



Universidade Federal do Rio de Janeiro
Centro de Ciências Matemáticas e da Natureza
Observatório do Valongo
Programa de Pós-Graduação em Astronomia



Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos em Galáxias Luminosas no Infravermelho

Yanna Carolina Martins da Silva

Rio de Janeiro
Março de 2019

Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos em Galáxias Luminosas no Infravermelho

Yanna Carolina Martins da Silva

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Astronomia do Observatório do Valongo, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como requisito necessário para a obtenção do título de Mestre em Ciências em Astronomia.

Orientador: Karín Menéndez-Delmestre

Rio de Janeiro
Março de 2019

CIP - Catalogação na Publicação

S586h Silva , Yanna Carolina Martins da
Hidrocarbonetos policíclicos aromáticos em
galáxias luminosas no infravermelho / Yanna
Carolina Martins da Silva . -- Rio de Janeiro, 2019.
91 f.

Orientadora: Karín Menéndez-Delmestre.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do
Rio de Janeiro, Observatório do Valongo, Programa de
Pós-Graduação em Astronomia, 2019.

1. Moléculas. 2. Meio Interestelar. 3.
Astrofísica Extragaláctica. I. Menéndez-Delmestre,
Karín, orient. II. Título.

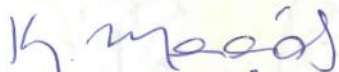
Hidrocarbonetos policíclicos aromáticos em galáxias luminosas no infravermelho

Yanna Carolina Martins da Silva

Dr.^a Karín Menéndez-Delmestre (Orientadora)
Laurie Anne Riguccini (Coorientadora)

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Astronomia, Observatório do Valongo, da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências - Astronomia.

Aprovada por:



Presidente, Dr.^a Karín Menéndez-Delmestre- (Orientadora) – OV/UFRJ



Dr.^a Dinalva Aires de Sales- (Avaliador Externo) – FURGS



Dr. Thiago Signorini Gonçalves- (Avaliador Interno) – OV/UFRJ

Rio de Janeiro
Março de 2019

O presente trabalho foi realizado com apoio da
Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de
Nível Superior – (Brasil) CAPES – Código de
Financiamento 001.

Dedicado a Elza, Francisco, Savina...

Agradecimentos

Eu achava que a coisa mais difícil que tinha feito na vida era a graduação em Astronomia... até fazer um mestrado em Astronomia. Mas certamente o caminho se tornou menos tortuoso graças às pessoas que estiveram ao meu lado durante esses 2 anos. Não me atreverei a colocar nomes de todos e todas, mas jamais poderei deixar de agradecer nominalmente a minha família: Elza, Francisco e Savina – eu nunca teria conseguido isso sem vocês. Também abrirei essa exceção à minha orientadora, Karín. Ela me convidou para trabalhar nesse projeto e acreditou no meu potencial, mesmo quando eu mesma não o fiz. Também tenho que agradecer meus amigos mais próximos: Amanda, Bruna, Maiara, Gustavo e Marcelo, e meu namorado, Davi, que me aguentaram nos melhores e piores momentos. Eu amo vocês!

“Sentir com inteligência, pensar com emoção”

— Humberto Gessinger

Resumo

Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos em Galáxias Luminosas no Infravermelho

Yanna Carolina Martins da Silva

Orientador: Karín Menéndez-Delmestre

RESUMO DA DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ASTRONOMIA DO OBSERVATÓRIO DO VALONGO, UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO, COMO REQUISITO NECESSÁRIO PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ASTRONOMIA.

Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos (PAHs) são moléculas complexas responsáveis por uma significativa fração da emissão em infravermelho (IV) de galáxias com alta atividade de formação estelar. Eles são detectados por suas transições vibracionais em IV-médio após a excitação por fótons de ultravioleta (UV). Informações sobre as regiões emissoras de IV-médio podem ser obtidas através das transições dos PAHs. Esse projeto explora a complexidade molecular de galáxias fortemente emissoras no IV, encontradas em baixos *redshifts* e usando espectros no IV-médio dos arquivos do *Infrared Spectrograph* (IRS), instrumento do Telescópio Espacial Spitzer. Nós focamos nosso estudo em Galáxias Luminosas e Ultra-Luminosas no Infravermelho (LIRGs: $10^{11} L_{\odot} \leq L_{IR} \leq 10^{12} L_{\odot}$, ULIRGs: $L_{IR} \geq 10^{12} L_{\odot}$) do *Great Observatories All-Sky LIRG Survey* (GOALS). GOALS é um catálogo local ($z \leq 0.088$) e multibanda, composto de 179 LIRGs + 22 ULIRGs com galáxias dominadas por AGN, *starbursts*, assim como sistemas em variados estágios de interação. Com dados auxiliares do UV ao IV-distante, a amostra de GOALS é um ótimo recurso para explorar históricos de formação estelar dessa população de galáxias. Nós usamos a rotina PAHFIT escrita em IDL para decompor os espectros em componentes de contínuo, bandas de PAHs e linhas atômicas/moleculares. Esses elementos nos fornecem parâmetros como a inclinação do contínuo, largura equivalente e fluxo integrado das bandas, que são traçadores da presença e contribuição de AGN. Também utilizamos o programa *NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database* nesse trabalho. Com essa ferramenta, nós caracterizamos a população de PAHs presentes em LIRGs e ULIRGs em termos de tamanho e carga. Juntamente com os resultados de PAHFIT, descrevemos a emissão de galáxias com diferentes contribuições de AGN/*starbursts* em termos da parcela de PAHs neutros ou ionizados, bem como espécies grandes ou pequenas. Sugerimos que os PAHs neutros são abundantes em galáxias *starburst*, enquanto as espécies carregadas estão mais presentes em sistemas com maior contribuição de AGN. Isso pode ser explicado através do campo de radiação das AGN,

que é mais ionizante. Esse projeto representa a primeira tentativa de ligação entre o histórico de formação estelar de fontes emisoras no IV e a sua população de PAHs de uma perspectiva astroquímica que combina observações com modelos teóricos.

palavras chave: *moléculas, meio interestelar, astrofísica extragaláctica*

Rio de Janeiro

Março de 2019

Abstract

Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Luminous Infrared Galaxies

Yanna Carolina Martins da Silva

Advisor: Karín Menéndez-Delmestre

DISSERTATION ABSTRACT SUBMITTED TO THE POSTGRADUATE ASTRONOMY PROGRAM OF THE VALONGO OBSERVATORY, FEDERAL UNIVERSITY OF RIO DE JANEIRO, IN FULFILLMENT OF THE REQUIREMENTS FOR THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE IN ASTRONOMY.

Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) are complex molecules responsible for a significant fraction of the infrared (IR) emission in star-forming galaxies. They are detected by mid-IR their vibrational transitions excited by UV photons. Information about the mid-IR emitting regions can be obtained by studying the PAH transitions. This project explores the molecular complexity of strong IR-emitting galaxies found at low redshifts using archival mid-IR spectra from the Infrared Spectrograph (IRS) on board the Spitzer Space Telescope. We focus our study on Luminous and Ultra-Luminous Infrared Galaxies (LIRGs: $10^{11} L_{\odot} \leq L_{IR} \leq 10^{12} L_{\odot}$, ULIRGs: $L_{IR} \geq 10^{12} L_{\odot}$), from the Great Observatories All-Sky LIRG Survey (GOALS). GOALS is a local ($z \leq 0.088$) and multiband survey, composed of 179 LIRGs + 22 ULIRGs with AGN-dominated systems, starbursts, as well as systems in varying stages of interaction. With ancillary data extending from the UV to the far-IR, the GOALS sample is a great resource to explore star formation histories of this galaxy population. We use the IDL-based routine PAHFIT to decompose the spectra into components of dust continuum, PAH features and atomic/molecular lines. These elements provide us parameters like the slope of dust continuum, equivalent width of PAH bands and strength of dust features, which are tracers of presence and contribution of AGN. We also use the NASA Ames PAH IR database in this work. With this tool, we characterize the underlying PAH population in terms of size, type and charge. Along with the PAHFIT results, we describe the emission of galaxies with different AGN/starburst contributions in terms of the portion of neutral or ionized PAHs, as well as bigger or smaller species. We suggest that neutral PAHs are abundant in starburst galaxies, while the charged species are more present in systems with higher AGN contribution. This program represents the first attempt to link the star formation history of LIRGs to the breakdown of their PAH emission from a astrochemical perspective which combines observations with theoretical models.

keywords: *molecules, interstellar medium, extragalactic astrophysics*

Rio de Janeiro

March 2019

Lista de Figuras

1.1	Bandas no IV-médio em espectros da Barra de Orion e NGC 7027.	18
1.2	Representação da aromaticidade do benzeno e alguns PAHs.	19
1.3	Espectro no IV-médio de NGC 7023.	21
1.4	Modelo adotado para a descrição de transições vibracionais.	22
1.5	Evolução da densidade de energia co-movente para galáxias no IV.	25
1.6	Diagrama ilustrativo do cenário merger-quasar, onde a interação entre duas galáxias ricas em gás forma uma galáxia luminosa no IV, que evolui para uma galáxia ultra luminosa, então um quasar, e eventualmente uma galáxia elíptica. Figura traduzida de http://candels-collaboration.blogspot.com/2012/07/luminous-infrared-galaxies.html	25
2.1	Espectros de NGC 1797 nos quatro modos de IRS-Spitzer.	35
2.2	Distribuição da nossa amostra de galáxias no céu.	36
2.3	Distribuição de luminosidade e redshift das galáxias da amostra.	37
2.4	Taxa de formação estelar em função do redshift para as galáxias da amostra.	37
3.1	Exemplos de SEDs de galáxias.	39
3.2	Potencial de ionização e comprimento de onda das linhas atômicas listadas no programa PAHFIT.	42
3.3	Curva de extinção adotada em PAHFIT e curva de Chiar & Tielens (2006).	44
3.4	Aplicação de LINFIT para o espectro da galáxia CGCG 448-020.	46
3.5	Distribuição de carga, composição e tamanho das moléculas do PAHdb.	47
3.6	Resultado de PAHdb para a galáxia IRASF 22491-1808.	49
4.1	Temperatura estimada dos grãos presentes na amostra através de PAHFIT.	52
4.2	Aplicação de LINFIT para as galáxias IRASF 15250+3608 e NGC 6156.	53
4.3	Ajuste linear representativo do contínuo de poeira das galáxias IRAS F17132+5313, NGC 5990 e NGC 7674.	54
4.4	Distribuição de valores para a inclinação do contínuo de poeira por LINFIT para as galáxias da amostra.	55
4.5	Inclinação do contínuo em função da porcentagem de AGN para as galáxias da amostra.	56
4.6	Larguras equivalentes das bandas de 6.2, 7.7, 11.3 e 12.7 μ m em função da contribuição de AGN.	57
4.7	Decomposição espectral realizada por PAHFIT para exemplos individuais.	57
4.8	Ajuste realizado por PAHFIT para a média das galáxias da nossa amostra.	58
4.9	Ajuste das moléculas de PAHdb em termos de carga e tamanho para IRAS F10173+0828.	59

4.10	Distribuição de carga, composição e tamanho das moléculas encontradas por PAHdb.	59
4.11	Ajuste de PAHdb em termos de carga e tamanho para o espectro médio da nossa amostra.	60
4.12	Região das bandas selecionadas para a integração de fluxo.	61
4.13	Contribuição relativa de PAHs em termos de carga e tamanho.	62
4.14	Contribuição relativa das bandas dos PAHs em termos do tamanho.	62
4.15	Contribuição relativa das bandas dos PAHs em termos de carga.	63
5.1	Espectro da galáxia média da amostra e das galáxias com menor e maior valor de $\tau_{9.7}$	65
5.2	Comparação entre as profundidades ópticas.	66
5.3	Contribuição relativa dos PAHs grandes e pequenos da nossa amostra em função da fração de AGN da galáxia para cada banda.	69
5.4	Componentes neutras e carregadas positivamente de PAHs na nebulosa NGC 7023.	70
5.5	Ajuste MARS para a contribuição de PAHs neutros e carregados da amostra.	73
5.6	Contribuição de PAHs neutros e carregados da amostra em função de $\langle \text{AGN} \rangle$ e suas KDEs.	74

Lista de Tabelas

1.1	Transições dos PAHs no IV-médio.	20
2.1	A amostra de GOALS	28
2.2	Sumário com os dados do levantamento GOALS.	33
3.1	Linhas de emissão rotacionais de H ₂ utilizadas em PAHFIT.	42
3.2	Bandas de PAHs utilizadas em PAHFIT.	43
4.1	Distribuição da inclinação do contínuo em termos da quantidade de galáxias.	54
5.1	Testes de normalidade da distribuição de contribuição de moléculas neutras e carregadas.	75

Abreviações

AGN	A ctive G alactic N uclei
IRAS	I nfra R ed A stronomical S atellite
IRS	I nfra R ed S pectrograph
IV	I nfra V ermelho
GOALS	G reat O bservatories A ll-Sky L IRG S urvey
LIRGs	L uminous I nfrared G alaxies
LF	L uminosity F unction
PAH	P olycyclic A romatic H ydrocarbon
PAHdb	P olycyclic A romatic H ydrocarbon d atabase
RBGS	IRAS R evised B right G alaxy S ample
SED	S pectral E nergy D istribution
SFR	S tar F ormation R ate
UIB	U nidentified I nfrared B ands
ULIRGs	U ltra L uminous I nfrared G alaxies
UV	U ltra V ioleta

Sumário

1	Introdução	17
1.1	Bandas de emissão não-identificadas no infravermelho	17
1.1.1	Transições vibracionais	20
1.2	Galáxias Luminosas no IV e sua importância	22
1.3	Objetivos	26
2	Amostra e Dados	27
2.1	GOALS	27
2.2	Observações e dados do Spitzer	33
2.2.1	IRS	34
2.3	Seleção da amostra	36
3	Metodologia	38
3.1	Emissão do IV em galáxias – uma visão global	38
3.2	Decomposição espectral com PAHFIT	40
3.3	Caracterização do contínuo por lei de potência – LINFIT	45
3.4	NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database	46
4	Resultados	50
4.1	Caracterização do contínuo para identificação de AGN e starbursts	50
4.2	Decomposição das bandas de emissão dos PAHs	55
5	Discussão	64
5.1	Diversidade espectral das (U)LIRGs	64
5.1.1	Absorção de silicatos – uma grande variedade em obscurecimento pela poeira	64
5.1.2	Inclinação do contínuo de poeira	66
5.2	Prevalência de PAHs pequenos, puros e neutros na emissão do IV-médio em (U)LIRGs	67
5.3	Natureza da fonte de energia das (U)LIRGs e seu impacto na produção de PAHs	71
5.3.1	AGN \times ionização dos PAHs	72
6	Conclusão	77
	Referências Bibliográficas	79
A	Apêndice A - PAHFIT	86

B	Apêndice B - LINFIT	88
C	Apêndice C - PAHdb	90

Capítulo 1

Introdução

1.1 Bandas de emissão não-identificadas no infravermelho

A Astronomia é historicamente focada na observação do céu no óptico, mas nas últimas décadas temos testemunhado grandes avanços no estudo do universo ao longo do espectro eletromagnético, desde mais altas energias, como raios-gama, até as de mais baixas, como o rádio. Cada domínio de energia nos fornece informações diferentes sobre os processos físicos ocorrentes no ambiente astrofísico observado. Em galáxias, uma grande parte da luz é emitida no infravermelho (IV) – isso dificulta a observação na superfície terrestre, visto que a atmosfera absorve fortemente nessas frequências.

Apesar de mais tradicional, a observação no óptico é prejudicada em regiões com presença de gás e poeira. O IV, com maiores comprimentos de onda que o visível, passa por regiões empoeiradas do espaço, sofrendo menos os efeitos da extinção interestelar. Uma vantagem disso é que podemos estudar objetos envoltos por esses materiais, como galáxias e regiões de formação estelar.

O uso de detectores no domínio do IV promoveu uma série de descobertas astronômicas a partir da segunda metade do século XX. Algumas bandas largas de emissão puderam ser resolvidas e foram observadas em 8.6 e $11.3\mu\text{m}$ (Gillett et al., 1973) e, posteriormente, em 6.2 e $7.7\mu\text{m}$ (Russell et al., 1975). Essas emissões quase sempre aparecem juntas e são encontradas em nebulosas planetárias (Allamandola et al., 1989), regiões HII (e.g., Verstraete et al., 1996), nebulosas de reflexão (e.g., Moutou et al., 1999) e até em ambientes extragalácticos (e.g., Aitken & Roche, 1985). A fonte dessas bandas

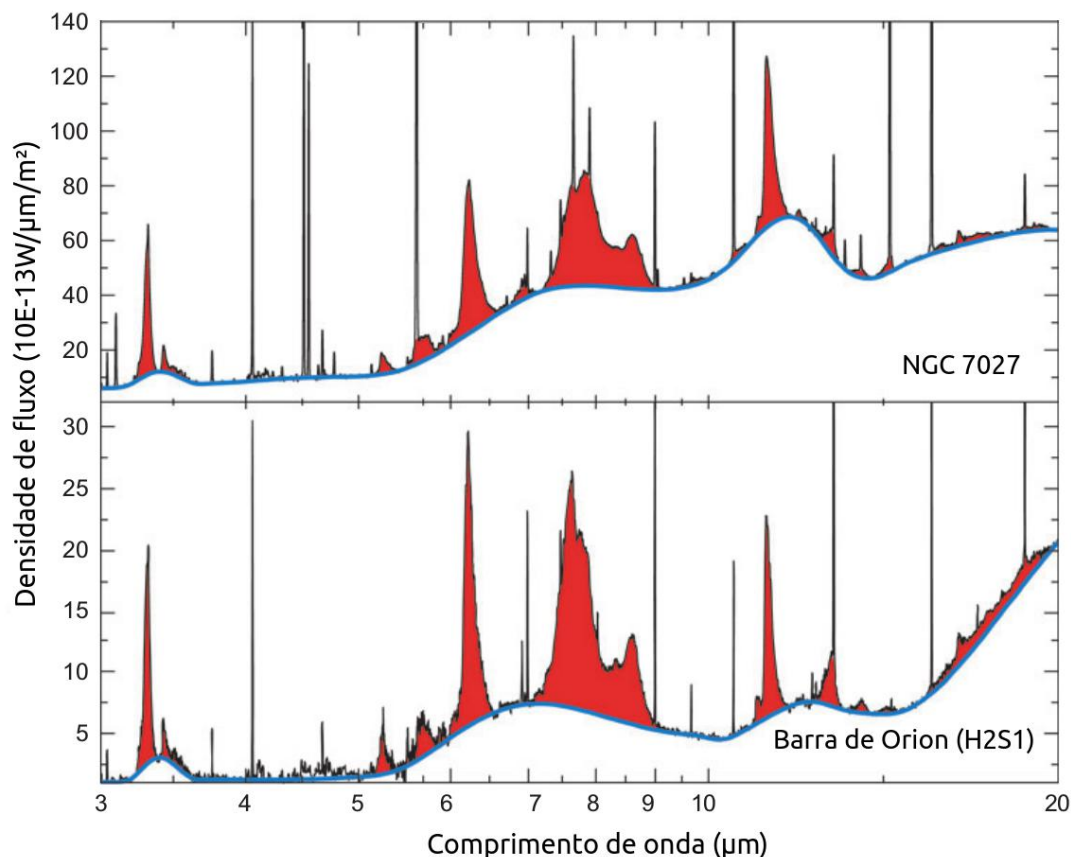


FIGURA 1.1. Espectros no IV-médio da região de fotodissociação na Barra de Orion e da nebulosa planetária NGC 7027 que são dominados por um conjunto de bandas de emissão. Esses espectros foram adquiridos pelo instrumento *Short Wavelength Spectrometer*, do telescópio ISO. Figura adaptada de Tielens (2008).

permaneceu desconhecida por vários anos, de forma que foram denominadas bandas não-identificadas no IV (do inglês, Unidentified InfraRed, UIR; Gillett et al. 1973).

O espectro de emissão interestelar no IV-médio¹ é rico em linhas atômicas e moleculares (especialmente transições rotacionais de H_2) e dominado pelas bandas UIR em 3.3, 6.2, 7.7, 8.6, 11.3 e $12.7\mu m$, mas há ainda outras mais fracas observadas entre 3.4- $18.9\mu m$. Essas bandas ascendem de platôs nos comprimentos de onda de ~ 3 , 6-9, 11-14 e 15- $19\mu m$, como mostra a Figura 1.1.

Duley & Williams (1981) sugeriram que as bandas UIR correspondem aos modos vibracionais característicos de moléculas aromáticas. Isso levou a proposição dos possíveis portadores das bandas UIR, como carbonos amorfos hidrogenados (e.g., Duley & Williams, 1983), compostos sintéticos de carbonos condensados (e.g., Sakata et al.,

¹Neste texto adotamos a convenção de que IV-próximo corresponde aos comprimentos de onda no intervalo 1- $3\mu m$, o IV-médio ao intervalo de ~ 5 - $25\mu m$, o IV-distante a 25- $1000\mu m$ e o IV-total a 8- $1000\mu m$.

1984), Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos (PAHs, do inglês, Polycyclic Aromatic Hydrocarbons; e.g., Leger & Puget, 1984; Allamandola et al., 1985), carvão (e.g., Papoular et al., 1989) e nanodiamantes (e.g., Jones & d’Hendecourt, 2000).

Os PAHs são moléculas complexas compostas majoritariamente de carbono e hidrogênio, dispostos em anéis aromáticos de 6 carbonos, como mostra a Figura 1.2. Nessas estruturas, há alternância de ligações simples e duplas entre os carbonos, fornecendo alta estabilidade para esses compostos. Esse anel molecular é a molécula base de quase todos os PAHs e é denominado benzeno. Os PAHs podem aparecer em diversas configurações, como em anéis de 5 carbonos, com radicais substituintes de um ou mais hidrogênios. Há ainda os Hidrocarbonetos Nitrogenados Policíclicos Aromáticos (PANHs, do inglês, Polycyclic Aromatic Nitrogen Hydrocarbons), quando o nitrogênio substitui um dos carbonos internos dos PAHs.

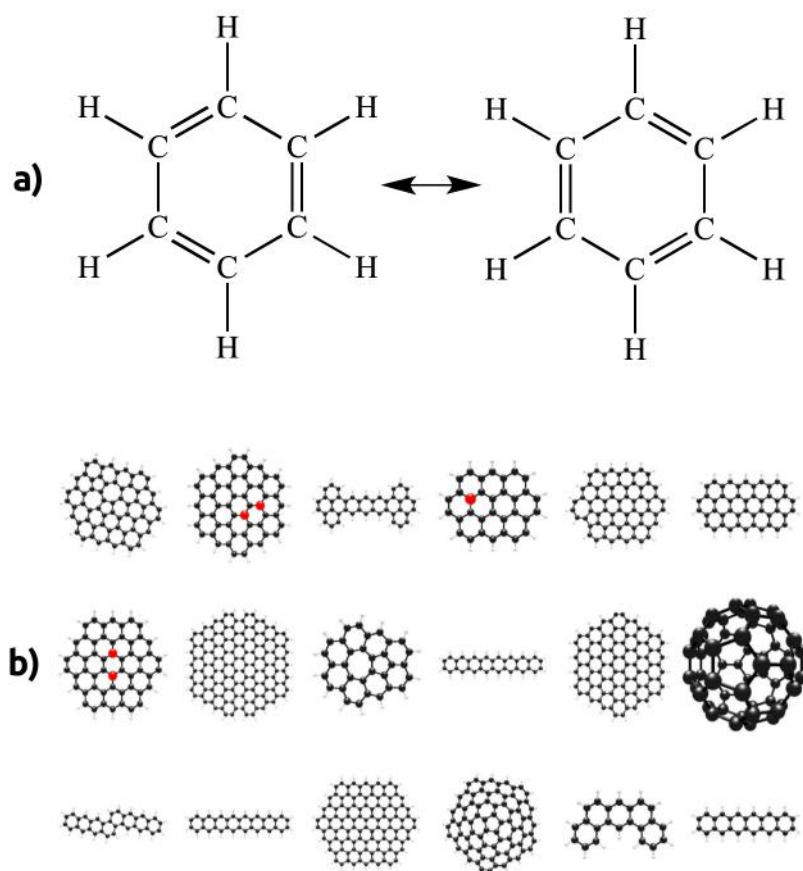


FIGURA 1.2. a) Representação da molécula de benzeno com a alternância (representada pela seta) entre suas duas configurações possíveis das ligações simples e duplas, produzindo o efeito de aromaticidade no composto. b) PAHs complexos formados por vários anéis benzênicos. Há enorme diversidade molecular, com espécies simétricas, compactas e substituídas. Os átomos de carbono são representados pelas esferas pretas, os hidrogênios em branco e nitrogênios em vermelho. Figura adaptada de Bauschlicher et al. (2018).

A atribuição dos PAHs como fonte para as bandas UIR é baseada nos seguintes argumentos: 1) os PAHs tem baixa capacidade térmica, o que significa que são aquecidos a altas temperaturas mesmo através da absorção de um único fóton; 2) a razão banda/contínuo encontrada nos objetos com emissão de bandas no IV implica uma fonte molecular ao invés de estado sólido; 3) o perfil dessas bandas é característico de anarmonicidade², associada a emissão molecular (Tielens, 2008).

Como mostrado na Figura 1.2, os PAHs representam uma grande família, com moléculas neutras e carregadas, grandes e pequenas, e com diferentes composições. Essa diversidade molecular representa um grande desafio para o entendimento dos ditos PAHs astrofísicos, demandando a colaboração entre estudos experimentais, modelos teóricos e programas observacionais desde a sua descoberta.

1.1.1 Transições vibracionais

As bandas presentes nos espectros de ambientes astrofísicos foram identificadas como resultado dos modos vibracionais característicos das ligações entre os átomos que compõem os PAHs. Na Tabela 1.1, podemos ver quais as ligações envolvidas, para cada uma das bandas principais dos PAHs no IV-médio. A Figura 1.3, mostra o espectro no IV-médio da nebulosa NGC 7023, com as principais bandas dos PAHs.

TABELA 1.1. Transições dos PAHs no IV-médio.

Comprimento de onda (μm)	Associação
6.2	estiramento entre C–C
7.7	estiramento entre C–C
8.6	torção entre C–H no plano do anel aromático
11.3	torção entre C–H fora do plano do anel aromático (sem H adjacente)
12.7	torção entre C–H fora do plano do anel aromático (com dois H adjacentes)

Admite-se que uma transição vibracional é similar ao movimento do oscilador harmônico, onde duas ou mais partículas estão sujeitas a uma força restauradora proporcional a distância entre elas, e isso ocorre quando os átomos estão em movimento periódico. O tratamento clássico do oscilador é descrito a seguir e a Figura 1.4 ilustra o modelo adotado para a vibração de uma molécula diatômica. Para pequenos estiramentos e compressões, podemos descrever a equação de movimento pela Lei de Hooke:

²Apesar de comumente modeladas por movimentos de osciladores harmônicos, como descrito na Seção 1.1.1, as transições vibracionais geradoras das bandas de PAHs precisam de correções, pois se tratam de sistemas reais, por isso há características de anarmonicidade.

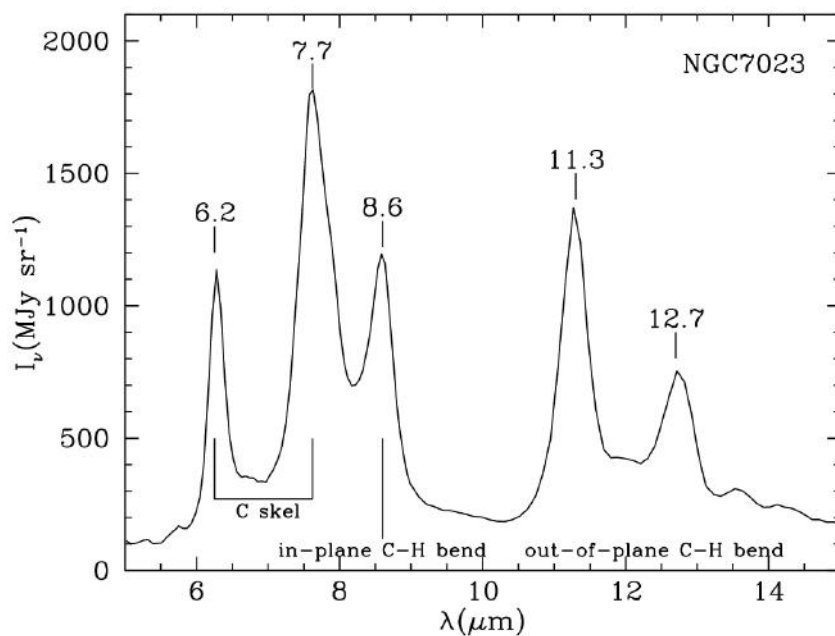


FIGURA 1.3. Espectro no IV-médio da nebulosa de reflexão NGC 7023. Estão indicadas abaixo das bandas principais as ligações responsáveis pela emissão, sendo as bandas de 6.2 e 7.7 μm atribuídas à ligação C-C e as bandas de 8.6, 11.3 e 12.7 designadas à ligação C-H. Figura adaptada de Draine (2003).

$$F = -\frac{dV(x)}{dx} = -kx \longrightarrow V(x) = kx^2 \quad (1.1)$$

onde $V(x)$ é a energia potencial associada ao movimento, x é o deslocamento entre as duas esferas de massa m e M e k é a constante elástica da mola, proporcional a massa e a frequência de oscilação do movimento.

