

A era digital e suas implicações sociais: Desafios e contribuições

ESTUDO DE HIDROCARBONETOS POLICÍCLICOS AROMÁTICOS EM GALÁXIAS COM NÚCLEO ATIVO E STARBURST

Giovana Cristina Furtado¹, Ângela Cristina Krabbe², José Andres Hernandez Jimenez¹.

¹Universidade do Vale do Paraíba/Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento, Avenida Shishima Hifumi, 2911, Urbanova - 12244-000 - São José dos Campos-SP, Brasil, giovanacfurtado@hotmail.com, joseahe@gmail.com.

²Universidade de São Paulo/Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas, Rua do Matão, 1226, Cidade Universitária - 05508-090 - São Paulo-SP, Brasil, angela.krabbe@gmail.com.

Resumo

Este artigo é um estudo em andamento de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos em uma amostra de galáxias com núcleo ativo e *Starburst*, com *redshift* $z \leq 0.04$, selecionadas do Atlas Spitzer. Dados espectroscópicos no intervalo de 5-15 μm em combinação com códigos de síntese espectral, como o código PAHdb, foram utilizados na identificação dos possíveis portadores das Bandas Interestelares Difusas. O objetivo desta pesquisa é ampliar a amostra de galáxias estudadas por Silva-Ribeiro et al. (2022), explorando as possíveis correlações entre parâmetros, como a taxa de fragmentação, o grau de ionização e o tipo de espécies de PAHs, com a dureza do campo de radiação, metalicidade e outras propriedades físicas. Por fim, comparou-se os resultados obtidos até o momento com aqueles derivados por Silva-Ribeiro et al. (2022), obtendo-se boa concordância entre eles, ainda que empregadas bases distintas.

Palavras-chave: galáxia, PAHS, espectro.

Área do Conhecimento: Ciências Exatas e da Terra - Astronomia

Introdução

O estudo da física e da química do meio interestelar (ISM) é uma das áreas mais ativas da astrofísica moderna. Isto se deve ao fato de que o ISM é um grande agente na evolução química das galáxias e, portanto, o seu estudo nos permite entender este processo em detalhe. Apesar do ISM ser composto na sua maior parte por hidrogênio (H) (~90%) e hélio (He) (~10%), são suas componentes minoritárias, como o carbono (C), nitrogênio (N), e oxigênio (O), que definem as suas propriedades químicas e físicas. Dentro das espécies atômicas e moleculares, se encontram os hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs), que são cadeias de anéis de benzenos compostas desde dezenas até centenas de átomos de C. Através de sua assinatura espectral no infravermelho médio pode-se estudar sua estrutura, tamanho e grau de ionização.

Embora o termo PAHs se refira às moléculas contendo apenas átomos de carbono e hidrogênio, nele também é incluído os seus derivados, como nitro-PAHs, Oxy-PAHs e os heterocíclicos análogos. Estudos mostram que os PAHs representam uma das formas mais abundantes de carbono no Universo, com aproximadamente 15% do carbono elementar do Universo na forma de PAHs (CANDIAN et al., 2019). Além disso, os PAHs têm um importante papel no aquecimento do ISM, uma vez que têm baixo potencial de ionização (TIELENS, 2008). Esta classe de moléculas é frequentemente observada em uma ampla gama de ambientes astrofísicos, incluindo fontes extragalácticas como galáxias Seyferts (Sys) e Starbursts (SBs) (BRANDL et al., 2006, SMITH et al., 2007, SALES et al., 2010).

