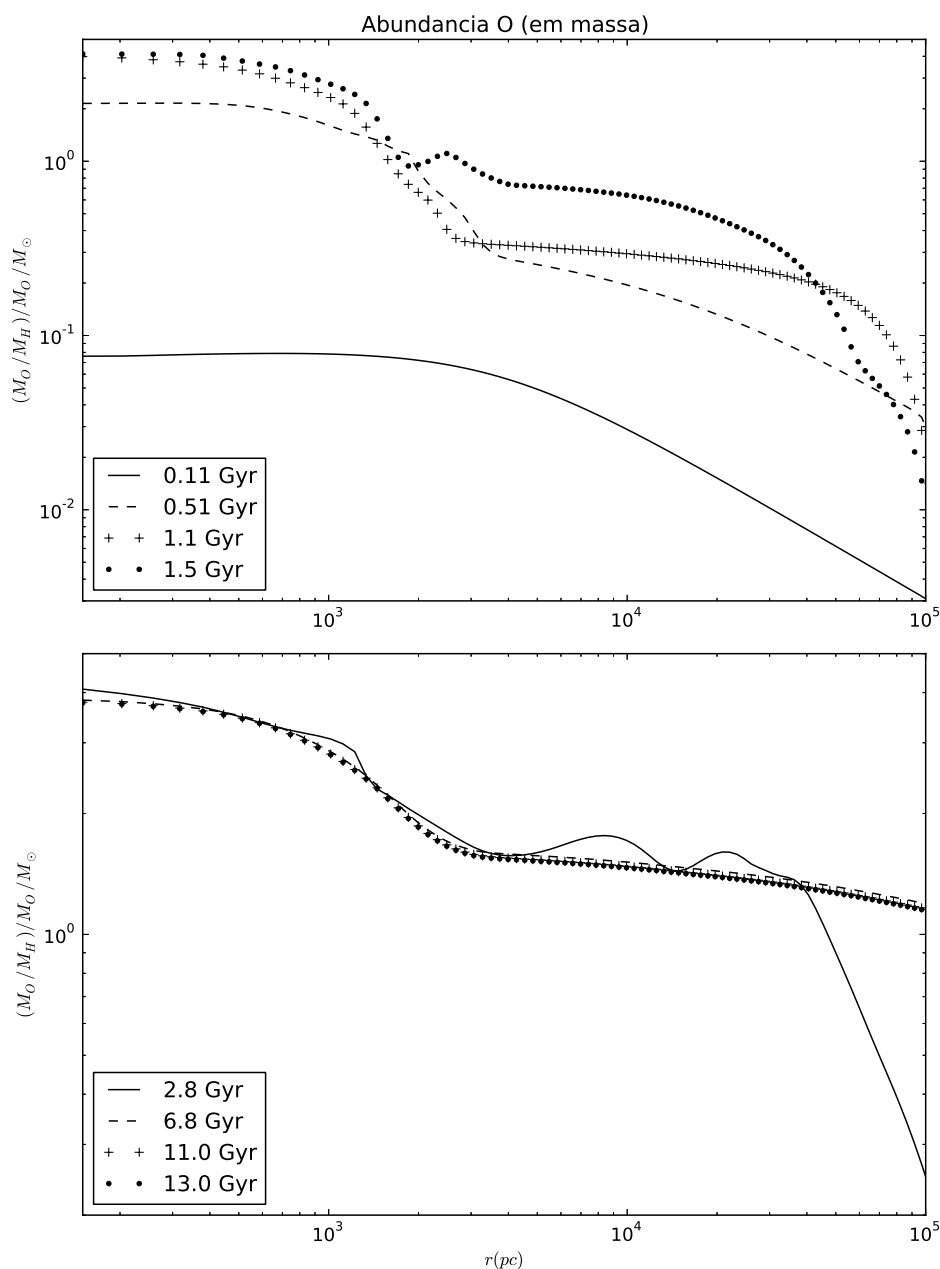


Figura 3.5: Evolução da abundância em massa de O em função do raio para diversos tempos. No painel superior a linha sólida indica 0.11 Gyr, a tracejada 0.51 Gyr, o + 1.1 Gyr e a pontilhada 1.5 Gyr. No painel inferior a sólida indica 2.8 Gyr, a tracejada 6.8 Gyr, o + 11 Gyr e a pontilhada 14 Gyr. Atenção: o eixo da abundância não é igual para o painel superior e inferior.

3.1.4 Emissão Estelar

A síntese espectral estelar é feita com base nas bibliotecas espectrais de Bruzual e Charlot (2003), obtida com a técnica da síntese das isócronas (*isochrone synthesis technique*, em inglês), que computa a evolução da população estelar e da SED resultante de um mesmo

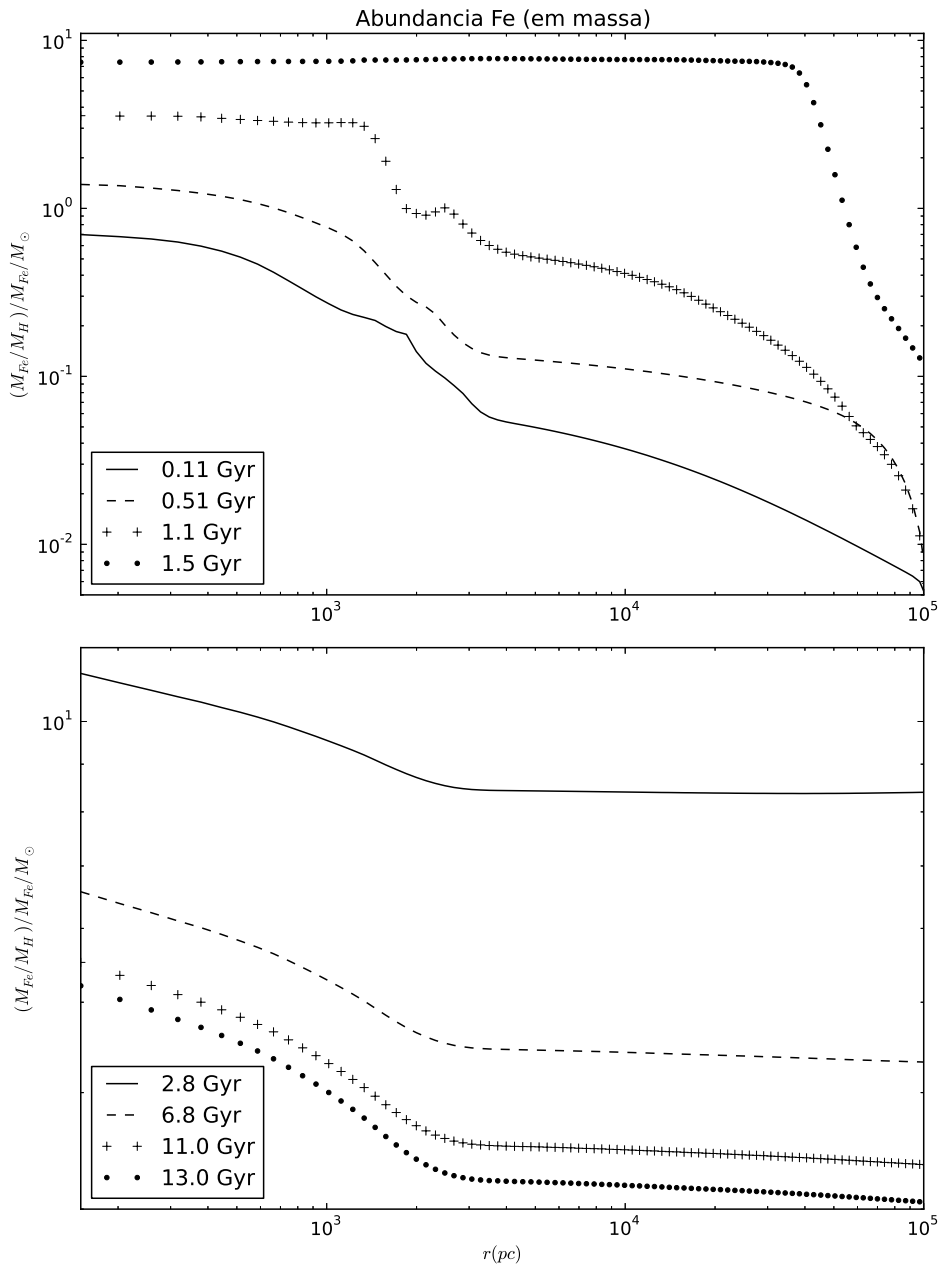


Figura 3.6: Evolução da abundância em massa de Fe em função do raio para diversos tempos. No painel superior a linha sólida indica 0.11 Gyr, a tracejada 0.51 Gyr, o + 1.1 Gyr e a pontilhada 1.5 Gyr. No painel inferior a sólida indica 2.8 Gyr, a tracejada 6.8 Gyr, o + 11 Gyr e a pontilhada 14 Gyr. Atenção: o eixo da abundância não é igual para o painel superior e inferior.

sítio. A técnica se adequa bem às galáxias elípticas e aos aglomerados estelares. A Figura 3.7 ilustra o espectro calculado para a galáxia modelo antes dos grãos processarem o campo de radiação, para os raios 1.00, 4.00 e 70.67 kpc e tempos 0.03, 1.00 e 2.60 Gyr.

A *isochrone synthesis technique* considera que uma população estelar, com qualquer

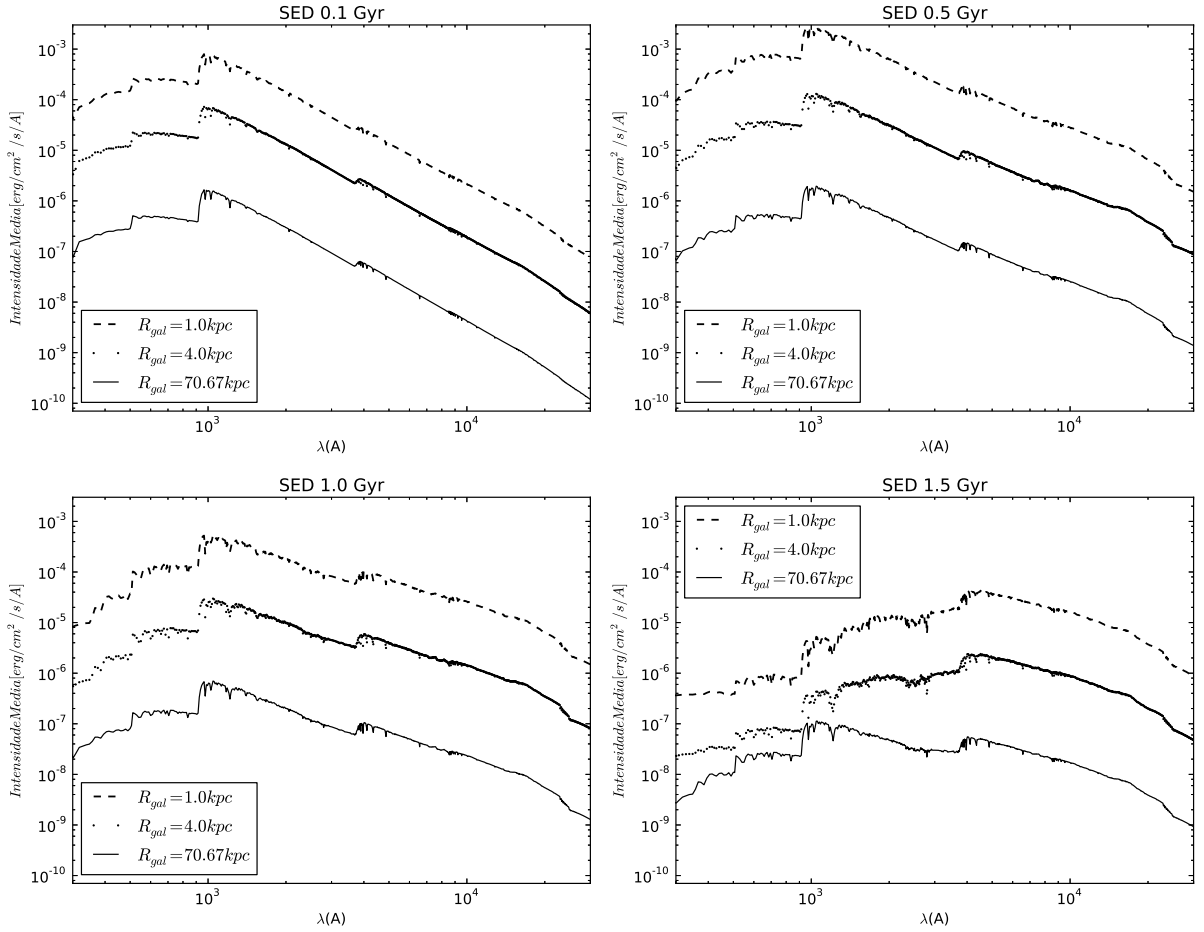


Figura 3.7: SED galáctica considerando apenas emissão estelar para galáxia de 0.1 Gyr (superior esquerdo), 0.5 Gyr (superior direito), 1.0 Gyr (inferior esquerdo) e 1.5 Gyr (inferior direito), para os raios 1 (tracejado), 4 (potilhado) e 70.67 kpc (sólido).

história de formação, pode ser expandida como uma série de *star burst* instantâneos ou populações estelares simples (SSP, do inglês *simple stellar populations*). A SED é calculada por 3.9 (Tinsley, 1980), onde se considera que a IMF é independente do tempo, ψ é a SFR, ζ a lei de enriquecimento por metais e $S_\lambda[t', \zeta(t-t')]$ a potência irradiada por comprimento de onda por massa inicial de uma SSP de idade t' e metalicidade $\zeta(t-t')$. O fluxo é:

$$F_\lambda(t) = \int_0^t \psi(t-t) S_\lambda[t', \zeta(t-t')] dt' \quad (3.9)$$

A massa varia entre $0.1 - 100 M_\odot$ neste modelo. A IMF segue a parametrização de Chabrier (2003) (3.10) para o disco galáctico. O espectro é dependente da metalicidade e a idade varia de 0 à 20 Gyr.

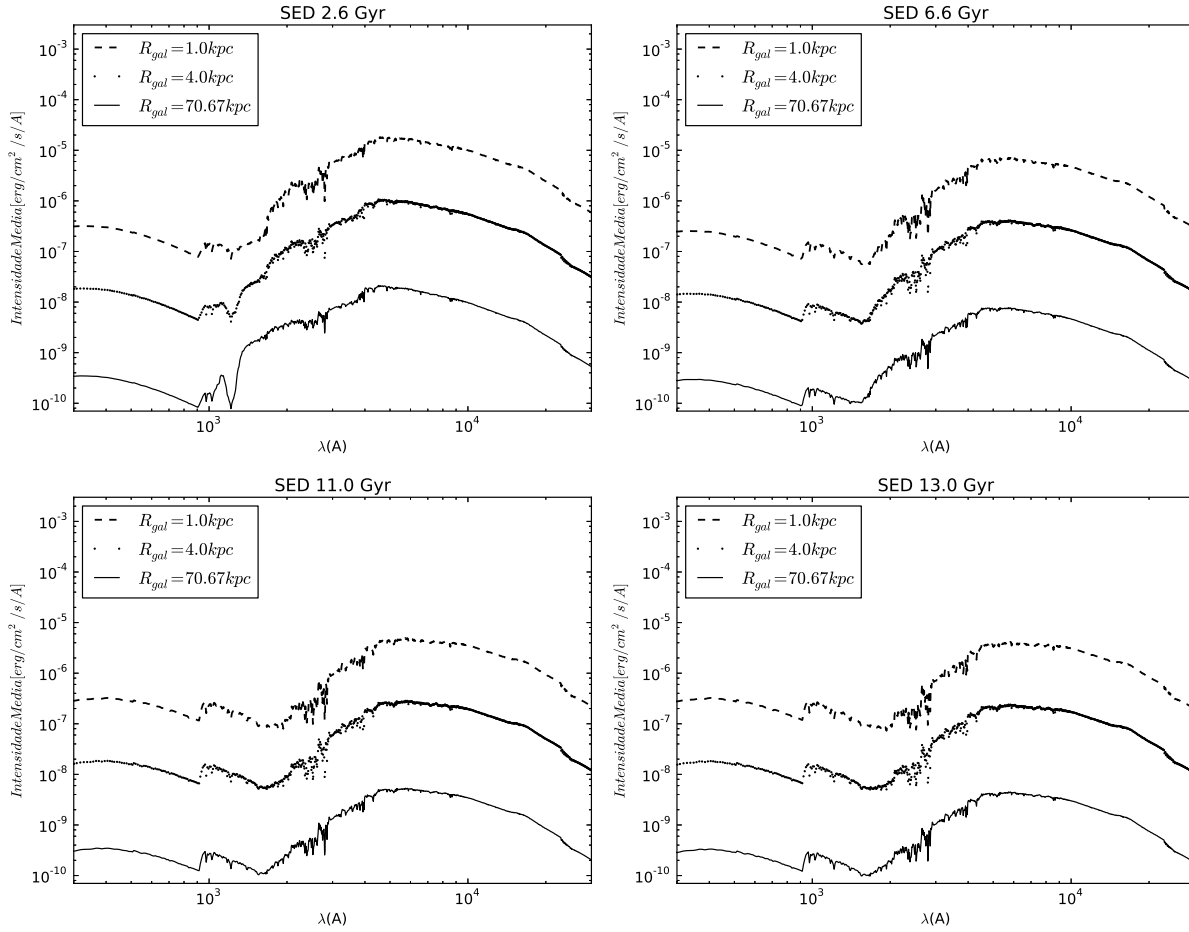


Figura 3.8: SED galáctica considerando apenas emissão estelar para galáxia de 2.6 Gyr (superior esquerdo), 6.6 Gyr (superior direito), 11.0 Gyr (inferior esquerdo) e 13.0 Gyr (inferior direito), para os raios 1 (tracejado), 4 (potilhado) e 70.67 kpc (sólido).

$$\phi(\log m) \propto \begin{cases} \exp \left[-\frac{(\log m - \log m_c)^2}{2\sigma^2} \right], & \text{se } m \leq 1M_{\odot}, \\ m^{-1.3}, & \text{se } m > 1M_{\odot} \end{cases} \quad (3.10)$$

Os espectros foram obtidos com base nas bibliotecas BaSeL (teórica, Bessell et al. (1989), Bessell et al. (1991), Fluks et al. (1994), Allard e Hauschildt (1995) e Rauch (2002)) e STELIB (observacional, Le Borgne et al. (2003)), com resolução de 3\AA , para comprimento de onda entre 3200\AA e 9500\AA , pra uma grande variedade de metalicidades, e foi também calculado no intervalo 91\AA até $160\mu\text{m}$ com menor resolução. O modelo reproduz detalhadamente galáxias típicas do *Sloan Digital Sky Survey* (SDSS) e *Early Data Release* (EDR).

As figuras 3.7 e 3.8 representam o espectro estelar calculado. Na figura 3.7 nota-se a

emissão de estrelas jovens e quentes e o pico está por volta de 1000\AA , o que corresponderia a uma galáxia azul. A SED de 1.5 Gyr já apresenta pico por volta de 5000\AA , sugerindo o amarelamento da galáxia e o mesmo se observa em todas as SEDs da figura 3.8, que também tem a intensidade diminuída. Importante lembrar que aqui efeitos de poeira ainda não são considerados.

3.2 Poeira

A poeira absorve a radiação UV e visível (no nosso caso a fonte é estelar), reprocessa e retorna no IR, o que resulta na extinção e no avermelhamento do campo. Em ISM muito densos muitas vezes é a grande fonte, junto às bandas moleculares, de informação pois a luz estelar é atenuada ou completamente absorvida. Estrelas se formam no interior de GMCs, com gás frio e denso, e AGNs geralmente estão envoltos em um toro denso de gás e poeira. Ambas são regiões dinâmicas e com importante emissão IR. Desta forma, esta faixa espectral é frequentemente utilizada no diagnóstico de regiões de formação estelar e AGNs. Em particular as bandas aromáticas tem se mostrado ótimas indicadoras da luminosidade total do IR e dos processos físicos do meio, inclusive na diferenciação entre AGNs e SBs. Os grãos também agem como superfície catalítica para reações químicas no ISM (tal qual a já citada formação de H_2) resultando no enriquecimento químico do meio.

Para tal estudo foi desenvolvido um modelo de nuvens moleculares e meio difuso acoplado à uma interface que calcula o transporte de energia. Consideramos a poeira constituída por silicatos, grafite e PAHs.

3.2.1 Evolução química do meio interestelar

Com a explosão das primeiras estrelas, parte do gás aprisionado nelas retorna ao meio interestelar enriquecido com os metais produzidos em seu núcleo e nas supernovas resultantes do fim de suas vidas.

Calculamos a abundância dos elementos no ISM pela 3.11, sendo $\rho_{ISM}(r, t)$ a densidade volumétrica de massa bariônica total do meio, $\rho_{ISM}(A, r, t)$ a densidade volumétrica de massa para um elemento A , ambos em um mesmo instante t e posição r .

$$\rho_{ISM}(r, t) = \sum_{\{A\}} \rho_{ISM}(A, r, t) \quad (3.11)$$

A evolução da densidade total é descrita pela 3.12, onde $\Psi(r, t)$ representa a taxa de formação estelar por volume, $\phi(M)$ a IMF, $M_{ej}(M, Z)$ a massa ejetada por uma estrela de massa M e metalicidade inicial Z , M_{av} a massa das estrelas formadas ponderadas pela IMF e $\tau(M)$ o tempo de vida de uma estrela de massa M . O termo $(\frac{d\rho(r,t)}{dt})_{inf}$ expressa a variação da densidade devido ao *infall* sobre a galáxia.

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{ISM}(r, t)}{dt} &= -\Psi(r, t) \\ &+ \int_{M_l}^{M_u} \Psi(r, t - \tau(M)) \phi(M) \left[\frac{M_{ej}(M, Z)}{M_{av}} \right] dM \\ &+ \left(\frac{d\rho(r, t)}{dt} \right)_{inf} \end{aligned} \quad (3.12)$$

A evolução de densidade de cada elemento (densidade parcial) é descrita de forma similar. Sendo $Z_{ISM}(A, r, t)$ a fração de massa de um elemento A presente no meio interestelar, definida por:

$$Z_{ISM}(A, r, t) \equiv \frac{\rho_{ISM}(A, r, t)}{\rho_{ISM}(r, t)} \quad (3.13)$$

e $M_{ej}(A, M, Z)$ a massa de mesmo elemento ejetada por uma estrela de massa M e metalicidade inicial Z , a evolução parcial da densidade é:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{ISM}(A, r, t)}{dt} &= -Z_{ISM}(A, r, t) \Psi(r, t) \\ &+ \int_{M_l}^{M_u} \Psi(r, t - \tau(M)) \phi(M) \left[\frac{M_{ej}(A, M, Z)}{M_{av}} \right] dM \\ &+ \left(\frac{d\rho_A(r, t)}{dt} \right)_{inf} \end{aligned} \quad (3.14)$$

A componente $(\frac{d\rho_A(r,t)}{dt})_{inf}$ também está relacionada ao *infall* do IGM sobre a galáxia. Neste trabalho eles serão considerados sempre iguais a zero. Sua permanência nas equações será mantida por completude e para explicitar possíveis escopos para novas investigações.

Podemos reescrever 3.12 em termos explícitos de cada processo que contribui com $\frac{d\rho_{ISM}(A,r,t)}{dt}$, o que fica:

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho_{ISM}(A, r, t)}{dt} &= - Z_{ISM}(A, r, t) \Psi(r, t) \\
&+ \int_{M_l}^{M_{b1}} \Psi(r, t - \tau(M)) \phi(M) \left[\frac{M_{ej}(A, M, Z)}{M_{av}} \right] dM \\
&+ A_{SNI} \left(\frac{M_{ej}^I(A)}{M_{av}} \right) \int_{M_{b1}}^{M_{b2}} \phi(M_b) dM_b \int_{\mu_m}^{\frac{1}{2}} f(\mu) \Psi(r, t - \tau(\mu M_b)) d\mu \\
&+ (1 - A_{SNI}) \int_{M_{b1}}^{M_{b2}} \Psi(r, t - \tau(M)) \phi(M) \left[\frac{M_{ej}(A, M, Z)}{M_{av}} \right] dM \\
&+ \int_{M_{b2}}^{M_u} \Psi(r, t - \tau(M)) \phi(M) \left[\frac{M_{ej}(A, M, Z)}{M_{av}} \right] dM \\
&+ \left(\frac{d\rho(A, r, t)}{dt} \right)_{inf}
\end{aligned} \tag{3.15}$$

onde μ representa a massa de uma estrela do sistema binário pela massa total, $f(\mu)$ a função distribuição de μ e A_{SNI} a taxa relativa de SNe Ia para estrelas que evoluem isoladamente.

Em 3.15 cada termo da soma corresponde a um processo. O primeiro representa a taxa de remoção do elemento A do ISM devido à captura realizada pelas estrelas. O termo seguinte representa a taxa de enriquecimento para estrelas de massa entre M_l e M_{b1} devida à nucleossíntese estelar; o terceiro representa o enriquecimento por SNeI (sistemas binários de massa entre $M_{b1} = 3M_\odot$ e $M_{b2} = 16M_\odot$) e o quarto termo corresponde à sistemas binários que não acabam em SNeI e estrelas isoladas que terminam sua vida como nebulosas planetárias.

O último termo representa o enriquecimento devido ao *inflow* proveniente do IGM e consideramos $\left(\frac{d\rho(A, r, t)}{dt} \right)_{inf} = 0$.

3.2.2 Evolução da poeira

Analogamente à 3.15, a evolução da densidade de poeira composta por um elemento A é descrita por:

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho_{dust}(A, r, t)}{dt} &= -Z_{dust}(A, r, t) \Psi(r, t) \\
&+ \int_{M_l}^{M_{b1}} \Psi(t - \tau(M)) \phi(M) \left[\frac{\delta_{cond}^w(A) M_{ej}(A, M, Z)}{M_{av}} \right] dM \\
&+ A_{SNI} \left(\frac{\delta_{cond}^I(A) M_{ej}(A)}{M_{av}} \right) \int_{M_{b1}}^{M_{b2}} \phi(M_b) dM_b \int_{\mu_m}^{\frac{1}{2}} f(\mu) \Psi(r, t - \tau(\mu M_b)) d\mu \\
&+ (1 - A_{SNI}) \int_{M_{b1}}^{M_{b2}} \Psi(r, t - \tau(M)) \phi(M) \left[\frac{\delta_{cond}^w(A) M_{ej}(A, M, Z)}{M_{av}} \right] dM \\
&+ \int_{M_{b2}}^{M_u} \Psi(r, t - \tau(M)) \phi(M) \left[\frac{\delta_{cond}^{II}(A) M_{ej}(A, M, Z)}{M_{av}} \right] dM \quad (3.16) \\
&- \rho_{dust}(A, r, t) / \tau_{SNR}(A, r, t) \\
&+ \rho_{dust}(A, r, t) \left(1 - \frac{\rho_{dust}(A, r, t)}{\rho_{ISM}(A, r, t)} \right) / \tau_{accr}(A, r, t) \\
&- \left(\frac{d\rho_{dust}(A, r, t)}{dt} \right)_{outf}
\end{aligned}$$

onde

$$Z_{dust}(A, r, t) \equiv \frac{\rho_{dust}(A, r, t)}{\rho_{ISM}(r, t)}$$

é a fração do elemento A alocado na poeira, $\delta_{cond}^w(A)$, $\delta_{cond}^I(A)$, e $\delta_{cond}^{II}(A)$ representam a eficiência de condensação em poeira por ventos estelares, SNeI e SNeII. Existem dois termos em 3.16 sem correspondência em 3.15. O primeiro, $(\rho_{dust}(A, r, t) / \tau_{SNR}(A, r, t))$, representa a destruição dos grãos (e retorno à fase de gás) devido à SNe e o segundo, $\rho_{dust}(A, r, t) \left(1 - \frac{\rho_{dust}(A, r, t)}{\rho_{ISM}(A, r, t)} \right) / \tau_{accr}(A, r, t)$, representa a taxa de acreção do grão (o quão a condensação retira do gás um elemento A e o acreta em grãos já existentes). Os parâmetros $\tau_{SNR}(A, r, t)$ e $\tau_{accr}(A, r, t)$, são respectivamente, a escala de tempo para cada um dos processos citados.

O último termo de 3.16 se refere à poeira devolvida ao IGM e será considerado nulo. Como discutido em 2.2.2, a contribuição da SNe Ia para a criação de grãos ainda é incerta e ao que tudo indica ela contribui ou fracamente ou não o faz. Novamente manteremos o termo referente a esse evento tanto por completude quanto pela possibilidade de se investigar seus efeitos.

