# Efeitos da Presença de Poeira na Emissão de Galáxias a Altos e Baixos Redshifts

Mauro César Guimarães

Tese de Doutorado submetida ao Departamento de Astronomia Instituto Astronômico, Geofísico e de Ciências Atmosféricas Universidade de São Paulo

Orientador: Amâncio César Santos Friaça

São Paulo, julho de 2006

# Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

A meus pais, Mauro e Marta, meus irmãos, Simone e Murilo, minha cunhada Elisângela, e minha sobrinha Muriel.  $\Phi \rho o \nu \varepsilon \tilde{\iota} \nu \ \dot{w} \zeta \ \delta \varepsilon \iota \nu \dot{o} \nu \ ' \dot{\epsilon} \nu \theta \tilde{\alpha} \ \mu \dot{\eta} \ \tau \dot{\epsilon} \lambda \eta \ / \ \lambda \dot{\upsilon} \eta \ \varphi \rho o \nu o \tilde{\upsilon} \nu \tau \iota.$ Como é terrível conhecer, quando o conhecimento / não favorece quem o possui. Sófocles (Édipo Rei)

> 'Ανήνυτον 'έργον πράττειν Πηνελόπης τινά εναντίως ιστὸν μεταχειριζομένης. Executar um labor apenas para vê-lo desfeito novamente, tecendo-se ao invés de destecer a Teia de Penélope. Platão (Fédon)

"As coisas estão longe de ser todas tão tangíveis e dizíveis quanto se nos pretenderia fazer crer; a maior parte dos acontecimentos é inexprimível e ocorre num espaço em que nenhuma palavra nunca pisou." Rainer Maria Rilke

> "Existir é tão completamente fora do comum que se a consciência de existir demorasse mais alguns segundos, nós enlouqueceríamos."

> > Clarice Lispector

" Quem conhece a outrem, é ilustrado
Quem conhece a si mesmo, é sábio
O que conquista a outrem, tem força muscular
O que conquista a si mesmo, é poderoso
Quem sabe contentar-se, é rico
Quem obra firme em seu propósito, tem caráter
O que não perde sua interioridade, resiste
O que morre, mas não perece, possui a vida eterna".
Lao-Tsê (Tao Te king)

i

### Resumo

Investigamos o papel da poeira na radiação emergente de galáxias a altos e baixos redshifts com o auxílio de um modelo quimiodinâmico para evolução de galáxias.

O modelo quimiodinâmico foi usado no estudo da formação e evolução de esferóides e inclui uma interface espectrofotométrica para calcular a emissão de sua população estelar. O modelo também fornece a quantidade de poeira no meio interestelar. Incluimos extinção pela poeira da luz da população estelar da galáxia e seu reprocessamento pela poeira em radiação infravermelha. A poeira é distribuída parte no meio interestelar difuso, e parte em nuvens moleculares, onde ocorre a formação estelar.

Estudamos os diversos componentes da poeira interestelar: grandes grãos de silicato e carbono, pequenos grãos de grafite e hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs). Calculamos a extinção e emissão dos grãos de poeira, consideramos equilíbrio térmico para os grandes grãos e flutuações de temperatura dos pequenos grãos de grafite e dos PAHs. Os PAHs foram considerados em detalhe, levando em conta a grande quantidade de resultados experimentais recentes e novos dados sobre *features* de PAHs observados em fontes astronômicas.

Calculamos a emissão de fontes extragalácticas com poeira, enfatizando a porção infravermelha da distribuição espectral de energia, tomando como base o estudo da evolução de uma galáxia elíptica luminosa. Investigamos a evolução da distribuição espectral de energia de radiogaláxias, de Lyman Break Galaxies, ULIRGS, galáxias starburst e elípticas massivas. Exploramos o potencial de se usar linhas de PAH como instrumentos de diagnóstico de evolução de galáxias.

## Abstract

We investigated the role of the dust in the emergent radiation from galaxies at low and high redshift with the aid of a chemodynamical model of evolution of galaxies.