No que diz respeito às características de emissão em comprimentos de onda do infravermelho (IR) e ópticos, estudos mostraram que grandes moléculas com carbono na fase gasosa, como PAHs, bem como longas cadeias de carbono ou fulerenos, devem ser os possíveis portadores de Bandas Interestelares Difusas (DIBs) e das Bandas de Infravermelho não identificadas (UIR), mas a identificação específica desses portadores ainda é um desafio. A identificação de espécies portadores de DIBs pode ser realizada através da reconstrução do espectro observado de uma galáxia, via síntese espectral. Neste caso, um dos ajustes de síntese espectral utilizados é o código PAHdb (BOERSMA et al., 2014, BAUSCHLICHER JR et al., 2018), que utiliza um conjunto de dados de espectros teóricos e

A era digital e suas implicações sociais: Desafios e contribuições

experimentais de PAHs. No entanto, é bem conhecido que existe uma degenerescência no ajuste dos espectros observados.

Nesse contexto, o objetivo é dar continuidade ao estudo realizado por Silva-Ribeiro *et al.* (2022), ampliando a amostra de galáxias estudadas e explorando correlações adicionais entre os parâmetros físicos do ISM e as propriedades dos PAHs. A busca por uma melhor identificação das espécies dominantes de PAHs é essencial para compreender a química do meio interstelar e seu papel na evolução das galáxias. Através dessas investigações, espera-se contribuir para o avanço do conhecimento sobre a astrofísica do meio interstelar e suas implicações na evolução das galáxias selecionadas para este estudo.

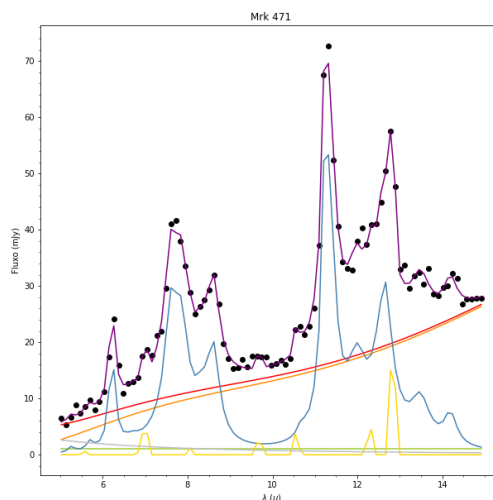
Metodologia

A partir do Atlas Spitzer/IRS (HERNÁN-CABALLERO; HATZIMINAOGLOU, 2011) foi selecionada uma amostra de galáxias com núcleo ativo (galáxias que apresentam um núcleo ativo altamente energético com um buraco negro supermassivo em seu centro) e *Starburst* (galáxias que experimentam um período intenso de formação estelar em comparação com a taxa média de formação estelar em galáxias comuns), onde determinou-se as espécies emissoras das bandas de PAHs, que são inferidas dos espectros no infravermelho. Adotou-se o *redshift* $z \leq 0.04$, dados espectroscópicos na faixa de 5-15 μm e sem a observação do espectro ótico. Assim, o número de galáxias estudadas é de dezenove, sendo sete a mais que o estudo de Silva-Ribeiro *et al.* (2022). Os objetos selecionados foram os seguintes: Mrk 273, Mrk 471, Mrk 609, Mrk 622, Mrk 883, NGC 660, NGC 1194, NGC 2622, NGC 2623, NGC 3982, NGC 4194, NGC 4388, NGC 4676, NGC 4922, NGC 5256, NGC 5347, NGC 5929, UGC 5101 e UGC 7064.

Após a seleção da amostra, a correção pelo *redshift* (z) foi realizada através da tarefa dopcor do IRAF, essa operação é necessária uma vez que visa ajustar as medidas observadas de objetos distantes devido à expansão do Universo.

O espectro observado, na faixa espectral 5-15 μm em cada galáxia, contém uma variedade de componentes de emissão, tais como: o contínuo de poeira, as linhas de H_2 , as emissões de estrelas, o contínuo estelar, as linhas de extinção e as bandas de PAH. Para a decomposição do espectro utilizou-se o programa PAHFIT, ferramenta do IDL (do inglês *Interactive Data Language*), elaborado por Smith *et al.* (2007). Dentre os objetos selecionados para este trabalho, selecionou-se a galáxia Mrk 471 para a demonstração do assunto abordado, assim, na figura 1 é mostrada a decomposição espectral obtida para a galáxia Mrk 471. Neste gráfico, o espectro observado são os pontos negros, enquanto a linha do melhor ajuste está em cor lilás. Pode-se observar que o ajuste feito pelo PAHFIT é bastante preciso na reprodução dos detalhes dos espectros observados. Também é mostrado, em vermelho, a soma do contínuo estelar mais a poeira; e em azul, a banda dos PAHs.