3.2.3 Criação e Destruição

Consideramos a produção de poeira causada por SNe Ia, estrelas de baixa massa e SNeII, com as duas últimas provavelmente as formas predominantes. A fórmula de produção de grão é definida para uma estrelas de massa M . Adotamos o limiar para regimes de formação de grão em $M_w = 8M_\odot$. Se $M \leq M_w$ o rendimento da condensação em poeira é determinado apenas pela razão em número de átomos de C/O que é ejetada. Caso exista mais átomos de C que O todo O se liga ao C formando CO e o carbono excedente é condensado em grafite (poeira carbonácea). Se existe mais átomos de O que de C se considera que todo C é aprisionado em moléculas de CO e o restante do O reage com elementos refratários (aqui consideramos apenas o Si) em razão aproximada um para um.

A poeira é produzida seguindo a fórmula:

1) Se $M \leq M_w = 8 M_\odot$:

a) Caso $C/O > 1$ no material ejetado

$$\begin{aligned} M_{dust}(C, M) &= \delta_{cond}^w(C) \left[M_{ej}(C, M) - \frac{3}{4} M_{ej}(O, M) \right] \\ M_{dust}(A, M) &= 0 \end{aligned} \quad (3.17)$$

b) Caso $C/O < 1$ no material ejetado

$$\begin{aligned} M_{dust}(C, M) &= 0 \\ M_{dust}(Si, M) &= \delta_{cond}^w(A) M_{ej}(Si, M) \end{aligned} \quad (3.18)$$

2) Massa $M > M_w = 8 M_\odot$:

$$\begin{aligned} M_{dust}(C, M) &= \delta_{cond}^{II}(C) M_{ej}(C, M) \\ M_{dust}(Si, M) &= \delta_{cond}^{II}(Si) M_{ej}(A, M) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Para SNe I foi usada uma equação idêntica à (3.19) substituindo $\delta_{cond}^{II}(A)$ por $\delta_{cond}^I(A)$. Em (3.17), (3.18) consideramos que há a máxima formação possível de CO.

O mecanismo de formação e destruição de grãos ainda é incerto e a extinção observada é degenerada (é possível escolher mais de uma combinação que reproduza o observado). A escolha de δ_{cond} não é unívoca e o uso de $\delta_{cond} < 1.0$ considera-se que há tanto criação quanto destruição de grãos de poeira, enquanto $\delta_{cond} = 1.0$ não há destruição de grãos. Seguindo Guimaraes (2006) utilizamos $\delta_{cond}^w(A) = 1.0$, $\delta_{cond}^I(A) = \delta_{cond}^{II}(A) = 0.9$ para o silício e

$\delta_{cond}^w(A) = 1.0$, $\delta_{cond}^{II}(A) = \delta_{cond}^{II}(A) = 0.7$ para o carbono. Esses valores caracterizam uma produção muito eficiente de poeira. A figura 3.9 expressa a evolução da massa de poeira de C e Si para nossa galáxia fiducial no caso A com alta eficiência em produção e usado neste trabalho (salvo quando dito o contrário) definido por $(\delta_{cond}^{II}(A), \delta_{cond}^{II}(A), \delta_{cond}^I(A)) = (1.0, 0.7, 0.7)$ e o caso B baseado em Dwek (1998) não tão eficiente definido por $(\delta_{cond}^{II}(C), \delta_{cond}^{II}(C), \delta_{cond}^I(C)) = (1.0, 0.5, 0.5)$ e $(\delta_{cond}^{II}(Si), \delta_{cond}^{II}(Si), \delta_{cond}^I(Si)) = (1.0, 0.8, 0.8)$.

Existem diversos mecanismos de destruição e reciclagem da poeira interestelar, porém consideramos apenas a destruição de grãos por remanescentes de SNe, pois, segundo Dwek (1998), este é o mais importante mecanismo para a transição de poeira para gás novamente. Seja $m_{dest}(A, r, t)$ a massa total de um elemento A inicialmente condensado em forma de poeira que é sublimado por uma única remanescente de SNe, numa posição r e instante t . Essa massa retornará à forma gasosa numa taxa:

$$\left[\frac{d\rho_{dust}(A, r, t)}{dt} \right]_{SNR} = m_{dest}(A, r, t) \mathcal{R}_{SN}(r, t) \quad (3.20)$$

onde $\mathcal{R}_{SN} = \mathcal{R}_{SNIa} + \mathcal{R}_{SNI}$ é a soma das taxas de SNe Ia e SNe II na galáxia ($pc^{-3}Gyr^{-1}$). Podemos reescrever (3.20) como:

$$\left[\frac{d\rho_{dust}(A, r, t)}{dt} \right]_{SNR} = \rho_{dust}(A, r, t) \left[\frac{m_{dest}(A, r, t)}{\rho_{dust}(A, r, t)} \right] \mathcal{R}_{SNR}(A, r, t) \equiv \frac{\rho_{dust}(A, r, t)}{\tau_{SNR}(r, t)}. \quad (3.21)$$

Em (3.21) fica evidente a escala de tempo em que ocorre a destruição dos grãos (τ_{SNR}) e seu cálculo depende do entendimento de diversos fatores como a destruição de grãos por fragmentação térmica, colisões grão-grão, choques interestelares e por remanescentes de SNe. A determinação de τ_{SNR} é de suma importância no cálculo da destruição ou da depleção de um elemento A contido nos grãos.

Dentre os processos citados, a destruição devido à colisão grão-grão é o mais difícil de modelar, porém, como este é o processo dominante durante a fase radiativa da remanescente, quando a maior parte do meio interestelar é varrida (Dwek, 1998), sua determinação é indispensável. Estimou-se em ~ 0.4 e 0.22 Ganos o tempo de vida global dos grãos refratários carbonáceos e silicatos, respectivamente, segundo modelagem das eficiências de destruição de grãos por choques radiativos.

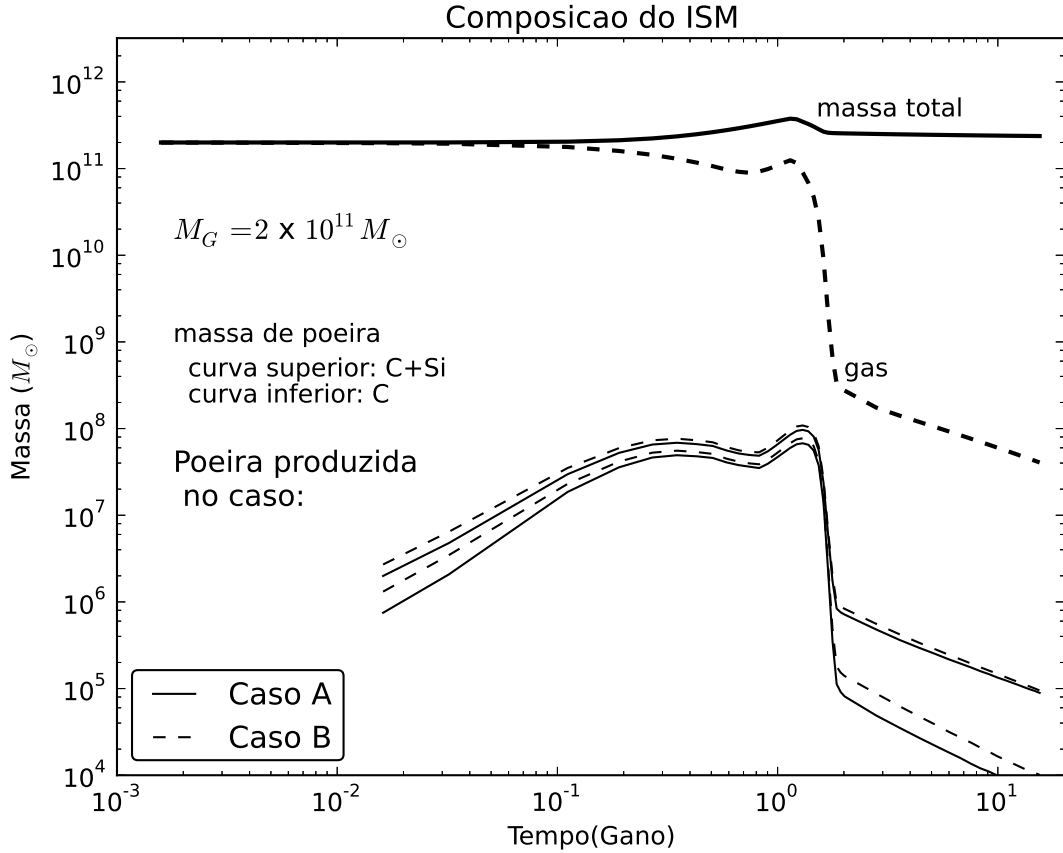


Figura 3.9: Evolução da massa de poeira de C e de C + Si, massa de gás e massa total para nossa galáxia fiducial. Caso A é dado por: $(\delta_{cond}^{II}(A), \delta_{cond}^{II}(A), \delta_{cond}^I(A)) = (1.0, 0.7, 0.7)$. O caso B: $(\delta_{cond}^{II}(C), \delta_{cond}^{II}(C), \delta_{cond}^I(C)) = (1.0, 0.5, 0.5)$ e $(\delta_{cond}^{II}(Si), \delta_{cond}^{II}(Si), \delta_{cond}^I(Si)) = (1.0, 0.8, 0.8)$. Adaptado de Guimaraes (2006).

Tanto \mathcal{R}_{SN} quanto $\rho_{dust}(A, r, t)$ variam com a idade da galáxia. Assim também τ_{SNR} não é constante. Simulamos essa dependência considerando a massa de poeira destruída (m_{dest}) por um remanescente como:

$$m_{dest}(A, r, t) = \left(\frac{\rho_{dust}(A, r, t)}{\rho_{ISM}(A, r, t)} \right) \epsilon M_{SNR} \quad (3.22)$$

onde M_{SNR} é a massa total do ISM varrida por uma remanescente durante seu tempo de vida e ϵ a eficiência média de destruição de grãos. Chegamos a escala de tempo para a destruição de grãos:

$$\tau_{SNR}(A, r, t) = (\epsilon M_{SNR})^{-1} \left[\frac{\rho_{ISM}(r, t)}{\mathcal{R}_{SN}(r, t)} \right] \quad (3.23)$$

A massa do ISM varrida por um remanescente de SNe de uma certa velocidade não

depende da densidade do meio, mas é uma consequência de lei da conservação do momento linear. Logo ϵ pode ser tomado como aproximadamente constante com a densidade do ISM e, portanto, com o tempo.

3.2.4 Distribuição Espacial da Poeira

A densidade e distribuição de gás e poeira nas galáxias não são homogêneas, podendo ser divididas em diversas fases. Explosões de SNe, *inflow* e *outflow*, metalicidade e população estelar modificam a estrutura do ISM e consequentemente sua extinção e emissão no IR. Calzetti et al. (1994) sugere diferentes modos de modelar o ISM.

Em nosso modelo consideramos dois componentes para o ISM: Nuvens moleculares (MCs) e o Meio Interestelar Difuso. O último é representado por um modelo de telas de poeira uniforme, seguindo o fluxo de gás calculado pelo modelo químiodinâmico. Os fótons estelares são processados no interior de cada tela seguindo a equação do transporte radiativo:

$$\mu \frac{dI_\lambda}{d\tau_\lambda} = S_\lambda - I_\lambda + \gamma_\lambda J_\lambda \quad (3.24)$$

com $\mu = \cos\theta$ e θ o ângulo entre a direção de propagação do feixe e a normal do objeto considerado, τ_λ a profundidade óptica, I_λ a intensidade do campo no comprimento de onda ν , S_λ a função fonte definida em 3.25 quando representa j_λ a emissividade por unidade de volume, σ_λ a secção de choque para espalhamento e k_λ a absorvência, γ_λ é o albedo definido em 3.26 e J_λ a intensidade média do campo.

$$S_\lambda = \frac{j_\lambda}{k_\lambda + \sigma_\lambda} \quad (3.25)$$

$$\gamma_\lambda = \frac{\sigma_\lambda}{k_\lambda + \sigma_\lambda} \quad (3.26)$$

3.2.4.1 Extinção no Meio Interestelar: Modelo de Multitelas

O modo como a poeira está distribuída não é homogêneo nem mesmo para um mesmo sítio. Porém, simplificações são necessárias, principalmente quando se estuda objetos multifásicos como galáxias. Calzetti et al. (1994) discute diversas possibilidades de representações para a distribuição espacial de gás e poeira em galáxias, as quais estão esboçadas

na figura 3.10, desde *clumps* com poeira concentrada, que resulta em linhas de visada limpas e quase sem efeito de poeira, à misturas homogêneas, resultando em observações das camadas exteriores e opacidade das camadas internas. Considerando também a posição da poeira (se perto ou longe da fonte estelar).

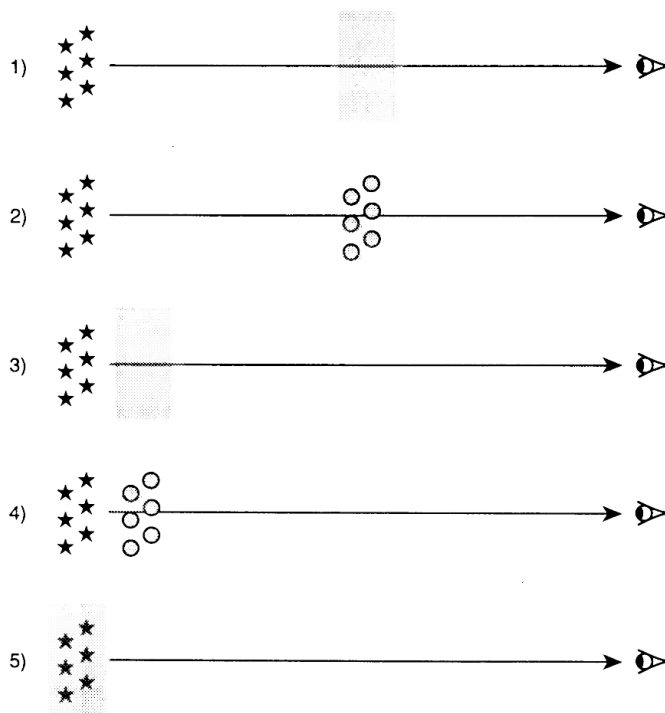


Figura 3.10: Esboço de diferentes modelos de distribuição espacial da poeira. caso 1) tela de poeira uniforme; 2) tela *clumpy*; 3) placa de espalhamento uniforme; 4) placa de espalhamento *clumpy* e 5) poeira interna. Retirado de Calzetti et al. (1994).

Seguindo a figura 3.10, os tipos de distribuição que Calzetti et al. (1994) cita para a galáxia são:

- 1) Tela de poeira uniforme: A tela está fisicamente distante da nuvem ionizada e é configuração preferível para corrigir o avermelhamento. A poeira da tela retira os fótons da linha de visada, seja por absorção, seja por espalhamento.
- 2) Tela de poeira ‘*clumpy*’: Esta configuração é mais realística que o item 1), a poeira aqui se configura como *clumps*, de resto é igual ao modelo anterior.
- 3) Placa de espalhamento uniforme: A tela se encontra fisicamente próxima à fonte central. Aqui a poeira tanto retira fótons da linha de visada quanto emite novos por espalhamento.
- 4) Placa de espalhamento *clumpy*: Similarmente à situação anterior, a única diferença é que a poeira se organiza em *clumps*.

5) Poeira interna: A poeira e gás ionizado se encontram misturados uniformes juntamente à fonte estelar OB.

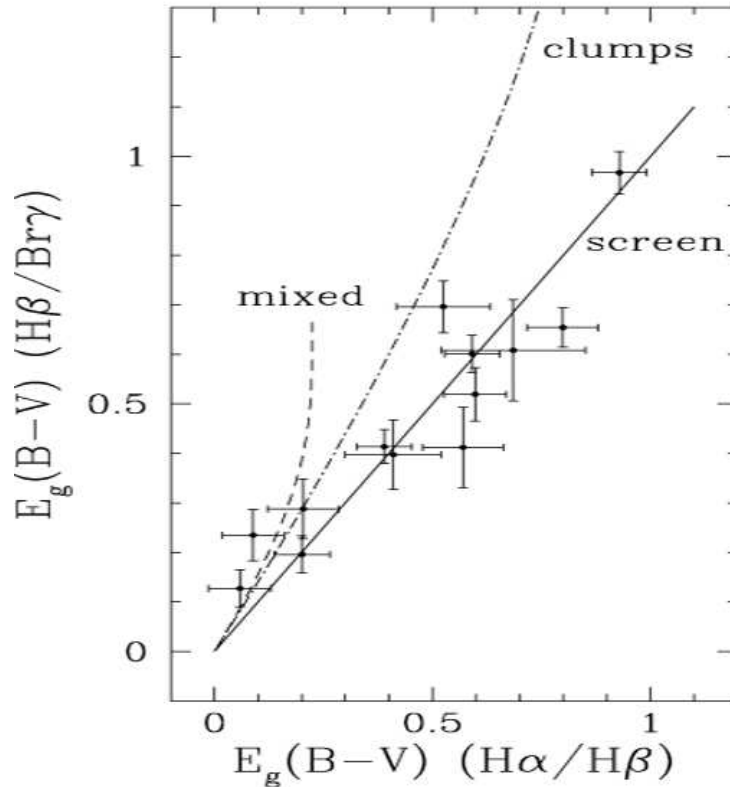


Figura 3.11: Excesso de cor derivado de $H\alpha/H\beta$ (eixo-x) pelo excesso derivado de $H\beta/Br\gamma$. Na figura modelo de tela (linha sólida), de *clumpy* (linha e ponto) e modelo misturado de poeira e gás que simula poeira interna. Vê-se que para $H\alpha/H\beta$ pequeno os valores são degenerados. As barras de erro representam 1σ de pontos observacionais. Retirado de Calzetti (1998).

A escolha do melhor modelo depende do tipo de objeto que se estuda e da finalidade do estudo. Calzetti (1998) discute a constituição da poeira em SBs, onde as ondas de choques, campo duro (embora muito menos que AGNs) e ventos de estrelas massivas podem destruir grãos e PAHs; onde *outflows* resultantes da dinâmica de sistemas jovens expulsam grandes quantidades de gás e poeira. Assim sendo a poeira interna não parece o melhor modelo.

A poeira deve então estar majoritariamente distribuída em torno da região de formação estelar, mas ainda dentro da galáxia. Nos modelos de placa o espalhamento e reemissões são fontes importantes para a emissão da região, fato não atestado pelas observações sobre o avermelhamento da emissão estelar. Com isto as opções de tela nos parecem a melhor opção.

A figura 3.11 (Calzetti, 1998) ilustra resultados para modelos de *clumps*, telas e misturados. Nela o autor confronta observações de SGBs com os modelos já citados com base no excesso de cor $E_g(B - V)$ e das razões de linhas nebulares H_α/H_β e H_β/Br_γ , diagnóstico sensíveis à geometria da poeira.

A partir destes resultados optamos por um modelo de telas (sete) concêntricas circundando uma fonte central (modelo 1) que, apesar de simples, reproduzem muito bem dados observacionais sobre o avermelhamento e a extinção galáctica (melhor até que modelos mais complexos).

Por tanto, consideramos sete telas esféricas de posição, r_n , dada por 3.27, com $a_n = (0.25, 1.0, 2.0, 4.0, 8.0, 70.7)$, onde se projeta a densidade de coluna de poeira e a profundidade óptica de cada tela é dada por $\tau(\lambda) = k_\lambda \delta r / \cos\theta$, δr é a espessura da tela, com $\delta r \ll r$, centrada em r .

$$r_n = a_n \times \frac{R_{mare}}{98.0} \quad (3.27)$$

3.2.4.2 Emissão pelo Meio Interestelar: Modelo de Nuvens Moleculares

As MCs representam a parte densa e de alta concentração de poeira do ISM. São também o berçário das estrelas, portanto, sua posição segue a mesma dos objetos jovens (Equação 3.8). Sua estrutura é bastante complexa e geralmente esses objetos fazem parte de estruturas maiores (junto com os aglomerados jovens), das GMCs, que contém outras tantas subestruturas e flutuações de densidade. Isso se deve tanto pelo seu mecanismo de formação (choque de nuvens menores) quanto pelas estrelas jovens que ao nascerem no interior da nuvem a evaporam “de dentro para fora”. Embora sejam extensas as MCs não permeiam todo o ISM (ao contrário do meio difuso). A formulação aqui expressa foi baseada em Guimaraes (2006). Um esquema de nosso modelo para o ISM está sistematizado na figura 3.12.

A emissividade por unidade de volume final, j_λ , é a soma da emissividade estelar (j_λ^*) com a das duas componentes do ISM (meio difuso, j_λ^d , e MCs, j_λ^{mc}):

$$j_\lambda = j_\lambda^* + j_\lambda^d + j_\lambda^{mc} \quad (3.28)$$

Devido à alta opacidade do gás molecular, as GMCs não são observáveis no visível e no UV, afetando também observações sobre estrelas recém-nascidas. A poeira e o gás

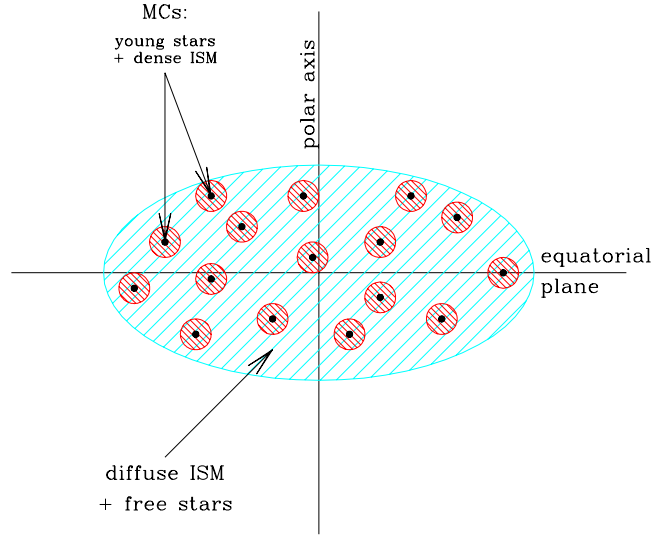


Figura 3.12: Esquema do modelo de distribuição de poeira. Círculos vermelhos representam as MC, meio denso onde nascem as estrelas, a elipse azul representa o meio rarefeito difuso. Retirado de Silva et al. (1998)

denso processam a luz estelar e reemitem no IR e é desta faixa (juntamente com raios-x e rádio) que se obtém informação sobre essas regiões. A radiação ionizante (UV e raios-x) e ventos solares de estrelas jovens corroem a nuvem numa escala de tempo da mesma ordem que a vida das estrelas OB ($\sim 10 \text{ Manos}$). Definimos o tempo de resistência da nuvem (t_{mc}) como o tempo máximo em que toda emissão estelar é processada pela nuvem (não há escape para a luz estelar) e adotamos $t_{mc} = 50 \text{ Myr}$. Quando $t > t_{mc}$ a fração de energia processada (f) diminui linearmente com o tempo e anula em $2t_{mc}$, ou:

$$f = \begin{cases} 1 & \text{if } t \leq t_{mc}/2, \\ 2(1 - t/t_{mc}) & \text{if } t_{mc}/2 < t < t_{mc}, \\ 0 & \text{if } t > t_{mc}. \end{cases} \quad (3.29)$$

Cada MC é considerada como uma casca esférica, centrada nas estrelas recém-nascidas, com raio inferior r_{sub} e raio exterior r_{mc} . Definimos um r_{sub} para evitar regiões muito quente próximo à estrela, pois os grão sublimam em $T_{sub} \sim 500K$ (a qual será adotada para sublimação), desta forma a temperatura média da nuvem será $\sim 50K$. Adotamos

um modelo em que a nuvem molecular possui massa $M_{mc} = 10^6 M_{\odot}$ (pois a massa típica destes objetos se encontra entre $M_{mc} \sim 10^5 - 10^6 M_{\odot}$), raio $r_{mc} = 15 kpc$ e $t_{mc} = 50 Myr$.

A massa de gás, $M_{g,mc}(r, t)$, em uma posição r e instante $t < t_{mc}$, é assumida proporcional à massa total de estrelas jovens, $M_{yo}(r, t)$, por uma constante $\eta_{yo} = 1$ ou $\eta_{yo} = M_{g,mc}(r, t)/M_{yo}(r, t) = 1$. O número de MCs em cada zona galáctica é $N_{mc}(r, t) = M_{g,mc}(r, t)/M_{mc}$ e a fração de massa do gás da galáxia que está nesta forma é $f_{mc} = M_{g,mc}(r, t)/M_{gas}(r, t)$. Este é um importante parâmetro medível observacionalmente e age como limitador da formação estelar.

O máximo da função de resfriamento se dá $\sim 2 \times 10^4 M_{\odot}$, devido à recombinação do hidrogênio, e será nosso indicador para gás frio (temperatura menor que a citada) e quente (caso contrário). No disco galáctico, aproximadamente metade da massa total do gás é fria ($f_{cold} \sim 0.5$) e a outra quente, embora haja variações devido ao ambiente. Sempre que $f_{mc} > f_{cold}$ consideraremos f_{cold} ao invés de f_{mc} .

A alta profundidade ótica da nuvem no IR ($A_K \sim 10$) faz com que seja considerado na equação do transporte o reprocessamento da radiação produzida pela própria nuvem no IR.

3.2.5 Propriedades físicas dos grãos

O modelo adota receitas de grãos desenvolvidas por Siebenmorgen e Krügel (1992) (de agora em diante SK92) e Efstathiou et al. (2000) (de agora em diante Ef00), (o último é um aprimoramento do primeiro) e baseados no MNR. Sk92 modela diversos ambientes astrofísicos como nebulosa de reflexão, nebulosa planetária, região de formação estelar e a vizinhança solar. Ef00 trata de galáxias *starbursts*, para a qual modela transferência radiativa e a emissão (do UV ao milimétrico) destes objetos.

A escolha para os grãos no modelo SK92 foram baseadas nos seguintes dados:

- 1) Curva de extinção interestelar;
- 2) Abundância cósmica dos elementos constituintes da poeira;
- 3) Emissão em banda larga do IR devido à poeira aquecida;
- 4) Luz espalhada;
- 5) Dependência entre o comprimento de onda e a intensidade da luz polarizada;
- 6) Emissão das linhas $9.7 \mu m$ e $18.0 \mu m$ devido ao grafite e das AIBs atribuídas aos PAHS;
- 7) Linhas de absorção dos gelos.

Sk92 distingue três regiões do espectro eletromagnético em que há comportamento distinto da curva extinção, cada uma resultante de diferentes fontes de extinção. As regiões são:

- a) $\lambda^{-1} < 2.0\mu m^{-1}$: Região em que ocorre a extinção devido aos grandes grãos (raio aproximado entre 100\AA e 2500\AA). Causada de silicatos astronômicos e grãos de carbono amorfo, porém substituímos este por grafites grandes.
- b) Ressonância em 2175\AA : Pequenos grãos de grafite (raio entre 4\AA e 100\AA) respondem por esse *bump*.
- c) $\lambda^{-1} > 5.9\mu m^{-1}$: Apesar de haver outras opções (segunda ressonância do grafite e pequenos silicatos) os PAHs foram escolhidos.

Por tanto, grãos grandes causam a extinção dos maiores comprimentos e também dominam a reemissão nos maiores comprimentos (FIR e submilimétrico além das ressonâncias do silicato em $9.7\mu m$ e $18.0\mu m$). De maneira análoga os pequenos grãos dominam a reemissão em menores comprimentos (MIR e o *bump*). Os PAHs extinguem o FUV além de serem necessários no ajuste do NIR (além de seus *features* 3.3, 6.2, 7.7 e $11.3\mu m$).

Grafite e silicatos podem ser caracterizados pelo tamanho (sendo a o raio, a_- seu limite inferior e a_+ o limite superior), distribuição de tamanhos e eficiência de absorção ($Q_{abs}(a, \lambda)$). Já os PAHs dependem dos parâmetros já citados, além do número de carbonos (N_C) e de hidrogênios (N_H) que compõe cada molécula. Neste capítulo chamaremos de poeira o grafite e os silicatos.

3.2.5.1 Eficiência de Absorção

Tanto o grafite quanto o silicato são refratários e mesmo nossos grandes grãos ainda são suficientemente pequenos para valer a aproximação de Rayleigh para os refratários. No caso dos gelos precisa se considerar o espalhamento Mie. Nossos grãos são sempre esféricos e o gelo se acumula em torno dos grandes silicatos.