Os movimentos de estiramento e torção mencionados na Tabela 1.1 se referem à variação no valor de deslocamento entre os átomos de C-C e ao ângulo entre as ligações C-H em um mesmo anel aromático.

O tratamento quântico das transições vibracionais é ditado pela Equação de Schrödinger usando a energia potencial do oscilador:

$$\hat{H}\psi(x) = \hat{E}\psi(x) \longrightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (1.2)$$

A solução dessa equação nos fornece uma energia quantizada em função de n , sendo representada por uma parábola em um diagrama de energia em função do deslocamento do sistema.

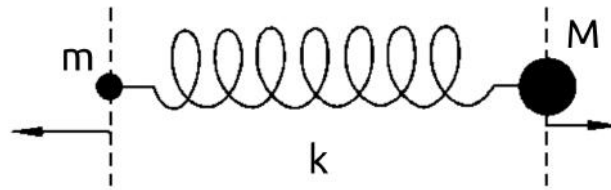


FIGURA 1.4. Modelo adotado para a descrição de transições vibracionais através de duas esferas de massa m e M , ligadas por uma mola de constante elástica k – válido para pequenos deslocamentos entre as esferas. Figura adaptada de Hollas (2004).

$$E_v = h\nu \left(n + \frac{1}{2} \right), \nu = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{k}{\mu} \right)^{1/2}. \quad (1.3)$$

onde n representa os níveis de energia associados às transições vibracionais ($n = 0, 1, 2, \dots$), ν é a frequência de vibração e μ é a massa reduzida do sistema. As funções de onda também são quantizadas em relação a n e dependem dos polinômios de Hermite. Isso significa que um oscilador harmônico vai absorver ou emitir fótons de frequência ν mostrada acima, dependendo do nível da transição.

1.2 Galáxias Luminosas no IV e sua importância

O IV tem um extraordinário potencial para sondar diferentes propriedades astrofísicas de galáxias. O IV engloba toda a emissão re-processada de galáxias, onde a poeira absorve fótons de maiores energias (i.e., UV e óptico) e re-emite em comprimentos de onda maiores (i.e., IV-médio, IV-distante).

Por mostrar emissão associada a estrelas mais velhas, o IV-próximo é um bom traçador da massa estelar da galáxia (Pérez-González et al., 2003). Por sofrer menos os efeitos de extinção, a emissão no IV-médio nos fornece características detalhadas das propriedades da poeira relacionadas à formação estelar (e.g., Wu et al., 2005) e a possibilidade de identificar núcleos ativos empoeirados e inacessíveis em outros comprimentos de onda (e.g., Díaz-Santos et al., 2017). O IV-distante, por sua vez, é dominado pela poeira fria aquecida principalmente por regiões de formação estelar (Lutz, 2014). A luminosidade total da galáxia no IV (faixa de 8–1000 μm) está associada ao volume total de energia gerado pela atividade de formação estelar e potencial presença de um núcleo ativo (Kim et al., 2015).

A missão *Infrared Astronomical Satellite* (IRAS; Neugebauer et al., 1984), lançada em 1983, nos forneceu pela primeira vez uma visão no IV de galáxias do universo local. Equipado com instrumentos nos modos de fotometria e espectroscopia, o telescópio IRAS explorou galáxias nas bandas do IV-médio e distante (12, 25, 60 e $100\mu\text{m}$).

O Observatório Espacial de Infravermelho (ISO; Kessler et al., 1996), uma missão da Agência Espacial Europeia, foi lançado no fim de 1995. ISO utilizou um conjunto de quatro instrumentos científicos que cobriram um intervalo espectral de $2.5\text{--}240\mu\text{m}$. Mesmo fora de funcionamento, os arquivos de ISO continuam sendo utilizados até os dias atuais. A sua espectroscopia permitiu a descoberta e caracterização de novas moléculas interestelares (e.g., Whittet et al., 1996). Além disso, ISO criou os primeiros grandes levantamentos no IV de galáxias em interação (Cesarsky & Salama, 2006), de aglomerados de galáxias (e.g., Hansen et al., 2000), de poeira em galáxias elípticas (Fich et al., 1999), entre outros.

Desde 2000, tivemos mais missões espaciais no IV. AKARI (Murakami et al., 2007), lançada em 2006 pela Agência de Exploração Aeroespacial Japonesa, operou em imageamento e espectroscopia no intervalo espectral de $2\text{--}180\mu\text{m}$. O telescópio Herschel (Pilbratt, 2004) também foi de grande importância para a Astronomia no IV, tendo sido lançado em 2009 também pela Agência Espacial Européia e operado no IV-distante: de 55 a $625\mu\text{m}$ na espectroscopia e de 55 a $672\mu\text{m}$ em imageamento. A Agência Espacial Norte Americana (NASA) lançou no fim de 2009 o telescópio WISE (Wright et al., 2010), que mapeou todo o céu nas bandas espectrais W1 ($3.4\mu\text{m}$), W2($4.6\mu\text{m}$), W3($12\mu\text{m}$) e W4($22\mu\text{m}$).

No entanto, até hoje o satélite de IV com maior importância científica no IV-médio desde IRAS é o Telescópio Espacial Spitzer (Werner et al., 2004), lançado em 2003 pela NASA. Spitzer porta os instrumentos de imageamento *Infrared Array Camera* (IRAC; com filtros em $3.19\text{--}3.94\mu\text{m}$, $4\text{--}5.02\mu\text{m}$, $4.98\text{--}6.41\mu\text{m}$ e $6.45\text{--}9.34\mu\text{m}$) e *Multiband Imaging Photometer for Spitzer* (MIPS; centrados em $24\mu\text{m}$, $70\mu\text{m}$, $160\mu\text{m}$ e SED de $51\text{--}106\mu\text{m}$), e de espectroscopia, o *Infrared Spectrograph* (IRS; com filtros detalhados na Seção 2.2.1). A sensibilidade e a resolução do telescópio foram sem precedentes. Porém, uma vez cessado o hélio criogênico, as missões envolvendo os instrumentos MIPS e IRS foram encerradas em 2009, assim como os dois canais mais vermelhos de IRAC. Nesse momento, Spitzer opera em “Warm Spitzer Mission” (Storrie-Lombardi & Dodd, 2010),

baseado no uso das bandas mais azuis de IRAC, uma vez que o nitrogênio líquido usado para resfriar as bandas mais vermelhas se esgotou.

Como a maior e mais recente fonte de espectros no IV, os dados de IRS/Spitzer apresentam uma visão única da emissão do IV-médio em uma grande variedade de ambientes astrofísicos, desde berçários estelares empoeirados, centros de galáxias e sistemas planetários recém-formados. Com os dados do Spitzer também foi possível observar objetos mais frios, como anãs marrons, planetas extrasolares e nuvens moleculares gigantes (e.g., Öberg et al., 2011).

A contribuição para a área de extragaláctica fornecida pelo Spitzer vai desde a observação do meio interestelar em outras galáxias, galáxias normais, elípticas, *starbursts*, galáxias ativas e seus núcleos, até aglomerados galácticos (e.g., Soifer et al., 2008). A luminosidade no IV de galáxias é atribuída tanto à atividade de formação estelar, quanto ao crescimento de buracos negros supermassivos (e.g., Genzel & Cesarsky, 2000). Essa dualidade em ambientes empoeirados não é amplamente estudada em outros domínios de energia, visto que a presença de poeira dificulta o estudo das propriedades físicas e os processos astrofísicos ocorrentes nas galáxias.

Sanders & Mirabel (1996) apontaram que galáxias menor luminosidade bolométrica são fracas no IV (galáxias normais de $L < 10^{11} L_{\odot}$ tem cerca de 30% de sua luminosidade no IV; Mathis, 1990), mas para maiores luminosidades bolométricas, a contribuição infravermelha também aumenta (A galáxia Arp 220 , por exemplo, emite $\sim 95\%$ de sua luminosidade total no IV; Lagache et al., 2005). As galáxias mais notáveis dessa classe são conhecidas como Galáxias Luminosas no IV (do inglês, Luminous Infrared Galaxies; LIRGs: $10^{12} L_{\odot} > L_{IV} \geq 10^{11} L_{\odot}$) e Galáxias Ultra Luminosas no IV (do inglês, Ultra Luminous Infrared Galaxies; ULIRGs: $L_{IV} \geq 10^{12} L_{\odot}$). As LIRGs e ULIRGs desempenham um papel central na evolução de galáxias: apesar de serem escassas no universo local, elas se tornam cada vez mais importantes em redshifts intermediários ($0.5 \lesssim z \lesssim 1$) e altos ($z \geq 2$), respectivamente, onde dominam a densidade de energia no IV e a atividade de formação estelar por volume (Casey et al., 2014). A Figura 1.5, retirada de Le Floch et al. (2005), demonstra nitidamente esse resultado para as LIRGs.

Estudos multibanda mostraram que a maioria das ULIRGs são encontradas em sistemas com perturbações de maré devido à fusão de galáxias ricas em gás (e.g., Armus

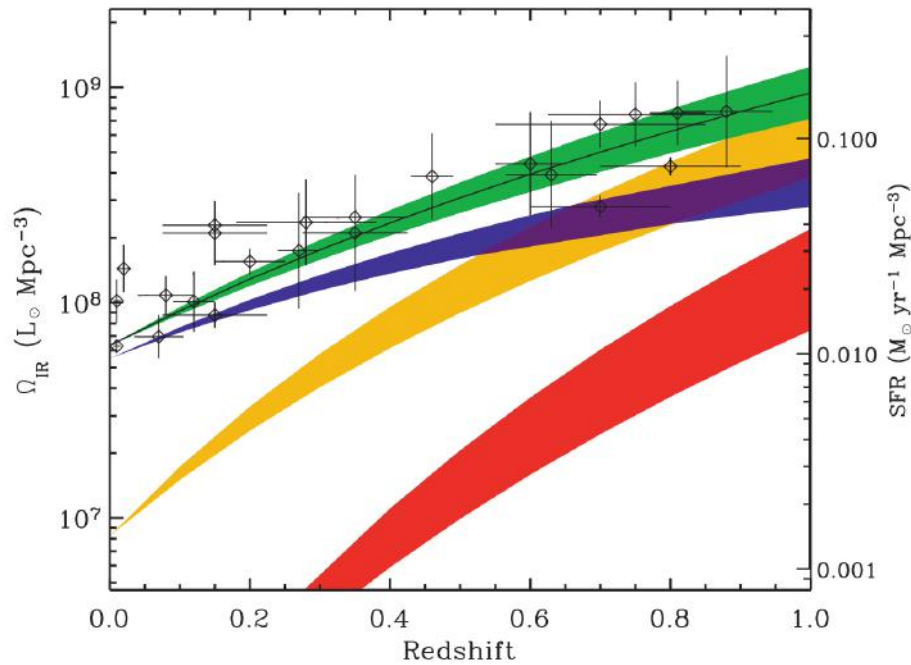


FIGURA 1.5. Evolução da densidade de energia co-movente no IV para todas as galáxias (em verde), para as galáxias normais ($L < 10^{11} L_{\odot}$, em azul), para LIRGs ($10^{12} L_{\odot} > L_{IV} \geq 10^{11} L_{\odot}$, em laranja) e para ULIRGs ($L_{IV} \geq 10^{12} L_{\odot}$, em vermelho). A densidade de taxa de formação estelar também foi derivada e é mostrada no eixo vertical direito. Os losangos e as barras de erro são dados retirados da literatura. Adaptado de Le Floch et al. (2005).

et al., 1987; Murphy et al., 2001). Segundo Sanders et al. (1988), as ULIRGs representam a fase empoeirada resultante de uma fusão entre duas galáxias ricas em gás, onde coexistem intensa atividade de formação estelar e AGN. Uma vez que a poeira obscurecida se dissipa ao redor do núcleo desses objetos, a emissão da região central ativa e brilhante se tornaria mais importante que a emissão de *starburst* e daria origem ao quasar. Esse cenário de evolução levaria subsequentemente à formação de galáxias elípticas massivas, sendo conhecido como ULIRG-quasar (Figura 1.6).

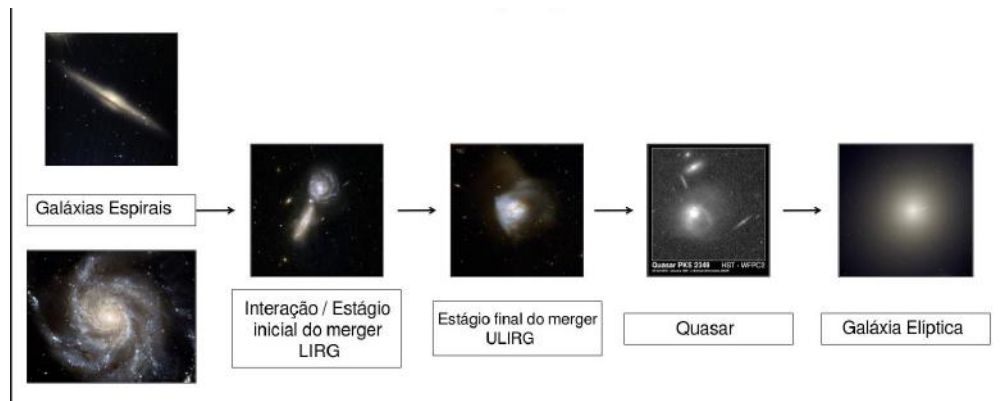


FIGURA 1.6. Diagrama ilustrativo do cenário merger-quasar, onde a interação entre duas galáxias ricas em gás forma uma galáxia luminosa no IV, que evolui para uma galáxia ultra luminosa, então um quasar, e eventualmente uma galáxia elíptica. Figura traduzida de <http://candels-collaboration.blogspot.com/2012/07/luminous-infrared-galaxies.html>.

1.3 Objetivos

Neste trabalho visamos explorar como a emissão no IV-médio, em particular a emissão dos PAHs, pode ser utilizada como ferramenta para estudar processos astrofísicos em galáxias ligados à fonte principal de energia, seja por formação estelar ou AGN. Focamos na emissão de galáxias luminosas no IV para fazer uma análise detalhada da natureza dos PAHs (tamanho das moléculas, grau de ionização, composição química) e como isso é afetado por propriedades globais dessas galáxias, como a presença de um núcleo ativo.

Utilizamos uma amostra de galáxias luminosas no IV no universo local, apresentada na Seção 2.3, a fim de investigar os seguintes tópicos:

- a influência da fonte de ionização de um AGN ou *starburst* na geração de uma variedade de características nos espectros do IV-médio;
- as propriedades físico-químicas dos PAHs (em termos de carga, tamanho e composição) que caracteriza a emissão no IV-médio de galáxias luminosas no IV;
- o impacto que a fonte de radiação dominante (AGN ou *starburst*) pode ter na natureza molecular dos PAHs que dominam as bandas de emissão no IV-médio.

Neste trabalho dedicamos o Capítulo 2 para descrever a amostra de galáxias utilizada, na qual aplicamos a metodologia descrita no Capítulo 3, que consiste na decomposição do espectro dessas galáxias e classificação dos PAHs. Apresentamos os resultados no Capítulo 4 e analisamos no Capítulo 5 as propriedades de PAHs em relação à presença ou não de um núcleo ativo na galáxia hospedeira.

Pretendemos com esse estudo avançar o conhecimento sobre a análise dos PAHs em Astroquímica, especialmente no âmbito observacional, e a pesquisa de galáxias emisoras no IV na área de Extragaláctica, contribuindo assim para essas duas vertentes da Astrofísica. Ressaltamos ainda que esse trabalho se apresenta como uma oportunidade de aproveitar os dados atualmente disponíveis de IRS/Spitzer para estudar de forma global a relação entre PAHs e fontes de radiação IV em LIRGs e ULIRGs. Mas, uma vez que o telescópio espacial James Webb for lançado, será possível estender esse tipo de estudo ao mapeamento espacialmente resolvido de PAHs em galáxias luminosas no IV até redshifts $z \sim 1-1.5$.

Capítulo 2

Amostra e Dados

Usamos dados espectroscópicos observados com o telescópio Spitzer do Great Observatories All-Sky LIRG Survey, ao qual nos referiremos como levantamento GOALS de agora em diante, com o intuito de definir uma amostra de galáxias luminosas no IV, citadas no Capítulo 1. Na Seção 2.1, mostramos as principais características do levantamento, bem como sua seleção. As observações realizadas e os tipos de dados coletados para a composição do levantamento foram tratados na Seção 2.2. Ainda nessa seção apresentamos o perfil representativo de espectros IRS que compõem o levantamento GOALS. Finalizamos o capítulo descrevendo os critérios adotados nesse projeto para a seleção da amostra utilizada.

2.1 GOALS

Grandes esforços têm sido feitos para o estudo de ULIRGs, enquanto as LIRGs foram mantidas em um segundo plano. Alguns trabalhos mostraram imageamento no óptico e IV-próximo de LIRGs de baixo redshift (e.g., Ishida, 2004), mas ainda não são abundantes os levantamentos multibanda de imageamento e espectroscopia de LIRGs mais próximas e mais brilhantes. É provável que isso se deva ao fato de que LIRGs compreendem um grupo morfologicamente diverso, enquanto ULIRGs são quase sempre objetos em estágios finais de interação.

O estudo de uma amostra completa de LIRGs e ULIRGs, abrangendo vários estágios de fusão e interação, pode esclarecer pontos sobre a evolução de buracos negros

e bojos em galáxias massivas. Assim surgiu a motivação para o levantamento GOALS (Armus et al., 2009), que reúne dados de 181 LIRGs e 22 ULIRGs (Tabela 2.1) de baixo *redshift* ($z \leq 0.088$), desde o infravermelho distante até raios X. O levantamento combina dados fotométricos e espectroscópicos de observatórios da NASA, como Spitzer, Hubble, GALEX e Chandra.

TABELA 2.1. A amostra de GOALS

Número	RA	Dec	Nome IRAS	Nome (óptico)	Distância	Redshift	$\log(L_{IR}/L_{\odot})$
	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)
1	00:09:53.36	+25:55:27.7	F00073+2538	NGC 0023	63.3	0.015	11.12
2	00:11:06.56	-12:06:28.2	F00085-1223	NGC 0034	81.5	0.019	11.49
3	00:18:50.37	-10:22:05.3	F00163-1039	MCG-02-01-051	111.4	0.027	11.48
4	00:36:52.49	-33:33:17.2	F00344-3349	ESO 350-IG038	85.4	0.020	11.28
5	00:42:49.32	-23:33:04.3	F00402-2349	NGC 0232	91.3	0.022	11.44
6	00:54:03.88	+73:05:05.9	F00506+7248	MCG+12-02-001	67.7	0.016	11.50
7	00:57:39.72	+43:47:47.7	F00548+4331	NGC 0317B	74.1	0.018	11.19
8	01:07:47.54	-17:30:25.6	F01053-1746	IC 1623	82.2	0.020	11.71
9	01:10:08.93	-16:51:09.9	F01076-1707	MCG-03-04-014	134.8	0.033	11.65
10	01:18:08.27	-44:27:51.9	F01159-4443	ESO 244-G012	87.7	0.021	11.38
11	01:20:02.63	+14:21:42.3	F01173+1405	CGCG 436-030	82.2	0.031	11.69
12	01:34:51.26	-36:08:14.4	F01325-3623	ESO 353-G020	82.2	0.016	11.06
13	01:36:23.76	-37:19:51.9	F01341-3735	ESO 297-G011	72.0	0.017	11.16
14	01:38:52.79	-10:27:12.1	F01364-1042		191.1	0.048	11.85
15	01:44:30.56	+17:06:09.0	F01417+1651	VIII Zw 035	112.6	0.028	11.64
16	01:51:14.34	+22:34:56.0	F01484+2220	NGC 0695	130.4	0.032	11.68
17	01:54:57.78	+36:55:07.9	F01519+3640	UGC 01385	76.9	0.019	11.05
18	02:09:31.84	-10:09:30.7	F02071-1023	NGC 0838	53.3	0.013	11.05
19	02:10:09.53	+39:11:24.7	F02070+3857	NGC 0828	73.6	0.018	11.36
20	02:14:00.77	+05:10:13.8	F02114+0456	IC 0214	122.4	0.030	11.43
21	02:17:56.46	+14:31:58.2	F02152+1418	NGC 0877	52.9	0.013	11.10
22	02:23:20.47	+32:11:33.6	F02203+3158	MCG+05-06-036	135.7	0.038	11.64
23	02:24:07.97	+47:58:11.9	F02208+4744	UGC 01845	65.0	0.015	11.12
24	02:30:42.84	-02:56:20.5	F02281-0309	NGC 0958	77.6	0.019	11.20
25	02:37:25.46	+21:06:02.8	F02345+2053	NGC 0992	56.4	0.014	11.07
26	02:42:40.72	-00:00:47.9	F02401-0013	NGC 1068	15.8	0.004	11.40
27	02:46:17.46	+13:05:44.6	F02435+1253	UGC 02238	88.5	0.022	11.33
28	02:46:39.13	+21:35:10.4	F02437+2122		94.4	0.023	11.16
29	02:54:01.79	+14:58:26.0	F02512+1446	UGC 02369	127.7	0.032	11.67
30	03:15:01.47	+42:02:08.6	F03117+4151	UGC 02608	95.5	0.023	11.41
31	03:19:48.18	+41:30:42.0	F03164+4119	NGC 1275	72.4	0.017	11.26
32	03:25:05.37	+40:33:32.2	F03217+4022		95.5	0.023	11.33
33	03:33:36.40	-36:08:25.9	F03316-3618	NGC 1365	17.7	0.005	11.00
34	03:38:47.07	+15:32:54.1	F03359+1523		141.8	0.035	11.55
35	03:54:15.95	+15:55:43.4	F03514+1546	CGCG 465-012	90.1	0.022	11.20
36	04:02:32.47	+60:20:40.0	03582+6012		123.5	0.030	11.43

Tabela 2.1 – *Continua*

Número	RA	Dec	Nome IRAS	Nome (óptico)	Distância	Redshift	$\log(L_{IR}/L_{\odot})$
	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)
37	04:12:22.68	+05:32:49.1	F04097+0525	UGC 02982	72.3	0.018	11.20
38	04:13:49.70	-32:00:25.3	F04118-3207	ESO 420-G013	49.8	0.012	11.07
39	04:21:20.04	-18:48:48.4	F04191-1855	ESO 550-IG025	130.0	0.032	11.51
40	04:22:42.81	-40:36:03.1	F04210-4042	NGC 1572	85.1	0.020	11.30
41	04:30:33.09	+38:55:47.8	04271+3849		77.8	0.019	11.11
42	04:33:59.95	-08:34:46.6	F04315-0840	NGC 1614	65.7	0.016	11.65
43	04:35:33.81	+19:10:18.0	F04326+1904	UGC 03094	100.9	0.025	11.41
44	04:46:49.55	-48:33:30.6	F04454-4838	ESO 203-IG001	212.0	0.053	11.86
45	04:52:04.96	-32:59:26.0	F04502-3304	MCG-05-12-006	78.3	0.019	11.17
46	05:07:44.84	-08:01:08.7	F05053-0805	NGC 1797	61.6	0.015	11.04
47	05:08:20.46	+17:21:57.8	F05054+1718	CGCG 468-002	75.1	0.019	11.22
48	05:11:27.46	+24:45:41.1	05083+2441		94.8	0.023	11.26
49	05:16:46.39	+79:40:12.9	F05081+7936	VII Zw 031	216.2	0.053	11.99
50	05:16:55.96	+51:31:56.9	05129+5128		113.7	0.027	11.42
51	05:21:01.45	-25:21:46.2	F05189-2524		172.0	0.042	12.16
52	05:21:06.53	-10:14:46.2	F05187-1017		115.4	0.028	11.30
53	05:40:43.70	+49:41:41.6	05368+4940	MCG+08-11-002	80.6	0.019	11.46
54	05:42:04.55	+69:22:42.8	F05365+6921	NGC 1961	57.5	0.013	11.06
55	05:45:48.03	+58:42:03.6	F05414+5840	UGC 03351	63.9	0.015	11.28
56	05:47:08.49	+17:33:29.1	05442+1732		77.4	0.018	11.30
57	06:09:45.84	-21:40:28.3	F06076-2139		153.3	0.037	11.65
58	06:14:13.75	+80:27:47.1	F06052+8027	UGC 03410	56.9	0.013	11.10
59	06:18:37.82	+78:21:24.0	F06107+7822	NGC 2146	17.4	0.003	11.12
60	06:27:22.39	-47:10:49.4	F06259-4708	ESO 255-IG007	160.3	0.039	11.90
61	06:31:46.45	-17:38:00.7	F06295-1735	ESO 557-G002	89.5	0.021	11.25
62	06:57:34.41	+46:24:10.6	F06538+4628	UGC 03608	90.4	0.021	11.34
63	06:59:40.26	-63:17:52.4	F06592-6313		99.4	0.023	11.24
64	07:03:26.33	-60:16:02.7	F07027-6011	AM 0702-601	132.6	0.031	11.64
65	07:09:15.04	+20:37:10.7	07063+2043	NGC 2342	75.0	0.017	11.31
66	07:16:37.73	-62:20:36.4	F07160-6215	NGC 2369	46.6	0.011	11.16
67	07:27:37.62	-02:54:54.8	07251-0248		338.2	0.087	12.39
68	07:28:46.38	+33:50:22.9	F07256+3355	NGC 2388	59.7	0.014	11.28
69	07:35:43.44	+11:42:34.8	F07329+1149	MCG+02-20-003	72.0	0.016	11.13
70	08:37:01.87	-49:54:30.0	08355-4944		112.1	0.026	11.62
71	08:38:23.18	+65:07:15.2	F08339+6517		83.1	0.019	11.11
72	08:38:24.11	+25:45:16.5	F08354+2555	NGC 2623	81.1	0.018	11.60
73	08:44:28.07	-31:41:40.5	08424-3130	ESO 432-IG006	72.1	0.016	11.08
74	08:52:31.28	-69:01:57.0	F08520-6850	ESO 060-IG016	191.8	0.046	11.82
75	09:00:25.35	+39:03:54.0	F08572+3915		235.7	0.058	12.16
76	09:04:12.69	-36:27:01.5	09022-3615		241.4	0.059	12.31
77	09:13:37.69	-10:19:24.6	F09111-1007		221.4	0.054	12.06
78	09:15:55.10	+44:19:54.0	F09126+4432	UGC 04881	164.7	0.039	11.74
79	09:35:51.59	+61:21:11.9	F09320+6134	UGC 05101	163.8	0.039	12.01
80	09:36:34.02	+48:28:18.8	F09333+4841	MCG+08-18-013	109.8	0.026	11.34

Tabela 2.1 – *Continua*

Número	RA	Dec	Nome IRAS	Nome (óptico)	Distância	Redshift	$\log(L_{IR}/L_{\odot})$
	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)
81	09:46:20.70	+03:03:30.4	F09437+0317	IC 0563	89.3	0.020	11.23
82	10:03:59.57	-06:29:08.5	F10015-0614	NGC 3110	75.2	0.017	11.37
83	10:06:04.65	-33:53:06.1	F10038-3338	ESO 374-IG032	145.9	0.034	11.78
84	10:20:00.24	+08:13:32.8	F10173+0828		203.5	0.049	11.86
85	10:22:19.98	+21:34:10.6	F10196+2149	NGC 3221	63.9	0.014	11.09
86	10:27:51.30	-43:54:14.0	F10257-4339	NGC 3256	38.2	0.009	11.64
87	10:43:07.51	-46:12:44.1	F10409-4556	ESO 264-G036	95.9	0.021	11.32
88	10:59:01.70	-43:26:25.2	F10567-4310	ESO 264-G057	80.5	0.017	11.14
89	10:59:18.15	+24:32:34.2	F10565+2448		147.6	0.043	12.08
90	11:03:53.98	+40:51:00.4	F11011+4107	MCG+07-23-019	147.6	0.034	11.62
91	11:21:10.26	-02:59:20.8	F11186-0242	CGCG 011-076	110.5	0.025	11.43
92	11:25:47.31	+14:40:21.2	F11231+1456	IC 2810	146.0	0.034	11.64
93	11:27:54.18	-41:36:51.7	F11255-4120	ESO 319-G022	77.4	0.016	11.12
94	11:28:32.35	+58:33:43.3	F11257+5850	NGC 3690	49.7	0.010	11.93
95	11:53:11.73	-39:07:49.0	F11506-3851	ESO 320-G030	40.3	0.011	11.17
96	12:06:51.78	-31:56:52.8	F12043-3140	ESO 440-IG058	107.0	0.023	11.43
97	12:13:46.02	+02:48:42.2	F12112+0305		295.1	0.073	12.36
98	12:14:09.71	+54:31:35.5	F12116+5448	NGC 4194	42.3	0.008	11.10
99	12:14:12.81	-47:13:42.5	F12115-4656	ESO 267-G030	93.0	0.018	11.25
100	12:14:22.08	-56:32:32.7	12116-5615		121.3	0.027	11.65
101	12:25:03.90	-06:40:52.1	F12224-0624		118.7	0.026	11.36
102	12:26:59.74	-00:53:32.1	F12243-0036	NGC 4418	36.3	0.007	11.19
103	12:56:14.25	+56:52:24.8	F12540+5708	UGC 08058	176.8	0.042	12.57
104	13:01:24.89	+29:18:39.6	F12590+2934	NGC 4922	105.9	0.023	11.38
105	13:01:50.28	+04:20:00.8	F12592+0436	CGCG 043-099	162.6	0.037	11.68
106	13:02:20.02	-15:46:01.8	F12596-1529	MCG-02-33-098	76.3	0.016	11.17
107	13:02:52.42	-23:55:17.8	F13001-2339	ESO 507-G070	101.5	0.022	11.56
108	13:08:18.73	-57:27:30.3	13052-5711		101.6	0.021	11.40
109	13:15:03.49	+24:37:07.6	F13126+2453	IC 0860	55.6	0.011	11.14
110	13:15:06.37	-55:09:22.5	13120-5453		135.5	0.031	12.32
111	13:15:32.82	+62:07:37.4	F13136+6223	VV 250a	133.1	0.031	11.81
112	13:20:35.37	+34:08:22.2	F13182+3424	UGC 08387	105.0	0.023	11.73
113	13:21:23.09	+00:20:33.2	F13188+0036	NGC 5104	87.5	0.018	11.27
114	13:22:21.73	-16:43:06.2	F13197-1627	MCG-03-34-064	79.5	0.016	11.28
115	13:25:44.02	-29:50:00.4	F13229-2934	NGC 5135	59.3	0.014	11.30
116	13:27:23.79	-57:29:21.8	13242-5713	ESO 173-G015	33.3	0.009	11.38
117	13:32:53.40	-24:12:25.5	F13301-2356	IC 4280	79.8	0.016	11.15
118	13:38:17.52	+48:16:37.2	F13362+4831	NGC 5256	122.1	0.028	11.56
119	13:39:55.34	+00:50:09.5	F13373+0105	NGC 5257	103.8	0.022	11.62
120	13:44:42.12	+55:53:13.1	F13428+5608	UGC 08696	160.6	0.038	12.21
121	13:49:13.94	+35:15:26.2	F13470+3530	UGC 08739	78.7	0.017	11.15
122	13:50:56.92	-49:03:18.8	F13478-4848	ESO 221-IG010	61.6	0.010	11.22
123	13:52:16.32	+02:06:18.0	F13497+0220	NGC 5331	145.2	0.033	11.66
124	13:58:35.80	+37:26:20.5	F13564+3741	NGC 5394	57.3	0.011	11.08