Figura 1 - Decomposição espectral da galáxia Mrk 471.

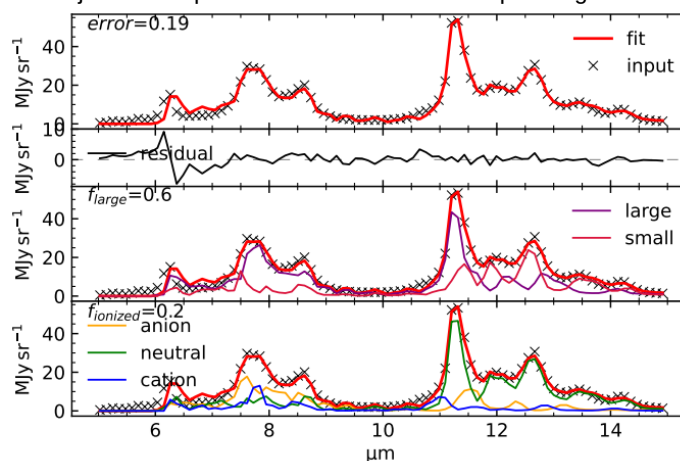


Fonte: o Autor.

A era digital e suas implicações sociais: Desafios e contribuições

Uma vez obtida a contribuição das bandas dos PAHs nos espectros observados das galáxias a partir do PAHFIT, é possível estimar as espécies de PAHs que estão presentes nos espectros. Para este procedimento, usamos a versão *offline* em python do PAHdb (BOERSMA *et al.*, 2014). Este código usa o Banco de Dados Espectroscópico Ames PAH IR da NASA, versão 3.0, com 4233 espécies de PAHs, permitindo uma análise dos espectros de PAHs para diversos tamanhos, heteroátomos, estruturas e estados de ionização de cada espécie. Na figura 2, é apresentado o gráfico de saída do PAHdb para o ajuste do espectro de Mrk 471.

Figura 2 - Ajuste do espectro das bandas de PAHs para a galáxia Mrk 471.



Fonte: o Autor.

Resultados

De acordo com a figura 2, o espectro da banda dos PAHs é representado pelos “Xs” pretos, enquanto o melhor ajuste é representado pela linha contínua em vermelho. O residual do ajuste é apresentado no segundo painel superior (linha contínua preta). No terceiro painel (de cima para baixo) dessa figura, é mostrado a contribuição das moléculas grandes ($C > 40$) e pequenas ($C < 40$), e no painel inferior é mostrado a contribuição das moléculas em função dos estados de ionização. Observa-se que o ajuste é bom para os comprimentos de onda, reproduzindo bem as características espectrais das bandas de PAHs. A partir da saída do PAHdb, também, determinou-se as espécies de PAHs que mais contribuíram em percentual para a emissão de cada amostra selecionada. A tabela 3 exibe a contribuição das espécies de PAHs na emissão desta galáxia. Junto ao percentual é exibido a Unidade Identificadora (UID) e a fórmula química das espécies. É bem conhecido que há degenerescência no ajuste dos espectros usando o banco de dados PAHdb, e não é possível garantir quais espécies exatamente estão presentes nos espectros das galáxias estudadas, uma vez que combinações de moléculas distintas apresentam o mesmo comportamento na emissão do espectro. Logo, com o objetivo de estabelecer uma descrição mais simples, os diferentes tipos de PAHs de uma galáxia foram agrupados nas seguintes categorias: desidrogenados, PAHs puros, PANHs e heteroátomos. Esses grupos foram os mesmos adotados por Silva-Ribeiro *et al.* (2022).