A formulação que usamos é baseada em Draine e Lee (1984) (embora com alterações que serão pontuadas). A Seção de choque de absorção para os grãos é:

$$\sigma_{grao}(a, \lambda) = \sigma_d Q_{abs}(a, \lambda) \quad (3.30)$$

onde a é o raio do grão, λ o comprimento de onda, $\sigma_d = \pi a^2$ a seção de choque geométrica e Q_{abs} a eficiência de absorção tabulada em Draine (1985) para o grafite. No caso do silicato

usamos Weingartner e Draine (2001).

No IR se aproxima Q_{abs} por uma lei de potência do tipo:

$$Q_{abs}(a, \lambda) = Q_{abs0} \left(\frac{\lambda_0}{\lambda} \right)^\beta, \quad \lambda > \lambda_0 \quad (3.31)$$

onde Q_{abs0} , λ_0 e β são constantes. Draine (1985) considera $\beta = -2$, porém, para melhor ajuste com dados observacionais consideramos $\beta = -1.6$, tanto para grafites quanto para silicatos no caso de grãos grandes ($a > 100\text{\AA}$) e $\lambda > 100\mu m$.

Agora podemos definir a emissividade planckiana média como:

$$\langle Q_{abs}(a, T_{grao}) \rangle = \frac{\pi}{\sigma T_{grao}^4} \int_0^\infty Q_{abs}(a, \lambda) B_\lambda(T_{grao}, \lambda) d\lambda \quad (3.32)$$

com σ sendo a constante de Stefan-Boltzmann e $B_\lambda(T_{grao}, \lambda)$ a função de Planck para um corpo negro, definida como:

$$B_\lambda(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp(hc/\lambda kT) - 1} \quad (3.33)$$

na qual h , c e k a constante de Planck, a velocidade da luz e constante de Boltzmann, respectivamente. Considerando Q_{abs0} dada por 3.31, a solução geral de 3.32 para qualquer β é:

$$\langle Q_{abs}(a, T_{grao}) \rangle = \frac{15}{\pi^4} (\beta + 3)! \zeta(\beta + 4) Q_0 \left(\frac{\lambda_0 k T_{grao}}{hc} \right)^\beta \quad (3.34)$$

onde ζ é a função zeta de Riemann. Um corpo cinza é tal que $\beta = 0$ e $\langle Q_{abs}(a, T_{grao}) \rangle = Q_0$.

Não só o campo de radiação contribui para a temperatura dos grãos, mas reações químicas (como a formação de H_2 e a recombinação do hidrogênio), colisões grão-grão e grão-gás também contribuem. A energia armazenada pelo grão pode gerar a excitação eletrônica além dos efeitos térmicos (Whittet, 1992).

A temperatura de estado estacionário é majoritariamente determinada pelo campo de radiação (nuvens extremamente densas podem ser exceções). A energia absorvida por um grão exposto à um campo de radiação será:

$$\Gamma_{abs}(a) = 4\pi\sigma_d \int_0^\infty Q_{abs}(a, \lambda) J(\lambda) d\lambda \quad (3.35)$$

onde $J(\lambda)$ é a intensidade média do campo. De 3.35 a potência de absorção (W_{abs}) é obtida lembrando que $4\pi J(\lambda) = cu(\lambda)$, onde $u(\lambda)$ é a densidade de energia do campo. A energia emitida pelo grão é descrita por:

$$\Gamma_{em}(a) = 4\pi\sigma_d \int_0^\infty Q_{abs}(a, \lambda) B(T_{grao}, \lambda) d\lambda \quad (3.36)$$

aqui é importante ressaltar que $Q_{abs}(a, \lambda) = Q_{em}(a, \lambda)$. A partir de 3.32 temos que:

$$\Gamma_{em}(a) = 4\sigma_d \langle Q_{abs}(a, T_{grao}) \rangle \sigma T_{grao}^4 \quad (3.37)$$

no equilíbrio $\Gamma_{abs} = \Gamma_{em}$, portanto:

$$\int_0^\infty Q_{abs}(a, \lambda) J(\lambda) d\lambda = (1/\pi) \langle Q_{abs}(a, T_{grao}) \rangle \sigma T^4 \quad (3.38)$$

ou em termos da energia

$$\int_0^\infty Q_{abs}(a, \lambda) u(\lambda) d\lambda = (4/c) \langle Q_{abs}(a, T_{grao}) \rangle \sigma T^4. \quad (3.39)$$

A emissão dos grãos de poeira apresenta diferenças significativas em relação à lei de Planck, principalmente em grandes comprimentos de onda, onde $Q_{em} \propto \lambda^\beta$ e β entre -1 e -2, o que os tornam *corpo negro modificado*. Esta característica lhes permite alcançar temperaturas mais elevadas que a de um corpo negro, em geral entre 30K e 50K, de forma que eles absorvem mais em pequenos comprimentos de onda (azul) e emitem mais em grandes comprimentos (vermelho).

Os Cirros no IR dominam o espectro do ISM em $100\mu m$ e são formados por poeira em equilíbrio térmico com o campo de radiação interestelar. Possuem uma temperatura entre 18 K e 21 K em geral (embora nas proximidades de estrelas, tanto individuais quanto em grupos, cheguem em algo entre 40 K e 80 K com pico de emissão pro volta de $60\mu m$).

O reprocessamento dos fótons estelares varia severamente conforme o sítio. Na Via-Láctea a estimativa é que aproximadamente metade da luz estelar é reprocessada (em torno de 30 % à 50 % da luminosidade bolométrica está no FIR, o que se credita aos grãos). Em elípticas e S0 com baixa densidade de gás e poeira o IR pode contribuir com menos de 1 % da luminosidade bolométrica, enquanto em alguns SB pode chegar à quase 100 % (as chamadas ULIRGs, *Ultraluminous Far-Infrared Galaxies*).

3.2.5.2 Distribuição de tamanho

Em nossos modelos consideramos grãos esféricos embora a geometria do grão possa ser um fator importante. Limitações computacionais são um grande entrave para uma análise

mais detalhada. O cálculo das propriedades ópticas de grãos sem uma geometria muito bem definida (que não podem ser aproximados por elipsóides ou cilindros) já é um trabalho demasiadamente laborioso.

Provavelmente o ISM contém uma grande quantidade de grãos amorfos (como grãos de grafite). A polarização observada na luz estelar reprocessada pela poeira indica que uma quantidade não desprezível de grãos é não esférica, possivelmente bastonetes. Porém, o espalhamento do UV indica que os pequenos grãos são aproximadamente esféricos ou ao menos não alinhados (Li, 2005).

Alternativas à esse problema tem sido discutidas. Alguns autores trabalham com grãos no formato de “agulhas”, outros como “antenas” clássicas para deduzir sua interação com a luz e outros tentam montar grãos fractais aglomerando grãos esféricos simples.

Desta forma consideraremos grãos de raio esféricos de raio a e $n(a)$ o número de grãos com raio a . Diversos trabalhos tentam ajustar $n(a)$ às curvas de extinção para grãos de composições variadas. Neste trabalho consideramos o modelo MNR, Mathis et al. (1977), modificado dado por:

$$n(a) \propto a^{-\alpha} \quad (3.40)$$

$$\alpha = \begin{cases} -3.5 & \text{grandes graos } (100\text{\AA} < a < 2500\text{\AA}) \\ -4.0 & \text{pequenos graos } (10\text{\AA} < a < 100\text{\AA}) \end{cases}$$

onde os grandes podem ser grafite e silicatos e os pequenos grãos apenas grafite. O MNR original utiliza apenas α de grandes grãos e foi criado para descrever a curva de extinção interestelar média. Kim et al. (1994) utiliza Método da Máxima Entropia (MEM) para obter a $n(a)$ que adotamos.

Por completude trataremos da distribuição dos PAHs aqui. A distribuição de massa dos PAHs é dada por:

$$n(a) \equiv dn/dN_C \propto N_C^{-2.25}, \quad 24 \leq N_C \leq 486 \quad (3.41)$$

onde N_C é o número de carbono. Consideramos 8 espécies de tamanhos variados, desde o coroneno ($N_C = 24$) até uma espécie representando aglomerados ($N_C = 486$), todos pericondensados (ver tabela 3.1), já que este tipo possibilita expressar a distribuição de tamanhos em termos do número de carbonos por $a \propto N_C$. A menor resiliência de pequenos

PAHs é expresso em 3.41, onde espécies com grande número de carbono são privilegiadas devido ao amortecimento contra o UV e choques de SNe que as grandes cadeias de benzeno oferecem.

Tanto os PAHs como os pequenos grãos sofrem flutuações de temperatura (3.3.4) resultantes da interação dos grãos com fótons energéticos individuais. O cálculo dessa propriedade é bastante demorado, de modo que optamos por limitar também o número de espécies de pequenos grãos. Seguindo SK92 consideramos apenas grãos com raio 12.59, 19.95, 31.62, 50.12 e 79.43 Å.

Todo silício na forma de poeira estará na forma de silicato astronômico, enquanto o carbono se dividirá em 80 % para grandes grãos, 10 % para pequenos grãos e 10 % para os PAHs.

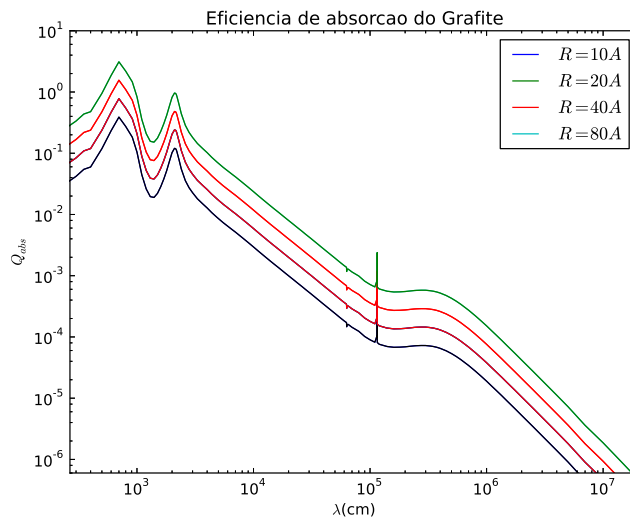


Figura 3.13: Eficiência de absorção dos grãos de grafite com raios 10, 20, 40 e 80 Å segundo o modelo de Draine e Lee (1984).

3.2.5.3 Gelos

Os grãos refratários (como o grafite e os silicatos) podem ser tratados pelo espalhamento *Rayleigh*. Este é um caso particular do espalhamento *Mie* que é mais adequado ao tratamento de gelos.

Dentro do formalismo do eletromagnetismo podemos definir o índice de refração complexo como $m = n + ik$, com m , n e k reais e dependentes do comprimento de onda mais a

unidade imaginária denotada por i . Podemos escrever a constante dielétrica ($\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$) em termos do índice de refração e teremos $\epsilon = m^2$, $\epsilon_1 = n^2 - k^2$ e $\epsilon_2 = 2nk$.

A teoria de Mie para absorção e espalhamento por esferas consiste em uma expansão em série do parâmetro de tamanho $x = 2\pi/\lambda$. No caso de pequenas partículas $a/\lambda < 0.1$ vale a aproximação de dipolo na qual se assume que o campo de radiação incidente é considerado como dipolo elétrico e magnético, com seção de choque para o absorção elétrica e magnética (σ_{abs}^e e σ_{abs}^m), seção de choque de espalhamento também elétrica e magnética (σ_{sca}^e e σ_{sca}^m) e a seção final é soma dos dois campos ($\sigma_{abs} = \sigma_{abs}^e + \sigma_{abs}^m$; $\sigma_{sca} = \sigma_{sca}^e + \sigma_{sca}^m$).

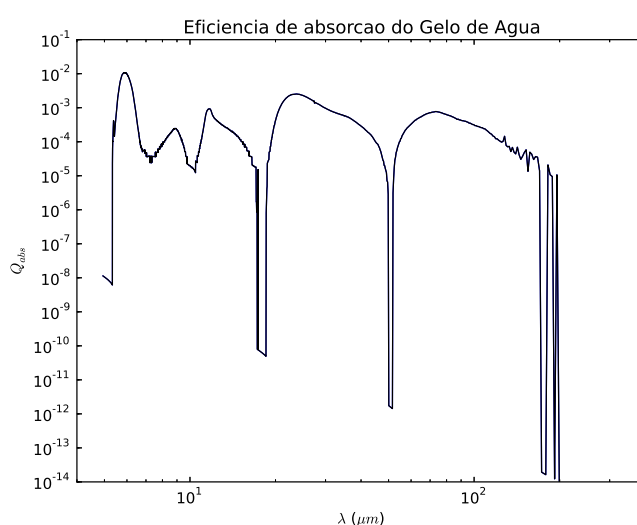


Figura 3.14: Eficiência de absorção do gelo de água segundo o espalhamento Mie.

Quando x e mx são muito pequenos σ_{abs}^m e σ_{sca}^m são desprezíveis e temos o espalhamento *Rayleigh* (caso dos refratários). Quando estudamos gelos é necessário considerar tanto a componente elétrica quanto a magnética da seção de choque. A figura 3.14 mostra o cálculo da eficiência de absorção (Q_{abs}) para o gelo de água, com formalismo de Draine e Lee (1984) e índices de refração de Hudgins et al. (1993). O crescimento da massa dos grãos é descrito por:

$$\frac{dm_d(a)}{dt} = 4\pi a^2 \rho_s \frac{da}{dt} = \pi a^2 n_c \langle v_c \rangle \langle m_c \rangle \quad (3.42)$$

onde a é o raio, ρ_s a densidade específica do material do grão, n_c a densidade do gás condensável, $\langle v_c \rangle$ a velocidade média e $\langle m_c \rangle$ a massa média. Logo, o aumento no tamanho do grão por acreção de gás independe do tamanho do grão e todos crescem o

mesmo monte, levando, juntamente com a distribuição MNR, à concentração de gelo nos pequenos grãos.

3.3 PAHs

Embora ainda não haja consenso entre os pesquisadores, os PAHs são a alternativa que melhor representa as bandas da região de $3.0\mu m$ à $20.0\mu m$. Sua estrutura robusta oferece grande resistência ao UV, embora em campos muito intensos de FUV e raios-X eles possam ser aniquilados. Seguiremos discutindo suas propriedades físicas e o modelo que usamos para representá-los.

3.3.1 Espécies de PAHs

Nossa biblioteca de PAHs contém oito espécies, todas pericondensadas. Preferimos este tipo pela maior resiliência que ele apresenta aos eventos do ISM e por sua simetria simples. Na tabela a seguir estão expressas as espécies consideradas:

Tabela 3.1 - Biblioteca de PAHs

| Nome | Formula |
|-----------------------------------|-----------------|
| <i>Coroneno</i> | $C_{24}H_{12}$ |
| <i>Circum – Coroneno</i> | $C_{54}H_{18}$ |
| <i>Circum²Coroneno</i> | $C_{96}H_{24}$ |
| <i>Circum³Coroneno</i> | $C_{150}H_{30}$ |
| <i>Circum⁴Coroneno</i> | $C_{216}H_{36}$ |
| <i>Circum⁵Coroneno</i> | $C_{294}H_{42}$ |
| <i>Circum⁶Coroneno</i> | $C_{384}H_{48}$ |
| <i>Circum⁷Coroneno</i> | $C_{486}H_{54}$ |

Nossos PAHs (pericondensados) podem ser aproximados por um disco de raio $a_{PAH}(\text{Å})$ dependente do número de carbono, N_c , pela relação 3.43. Catacondensados não possuem um raio definido, já que podem ser ligados por cadeias alifáticas e possuem geometria mais maleável (Dwek et al., 1997).

$$a_{PAH} = 10 \sqrt{\frac{N_c}{120}} \quad (3.43)$$

Vale aqui um pequeno comentário sobre o tamanho de grãos do modelo de Draine e Li (2001). Eles consideram os PAHs como esferas com densidade igual ao de um grão de grafite com o mesmo N_c , de modo que o raio obtido é $a = 1.286 N_c^{1/3} \text{Å}$. Seus raios são menores que os do modelo de Dwek et al. (1997). Como exemplo o Coroneno possui 3.55Å para Draine contra 4.47Å de Dwek.

3.3.2 Propriedades ópticas

Nosso modelo é majoritariamente uma composição do modelo de Dwek et al. (1997) e de Draine e Li (2001). No decorrer do texto será discriminado em quem foi baseado cada passo da nossa formulação.

A seção de choque de absorção ($\sigma_{PAH}(\lambda)$) é descrita como uma soma de diversas componentes (seguindo Dwek et al. (1997)) dada por:

$$\sigma_{PAH}(\lambda) = \sigma_{UV\text{-}visual}(\lambda) + \sigma_{IRc}(\lambda) + \sigma_{IRl}(\lambda) \quad (3.44)$$

a componente $\sigma_{UV\text{-}visual}(\lambda)$ representa a seção de choque dominante para o UV e visível, $\sigma_{IRc}(\lambda)$ a dominante no contínuo do IR e $\sigma_{IRl}(\lambda)$ os *features* dos PAHs.

Dwek et al. (1997) usa a seguinte relação para $\sigma_{UV\text{-}visual}(\lambda)$:

$$\sigma_{UV\text{-}visual}(\lambda) = 10^{-18} N_c [p_1 f_v(x) + f_u(x)] C \left(\frac{x}{x_c} \right) \text{ cm}^2 \quad (3.45)$$

definindo $x \equiv \lambda(\mu m)^{-1}$ e os parâmetros $x_c \equiv 12.5/a_{PAH}(\text{Å})$, $p_1 = 4.0$ e $p_2 = 1.1$. As funções $f_v(x)$, $f_u(x)$ e $C \left(\frac{x}{x_c} \right)$ são dadas por:

$$f_u(x) = \begin{cases} (x - 5.9)^2 (0.1x + 0.41) & \text{se } x \geq 5.9 \mu m^{-1}, \\ 0 & \text{se } x < 5.9 \mu m^{-1} \end{cases}$$

$$f_v(x) = \begin{cases} 1.0 & \text{se } x \geq x_l \equiv 4 \mu m^{-1}, \\ x^2 (3x_l - 2x)/x_l^3 & \text{se } x < x_l \end{cases}$$

$$C(y \equiv x/x_c) = \pi^{-1} \arctan(10^3 (y - 1)^3/y) + 0.5$$

Como pode ser visto em 3.15 e 3.16, essa formulação de seção de choque explode no UV extremo e raios-X moles. Nessa região usaremos a correção sugerida por Bakes et al. (2001), dada por:

$$\sigma_{abs}(\nu) = 2.16 \times 10^{-17} N_c Q_{0.003\mu m}(\nu) \text{ cm}^2 \quad (3.46)$$

para a qual $Q_{0.003\mu m}(\nu)$ é a eficiência de absorção de um grão de grafite com $a = 0.003\mu m$ calculado pelo modelo de Draine e Lee (1984), considera-se aqui que a eficiência independe da carga do PAH. A correção está ilustrada nas figuras 3.15 e 3.16 junto com o modelo não corrido, nas imagens nota-se a explosão no FUV. Medições de Verstraete et al. (1990) mostram que no limite de pequenos grãos de grafites e condições do espalhamento Rayleigh, as ligações π dominam a absorção e, assim como nos PAHs, a resposta do grafite depende de N_c , o que justifica a correção.

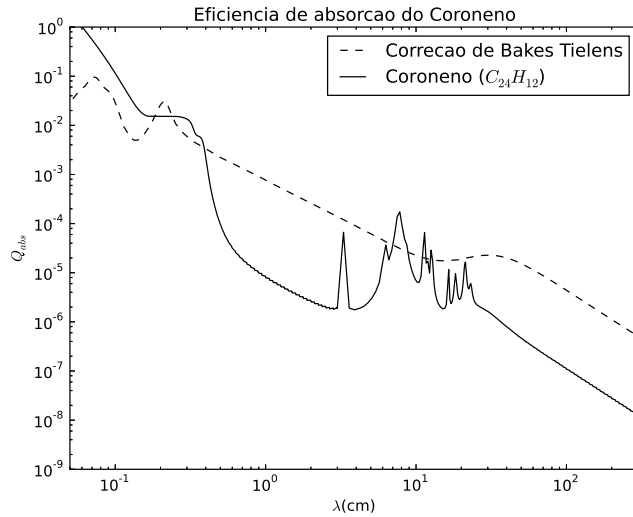


Figura 3.15: Modelo de absorção para o coroneno (linha sólida) e correção de Bakes & Tielens (1994) (linha tracejada), onde Q_{abs} representa a eficiência de absorção por comprimento de onda (λ) do coroneno.

O contínuo IR foi baseado em Draine e Li (2001), onde se caracteriza a opacidade no IR dos PAHs por uma fração (q_{grao}) da opacidade por átomos de carbono no grafite. Draine e Li (2001) indicam que $q_{grao} \approx 0.1$ (valor adotado neste trabalho) com base em observações da linha $3.3\mu m$ na Barra de Órion, Red Rectangle e NGC 1333. A expressão é:

$$\sigma_{IRc} = q_{grao} \times a_{PAH}^2 Q(a_0, \lambda), \quad (3.47)$$

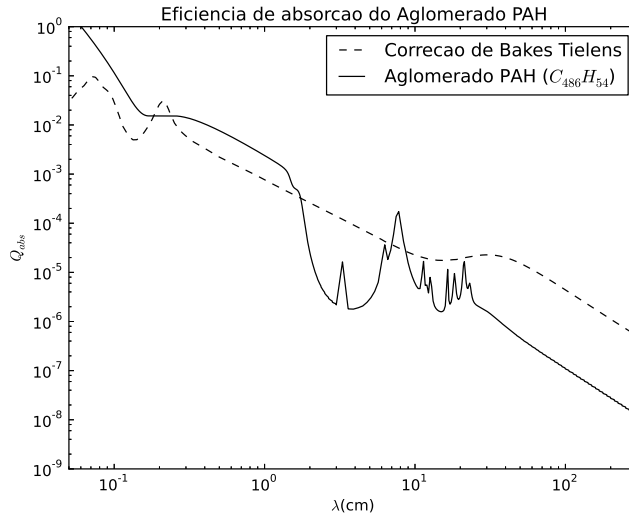


Figura 3.16: Modelo de absorção para o Aglomerado (linha sólida) e correção de Bakes & Tielens (1994) (linha tracejada), onde Q_{abs} representa a eficiência de absorção por comprimento de onda (λ) do Aglomerado.

adotamos $a_0 = 1.0\text{\AA}$, que corresponde ao raio de um PAH com 120 carbonos segundo 3.43.

A componente σ_{IR_c} é importante para representar o contínuo entre 1 e 5 μm , observada em ambientes variados como nebulosas de reflexão, SBG, Barra de Órion e galáxias normais (Sturm et al. (2000)), provavelmente causado por um quase-contínuo de vários modos vibracionais bastante fracos e com muitos harmônicos dos PAHs (Leger e Puget (1984), Allamandola et al. (1985)).

Nosso modelo de *Features* também foi baseado em Draine e Li (2001) e sua seção de choque seguem um conjunto de perfis de Drude. As *Features* em 3.3 μm são causadas por uma vibração *stretching mode* da ligação C-H, já os 6.2 e 7.7 μm pelo *stretching mode* do C-C, a de 8.6 μm é pelo *in-plane bending mode* de C-H e 11.3, 11.9 e 12.7 μm são devidos aos *out-of-plane modes* de C-H. Outras *features* fracos (16.4, 18.3, 21.2 e 23.1 μm) devem ser vibracionais causadas por *bending modes*. A seção de choque por número de carbonos será:

$$\frac{\sigma_{IR_l}}{N_C} = 34.58 \times 10^{-18-3.431/x} \times C \left(\frac{x}{x_C} \right) + \sum_{j=3}^{14} S_j(\lambda) \quad \text{cm}^2/C \quad x < 3.3, \quad (3.48)$$

cujo x , x_C e $C \left(\frac{x}{x_C} \right)$ são definidos do mesmo modo que em 3.45, $S_j(\lambda)$ é o perfil de Drude descrito por:

$$S_j(\lambda) \equiv \frac{2}{\pi} \frac{\gamma_j \lambda_j \sigma_{int,j}}{(\lambda/\lambda_j - \lambda_j/\lambda)^2 + \gamma_j^2} \quad (3.49)$$

onde $\sigma_{int,j}$ é a seção de choque integrada sobre o comprimento de onda (3.50), γ_j o fator de alargamento e λ_j o centro da linha.

$$\sigma_{int,j} \equiv \int S_j(\lambda) d\lambda^{-1} = \frac{2}{\pi} S_j(\lambda) \gamma_j \lambda_j^{-1}. \quad (3.50)$$

Foi adotada uma função cutoff(λ, λ_c), definida por Desert et al. (1990), com a forma:

$$\text{cutoff}(\lambda, \lambda_c) = \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{10^3 (y - 1)^3}{y} \right) + \frac{1}{2}, y = \lambda_c/\lambda \quad (3.51)$$

para a qual λ_c representa o comprimento de corte, com a seguinte forma proposta por Salama et al. (1996):

$$\left[\frac{\lambda_c}{\mu m} \right] = \begin{cases} 1/(3.80M^{-0.5} + 1.052) & \text{para PAHs neutros,} \\ 1/(2.282M^{-0.5} + 0.889) & \text{para PAHs cátions} \end{cases} \quad (3.52)$$

para M representando o número de anéis de benzeno. Embora seja valor aproximado, adotaremos $M = 0.4N_c$ se $N_c > 40$ e $M = 0.3$ se $N_c < 40$.

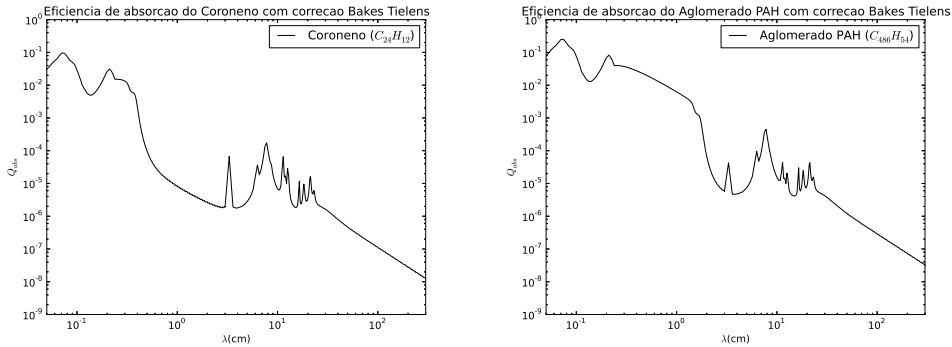


Figura 3.17: Modelo de absorção de PAHs montado com base em Dwek, Draine e Bakes. No painel direito a eficiência do coroneno e no esquerdo de nosso aglomerado.

O índice j se refere às diferentes linhas centradas em cada λ_j . A tabela 3.2 contém os valores para caracterizar a linha para PAHs neutros e ionizados (a presença de íons será melhor discutido em 3.3.3). Os Fatores E_{λ_j} são fatores de aumento usados para melhorar o ajuste da linha λ_j . Em medições de laboratório $E_{6.2} = E_{7.7} = E_{8.6} = 1$, porém eles não reproduzem as intensidades do observado, ficando sempre abaixo. Ajusta-se $E_{6.2} = 3$ e

$E_{7.7} = E_{8.6} = 2$ para melhor *fit* com o observacional. A figura 3.17 corresponde à Q_{abs} final calculada para o coroneno e para o aglomerado.