The chemodynamical model is used in the study of the formation and evolution of spheroids, and includes a spectrophotometric interface to calculate the emission from its stellar population. The model also furnishes the amount of the dust in the interstellar medium. It is included the dust extinction of the light arising from the galaxy stellar population and its reprocessing by the dust into infrared radiation. The dust is distributed in part in the diffuse interstellar medium, and in part in molecular clouds, where the star formation occurs.

We have studied the several components of the interestellar dust: big grains of silicate and carbon, small graphite grains, and polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). We calculated the extinction and emission from the dust grains, considering thermal equilibrium for the big grains and temperature fluctuations for the small grains and PAHs. The PAHs have been considered in detail, taking into account the large amount of recent experimental results and novel results on PAH features observed in astronomical sources.

We have calculated the emission of dusty extragalactic sources, focusing on the infrared portion of the SED, based on the study of the evolution of a luminous elliptical. We investigated the evolution of the SED of radiogalaxies, Lyman Break Galaxies, ULIRGs, starburst galaxies and massive ellipticals. We have explored the potential of using PAH lines as a diagonis for the evolution of galaxies.

# ÍNDICE

ÍN	NDIC	CE		iv
LI	[STA	DE F	IGURAS	vii
L]	[STA	DE T	ABELAS	xvi
A	GRA	DECI	MENTOS	xvii
1	INT	FROD	UÇÃO	1
<b>2</b>	O N	AODE	LO QUIMIODINÂMICO	5
	2.1	DESC	RIÇÃO DO MODELO QUIMIODINÂMICO	6
		2.1.1	A Evolução Hidrodinâmica	7
		2.1.2	A Evolução Química	10
		2.1.3	Evolução do Meio Interestelar e Taxa de Formação Estelar	15
		2.1.4	O Vento Galáctico	21
		2.1.5	Abundâncias de Populações Estelares	23
	2.2	PROD	DUÇÃO DE POEIRA NO MODELO QUIMIODINÂMICO	25
		2.2.1	A evolução Química do Meio Interestelar	26
		2.2.2	A Evolução Química da Poeira	28
		2.2.3	Os <i>Yields</i> da Produção da Poeira	29
		2.2.4	A Destruição dos Grãos de Poeira	30

3	A F	POEIR	A INTERESTELAR	33
	3.1	FUNE	DAMENTOS TEÓRICOS	35
	3.2	A CU	RVA DE EXTINÇÃO POR POEIRA	40
		3.2.1	A Extinção e a Densidade Colunar de Hidrogênio	42
		3.2.2	Estrutura Fina na Curva Extinção Interestelar	43
		3.2.3	A Curva de Extinção Extragaláctica	50
	3.3	MOD	ELOS PARA GRÃOS DE POEIRA	56
		3.3.1	Espécies Químicas de Poeira	63
		3.3.2	As Eficiências de Absorção	65
	3.4	A TE	MPERATURA DOS GRÃOS INTERESTELARES	67
	3.5	CÁLC	ULOS DA MASSA DE POEIRA	72
	3.6	O FO	RMATO DOS GRÃOS	73
	3.7	A DIS	TRIBUIÇÃO DE TAMANHO DE GRÃOS	73
		3.7.1	O Método da Regularização de Tikhonov	78
	3.8	MOD	ELOS DE DISTRIBUIÇÃO DE POEIRA	80
		3.8.1	O Modelo de Telas	84
		3.8.2	O Modelo de Nuvens Moleculares	86
4	HII	DROC	ARBONETOS AROMÁTICOS POLICÍCLICOS - PAHs	90
	4.1	A CA	RACTERIZAÇÃO DOS PAHs	93
	4.2	A EFI	CIÊNCIA DE ABSORÇÃO DOS PAHs	97
		4.2.1	O Modelo de Dwek	98
		4.2.2	A Extensão de $Q_{abs}$ para o Ultravioleta-Extremo/Raios-X Moles	101
		4.2.3	O Modelo de Li & Draine	104
		4.2.4	O Nosso Modelo de PAHs	108
	4.3	A ION	NIZAÇÃO DOS PAHs	113
	4.4	FLUT	UAÇÕES DE TEMPERATURA	118
		4.4.1	Equações Básicas	119
		4.4.2	Parâmetros Físicos	122
<b>5</b>	RE	SULTA	ADOS E DISCUSSÃO	125
	5.1	A EV	OLUÇÃO DE GALÁXIAS ELÍPTICAS	127
	5.2	RADI	OGALÁXIAS COM EMISSÃO SUBMILIMÉTRICA	136
	5.3	LYMA	AN BREAK GALAXIES	141