Tabela 2.1 – *Continua*

Número	RA	Dec	Nome IRAS	Nome (óptico)	Distância	Redshift	$\log(L_{IR}/L_{\odot})$
	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)
125	14:19:43.27	+49:14:11.9	F14179+4927	CGCG 247-020	114.1	0.026	11.39
126	14:30:10.44	+31:12:55.8	F14280+3126	NGC 5653	58.8	0.012	11.13
127	14:37:38.29	-15:00:24.2	F14348-1447		330.3	0.083	12.39
128	14:40:59.04	-37:04:32.0	F14378-3651		276.4	0.067	12.23
129	14:45:10.02	-20:53:30.9	F14423-2039	NGC 5734	65.2	0.014	11.15
130	14:57:00.51	+24:36:45.2	F14547+2449	VV 340a	146.5	0.033	11.74
131	14:57:43.27	-43:07:56.3	F14544-4255	IC 4518	77.5	0.016	11.23
132	15:13:13.07	+07:13:32.1	F15107+0724	CGCG 049-057	63.7	0.013	11.35
133	15:18:06.24	+42:44:41.5	F15163+4255	VV 705	169.2	0.039	11.92
134	15:24:57.98	-63:07:29.4	15206-6256	ESO 099-G004	129.3	0.029	11.74
135	15:26:59.42	+35:58:37.8	F15250+3608		228.1	0.055	12.08
136	15:30:00.85	+12:59:22.1	F15276+1309	NGC 5936	65.3	0.013	11.14
137	15:34:57.23	+23:30:11.3	F15327+2340	UGC 09913	84.8	0.018	12.28
138	15:46:16.41	+02:24:55.6	F15437+0234	NGC 5990	62.8	0.013	11.13
139	16:05:12.87	+20:32:33.0	F16030+2040	NGC 6052	75.2	0.016	11.09
140	16:11:40.84	+52:27:27.2	F16104+5235	NGC 6090	129.2	0.029	11.58
141	16:19:11.75	-07:54:03.0	F16164-0746		121.3	0.027	11.62
142	16:30:54.89	+04:04:41.3	F16284+0411	CGCG 052-037	112.8	0.024	11.45
143	16:34:52.55	-60:37:08.0	16304-6030	NGC 6156	47.0	0.011	11.14
144	16:38:12.64	-68:26:42.3	F16330-6820	ESO 069-IG006	193.6	0.046	11.98
145	16:42:40.11	-09:43:13.7	F16399-0937		121.4	0.027	11.63
146	16:47:30.21	-29:20:14.2	F16443-2915	ESO 453-G005	96.4	0.021	11.37
147	16:52:58.90	+02:24:03.3	F16504+0228	NGC 6240	110.5	0.024	11.93
148	16:54:23.72	-09:53:20.9	F16516-0948		102.3	0.022	11.31
149	16:58:27.81	+58:56:47.5	F16577+5900	NGC 6286	83.9	0.018	11.37
150	17:14:20.45	+53:10:31.6	F17132+5313		210.1	0.051	11.96
151	17:16:35.68	-10:20:40.5	F17138-1017		81.2	0.017	11.49
152	17:23:21.97	-00:17:00.7	F17207-0014		182.1	0.043	12.46
153	17:26:43.35	-59:55:55.2	F17222-5953	ESO 138-G027	94.3	0.021	11.41
154	17:54:51.82	+34:46:34.2	F17530+3447	UGC 11041	75.0	0.016	11.11
155	17:56:56.65	+24:01:02.0	F17548+2401	CGCG 141-034	89.8	0.019	11.20
156	18:00:28.61	-04:01:16.3	17578-0400		67.0	0.014	11.48
157	18:11:35.91	+01:31:41.3	18090+0130		126.6	0.029	11.65
158	18:12:57.46	+68:21:38.7	F18131+6820	NGC 6621	92.4	0.020	11.29
159	18:13:39.56	-57:44:00.9	F18093-5744	IC 4687	76.7	0.017	11.62
160	18:16:37.26	+22:06:42.6	F18145+2205	CGCG 142-034	83.2	0.019	11.18
161	18:32:41.10	-34:11:27.0	F18293-3413		83.0	0.018	11.88
162	18:33:36.00	+59:53:20.3	F18329+5950	NGC 6670A/B	122.4	0.028	11.65
163	18:38:25.75	-57:29:25.4	F18341-5732	IC 4734	71.2	0.015	11.35
164	18:43:12.52	+60:39:11.6	F18425+6036	NGC 6701	60.8	0.013	11.12
165	19:10:59.19	+73:25:04.2	F19120+7320	NGC 6786	107.5	0.025	11.49
166	19:14:31.15	-21:19:06.3	F19115-2124	ESO 593-IG008	201.8	0.049	11.93
167	19:32:22.30	-04:00:01.1	F19297-0406		335.1	0.086	12.45
168	19:56:35.78	+11:19:04.9	19542+1110		260.1	0.065	12.12

Tabela 2.1 – *Continua*

Número	RA	Dec	Nome IRAS	Nome (óptico)	Distância	Redshift	$\log(L_{IR}/L_{\odot})$
	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)
169	19:57:37.60	-37:56:08.4	F19542-3804	ESO 339-G011	85.3	0.019	11.20
170	20:25:06.58	-24:48:32.9	F20221-2458	NGC 6907	49.1	0.010	11.11
171	20:28:31.98	+25:43:42.3	20264+2533	MCG+04-48-002	63.6	0.014	11.11
172	20:33:06.13	-02:01:38.9	F20304-0211	NGC 6926	85.7	0.019	11.32
173	20:37:17.73	+25:31:37.5	20351+2521		141.3	0.034	11.61
174	20:57:24.01	+17:07:41.6	F20550+1655	CGCG 448-020	150.0	0.036	11.94
175	20:58:26.78	-42:39:00.5	F20551-4250	ESO 286-IG019	177.4	0.043	12.06
176	21:04:11.11	-43:35:36.1	F21008-4347	ESO 286-G035	76.4	0.017	11.20
177	21:11:29.28	+58:23:07.9	21101+5810		161.2	0.039	11.81
178	21:36:10.73	-38:32:37.8	F21330-3846	ESO 343-IG013	82.6	0.019	11.14
179	21:48:19.54	-34:57:04.7	F21453-3511	NGC 7130	70.4	0.016	11.42
180	22:14:39.97	-27:27:50.3	F22118-2742	ESO 467-G027	74.7	0.017	11.08
181	22:16:09.13	-36:50:37.2	F22132-3705	IC 5179	50.2	0.011	11.24
182	22:31:25.48	-19:02:04.0	F22287-1917	ESO 602-G025	104.7	0.025	11.34
183	22:41:12.21	+34:14:56.8	F22389+3359	UGC 12150	89.6	0.021	11.35
184	22:49:39.84	-48:50:58.3	F22467-4906	ESO 239-IG002	175.6	0.043	11.84
185	22:51:49.35	-17:52:24.9	F22491-1808		302.2	0.078	12.20
186	23:03:16.84	+08:53:00.9	F23007+0836	NGC 7469	68.0	0.016	11.65
187	23:04:56.55	+19:33:07.1	F23024+1916	CGCG 453-062	103.7	0.025	11.38
188	23:15:46.75	-59:03:15.8	F23128-5919	ESO 148-IG002	182.4	0.044	12.06
189	23:16:00.67	+25:33:24.3	F23135+2517	IC 5298	112.7	0.027	11.60
190	23:16:10.81	-42:35:05.5	F23133-4251	NGC 7552	23.2	0.005	11.11
191	23:18:14.89	+06:34:17.8	F23157+0618	NGC 7591	69.1	0.016	11.12
192	23:18:22.19	-04:24:57.4	F23157-0441	NGC 7592	101.0	0.024	11.40
193	23:21:04.59	-69:12:54.1	F23180-6929	ESO 077-IG014	171.5	0.041	11.76
194	23:27:57.73	+08:46:51.0	F23254+0830	NGC 7674	119.4	0.029	11.56
195	23:28:46.62	+03:30:41.4	23262+0314	NGC 7679	71.3	0.017	11.11
196	23:39:01.32	+36:21:08.2	F23365+3604		253.3	0.064	12.20
197	23:42:00.91	-03:36:54.4	F23394-0353	MCG-01-60-022	92.4	0.023	11.27
198	23:46:05.44	+53:14:01.7	23436+5257		139.3	0.034	11.57
199	23:47:01.73	+29:28:16.2	F23444+2911	NGC 7752/3	71.1	0.017	11.07
200	23:51:13.55	+20:07:41.2	F23488+1949	NGC 7771	58.5	0.014	11.40
201	23:51:22.73	+20:34:55.4	F23488+2018	Mrk 331	73.8	0.018	11.50

NOTA – (1) Ascensão reta (hh:mm:ss.ss) disponível em NASA/IPAC *Extragalactic Database* (NED) em outubro de 2008; (2) Declinação (dd:mm:ss.ss) disponível em NED em outubro de 2008; (3) Fonte IRAS, onde o prefixo F indica a presença no *Faint Source Catalog* (Moshir & et al., 1990) e nenhum prefixo indica a presença no *Point Source Catalog*; (4) Identificação no óptico, quando disponível em NED; (5) Distância em Mpc derivada pela correção da velocidade heliocêntrica para o modelo \mathcal{I} -*attractor* de Mould et al. (2000) e adotando os parâmetros cosmológicos de $H_0 = 70 \text{ km s}^{-1} \text{ Mpc}$, $\Omega_{vacuo} = 0.72$ e $\Omega_{matéria} = 0.28$, baseado nos resultados do WMAP (Hinshaw et al. 2009) e disponibilizado pelo NED; (6) Redshift calculado a partir da velocidade heliocêntrica dos objetos, disponível em NED em outubro de 2008; (7) Luminosidade total no infravermelho

(8–1000 μm) em unidades de log10 solares computadas usando as densidades de fluxo reportadas no RBGS e as distâncias de luminosidades em (6).

Os alvos de GOALS foram definidos a partir da seleção das LIRGs e ULIRGs do *IRAS Revised Bright Galaxy Sample* (RBGS; Sanders et al. (2003)), que possui 629 objetos extragalácticos com densidade de fluxo em 60 μm maior que 5.24 Jy (limite de completeza do catálogo) e latitude galáctica acima de 5°. As galáxias do RBGS são as mais brilhantes em 60 μm e, por estarem próximas, nos fornecem a possibilidade de comparação com galáxias de alto redshift selecionadas por infravermelho e submilimétrico. É importante salientar que 77 LIRGs são sistemas com múltiplas galáxias, de forma que o levantamento GOALS compreende 291 objetos.

O conjunto primário de dados de GOALS consiste nos instrumentos de imageamento no IV por IRAC e MIPS (Spitzer); espectroscopia no IV por IRS (Spitzer); imageamento no óptico por Hubble *Advanced Camera for Surveys* (ACS), *Near Infrared Camera and Multi-Object Spectrometer* (NICMOS) e *Wide Field and Planetary Camera 2* (WFPC2); dados em raios-X por *Chandra AXAF CCD Imaging Spectrometer* (ACIS); e observações no GALEX de UV-próximo e UV-distante. Um sumário das observações multibanda que compõem a campanha observacional de GOALS está na Tabela 2.2.

TABELA 2.2. Sumário do conjunto de dados do levantamento multibanda GOALS. O tipo de dado, o comprimento de onda referido, o telescópio (e instrumentos utilizados) e o número de sistemas observados (incluindo os dados disponíveis em arquivos) são mostrados nas colunas 1-4, respectivamente. Adaptado de Armus et al. (2009).

Tipo (1)	Comprimento de onda/Filtro (2)	Telescópio (3)	Amostra (4)
Imag. e Espectr. em raios X	0.4–7keV	Chandra–ACIS	44
Imag. em UV	1528Å(FUV), 227Å(NUV)	GALEX	124
Imag. em UV	1400Å(F140LP)	Hubble–ACS/SBC	30
Imag. em UV	2180Å(F218W)	Hubble–WFPC2	30
Imag. no optico	4350Å(F435W), 8140Å(F814W)	Hubble–ACS	88
Imag. no IV proximo	16 μm (F160W)	Hubble–NICMOS	88
Imag. no IV medio	3.6, 4.5, 5.4, 8 μm	Spitzer–IRAC	202
Espectr. nuclear no IV medio	5–40 μm baixa res., 10–40 μm alta res.	Spitzer–IRS	202
Map. espectral no IV medio	5–40 μm baixa res.	Spitzer–IRS	42
Imag. no IV distante	24, 70, 160 μm	Spitzer–MIPS	202

2.2 Observações e dados do Spitzer

Os dados no infravermelho de GOALS são compostos de imagens e espectros previamente obtidos e já disponibilizados na forma de *data archive* na página online do

Spitzer¹ e por observações auxiliares de LIRGs e ULIRGs do levantamento.

A amostra fotométrica na região do IV de GOALS consiste em 175 imagens adquiridas com IRAC e MIPS, instrumentos do *Spitzer Space Telescope* (PID 3672, PI J. Mazzarella). As observações realizadas pelo IRAC em 3.6, 4.5, 5.8 e 8 μ m foram feitas no modo *high dynamic range* para evitar a saturação de brilho no núcleo do objeto e a exposição de cada imagem foi de 30 segundos. Já as observações feitas com o MIPS em 24, 70 e 160 μ m tiveram tempos de integração total de 48, 38 e 25s, respectivamente.

2.2.1 IRS

Focamos o trabalho na análise detalhada de bandas de emissão no IV-médio associadas aos PAHs. Como descrito nas Seções 1.1 e 1.2, os espectros no IV-médio de galáxias são caracterizados pela presença de bandas de PAHs em 6.2, 7.7, 8.6, 11.3 e 12.7 μ m, absorções de silicatos em 9.7 e 18 μ m, linhas atômicas em toda a sua extensão, e absorções por gelos de água ou hidrocarbonetos no intervalo espectral de 5–7 μ m (Spoon et al., 2004; Armus et al., 2007).

Os espectros de baixa resolução ($R \approx 100$) são mais adequados de forma geral para o estudo de PAHs e das absorções de silicatos, por se tratar de bandas mais largas. Os espectros de alta resolução espectral são úteis no estudo de alvos brilhantes (como estrelas). Porém, estudos focados nas condições do meio interestelar em ULIRGs demonstram o valor desta modalidade de IRS na medição de larguras equivalentes e intensidades relativas de linhas de emissão como [SIV] 10.5 μ m, [NeII] 12.8 μ m, [NeIII] 15.5 μ m, [NeV] 14.3 e 24.3 μ m, [OIV] 25.9 μ m, [SIII] 18.7 e 33.5 μ m, [SiII] 34.8 μ m, [FeII] 17.9 e 25.9 μ m, assim como linhas rotacionais de H₂ em 9.66 μ m, 12.1 μ m, 17.0 μ m e 28.2 μ m. Essas linhas fornecem a medição do estado de ionização, densidade, temperatura e massa do gás molecular quente (Higdon et al., 2006, 100-500K).

Para compor os dados espectroscópicos no infravermelho do levantamento GOALS, foram observadas 189 LIRGs², as quais foram observadas nos quatro módulos de operação (*channels*, em inglês) do instrumento IRS: ch0, ch1, ch2 e ch3, que correspondem aos modos *Short-Low* (SL), *Short-High* (SH), *Long-Low* (LL) and *Long-High* (LH). *short* e *long* se referem ao comprimento de onda abrangido pelo módulo, enquanto

¹<http://irsa.ipac.caltech.edu/data/SPITZER/docs/spitzerdataarchives/>

²Falaremos mais a frente sobre os cortes utilizados neste trabalho.

low e *high* dizem respeito à resolução espectral. Os valores para a resolução espectral variam de 57 a 127 para os modos ch0 e ch2, e 600 para os modos ch1 e ch3; já para comprimentos de onda, os valores foram de 5.13–19.51 e 13.9–39.9 μm .

O repositório de espectros de GOALS foi disponibilizado ao público através do site <https://irsa.ipac.caltech.edu/data/GOALS/galaxies.html>. Mostramos na Figura 2.1 exemplos dos espectros obtidos nos diferentes modos de IRS para a galáxia NGC 1797. O canal ch0 apresenta o espectro de baixa resolução nos comprimentos de onda onde se encontram as bandas de emissão principais dos PAHs. No contexto desse trabalho, o estudo detalhado dos PAHs foi focado na análise dos espectros obtidos neste modo para a amostra de LIRGs e ULIRGs da amostra GOALS.

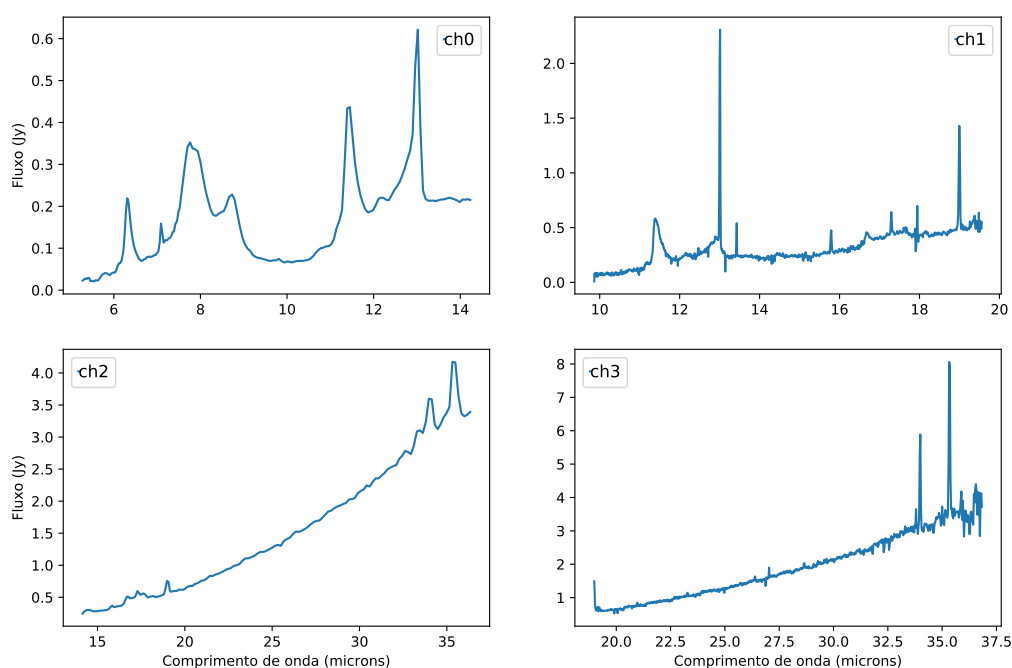


FIGURA 2.1. Espectros IRS da galáxia NGC 1797. Os painéis superiores apresentam os espectros em baixos comprimentos de onda, onde o espectro da esquerda mostra o canal ch0, de baixa resolução e o espectro da direita o espectro ch1, de alta resolução. Os painéis inferiores exibem os espectros para mais altos comprimentos de onda, onde o canal ch2, mostrado a esquerda, é de baixa resolução, e ch3, na direita mostra um espectro de alta resolução. O modo ch0 mostra mais claramente os PAHs, ch2 exhibe o contínuo formado por grãos muito pequenos, enquanto ch1 e ch3 exibem as linhas atômicas. Utilizamos no nosso trabalho os dados do canal ch0.

2.3 Seleção da amostra

Para uma análise mais detalhada das bandas dos PAHs, selecionamos na amostra de GOALS apenas as galáxias que possuem espectro no modo ch0. Essa seleção resultou em um total de 189 sistemas, sendo esses objetos 167 LIRGs e 22 ULIRGs. Além disso, eliminamos da amostra as LIRGs em sistemas múltiplos (caso em que a fenda está localizada em apenas uma das componentes), gerando um montante final de 157 galáxias, com 135 LIRGs e 22 ULIRGs. Por fim, temos uma amostra representativa de galáxias com distribuição uniforme pelo céu, como mostra a Figura 2.2.

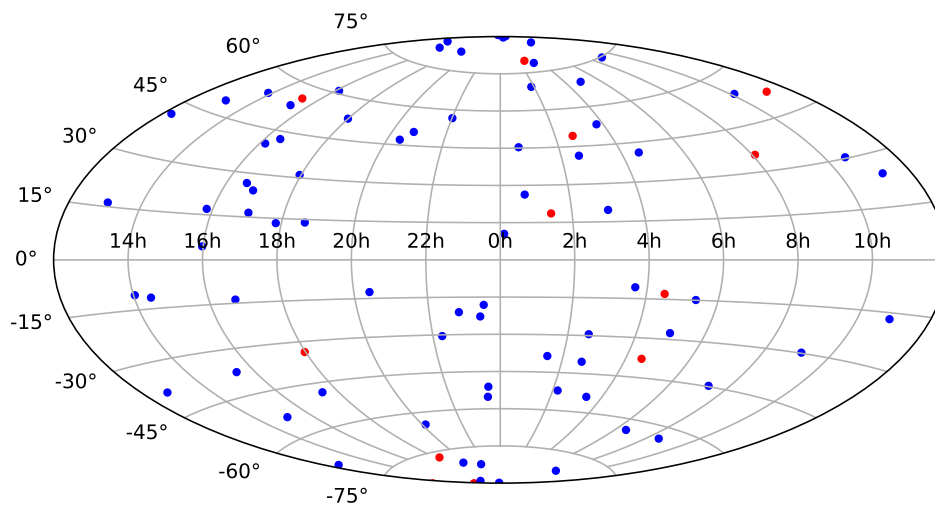


FIGURA 2.2. Distribuição da amostra de 189 LIRGs e ULIRGs no céu. As LIRGs estão representadas em azul, enquanto as ULIRGs são mostradas em vermelho.

Como citado na Seção 1.2, as LIRGs possuem luminosidade na região do infravermelho de $10^{12} > L_{IR} (L_{\odot}) \geq 10^{11}$ e as ULIRGs apresentam $L_{IR} (L_{\odot}) > 10^{12}$ (Sanders et al., 1988). A distribuição de luminosidades e redshift desses objetos é mostrada na Figura 2.3, salientando a abundância de LIRGs comparada as ULIRGs no universo local (Le Floc'h et al., 2005; Magnelli et al., 2013).

Kennicutt (1998) mostrou que a taxa de formação estelar (SFR) é diretamente proporcional à luminosidade em infravermelho, como mostra a Equação 2.1. Desse modo, podemos inferir a SFR a partir da luminosidade fornecida através do levantamento GOALS através de fotometria em diferentes bandas no IV e modelagem de distribuição espectral de energia (como mostra a Figura 2.4). Podemos perceber que o survey passa por efeitos de seleção, como o Viés de Malmquist, no qual as ULIRGs podem ser detectadas até distâncias onde as LIRGs, que são menos luminosas, já não são detectáveis.

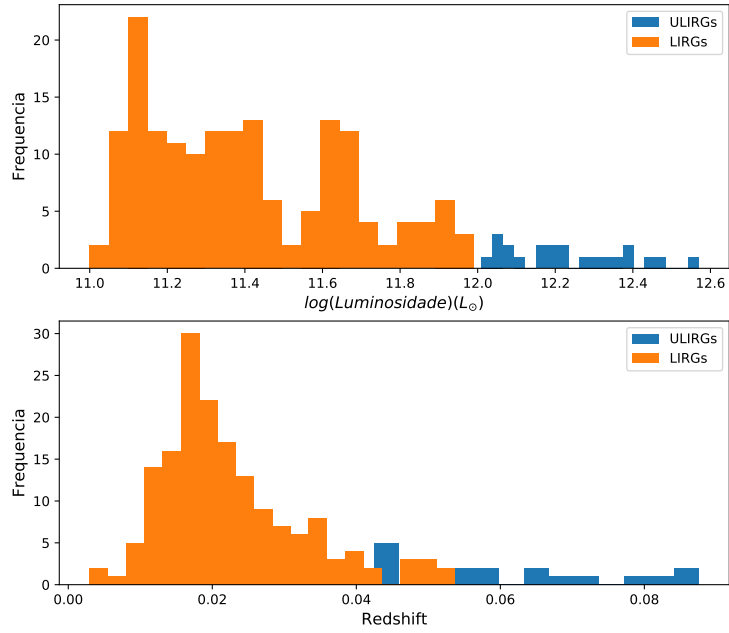


FIGURA 2.3. Distribuição de luminosidade e redshift das galáxias da amostra. No painel superior, mostramos a distribuição de luminosidade e, no painel inferior, a distribuição de redshift para as galáxias da amostra. As ULIRGs, mostradas em azul, representam cerca de 11% da nossa amostra. As galáxias LIRGs, mostradas em laranja, correspondem à maior parte da amostra, com representação de 89% dos objetos.

$$\text{SFR} (M_{\odot} \text{ ano}^{-1}) = \frac{L_{IR}}{5.8 \times 10^9} \quad (2.1)$$

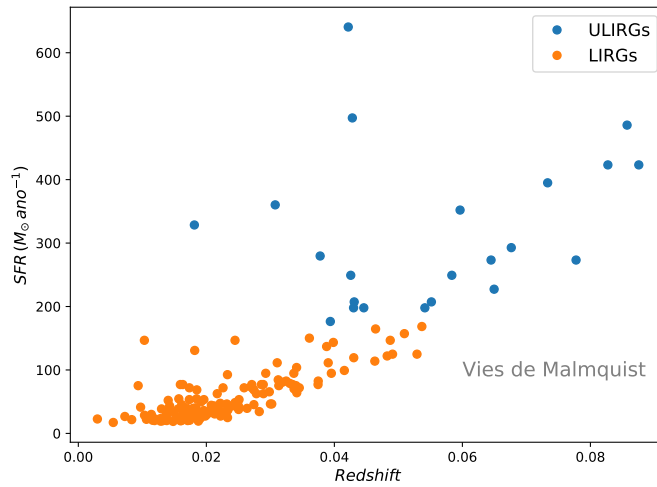


FIGURA 2.4. Taxa de formação estelar em função do redshift para as galáxias da amostra de acordo com Kennicutt (1998). Em laranja são mostradas as LIRGs e em azul, ULIRGs.

Capítulo 3

Metodologia

Neste capítulo explicamos a metodologia utilizada para o desenvolvimento desta pesquisa. Na Seção 3.2 mostramos o uso de uma ferramenta para a decomposição de espectros IRS/Spitzer, em termos de contínuos, bandas de PAHs e linhas atômicas/moleculares das galáxias de GOALS. Tratando apenas da componente espectral do contínuo, mostramos a aplicação de um programa que calcula a inclinação do contínuo de poeira nos espectros da amostra na Seção 3.3. Na Seção 3.4 expomos a categorização dos PAHs encontrados fazendo uso de uma base de dados teórica de PAHs.

3.1 Emissão do IV em galáxias – uma visão global

As missões espaciais pioneiras focadas no infravermelho, como IRAS e ISO, mostraram a importância do entendimento dos processos que ocorrem nesse domínio de frequências para o balanço energético das galáxias. Os primeiros resultados desse progresso científico foram vistos em trabalhos como Mathis (1990), onde é apontado que o IV-distante é parte significativa ($\sim 30\%$) da luminosidade total de uma galáxia como a Via-Láctea.