Tabela 3.2 - Features PAHs.

| j | λ_j (μm) | λ_j^{-1} (cm^{-1}) | γ_j | FWHM | | $\sigma_{int,j} \equiv \int S_j(\lambda)d\lambda^{-1}$ | |
|-----------------|-------------------------------|---------------------------------------|------------|--|--|--|-------------------------------------|
| | | | | $\gamma_j \lambda_j$ (μm) | $\gamma_j \lambda_j^{-1}$ (cm^{-1}) | neutro ($10^{-20} \text{cm}/C$) | ionizado ($10^{-20} \text{cm}/C$) |
| 1 | 0.0722 | 18500 | 0.195 | 0.141 | 27000 | 7.97×10^7 | 7.97×10^7 |
| 2 | 0.2175 | 46000 | 0.217 | 0.473 | 1000 | 1.23×10^7 | 1.23×10^7 |
| 3 | 3.3 | 3030 | 0.012 | 0.04 | 37 | $197 \times H/C$ | $44.7 \times H/C$ |
| 4 ^a | 6.2 | 1161 | 0.047 | 0.20 | 52 | $19.6 \times E_{6.2}$ | $157 \times E_{6.2}$ |
| 5 ^a | 7.7 | 1300 | 0.091 | 0.70 | 118 | $60.9 \times E_{7.7}$ | $548 \times E_{7.7}$ |
| 6 ^a | 8.6 | 1161 | 0.047 | 0.40 | 54 | $34.7 \times E_{8.6} \times H/C$ | $242 \times E_{8.6} \times H/C$ |
| 7 ^b | 11.3 | 886 | 0.018 | 0.20 | 16 | $427 \times (1/3)H/C$ | $400 \times (1/3)H/C$ |
| 8 ^b | 11.9 | 840 | 0.025 | 0.30 | 21 | $72.7 \times (1/3)H/C$ | $61.4 \times (1/3)H/C$ |
| 9 ^b | 12.7 | 787 | 0.024 | 0.30 | 19 | $167 \times (1/3)H/C$ | $149 \times (1/3)H/C$ |
| 10 ^c | 16.4 | 610 | 0.010 | 0.16 | 6 | 5.52 | 5.52 |
| 11 ^d | 18.3 | 546 | 0.036 | 0.66 | 20 | 6.04 | 6.04 |
| 12 ^d | 21.2 | 472 | 0.038 | 0.81 | 18 | 10.8 | 10.8 |
| 13 ^d | 23.1 | 433 | 0.046 | 1.07 | 20 | 2.78 | 2.78 |
| 14 ^e | 26.0 | 385 | 0.69 | 18.0 | 266 | 15.2 | 15.2 |

^a O valor de laboratório é $E_{6.2} = E_{7.7} = E_{8.6} = 1$, porém para ajustar o ISM difuso adota-se $E_{6.2} = 3$, $E_{7.7} = 2$, e $E_{8.6} = 2$

^b Para os modos *out-of-plane bending* da ligação C-H. O fator 1/3 é devido à suposição de que os PAHs possuem iguais números de H solo, duet e trio para as unidades de CH adjacentes

^c Largura de banda de Moutou et al. (2000)

^d Largura de banda de Moutou et al. (1996)

^e Seguindo Moutou et al. (1996), para reproduzir o fraco contínuo para $\lambda > 14\mu\text{m}$.

Os valores de E_{λ_j} são aproximações embasadas em análise de laboratório indicando que $\sigma_{int,7.7}/\sigma_{int,11.3} \approx 1.3$ para PAHs neutros e aproximadamente 12 para os ionizados (assumindo $H/C = 1/3$). Estudos no ISM difuso, nebulosas planetárias, nebulosas de reflexão e regiões HII apontam que $E_{6.2} = 1.5E_{7.7} \approx 3$. O valor de $E_{7.7}$ foi de modo a reproduzir o *feature* mais forte observado em $7.7\mu\text{m}$ e a intensidade de $8.6\mu\text{m}$ geralmente é consistente com $7.7\mu\text{m}$, de modo que $E_{7.7} = E_{8.6}$.

Como estamos trabalhando apenas com pericondensados, aproximando os PAHs como um disco de raio a_{PAH} , a eficiência de absorção será (Dwek et al. (1997)):

$$Q(a, \lambda)_{PAH} = \frac{\sigma_{PAH}(\lambda)}{\pi(a_{PAH})^2} \quad (3.53)$$

e a figura 3.17 ilustra $Q(a, \lambda)_{PAH}$ obtida no nosso modelo para o coroneno e o aglomerado, respectivamente.

O grau de hidrogenação ($\alpha_{H/C}$) exprime o número de H ligados aos C periféricos. As ligações H-C são mais fracas que C-C (respectivamente $4.5eV$ e $7.5eV$), portanto são mais suscetíveis aos efeitos do campo de radiação, podendo ser mais facilmente quebradas, o que altera as bandas vibracionais $C-H$ e $C=C$ (SK92).

O valor de $\alpha_{H/C}$ depende tanto do ambiente quanto da história da molécula. A desidrogenação em aglomerados de PAHs é menos eficiente devido à alta densidade de modos vibracionais que a molécula apresenta, o que causa uma rápida absorção e dissipação da energia do fóton. Sem desidrogenação $\alpha_{H/C} = 0.5$ para o coroneno e $\alpha_{H/C} = 0.11$ para o aglomerado ($C_{486}H_{54}$), porém em ambientes com campo de radiação muito energético pode-se alcançar $\alpha_{H/C} = 0.01$ (SK92).

3.3.3 Ionização

O potencial de ionização dos PAHs é em torno de 6 à 7 eV o que permite sua ionização por efeito fotoelétrico (Allamandola et al., 1985; Van der Zwet e Allamandola, 1985; Lepp e Dalgarno, 1988; Bakes e Tielens, 1994). Porém, os PAHs também capturam elétrons colisionalmente, assim como o fazem com íons (Draine e Sutin, 1987). Este balanço de cargas foi estudado por Weingartner e Draine (2001), que concluíram que os cátions dominam sobre os ânions nos PAHs. Contudo, mais recentemente (Cecchi-Pestellini et al., 2008), estudos da extinção ultravioleta na Galáxia indicaram que os PAH^- constituem uma fração considerável dos PAHs no ISM, enquanto os cátions são pouco abundantes ou ausentes e Bauschlicher Jr et al. (2009) relativiza a questão ao concluir que ânions, cátions e neutros devem estar na mesma proporção.

PAHs ionizados têm suas linhas provenientes da ligação C-H *out-of-plane-bending* (como a $3.3\mu m$, $8.6\mu m$ e a $11.3\mu m$ e outras de maior comprimento de onda) diminuída, enquanto as linhas provenientes de C-C ($6.2\mu m$ e $7.7\mu m$) sofrem pouca alteração. Estes resultados estão ilustrados nas figuras 3.18 e 3.19. A primeira ilustra Q_{abs} para todo o espectro comparando os PAHs neutros e os cátions. Na segunda também existe a mesma comparação com a região das bandas aromáticas ampliadas. Nota-se que PAHs neutros dominam a

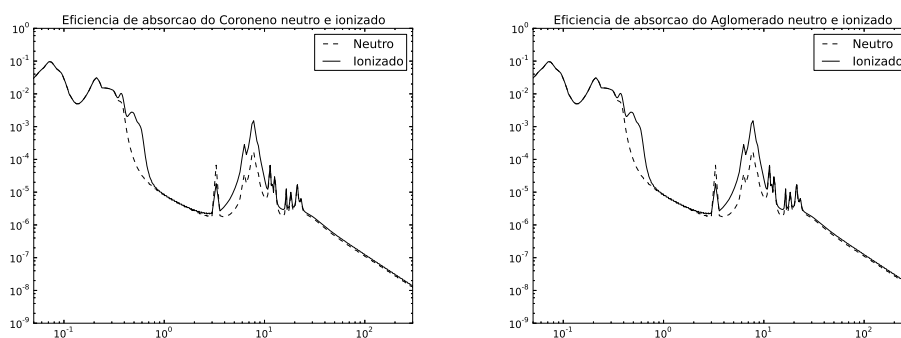


Figura 3.18: Comparação entre a eficiência de absorção do PAH neutro e cátion. No painel da esquerda está o coroneno, no da direita o aglomerado.

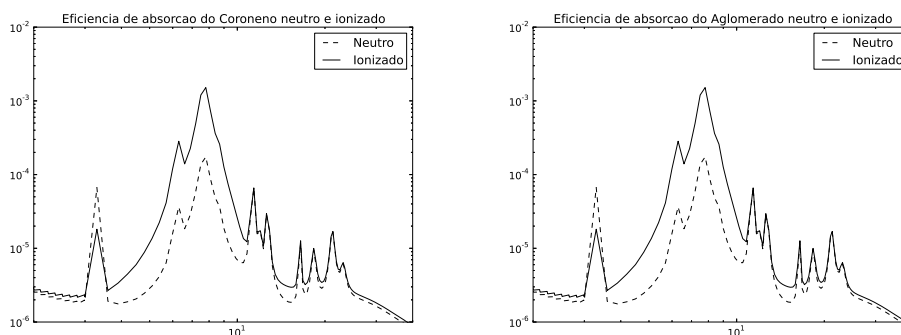


Figura 3.19: Comparação entre a eficiência de absorção do PAH neutro e cátion na região das bandas aromáticas. No painel da esquerda está o coroneno, no da direita o aglomerado.

emissão na região e $10\mu\text{m}$ à $13\mu\text{m}$ enquanto os ionizados dominam de $6\mu\text{m}$ à $9\mu\text{m}$. A existência de linhas sensíveis e de linhas insensíveis à ionização fornece informações sobre o campo de radiação incidente, densidade de elétrons e temperatura do gás.

Embora o tamanho do PAHs também influencie nas intensidades das linhas, Draine e Li (2001) conclui que a razão dos fluxos em $7.7\mu\text{m}$ e $11.3\mu\text{m}$ é muito mais dependente (cerca de 10 vezes) do seu grau de ionização do que de seu tamanho.

Em ambientes astrofísicos é esperado que os PAHs estejam ionizados (uma fração ou todos eles) e assim serão considerados, salvo quando dito o contrário, com os dados ópticos de Draine e Li (2001) expressos na tabela 3.2.

3.3.4 Flutuações de temperatura

Em campos de radiação muito intensos ou muito débeis, os pequenos grãos e macromoléculas possuem temperaturas variadas devido à interação entre eles e fótons energéticos

individuais, resultando no alargamento da sua distribuição de temperatura, em contraste com os grandes grãos que podem ser muito bem representados por uma função delta em torno da temperatura de estado estacionário do grão. Utilizaremos o formalismo de Guimaraes (2006).

Consideramos que a taxa de absorção de fótons por segundo (r_{abs}), por um grão de raio a seja:

$$r_{abs} = \int_0^{13.6eV} \pi a^2 Q_{abs}(E) n(E) dE \quad (3.54)$$

onde $n(E)$ é a intensidade média de fótons com energia E e que a eficiência de absorção (Q_{abs}) não depende da temperatura (embora a dependência exista, se a é pequeno Q_{abs} aumenta com a diminuição de temperatura, porém considerar este efeito impõe o uso de grandes recursos computacionais). O tempo médio de absorção de fótons (τ_{abs}) será:

$$\tau_{abs} = \frac{1}{r_{abs}} \quad (3.55)$$

O tempo médio de difusão de temperatura no grão é tipicamente muito maior que τ_{abs} , portanto, a temperatura do grão é bem definida durante todo tempo (exceto um pequeno instante δt imediatamente após a absorção). O grão tipicamente emite no IR enquanto absorve fótons no UV (fótons geralmente milhares de vezes mais energéticos que os do IR), o que torna “suave” o resfriamento, exceto para pequenas temperaturas.

A curva de resfriamento pode ser descrita de maneira geral pelas equações diferenciais 3.56, onde H representa a entalpia, T a temperatura, t o tempo e $C(T)$ o capacidade térmica.

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \frac{dH}{dT} \frac{dT}{dt} \\ \frac{dT}{dt} &= \frac{dH/dt}{dH/dT} \\ \frac{dH}{dt} &= C(T) \end{aligned} \quad (3.56)$$

A potência irradiada por um grão após a absorção de um fóton é:

$$\frac{dH}{dt} = 4\pi a^2 \int_0^\infty \pi Q_{IR} B_\lambda(T) d\lambda \quad (3.57)$$

onde Q_{IR} é a eficiência de emissão no IR. Juntando 3.56 com 3.57 obtemos a seguinte curva de resfriamento para nossos grãos:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{4\pi a^2}{C(T)} \int_0^\infty \pi Q_{IR} B_\lambda(T) d\lambda \quad (3.58)$$

Considerando que a absorção e o resfriamento do grão se dá pela distribuição de Poisson em torno de τ_{abs} , a distribuição dos períodos de resfriamentos (τ) será:

$$P(\tau) = \frac{1}{\tau_{abs}} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_{abs}}\right) \quad (3.59)$$

A probabilidade de um grão resfriar até uma temperatura T é obtida integrando 3.59 de $\tau_{min}(T)$ (mínimo período necessário para se resfriar de T_0 até T , equação 3.61) ao infinito, ou seja:

$$P(T) = \int_{\tau_{min}(T)}^\infty P(\tau) d\tau = \frac{1}{\tau_{abs}} \exp\left(-\frac{\tau_{min}(T)}{\tau_{abs}}\right) \quad (3.60)$$

$$\tau_{min}(T) = \int_{T_0}^T \frac{dT}{dT/dt} \quad (3.61)$$

A energia E do fóton está relacionado com a variação de temperatura $\Delta T = T_0 - T_1$ pela relação:

$$\int_{T_1}^{T_0} C(T) dT = E \quad (3.62)$$

onde T_1 é a temperatura mínima que o grão poderia alcançar. Não existe consenso sobre o valor de T_1 . Baseado em Dwek (1986) adotamos $T_1 \simeq 2.73K$, o que corresponde a temperatura da radiação de fundo cósmica.

Para $T_1 < T < T_0(E)$, o tempo em que o grão permanece entre uma temperatura T e $T + dT$ é dado por:

$$G_E(T) dT = \frac{dt}{\tau_{abs}} P_t(T) \quad (3.63)$$

$$G_E(T) = \frac{1}{\tau_{abs}(dT/dt)} \exp\left(-\frac{\tau_{min}(T)}{\tau_{abs}}\right)$$

com $\tau_{min}(T)$ dado por 3.61. Por fim, ponderando 3.63 pela densidade de fótons de energia E , $n(E)$ chegamos à função final de distribuição de temperatura para os pequenos grãos na forma:

$$G(T) = \tau_{abs} \int_0^{13.6eV} G_E(T) \pi a^2 Q_{abs}(E) n_p(E) dE \quad (3.64)$$

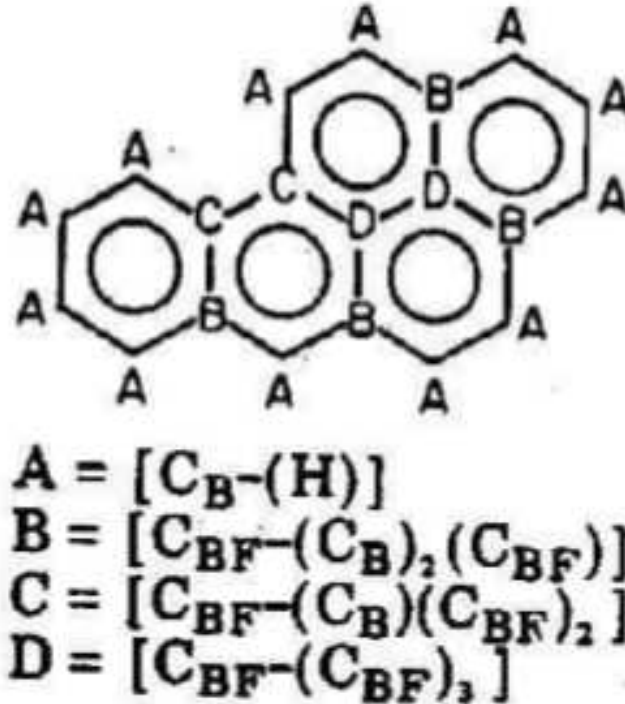


Figura 3.20: Identificação dos carbonos para o método aditivo. O Benzo[a]pireno é formado por 12 carbonos pertencentes ao grupo A, 4 pertencentes ao grupo B, 2 ao grupo C e 2 ao grupo D. Retirado de Stein et al. (1977).

O último parâmetro relevante para o nosso modelo que falta ser definido é a capacidade térmica $C(T)$ dos pequenos grãos e PAHs. No cálculo desta grandeza seguimos (Dwek et al., 1997) e para os pequenos grãos de grafite utilizamos a capacidade térmica de Markelov et al. (1973), válida para temperaturas de $10K$ à $2000K$, descrita por:

$$C_{graf} = 2.2 \times 10^7 \frac{\sum_{n=3}^5 a_n T^n}{\sum_{n=0}^5 b_n T^n} \quad (3.65)$$

com os seguintes coeficientes:

$$[a_3, a_4, a_5] = [0.10273, 4.4354 \times 10^{-2}, 2.21224 \times 10^{-4}]$$

$$[b_0, b_1, b_2, b_3, b_4, b_5] = [1.0003 \times 10^{-12}, 3.6909 \times 10^4, 1129.71, 30.4420, 1.2888 \times 10^{-2}, 1.0 \times 10^{-4}]$$

No caso dos PAHs utilizamos o método aditivo de Stein et al. (1977), onde se considera quatro tipos de ligações de carbono (A , B , C e D), dependendo de com o que ele está

ligado, um exemplo é dado pela figura (3.20). Esta classificação impõe certos vínculos como $N_c \equiv N_A + N_B + N_C + N_D$, onde N_c é o número total de carbono e N_A , N_B , N_C e N_D o número de carbonos pertencentes respectivamente aos grupos A , B , C e D . Um PAH completamente hidrogenado terá o número de hidrogênios (N_H) igual a $N_H = \sqrt{6N_c}$ (Omont, 1986) e $N_A = N_H$, de modo que C_{PAH} fica:

$$C_{PAH} = f_H N_A C_A(T) + N_B C_B(T) + N_C C_C(T) + N_D C_D(T) \quad (3.66)$$

cujos parâmetros f_H representa o grau de hidrogenação (valendo 1 caso completamente hidrogenado e 0 caso completamente desidrogenado) e $C_A(T)$, $C_B(T)$, $C_C(T)$ e $C_D(T)$ o calor específico devido a cada grupo.

Stein et al. (1977) admite $C_C = C_B$, considerando o PAH completamente hidrogenado e substituindo cada N em 3.66, chegamos à:

$$C_{PAH} = N_c \left(\sqrt{\frac{6}{N_c}} (C_A + C_B - 2C_D) + \frac{6}{N_c} (C_D - C_B) + C_D \right) \quad (3.67)$$

A capacidade térmica entre $300K$ e $3000K$ é baseada em Stein (1978) e Fahr Stein e Fahr (1985), donde Guimaraes (2006) ajustou o polinômio de grau 6 e coeficientes:

$$C_{PAH} = N_H \sum_{n=0}^6 a_n T^n + N_c \sum_{n=0}^6 b_n T^n + \sum_{n=0}^6 c_n T^n \quad (3.68)$$

$$[a_n] = [27.8408, -0.11373, 2.2903 \times 10^{-4}, -2.02263 \times 10^{-7}, 9.27398 \times 10^{-11}, -2.15391 \times 10^{-14}, 2.00033 \times 10^{-18}]$$

$$[b_n] = [-18.64024, 0.1362, -1.92486 \times 10^{-4}, 1.47558 \times 10^{-7}, -6.30645 \times 10^{-11}, 1.40855 \times 10^{-14}, -1.27792 \times 10^{-18}]$$

$$[c_n] = [-115.142, 0.50166, -8.67177 \times 10^{-4}, 7.35562 \times 10^{-7}, -3.32388 \times 10^{-10}, 7.66823 \times 10^{-14}, -7.09378 \times 10^{-18}]$$

Para N_c suficientemente grande C_{PAH} converge para C_{graf} , o que é bastante relevante quando $T < 300K$ e o método aditivo falha. Dwek et al. (1997) (e nós) aproxima C_{PAH} como C_{graf} , ponderando-os de modo a se uni-los suavemente. O resultado (válido para $T < 2000K$) é:

$$\log_{10}(C_{PAH}/N_c) = -21.26 + 3.1688 \log_{10} T - 0.401894(\log_{10} T)^2 \quad (3.69)$$

A geometria dos PAHs é determinante para definir suas propriedades físicas, por isso optamos por usar uma biblioteca restrita de PAHs do mesmo tipo e os pericondensados foram preferidos por sua maior resiliência, e por tanto, maior abundância esperada no ISM, além de evitarmos certos inconvenientes como utilizar formalismos errôneos ou sem embasamento físico no modelo.

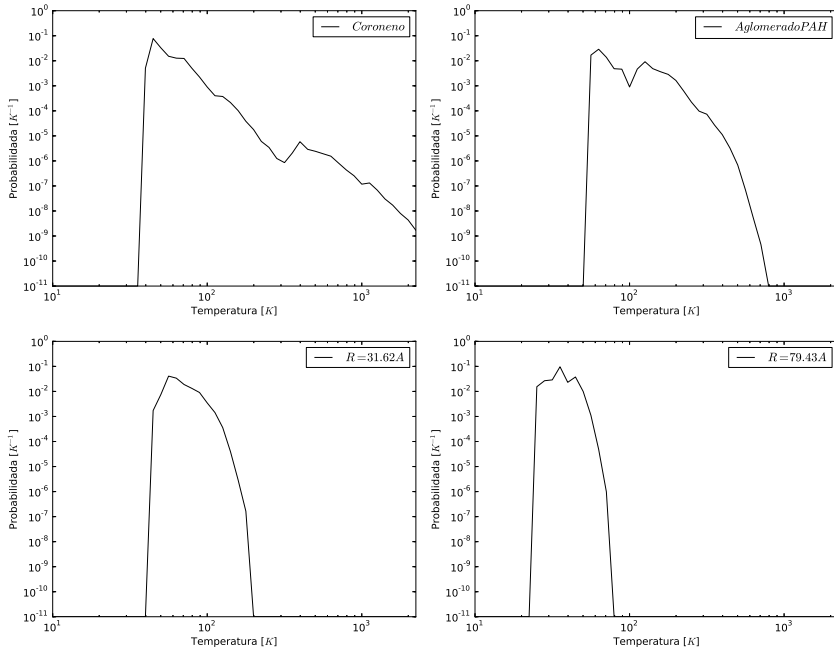


Figura 3.21: Flutuações de temperatura de pequenos grãos em uma galáxia de 0.3G yr Gyr e à 1.0 kpc do centro. No eixo-x temos a temperatura e no -y a probabilidade do grão estar nessa temperatura. No painel superior direito as flutuações do coroneno, superior esquerdo do aglomerado ($C_{486}H_{54}$). Nos painéis inferiores pequenos grãos de grafite de raio 31.62Å (esquerda) e 79.43Å (direita).

As figuras 3.21, 3.22, 3.23 e 3.24 ilustram a flutuação de temperatura de pequenos grãos ($a = 31.62\text{Å}$ e $a = 79.43\text{Å}$) e PAHs (Coroneno, $C_{24}H_{12}$, e nosso exemplo de aglomerado, $C_{486}H_{54}$) para raios (1.0 e 8.0 kpc) e idades galácticas selecionados (0.3 e 1.5Gyr). A escolha das espécies foi arbitrária devido à finalidade puramente ilustrativa, já que a presença de toas as distribuições acrescentaria pouco ao trabalho e faria muito volume, porém tentou se pegar intervalos onde se fosse apreciável a mudança. Nas figuras citadas nota-se que quanto menor é a espécie mais larga é a distribuição de temperatura, enquanto para maiores

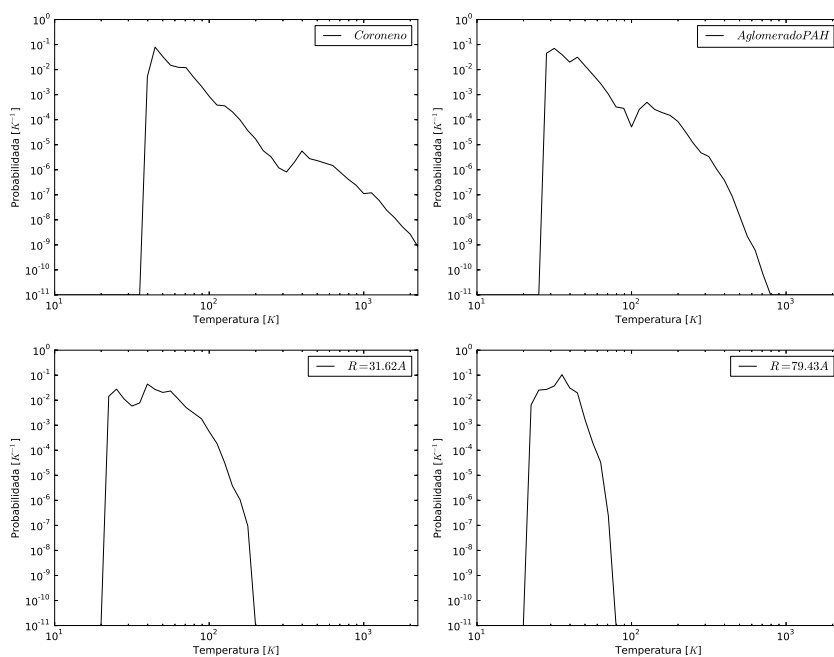


Figura 3.22: Flutuações de temperatura de pequenos grãos em uma galáxia de 0.3G yr Gyr e à 8.0 kpc do centro. As representações são as mesmas da figura 3.21.

espécies o máximo e o mínimo se aproximam. O efeito dos grãos na SED da galáxia será apresentado no capítulo seguinte.

Interessante notar que quanto maior a partícula mais estreita é a distribuição de temperatura (ou seja, mais se aproxima da função delta representativa dos grandes grãos, como era de se esperar). Outra característica interessante é o caráter bimodal resultante da dependência das flutuações com a intensidade e a dureza do campo de radiação ao qual o grão está exposto.

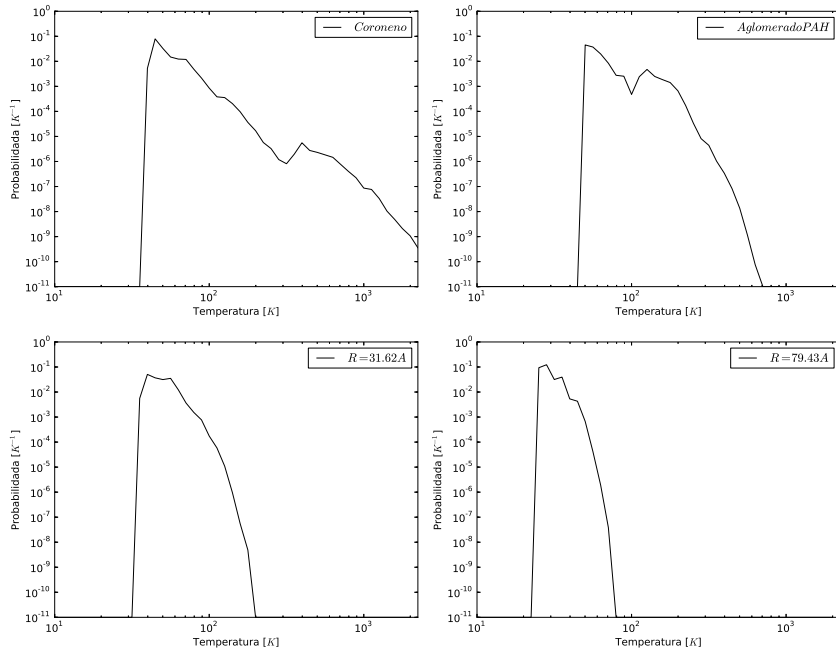


Figura 3.23: Flutuações de temperatura de pequenos grãos em uma galáxia de 1.5 Gyr e à 1.0 kpc do centro. As representações são as mesmas da figura 3.21.

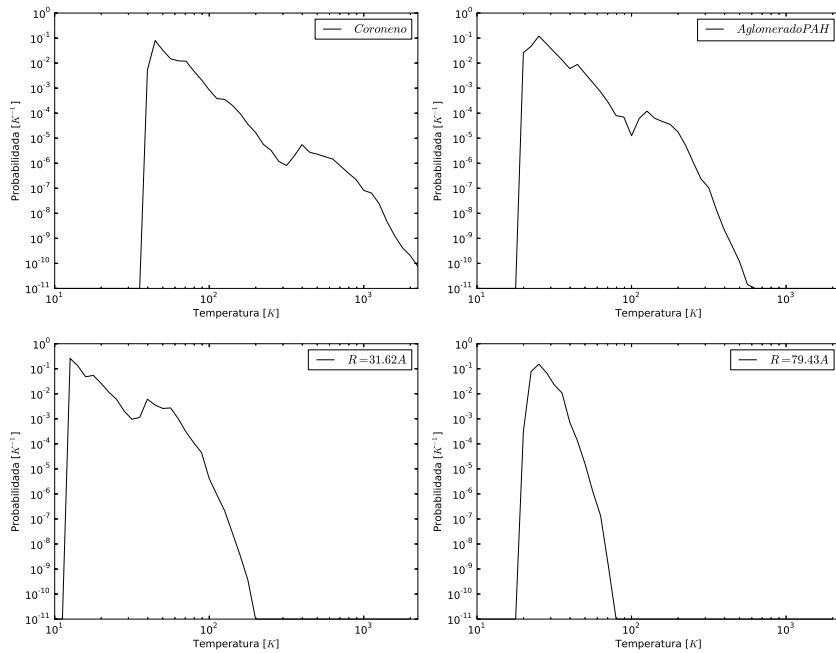


Figura 3.24: Flutuações de temperatura de pequenos grãos em uma galáxia de 1.5 Gyr e à 8.0 kpc do centro. As representações são as mesmas da figura 3.21.