	5.4	GALÁXIAS ULIRGs	144
	5.5	LINHAS DE PAHs COMO SONDAS DE EVOLUÇÃO DE GALÁXIAS	146
6	CON	NCLUSÕES E PERSPECTIVAS	156
Bl	BLIC	OGRAFIA	159
$\mathbf{A}$	MÉI	ΓΟ <b>DO DA REGULARIZAÇÃO DE TIKHONOV</b>	168
	A.1	CRITÉRIO DE REGULARIZAÇÃO: CÁLCULO DE $\alpha$	173
в	PAR	ÂMETROS DAS CURVAS DE EXTINÇÃO OBSERVACIONAIS	175

# LISTA DE FIGURAS

2.1	A evolução das razões de abundâncias para os modelos de zona única. A figura	
	ilustra o efeito do parâmetro de convecção $\alpha_c$ dos modelos de Renzini & Voli	
	(1981) para os yields das estrelas de massa intermediária. Retirado de Friaça &	
	Terlevich 1998	14
2.2	A evolução das taxas de supernovas para o modelo fiducial. As taxas foram	
	normalizadas para a massa inicial da protogaláxia (2 $\times  10^{11} \ {\rm M}_{\odot}).$ Retirado de	
	Friaça & Terlevich 1998	17
2.3	Perfil de velocidade do gás para o modelo fiducial em algumas escalas de tempo	
	de evolução. As linhas são nomeadas de acordo com o tempo (em Gano) que elas	
	representam. O painel de cima permite-nos seguir o estágio global de $inflow$ da	
	evolução do meio interestelar; o painel inferior mostra o vento parcial ( $t=1.2~{\rm e}$	
	1.6 Gano) e os estágios de vento total (t = 2, 5, e 13 Gano). Retirado de Friaça	
	& Terlevich 1998	18
2.4	Evolução da massa estelar (linha sólida) e da fração de gás (linha pontilhada)	
	para o modelo fiducial. Retirado de Friaça & Terlevich 1998. $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	19
2.5	Painel superior: evolução da TFE sobre a região interior a 1kpc (linha sólida	
	superior) e sobre toda a galáxia (linha sólida inferior), bem como a evolução	
	da luminosidade bolométrica da população estelar da galáxia inteira no modelo	
	fiducial (linha pontilhada). Painel inferior: evolução da TFE específica ponde-	
	rada sobre a região interna a 1 kpc (linha superior) e sobre toda a galáxia (linha $% \lambda =0$	
	inferior). Retirado de Friaça & Terlevich 1998	20