Atualmente, sabemos que a forma da distribuição espectral de energia de uma galáxia (em inglês, Spectral Energy Distribution, SED) é dominada por duas estruturas distinguíveis, como vemos na Figura 3.1: a região de menores comprimentos de onda na imagem, representando o campo de radiação estelar que emite desde o ultravioleta (UV) até o IV-próximo ($\lambda \lesssim 3 \mu\text{m}$); a outra, que compreende a região do IV-médio até

maiores comprimentos de onda ($\lambda \gtrsim 3 \mu\text{m}$), retrata o aquecimento de grãos e poeira pela radiação estelar, que re-emitem termicamente.

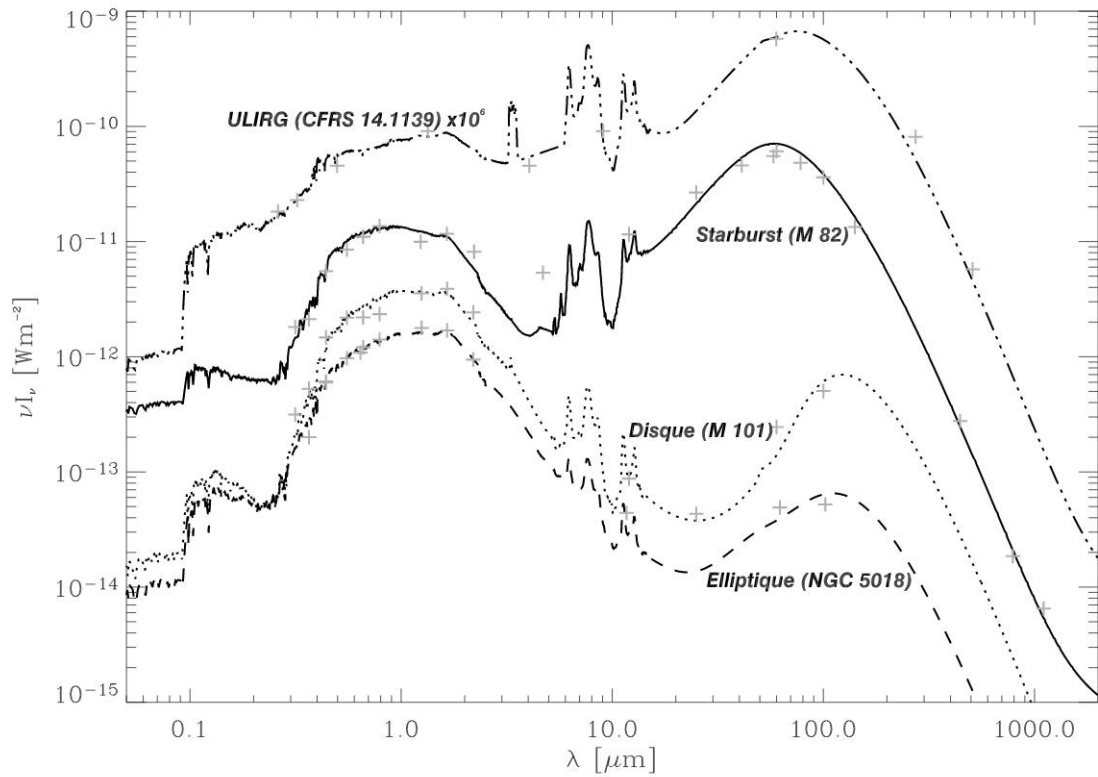


FIGURA 3.1. Exemplos de SEDs de galáxias do UV à região do milimétrico. Os objetos são: a galáxia elíptica NGC 5018, o disco da galáxia espiral M101, a galáxia *starburst* M82 e a ULIRG CFRS14.1139, cujo fluxo foi multiplicado por 1×10^6 para facilitar a comparação com os outros objetos. Tese de doutorado de Galliano (2004).

As SEDs contêm informações importantes sobre o conteúdo de estrelas, gás e poeira em galáxias. A radiação no UV, óptico e IV-próximo revelam vestígios sobre o histórico de formação estelar, enriquecimento químico e atenuação pela poeira, traçando a presença de estrelas de idade intermediária e mais velhas. As linhas de emissão produzidas pelo gás interestelar aquecido por estrelas mostram a atividade de formação estelar atual e as condições físicas do gás presente, como as linhas $H\alpha$, $H\beta$ e $Ly\alpha$ das séries de Balmer e Lyman, onde os fótons de UV conseguem excitar e ionizar os átomos de hidrogênio presentes no ambiente. Para comprimentos de onda maiores que $3\mu\text{m}$, o contínuo é dominado pelo aquecimento da poeira em diferentes componentes do meio interestelar (da Cunha et al., 2008).

As principais componentes que contribuem para o espectro de uma galáxia no IV-médio são: o contínuo de poeira térmico, a emissão de modos vibracionais dos Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos e linhas de emissão atômicas e/ou moleculares.

O contínuo em comprimentos de onda maiores ($\lambda \gtrsim 12\mu\text{m}$) resulta da emissão de grãos muito pequenos (tamanho $\sim \text{nm}$) encontrados ao redor de AGN obscurecidos ou em regiões de formação estelar – chamado de contínuo VSG (em inglês, Very Small Grains, VSG) ou contínuo da poeira morna ($T_{\text{poeira}} \lesssim 250\text{K}$). Em menores comprimentos de onda ($\lambda \lesssim 6\mu\text{m}$), o contínuo caracteriza a emissão da poeira aquecida a temperaturas mais altas ($T_{\text{poeira}} \gtrsim 500\text{K}$), representativas de áreas muito próximas à AGN ou às regiões nucleares de *starbursts* – conhecido como contínuo de poeira quente (e.g., Menéndez-Delmestre et al., 2009).

As bandas de emissão no IV-médio são dominadas por PAHs excitados principalmente por fótons na faixa do UV, produzidos por estrelas O e B. As bandas dessas moléculas são originadas nos modos vibracionais de ligação entre os átomos, como C–C e C–H, e são observadas principalmente em 6.2, 7.7, 8.6, 11.3 e 12.7 μm . No entanto, também há linhas de emissão geradas por recombinação de hidrogênio e de linhas estrutura fina originadas no gás ionizado de regiões HII presentes em galáxias. Muitas das bandas de PAHs são misturadas a essas linhas espectrais proibidas, como o [NeII] em 12.8 μm convoluído à banda de PAH em 12.7 μm (Smith et al., 2007). Algumas linhas requerem campos de radiação mais ionizantes, como [OIV] em 25.9 μm e [NeV] em 14.3 μm , característicos de discos de acreção de AGN (Genzel et al., 1998).

No IV-médio também observamos a presença da absorção por gelo de água centrada em $\sim 6\mu\text{m}$ (Spoon et al., 2004), que pode se sobrepor à banda de PAHs 6.2 μm , alterando o fluxo real da banda. Do mesmo modo, observamos a absorção por silicatos em 9.7 e 18 μm (e.g., Draine, 2003), características de regiões altamente obscurecidas, como AGN tipo 2 e *starbursts* obscurecidos (e.g., Imanishi et al., 2007).

3.2 Decomposição espectral com PAHFIT

Considerando as diferentes contribuições espectrais descritas na Seção 3.1, torna-se claro que, para uma análise detalhada de PAHs, é necessário isolar as diferentes fontes de emissão de IV (contínuos, linhas atômicas/moleculares, PAHs e bandas de absorção). Smith et al. (2007) desenvolveram a ferramenta PAHFIT¹, uma rotina escrita em IDL visando separar as diferentes componentes de um espectro no IV-médio.

¹<http://tir.astro.utoledo.edu/jdsmith/research/pahfit.php>

A ferramenta foi construída para a utilização em espectros IRS/Spitzer e usa um modelo simples que consiste em um pequeno número de componentes: 1) contínuo de poeira considerando diferentes valores fixos de temperatura, 2) contínuo estelar da radiação proveniente de uma estrela a uma dada temperatura, 3) linhas de emissão, 4) bandas de emissão de PAHs individuais e convoluídas e 5) extinção por grãos de silicatos. A combinação dessas componentes resulta numa densidade de fluxo modelada por PAHFIT, dada pela seguinte equação, onde os 3 termos representam a contribuição do contínuo estelar, de poeira e das linhas e bandas de emissão, respectivamente, todas sob o efeito de extinção:

$$I_\nu = \left[\tau_\star B_\nu(T_\star) + \sum_{m=1}^M \tau_m \frac{B_\nu(T_m)}{(\lambda/\lambda_0)^2} + \sum_{r=1}^R I_r(\nu) \right] \frac{(1 - e^{-\tau_\lambda})}{\tau_\lambda}, \quad (3.1)$$

onde B_ν é a função de corpo negro, T_\star é a temperatura do contínuo estelar, T_m são as temperaturas do contínuo de poeira térmico, $I_r(\nu)$ são as bandas e linhas de emissão presentes no espectro e τ_λ é a opacidade pela poeira.

O primeiro termo da Equação 3.1 é referente ao contínuo estelar, onde o programa admite que a contribuição estelar é aproximadamente um corpo negro a uma temperatura fixa (T_\star) de 5000K. Essa temperatura é característica de populações estelares mais velhas e domina a emissão entre 3–5 μ m.

No segundo termo da Equação 3.1, é representada a contribuição do contínuo de poeira, onde o programa ajusta até 8 temperaturas ($T_m = 35, 40, 50, 65, 90, 135, 200, 300$ K) para um modelo de corpo negro. Apesar de a maioria da poeira presente nas galáxias ser aquecida a baixas temperaturas (~ 15 –20K), elas contribuem mais fortemente para espectros no IV-distante, por isso não são consideradas nesta ferramenta. Contribuições de grãos mais quentes que 300K, que estariam presentes em regiões muito próximas a AGN, também não foram consideradas. PAHFIT é indicado para galáxias não-AGN ou com AGN mais fracos, ideal para nossas galáxias, como mostraremos nos Capítulos 4 e 5.

O terceiro termo da Equação 3.1 descreve o conjunto de linhas finas de emissão que estão no intervalo do IV-médio, incluindo linhas rotacionais de hidrogênio molecular e linhas de resfriamento de regiões de fotodissociação de espécies de baixa e alta ionização. As linhas espectrais em PAHFIT são representadas por perfis gaussianos, com larguras

definidas por medidas diretas de observações Smith et al. (2007). As linhas de emissão associadas a transições eletrônicas ajustadas aos espectros estão mostradas na Figura 3.2. Os modos rotacionais de H₂ utilizados no programa são mostrados na Tabela 3.1.

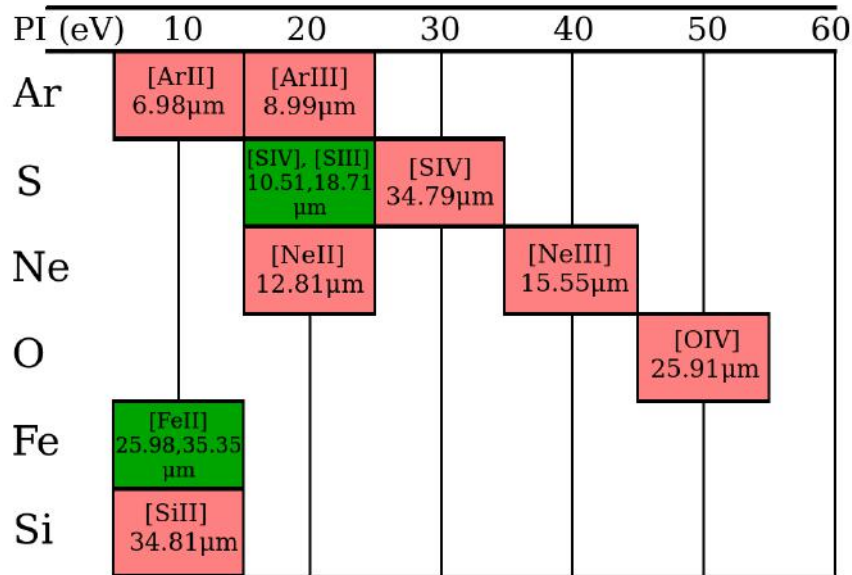


FIGURA 3.2. Esquema mostrando as linhas atômicas listadas no modelo do programa PAHFIT, seus comprimentos de onda e seus potenciais de ionização aproximados. Figura baseada em Martín-Hernández et al. (2002).

TABELA 3.1. Linhas de emissão rotacionais de H₂ utilizadas em PAHFIT. Coluna (1): nome da linha. Coluna (2): comprimento de onda central. Coluna (3): largura a meia altura utilizada no modelo.

Linha (1)	Comprimento de onda (μm) (2)	FWHM (μm) (3)
H ₂ S(7)	5.511	0.053
H ₂ S(6)	6.109	0.053
H ₂ S(5)	6.909	0.053
H ₂ S(4)	8.026	0.100
H ₂ S(3)	9.665	0.100
H ₂ S(2)	12.278	0.100
H ₂ S(1)	17.035	0.140
H ₂ S(0)	28.221	0.340

A ferramenta PAHFIT isola as bandas de PAHs, que apresentam seus comprimentos de onda centrais fixados no programa (Tabela 3.2), por efeitos de simplicidade. O perfil de Drude, como o lorentziano, possui mais fluxo nas asas que o gaussiano – isso reproduz as características de emissão dos PAHs e é verossímil às observações de bandas na região de 5–12μm dos espectros (Fitzpatrick & Massa, 1986). O perfil de Drude é utilizado para reproduzir um oscilador clássico amortecido, e é mostrado na Equação 3.2, onde

λ_r é o comprimento de onda central, γ_r é a largura a meia altura fracional (razão entre a largura a meia altura e o comprimento de onda central da banda) e b_r é a intensidade central da banda. A Tabela 3.2 mostra as bandas utilizadas no modelo da ferramenta PAHFIT.

$$I_\nu^{(r)} = \frac{b_r \gamma_r^2}{(\lambda/\lambda_r - \lambda_r/\lambda)^2 + \gamma_r^2} \quad (3.2)$$

TABELA 3.2. Bandas de PAHs utilizadas em PAHFIT. Coluna (1): comprimento de onda central. Coluna (2): largura a meia altura fracional para as bandas. Coluna (3): largura a meia altura das bandas.

λ_r (μm)	γ_r	FWHM (μm)
(1)	(2)	(3)
5.27	0.034	0.179
5.70	0.035	0.200
6.22	0.030	0.187
6.69	0.070	0.468
7.42	0.126	0.935
7.60	0.044	0.334
7.85	0.053	0.416
8.33	0.050	0.417
8.61	0.039	0.336
10.68	0.020	0.214
11.23	0.012	0.135
11.33	0.032	0.363
11.99	0.045	0.540
12.62	0.042	0.530
12.69	0.013	0.165
13.48	0.040	0.539
14.04	0.016	0.225
14.19	0.025	0.355
15.90	0.020	0.318
16.45	0.014	0.230
17.04	0.065	1.108
17.375	0.012	0.209
17.87	0.016	0.286
18.92	0.019	0.359
33.10	0.050	1.655

A atenuação, causada por extinção de grãos de poeira, é representada pelo termo multiplicador da Equação 3.1. A lei de extinção adotada é similar a utilizada para a poeira presente na Via-Láctea, que consiste em uma lei de potência com bandas de absorção por silicatos em 9.7 e 18 μm . A lei é mostrada na Equação 3.3, onde $\tau_{9.7}$ é a extinção total em 9.7 μm e $P_{Si}(\lambda)$ é uma função normalizada representativa do perfil de silicatos, onde $P_{Si}(9.7\mu\text{m}) = 1$.

$$\tau(\lambda) = \tau_{9.7} \left[0.9 P_{Si}(\lambda) + 0.1 (9.7/\lambda)^{1.7} \right] \quad (3.3)$$

Além disso, a ferramenta PAHFIT adotou a curva de extinção de Chiar & Tielens (2006) com os valores de $\tau_{9.7}$ mas com maior extinção em maiores comprimentos de onda. É importante notar que não foi agregado ao modelo nenhuma emissão de silicatos. A curva final de extinção é mostrada na Figura 3.3.

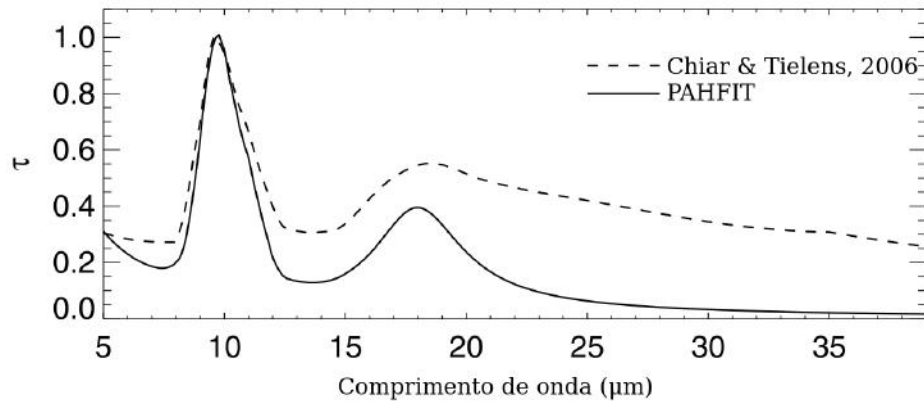


FIGURA 3.3. Curva de extinção adotada em PAHFIT, juntamente com a curva de Chiar & Tielens (2006). Figura adaptada de Smith et al. (2007).

PAHFIT decompõe espectros IRS/Spitzer de baixa resolução em contínuo de poeira, bandas de PAHs, linhas atômicas e moleculares, contínuo estelar e absorção de silicatos, retornando os parâmetros de ajuste para cada uma dessas componentes.

O resultado da execução de PAHFIT é: 1) uma lista com as temperaturas de grãos que, através de um modelo de corpo negro, reproduziriam o contínuo de poeira do espectro; 2) parâmetros das bandas de PAHs, assim como das linhas atômicas/moleculares e rotacionais presentes no espectro, incluindo comprimento de onda (fixo) e intensidade central, largura a meia altura fracional (fixa), fluxo integrado e largura equivalente, bem como também para as bandas de PAHs mostradas na Tabela 3.2; 3) profundidade óptica para a extinção da poeira em $9.7\mu\text{m}$.

Carla Martinez Canelo (IAG-USP) disponibilizou gentilmente o programa *fit.-pahfit.pro* em IDL, que ajusta o modelo de PAHFIT. O programa retorna uma tabela com os fluxos de cada componente ajustada pelo modelo (Canelo, 2006). Ele é mostrado no Apêndice A.

3.3 Caracterização do contínuo por lei de potência – LINFIT

Segundo Alonso-Herrero et al. (2006), o contínuo térmico da poeira no IV-médio proveniente de formação estelar ou atividade de AGN, pode ser descrito por uma lei de potência $S_\nu \sim \nu^{-\alpha}$, onde o índice α indica a inclinação do espectro num plano $\log(S_\nu)$ versus $\log(\nu^{-\alpha})$. Contínuos planos com valores menores de índice de potência ($\alpha \lesssim 0.5$) são associados a AGN não obscurecidos, onde a emissão da poeira quente é diretamente observada. Por outro lado, contínuos mais inclinados ($\alpha \gtrsim 0.5$) com um evidente aumento em fluxo para comprimentos de ondas maiores são associados a atividade *starburst* mas também podem ser encontrados em AGN obscurecidos por poeira (e.g., Alonso-Herrero et al., 2006; Menéndez-Delmestre et al., 2009).

Após a determinação do índice de potência α do espectro, é possível definir a inclinação do contínuo e investigar a fonte de energia gerando a emissão no IV-médio. No intuito de caracterizar a contribuição no IV-médio de AGN na nossa amostra, desenvolvemos um código em Python para calcular o índice de potência α . O programa, chamado LINFIT (B), se baseia na minimização do χ^2 entre o contínuo de espectros IRS/Spitzer e o modelo de contínuo por lei de potência, baseado na metodologia apresentada por Menéndez-Delmestre et al. (2009).

A presença das bandas de emissão dos PAHs afetam fortemente o ajuste linear dos espectros no plano $\log(S_\nu)$ versus $\log(\nu)$. Considerando que o interesse é caracterizar a inclinação do contínuo, criamos o programa para minimizar o impacto das bandas de PAHs com a seguinte abordagem: após obter o primeiro ajuste linear para o espectro, calculamos a raiz quadrática média (rms) no espectro residual (dados - modelo) e identificamos as regiões em que os dados diferem do modelo por mais de uma vez o valor de rms. Essas regiões (que correspondem aos maiores desvios do contínuo, tipicamente às bandas de PAHs ou bandas de absorção por silicatos) são marcadas para serem ignoradas num segundo ajuste linear. O processo é repetido mais duas vezes. Desta forma, as regiões do espectro consideradas para o ajuste linear final são aquelas mais representativas do contínuo de poeira presente no IV-médio que o espectro original da galáxia. Mostramos na Figura 3.4 um exemplo do espectro da galáxia CGCG 448-020, durante e após a execução de LINFIT. O código `linfit.py` está descrito no Apêndice B.

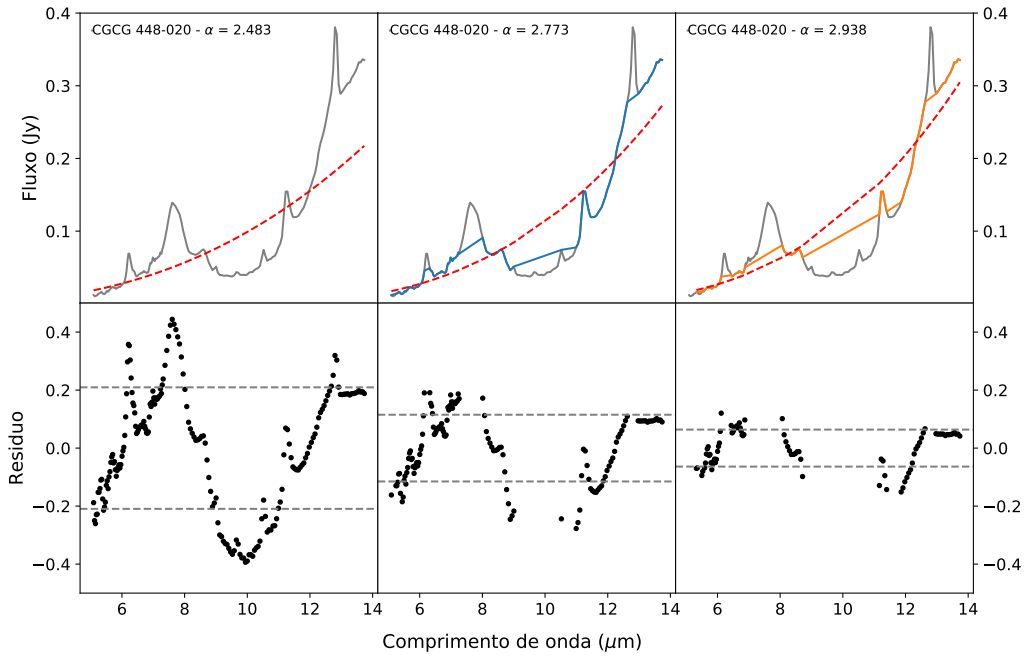


FIGURA 3.4. Aplicação do programa LINFIT no espectro da galáxia CGCG 448-020. Mostramos nos painéis superiores o espectro original da galáxia em cinza; após o espectro da galáxia após a execução do programa uma vez (mostrado no painel central em azul) e duas vezes (mostrado no painel direito em laranja); a linha tracejada vermelha representa a curva com a inclinação do contínuo dada pelo programa; nos painéis inferiores são mostrados os resíduos entre o espectro e o ajuste linear em cada etapa do programa; as linhas tracejadas cinza representam o desvio padrão do resíduo.

3.4 NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database

Após a decomposição espectral realizada com PAHFIT, procedemos com a análise das bandas dos PAHs presentes em LIRGs e ULIRGs através da base de dados NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database – aqui referida como PAHdb. Sua primeira versão foi apresentada por Bauschlicher et al. (2010) e consistia apenas em uma base de dados de transições teóricas de PAHs, cuja finalidade era combinar os espectros das moléculas lá presentes. Boersma et al. (2014) anunciaram a segunda versão da base de dados, onde foi desenvolvida a ferramenta de comparação entre espectros astronômicos de emissão no IV com espectros resultantes da combinação de diferentes PAHs. A terceira e mais recente versão, apresentada por Bauschlicher et al. (2018) apresentou um significativo aumento na quantidade de moléculas contidas em PAHdb.

A versão atual de PAHdb inclui um banco de dados composto por 3130 moléculas candidatas a PAHs astronômicos. Estas moléculas variam em tamanho, contendo de 6 a 384 carbonos, distribuídos em estruturas de anéis aromáticos (com ligações simples e duplas alternadas) e em ramificações alifáticas (cadeias de carbono abertas). As moléculas

incluídas em PAHdb podem ser puras (compostas apenas de carbono e hidrogênio), pertencer à classe de fulerenos (compostos apenas por carbono), ou terem heteroátomos em sua estrutura, como nitrogênio, oxigênio, magnésio e ferro. Além disso, esses PAHs podem ser selecionados quanto a carga: PAHdb possui moléculas neutras e carregadas negativa e positivamente, podendo esta última ter múltiplas cargas. A Figura 3.5 mostra as distribuições de carga, composição e tamanho para todas as espécies presentes na versão 3.00 de PAHdb.

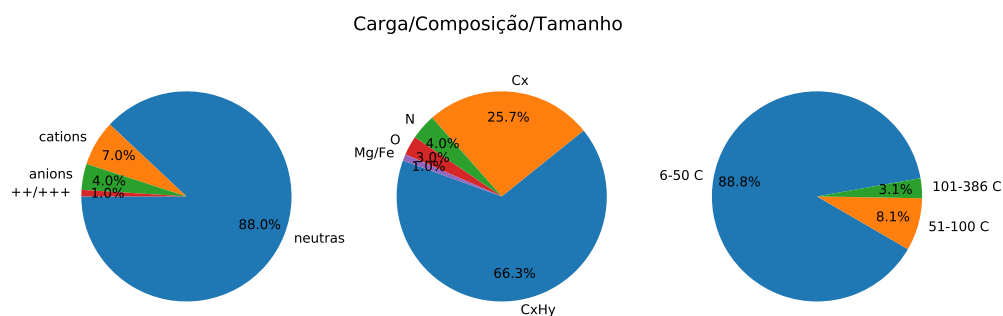


FIGURA 3.5. Gráfico de pizza mostrando a distribuição de carga (esquerda), composição (meio) e tamanho (direita) para todas as espécies na versão 3.00 da base de dados. PAHdb é majoritariamente composto de moléculas neutras, “puras” e pequenas.

PAHdb fornece uma série de ferramentas que permite ao usuário a inspeção dos espectros teóricos assim como a sua conversão em espectros sintéticos de emissão. A lista completa de informações transicionais que compõem a base de dados, sob a forma de um arquivo XML, pode ser diretamente acessada pelo usuário. O portal², que hospeda a base de dados, também oferece uma série de rotinas em IDL que simplificam tarefas para a utilização do PAHdb de forma offline.

O portal permite ao usuário procurar e selecionar dados através de consultas baseadas em características de tamanho, carga e composição das moléculas. A saída da *query* é a lista de moléculas que obedece às condições estabelecidas na entrada. Além disso, para cada molécula há informações adicionais, como estruturas 3D da espécie, referências na literatura, comparação com dados experimentais (quando disponíveis), lista de transições, espectro interativo e propriedades moleculares.

No entanto, a ferramenta mais utilizada nesse projeto foi a de comparação entre espectros astronômicos e espectros de PAHs na base de dados teórica. Os espectros astronômicos correspondem àqueles resultantes da aplicação da ferramenta PAHFIT – já subtraídos de contínuo, linhas atômicas/ moleculares e rotacionais de H₂ – na forma

²<https://www.astrochemistry.org/pahdb/>

de um arquivo de texto com duas colunas: comprimento de onda e densidade de fluxo espectral.

Os espectros sintéticos gerados por PAHdb são fornecidos no formato de tabelas, com frequência (cm^{-1}) e seções de choque integradas (km/mol) para cada transição, equivalentes a espectros de absorção. Também é possível converter os espectros de emissão sintéticos a depender de condições locais, como temperatura de excitação e energia média dos fótons UV. Além disso, a essas transições precisam ser atribuídos perfil de linha (lorentziano ou gaussiano), onde a largura a meia altura é um parâmetro livre para ajuste. Para mais informações, consultar o apêndice de Bauschlicher et al. (2010).

Optamos por convoluir as bandas em Lorentzianas com largura de 15cm^{-1} , por mostrar melhores ajustes em testes iniciais. Além disso, adotamos um pequeno desvio de 15cm^{-1} em número de onda para corrigir o efeito intrínseco de anarmonicidade em processos de emissão.

Após a etapa de estabelecer os parâmetros de linha, executamos o programa e, para cada galáxia, PAHdb nos forneceu uma lista de moléculas (e seus espectros) que seriam responsáveis pelo espectro de emissão que fora colocado como parâmetro de entrada. PAHdb seleciona as moléculas que estariam promovendo a emissão da galáxia no IV-médio através do método de *non-negative least squares*, possibilitando a decomposição desses PAHs em subclasses que revelam a contribuição relativa de suas populações em relação a tamanho, carga, composição, entre outras características (Boersma et al., 2014). A saída dessa análise é uma lista de moléculas com seus respectivos espectros em IV-médio, seguindo o mesmo intervalo de comprimentos de onda do espectro da (U)LIRG inserido inicialmente. Todo o procedimento foi feito através do código `pahdb.pro`, mostrado no Apêndice C.