Tabela 1 - Espécies de PAHs contribuintes na emissão da galáxia Mrk 471.

UID	%	Fórmula	UID	%	Fórmula
3173	10,70	$C_{52}H_{18}$	704	1,07	C_{54}
620	5,66	$C_{42}H_{16}$	2832	0,91	C_{32}
2427	5,25	C_{26}	330	0,88	$C_{10}H_8$
233	4,77	$C_{23}H_{12}N^+$	159	0,86	$C_{20}H_{10}$
836	4,48	$C_{54}H_{18}$	2368	0,83	C_{21}
2542	4,7	C_{29}	2791	0,76	C_{32}
2797	3,99	C_{32}	2374	0,76	C_{22}

A era digital e suas implicações sociais: Desafios e contribuições

2379	3,91	C ₂₂	635	0,73	C ₄₈ H ₁₈
468	3,57	C ₁₅ H ₉ N ⁺	2510	0,70	C ₂₉
443	3,29	C ₁₆ H ₁₁ O	192	0,70	C ₉₆ H ₂₈ ⁻
2782	2,86	C ₃₂	116	0,58	C ₆₆ H ₂₀ ⁻
167	2,59	C ₁₁₂ H ₂₆ ⁻	473	0,53	C ₁₀ H ₉ N
3188	2,18	C ₆₄ H ₂₀	465	0,50	C ₁₁ H ₇ N
2391	2,04	C ₂₄	521	0,49	C ₁₁ H ₉
817	2,02	C ₃₀ H ₁₈	3096	0,49	C ₃₄
496	1,92	C ₉ H ₈ ⁺	2463	0,45	C ₂₈
639	1,89	C ₉₀ H ₂₄ ⁺	2746	0,45	C ₃₁
470	1,84	C ₁₅ H ₉ N ⁺	2655	0,43	C ₃₀
636	1,81	C ₄₈ H ₁₈ ⁺	2436	0,42	C ₂₇
819	1,63	C ₃₀ H ₁₈ ⁻	337	0,35	C ₁₆ H ₁₂
18	1,51	C ₂₄ H ₁₂	2499	0,33	C ₂₈
284	1,47	C ₂₂ H ₁₂	2638	0,31	C ₃₀
3098	1,42	C ₃₄	3099	0,28	C ₃₄
1895	1,41	C ₃₀ H ₁₈	488	0,27	C ₁₃ H ₉ N ⁺
229	1,35	C ₂₃ H ₁₂ N	339	0,21	C ₁₄ H ₁₆
3226	1,29	C ₃₁ H ₁₅	2626	0,18	C ₃₀
726	1,27	C ₂₈ H ₁₄	3138	0,13	C ₃₄
837	1,25	C ₃₄ H ₂₀	11	0,12	C ₃₂ H ₁₄ ⁻
3151	1,18	C ₃₄	2362	0,08	C ₁₈
176	1,17	C ₈₄ H ₂₄ ⁻	2748	0,05	C ₃₁
2955	1,10	C ₃₃	525	0,04	C ₁₁ H ₈

Fonte: o Autor.

Assim, utilizando a tabela 1 como base, a contribuição de cada categoria para a galáxia Mrk 471 foi de 34,65%, 49,21%, 12,83% e 3,29%, para os desidrogenados, PAHs puros, PANHs e heteroátomos, respectivamente, esses valores são próximos daqueles obtidos por Silva-Ribeiro et al. (2022), a saber: 31.5%, 53.3%, 11.9 % e 3.4% para essa galáxia.

Discussão

A partir da análise realizada, pode-se concluir que a metodologia *offline* utilizada foi satisfatória comparada aos resultados obtidos *online*, a escolha por essa abordagem teve como objetivo um melhor controle sobre a base de dados empregada, a fim de que o estudo fosse mais detalhado e preciso.