Simulações

Após um breve resumo das principais considerações sobre evolução galáctica e do meio interestelar e descrever o modelo Quimiodinâmico podemos finalmente discutir o resultado e as análises resultantes de nosso modelo. Primeiramente testaremos a relevância das flutuações e da ionização dos PAHs, considerando os cátions. Avaliaremos então o padrão de algumas razões de linhas. Para melhor ampliar o resultado obtido compararemos o resultado de nossa galáxia fiducial com uma de $1 \times 10^{12} M_{\odot}$ e com outra menos eficiente na produção de poeira que segue o modelo de Dwek (1998).

Cabe aqui reiterar que, salvo quando dito o contrário, adotamos o modelo cosmológico $\Lambda - \text{CDM}$, com $\Omega_{\Lambda} = 0.7$, $\Omega_M = 0.3$, $H_0 = 70 \text{ km/s/Mpc}$, um universo plano ($\Omega_K = 0.0$) e com parâmetro de densidade da radiação desprezível ($\Omega_{\gamma} = 0.0$). Considera-se que a formação da galáxia se inicia em $z = 10$ e que a temperatura média do gás (livre de metais) nesse instante é $T = 10^4 \text{ K}$. A massa da galáxia fiducial é $M_G = 2 \times 10^{11} M_{\odot}$.

4.1 Efeitos dos parâmetros físicos

Nesta seção investigamos a influência de suposições físicas nos resultados dos nossos cálculos. Desse modo, poderemos tanto avaliar as incertezas das nossas previsões como ter subsídios para elaborar estratégias de obtenção das condições físicas dos PAHs a partir das observações das suas linhas.

A fim de termos uma leitura clara dos resultados estudaremos em separado cada parâmetro físico relevante.

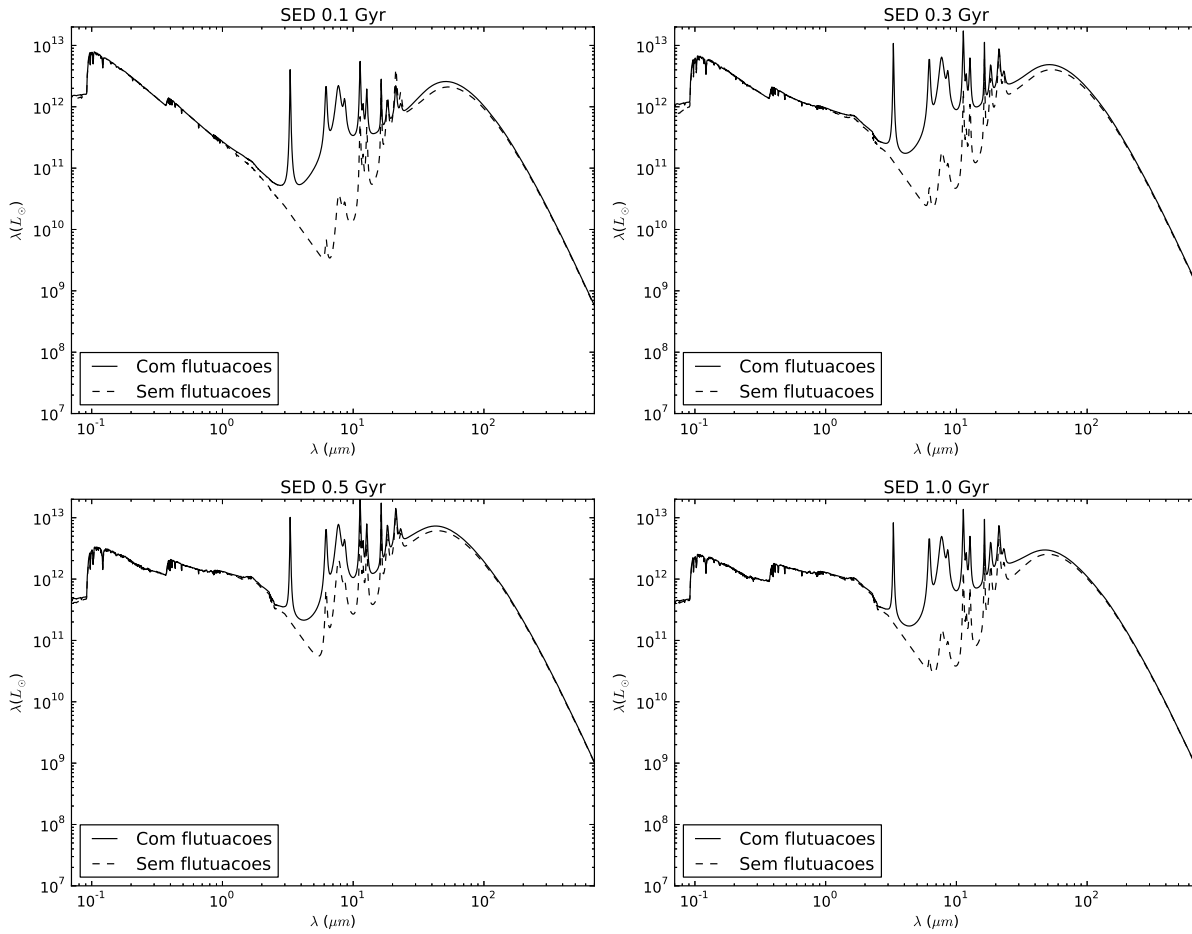


Figura 4.1: SEDs calculada para uma galáxia de $2 \times 10^{11} M_{\odot}$ para os tempos 0.1 (superior esquerdo), 0.3 (superior direito), 0.5 (inferior esquerdo) e 1.0 Ganos (inferior direito). As linhas tracejadas indicam a SED sem flutuações de temperatura e as contínuas considerando o efeito.

4.1.1 Flutuações de temperatura

As figuras 4.1 e 4.2 mostram a evolução da luminosidade em função do comprimento de onda para nossa galáxia fiducial, com $2 \times 10^{11} M_{\odot}$, entre 0.1 e 1 Gano (4.1) e entre 2.6 e 13 Ganos(4.2). Adotou-se os PAHs neutros de Li e Draine (2001; doravante LD01). Podemos apreciar as diferenças dos espectros nos casos com e sem flutuações de temperatura.

As flutuações de temperatura dos pequenos grãos e PAHs elevam o contínuo na região do infravermelho próximo e médio. Os PAHs apresentam flutuações de temperatura que podem chegar a superar 2000 K. A combinação das emissões de corpo negro dos PAHs e pequenos grãos mais quentes atenuam a fronteira entre o infravermelho dominado pela emissão da poeira e o visível, dominado pela emissão estelar.

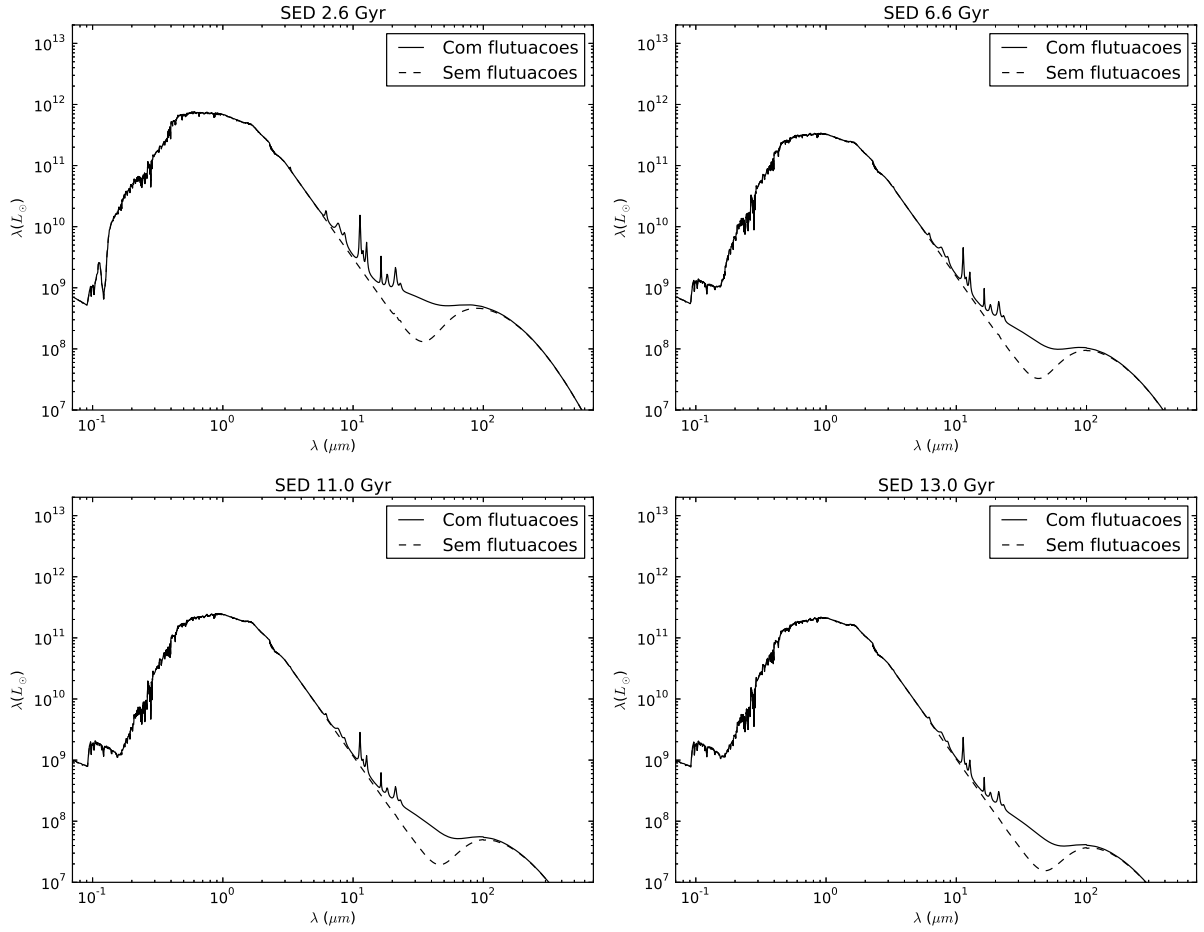


Figura 4.2: SEDs calculada para uma galáxia de $2 \times 10^{11} M_{\odot}$ para os tempos 2.6 (superior esquerdo), 6.6 (superior direito), 11.0 (inferior esquerdo) e 13.0 Ganos (inferior direito). As linhas tracejadas indicam a SED sem flutuações de temperatura e as contínuas considerando o efeito.

Um assinatura espectral que denuncia a presença de flutuações de temperatura é a linha de PAH a $3.3 \mu m$, que só surge quando há temperaturas suficientemente elevadas. Esta *feature* está frequentemente presente em espectros de fortes fontes de infravermelho, cobrindo a faixa em torno dos $3 \mu m$. As alturas das demais *features* aromáticas abaixo de $10 \mu m$ são drasticamente afetadas pelas flutuações de temperatura, sendo muito subestimadas quando não se consideram flutuações.

Após a fase *star burst* (figura 4.2) a principal diferença é notada após a região aromática, onde as flutuações suavizam a transição do MIR para o FIR, e pela quase ausência de AIBs no caso sem flutuações. Por esta razão daqui em diante sempre se considerará a poeira com flutuações de temperatura, salvo quando especificado o contrário.

Nota-se que durante os dois primeiros bilhões de anos de idade da galáxia, a alta taxa

de formação estelar, característica da fase *star burst* (como pode ser visto na figura 3.4), produz um campo intenso tanto no UV e raios-X moles quanto no MIR e FIR, o que decorre da grande quantidade de estrelas O e B que preenchem a galáxia com radiação dura. O campo então é processado pelos grãos e reemitido no MIR e FIR como radiação térmica. Logo, sem essas estrelas massivas a emissão tanto nos pequenos como nos grandes comprimentos de onda perde intensidade, situando-se então o pico da emissão na região vermelha do visível e no NIR (figura 4.2), em contraste com as galáxias de população estelar jovem (figura 4.1) que emitem tanto em altas energias e na região azulada do visível como no pico IR que marca a fase ULIRG.

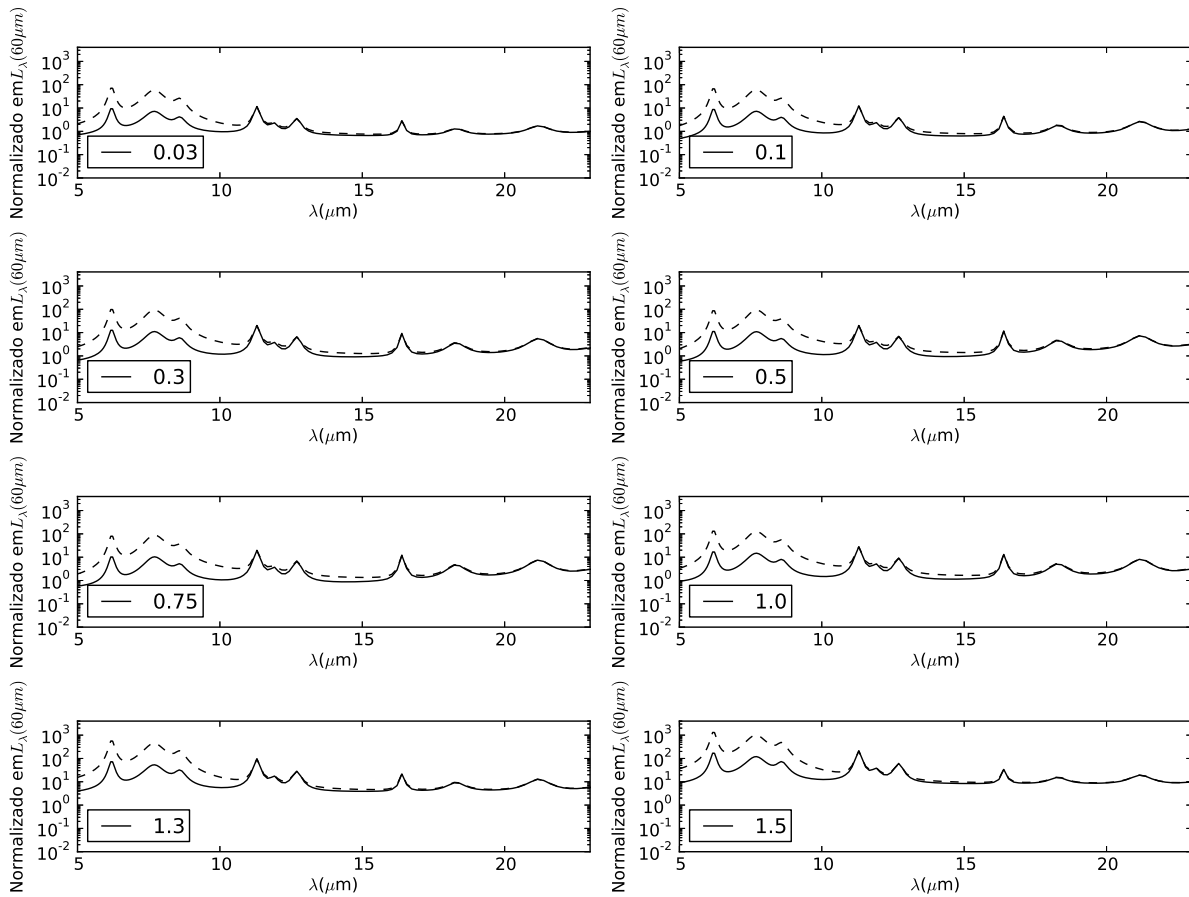


Figura 4.3: Luminosidade das Bandas Aromáticas neutras (linha contínua) e ionizadas (linha tracejada) 5 à 20 μm normalizada em $L_{\lambda}(60\mu m)$, para uma galáxia de $2 \times 10^{11} M_{\odot}$, de 0.1 à 1.5 Ganos e no caso A de produção de poeira.

4.1.2 Estágio de ionização

A partir das seções de choque da tabela 3.2 de LD01 calculamos a SED para PAHs ionizados (cátions) e neutros. O resultado está presente nas figuras 4.3 e 4.4, onde a SED está normalizada em $L_{\lambda}(60\mu m)$ e a linha tracejada representa os cátions e a contínua os neutros. O modelo reproduz a alta dependência das linhas 6.2, 7.7 e 8.1 μm com a ionização (figura 4.3), enquanto as linhas acima de 11.2 μm são aproximadamente independentes do grau de ionização.

Como as linhas respondem diferentemente a ionização as razões das linhas 6.2 μm ou 7.7 μm com 11.2 μm ou 12.7 μm podem ser usadas para indicar o grau de ionização dos PAHs e conseqüentemente trazer informações sobre o campo. Optamos por analisar sempre os casos totalmente neutro e totalmente ionizados, pois diversos fatores podem influir nas alturas da linha (metalicidade e distribuição de tamanho como exemplo) e o objetivo é estudar o efeito dos parâmetros físicos, de forma que o tratamento em separado permite uma abordagem mais analítica.

Na figura 4.4 nota-se que a emissão tanto das linhas neutras quanto das ionizadas enfraquece após 2.6 Ganos, o que também pode se ver na figura 4.2. Até por volta de 1 Gano nota-se que a região de pequenos comprimentos é mais baixa que a de longo comprimento nas AIBs.

Nos painéis de 1.3 e 1.5 Ganos ambos os limites estão altos e as linhas se encontram em um “vale” no contínuo, que caracteriza uma transição de fase na qual o contínuo da região de pequenos comprimentos de onda está mais alto que dos grandes. Este comportamento decorre do término do SB e do conseqüente amolecimento do campo de radiação, após a morte das estrelas O e B, e permanece até os dias atuais.

Vale lembrar que não se pode contar apenas com a sensibilidade da linha ao campo de radiação mas também com a intensidade que ela emite sobre o contínuo e a nitidez que se consegue distingui-la, visto que em observações sempre existem ruídos variáveis conforme a fonte (ver Smith et al. (2007), figura 1, para apreciar as diferentes AIBs de 59 objetos e notar tanto a resolução quanto a nitidez de alguns objetos). Ainda é preciso contar com outras bandas presente na região das AIBs, principalmente entre 10 e 20 μm , como a absorção em 10.7 μm dos silicatos, emissão de [Ne v] em 14.32 μm (em AGNs) e outras bandas fracas. Logo, as linhas escolhidas devem ser claras e intensas para se evitar erros

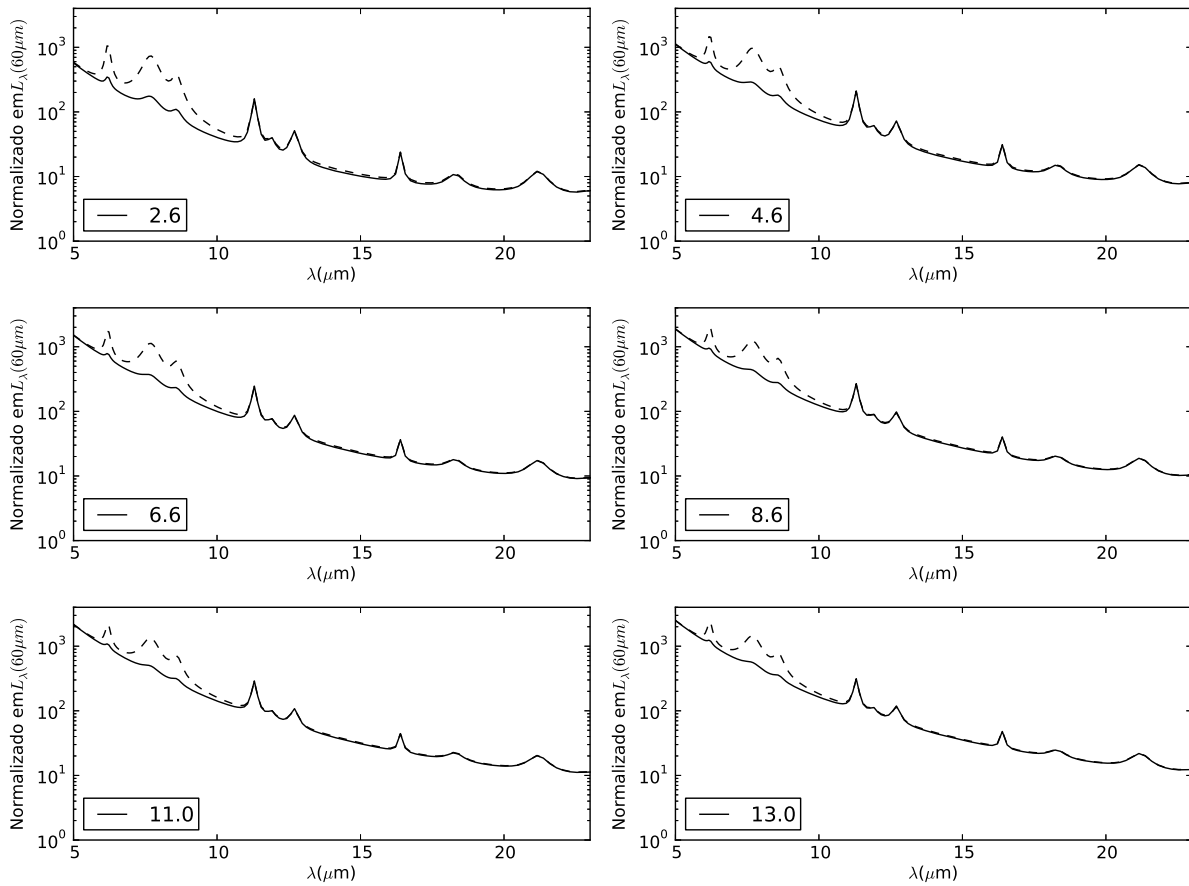


Figura 4.4: Luminosidade das Bandas Aromáticas neutras (linha contínua) e ionizadas (linha tracejada) 5 à 20 μm normalizada em $L_{\lambda}(60\mu\text{m})$ para uma galáxia de $2 \times 10^{11} M_{\odot}$, de 2.6 à 13.0 Ganos e no caso A de produção de poeira.

sistemáticos.

4.1.3 Evolução das linhas de PAHs

Existem vários diagnósticos baseados nas linhas dos PAHs, indicando SFR, a presença de AGNs ou L_{IR} (O’Dowd et al., 2009), Farrah et al. (2008). A grande vantagem das abordagens variadas é a possibilidade de se obter informação com diversas partes do espectro, visto que algumas linhas podem ser indistinguíveis por limitações na resolução ou estar fora da cobertura do telescópio devido ao *redshift*.

Nossas atenções serão voltadas majoritariamente para as linhas $7.7\mu\text{m}$ e $11.2\mu\text{m}$, por haver extensos trabalhos na literatura sobre elas e por essas linhas serem usadas para diagnóstico de presença de AGNs e SB e estimadores de SFR (O’Dowd et al. (2009) encontram que estas linhas constituem o melhor indicador nestes casos), além de serem

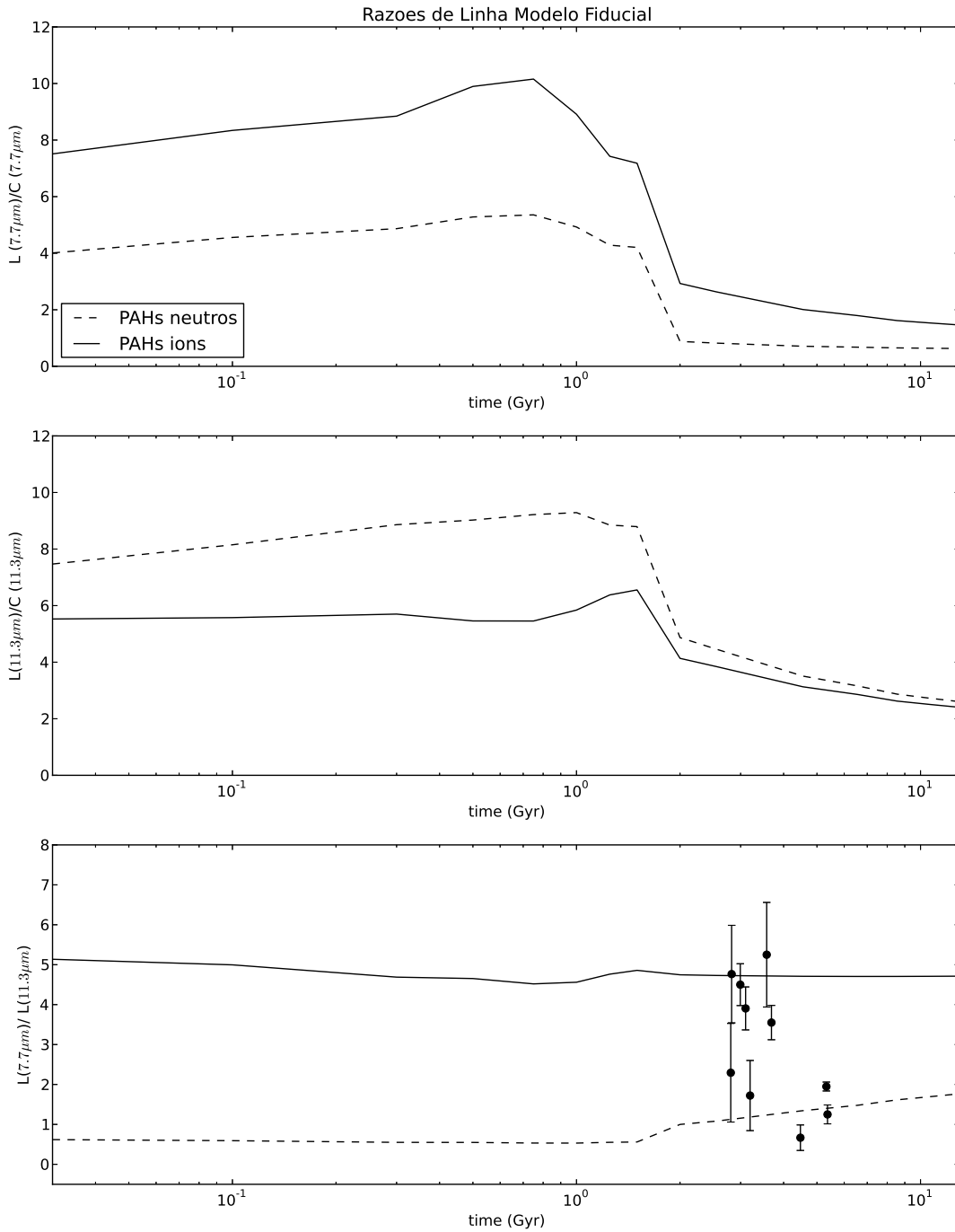


Figura 4.5: Variação temporal da razão $L(7.7\mu\text{m})/C(7.7\mu\text{m})$, painel superior, $L(11.2\mu\text{m})/C(11.2\mu\text{m})$, painel central e $L(7.7)/L(11.2)$ (μm), painel inferior, para a galáxia de $2 \times 10^{11} M_{\odot}$ quando os PAHs estão neutros (linha contínua) e ionizados (linha tracejada). Os pontos observacionais do painel inferior são ULIRGS a $z \sim 1 - 2$ do tipo *star burst* puro com razões L/L medidas da amostra de Sajina et al. (2007).

geralmente linhas proeminentes e de fácil observação.

Cabe aqui algumas ressalvas visto que muitas vezes diagnósticos diferentes não são

compatíveis entre si. Siana et al. (2009) investigando a LBG *Cosmic Eye*, mediu a SFR pelo UV e pelo IR encontrando um valor seis vezes maior para o primeiro. Vega et al. (2005) não encontra relação entre as linhas aromáticas e fonte que gera o campo enquanto que O’Dowd et al. (2009) encontram relações entre as razões de linha e fonte.

A figura 4.5 mostra a razão linha sobre contínuo, L/C , da *feature* $7.7\mu m$ (painel superior) e da $11.2\mu m$ (painel do meio) para os PAHs neutros e ionizados. Nota-se o claro e rápido declínio em ambos os painéis após a fase SB, de forma que a intensidade relativa ao contínuo das linhas claramente acompanham a SFR. Já o painel inferior ilustra a razão $L(7.7)/L(11.2)$ (μm) em função do tempo para PAHs neutros e ionizados, onde o primeiro apresenta um comportamento quase constante em torno de 5. Já para os PAHs ionizados, ela também se mantém durante a fase SB e sobe rapidamente entre 1 e 2 Ganos, enquanto que de 2 Ganos até o hoje a razão tem um crescimento.