A saída de PAHdb fornece espectros que devem ser convertidos de frequência para comprimento de onda. Mostramos na Figura `refpahdbex` o espectro da galáxia IRASF 22491-1808 referente apenas as bandas de PAHs, que serve como entrada para PAHdb, e o espectro sintético gerado pela base de dados.

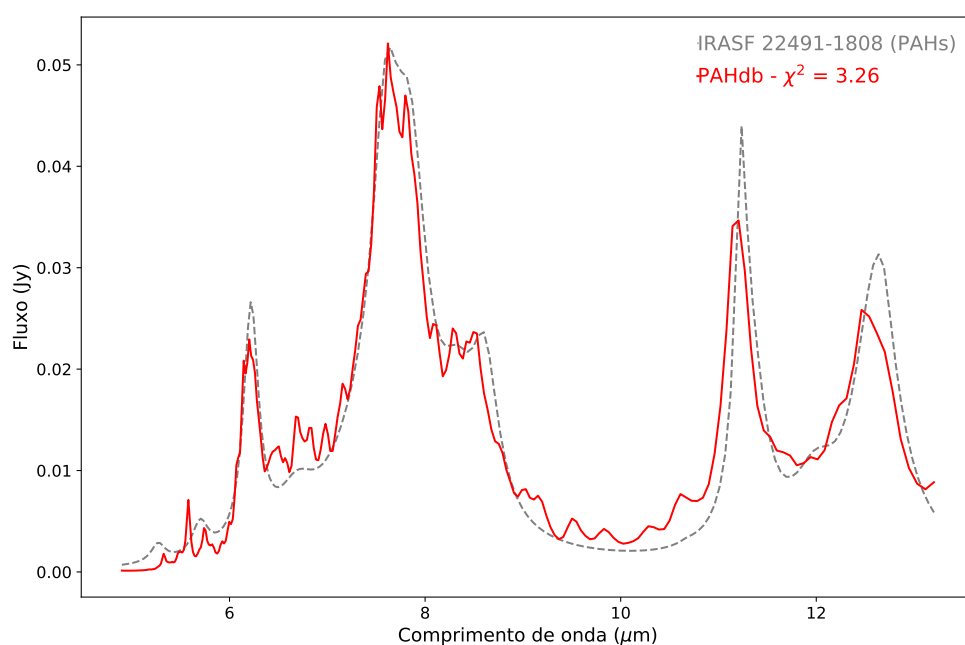


FIGURA 3.6. Execução de PAHdb para a galáxia IRASF 22491-1808. A linha cinza mostra o espectro da galáxia que representa apenas as bandas de PAHs, resultado de saída da ferramenta PAHFIT, e a linha vermelha tracejada mostra o espectro sintético provido por PAHdb. Esse espectro é resultado da soma dos fluxos de emissão no IV-médio de todos os PAHs que estariam presentes nessa galáxia, de acordo com PAHdb.

Capítulo 4

Resultados

Neste capítulo apresentamos os principais resultados de nosso trabalho. Eles foram gerados a partir da implementação das diferentes ferramentas apresentadas no Capítulo 3, visando uma exploração da diversidade nas características dos PAHs em função das propriedades globais das galáxias luminosas no infravermelho da amostra GOALS, descrita no Capítulo 2.

4.1 Caracterização do contínuo para identificação de AGN e starbursts

Trabalhos do fim da década de 90, como Genzel et al. (1998), Mirabel et al. (1999) e Laurent et al. (2000) mostraram que espectros de galáxias no IV-médio podem ser usados para caracterizar a emissão de *starbursts* e AGN. As componentes espectrais do IV, como linhas de estrutura-fina e contínuo de poeira, servem para sondar o campo de radiação da galáxia, definindo a fonte de emissão infravermelha.

Como mencionado na Seção 3.1, os principais contribuintes à emissão de poeira em galáxias podem ser estudados na região espectral do IV. Os PAHs tipicamente apresentam fortes bandas de emissão entre 3–13 μm , em particular, em galáxias associadas a forte atividade de formação estelar. O contínuo devido aos VSGs se torna proeminente em $\lambda > 12\mu\text{m}$ em regiões com intensa formação de estrelas jovens. Na presença de um AGN, o toro de poeira quente (150–1700K) pode contribuir fortemente ao contínuo no IV-próximo e IV-médio (e.g., Genzel & Cesarsky, 2000).

A presença de um núcleo ativo pode gerar dois cenários: 1) o de destruição dos PAHs pela forte radiação do AGN (Voit, 1992) e 2) o de diluição das bandas de PAHs, por conta de um aumento significativo no contínuo local produzido pelo AGN que leva a uma diminuição significativa das larguras equivalentes destas. Trabalhos mais recentes mostram suporte ao cenário de diluição: Desai et al. (2007) mostraram como as bandas de PAHs em AGN podem ser tão fortes (em termos de luminosidade) como em galáxias dominadas por *starbursts*, sugerindo que AGNs não necessariamente destroem PAHs, mas que adicionam um contínuo subjacente maior que diminui a proeminência aparente das bandas sobrepostas.

Podemos inferir a fonte de emissão dominante no IV para cada galáxia da nossa amostra através de PAHFIT, que permite estimar a temperatura dos grãos responsáveis pelo contínuo. A distribuição de temperaturas, baseada na decomposição dos espectros nos modos “*channel*”0 (5.13 – 14.29 μm) e “*channel*”2 (13.9 – 39.9 μm) do instrumento IRS/Spitzer (Figura 4.1) reproduz o que esperamos: a emissão do contínuo nos comprimentos de onda menores é dominada pela componente de poeira quente, enquanto a região mais vermelha do espectro trata de uma emissão de poeira comparavelmente mais fria. Esse comportamento é descrito pela Lei de Wien, que caracteriza o máximo da função de Planck que descreve a emissão de um corpo negro, relacionando o comprimento de onda de máxima emissão com a temperatura correspondente do corpo negro:

$$T(K) \times \lambda_{central}(\mu\text{m}) \sim 3000. \quad (4.1)$$

Desta forma, vemos que os espectros produzidos com o modo ch0 mostram o contínuo característico dos grãos mais quentes presentes em toros de AGN, enquanto no modo ch2 seria mais provável a detecção do contínuo VSG.

Em galáxias normais, há a presença de bandas dos PAHs no IV-médio e o contínuo de poeira é inclinado em $\lambda \geq 10 \mu\text{m}$. Em galáxias com maior contribuição de AGN, esse contínuo tende a ser mais plano, pois há aquecimento dos grãos presentes no núcleo ativo e eles produzem um contínuo significativo no IV-próximo e na região de menores comprimentos de onda do IV-médio. Diversos trabalhos abordaram o fato que o fluxo do contínuo de poeira no IV pode ser modelado como uma lei de potência (e.g., Alonso-Herrero et al., 2006; mais detalhes nas Seções 3.3 e 5.1.2). O contínuo térmico segue a lei $S_\nu \sim \nu^{-\alpha}$, onde o índice de potência α indica a inclinação do espectro. Quando

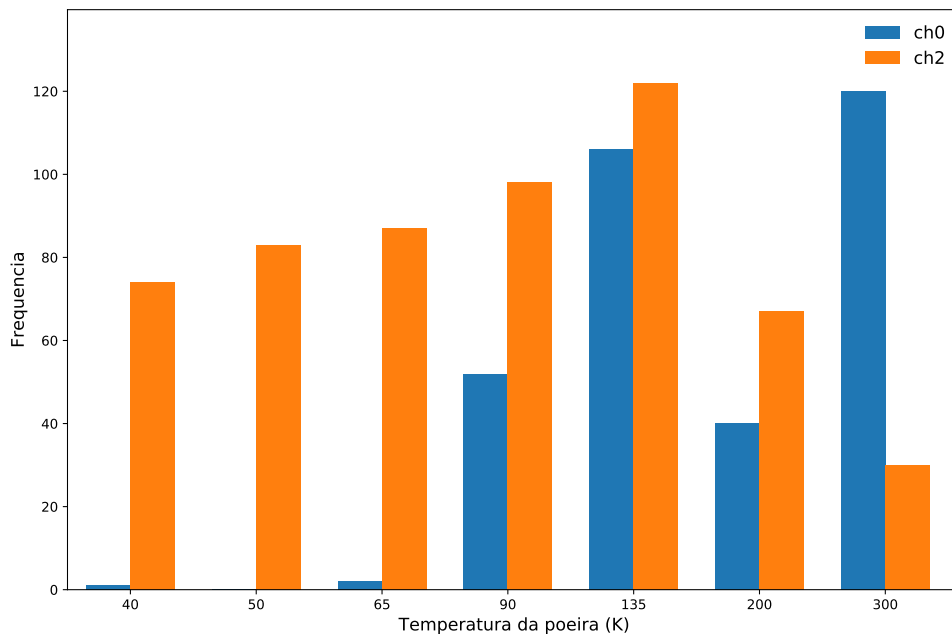


FIGURA 4.1. Temperatura estimada dos grãos presentes na amostra através de PAHFIT. Em azul, temos o modo espectral ch0 que cobre os menores comprimentos de onda e apresenta uma temperatura média dos grãos maior que ch2, que cobre os maiores comprimentos de onda.

observada em um plano de $\log(S_\nu) - \log(\nu)$, essa relação mostra que o contínuo pode ser estabelecido como um ajuste linear.

Em objetos extremos (caso de galáxias cuja luminosidade no IV é predominantemente devida à presença de um AGN ou formação estelar), a inclinação do contínuo é uma boa ferramenta de diagnóstico para a fonte dominante de emissão no IV-médio. Em um cenário mais típico, onde as galáxias possuem ambas as fontes, a tendência é que quanto maior a atividade de formação estelar no objeto, maiores os valores da inclinação do contínuo (isto é, maiores valores de α), a temperatura toma valores intermediários ($T \sim 50-100\text{K}$) e maior a proeminência dos PAHs no espectro do IV-médio.

Calculamos a inclinação do contínuo em espectros de baixa resolução no IV-médio. Para isso, criamos um programa de ajuste linear (LINFIT, apresentado na Seção 3.3) que ajusta o contínuo em 3 execuções para cada galáxia da amostra a fim de ajustar com maior confiança o contínuo, minimizando o impacto das bandas de PAHs e linhas atômicas/moleculares. A Figura 4.2 apresenta exemplos da execução do programa LINFIT, mostrando os espectros das galáxias com a maior e menor inclinações resultantes a partir da execução do nosso programa de ajuste de contínuo. Mostramos na Figura 4.3 mostra o ajuste do contínuo para o espectro de três galáxias com diferentes

contribuições¹ de um AGN no IV-médio segundo Díaz-Santos et al. (2017) (mais detalhes na Seção 5.3). Podemos ver que as principais diferenças entre os espectros são: a profundidade da banda de absorção de silicatos em $\lambda \sim 10\mu\text{m}$ e a proeminência das bandas dos PAHs. Uma fonte pontual fortemente obscurecida levaria a uma banda de absorção mais profunda, enquanto PAHs mais proeminentes são associados à galáxias com menor contribuição de AGN.

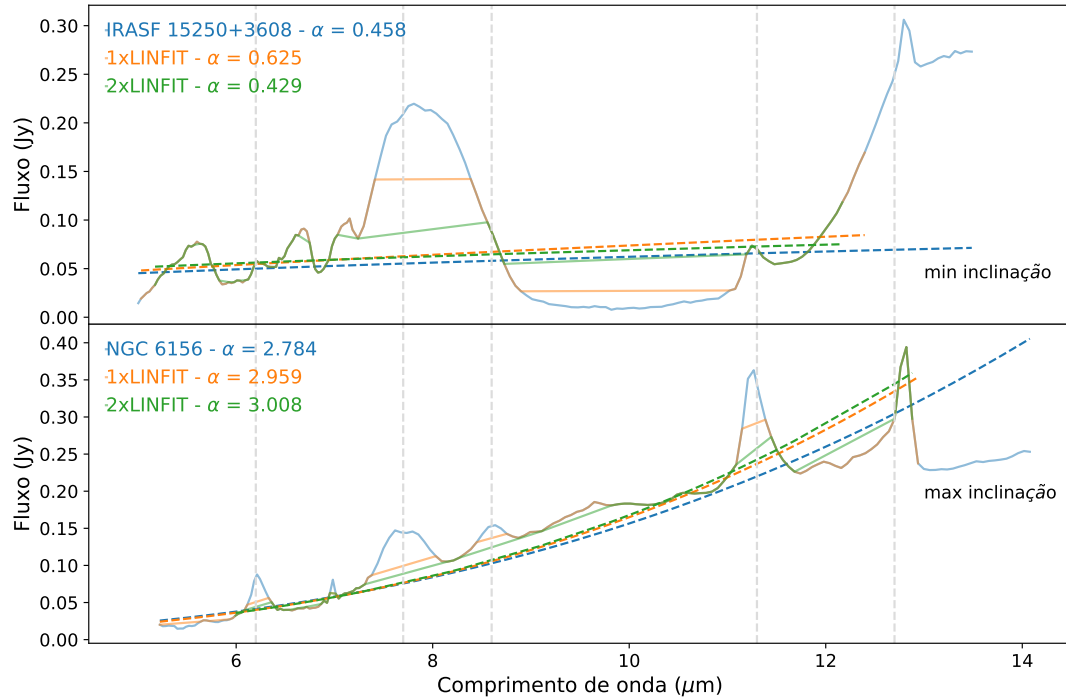


FIGURA 4.2. Execução do programa LINFIT para as galáxias IRASF 15250+3608 (painel superior) e NGC 6156 (painel inferior). As linhas azuis cheias e tracejadas representam o espectro original da galáxia e o ajuste linear do contínuo após a primeira execução do programa, respectivamente. Uma vez identificadas as regiões do espectro com os maiores resíduos, o segundo espectro é gerado (linha cheia laranja) para um segundo ajuste (linha tracejada laranja). As linhas rosa correspondem ao ajuste final do contínuo após a minimização da influência das bandas e emissão e absorção no espectro. As linhas verticais tracejadas correspondem aos comprimentos de onda das principais bandas de PAHs.

Na Figura 4.4, vemos a distribuição dos valores de α para todas as galáxias deste trabalho resultantes da nossa implementação de LINFIT. Podemos apreciar que 96% da amostra apresenta valores de $\alpha \sim 1-3$ (Tabela 4.1). Considerando que o limite de $\alpha = 0.5$ é usado como referência para distinguir galáxias dominadas por AGN (Alonso-Herrero et al., 2006; Donley et al., 2007; Sani et al., 2008; detalhes na Seção 5.1.2), a distribuição de valores de α na amostra sugere que a maioria apresenta contínuos no IV-médio íngremes e associados a sistemas dominados por formação estelar.

¹Disponível em <http://goals.ipac.caltech.edu/>.

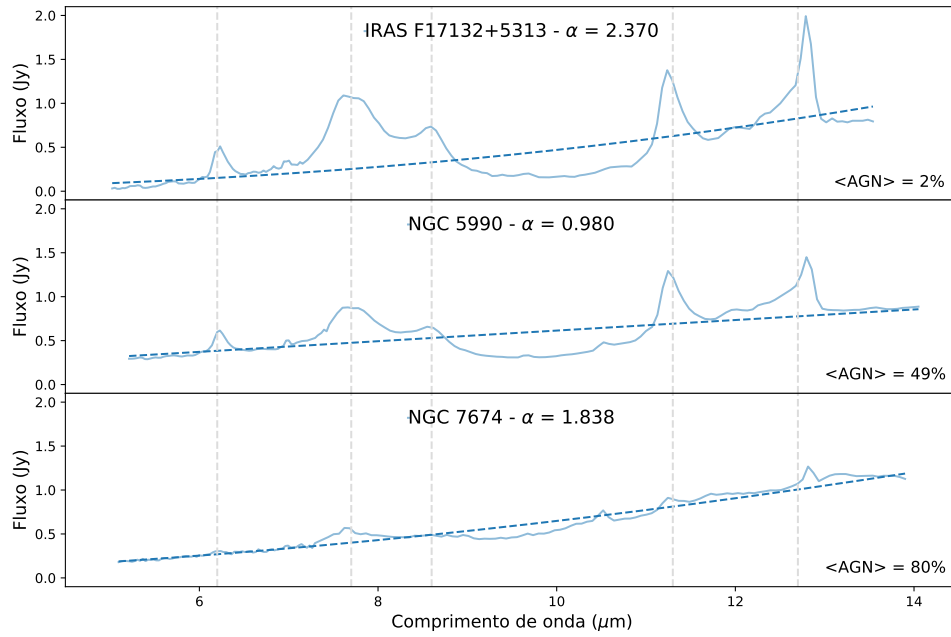


FIGURA 4.3. Espectro das galáxias IRAS F17132+5313 (painel superior), NGC 5990 (painel central) e NGC 7674 (painel inferior), normalizados em $\lambda = 12.5\mu\text{m}$, onde as linhas tracejadas azuis e os valores de α mostrados em cada painel representam o ajuste do contínuo. As linhas tracejadas verticais correspondem aos comprimentos de onda das principais bandas de PAHs. São mostradas as porcentagem de AGN dos objetos segundo diagnósticos no infravermelho médio (Díaz-Santos et al., 2017).

TABELA 4.1. Distribuição de valores da inclinação do contínuo. A inclinação do contínuo dos espectros da maior parte das galáxias se concentra em valores intermediários e altos ($\alpha > 1$), o que sugere que a maior parte da amostra é dominada por formação estelar ou por uma mistura de AGN e *starbursts*.

Valor de inclinação	Porcentagem da amostra
$\text{inclinação} \leq 0.5$	1/153
$0.5 < \text{inclinação} \leq 1.0$	6/153
$1.0 < \text{inclinação} \leq 1.5$	54/153
$1.5 < \text{inclinação} \leq 2.0$	54/153
$2.0 < \text{inclinação} \leq 2.5$	33/153
$2.5 < \text{inclinação} \leq 3.0$	4/153
$3.0 < \text{inclinação} \leq 3.5$	1/153

Exploramos na Figura 4.5 a relação entre α que caracteriza a inclinação do contínuo com a fração que o AGN contribui para o IV-médio em nossa amostra, segundo Díaz-Santos et al. (2017). Mesmo com a ausência de valores mais baixos de α (falta de contínuos mais planos) para as galáxias com maior contribuição de AGN, vemos uma grande variação de inclinação para uma dada fração de AGN. Interpretamos esse resultado como uma indicação do alto obscurecimento por poeira da amostra, podendo resultar em contínuos mais íngremes (maiores α), mesmo na presença de uma contribuição significativa de um AGN; voltaremos a essa discussão na Seção 5.1.2.

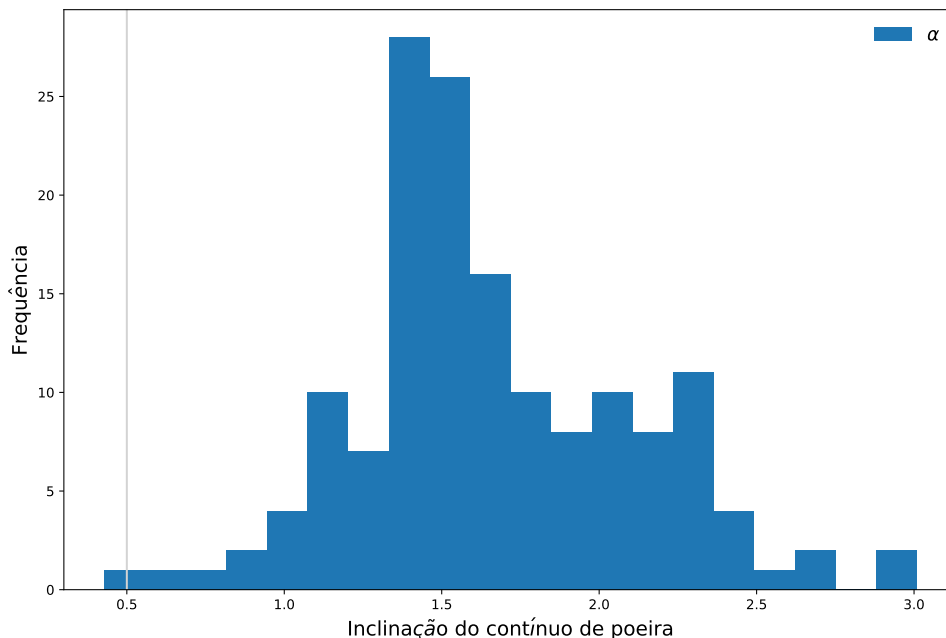


FIGURA 4.4. Distribuição de valores para a inclinação do contínuo de poeira por LINFIT para as galáxias da amostra. Em azul são mostradas as inclinações do espectro das galáxias, após a execução de LINFIT três vezes. A linha cinza representa o limite de $\alpha = 0.5$, dado por Menéndez-Delmestre et al. (2009), onde objetos com a inclinação menor que esse valor seriam galáxias ativas. É notável que a nossa amostra não possui AGN fortes, estando a mediana das inclinações por volta de 1.5 e a média em 1.7.

4.2 Decomposição das bandas de emissão dos PAHs

Os PAHs têm sido alvos de pesquisas na área de extragaláctica por sua importância no domínio do infravermelho. Já com o trabalho de Roche et al. (1991), baseado nos dados de IRAS, foi mostrado que as bandas de PAHs são menos proeminentes em AGNs. Para quantificar a proeminência das bandas de PAHs com respeito ao contínuo, estudos utilizam a largura equivalente das bandas de emissão dos PAHs: quanto maior a contribuição de um AGN, mais alto o contínuo no IV, diminuindo a largura equivalente da banda de emissão para um dado fluxo integrado.

As larguras equivalentes das bandas dos PAHs são dados de saída do programa PAHFIT (Seção 3.2). Mostramos na Figura 4.6 a relação entre as larguras equivalentes das diferentes bandas de PAHs com respeito à importância do AGN, segundo Díaz-Santos et al. (2017). Observamos que, como esperado, as galáxias com uma maior contribuição de AGN apresentam valores baixos de largura equivalente. Porém, a Figura 4.6 também aponta que o uso da largura equivalente como único diagnóstico para distinguir galáxias com contribuição de AGN e *starburst* é insuficiente – considerando que galáxias com baixa contribuição de um AGN no IV-médio podem apresentar larguras equivalentes

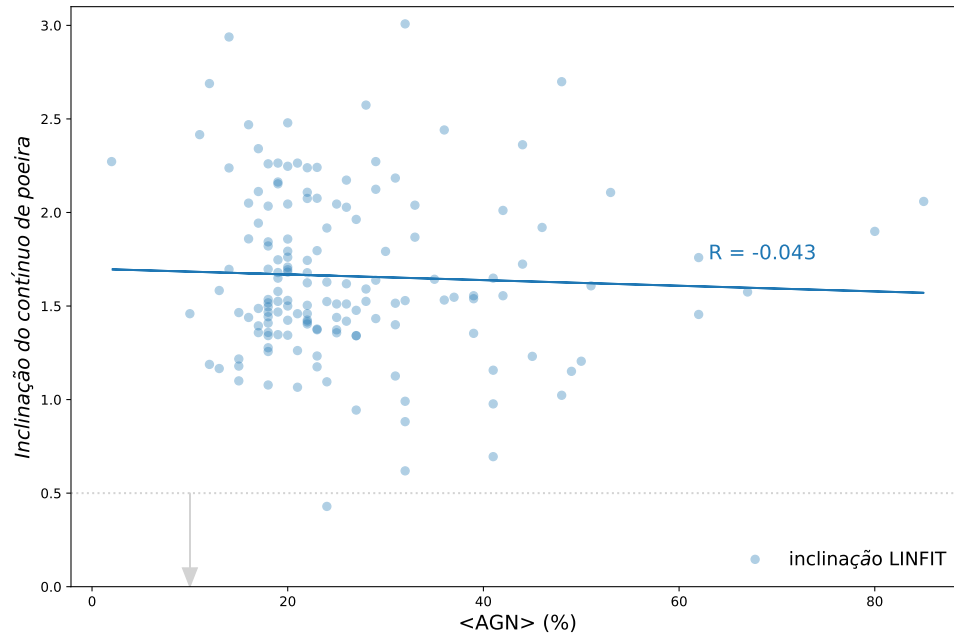


FIGURA 4.5. Inclinação do contínuo de poeira para a amostra em função da contribuição percentual do AGN à emissão no IV-médio, segundo Díaz-Santos et al. (2017). Em azul estão representados os valores de inclinação após a execução de LINFIT três vezes. O coeficiente de Pearson é mostrado para a relação entre $\langle \text{AGN} \rangle$ e α . A linha cinza pontilhada representa o limite de $\alpha = 0.5$, dado por Menéndez-Delmeire et al. (2009), e a seta indica a direção em que os valores caracterizam galáxias tipicamente dominadas por um AGN.

num amplo intervalo de valores, incluindo valores baixos, similares aos apresentados por galáxias com AGN mais dominantes. Esse comportamento pode ser atribuído ao fato que *starbursts* nucleares compactos são também capazes de causar a dissolução das bandas através do aquecimento de grãos de poeira a maiores temperaturas, aumentando a emissão do contínuo no IV-médio (e.g., Díaz-Santos et al., 2011).

As Figuras 4.7 e 4.8 mostram exemplos de algumas decomposições feitas por PAHFIT para galáxias individuais e para o espectro médio de nossa amostra. Construímos o espectro médio para ter uma noção global das características gerais de nossa amostra; criamos ele fazendo uma média dos espectros no referencial das galáxias individuais. Notamos nos espectros da Figura 4.7 uma diversidade na contribuição do contínuo de poeira, assim como nas linhas atômicas e moleculares. A galáxia ESO 339-G011, por exemplo, apresenta um contínuo de poeira mais pronunciado que IRASF 17132+5313, assim como linhas de alta ionização (e.g., [SIV] em $10.5\mu\text{m}$) – tipicamente associadas a uma maior contribuição de AGN (Inami et al., 2013) – mais fortes. As linhas de [ArII] em $6.98\mu\text{m}$ e [ArIII] em $8.99\mu\text{m}$ também são significativamente mais pronunciadas neste sistema, sugerindo condições de excitação diferentes às de IRASF 17132+5313 (Verma et al., 2003).

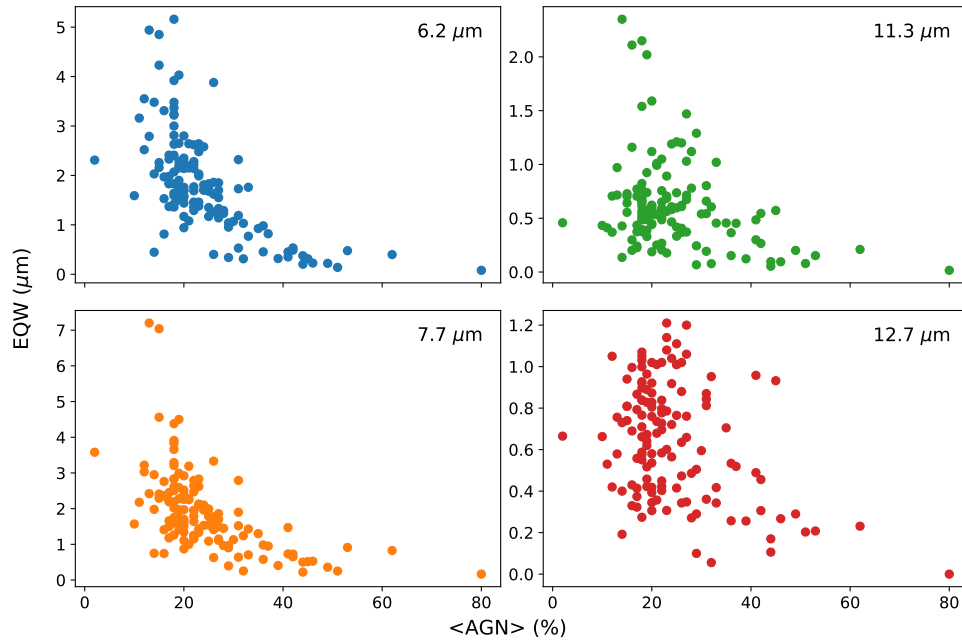


FIGURA 4.6. Larguras equivalentes das bandas de 6.2, 7.7, 11.3 e 12.7 μm em função da contribuição de AGN, dada por Díaz-Santos et al. (2017). Notamos que para baixas frações de AGN, as larguras equivalentes apresentam uma ampla distribuição de valores, enquanto para galáxias com uma forte contribuição de AGNs encontramos apenas valores baixos de largura equivalente.