2.6	Perfis radiais de $\rm [Fe/H]$ e $\rm [O/H]$ para o gás do modelo fiducial em algumas épocas:	
	0.03Gano (linha sólida), $0.35$ Gano (linha tracejada curta), 1 Gano (linha trace-	
	jada longa), 1.6 Gano (linha pontilhada), 1.9 Gano (pontilhado com traços cur-	
	tos), 4.4 Ganos (pontilhado com traços longos), 13 Ganos (traços curtos e longos).	
	Retirado de Friaça & Terlevich 1998	22
2.7	A evolução do $\rm [Mg/H]$ (curvas sólidas) e do $\rm [Fe/H]$ (curvas pontilhadas) da popu-	
	lação estelar em alguns raios para o modelo fiducial. As curvas superior, média	
	e inferior referem-se aos raios de 100 pc, 1 kpc, e 10 kpc, respectivamente. Note	
	que as curvas de $r$ = 100 pc e $r$ = 1 kpc, tanto para o magnésio [Mg/H] como	
	para o ferro [Fe/H], não se cruzam. Retirado de Friaça & Terlevich 1998. $\ldots$ .	24
2.8	A produção de poeira na galáxia fiducial. Friaça & Dunlop, em peparação. $\ .\ .$	32
3.1	Uma típica curva de extinção representada graficamente com o $E(\lambda-V)/E(B-V)$	
	contra 1/ $\lambda$ ( $\mu m^{-1}$ ). Retirado de Cardelli 1994.	39
3.2	Extinção no comprimento de onda $\lambda,$ relativo a extinção em I = 9000 Å, como	
	uma função do inverso do comprimento de ond a $\lambda^{-1},$ para regiões da Via-Láctea	
	caracterizadas por diferentes valores de $R_V \equiv A_V/{\rm E(B-V)},$ onde $A_B$ é a extinção	
	em B = 4400 Å, $A_V$ é a extinção em V = 5500 Å, e o "reddening" E(B - V)	
	$\equiv~A_B$ - $A_V.~$ Note o rápido aumento na extinção no ultravioleta ( $\lambda~\lesssim~0.2\mu$	
	m) para regiões com $R_V \lesssim$ 4. A normalização por núcleos de hidrogênio é de	
	$A_I/N_H\approx 2.6\times 10^{22} cm^2/H.$ Os features de absorção dos silicatos em 9.7 $\mu{\rm m}$ e as	
	bandas interestelares difusas são vistas com dificuldade. Retirado de Draine (2003).	41
3.3	Bandas interestelares difusas (DIBs) em torno da região entre 5700 Å e 6670 Å.	
	Retirado de Draine (2003).	45
3.4	"Features" em emissão de PAHs no espectro de $5\mu{\rm m}$ a $15\mu{\rm m}$ da nebulosa de	
	reflecção NGC 7023. Retirado de Draine (2003).	46
3.5	A estrutura de 4 moléculas de PAHs. Podemos ver exemplos de sítios de mono	
	H, duo H, trio H, e quartet H. Retirado de Draine (2003)	48
3.6	Curva de extinção ultravioleta para a Grande Nuvem de Magalhães (LMC). A	
	curva média para as estrelas amplamente distribuídas na LMC (curva com os	
	círculos sólidos) é comparada com aquela para a região de 30 Doradus na LMC	
	(curva tracejada) e com a Via-Láctea (curva pontilhada). Retirado de Whittet	
	1992	51

- 3.7  $Q(\lambda)$ , a profundidade óptica normalizada com  $\tau_{\lambda,\beta}^{linha}$  (profundidade óptica calculada usando-se as linhas de emissão observadas  $H_{\alpha}$  e  $H_{\beta}$ , supondo uma razão intrínseca de Balmer  $H_{\alpha}/H_{\beta} = 2.87$  e corrigindo para a extinção da Via-láctea em primeiro plano) para a Via-áctea, a Pequena e a Grande Nuvem de Magalhães. A linha contínua mostra a curva de extinção calculada ao se comparar as razões de linhas de  $H_{\alpha}$  e  $H_{\beta}$  para duas galáxias espirais. Retirado de Kinney et al 1994. 52

- 3.11 Campo de radiação interestelar para a vizinhança solar. A figura foi elaborada com base no artigo de Mezger, Mathis & Panagia 1982.
  70
- 3.12 Distribuição de tamanho de grãos de nosso modelo que melhor ajusta a curva de extinção da estrela Sk 69°210.
  81
- 3.14 Representação esquemática das cinco configurações entre poeira e gás ionizado.
  De cima para baixo elas são: (1) tela de poeira uniforme; (2) tela de poeira 'clumpy'; (3) 'placa' (slab) de espalhamento uniforme; (4) placa de espalhamento 'clumpy'; (5) modelo de poeira interna. Retirado de Calzetti et al (1994). . . . . 82