Nota-se assim que dentro de um intervalo de 0.8 à 5.0 $L(7.7)/L(11.2)$ (μm) a razão destas linha pode ser usada tanto como indicador de ionização e também de SFR. Aparentemente esta razão (tanto para o caso neutro quanto ionizado) satura quanto diagnóstico de dureza do campo e também do grau de ionização. De modo a permitir comparações com dados observacionais a figura 4.5 inclui as razões de linha $L(7.7)/L(11.2)$ (μm) determinados por Sajina et al. (2007) para a amostra de ULIRGs a altos *redshifts* ($z \sim 1 - 2$) classificados como tipo 1 (*star burst* puro) por Yan et al. (2007). O tempo correspondente a cada ULIRG foi obtido supondo-se que a formação da galáxia ocorreu a $z = 10$

4.2 Efeitos dos parâmetros galácticos

Observaremos agora qual efeito que a massa da galáxia pode ter sobre as linhas de PAHs (compararemos com nosso modelo fiducial com uma galáxia de $1 \times 10^{12} M_{\odot}$), assim como diferentes receitas de produção de poeira (caso da figura 3.9, receita de Dwek (1998)).

4.2.1 Massa da galáxia

A taxa de formação estelar e, conseqüentemente, a produção de poeira dependem da massa de uma galáxia de uma forma não trivial devido à dinâmica do gás colapsado. As figuras 4.6 e 4.7 representam a SED de uma galáxia de $1 \times 10^{12} M_{\odot}$ nos intervalos 0.1 à 1 Ganos e 2.6 à 13 Ganos, respectivamente, sobreposta a da nossa galáxia fiducial. Na figura

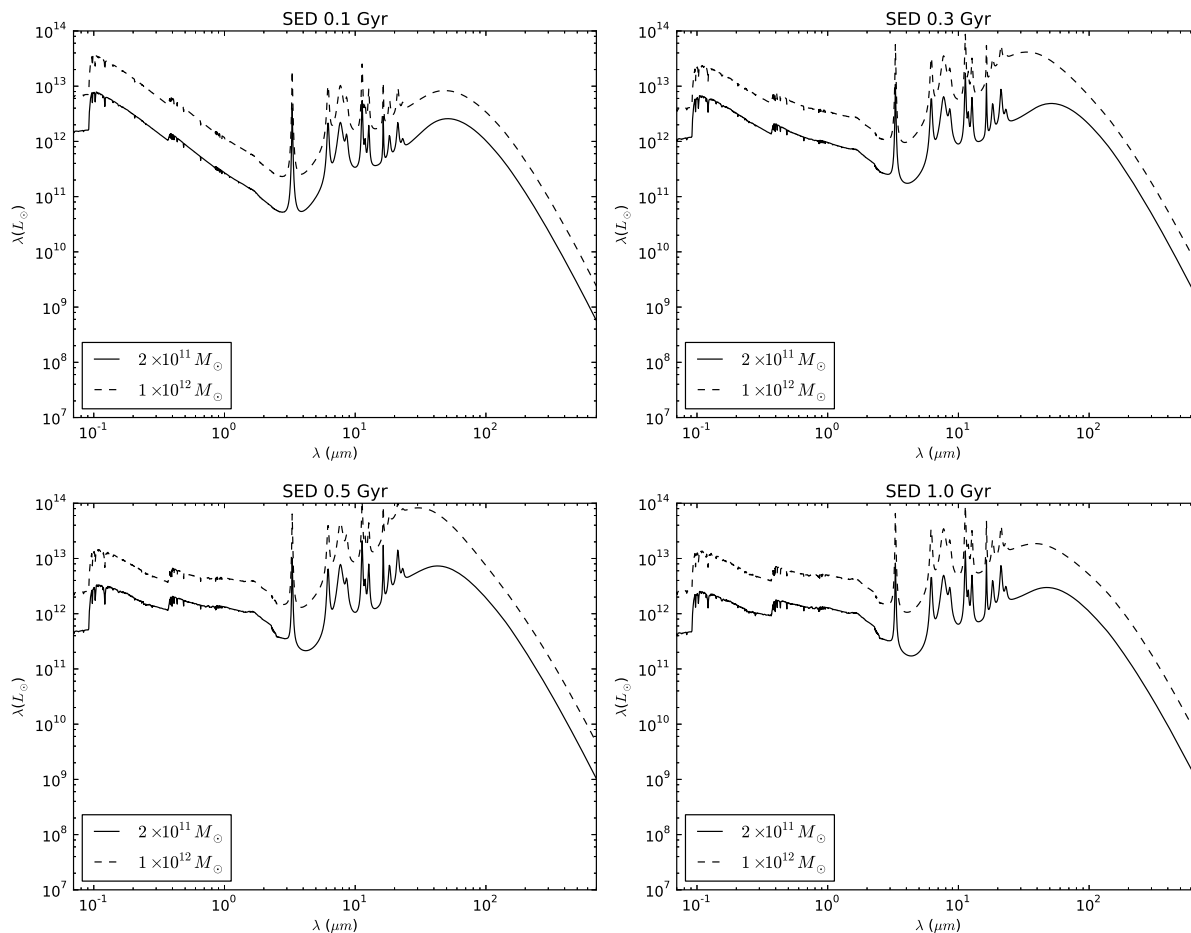


Figura 4.6: SEDs comparativa entre uma galáxia de $2 \times 10^{11} M_{\odot}$ (linha contínua) e outra de $1 \times 10^{12} M_{\odot}$ (linha tracejada) para os tempos 0.1 (superior esquerdo), 0.3 (superior direito), 0.5 (inferior esquerdo) e 1.0 Gyr (inferior direito).

4.6 a galáxia de $1 \times 10^{12} M_{\odot}$, a não ser por poucas variações (como elevação do pico do FIR em 0.3 e 0.5 Gyr), apenas permaneceu acima por um fator aproximadamente 8 vezes em relação à galáxia fiducial.

Porém na figura 4.7 vê-se a permanência (embora mais atenuado) do pico em aproximadamente $30 \mu\text{m}$ (grandes grãos) até ao menos 2.6 Gyr e o reaparecimento da mesma em 13 Gyr. Ocorre que este modelo de galáxia bem massiva inclui também um *infall* tardio do material ejetado pela galáxia durante a sua evolução provocando um segundo, e menos intenso, *star burst*, denunciado pelo trecho da SED na região dos raios-X moles e FUV que volta a apresentar um perfil similar ao da idade jovem. Na verdade a variação dos pequenos comprimentos de onda de cada painel na fase pós SB, assim como a presença de linhas aromáticas indica ativa formação estelar.

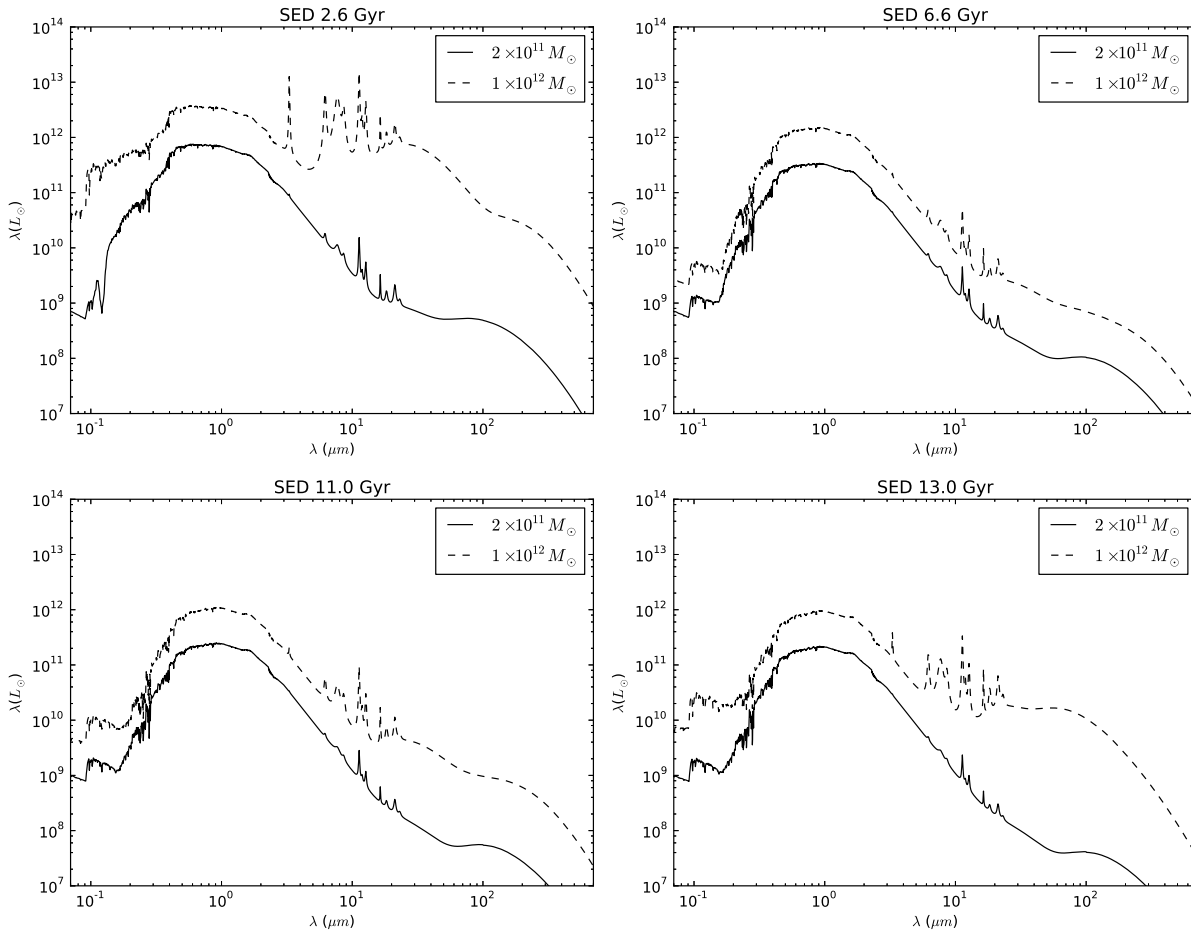


Figura 4.7: SEDs comparativa entre uma galáxia de $2 \times 10^{11} M_{\odot}$ (linha contínua) e outra de $1 \times 10^{12} M_{\odot}$ (linha tracejada) para os tempos 2.6 (superior esquerdo), 6.6 (superior direito), 11.0 (inferior esquerdo) e 13.0 Ganos (inferior direito).

A região das AIBs é destacada nas figuras 4.8 e 4.9, normalizadas pela luminosidade em $60\mu\text{m}$, tanto para espécies neutras quanto ionizadas. As citadas figuras estão normalizadas do mesmo modo que 4.3 e 4.4 para se comparar seus comportamentos relativos.

Na galáxia de $1 \times 10^{12} M_{\odot}$ (figura 4.8) a emissão das AIBs é mais protuberante, o contínuo tem pouco inclinação nas primeiras eras e, exceto pelo sua gradual elevação, não há variação nele apreciável até 1.5 Ganos. A luminosidade normalizada de toda região é maior, o que indica um levantamento em relação à emissão dos grandes grandes e consequentemente maior temperatura dos pequenos grãos. Na figura 4.9 nota-se os *features* 6.2, 7.7 e $8.1\mu\text{m}$ são proeminentes até o universo atual e a forma do contínuo nessa fase apresenta uma inclinação como da galáxia fiducial (figura 4.4), ainda que menos acentuada.

As diferenças nas razões de linhas se acentuam com a massa. Quando se compara

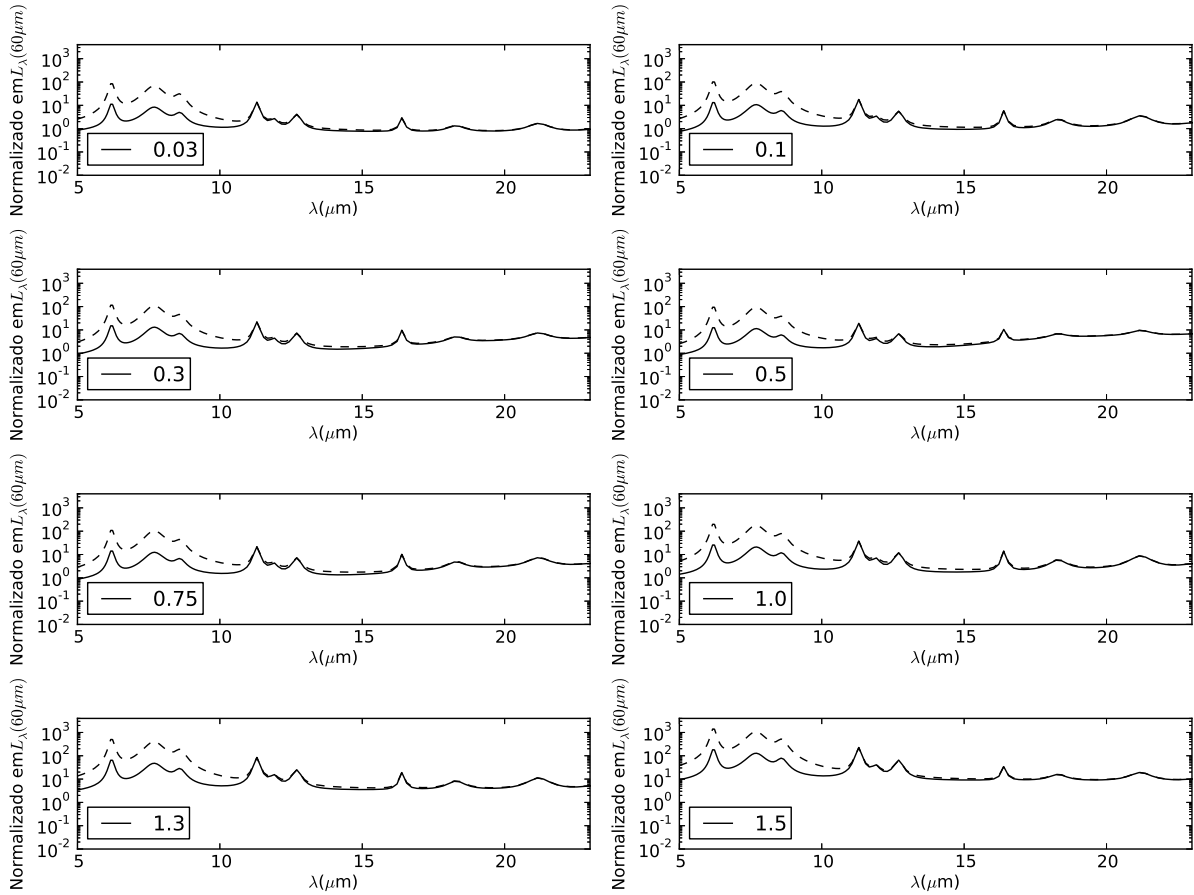


Figura 4.8: Bandas Aromáticas neutras (linha contínua) e ionizadas (linha tracejada) 5 à 20 μm normalizada em $L_\lambda(60\mu m)$ para uma galáxia de $1 \times 10^{12} M_\odot$, de 0.1 à 1.5 Ganos e no caso A de produção de poeira.

4.10 com 4.5 vê-se que aquela possui maior amplitude que esta, logo, assim galáxias de maior massa poderiam apresentar razões L/C mais irregulares (principalmente para a linha $11.7\mu m$). Nota-se que ambas linhas tanto do painel superior quanto do médio possuem um vale que começa a se formar pouco depois de 2 Ganos, alcança o mínimo em 4 Ganos e permanece aproximadamente constante por mais 2 Ganos, quando começa a subir novamente. O painel inferior possui um padrão similar, porém ao invés de ser um vale é um morro.

Juntando a diferença nas figuras 4.10 e 4.5 ao reaparecimento do pico de poeira da figura 4.7 e o último painel com linhas proeminentes na figura 4.9 conclui-se que há uma nova fonte de campo duro, por tanto, temos *star burst* tardio. No mais, as linhas sobre contínuos e $L(7.7)/L(11.2)$ (μm) seguem o mesmo padrão, acompanhando a SFR.

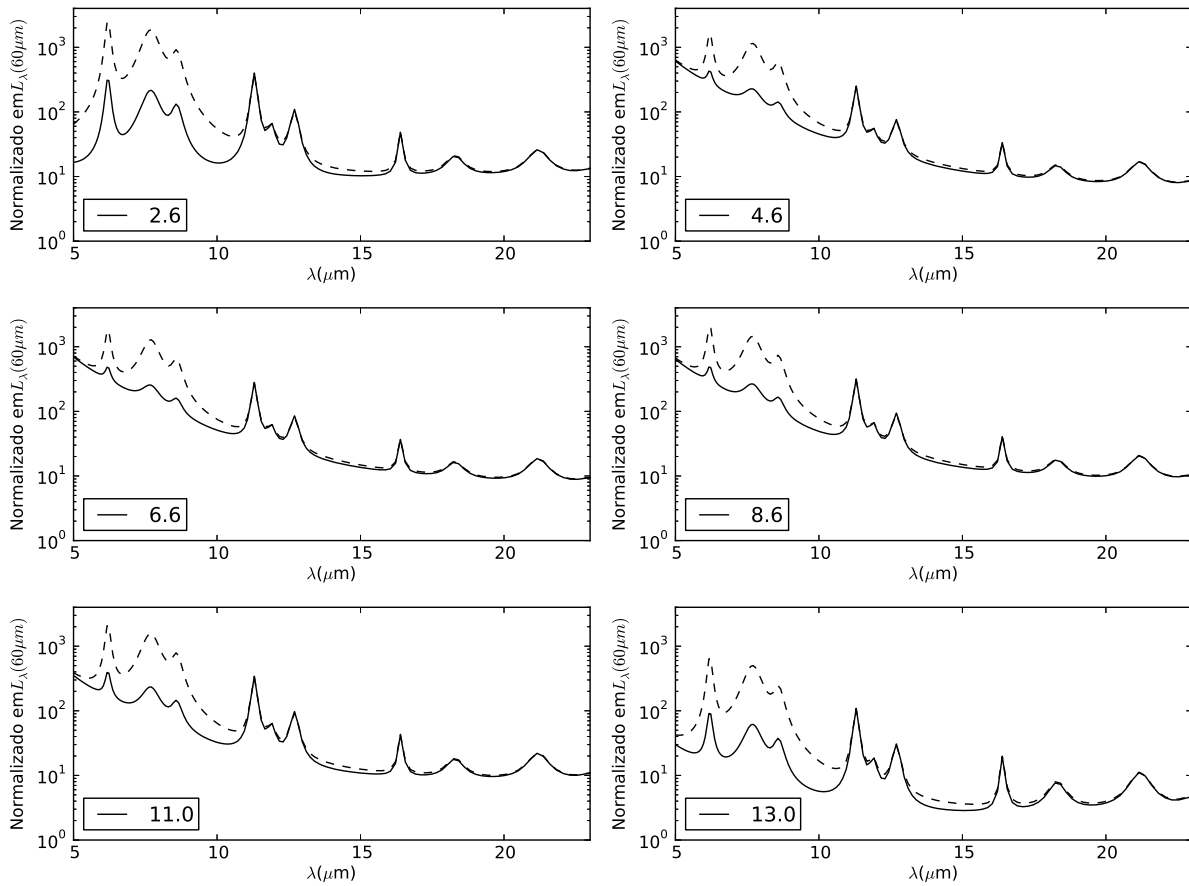


Figura 4.9: Bandas Aromáticas neutras (linha contínua) e ionizadas (linha tracejada) 5 à 20 μm normalizada em $L_{\lambda}(60\mu\text{m})$ para uma galáxia de $1 \times 10^{12} M_{\odot}$, de 2.6 à 13.0 Ganos e no caso A de produção de poeira.

4.2.2 Eficiência da produção de poeira

Assim como na figura 3.9 analisamos o efeito da eficiência de produção de poeira. Lembrando que o caso A (o modelo fiducial) corresponde a $(\delta_{cond}^{II}(A), \delta_{cond}^{II}(A), \delta_{cond}^I(A)) = (1.0, 0.7, 0.7)$. O caso B menos eficiente de Dwek (1998) é descrito por $(\delta_{cond}^{II}(C), \delta_{cond}^{II}(C), \delta_{cond}^I(C)) = (1.0, 0.5, 0.5)$ e $(\delta_{cond}^{II}(Si), \delta_{cond}^{II}(Si), \delta_{cond}^I(Si)) = (1.0, 0.8, 0.8)$. Nas figuras 4.11 e 4.12 analisamos o espectro resultante do caso B sobreposto ao caso A.

Nota-se que a diferença é muito pequena em ambos os casos e ocorre de um modo mais notável entre 0.5 e 1 Gano (fase *starburst*) na região do MIR para o FIR e muito pouco no UV. Logo, não encontramos grandes diferenças na extinção entre o caso A e B e mesmo a emissão de poeira foi marginalmente afetada. A intensidade das linhas de PAH (figuras 4.13 e 4.14) apresenta maior intensidade com relação à $L(60\mu\text{m})$ (o que não é perceptível nas figuras 4.11 e 4.12). Já em tempos tardios a diferença entre o caso A e B na SED é

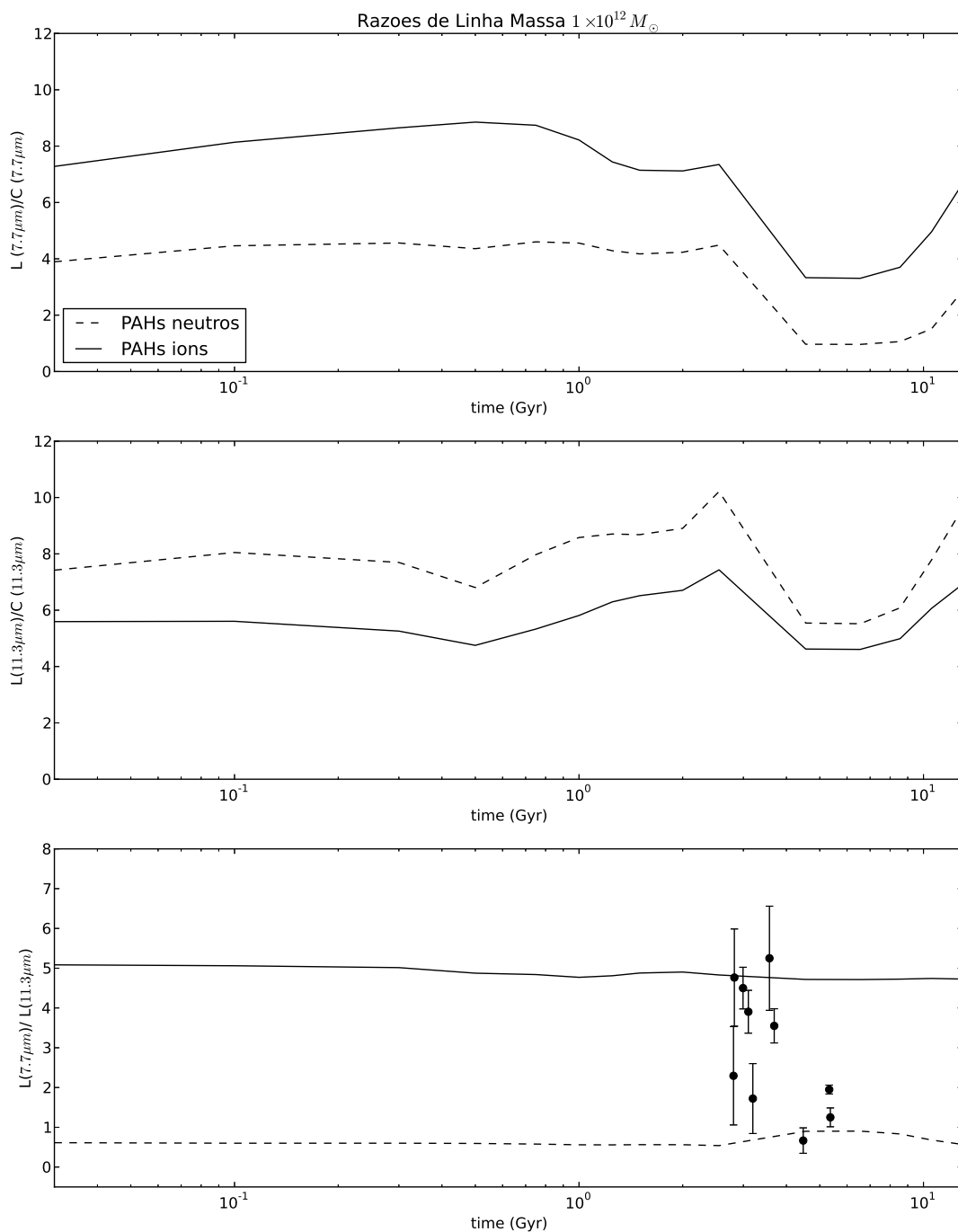


Figura 4.10: Variação temporal da razão $L(7.7\mu m)/C(7.7\mu m)$, painel superior, $L(11.2\mu m)/C(11.2\mu m)$, painel central e $L(7.7)/L(11.2)$ (μm), painel inferior, para a galáxia de $1 \times 10^{12} M_{\odot}$ quando os PAHs estão neutros (linha contínua) e ionizados (linha tracejada). Os pontos observacionais do painel inferior são ULIRGS a $z \sim 1 - 2$ do tipo *star burst* puro com razões L/L medidas da amostra de Sajina et al. (2007).

desprezível.

A figura 4.15 apresenta as $L(7.7\mu m)/C(7.7\mu m)$, $L(11.2\mu m)/C(11.2\mu m)$ e $L(7.7)/L(11.2)$

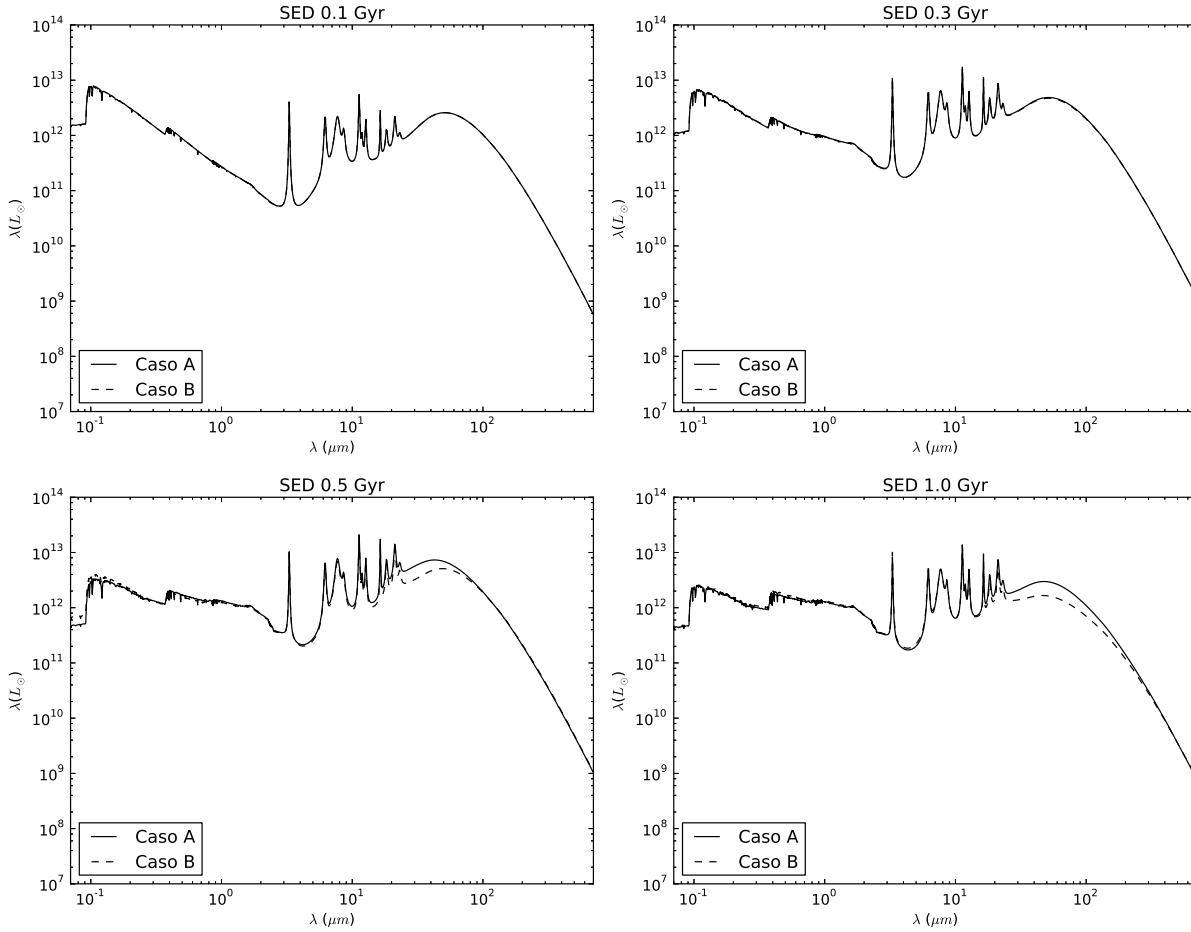


Figura 4.11: SEDs calculada para uma galáxia de $1 \times 10^{11} M_{\odot}$ para os casos A ($(\delta_{cond}^{II}(A), \delta_{cond}^{II}(A), \delta_{cond}^I(A)) = (1.0, 0.7, 0.7)$) e B ($(\delta_{cond}^{II}(C), \delta_{cond}^{II}(C), \delta_{cond}^I(C)) = (1.0, 0.5, 0.5)$) e ($(\delta_{cond}^{II}(Si), \delta_{cond}^{II}(Si), \delta_{cond}^I(Si)) = (1.0, 0.8, 0.8)$) de produção de poeira nos tempos 0.1 (superior esquerdo), 0.3 (superior direito), 0.5 (inferior esquerdo) e 1.0 Gano (inferior direito). As linhas tracejadas indicam o caso B e a contínua o A.