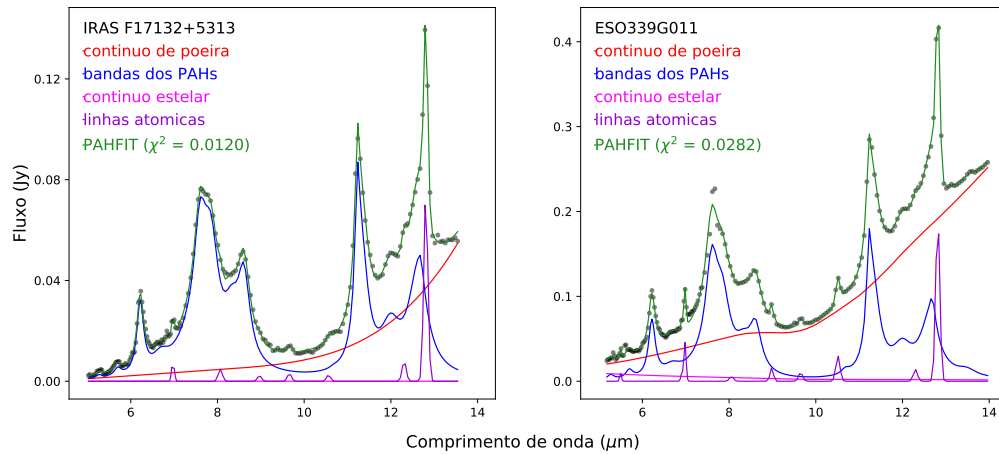


FIGURA 4.7. Decomposição espectral realizada por PAHFIT para as galáxias IRAS F17132+5313 e ESO 339-G011. Os pontos pretos representam o espectro original das galáxias. As linhas magenta, vermelha, azul, roxa e verde, simbolizam o contínuo estelar, contínuo de poeira, bandas de PAHs, linhas atômicas/moleculares e modelo de PAHFIT, respectivamente. O contínuo estelar é desprezível, enquanto o contínuo produzido pela poeira é parte significativa do espectro das duas galáxias. As assinaturas dos PAHs também estão presentes nos dois objetos.

Seguindo a metodologia descrita no Capítulo 3, executamos a ferramenta PAHdb para cada espectro resultante do programa PAHFIT (curva azul das Figuras 4.7 e 4.8). Na nossa análise, o ajuste dos espectros da amostra rendeu valores de qui-quadrado entre 1-260. Atribuímos os maiores valores a ajustes menos adequados das duas ultimas bandas, de 11.3 e 12.7 μm, e na região da absorção de silicatos, em 9.7 μm, como mostra a Figura 4.9. As linhas atômicas e moleculares, especialmente as que estão presentes em

maiores comprimentos de onda, como $[\text{NeII}]_{12.8}$ podem ser um dos fatores contribuintes para os piores ajustes. Voltaremos a este tópico na Seção 5.2.

PAHdb nos fornece uma lista de moléculas (e seus espectros de emissão correspondentes) que, combinadas, seriam responsáveis pelo espectro de emissão colocado como parâmetro de entrada. O número de moléculas que reproduz a emissão no IV-médio da amostra varia de 25-50 espécies por galáxia, uma quantidade pequena comparada ao conteúdo total da base de dados, que possui mais de 3000 moléculas. As características (carga, composição e tamanho) e a proporção destas são mostradas na Figura 4.10.

Executamos PAHdb para decompor as bandas de emissão de PAHs no espectro representativo da amostra. O resultado é mostrado na Figura 4.11. O ajuste é similar aos obtidos para cada galáxia da amostra, onde vemos a predominância de PAHs neutros e pequenos ($N_C \leq 50$).

Para quantificar a contribuição dos diferentes tipos de PAHs (e.g., PAHs pequenos, grandes, neutros, carregados), definimos janelas referentes às bandas principais nos espectros a fim de realizar uma integração numérica das contribuições individuais das moléculas que correspondem à classe em questão. Definimos as janelas utilizando a rotina `find_peaks_cwt` em Python para detectar os picos com as maiores intensidades em cada espectro de saída do PAHdb – esses picos correspondem às bandas de 6.2, 7.7,

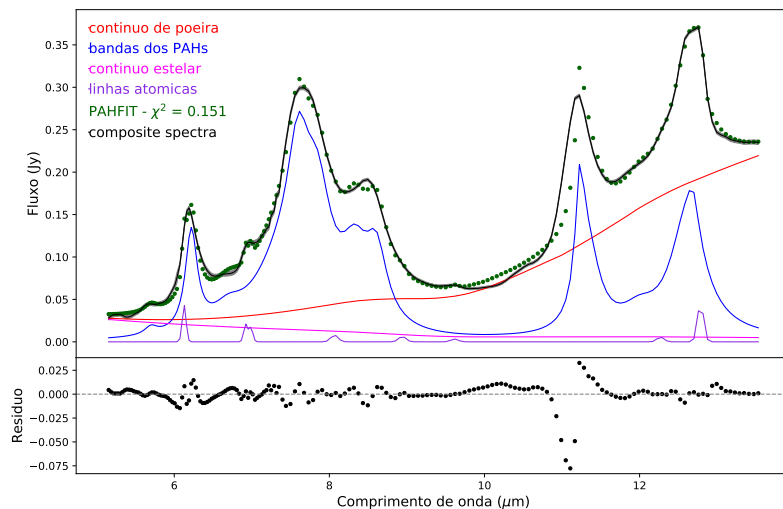


FIGURA 4.8. Decomposição espectral realizada por PAHFIT para o espectro médio de nossa amostra. Painel superior: a linha com a região cinza escuro representa a média dos espectros de nossa amostra e seu erro associado; as linhas magenta, vermelha, azul e roxa, simbolizam o contínuo estelar, contínuo de poeira, bandas de PAHs e linhas atômicas/moleculares; os pontos verdes mostram o modelo de PAHFIT. O valor de chi-quadrado é mostrado na figura. Painel inferior: resíduo entre o modelo de PAHFIT e o espectro médio de nossa amostra.

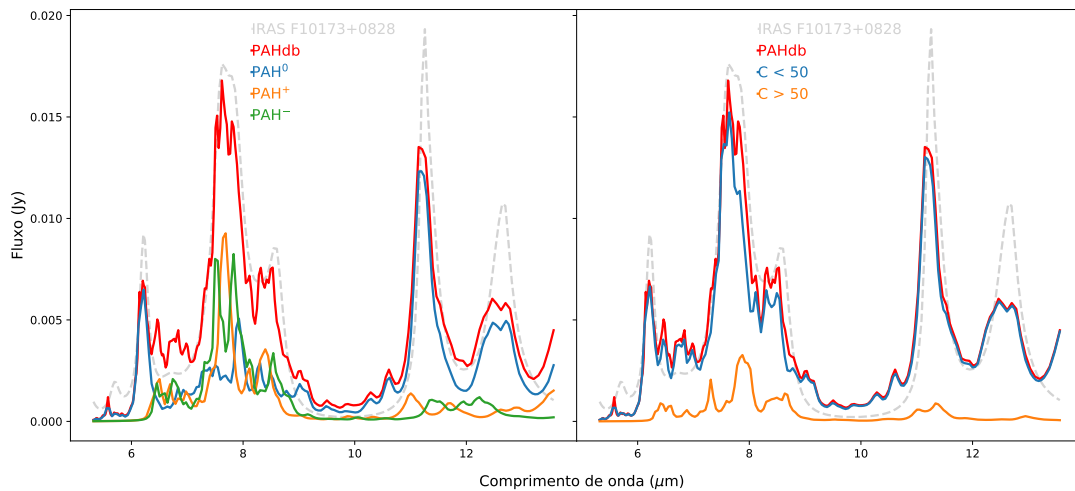


FIGURA 4.9. Ajuste de PAHdb em termos de carga e tamanho para a galáxia IRAS F10173+0828. A linha tracejada mostra o espectro de PAHs (saída de PAHFIT) para IRAS F10173+0828 e em vermelho, o espectro sintético de melhor ajuste produzido pelas moléculas da base de dados de PAHdb. No painel esquerdo são representadas as espécies neutras (azul), carregadas positivamente (laranja) e carregadas negativamente (verde). O painel direito apresenta a contribuição de moléculas pequenas que contêm menos de 50 carbonos (azul) e de moléculas grandes que contêm mais de 50 carbonos (laranja). Notamos que o espectro é visivelmente melhor ajustado nas bandas de menor comprimento de onda.

Carga/Composição/Tamanho

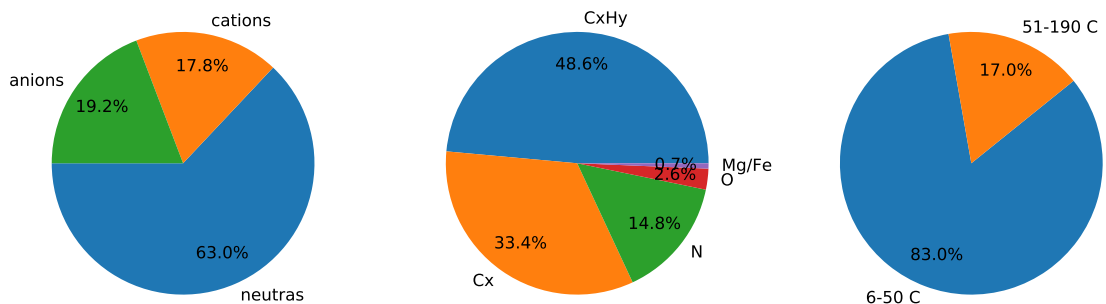


FIGURA 4.10. Gráfico de pizza mostrando a distribuição de carga (esquerda), composição (meio) e tamanho (direita) para as espécies encontradas pela base de dados de PAHdb para nossa amostra. Concluímos que as moléculas previstas por PAHdb para as LIRGs e ULIRGs deste trabalho são majoritariamente neutras, “puras” (isto é, compostas apenas por carbono e hidrogênio) e pequenas.

8.6, 11.3 e 12.7 μ m. De forma a ter janelas sistematicamente definidas para a amostra inteira, estabelecemos larguras médias para cada banda nos baseando em uma inspeção individual de uma subamostra de 10 galáxias: isso nos permitiu fixar as janelas para a amostra inteira. Optamos por uma integração direta do fluxo nestas janelas (em contraste aos ajustes com gaussianas e lorentzianas feitas na literatura; e.g., Menéndez-Delmestre et al., 2009) por conta da irregularidade em formato das bandas, uma vez que foram formadas pela soma de várias transições convoluídas em comprimentos de onda diferentes. Mostramos na Figura 4.12 o espectro resultante da contribuição de moléculas

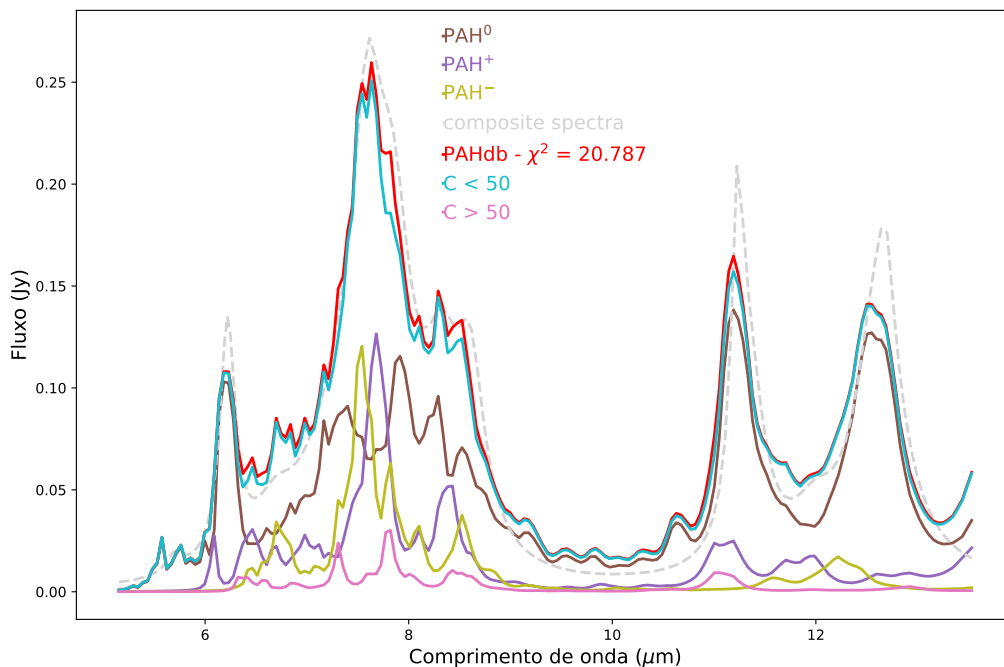


FIGURA 4.11. Ajuste de PAHdb em termos de carga e tamanho para o espectro médio da nossa amostra. A linha tracejada cinza representa o espectro médio da amostra e em vermelho, o espectro sintético produzido pelas moléculas da base de dados de PAHdb. São representadas as espécies neutras (marrom), carregadas positivamente (violeta) e carregadas negativamente (verde), moléculas pequenas que contêm menos de 50 carbonos (azul) e moléculas grandes que contêm mais de 50 carbonos (rosa).

individuais, gerado a partir da saída de PAHdb, para NGC 1797; as janelas que definem as bandas de PAHs seguindo nossa metodologia, aparecem identificadas. Em 13 galáxias esse método não foi bem-sucedido por conta da baixa intensidade da banda de $8.6\mu\text{m}$, por isso nossa amostra foi reduzida a 136 objetos.

Com as larguras das bandas e o comprimento de onda central estabelecidos, utilizamos a função `trapz`, também do Python, a fim de executar a integração pelo método do trapézio. Desta forma, integramos a contribuição dos diferentes tipos de PAHs. Isso nos permitiu calcular a contribuição relativa de cada uma das seguintes categorias de moléculas para o fluxo total contido nas bandas de PAHs: neutros, carregados (ânions e cátions), pequenos (segundo a convenção de Boersma et al., 2014 e Bauschlicher et al., 2018; mais detalhes na Seção 5.2) e grandes. A Figura 4.13 apresenta os resultados desta análise em termos da contribuição do tipo de PAH relativo ao fluxo total de todas as bandas e as Figuras 4.14 e 4.15 mostram o resultado para cada banda individual.

Na Figura 4.13 vemos a predominância das moléculas neutras e pequenas nas galáxias da nossa amostra. A média de contribuição de PAHs neutros, carregados, pequenos e grandes em todas as bandas é de 66,3%, 33,7%, 84,3% e 15,7%, respectivamente.

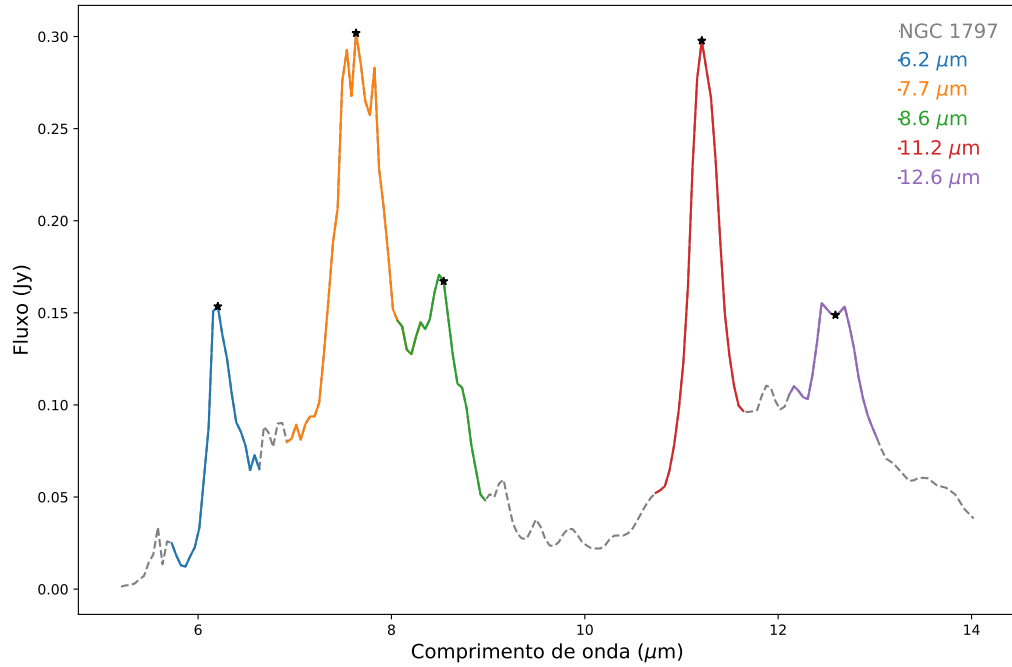


FIGURA 4.12. Espectro de melhor ajuste por PAHdb para NGC 1797, onde as regiões das bandas de PAHs são identificadas para a integração de fluxo. Cada linha colorida representa uma banda diferente e as estrelas pretas mostram o local do pico detectado pelo programa `find_peaks_cwt` (detalhes no texto). As curvas azul, laranja, verde, vermelha e lilás mostram as bandas em 6.2, 7.7, 8.6, 11.3 e 12.7 μm , respectivamente.

A análise por bandas individuais também nos mostra tendências astrofísicamente interessantes: as bandas podem servir como modo de caracterização do tamanho e da carga da população de PAHs que povoam o meio interestelar das galáxias estudadas. Isso é demonstrado nas Figuras 4.15 e 4.14. Enquanto a proporção de PAHs pequenos para PAHs grandes das bandas de 6.2, 7.7 e 12.7 μm corresponde a aproximadamente 90:10 (com uma clara predominância de PAHs pequenos), a banda de 11.3 μm apresenta uma proporção mais misturada e próxima de 60:40. Para as cargas, ocorre um fenômeno similar: a proporção de PAHs neutros para carregados é tipicamente de 80:20 (mostrando dominância de PAHs neutros) nas bandas de 6.2, 11.3 e 12.7 μm , enquanto a banda de 7.7 μm apresenta uma mistura maior nas contribuições de PAHs neutros e carregados, com uma proporção de 45:55. Essa proporção inclusive aponta que, na banda de 7.7 μm , a contribuição dos PAHs carregados é maior que a de PAHs neutros. Contextualizamos nossos resultados no Capítulo 5.

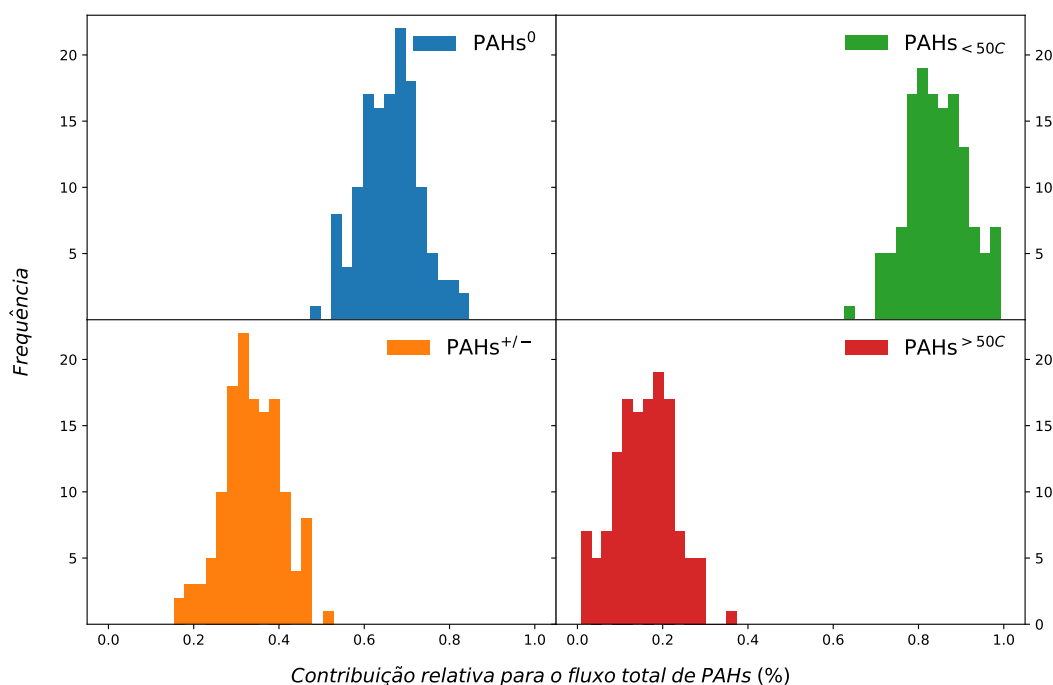


FIGURA 4.13. Contribuição relativa para o fluxo total nas bandas de PAHs por parte de moléculas de um tipo específico em termos de carga e tamanho. Os painéis da esquerda mostram a contribuição de PAHs neutros (azul) e carregados (laranja); os painéis da direita mostram a contribuição de PAHs pequenos (verde) e PAHs grandes (vermelho).

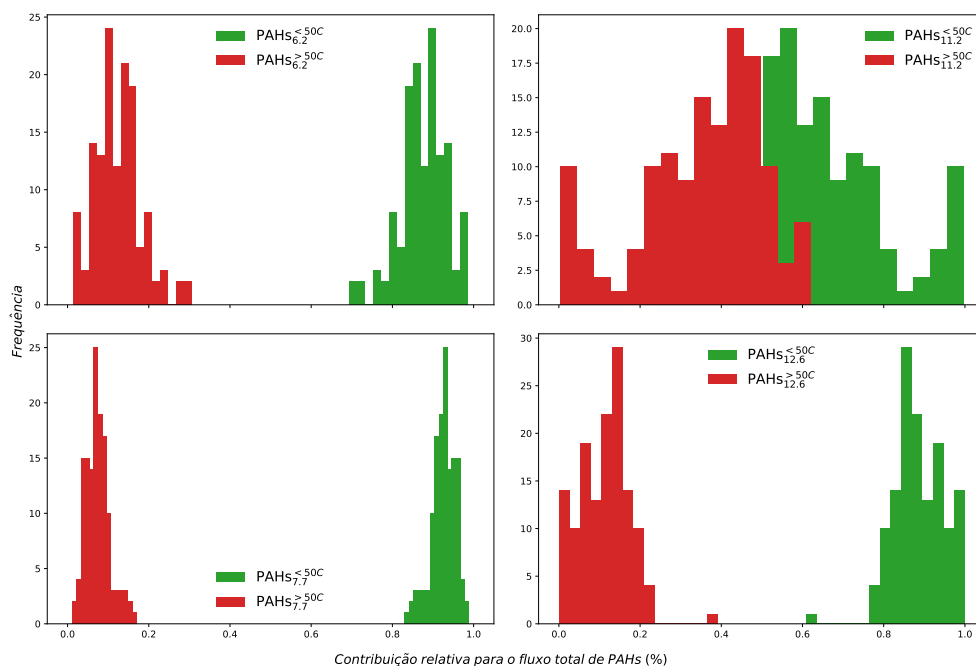


FIGURA 4.14. Contribuição relativa por parte de moléculas neutras (azul) e carregadas (laranja) para o fluxo nas bandas individuais de PAHs: 6.2 μm (painel inferior esquerdo), 7.7 μm (painel inferior esquerdo), 11.3 μm (painel superior direito) e 12.7 μm (painel inferior direito). Notamos que, para as bandas de 6.2, 11.3 e 12.7 μm, as moléculas neutras contribuem mais significativamente. No caso da banda de emissão de 7.7 μm, vemos uma inversão no comportamento das moléculas carregadas, considerando também que a diferença nas contribuições relativas é menos marcada (detalhes no texto).

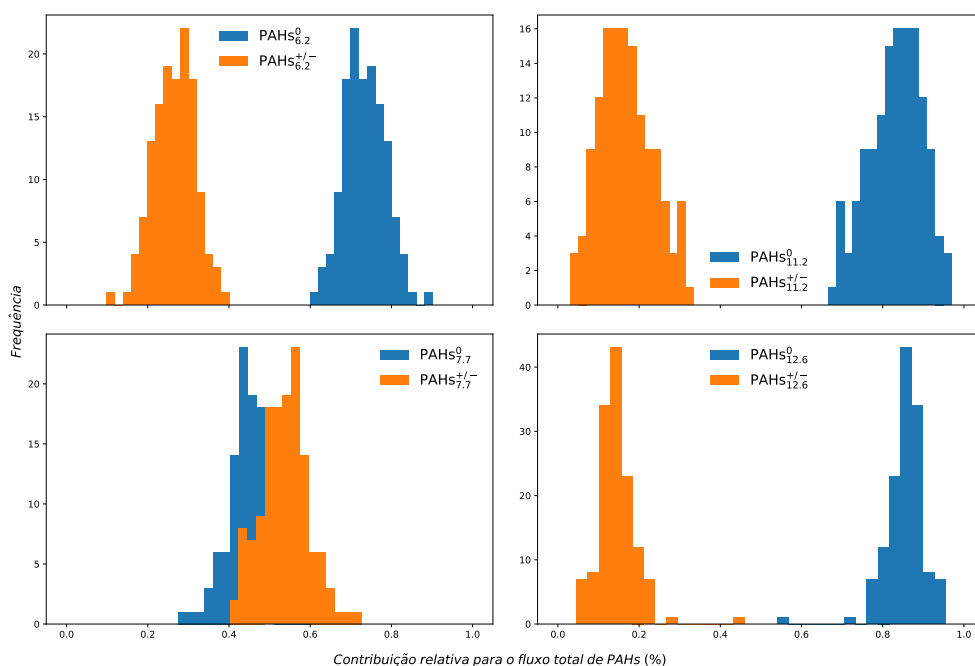


FIGURA 4.15. Contribuição relativa por parte de moléculas pequenas (verde) e grandes (vermelho) para o fluxo nas bandas individuais de PAHs: 6.2 μm (painel inferior esquerdo), 7.7 μm (painel inferior esquerdo), 11.3 μm (painel superior direito) e 12.7 μm (painel inferior direito). Notamos que, para as bandas de 6.2, 7.7 e 12.7 μm, as moléculas pequenas contribuem mais significativamente. No caso da banda de emissão de 11.3 μm, vemos que a diferença nas contribuições relativas é menos marcada (detalhes no texto).

Capítulo 5

Discussão

5.1 Diversidade espectral das (U)LIRGs

As galáxias da nossa amostra apresentam uma considerável variedade espectral. Destacamos duas características principais de interesse: 1) a profundidade da absorção ou emissão de silicatos, situada em $\sim 9.7\mu\text{m}$; 2) a inclinação do contínuo de poeira. Discutiremos esses tópicos nas subseções seguintes.

5.1.1 Absorção de silicatos – uma grande variedade em obscurecimento pela poeira

Uma das características mais marcantes nos espectros no IV-médio de LIRGs e ULIRGs é a absorção por silicatos em $9.7\mu\text{m}$, devida aos movimentos de estiramento da ligação Si–O e dobramento das ligações O–Si–O (e.g., Draine, 2003; Galliano, 2017). A partir desta banda de absorção podemos medir a profundidade óptica $\tau_{9.7}$, associada à absorção por silicatos e, desta forma, quantificar o obscurecimento pela poeira. Frequentemente nos referimos ao efeito da poeira como extinção, que ocasiona uma diminuição da quantidade de luz recebida. Essa atenuação também é chamada de avermelhamento (A_v), devido à tendência de extinção ser maior nos comprimentos de onda mais azuis que nos vermelhos.

A profundidade óptica τ associada a absorção por silicatos em $9.7\mu\text{m}$ foi derivada como parâmetro livre pelo programa PAHFIT, como relatado na Seção 3.2, e mostrou

valores no intervalo de $0 \leq \tau_{9.7} \leq 13.4$. As Figuras 4.2 e 4.3 mostram a diversidade na proeminência da banda de absorção por silicatos presente na amostra GOALS. Mostramos na Figura 5.1 o espectro das galáxias com menor e maior valor de profundidade óptica na absorção de silicatos, assim como o espectro médio da amostra, com $\tau_{9.7} = 1.15$.

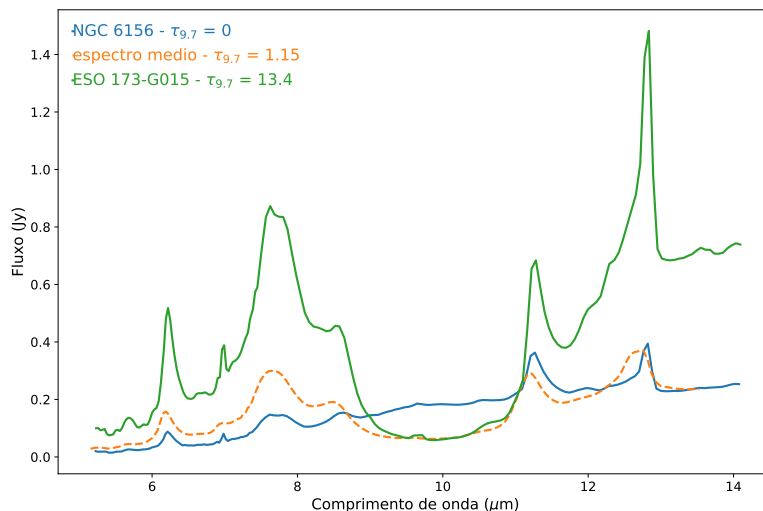


FIGURA 5.1. Espectro da galáxia composite da nossa amostra e das galáxias com menor e maior valor de $\tau_{9.7}$. NGC 6156 e ESO 173-G015 apresentam $\tau_{9.7} = 0$ e 13.4, respectivamente, enquanto a galáxia cujo espectro representa a média da amostra, possui um valor de profundidade óptica igual a 1.15.

Draine (2003) aponta que o centro galáctico possui valores de $\tau_{9.7} \sim 3.6$, gerando um avermelhamento de até 34 mag. Piqueras López et al. (2013) apontaram que LIRGs e ULIRGs de sua amostra apresentaram $A_v \sim 20-30$, sugerindo valores de $\tau_{9.7}$ de 2.2–3.3, quando comparamos com o cenário do centro da nossa Galáxia. Imanishi et al. (2007) utilizaram as profundidades ópticas em 9.7 e $18\mu\text{m}$ para analisar a geometria da fonte de energia de ULIRGs locais e constataram que, os objetos que apresentam $\tau_{9.7} \gg 1.7$, hospedam AGN compactos imersos em grandes quantidades de poeira.