- 3.15 O excesso de cor  $E_g(B V)$  derivado da razão de linha do hidrogênio  $H\beta/Br\gamma$ como uma função da mesma quantidade derivada da razão  $H\alpha/H\beta$ . As barras de erro representam incertezas de 1  $\sigma$ . Os dados são comparados com três modelos para a distribuição de poeira: uma tela *screen* em primeiro plano; uma camada *'clumpy'* em primeiro plano, com cerca de 10 *'clumps'* ao longo da linha da visada; e uma mistura homogênea de poeira e gás, a qual simula o caso de poeira interna. Para pequenos valores de  $E_g(B - V)$  os modelos são degenerados; entretanto, grandes  $E_g(B - V)$  podem ser explicados apenas por distribuições em primeiro plano (o modelo de tela homogênea e o modelo de camada *clumpy*. Geometrias de poeira *clumpy* com mais do que 10 *clumps* ao longo da linha de visada se localizam entre a linha contínua e a linha tracejada-pontilhada. Retirado de Calzetti (1998). 84
- 4.1 Tipos de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAH's): a) pericondensados (circuncoroneno); b) linear ou catacondensado (pentaceno); c) bifenil. Retirado de Omont 1986, mas seguindo a nomenclatura de Salama et al 1996. . . . . . . 94
- 4.2 Estrutura de alguns PAH's pericondensados e catacondensados. Os átomos de hidrogênio, localizados na periferia, não são representados. Retirado de Salama et al 1996.
  4.3 Estrutura de alguns PAH's contendo entre 18 30 átomos de carbono. Espécies

- 4.7 Eficiência de absorção  $Q_{abs}$  para o aglomerado de PAH's  $(C_{486}H_{54})$  segundo o Modelo de Dwek e a correção proposta por Bakes & Tielens (1994). . . . . . . 102

4.10	Diferença entre as eficiências de absorção $Q_{abs}$ calculadas segundo o Modelo de	
	Dwek (linha tracejada) para o PAH neutro e o nosso modelo de PAH ionizado	
	(linha contínua), para o Coroneno $(C_{24}H_{12})$ e o aglomerado de PAH's $(C_{486}H_{54})$ .	
	Para o Modelo de Dwek aplicamos a correção para o Ultravioleta/Raios-X Moles.	
	Já o nosso modelo segue a prescrição do Modelo de Li & Draine para a elaboração	
	dos <i>features</i> e do contínuo no infravermelho próximo e médio	115
4.11	Diferença entre as eficiências de absorção $Q_{abs}$ de PAHs neutros (linha tracejada)	
	e ionizados (linha contínua), para o nosso modelo. Aqui são mostrados o Coro-	
	neno $(C_{24}H_{12})$ e o aglomerado de PAH's $(C_{486}H_{54})$ . Como podemos observar, a	
	ionização tende a aumentar a emissão das linhas entre 5 $\mu{\rm m}$ e 10 $\mu{\rm m},$ e a diminuir	
	a emissão em 3.3 $\mu$ m	117
4.12	Um dia na vida de um grão interestelar: a temperatura do grão versus o tempo	
	para quatro tamanhos de grãos, com os grãos aquecidos pelo campo de radiação	
	interestelar médio. Grãos com $a\gtrsim 200 {\rm \AA}$ têm uma temperatura quase constante,	
	mas um grão com raio $a \lesssim 100 {\rm \AA}$ mostram aumentos evidentes na temperatura	
	depois de cada absorção de fóton, com resfriamento gradual entre os eventos de	
	absorção de fótons. Retirado de Draine (2003)	120
4.13	Eficiência de absorção do grafite para alguns raios de grão, elaborado com base	
	no artigo de Draine & Lee 1984.	122
5.1	SED da galáxia fiducial desde 3000 Å até 1 mm. No painel da esquerda não	
	utilizamos flutuações de temperatura (note a ausência da linha de 3.3 $\mu$ m); no	
	painel da direita há flutuações de temperatura para os pequenos grãos de grafite	
	e os PAHs (note como suas linhas são mais intensas). A linha tracejada longa	
	indica a contribuição das Nuvens Moleculares para a SED; a linha pontilhada	
	representa a contribuição dos grandes grãos - grafites e silicatos com raio $a >$	
	$100\mu m$ - presentes no meio interestelar (MIE); a linha tracejada curta representa	

os pequenos grãos de grafite no MIE, com flutuações térmicas e temperaturas em torno de poucas centenas de graus Kelvin; a linha fina representa os PAHs do MIE, com flutuações de temperatura, podendo alcançar transientemente 1500 K. 128