(μm), nos painéis superior, médio e inferior, respectivamente, com a mesma notação das figuras anteriores. Não vemos muita variação em relação ao caso A em nenhum painel, exceto pela razão $L(11.2\mu m)/C(11.2\mu m)$ para o qual há um vale mais acentuado por volta de 0.8 Ganos.

Os efeitos de receitas diversas de produção de poeira não foi muito relevante em nosso trabalho. Isto sugere que as escalas para a taxa de produção de poeira podem admitir alguma variação sem alterar significativamente a emissão IR das galáxias.

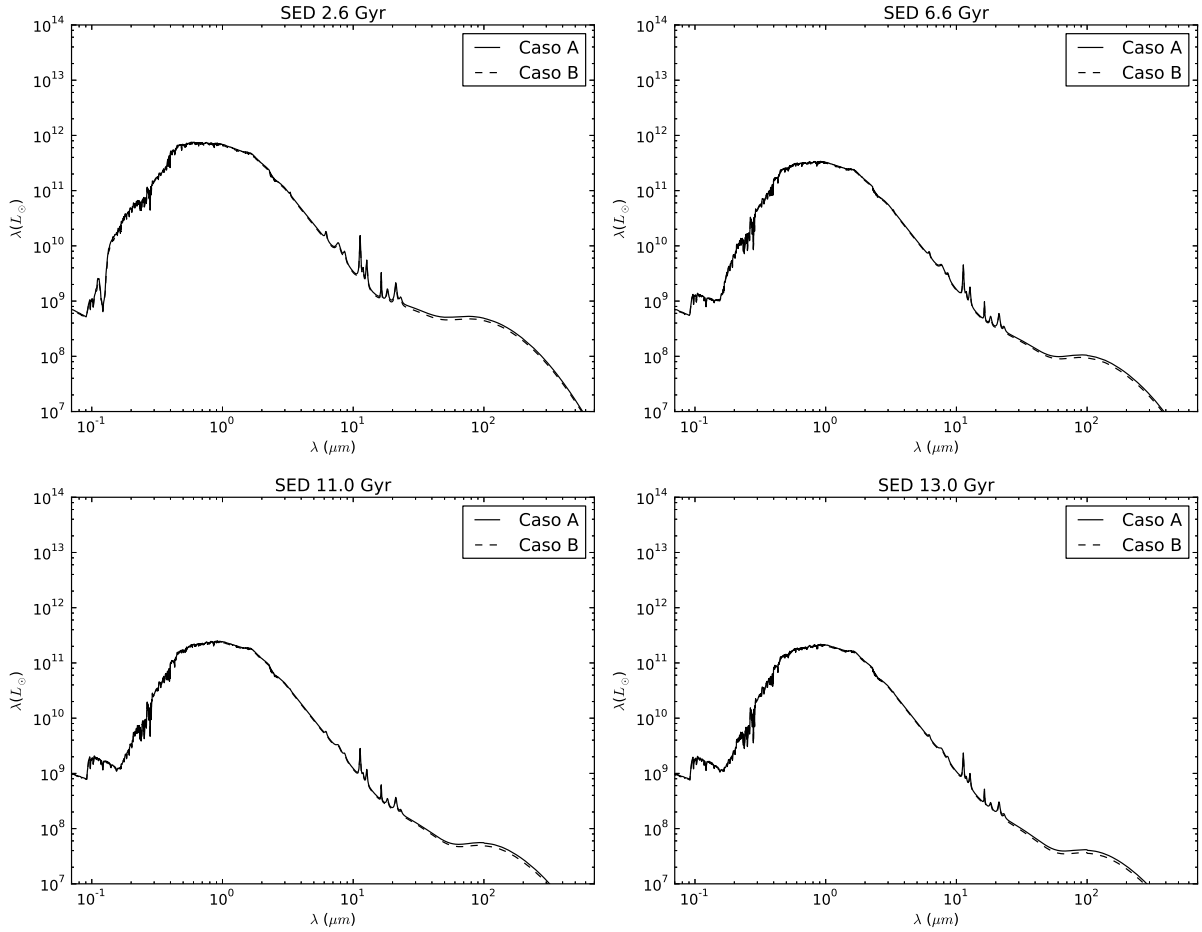


Figura 4.12: SEDs calculada para uma galáxia de $1 \times 10^{11} M_{\odot}$ para os casos A ($(\delta_{cond}^{II}(A), \delta_{cond}^{II}(A), \delta_{cond}^I(A)) = (1.0, 0.7, 0.7)$) e B ($(\delta_{cond}^{II}(C), \delta_{cond}^{II}(C), \delta_{cond}^I(C)) = (1.0, 0.5, 0.5)$) e $(\delta_{cond}^{II}(Si), \delta_{cond}^{II}(Si), \delta_{cond}^I(Si)) = (1.0, 0.8, 0.8)$) de produção de poeira nos tempos 2.6 (superior esquerdo), 6.6 (superior direito), 11.0 (inferior esquerdo) e 13.0 Gano (inferior direito). As linhas tracejadas indicam o caso B e a contínua o A.

4.3 Evolução das linhas de PAHs como indicador de evolução galáctica

A figura 4.16 mostra a SFR total da galáxia e a razão das linhas L(7.7)/L(11.2) (μm). Repara-se que a razão de linhas do PAH ionizado permanece aproximadamente constante com a SFR, enquanto a dos PAHs neutros decresce, embora não como uma lei de potência. Para a SFR cima de $200 M_{\odot} yr^{-1}$ dois valores de L(7.7)/L(11.2) (μm) correspondem à mesma SFR. Isto corresponde às fases iniciais da formação da galáxia, quando o fluxo estelar é intenso e duro, porém ainda não se acumulou uma grande quantidade de poeira.

Além disso, para uma descrição mais completa da formação da galáxia, a destruição de PAHs pelo campo duro de estrelas O precisa ser considerado. Efeito similar poderia

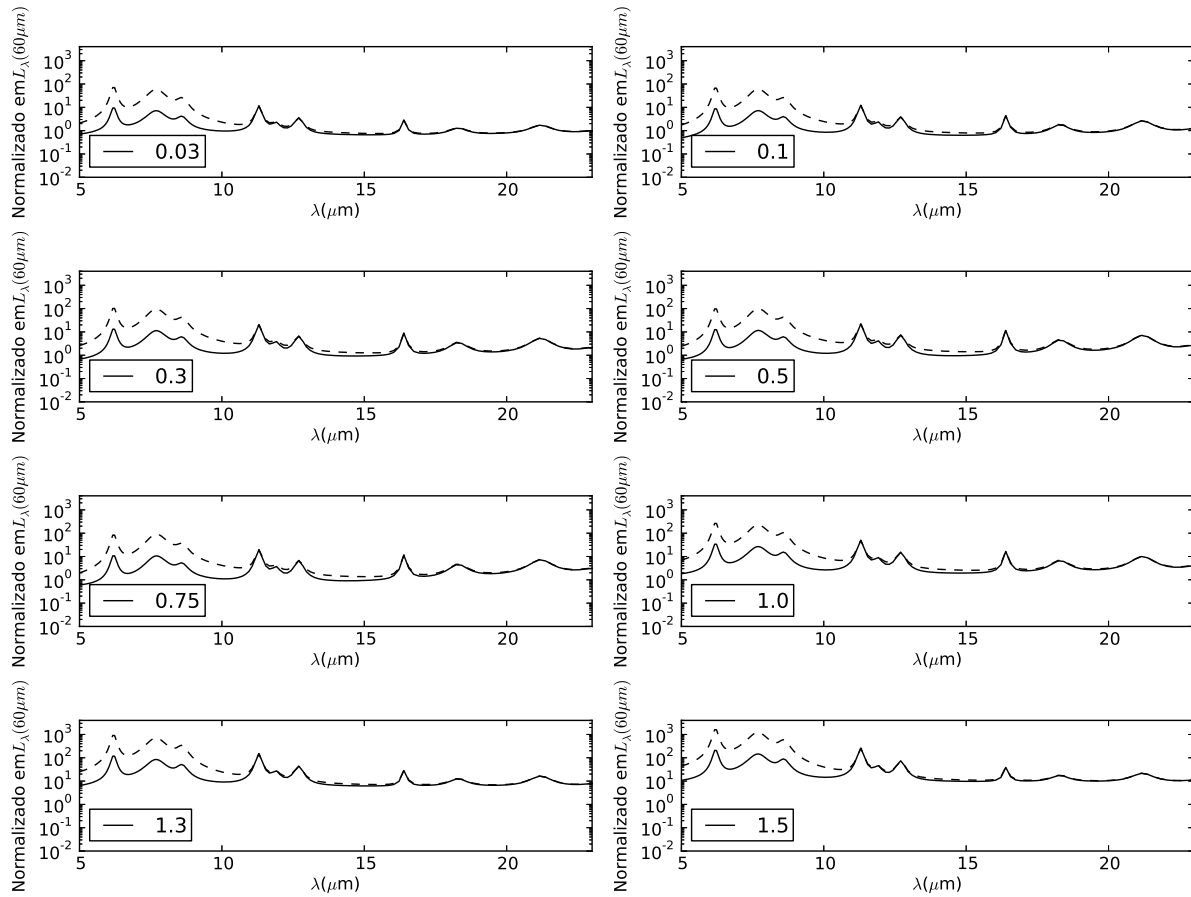


Figura 4.13: Bandas Aromáticas neutras (linha contínua) e ionizadas (linha tracejada) 5 à 20 μm normalizada em $L_{\lambda}(60\mu\text{m})$ para uma galáxia de $2 \times 10^{11} M_{\odot}$, de 0.1 à 1.5 Ganos e no caso B de produção de poeira.

acontecer em AGNs, cujo campo de radiação não-térmico poderia destruir os PAHs.

O'Dowd et al. (2009) também afirmam que razão de linha $L(6.2\mu\text{m})/L(7.7\mu\text{m})$ é sensível ao tamanho de grão, mas muito pouco à ionização, enquanto $L(7.7)/L(11.2)$ (μm) é sensível à taxa de ionização (também a SFR) e menos ao tamanho dos grãos embora Sales et al. (2010) encontrou que a fração de ionização não depende da dureza do campo, creditando diferenças nas emissões apenas à natureza do campo.

Um cenário qualitativo proposto por O'Dowd et al. (2009) é que galáxias muito jovens, com baixa metalicidade, e campo de radiação moderadamente duro devido ao SB, tenham uma emissão dos PAHs com alta razão curtos-para-longos comprimentos de onda. Espera-se que a metalicidade aumente com o tempo, o que permite grãos maiores e consequentemente o aumento na emissão de comprimentos longos, levando à queda da razão curtos-para-longos comprimentos de onda. A emissão em comprimentos curtos se torna

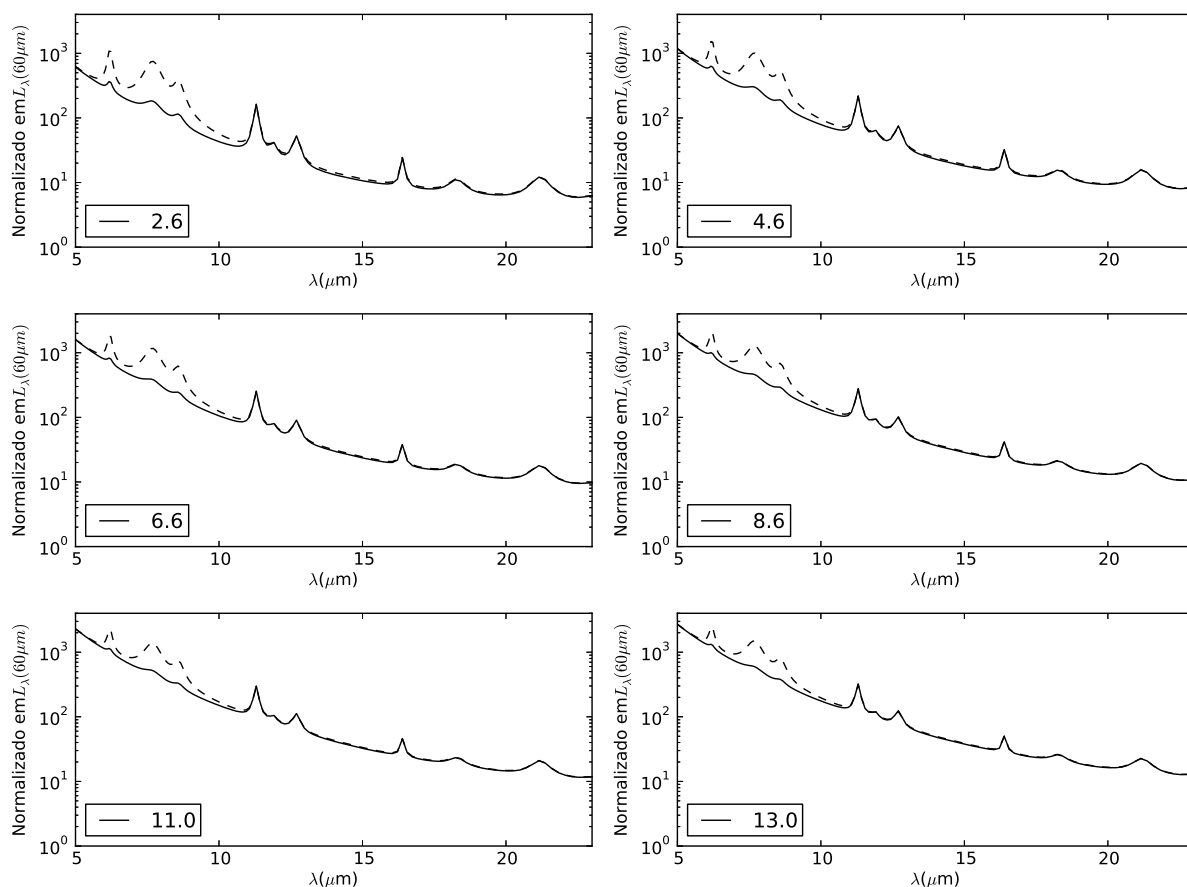


Figura 4.14: Bandas Aromáticas neutras (linha contínua) e ionizadas (linha tracejada) 5 à 20 μm normalizada em $L_{\lambda}(60\mu\text{m})$ para uma galáxia de $2 \times 10^{11} M_{\odot}$, de 2.6 à 13.0 Ganos e no caso A de produção de poeira.

dominante quando há o aumento da SF recente. Após a evolução das estrelas massivas o campo amolece, o que causa a diminuição da fração de moléculas ionizadas. Espera-se que este padrão se mantenha. Algumas galáxias passam pela fase AGN, que destrói grãos pequenos mas não os ioniza, levando também à queda desta razão.

Draine e Lee (1984) e Draine e Li (2001) concluem que as moléculas de PAHs podem ter se formado pelos grãos de carbono amorfo ou por grandes moléculas aromáticas e que a potência de emissão (principalmente das linhas 3.3, 6.2, 7.7, 8.6 e 11.3 μm) é altamente dependente da distribuição de tamanho dos PAHs, assim como sua taxa de ionização (Galliano et al., 2008; Draine e Li, 2001), embora O'Dowd et al. (2009) argumentem que taxa de ionização aparenta ser constante com o tamanho do grão. O'Dowd et al. (2009) também argumentam que grandes moléculas emitem mais em comprimentos mais longos, enquanto pequenas moléculas emitem mais em comprimentos mais curtos.

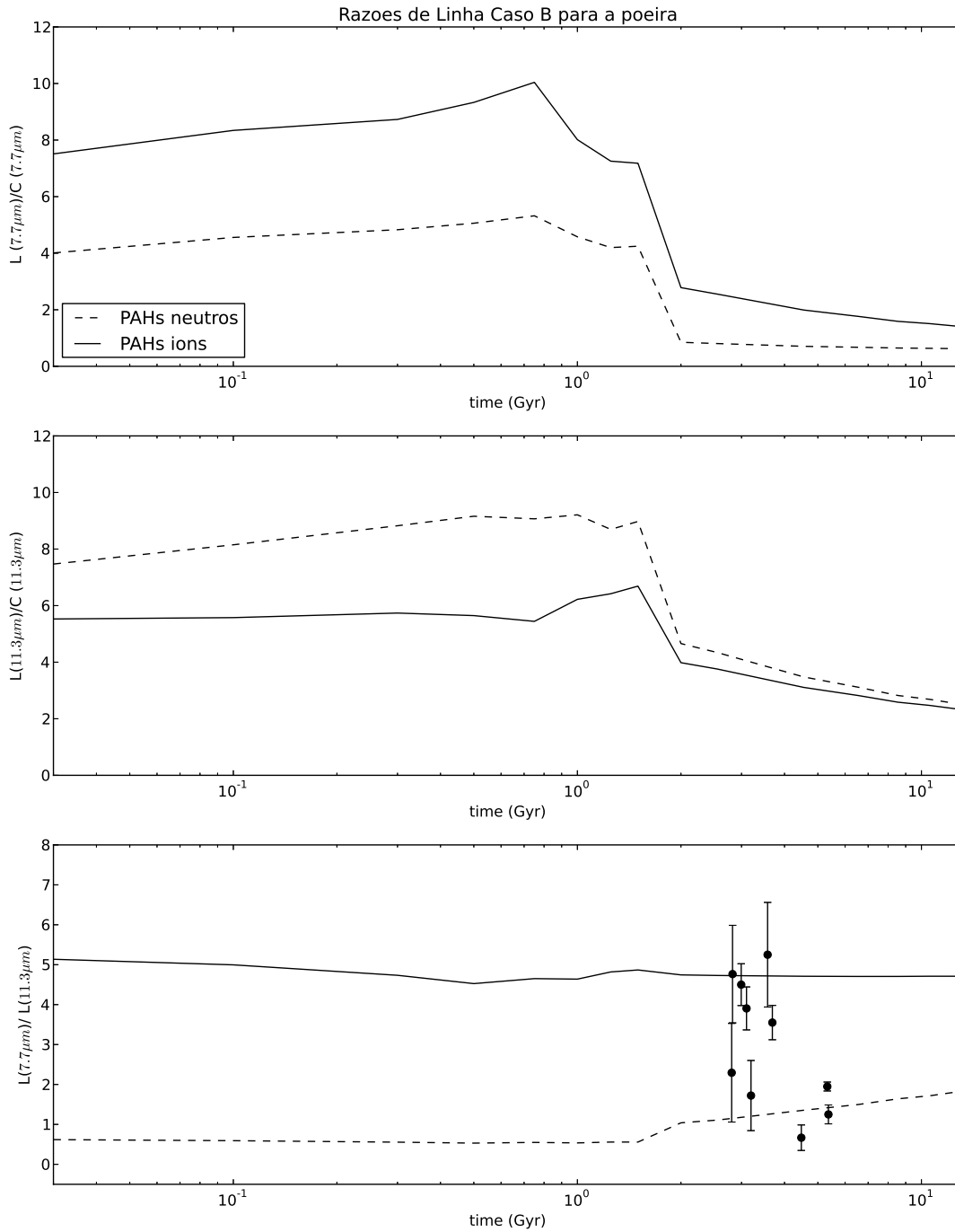


Figura 4.15: Variação temporal da razão $L(7.7\mu\text{m})/C(7.7\mu\text{m})$, painel superior, $L(11.2\mu\text{m})/C(11.2\mu\text{m})$, painel central e $L(7.7)/L(11.2)$ (μm), painel inferior, para a galáxia de $2 \times 10^{11} M_{\odot}$, no caso B de produção de poeira, quando os PAHs estão neutros (linha contínua) e ionizados (linha tracejada). Os pontos observacionais do painel inferior são ULIRGS a $z \sim 1 - 2$ do tipo *star burst* puro com razões L/L medidas da amostra de Sajina et al. (2007).

Os PAHs neutros possuem $L(7.7\mu\text{m})/L(11.2\mu\text{m}) > 1$, como se observa em sistemas cuja fonte de excitação dos PAHs é estelar. Assim em starbursts, $L(7.7\mu\text{m})/L(11.2\mu\text{m}) > 1$

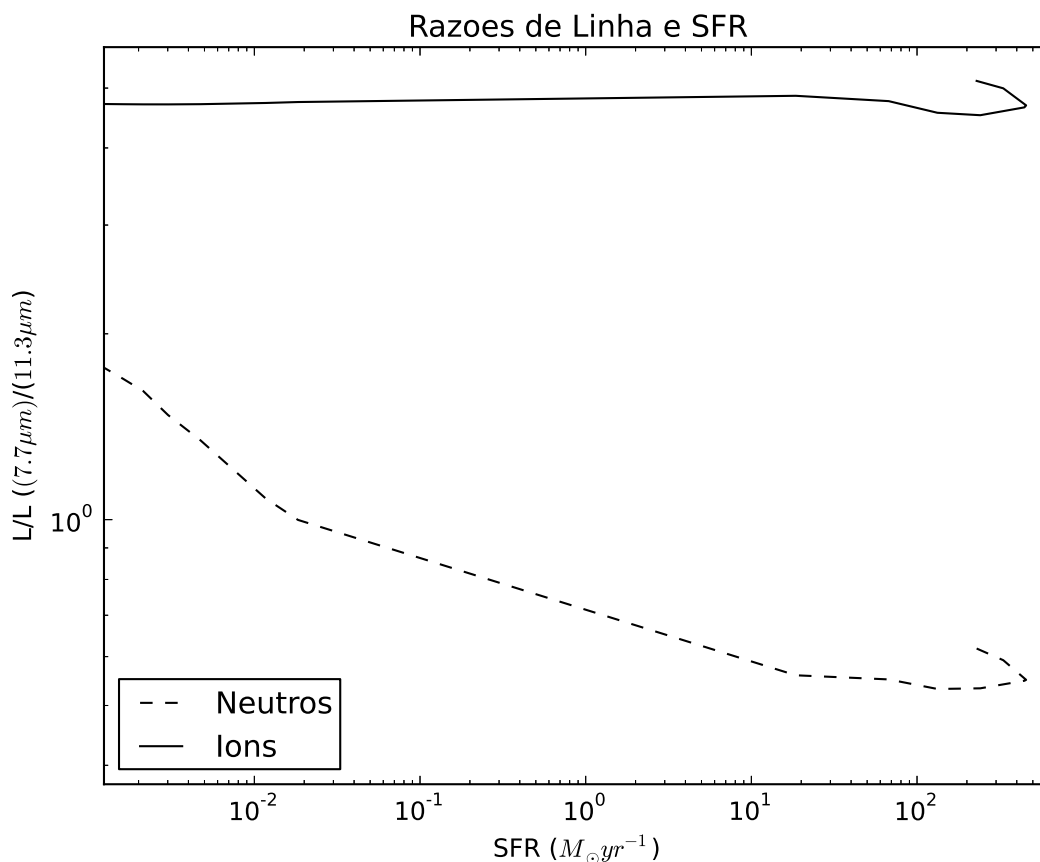


Figura 4.16: $L(7.7)/L(11.2)$ (μm) pela SFR.

(Yan et al., 2007), resultado que concorda conosco, como pode ser visto nas figuras 4.5, 4.10 e 4.15. Por outro lado, os PAHs ionizados resultam em $L(7.7\mu m)/L(11.2\mu m)$ menor e frequentemente menor do que 1. Daí se pode deduzir que os cátions não sejam os PAHs dominantes para a emissão de uma galáxia. Isso concorda com a investigação do estado de carga dos PAHs do meio interestelar da Galáxia usando a curva de extinção no ultravioleta, que indica que os cátions e dicátions constituiriam um componente minoritário e em alguns casos praticamente nulo (Cecchi-Pestellini et al., 2008).

A dependência entre SFR e a razões de linha de PAHs foi investigada por diversos autores. (O'Dowd et al., 2009) analisaram as razões $L(6.2\mu m)/L(7.7\mu m)$, $L(6.2\mu m)/L(11.2\mu m)$ e $L(7.7\mu m)/L(11.2\mu m)$ comparando-as com os testes $D_n(4000)$ e H_α EW e a própria SFR obtendo boa correlação entre as linhas $L(6.2\mu m)/L(11.2\mu m)$ e $L(7.7\mu m)/L(11.2\mu m)$ (esta a mais forte) e os testes citados.

Sales et al. (2010), com uma amostra de 186 galáxias (22 SBs, 59 HII e LINERs, 7

regiões HII de M 101 e 98 AGNs) com $z \ll 1$, encontraram que todas as SBGs e 80% das Seyfert exibem linhas de PAHs. AGNs emitem radiação muito mais dura que SBs, o que pode destruir os aromáticos ($L(6.2\mu m)/L(11.2\mu m) < 0.2$ em AGNs, contra $0.2 < L(6.2\mu m)/L(11.2\mu m) < 0.4$). De fato, tanto Sales et al. (2010) quanto O'Dowd et al. (2009) apontam para esta ideia, ou, ao menos, para uma destruição seletiva das pequenas moléculas em AGNs, restando apenas as espécies grandes (Sales et al. (2010) apontam para dominância de moléculas com mais de 180 carbonos nestes objetos). Já em SB estão presentes aromáticos grandes e pequenos. Isto é suportado por maiores emissões em maiores comprimentos de onda nestes objetos (embora Tielens (2005) tenha proposto que o efeito cascata por um possível aquecimento do pelo campo do AGN grão pode levar à queda da fração ionizada e explicar a emissão).

Engelbracht et al. (2006) encontraram maiores emissões em $8\mu m$ em galáxias com alta metalicidade, o que pode ser creditado à dificuldade em construir grandes PAHs em ambientes pobres em metais. Isto gera complicações quando se trabalha a altos *redshifts*, embora Marcillac et al. (2006) mostraram que ao menos no MIR, não é visto forte diferença nas SEDs para z entre 0 e 1.

Alguns autores propuseram relações entre a luminosidade das *features* dos PAHs e a SFR. Houck et al. (2007), por exemplo, propõe a relação

$$\log(SFR)[M_{\odot}/ano] = \log(\nu L_{\nu}(7.7\mu m)) - 42.57 \quad (4.1)$$

entre a SFR e a linha $7.7\mu m$. Já Farrah et al. (2007) propõe:

$$SFR[M_{\odot}/ano] = 1.18 \times 10^{-41} L_p[erg/s] \quad (4.2)$$

onde L_p é a soma da luminosidade de $6.2\mu m$ e $11.2\mu m$. Algumas ressalvas precisam ser feitas sobre estes estimadores. Primeiro quanto a presença de AGNs que podem alterar as linhas nos casos onde SBs e AGNs coexistem. Outro ponto é a metalicidade que privilegia grãos pequenos quando é pequena, desta forma preferimos não propor uma lei de conversão, já que não há evidências de que as relações sejam válidas para *redshifts* muito altos.

É certo que existem diversos fatores que influenciam nas linhas aromáticas e ainda é um campo fértil de investigações.

Conclusões

Com base em um modelo Quimiodinâmico acoplado a uma interface de poeira estudamos a evolução das SEDs na região de emissão aromática e seu potencial como diagnóstico de evolução galáctica. Muito foi feito, mas existe ainda muito para ser feito, talvez até mais do que caiba numa só vida.

De fato, a ciência sempre foi feita por muitos, a maioria anônima, que muitas vezes acaba por emprestar seu trabalho para enriquecer o nome de outros homens, sendo que todos estão empenhados na mesma difícil empresa: tentar compreender os segredos da vida, do universo e tudo mais. Neste aspecto pude, talvez, dar um pequeno passo para a frente nessa longa jornada (que talvez nunca finde).

As moléculas aromáticas têm sido consideradas parte fundamental do meio interestelar e importante fonte de informação sobre a física dos ambientes onde estão presentes. Ademais, possuem grande interesse astrobiológico visto que por si só podem carregar informações e, quando impregnadas com oxigênio e nitrogênio, podem ter sido importantes peças na construção da vida como conhecemos hoje.

As flutuações de temperatura de pequenos grãos são essenciais para analisar as AIBs, pois seu efeito ocorre majoritariamente no MIR, região onde tais bandas estão presentes. Ao considerar apenas a temperatura de estado estacionário é impossível fazer qualquer análise sobre a emissão dos PAHs.