Armus et al. (2007) selecionaram 10 ULIRGs do catálogo IRAS *Bright Galaxy Sample* e também analisaram a profundidade óptica na absorção de silicatos dessas galáxias, segundo a lei de Chiar & Tielens (2006). Os valores apresentaram média e mediana de 1.99 e 1.6, com desvio padrão de 1.24. A média dos valores de profundidade óptica e desvio padrão encontrados para a nossa amostra foram de 2.34 ± 3.04 , e mediana de 1.12, valores similares aos de Armus et al. (2007) dentro de 1σ .

Mostramos a distribuição dos valores de profundidade óptica para a nossa amostra na Figura 5.2 em relação aos valores de Stierwalt et al. (2014). Nossos valores parecem

mais espalhados e mais altos que os de Stierwalt et al. (2014). Atribuímos isso ao fato de que diferentes ferramentas de decomposição espectral foram utilizadas.

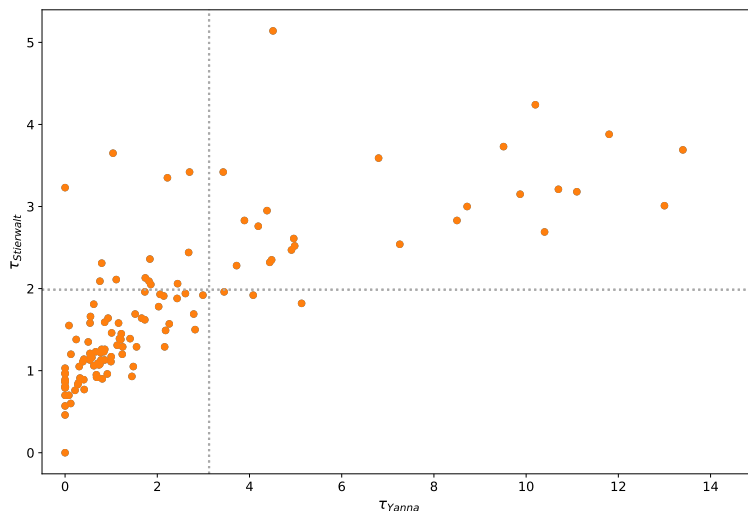


FIGURA 5.2. Comparação entre as profundidades ópticas da nossa amostra e de Stierwalt et al. (2014). A média dos valores de τ está representada pelas linhas pontilhadas. A nossa análise apresenta valores mais altos que a de Stierwalt et al. (2014), onde $\tau_{9.7} = (1.98 \pm 1.28)$.

5.1.2 Inclinação do contínuo de poeira

O contínuo no IV-médio é resultado principalmente da emissão térmica por grãos de poeira aquecidos a altas temperaturas ($T \sim 200\text{-}600$; mais detalhes na Seção 4.1). Os grãos de poeira estão imersos em um ambiente abundante em fótons que pode ser dominado por duas diferentes fontes: regiões de formação estelar ou um AGN. A emissão de AGN pode ser descrita por uma lei de potência (e.g., Alonso-Herrero et al., 2006), onde α quantifica a inclinação do contínuo de poeira ($S_\nu \sim \nu^{-\alpha}$). As galáxias dominadas por emissão de AGN mostram SEDs com lei de potência, apresentando uma variedade de inclinações (com $\alpha = 0.5\text{-}3$; Sanders et al., 1988). Os AGN mais luminosos apresentam inclinações tipicamente de $\alpha \sim 0.5$ no IV-médio (Sani et al., 2008). Sanders et al. (1988) e estudos mais recentes (e.g., Alonso-Herrero et al., 2006), mostram que LIRGs e ULIRGs possuem espectros no IV-médio que também obedecem a uma lei de potência, indicando assim a presença de um AGN. Dessa forma, o intervalo espectral do IV representa uma ferramenta para identificar AGN, mesmo os obscurecidos (Castelló-Mor et al., 2013).

Trabalhos como Alonso-Herrero et al. (2006), Donley et al. (2007) e Sani et al. (2008) apresentam o valor de $\alpha \leq 0.5$ como o limite superior para AGN. No entanto, esse valor é apenas uma referência popularmente usada. Se o AGN for muito obscurecido, a

poeira mais quente ($T \sim 600\text{K}$) seria limitada à poeira imediatamente vizinha ao AGN. A poeira mais distante do AGN pode estar imersa em um ambiente de formação estelar, contribuindo mais significativamente na região do contínuo associada a temperaturas mais mornas ($T \sim 200\text{K}$). Isso faz com que o contínuo seja mais íngreme, fornecendo maiores valores para o índice espectral α (Menéndez-Delmestre et al., 2009).

Como mostramos na Tabela 4.1, a maior parte da nossa amostra (96%) apresenta um contínuo de poeira mais íngreme do que os valores esperados para AGN (e.g., Alonso-Herrero et al., 2006). Isso sugere que a amostra é dominada por fontes com pouca presença de AGN ou, potencialmente, onde os núcleos ativos presentes estão fortemente obscurecidos. Isso nos demonstra um possível viés de redshift, visto que a amostra de GOALS é local.

5.2 Prevalência de PAHs pequenos, puros e neutros na emissão do IV-médio em (U)LIRGs

Segundo os resultados das Figuras 4.10 e 4.13 na Seção 4.2, podemos afirmar que os PAHs que representam a emissão no IV-médio das galáxias da nossa amostra são, em sua maioria, pequenos, puros (isto é, moléculas formadas apenas por C e H) e neutros. Abordaremos esse tópico nas subseções seguintes, pautando nossos resultados em modelos teóricos e dados de experimentos realizados em laboratório com grãos de poeira, incluindo PAHs e aglomerados de silicatos.

Neste trabalho usamos a convenção de que PAHs pequenos possuem $N_C \leq 50$ e PAHs grandes têm $N_C > 50$, baseados em Boersma et al. (2014) e Bauschlicher et al. (2018). Segundo Draine & Li (2001) – que desenvolveram um modelo teórico de emissão de PAHs, baseados na emissão no IV de uma população de grãos de poeira aquecidos por fótons – os PAHs pequenos emitem fortemente nas bandas de 6.2 e $7.7\mu\text{m}$, enquanto os PAHs maiores radiam em maiores comprimentos de onda. Essa conjuntura concorda com os resultados do nosso trabalho: a Figura 4.14 mostra que as bandas de 6.2 e $7.7\mu\text{m}$ são dominadas pela contribuição de PAHs pequenos, com uma contribuição de 5–20% de PAHs grandes. A banda de $11.3\mu\text{m}$ apresenta um comportamento levemente diferente, onde a contribuição de PAHs de grande e pequeno tamanhos se mistura fortemente, apontando maiores a participação de PAHs maiores na emissão que domina a banda.

Nossos resultados – baseados no ajuste de espectros reais de galáxias – refletem as predições dos modelos de emissão de Draine & Li (2001). A única forte divergência destas predições é na banda de $12.7\mu\text{m}$, onde nossos resultados diferem da expectativa de uma contribuição maior de PAHs com maior número de carbonos. No entanto, atribuímos isso ao fato de que a linha de $[\text{NeII}]_{12.8}$ (tipicamente associada à regiões de *starbursts*; Laurent et al., 2000) é abundante na nossa amostra e fortemente convoluída à banda de $12.7\mu\text{m}$ – isso impacta diretamente na decomposição espectral realizada por PAHFIT. A dificuldade em ajustar adequadamente a banda de $12.7\mu\text{m}$ pode adicionar incertezas aos resultados que associamos a esta banda.

Para explicar a abundância de PAHs menores, consideramos primeiramente a complexidade adicional requerida para os processos de formação de PAHs maiores: PAHs maiores podem ser construídos a partir das moléculas menores (e.g., Cherchneff, 2011; Tielens, 2013) que, a princípio, favorece a abundância de PAHs menores. Porém, estudos apontam que, uma vez formados os PAHs maiores, eles são estáveis em relação à radiação (e.g., Cataldo et al., 2009). Em particular, quando expostos a um campo de radiação, os PAHs maiores apresentam vias múltiplas de ionização (e.g., Sales et al., 2010; Monfredini et al., 2018), sugerindo que eles serão multiplamente ionizados antes de serem destruídos.

Além disso, consideramos também que a população de PAHs maiores possa ser diminuída na presença de um AGN por conta da exposição ao forte campo de radiação do núcleo ativo. Porém, Monfredini et al. (2018) desenvolveram um estudo experimental, analisando a interação entre raios-X e PAHs com 10-16 carbonos. Os autores perceberam que essas moléculas não apresentam variações significativas em seus tempos de meia-vida, mesmo quando submetidas à radiação compatível a de um AGN (275, 310 e 2500eV). Trabalhos como esse sugerem que a presença de um AGN não altera a distribuição de tamanhos de PAHs. Nossos resultados também concordam com esse resultado, como mostrado na Figura 5.3, onde não parece haver tendências de aumento ou diminuição de PAHs pequenos/grandes conforme a fração de AGN na galáxia. No entanto, Sales et al. (2010) mostrou que AGNs tem moléculas com maior número de carbonos que em galáxias *starbursts*, o que pode estar relacionado à nossa amostra, que consiste em núcleos ativos mais fracos.

Os PAHs puros compõem $\sim 50\%$ das moléculas associadas às bandas de PAHs

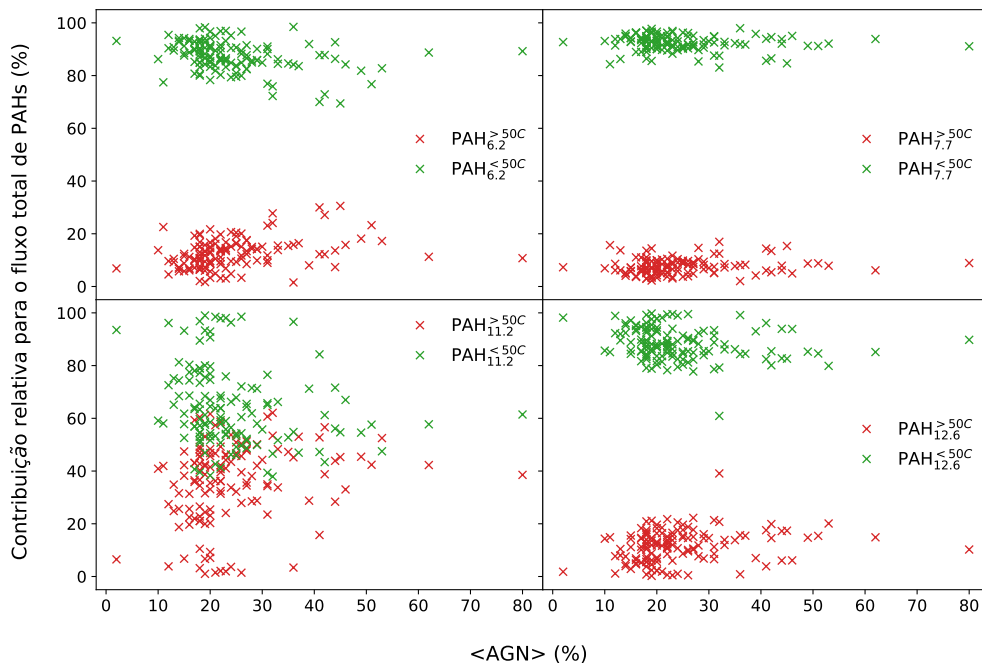


FIGURA 5.3. Contribuição relativa dos PAHs grandes e pequenos em relação ao fluxo total de PAHs da nossa amostra, em função da fração de AGN da galáxia (obtida por Díaz-Santos et al., 2017) para cada uma das bandas do espectro. A banda de $6.2\mu\text{m}$ é mostrada no painel superior esquerdo, $7.7\mu\text{m}$ no painel superior direito, $11.3\mu\text{m}$ no painel inferior esquerdo e $12.7\mu\text{m}$ no painel inferior direito.

na nossa amostra de galáxias, enquanto os PAHs compostos apenas por ligações C–C (fulerenos) contribuem com pouco mais de 30%. Essa dominância dos PAHs puros não é surpreendente, considerando que as bandas em 8.6 , 11.3 e $12.7\mu\text{m}$ de PAHs são associadas majoritariamente às transições vibracionais das ligações C–H (Figura 1.3). Apesar de estudos anteriores sugerirem que os fulerenos apresentam uma porção significativa dos PAHs presentes no espaço (e.g., Berné & Tielens, 2012), trabalhos mais recentes apontam que apenas $\sim 10^{-5}$ da porcentagem de carbono do meio interestelar difuso se encontra em fulerenos, enquanto 10% está presente em PAHs puros (Tielens, 2013).

Uma contribuição mais baixa (~ 15 – 20%) vem dos PAHs onde um ou mais átomos de carbono nos anéis aromáticos podem ser substituídos por outro elemento. Em particular, o caso de uma substituição por nitrogênio – que na nossa amostra representa o heteroátomo mais comum – tem se tornado bastante relevante no estudo de galáxias, com trabalhos recentes que apontam uma contribuição significativa dos conhecidos PAHNs (em inglês, *Polycyclic Aromatic Nitrogen Heterocycles*) à banda de $6.2\mu\text{m}$ (Canelo et al., 2018), baseado no impacto que estes têm na posição do comprimento de onda central da banda. Porém, estudos apontam que, de forma geral, os PAHs com nitrogênio são menos abundantes que os PAHs puros (Tielens, 2008), contribuindo com menos de 1–2%

da abundância cósmica de nitrogênio (e.g., Hudgins et al., 2005; Boersma et al., 2014). Assim, tanto os fulerenos como os PAHs substituídos apresentam abundância drasticamente menor que os PAHs puros (Tielens, 2013), explicando a predominância dos PAHs puros frente às outras categorias de composição.

A Figura 4.15 mostra a contribuição de PAHs neutros e carregados para cada banda no espectro do IV-médio. Observamos um comportamento similar nas bandas de 6.2, 11.3 e 12.7 μm , com uma contribuição muito mais pronunciada dos PAHs neutros ($\sim 80\text{--}90\%$ do fluxo total). Apenas a banda de 7.7 μm mostra uma mistura mais equilibrada de PAHs neutros e ionizados.

Para entender a predominância de PAHs neutros, recorreremos aos modelos de emissão de Draine & Li (2001). Segundo estes, as vibrações de estiramento C–C (características das bandas de 6.2 e 7.7 μm) aumentam com a ionização, enquanto as ligações C–H fora do plano (características das bandas de 11.3 e 12.7 μm) diminuem.

De uma perspectiva experimental e focada na análise da emissão de PAHs na nebulosa de reflexão NGC 7023, Rapacioli et al. (2005) mostraram que PAHs neutros dominam a emissão nas bandas de 11.3 e 12.7 μm , comparado aos PAHs carregados positivamente (Figura 5.4). Para as bandas em 6.2 e 7.7 μm , ambos os tipos de PAHs contribuem de forma equilibrada, com uma contribuição mais enviesada para os PAHs carregados.

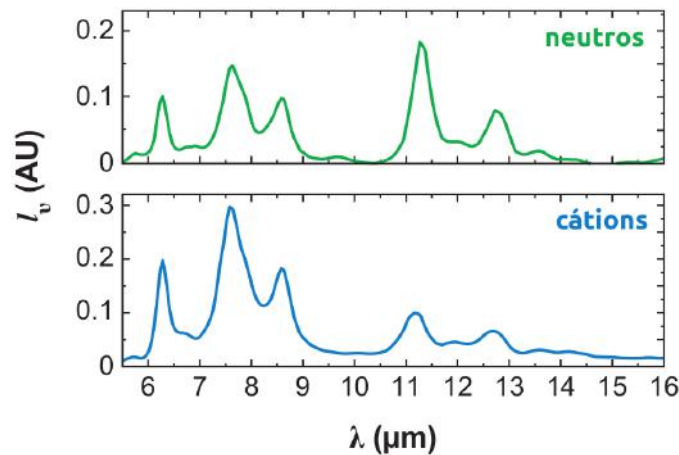


FIGURA 5.4. Componentes associadas a PAHs neutros (verde) e carregados positivamente (azul) na nebulosa de reflexão NGC 7023. Figura adaptada de Tielens (2008).

Nossa análise corrobora com os resultados para as bandas em 7.7, 11.3 e 12.7 μm : uma contribuição notavelmente mais forte dos PAHs neutros nas bandas mais vermelhas e mais equilibrada (com uma inversão na maior contribuição de PAHs ionizados) na banda de 7.7 μm . Ressaltamos o resultado observado para a banda de 6.2 μm que vai de encontro a expectativa de um comportamento similar a banda de 7.7 μm : observamos também uma contribuição de PAHs neutros. Considerando que o ajuste desta banda não se vê afetado por linhas atômicas, não atribuímos o desvio dessa predição pelo ajuste ruim da ferramenta PAHFIT. Porém, outras condições podem estar afetando nossos resultados: a influência da banda de absorção pelo gelo na banda de 6.2 μm (e.g., Spoon et al., 2004) que, no caso de obscurecimento significativo esperado para LIRGs e ULIRGs, pode ser importante e impactar na distribuição da emissão na banda de 6.2 μm e, conseqüentemente, na decomposição dos diferentes tipos de PAHs. Fora essa potencial influência, não temos uma justificativa para explicar o comportamento da banda de 6.2 μm em moléculas neutras e carregadas nesta fase da análise.

5.3 Natureza da fonte de energia das (U)LIRGs e seu impacto na produção de PAHs

Desde as descobertas de LIRGs e ULIRGs realizadas pela missão IRAS, estudos mostraram que as altas luminosidades desses objetos podem ser explicadas por regiões de intensa formação estelar e AGN (e.g., Sanders & Mirabel, 1996). Alguns trabalhos propuseram classificações baseadas em IV para determinar a importância de um AGN em LIRGs e ULIRGs. Díaz-Santos et al. (2017) apresentaram uma análise das linhas [OI]₆₃, [OIII]₈₈, [NII]₁₂₂ e [CII]₁₅₈ no IV-distante para as galáxias de GOALS, obtidas com o telescópio Herschel. Aproveitamos essa análise no nosso trabalho, com o intuito de explorar se a presença de um AGN – e sua dominância no IV-médio – altera de alguma forma a população de moléculas que geram as bandas observadas.

A maior parte das linhas usadas como diagnósticos no IV-distante é originada em regiões de fotodissociação ao redor de estrelas jovens e massivas (Hollenbach & Tielens, 1997), comumente encontradas em LIRGs, que exibem altas taxas de formação estelar, frequentemente acompanhadas pela presença de AGN (Petric et al., 2011). A presença de um AGN afeta a relação entre as linhas, permitindo o uso de diferentes proporções

entre linhas como diagnósticos da presença de um AGN (como $[\text{NeV}]_{14.3}/[\text{NeII}]_{12.8}$ e $[\text{OIV}]_{25.9}/[\text{NeII}]_{12.8}$; Armus et al., 2007).

Seguindo o formalismo descrito por Veilleux et al. (2009), Díaz-Santos et al. (2017) calcularam a contribuição de AGN nas galáxias de GOALS tanto para a luminosidade no IV-médio, como para a luminosidade bolométrica. Os autores utilizaram cinco diagnósticos diferentes baseados nos espectros do IV-médio obtidos com IRS/Spitzer: as razões de linha de emissão $[\text{NeV}]_{14.3}/[\text{NeII}]_{12.8}$ e $[\text{OIV}]_{25.9}/[\text{NeII}]_{12.8}$, a largura equivalente da banda de $6.2\mu\text{m}$ (Armus et al., 2007), a inclinação do contínuo de poeira em S_{30}/S_{15} (Veilleux et al., 2009) e o diagrama de Laurent (Laurent et al., 2000)¹. Esses indicadores são baseados em como um AGN modifica as linhas e o contínuo do espectro de uma galáxia *star forming* – através da ionização do gás na vizinhança para estados excitados e/ou através do aquecimento da poeira a maiores temperaturas, fornecendo uma estimativa de sua contribuição fracional à emissão no IV-médio (Díaz-Santos et al., 2017).

Optamos por adotar a quantificação da contribuição de AGN de Díaz-Santos et al. (2017) considerando que, individualmente, os diagnósticos têm suas limitações particulares, como resolução e cobertura espectral. Também há um número significativo de não-deteções em um ou mais diagnósticos – mas a combinação de todos eles em conjunto permite uma quantificação mais robusta da média de contribuição em luminosidade do IV-médio e bolométrica para os AGN, $\langle \alpha_{AGN}^{IV} \rangle$ e $\langle \alpha_{AGN}^{bol} \rangle$. A fração de AGN encontrada para cada diagnóstico e a média destas, para a luminosidade no IV-médio e bolométrica, estão disponibilizadas em goals.ipac.caltech.edu/data_files/agnfrac.dat.

5.3.1 AGN × ionização dos PAHs

Consideramos na Figura 5.5 as contribuições independentes dos PAHs ionizados e PAHs neutros para o fluxo total contido em todas as bandas de PAHs discutidas neste trabalho (6.2 , 7.7 , 11.3 e $12.7\mu\text{m}$). Já nas Seções 4.2 e 5.2 apresentamos e discutimos o resultado que PAHs neutros contribuem mais significativamente na maioria das bandas, o que é confirmado quando consideramos a contribuição de PAHs neutros versus ionizados

¹O método usa critérios espectroscópicos baseados no fato que emissão no IV-médio de galáxias *star forming* ou ativas provém majoritariamente de regiões HII, de fotodissociação e AGN.

para a totalidade do fluxo associado a todas as bandas. Na Figura 5.5 analisamos como essa relação varia em função da contribuição do AGN à luminosidade no IV-médio, segundo os valores de Díaz-Santos et al. (2017) para as galáxias da amostra estudada. Primeiramente, observamos serem poucas as galáxias com fração de AGN maiores que 40% – apenas 10% de nossa amostra.

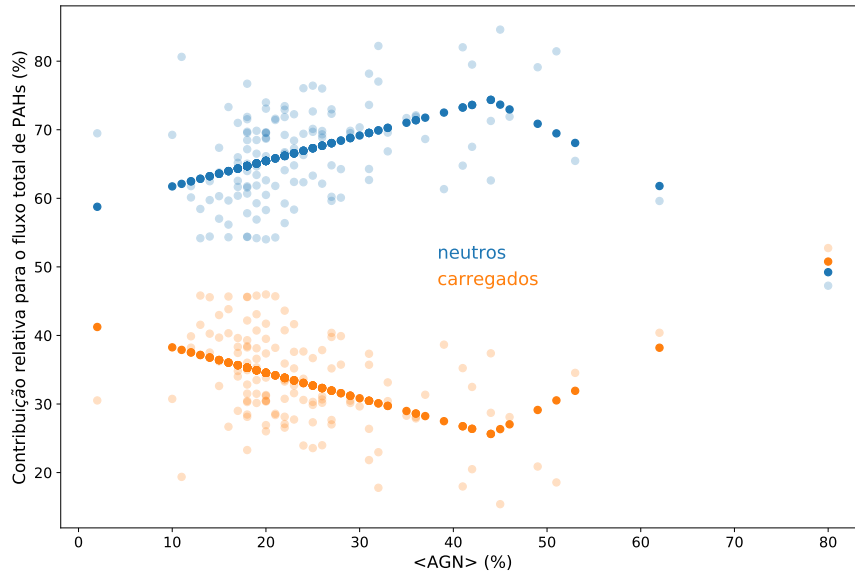


FIGURA 5.5. Ajuste de funções pelo método MARS na contribuição de PAHs neutros (azul) e carregados (laranja) em função da fração de AGN em cada galáxia da amostra.

Utilizamos o método *Multivariate Adaptive Regression Splines* (MARS) de regressão flexível que procura por interações e relações não lineares de forma automática (Friedman, 1991). Na Figura 5.5 podemos atestar que o método detecta uma mudança de comportamento nas distribuições de PAHs neutros e carregados em $\langle \text{AGN} \rangle \sim 45\%$, quando os PAHs neutros passam a contribuir menos para o fluxo total de PAHs e os PAHs carregados passam a contribuir mais.

Outra forma de atestar esse comportamento é verificando a “gaussianidade” das distribuições de moléculas neutras e carregadas. Usamos a técnica de *Kernel Density Estimation* (Rosenblatt, 1956; Parzen, 1962, KDE) para inferir a função de densidade de probabilidade das contribuições neutras e carregadas. A KDE suaviza os dados partindo de Kernels gaussianos. Na Figura 5.6, vemos que as KDEs de cada categoria possuem dois picos (indicados pelas setas) e asas alongadas, sugerindo que existe uma certa separação interna na distribuição. Aplicamos os testes de normalidade (Shapiro-Wilk e Kolmogorov-Smirnov) à distribuição de valores correspondentes à contribuição de moléculas neutras (histograma azul da figura) e mostramos os valores destes testes

na Tabela 5.1. Aceitamos a hipótese nula (consideramos que nossos dados seguem a distribuição normal) quando o valor p é próximo de zero, ou quando o valor p é maior que o nível de significância, nos casos dos testes de Kolmogorov-Smirnov e de Shapiro-Wilk, respectivamente. Pelos valores da Tabela 5.1, percebemos que, a um nível de confiança de 95%, o teste de Kolmogorov-Smirnov sugere que as distribuições laterais da Figura 5.6 podem ser descritas por uma distribuição normal; já o teste de Shapiro-Wilk, a um mesmo nível de confiança, aponta que os dados não são fielmente representados por uma distribuição gaussiana.

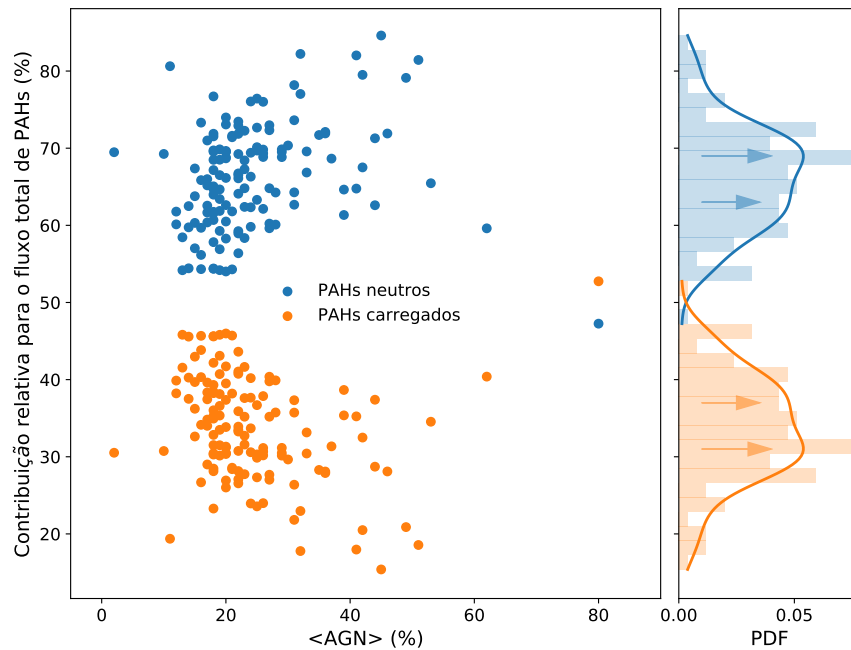


FIGURA 5.6. Contribuição de PAHs neutros (azul) e carregados (laranja) em função da fração de AGN em cada galáxia da amostra. No histograma lateral são mostradas as KDEs das duas componentes, com os picos indicados pelas setas.

Interpretamos esses resultados como um indício de que estamos traçando uma tendência onde a contribuição de moléculas carregadas é mais pronunciada em galáxias dominadas por AGN. Considerando que, na presença de um AGN o campo de radiação é mais intenso, com maior abundância de fótons de maior energia do que seria previsto de uma região de formação estelar, um aumento na população de PAHs ionizados é esperado (Sales et al., 2010). Porém, admitimos que mesmo considerando a análise estatística apresentada, nossa amostra com $\sim 10\%$ de galáxias com AGN que contribuem mais que 40% da luminosidade no IV-médio não apresenta fortes evidências desta tendência. Essa disposição é fortemente baseada nas poucas galáxias representantes da região com alta contribuição de AGN.

TABELA 5.1. Testes de normalidade da distribuição de contribuição de moléculas neutras e carregadas para as galáxias da amostra.