Futuramente, pretende-se um desempenho melhor para quebrar a degenerescência do ajuste, diminuindo as imprecisões dos resultados, agrupando os PAHs de acordo com cargas, tipos e tamanhos, além disso, planeja-se aumentar a amostra de galáxias com núcleo ativo e *Starburst* obtidos com o telescópio James Webb/NASA.

Conclusão

Os resultados obtidos até o momento apresentaram êxito em relação ao estudo anterior, ademais, a utilização da comparação no modelo *offline* contribui consideravelmente para a compreensão do fenômeno em questão, proporcionando uma base sólida para as futuras tomadas de decisões do estudo.

Referências

BOERSMA, C., BAUSCHLICHER, C. W., J., RICCA, A., MATTIODA, A. L., CAMI, J., PEETERS, E., SÁNCHEZ DE ARMAS, F., PUERTA SABORIDO, G., HUDGINS, D. M., AND ALLAMANDOLA, L. J. (2014). The NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database Version 2.00: Updated Content, Web Site, and On(Off)line Tools. **The Astrophysical Journal Supplement**, 211(1):8.

A era digital e suas implicações sociais: Desafios e contribuições

BRANDL, B. R., BERNARD-SALAS, J., SPOON, H. W. W., DEVOST, D., SLOAN, G. C., GUILLES, S., WU, Y., HOUCK, J. R., WEEDMAN, D. W., ARMUS, L., APPLETON, P. N., SOIFER, B. T., CHARMANDARIS, V., HAO, L., HIGDON, J. A., MARSHALL, S. J., AND HERTER, T. L. (2006). The Mid-Infrared Properties of Starburst Galaxies from Spitzer-IRS Spectroscopy. **The Astrophysical Journal**, 653(2):1129–1144.

BUCHANAN, C. L., GALLIMORE, J. F., O'DEA, C. P., BAUM, S. A., AXON, D. J., ROBINSON, A., ELITZUR, M., AND ELVIS, M. (2006). Spitzer IRS Spectra of a Large Sample of Seyfert Galaxies: A Variety of Infrared Spectral Energy Distributions in the Local Active Galactic Nucleus Population. **The Astrophysical Journal**, 132(1):401–419.

DEO, R. P., CRENSHAW, D. M., KRAEMER, S. B., DIETRICH, M., ELITZUR, M., TEPLITZ, H., AND TURNER, T. J. (2007). Spitzer IRS Observations of Seyfert 1.8 and 1.9 Galaxies: A Comparison with Seyfert 1 and Seyfert 2. **The Astrophysical Journal**, 671(1):124–135.

HERNÁN-CABALLERO, A. AND HATZIMINOAGLOU, E. (2011). An atlas of mid-infrared spectra of star-forming and active galaxies. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, 414(1):500–511.

SILVA-RIBEIRO, A., KRABBE, A. C., CANELO, C. M., MONTEIRO, A. F., SALES, D. A., HERNANDEZ-JIMENEZ, J. A., AND ANDRADE, D. P. P. (2022). Polycyclic aromatic hydrocarbons and the ionized gas in galaxies with active nuclei. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, 509(1):327–344.

SMITH, J.-D. T., DRAINE, B. T., DALE, D., MOUSTAKAS, J., KENNICUTT JR, R., HELOU, G., ARMUS, L., ROUSSEL, H., SHETH, K., BENDO, G., *et al.* (2007). The mid-infrared spectrum of star-forming galaxies: global properties of polycyclic aromatic hydrocarbon emission. **The Astrophysical Journal**, 656(2):770.

WU, Y., CHARMANDARIS, V., HUANG, J., SPINOGLIO, L., AND TOMMASIN, S. (2009). Spitzer/IRS 5-35 μm Low-resolution Spectroscopy of the 12 μm Seyfert Sample. **The Astrophysical Journal**, 701(1):658–676.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) sob o projeto 2022/11132-4.