A análise de PAHs neutros e cátions deixa claro (em qualquer situação estudada) que o grau de ionização dos íons influe fortemente tanto nas razões de linhas quanto nas linhas obtidas, marcando toda região das bandas aromáticas.

Analisando a evolução das linhas de PAHs notamos sua dependência com o campo de radiação das estrelas jovens. Desta forma ela traça a taxa de formação estelar, uma relação

que é apropriada pela evolução temporal das razões $L(7.7\mu m)/C(7.7\mu m)$, $L(11.2\mu m)/C(11.2\mu m)$ e $L(7.7)/L(11.2)$ (μm) da galáxia de $2 \times 10^{12} M_{\odot}$ que apresenta dois *stars bursts*.

Nossa análise indicou que tanto a massa quanto a eficiência de produção de poeira influem pouco na razão $L(7.7)/L(11.2)$ (μm), embora as razões $L(7.7\mu m)/C(7.7\mu m)$ e $L(11.2\mu m)/C(11.2\mu m)$ são sensíveis a esses parâmetros, mas são mais sensíveis ainda à SFR. De qualquer forma, a sensibilidade das L/C a outros parâmetros a torna menos eficaz como diagnóstico de eficiência de produção de poeira, pois pode gerar resultados degenerados.

Obtivemos $L(7.7)/L(11.2)$ (μm) aproximadamente 5 para íons e com pouca variação com a SFR. No caso dos PAHs neutros obtivemos uma razão pouco menor que 1 e aumentando conforme a formação estelar cai em acordo com trabalhos da literatura. Ainda assim mais precisa ser investigado sobre a saturação da razão $L(7.7)/L(11.2)$ (μm) com formação estelar muito intensa, para evitar estimativas errôneas.

Mas, como dito, ainda há muito a se fazer. Mesmo não contribuindo muito para a extinção, a inclusão de gelos de água, amônia e CO no modelo quimiodinâmico para analisar a coexistência entre eles e os PAHs e o acoplamento desta ferramenta à modelos de PDRs e foto ionização, como o *Meudon*, pode gerar importantes resultados sobre o crescimento da complexidade química do Universo e ajudar a delimitar zonas de habitabilidade galácticas.

Ainda nesse mesmo ritmo a inclusão de N-heterocíclos deve abrir novas perspectivas tanto astrofísicas quanto astrobiológicas, visto que este tipo de moléculas é a base do material genético terrestre, compartilhado por todas as formas de vidas conhecidas.

Segundo Rosenberg et al. (2014), as bandas aromáticas são indistintamente representada por qualquer conjunto de 30 espécies, contendo ou não heterocíclicos, com os modelos atuais. Uma das perspectivas iniciais que não conseguimos alcançar era trabalhar com N-Heterociclos, principalmente espécies ligadas às piridinas já que é a espécie mais resistente entre os N-Heterocíclicos. A piridina é uma molécula muito próxima a pirimidina, uma molécula constituinte do DNA, por esta razão, investigar sua possível abundância no ISM é uma tarefa de grande interesse astrobiológico. Os N-Heterocíclicos também alteram o formato da linha $6.2\mu m$, o que poderia ter grandes implicações para a determinação das condições astrofísicas e seria também uma nova janela para a astrobiologia.

A introdução do grau de desidrogenação dos PAHs também pode acarretar mudanças consideráveis nas AIBs pois os PAHs dehidrogenados começam a apresentar características

mais similares ao grafite, agindo como um condutor. Allamandola et al. (1989) constataram que fótons mais energéticos que 10 eV retiram hidrogênio dos carbonos periféricos de pequenos PAHs (aproximadamente 20 C).

A inclusão de ânions pode ser muito importante para a aumentar a verossimilhança do modelo, ou para testar a taxa de ionização dos PAHs no ISM. Assim, incluir a linha $3.3\mu m$ nas análises, que é um marcados da ionização do ambiente. É certo que a não há consenso sobre a questão, havendo tanto argumentos em favor dos PAHs serem predominantemente neutros (Van Dienenhoven et al., 2004) como em favor de os neutros, cátions e ânions terem igual contribuição (Bauschlicher Jr et al., 2009). Novamente vemos um terreno fértil para novos estudos.

Juntamente com a carga dos PAHs, o ponto mais urgente é a mudança da distribuição de tamanhos estática do tipo MNR para uma dinâmica, dependente da temperatura e velocidade do gás para se considerar estilhaçamentos e condensação por choques, dependente também da metalicidade para privilegiar pequenos grãos à altíssimos *redshifts* e a sublimação das espécies em temperaturas muito altas ou campo muito duro.

Os dois últimos pontos devem ter importância central em análises de AGNs e na aprimoração dos diagnósticos de distinção entre estes fenômenos e *star bursts*, já que no primeiro caso diversas linhas estão ausentes e muito mais comumente as linhas ligadas à pequenos PAHs, que devem ser destruídos no processo. A ionização dos PAHs por campos duros também precisa de análises devido à grande divergência de opiniões tanto sobre a carga quanto a influência do campo sobre isso. O estudo dos PAHs em AGNs e SBs é o próximo passo natural para este trabalho.

Referências Bibliográficas

- Allamandola L., Tielens A., Barker J., Polycyclic aromatic hydrocarbons and the unidentified infrared emission bands-Auto exhaust along the Milky Way, *The Astrophysical Journal*, 1985, vol. 290, p. L25
- Allamandola L., Tielens A., Barker J., Interstellar polycyclic aromatic hydrocarbons-The infrared emission bands, the excitation/emission mechanism, and the astrophysical implications, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 1989, vol. 71, p. 733
- Allard F., Hauschildt P. H., Model atmospheres for M (sub)dwarf stars. 1: The base model grid, *ApJ*, 1995, vol. 445, p. 433
- Archibald E. N., Dunlop J. S., Jimenez R., Friaca A. C. S., McLure R. J., Hughes D. H., Coupled spheroid and black hole formation, and the multifrequency detectability of active galactic nuclei and submillimetre sources, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2002, vol. 336, p. 353
- Bakes E., Tielens A., The photoelectric heating mechanism for very small graphitic grains and polycyclic aromatic hydrocarbons, *The Astrophysical Journal*, 1994, vol. 427, p. 822
- Bakes E., Tielens A., Bauschlicher Jr C. W., Theoretical Modeling of Infrared Emission from Neutral and Charged Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. I., *The Astrophysical Journal*, 2001, vol. 556, p. 501
- Barbuy B., Friaça A., da Silveira C., Hill V., Zoccali M., Minniti D., Renzini A., Ortolani S., Gómez A., Zinc abundances in Galactic bulge field red giants: Implications for damped Lyman- α systems, *Astronomy & Astrophysics*, 2015, vol. 580, p. A40

- Bauschlicher Jr C. W., Peeters E., Allamandola L. J., the infrared spectra of very large irregular polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs): Observational probes of astronomical PAH geometry, size, and charge, *The Astrophysical Journal*, 2009, vol. 697, p. 311
- Bessell M., Brett J., Scholz M., Wood P., Colors and stratifications of extended static model photospheres of M stars located on the FGB, AGB and supergiant branch, *Astronomy and Astrophysics Supplement series*, 1991, vol. 89, p. 335
- Bessell M., Brett J., Wood P., Scholz M., Colors of extended static model photospheres of M giants, *Astronomy and Astrophysics Supplement series*, 1989, vol. 77, p. 1
- Bromm V., Loeb A., The formation of the first low-mass stars from gas with low carbon and oxygen abundances, *Nature*, 2003, vol. 425, p. 812
- Bromm V., Loeb A., High-redshift gamma-ray bursts from population III progenitors, *The Astrophysical Journal*, 2006, vol. 642, p. 382
- Bruzual G., Charlot S., Stellar population synthesis at the resolution of 2003, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2003, vol. 344, p. 1000
- Calzetti D., Dust in Star-Forming Galaxies, arXiv preprint astro-ph/9806083, 1998
- Calzetti D., Kinney A. L., Storchi-Bergmann T., Dust extinction of the stellar continua in starburst galaxies: The ultraviolet and optical extinction law, *The Astrophysical Journal*, 1994, vol. 429, p. 582
- Cecchi-Pestellini C., Mallocci G., Mulas G., Joblin C., Williams D., The role of the charge state of PAHs in ultraviolet extinction, *Astronomy & Astrophysics*, 2008, vol. 486, p. L25
- Chabrier G., Galactic Stellar and Substellar Initial Mass Function¹, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 2003, vol. 115, p. 763
- Desert F.-X., Boulanger F., Puget J., Interstellar dust models for extinction and emission, *Astronomy and Astrophysics*, 1990, vol. 237, p. 215
- Draine B., Tabulated optical properties of graphite and silicate grains, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 1985, vol. 57, p. 587

- Draine B., Interstellar dust grains, arXiv preprint astro-ph/0304489, 2003
- Draine B., Anderson N., Temperature fluctuations and infrared emission from interstellar grains, *The Astrophysical Journal*, 1985, vol. 292, p. 494
- Draine B., Lee H. M., Optical properties of interstellar graphite and silicate grains, *The Astrophysical Journal*, 1984, vol. 285, p. 89
- Draine B., Li A., Infrared emission from interstellar dust. I. Stochastic heating of small grains, *The Astrophysical Journal*, 2001, vol. 551, p. 807
- Draine B., Sutin B., Collisional charging of interstellar grains, *The Astrophysical Journal*, 1987, vol. 320, p. 803
- Dwek E., Temperature fluctuations and infrared emission from dust particles in a hot gas, *The Astrophysical Journal*, 1986, vol. 302, p. 363
- Dwek E., The evolution of the elemental abundances in the gas and dust phases of the galaxy, *The Astrophysical Journal*, 1998, vol. 501, p. 643
- Dwek E., Interstellar dust: what is it, how does it evolve, and what are its observational consequences?, arXiv preprint astro-ph/0412344, 2004
- Dwek E., Arendt R., Fixsen D., Sodroski T., Odegard N., Weiland J., Reach W., Hauser M., Kelsall T., Moseley S., et al., Detection and characterization of cold interstellar dust and polycyclic aromatic hydrocarbon emission, from COBE observations, *The Astrophysical Journal*, 1997, vol. 475, p. 565
- Efstathiou A., Rowan-Robinson M., Siebenmorgen R., Massive star formation in galaxies: radiative transfer models of the UV to millimetre emission of starburst galaxies, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2000, vol. 313, p. 734
- Ehrenfreund P., Rasmussen S., Cleaves J., Chen L., Experimentally tracing the key steps in the origin of life: The aromatic world, *Astrobiology*, 2006, vol. 6, p. 490
- Engelbracht C., Kundurthy P., Gordon K., Rieke G., Kennicutt R., Smith J.-D., Regan M., Makovoz D., Sosey M., Draine B., et al., Extended mid-infrared aromatic feature emission in M82, *The Astrophysical Journal Letters*, 2006, vol. 642, p. L127

- Fan X., Hennawi J. F., Richards G. T., Strauss M. A., Schneider D. P., Donley J. L., Young J. E., Annis J., Lin H., Lampeitl H., Lupton R. H., Gunn J. E., Knapp G. R., Brandt W. N., Anderson S., Bahcall N. A., Brinkmann J., Brunner R. J., Fukugita M., Szalay A. S., Szokoly G. P., York D. G., A Survey of $z > 5.7$ Quasars in the Sloan Digital Sky Survey. III. Discovery of Five Additional Quasars, *The Astronomical Journal*, 2004, vol. 128, p. 515
- Farrah D., Bernard-Salas J., Spoon H., Soifer B., Armus L., Brandl B., Charmandaris V., Desai V., Higdon S., Devost D., et al., High-resolution mid-infrared spectroscopy of ultraluminous infrared galaxies, *The Astrophysical Journal*, 2007, vol. 667, p. 149
- Farrah D., Lonsdale C., Weedman D., Spoon H., Rowan-Robinson M., Polletta M., Oliver S., Houck J., Smith H., The nature of star formation in distant ultraluminous infrared galaxies selected in a remarkably narrow redshift range, *The Astrophysical Journal*, 2008, vol. 677, p. 957
- Farrah D., Urrutia T., Lacy M., Lebouteiller V., Spoon H., Bernard-Salas J., Connolly N., Afonso J., Connolly B., Houck J., The extraordinary mid-infrared spectral properties of FeLoBAL quasars, *The Astrophysical Journal*, 2010, vol. 717, p. 868
- Favre C., Cleaves L. I., Bergin E. A., Qi C., Blake G. A., A Significantly Low CO Abundance toward the TW Hya Protoplanetary Disk: A Path to Active Carbon Chemistry?, *The Astrophysical Journal Letters*, 2013, vol. 776, p. L38
- Fluks M., Plez B., De Winter D., Westerlund B., Steenman H., et al., On the spectra and photometry of M-giant stars, *Astronomy and Astrophysics Supplement series*, 1994, vol. 105, p. 311
- Franceschini A., , 2000 Technical report High-Redshift Galaxies
- Friaca A., Terlevich R., The cosmological evolution of colour gradients in spheroids, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2001, vol. 325, p. 335
- Friaca A. C. S., Alcaniz J. S., Lima J. A. S., An old quasar in a young dark energy-dominated universe?, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2005, vol. 362, p. 1295

-
- Friaca A. C. S., Terlevich R. J., Formation and evolution of elliptical galaxies and QSO activity, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 1998, vol. 298, p. 399
- Friaca A. C. S., Terlevich R. J., Lyman break galaxies as young spheroids, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 1999, vol. 305, p. 90
- Galliano F., Madden S. C., Tielens A. G., Peeters E., Jones A. P., Variations of the mid-IR aromatic features inside and among galaxies, *The Astrophysical Journal*, 2008, vol. 679, p. 310
- Goicoechea J., Pety J., Gerin M., Hily-Blant P., Le Bourlot J., The ionization fraction gradient across the Horsehead edge: an archetype for molecular clouds, *Astronomy & Astrophysics*, 2009, vol. 498, p. 771
- Gomez H. L., Clark C., Nozawa T., Krause O., Gomez E. L., Matsuura M., Barlow M., Besel M.-A., Dunne L., Gear W. K., et al., Dust in historical Galactic Type Ia supernova remnants with Herschel, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2012, vol. 420, p. 3557
- Gruenwald R. B., Viegas S. M., Line-of-sight results from H II region models, *ApJS*, 1992, vol. 78, p. 153
- Guimaraes M. C., Efeitos da Presença de Poeira na Emissao de Galáxias a Altos e Baixos Redshifts, 2006, Tese de Doutorado
- Hillebrandt W., An exploding 10 solar mass star-A model for the Crab supernova, *Astronomy and Astrophysics*, 1982, vol. 110, p. L3
- Houck J., Weedman D., Le Floch E., Hao L., Spitzer Spectra of a 10 mJy Galaxy Sample and the Star Formation Rate in the Local Universe, *The Astrophysical Journal*, 2007, vol. 671, p. 323
- Hudgins D. M., Bauschlicher Jr C. W., Allamandola L., Variations in the peak position of the 6.2 μm interstellar emission feature: A tracer of N in the interstellar polycyclic aromatic hydrocarbon population, *The Astrophysical Journal*, 2005, vol. 632, p. 316

- Hudgins D. M., Sandford S. A., Allamandola L. J., Tielens A. G. G. M., Mid- and far-infrared spectroscopy of ices - Optical constants and integrated absorbances, *ApJS*, 1993, vol. 86, p. 713
- Iben Jr I., Renzini A., Asymptotic giant branch evolution and beyond, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 1983, vol. 21, p. 271
- Iwamoto K., Brachwitz F., Nomoto K., Kishimoto N., Umeda H., Hix W. R., Thielemann F.-K., Nucleosynthesis in Chandrasekhar mass models for type Ia supernovae and constraints on progenitor systems and burning-front propagation, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 1999, vol. 125, p. 439
- Kim S.-H., Martin P., Hendry P. D., The size distribution of interstellar dust particles as determined from extinction, *The Astrophysical Journal*, 1994, vol. 422, p. 164
- Lanfranchi G. A., Friaca A. C. S., Clues to the nature of damped Lyman α systems from chemical evolution models, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2003, vol. 343, p. 481
- Larson R. B., Dynamical models for the formation and evolution of spherical galaxies, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 1974, vol. 166, p. 585
- Le Borgne J.-F., Bruzual G., Pelló R., Lançon A., Rocca-Volmerange B., Sanahuja B., Schaerer D., Soubiran C., Vílchez-Gómez R., STELIB: A library of stellar spectra at, *Astronomy & Astrophysics*, 2003, vol. 402, p. 433
- Leger A., Puget J., Identification of the 'unidentified' IR emission features of interstellar dust?, *Astronomy and Astrophysics*, 1984, vol. 137, p. L5
- Lepp S., Dalgarno A., Heating of interstellar gas by large molecules or small grains, *The Astrophysical Journal*, 1988, vol. 335, p. 769
- Li A., Interstellar grains the 75th anniversary. In *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 6, 2005, p. 229
- Loeb A., *How Did the First Stars and Galaxies Form?*. Princeton Frontiers in Physics, Princeton University Press, 2010

- Marcillac D., Elbaz D., Chary R., Dickinson M., Galliano F., Morrison G., Mid infrared properties of distant infrared luminous galaxies, *Astronomy & Astrophysics*, 2006, vol. 451, p. 57
- Markelov N., Volga V., Buchnev L., Thermodynamic functions of monocrystal graphite in 0-3000 K temperature interval, 1973
- Materese C. K., Nuevo M., Sandford S. A., N- and O-heterocycles Produced from the Irradiation of Benzene and Naphthalene in H₂O/NH₃-containing Ices, *The Astrophysical Journal*, 2015, vol. 800, p. 116
- Mathis J. S., Rumpl W., Nordsieck K. H., The size distribution of interstellar grains, *The Astrophysical Journal*, 1977, vol. 217, p. 425
- Matteucci F., The influence of dark matter on the chemical evolution of elliptical galaxies, *The Astrophysical Journal*, 1992, vol. 397, p. 32
- Matteucci F., Tornambe A., Chemical evolution of elliptical galaxies, *Astronomy and Astrophysics*, 1987, vol. 185, p. 51
- Mello C. C., Conte D., Revealing the world of RNA interference, *Nature*, 2004, vol. 431, p. 338
- Mispelaer, F. Theule, P. Duvernay, F. Roubin, P. Chiavassa, T. Kinetics of OCN formation from the HNCO + NH₃ solid-state thermal reaction, *A&A*, 2012, vol. 540, p. A40
- Mo H., Van den Bosch F., White S., *Galaxy formation and evolution*. Cambridge University Press, 2010
- Moutou C., Léger A., d'Hendecourt L., Far-infrared emission of PAH molecules (14-40μm): a preparation for ISO spectroscopy., *Astronomy and Astrophysics*, 1996, vol. 310, p. 297
- Moutou C., Verstraete L., Léger A., Sellgren K., Schmidt W., New PAH mode at 16.4 μm, *Astronomy and Astrophysics*, 2000, vol. 354, p. L17
- Mulas G., Mallocci G., Joblin C., Toubanc D., Diagnostics for specific PAHs in the far-IR: searching neutral naphthalene and anthracene in the Red Rectangle, *Astronomy & Astrophysics*, 2006, vol. 456, p. 161

- Nakazato K., Sumiyoshi K., Yamada S., Gravitational collapse and neutrino emission of population III massive stars, *The Astrophysical Journal*, 2006, vol. 645, p. 519
- Nozawa T., Maeda K., Kozasa T., Tanaka M., Nomoto K., Umeda H., Formation of dust in the ejecta of type Ia supernovae, *The Astrophysical Journal*, 2011, vol. 736, p. 45
- O'Dowd M. J., Schiminovich D., Johnson B. D., Treyer M. A., Martin C. D., Wyder T. K., Charlot S., Heckman T. M., Martins L. P., Seibert M., et al., Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Galaxies at $z \sim 0.1$: The Effect of Star Formation and Active Galactic Nuclei, *The Astrophysical Journal*, 2009, vol. 705, p. 885
- Ohkubo T., Umeda H., Maeda K., Nomoto K., Suzuki T., Tsuruta S., Rees M. J., Core-Collapse Very Massive Stars: Evolution, Explosion, and Nucleosynthesis of Population III 500-1000 M Stars, *The Astrophysical Journal*, 2006, vol. 645, p. 1352
- Omont A., Physics and chemistry of interstellar polycyclic aromatic molecules, *Astronomy and Astrophysics*, 1986, vol. 164, p. 159
- Peeters Z., Botta O., Charnley S., Kisiel Z., Kuan Y.-J., Ehrenfreund P., Formation and photostability of N-heterocycles in space-I. The effect of nitrogen on the photostability of small aromatic molecules, *Astronomy & Astrophysics*, 2005, vol. 433, p. 583
- Rauch T., Synthetic ionizing spectra for planetary nebulae: a new grid of metal-line blanketed nlte model atmospheres. In *Revista Mexicana de Astronomia y Astrofisica Conference Series* , vol. 12, 2002, p. 150
- Riechers D. A., Pope A., Daddi E., Armus L., Carilli C. L., Walter F., Hodge J., Chary R.-R., Morrison G. E., Dickinson M., et al., Polycyclic Aromatic Hydrocarbon and Mid-Infrared Continuum Emission in a $z \sim 4$ Submillimeter Galaxy, arXiv preprint arXiv:1306.5235, 2013
- Rosa-Gonzalez D., Terlevich R., Terlevich E., Friaca A., Gaztanaga E., On the detectability of the Sunyaev-Zel dovich effect of massive young galaxies, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2004, vol. 348, p. 669
- Rosenberg M. J., Berné O., Boersma C., Random mixtures of polycyclic aromatic hydrocarbon spectra match interstellar infrared emission, *Astronomy & Astrophysics*, 2014, vol. 566, p. L4

- Sajina A., Yan L., Armus L., Choi P., Fadda D., Helou G., Spoon H., Spitzer Mid-Infrared Spectroscopy of Infrared Luminous Galaxies at $z \sim 2$. II. Diagnostics, *The Astrophysical Journal*, 2007, vol. 664, p. 713
- Salama F., Bakes E., Allamandola L., Tielens A., Assessment of the Polycyclic Aromatic Hydrocarbon–Diffuse Interstellar Band Proposal, *The Astrophysical Journal*, 1996, vol. 458, p. 621
- Sales D. A., Riffel R., Pastoriza M., , 2010 Technical report PAH and Emission Line Ratios in AGN and Starburst Galaxies
- Schmidt M., The Rate of Star Formation., *The Astrophysical Journal*, 1959, vol. 129, p. 243
- Schmidt M., The Rate of Star Formation. II. The Rate of Formation of Stars of Different Mass., *The Astrophysical Journal*, 1963, vol. 137, p. 758
- Siana B., Smail I., Swinbank A., Richard J., Teplitz H., Coppin K., Ellis R., Stark D., Kneib J.-P., Edge A., Detection of Far-Infrared and Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Emission from the Cosmic Eye: Probing the Dust and Star Formation of Lyman Break Galaxies, *The Astrophysical Journal*, 2009, vol. 698, p. 1273
- Siebenmorgen R., Krügel E., Dust model containing polycyclic aromatic hydrocarbons in various environments, *Astronomy and Astrophysics*, 1992, vol. 259, p. 614
- Silva L., Granato G. L., Bressan A., Danese L., Modeling the Effects of Dust on Galactic Spectral Energy Distributions from the Ultraviolet to the Millimeter Band, *The Astrophysical Journal*, 1998, vol. 509, p. 103
- Smith J. D. T., Draine B. T., Dale D. A., Moustakas J., R. C. Kennicutt J., Helou G., Armus L., Roussel H., Sheth K., Bendo G. J., Buckalew B. A., Calzetti D., Engelbracht C. W., Gordon K. D., Hollenbach D. J., Li A., Malhotra S., Murphy E. J., Walter F., The Mid-Infrared Spectrum of Star-forming Galaxies: Global Properties of Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Emission, *The Astrophysical Journal*, 2007, vol. 656, p. 770
- Soifer B., Puetter R., Russell R., Willner S., Harvey P., Gillett F., The 4-8 micron spectrum of the infrared source W33 A, *ApJ*, 1979, vol. 232, p. L53

- Steglich M., Jager C., Huisken F., Friedrich M., Plass W., et al., The abundances of hydrocarbon functional groups in the interstellar medium inferred from laboratory spectra of hydrogenated and methylated polycyclic aromatic hydrocarbons, *Astrophys.J.Suppl.*, 2013, vol. 208, p. 26
- Stein S., On the high temperature chemical equilibria of polycyclic aromatic hydrocarbons, *The Journal of Physical Chemistry*, 1978, vol. 82, p. 566
- Stein S., Golden D., Benson S. W., Predictive scheme for thermochemical properties of polycyclic aromatic hydrocarbons, *The Journal of Physical Chemistry*, 1977, vol. 81, p. 314
- Stein S. E., Fahr A., High-temperature stabilities of hydrocarbons, *The Journal of Physical Chemistry*, 1985, vol. 89, p. 3714
- Sturm E., Lutz D., Tran D., Feuchtgruber H., Genzel R., Kunze D., Moorwood A., Thornley M., ISO-SWS spectra of galaxies: Continuum and features, *Arxiv preprint astro-ph/0002195*, 2000
- Talbot Jr. R. J., Arnett W. D., The Evolution of Galaxies. II. Chemical Evolution Coefficients, *ApJ*, 1973, vol. 186, p. 51
- Tielens A. G., *The physics and chemistry of the interstellar medium*. Cambridge University Press, 2005
- Tinsley B. M., Evolution of the stars and gas in galaxies, *Fundamentals of cosmic physics*, 1980, vol. 5, p. 287
- Tscharnutter W., Winkler K.-H., A method for computing selfgravitating gas flows with radiation, *Computer Physics Communications*, 1979, vol. 18, p. 171
- Van Den Hoek L., Groenewegen M. A., New theoretical yields of intermediate mass stars, *Astronomy and Astrophysics Supplement Series*, 1997, vol. 123, p. 305
- Van der Zwet G., Allamandola L., Polycyclic aromatic hydrocarbons and the diffuse interstellar bands, *Astronomy and Astrophysics*, 1985, vol. 146, p. 76

- Van Diedenhoven B., Peeters E., Van Kerckhoven C., Hony S., Hudgins D., Allamandola L., Tielens A., The profiles of the 3-12 micron polycyclic aromatic hydrocarbon features, *The Astrophysical Journal*, 2004, vol. 611, p. 928
- Vega O., Silva L., Panuzzo P., Bressan A., Granato G., Chavez M., The evolution of actively star-forming galaxies in the mid-infrared, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2005, vol. 364, p. 1286
- Verstraete L., Leger A., d'Hendecourt L., Defourneau D., Dutuit O., Ionization cross-section measurements for two PAH molecules-Implications for the heating of diffuse interstellar gas, *Astronomy and Astrophysics*, 1990, vol. 237, p. 436
- Vijh U. P., Witt A. N., Gordon K. D., Blue luminescence and the presence of small polycyclic aromatic hydrocarbons in the interstellar medium, *The Astrophysical Journal*, 2005a, vol. 633, p. 262
- Vijh U. P., Witt A. N., Gordon K. D., Small polycyclic aromatic hydrocarbons in the red rectangle, *The Astrophysical Journal*, 2005b, vol. 619, p. 368
- Weingartner J. C., Draine B., Dust grain-size distributions and extinction in the milky way, large magellanic cloud, and small magellanic cloud, *The Astrophysical Journal*, 2001, vol. 548, p. 296
- Whelan J., Iben Jr I., Binaries and supernovae of type I, *The Astrophysical Journal*, 1973, vol. 186, p. 1007
- Whittet D. C., Dust in the galactic environment, *Dust in the galactic environment Institute of Physics Publishing*, 306 p., 1992, vol. 1
- Woolley S., Weaver T. A., The evolution and explosion of massive stars. II. Explosive hydrodynamics and nucleosynthesis, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 1995, vol. 101, p. 181
- Yan L., Chary R., Armus L., Teplitz H., Helou G., Frayer D., Fadda D., Surace J., Choi P., Spitzer detection of polycyclic aromatic hydrocarbon and silicate dust features in the mid-infrared spectra of $z \sim 2$ ultraluminous infrared galaxies, *The Astrophysical Journal*, 2005, vol. 628, p. 604

Yan L., Sajina A., Fadda D., Choi P., Armus L., Helou G., Teplitz H., Frayer D., Surace J., Spitzer Mid-Infrared Spectroscopy of Infrared Luminous Galaxies at $z \sim 2$. I. The Spectra, *The Astrophysical Journal*, 2007, vol. 658, p. 778

Zubko V., Dwek E., Arendt R. G., Interstellar dust models consistent with extinction, emission, and abundance constraints, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 2004, vol. 152, p. 211