	Shapiro-Wilk	Kolmogorov-Smirnov
valor do teste	0.989	0.698
valor p	0.454	0
nível de confiança	95%	95%

Idealmente, faríamos essa análise baseada numa amostra com maior representatividade de galáxias com AGN fortes, no entanto, nossa amostra não permite isso, visto que se trata de galáxias no universo local e, inerentemente, com menor número de AGN (e.g., Sanders & Mirabel, 1996). Mostrando de outra forma, consideremos a seguinte situação: se a presença de um AGN não impacta nas propriedades de PAHs em termos de ionização, os fótons associados às regiões dominadas por AGN não possuem energia suficiente para ionizar as moléculas. Trabalhos recentes indicam que o campo de radiação de AGN não destrói PAHs (Sales et al., 2010; Ruschel-Dutra et al., 2014; Monfredini et al., 2018). Em termos da ionização de PAHs, trabalhos como Kuroda (1964) e Dabestani & Ivanov (1999) – que investigaram o potencial de ionização de PAHs pequenos – mostraram que para o benzeno (C_6H_6), molécula base dos PAHs, a energia necessária para arrancar um de seus elétrons é de $\sim 9.25\text{eV}$; para a fenantrenamina ($C_{14}H_{11}N$), uma das moléculas mais recorrentes da nossa amostra, esse valor é de 7.2eV . Mesmo os PAHs maiores, como o fulereno C_{60} , possuem baixas energias de ionização, variando entre $7.5\text{-}8.1\text{eV}^2$. Comparando as baixas energias de ionização para os PAHs com o requerimento energético para produzir $[NeV]_{14.3}$ (97.1eV), linhas proibidas tipicamente associadas a AGN (e.g., Genzel et al., 1998), chegamos a conclusão que, na presença de um núcleo ativo, fótons com energias suficientes para ionizar os PAHs são abundantes. Isso nos traz ao ponto que, AGN devem impactar a população de PAHs, promovendo um aumento na abundância de moléculas ionizadas e levando a uma maior contribuição destas nas bandas de emissão observadas no IV-médio (Sales et al., 2013; Alonso-Herrero et al., 2014).

De modo definitivo, a análise deve ser estendida para galáxias com maior diversidade na contribuição de AGN. Vários trabalhos têm estudado a presença de AGN na amostra de GOALS. Como mencionamos na Seção 2.1, GOALS é um levantamento

²Os valores de potencial de ionização para as moléculas deste projeto foram retirados do banco de dados online do *National Institute of Standards and Technology* (NIST): <https://webbook.nist.gov/chemistry/>

multibanda e disponibiliza dados em raios-X e rádio para uma parte da amostra, obtidos pelos telescópios Chandra e VLA, respectivamente. Pela grande utilidade dessas faixas de energia para a seleção de atividade nos núcleos (Netzer, 2015), vários trabalhos têm focado na identificação dessas regiões na amostra de GOALS. Iwasawa et al. (2011) apresentaram dados das 44 LIRGs mais luminosas de GOALS, com $\log(L_{IR}/L_{\odot}) \geq 11.73$: raios-X foram detectados em 37% dessa subamostra, mas considerando os objetos que apresentam a linha $[\text{NeV}]_{14.3}$, a fração de AGN aumenta para 48%. Por outro lado, Vardoulaki et al. (2015) verificaram como as propriedades em rádio de uma amostra de 35 LIRGs de GOALS se relacionam às suas características espectrais no IV, baseado em observações em 1.49 e 8.44GHz, a fim de procurar por AGN através dos índices espectrais no rádio. Eles determinaram que 45% dos objetos são rádio-AGN e 35% apresentam uma mistura de AGN e *starburst*. Vardoulaki et al. (2015) encontraram que 7% dos objetos identificados como AGN no rádio, não são classificados como AGN nos diagnósticos de IV-médio e óptico. Considerando esses estudos fica claro que, para investigar o impacto de diferentes fontes, é preciso considerar outra amostra. Essa é uma das motivações para o projeto de doutorado que será desenvolvido em um futuro próximo, visando uma amostra mais ampla, incluindo ULIRGs distantes com uma maior contribuição de AGN fortes.

Capítulo 6

Conclusão

As últimas décadas têm sido repletas de transformações na Astronomia de IV, em particular, os últimos 35 anos desde o lançamento da missão IRAS. Finalmente pudemos analisar dados de IV com maior qualidade sem a interferência da atmosfera, e isso impactou diretamente no estudo da poeira presente no meio interestelar e nas descobertas de galáxias com alta emissão no IV.

Atualmente, sabemos que galáxias luminosas no IV não são abundantes no universo local, enquanto as galáxias muito luminosas no IV são mais raras ainda. No entanto, esses dois tipos de galáxias são responsáveis por grande parte da formação estelar e densidade de energia no IV a partir de $z = 1$. Existe enorme interesse em estudar esses objetos por suas fontes de emissão no IV, que coexistem entre formação de massa estelar e crescimento de buracos negros (AGN).

As bandas de PAHs observadas em espectros no IV-médio, originadas de transições vibracionais nas ligações dessas moléculas, podem ser usadas como traçadores das condições físicas presentes nas galáxias: a razão banda/contínuo dos PAHs é capaz de discernir fontes dominadas por formação estelar e AGN; a razão entre bandas, como $6.2\mu\text{m}/11.3\mu\text{m}$, fornece medidas da ionização dos PAHs.

Esse trabalho aproveita a recente exploração do IV, como uma combinação entre trabalhos teóricos e observacionais: usamos espectros IRS/Spitzer no IV-médio do levantamento GOALS, contendo LIRGs e ULIRGs de $z \leq 0.088$, a fim de decompô-los em termos de contínuo, linhas atômicas e bandas de PAHs; utilizando uma base de dados teórica de PAHs, pudemos fazer uma correspondência entre os espectros provenientes da

decomposição com os espectros teóricos da base de dados, objetivando a categorização em tamanho e carga dos PAHs responsáveis pela emissão dos espectros IRS/Spitzer.

Nossos principais resultados foram: 1) nossa amostra apresentou grande variação espectral, especialmente no que se refere a profundidade da absorção de silicatos, inclinação do contínuo de poeira e proeminência dos PAHs; 2) encontramos cerca de 100 moléculas diferentes e os PAHs puros, neutros e pequenos foram os mais abundantes na amostra – apesar disso, a banda de $11.3\mu\text{m}$ apresentou forte mistura entre PAHs pequenos e grandes, enquanto na banda de $7.7\mu\text{m}$ os PAHs carregados foram tão abundantes que ultrapassaram os neutros; 3) percebemos uma tendência de aumento dos PAHs carregados e diminuição dos PAHs neutros para galáxias com maior contribuição de AGN.

Estamos no limiar de grandes descobertas com JWST, em especial nos ambientes empoeirados – com exploração do IV-próximo e IV-médio através de imageamento, espectroscopia e espectroscopia de campo integral. Esse trabalho se posiciona como um precedente para essa nova era: estudos resolvidos de PAHs especialmente para galáxias desde o universo local até $z \sim 1.2$.

Referências Bibliográficas

- Aitken, D. K., & Roche, P. F. 1985, MNRAS, 213, 777, doi: 10.1093/mnras/213.4.777
- Allamandola, L. J., Bregman, J. D., Sandford, S. A., et al. 1989, ApJ, 345, L59, doi: 10.1086/185552
- Allamandola, L. J., Tielens, A. G. G. M., & Barker, J. R. 1985, ApJ, 290, L25, doi: 10.1086/184435
- Alonso-Herrero, A., Pérez-González, P. G., Alexander, D. M., et al. 2006, ApJ, 640, 167, doi: 10.1086/499800
- Alonso-Herrero, A., Ramos Almeida, C., Esquej, P., et al. 2014, MNRAS, 443, 2766, doi: 10.1093/mnras/stu1293
- Armus, L., Heckman, T., & Miley, G. 1987, AJ, 94, 831, doi: 10.1086/114517
- Armus, L., Charmandaris, V., Bernard-Salas, J., et al. 2007, ApJ, 656, 148, doi: 10.1086/510107
- Armus, L., Mazzarella, J. M., Evans, A. S., et al. 2009, PASP, 121, 559, doi: 10.1086/600092
- Bauschlicher, Jr., C. W., Ricca, A., Boersma, C., & Allamandola, L. J. 2018, ApJS, 234, 32, doi: 10.3847/1538-4365/aaa019
- Bauschlicher, Jr., C. W., Boersma, C., Ricca, A., et al. 2010, ApJS, 189, 341, doi: 10.1088/0067-0049/189/2/341
- Berné, O., & Tielens, A. G. G. M. 2012, Proceedings of the National Academy of Science, 109, 401, doi: 10.1073/pnas.1114207108

- Boersma, C., Bauschlicher, Jr., C. W., Ricca, A., et al. 2014, *ApJS*, 211, 8, doi: 10.1088/0067-0049/211/1/8
- Canelo, C. M. 2006, Master's thesis, Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas – Universidade de São Paulo
- Canelo, C. M., Friaça, A. C. S., Sales, D. A., Pastoriza, M. G., & Ruschel-Dutra, D. 2018, *MNRAS*, 475, 3746, doi: 10.1093/mnras/stx3351
- Casey, C. M., Narayanan, D., & Cooray, A. 2014, *Phys. Rep.*, 541, 45, doi: 10.1016/j.physrep.2014.02.009
- Castelló-Mor, N., Carrera, F. J., Alonso-Herrero, A., et al. 2013, *A&A*, 556, A114, doi: 10.1051/0004-6361/201321457
- Cataldo, F., Strazzulla, G., & Iglesias-Groth, S. 2009, *MNRAS*, 394, 615, doi: 10.1111/j.1365-2966.2008.14369.x
- Cesarsky, C. J., & Salama, A. 2006, *ISO Science Legacy*
- Cherchneff, I. 2011, in *EAS Publications Series*, Vol. 46, *EAS Publications Series*, ed. C. Joblin & A. G. G. M. Tielens, 177–189, doi: 10.1051/eas/1146019
- Chiar, J. E., & Tielens, A. G. G. M. 2006, *ApJ*, 637, 774, doi: 10.1086/498406
- da Cunha, E., Charlot, S., & Elbaz, D. 2008, *MNRAS*, 388, 1595, doi: 10.1111/j.1365-2966.2008.13535.x
- Dabestani, R., & Ivanov, I. N. 1999, *Photochemistry and Photobiology*, 70, 10
- Desai, V., Armus, L., Spoon, H. W. W., et al. 2007, *ApJ*, 669, 810, doi: 10.1086/522104
- Donley, J. L., Rieke, G. H., Pérez-González, P. G., Rigby, J. R., & Alonso-Herrero, A. 2007, *ApJ*, 660, 167, doi: 10.1086/512798
- Draine, B. T. 2003, *ARA&A*, 41, 241, doi: 10.1146/annurev.astro.41.011802.094840
- Draine, B. T., & Li, A. 2001, *ApJ*, 551, 807, doi: 10.1086/320227
- Duley, W. W., & Williams, D. A. 1981, *MNRAS*, 196, 269, doi: 10.1093/mnras/196.2.269

- Duley, W. W., & Williams, D. A. 1983, MNRAS, 205, 67P, doi: 10.1093/mnras/205.1.67P
- Díaz-Santos, T., Charmandaris, V., Armus, L., et al. 2011, ApJ, 741, 32, doi: 10.1088/0004-637X/741/1/32
- Díaz-Santos, T., Armus, L., Charmandaris, V., et al. 2017, ApJ, 846, 32, doi: 10.3847/1538-4357/aa81d7
- Fich, M., Rupen, M. P., Knapp, G. R., et al. 1999, in ESA Special Publication, Vol. 427, The Universe as Seen by ISO, ed. P. Cox & M. Kessler, 877
- Fitzpatrick, E. L., & Massa, D. 1986, ApJ, 307, 286, doi: 10.1086/164415
- Friedman, J. H. 1991, The Annals of Statistics, 1
- Galliano, F. 2004, PhD thesis, Service d'Astrophysique, CEA/Saclay, L'Orme des Merisiers, 91191 Gif sur Yvette, France
- Galliano, F. 2017, Planet. Space Sci., 149, 38, doi: 10.1016/j.pss.2017.09.006
- Genzel, R., & Cesarsky, C. J. 2000, ARA&A, 38, 761, doi: 10.1146/annurev.astro.38.1.761
- Genzel, R., Lutz, D., Sturm, E., et al. 1998, ApJ, 498, 579, doi: 10.1086/305576
- Gillett, F. C., Forrest, W. J., & Merrill, K. M. 1973, ApJ, 183, 87, doi: 10.1086/152211
- Hansen, L., Jørgensen, H. E., Nørgaard-Nielsen, H. U., et al. 2000, A&A, 362, 133
- Higdon, S. J. U., Armus, L., Higdon, J. L., Soifer, B. T., & Spoon, H. W. W. 2006, ApJ, 648, 323, doi: 10.1086/505701
- Hollas, J. M. 2004, Modern spectroscopy, 4th edn. (John Wiley & Sons), ISBN: 0470844167,9780470844168,9780470094716,0470844159
- Hollenbach, D. J., & Tielens, A. G. G. M. 1997, ARA&A, 35, 179, doi: 10.1146/annurev.astro.35.1.179
- Hudgins, D. M., Bauschlicher, Jr., C. W., & Allamandola, L. J. 2005, ApJ, 632, 316, doi: 10.1086/432495

- Imanishi, M., Dudley, C. C., Maiolino, R., et al. 2007, *ApJS*, 171, 72, doi: 10.1086/513715
- Inami, H., Armus, L., Charmandaris, V., et al. 2013, *ApJ*, 777, 156, doi: 10.1088/0004-637X/777/2/156
- Ishida, C. M. 2004, PhD thesis, UNIVERSITY OF HAWAII
- Iwasawa, K., Sanders, D. B., Teng, S. H., et al. 2011, *A&A*, 529, A106, doi: 10.1051/0004-6361/201015264
- Jones, A. P., & d'Hendecourt, L. 2000, *A&A*, 355, 1191
- Kennicutt, Jr., R. C. 1998, *ApJ*, 498, 541, doi: 10.1086/305588
- Kessler, M. F., Steinz, J. A., Anderegg, M. E., et al. 1996, *A&A*, 315, L27
- Kim, S. J., Lee, H. M., Jeong, W.-S., et al. 2015, *MNRAS*, 454, 1573, doi: 10.1093/mnras/stv2006
- Kuroda, H. 1964, *Nature*, 201, 1214
- Lagache, G., Puget, J.-L., & Dole, H. 2005, *ARA&A*, 43, 727, doi: 10.1146/annurev.astro.43.072103.150606
- Laurent, O., Mirabel, I. F., Charmandaris, V., et al. 2000, *A&A*, 359, 887
- Le Floch, E., Papovich, C., Dole, H., et al. 2005, *ApJ*, 632, 169, doi: 10.1086/432789
- Leger, A., & Puget, J. L. 1984, *A&A*, 137, L5
- Lutz, D. 2014, *ARA&A*, 52, 373, doi: 10.1146/annurev-astro-081913-035953
- Magnelli, B., Popesso, P., Berta, S., et al. 2013, *A&A*, 553, A132, doi: 10.1051/0004-6361/201321371
- Martín-Hernández, N. L., Peeters, E., Morisset, C., et al. 2002, *A&A*, 381, 606, doi: 10.1051/0004-6361:20011504
- Mathis, J. S. 1990, *ARA&A*, 28, 37, doi: 10.1146/annurev.aa.28.090190.000345
- Menéndez-Delmestre, K., Blain, A. W., Smail, I., et al. 2009, *ApJ*, 699, 667, doi: 10.1088/0004-637X/699/1/667

- Mirabel, I. F., Laurent, O., Sanders, D. B., et al. 1999, *A&A*, 341, 667
- Monfredini, T., Quiñán-Lara, H. M., Fantuzzi, F., et al. 2018, arXiv e-prints. <https://arxiv.org/abs/1808.07626>
- Moshir, M., & et al. 1990, IRAS Faint Source Catalogue
- Moutou, C., Sellgren, K., Verstraete, L., & Léger, A. 1999, *A&A*, 347, 949
- Murakami, H., Baba, H., Barthel, P., et al. 2007, *PASJ*, 59, S369, doi: 10.1093/pasj/59.sp2.S369
- Murphy, Jr., T. W., Soifer, B. T., Matthews, K., Armus, L., & Kiger, J. R. 2001, *AJ*, 121, 97, doi: 10.1086/318031
- Netzer, H. 2015, *ARA&A*, 53, 365, doi: 10.1146/annurev-astro-082214-122302
- Neugebauer, G., Habing, H. J., van Duinen, R., et al. 1984, *ApJ*, 278, L1, doi: 10.1086/184209
- Öberg, K. I., Boogert, A. C. A., Pontoppidan, K. M., et al. 2011, *ApJ*, 740, 109, doi: 10.1088/0004-637X/740/2/109
- Papoular, R., Conrad, J., Giuliano, M., Kister, J., & Mille, G. 1989, *A&A*, 217, 204
- Parzen, E. 1962, *The Annals of Mathematical Statistics*, 33, 1065
- Petric, A. O., Armus, L., Howell, J., et al. 2011, *ApJ*, 730, 28, doi: 10.1088/0004-637X/730/1/28
- Pilbratt, G. L. 2004, in *Proc. SPIE*, Vol. 5487, Optical, Infrared, and Millimeter Space Telescopes, ed. J. C. Mather, 401–412, doi: 10.1117/12.562382
- Piqueras López, J., Colina, L., Arribas, S., & Alonso-Herrero, A. 2013, *A&A*, 553, A85, doi: 10.1051/0004-6361/201220991
- Pérez-González, P. G., Gallego, J., Zamorano, J., et al. 2003, *ApJ*, 587, L27, doi: 10.1086/375123
- Rapacioli, M., Joblin, C., & Boissel, P. 2005, *A&A*, 429, 193, doi: 10.1051/0004-6361:20041247

- Roche, P. F., Aitken, D. K., Smith, C. H., & Ward, M. J. 1991, MNRAS, 248, 606, doi: 10.1093/mnras/248.4.606
- Rosenblatt, M. 1956, The Annals of Mathematical Statistics, 832
- Ruschel-Dutra, D., Pastoriza, M., Riffel, R., Sales, D. A., & Winge, C. 2014, MNRAS, 438, 3434, doi: 10.1093/mnras/stt2448
- Russell, R. W., Soifer, B. T., & Forrest, W. J. 1975, ApJ, 198, L41, doi: 10.1086/181806
- Sakata, A., Wada, S., Tanabe, T., & Onaka, T. 1984, ApJ, 287, L51, doi: 10.1086/184396
- Sales, D. A., Pastoriza, M. G., & Riffel, R. 2010, ApJ, 725, 605, doi: 10.1088/0004-637X/725/1/605
- Sales, D. A., Pastoriza, M. G., Riffel, R., & Winge, C. 2013, MNRAS, 429, 2634, doi: 10.1093/mnras/sts542
- Sanders, D. B., Mazzarella, J. M., Kim, D.-C., Surace, J. A., & Soifer, B. T. 2003, AJ, 126, 1607, doi: 10.1086/376841
- Sanders, D. B., & Mirabel, I. F. 1996, ARA&A, 34, 749, doi: 10.1146/annurev.astro.34.1.749
- Sanders, D. B., Soifer, B. T., Elias, J. H., et al. 1988, ApJ, 325, 74, doi: 10.1086/165983
- Sani, E., Risaliti, G., Salvati, M., et al. 2008, ApJ, 675, 96, doi: 10.1086/523784
- Smith, J. D. T., Draine, B. T., Dale, D. A., et al. 2007, ApJ, 656, 770, doi: 10.1086/510549
- Soifer, B. T., Helou, G., & Werner, M. 2008, ARA&A, 46, 201, doi: 10.1146/annurev.astro.46.060407.145144
- Spoon, H. W. W., Armus, L., Cami, J., et al. 2004, ApJS, 154, 184, doi: 10.1086/422813
- Stierwalt, S., Armus, L., Charmandaris, V., et al. 2014, ApJ, 790, 124, doi: 10.1088/0004-637X/790/2/124
- Storrie-Lombardi, L. J., & Dodd, S. R. 2010, in Proc. SPIE, Vol. 7737, Observatory Operations: Strategies, Processes, and Systems III, 77370L, doi: 10.1117/12.857827

- Tielens, A. G. G. M. 2008, *ARA&A*, 46, 289, doi: 10.1146/annurev.astro.46.060407.145211
- Tielens, A. G. G. M. 2013, *Reviews of Modern Physics*, 85, 1021, doi: 10.1103/RevModPhys.85.1021
- Vardoulaki, E., Charmandaris, V., Murphy, E. J., et al. 2015, *A&A*, 574, A4, doi: 10.1051/0004-6361/201424125
- Veilleux, S., Rupke, D. S. N., Kim, D.-C., et al. 2009, *ApJS*, 182, 628, doi: 10.1088/0067-0049/182/2/628
- Verma, A., Lutz, D., Sturm, E., et al. 2003, *A&A*, 403, 829, doi: 10.1051/0004-6361:20030408
- Verstraete, L., Puget, J. L., Falgarone, E., et al. 1996, *A&A*, 315, L337
- Voit, G. M. 1992, *MNRAS*, 258, 841, doi: 10.1093/mnras/258.4.841
- Werner, M. W., Roellig, T. L., Low, F. J., et al. 2004, *ApJS*, 154, 1, doi: 10.1086/422992
- Whittet, D. C. B., Schutte, W. A., Tielens, A. G. G. M., et al. 1996, *A&A*, 315, L357
- Wright, E. L., Eisenhardt, P. R. M., Mainzer, A. K., et al. 2010, *AJ*, 140, 1868, doi: 10.1088/0004-6256/140/6/1868
- Wu, H., Cao, C., Hao, C.-N., et al. 2005, *ApJ*, 632, L79, doi: 10.1086/497961

Apêndice A

Apêndice A - PAHFIT

O programa `fit_pahfit.pro`, mostrado abaixo, se baseia na ferramenta PAHFIT para ajustar as componentes de fluxo ao espectro de um objeto astronômico. As componentes utilizadas são: contínuo de poeira, contínuo estelar, linhas atômicas/moleculares, bandas de PAHs e absorção de silicatos.

```
1 ; PROGRAM TO FIT THE CONTINUUM AND THE IONIC LINES OF THE SELECTED SOURCES
2 ;
3 ; The sources were extracted from Hernan-Caballero and Hatziminaoglou ...
   (2011).
4 ; Site: http://www.denebola.org/atlas/?p=data
5 ;
6 ; IMPORTANT: The sources must have passed through redshift's correction
7 ; before using this program, what can be done with ...
   check_and_correct_drd5.py
8 ;
9 ; The code used to fit is the PAHFIT. Reference: Smith, J.D.T. et al.,
10 ; 2007, ApJ, 656, 770
11 ; One of its programs was modified by Anelise Audibert - pahfit_plot
12 ;
13 ; PARAMETER: directory's path of the sources (placed at line 20)
14 ;
15 ; Code written by Carla Martinez Canelo- 2015, July
16 ; (based on runall from Anelise Audibert)
17
18 pro fit_pahfit
```



```
19
20 CD, '/path/file/'
21 files = FILE_SEARCH('*tbl')
22
23 foreach element, files, idx do begin
24   name = STRMID(element, 0, STRLEN(element)-4)
25   readcol, element, lambda, flux, error, delimiter="|", skipline=1
26   fit=pahfit(lambda, flux, error, /PLOT_PROGRESS, ...
       REPORT=name+'_pahfit.txt')
27
28   readcol, 'components_model.dat', lam_mod, cont_mod, feat_mod, $
29     lines_mod, stars_mod, dust_mod, bestfit_mod, ext_mod
30   openw, 1, name+'_mod_components.dat', WIDTH=250
31   printf, 1, 'lam_mod', '|', 'cont_mod', '|', 'feat_mod', '|', $
32     'lines_mod', '|', 'stars_mod', '|', 'dust_mod', '|', $
33     'bestfit_mod', '|', 'ext_mod'
34
35
36   for k=0, n_elements(lam_mod)-1 do begin
37     printf, 1, lam_mod[k], '|', cont_mod[k], '|', feat_mod[k], '|', $
38       lines_mod[k], '|', stars_mod[k], '|', dust_mod[k], '|', $
39       bestfit_mod[k], '|', ext_mod[k]
40   endfor
41
42   close, 1
43
44 endforeach
45
46 end
```

LISTING A.1. Programa fit_pahfit.pro por Carla Canelo (IAG-USP)

Apêndice B

Apêndice B - LINFIT

O programa LINFIT calcula a inclinação do contínuo de poeira de um espectro no plano $\log(S_\nu)$ por $\log(\nu)$. Ele foi construído baseado na minimização de qui-quadrado entre o ajuste linear e o espectro.

```
1 # ajuste de continuo de poeira a partir da minimizacao do qui-quadrado
2
3 # os espectros aqui utilizados sao do catalogo GOALS (Armus+09)
4 # e foram extraidos do repositorio
5 # https://irsa.ipac.caltech.edu/data/GOALS/galaxies.html
6
7 # eh necessario corrigir o redshift previamente
8
9 import numpy as np
10 from scipy import stats
11 import pandas as pd
12 import glob
13 import os.path
14
15 # ler o nome de todas as galaxias
16 for galaxy in glob.glob('/path/*.tbl'):
17     filename_w_ext = os.path.basename(galaxy)
18     filename, file_extension2 = os.path.splitext(filename_w_ext)
19
20 # ler cada espectro por vez
21     spectrum = np.loadtxt(galaxy, delimiter='|', skiprows=1)
22
```

```
23 # definir comprimento de onda, frequencia e fluxo,
24 # com suas respectivas unidades
25     wave = spectrum[:,0] # em microns
26     fluxo = spectrum[:,1] # em Jy
27     freq = 3E14/(wave) # em Hz
28     flux = 1E23*fluxo # em erg.s-1.cm-2.Hz
29
30 # ajustar uma lei de regressao linear entre log(frequencia) e log(fluxo),
31 # estimando os coeficientes linear e angular
32 # determinar o residuo entre o fluxo e o modelo de regressao linear,
33 # e desvio padrao do residuo
34     slope1, intercept1 = stats.linregress(np.log10(freq), np.log10(flux))
35     residual1 = np.log10(flux) - ((slope1 * np.log10(freq)) + intercept1)
36     des_pad1 = residual1.std()
37
38 # eliminar as regioes do espectro cujo residuo diste
39 # mais/menos de 1 desvio padrao
40     freq2 = freq[abs(residual1) < des_pad1]
41     flux2 = flux[abs(residual1) < des_pad1]
42
43 # repetir o procedimento anterior
44     slope2, intercept2 = stats.linregress(np.log10(freq2), ...
45     np.log10(flux2))
46     residual2 = np.log10(flux2) - ((slope2 * np.log10(freq2)) + ...
47     intercept2)
48     des_pad2 = residual2.std()
49
50     freq3 = freq2[abs(residual2) < des_pad2]
51     flux3 = flux2[abs(residual2) < des_pad2]
52
53     slope3, intercept3 = stats.linregress(np.log10(freq3), ...
54     np.log10(flux3))
55     residual3 = np.log10(flux3) - ((slope3 * np.log10(freq3)) + ...
56     intercept3)
57     des_pad3 = residual3.std()
58
59 # slope1, slope2 e slope3 sao os valores de inclinacao do continuo de
60 # poeira do ajuste para o espectro da galaxia, para as segundas e
61 # terceira execucoes do programa.
```

LISTING B.1. Programa `linfit.py` por Yanna Martins (OV/UFRJ)

Apêndice C

Apêndice C - PAHdb

A base de dados NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database contém mais de 3000 espectros teóricos no IV de PAHs. Além das informações transicionais, PAHdb permite a comparação entre os espectros gerados pela base de dados com espectros astronômicos, gerando um espectro sintético de PAHs que estariam promovendo a emissão no IV-médio do objeto cujo espectro foi inserido na ferramenta. Também é possível analisar decompor a emissão desses PAHs em termos de carga e tamanho das moléculas. O programa `pahdb.pro` faz a comparação entre os espectros e gera a lista de moléculas (e seus espectros) cuja emissão no IV é atribuída.

```
1 ; código baseado no exemplo mostrado na página oficial de NASA PAHdb:
2 ; ...
   https://www.astrochemistry.org/Pictures/pahdb/theoretical/3.00/help/software
3
4 observation = OBJ_NEW('AmesPAHdbIDLSuiteObservation', 'file', $
5                       ...
   Units=AmesPAHdbIDLSuite_CREATE_OBSERVATION_UNITS_S())
6
7 ; a observacao eh lida do arquivo 'file' e a funcao
8 ; 'AmesPAHdbIDLSuite_CREATE_OBSERVATION_UNITS_S'
9 ; eh chamada para associar unidades a observacao
10
11 observation -> AbscissaUnitsTo,1
12
13 ; as unidades da abcissa da observacao sao convertidas para numero de onda
```

```
14
15 observation -> Rebin,5D,/Uniform
16
17 ; binagem em uma grade uniforme de 5 numeros de onda
18
19 pahdb = OBJ_NEW('AmesPAHdbIDLSuite', Filename='pahdb-theoretical.xml')
20
21 ; o arquivo xml de NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database eh carregado
22
23 transitions = pahdb->getTransitionsByUID(pahdb->Search("C>0"))
24
25 ; eh feita a selecao de moleculas atraves da consulta "C>0" e o numero UID
26 ; de cada especie eh associado as transicoes vibracionais destas
27
28 transitions -> Shift,-15D
29
30 ; eh aplicado um desvio de 15 numeros de onda para mais alto comprimento
31 ; de onda a fim de simular efeitos de anharmonicidade de transicoes
32
33 spectrum = transitions -> Convolve(/Lorentzian, Grid = $
34                                     observation->getGrid(), FWHM=15D)
35
36 ; sao atribuidos as transicoes vibracionais perfis de Lorentz com FWHM
37 ; de 15 cm-1 na grade observacional definida anteriormente
38
39 fit = spectrum -> Fit(observation)
40
41 ; a observacao eh ajustada aos espectros de emissao dos PAHs
42
43 fit -> Write, 'pahdb_file'
44
45 ; converte o espectro de emissao das moleculas em um
46 ; arquivo .txt com o nome 'pahdb_file'
```

LISTING C.1. Programa pahdb.pro por Yanna Martins (OV/UFRJ)