Evolução do campo de radiação da galáxia para o modelo fiducial de Nuvens Mo-5.2leculares, onde:  $M_{mc}$  é a massa das Nuvens Moleculares,  $r_{mc}$  é o raio das Nuvens Moleculares, e  $t_{mc}$  é o tempo de confinamento da estrela dentro das Nuvens Moleculares. Para o modelo fiducial de Nuvens Moleculares, temos que  $M_{mc} = 10^6 \, \mathrm{M}_{\odot}$ ,  $r_{mc}=15~{\rm pc},\,t_{mc}=50$ Manos. Observe a diminuição do 'feature" em 3.3  $\mu{\rm m}$ com Evolução do campo de radiação da galáxia para o modelo de Nuvens Moleculares, 5.3onde:  $M_{mc} = 10^6 \,$  M<sub>☉</sub>,  $r_{mc} = 15 \,$  pc,  $t_{mc} = 25 \,$  Manos. A linha tracejada indica a SED da galáxia com o modelo fiducial de Nuvens Moleculares ( $M_{mc} = 10^6 \, \mathrm{M}_{\odot}$ ,  $r_{mc}=15$ pc e $t_{mc}=50$ Manos). Observe a diminuição do 'feature" em 3.3  $\mu{\rm m}$ com o passar do tempo. . . . . . . 131Evolução do campo de radiação da galáxia para o modelo de Nuvens Moleculares, 5.4onde:  $M_{mc} = 10^6 \,\mathrm{M_{\odot}}, r_{mc} = 15 \,\mathrm{pc}, t_{mc} = 15 \,\mathrm{Manos}$ . A linha tracejada indica a SED da galáxia com o modelo fiducial de Nuvens Moleculares ( $M_{mc} = 10^6 \, \mathrm{M}_{\odot}$ ,  $r_{mc} = 15$  pc e  $t_{mc} = 50$  Manos). Observe a diminuição do feature em 3.3  $\mu$ m com o passar do tempo. Influência de  $r_{mc}$  (o raio das nuvens moleculares) sobre a evolução temporal da 5.5Densidade de Fluxo  $(S_{\nu})$  na fase "Early" de nossa galáxia fiducial, na região do espectro entre 4  $\mu$ m e 24  $\mu$ m. A linha contínua indica o nosso modelo fiducial de Nuvens Moleculares ( $M_{mc} = 10^6 \, \mathrm{M}_{\odot}, \, r_{mc} = 15 \, \mathrm{pc}, \, t_{mc} = 50 \, \mathrm{Manos}$ ), enquanto que a linha tracejada representa o modelo com  $r_{mc} = 10$  pc, onde as nuvens moleculares são mais densas. O modelo tracejado alcança intensidades menores devido ao efeito de alto-absorção que ocorre dentro das próprias nuvens, por causa dos PAHs. . . . . . . 135Evolução de  $[L_{850\mu m}/L_{2.2\mu m/(1+z)}]$ . 5.61385.75.8

- linha fina horizontal assinala o limite  $G R \le 1.2$  para o critério de seleção por cor de LBG's. A linha pontilhada se refere ao redshift da LBG DSF2237+116 C2, bem ajustada pelo modelo fiducial (Friaça & Terlevich 1999). Esta LBG possui  $G - R = 1.13. \dots 143$

# LISTA DE TABELAS

2.1	Massa da galáxia e evolução do vento (Friaça & Terlevich 1998)	16
2.2	Abundâncias químicas estelares na época atual (Friaça & Terlevich 1998) $\ .\ .\ .$	23
3.1	Atenuação Média por poeira em Galáxias Locais. Retirado de Calzetti $\left(2001\right)$	55
3.2	Temperatura de Estado Estacionário para os grãos de silicato e grafite no campo	
	de radiação galático local.	71
3.3	Temperatura de Estado Estacionário para os grãos de silicato e grafite submetidos	
	aos campos de radiação da galáxia fiducial do modelo quimiodinâmico de Friaça	
	& Terlevich (1998)	71
4.1	Parâmetros para os perfis de Drude para o modelo de PAHs de Li & Draine	107
4.2	Comparação entre algumas espécies químicas de nossa biblioteca de PAHs com as	
	do Modelo de Li & Draine. Selecionamos os primeiros seis PAHs de Li & Draine	
	que tinham o número de carbonos mais próximos daqueles do nos so modelo $\ .$	108
4.3	Espécies químicas de nossa biblioteca de PAHs	109
5.1	Magnitude, fluxo e cores óptico / submilimétrico de radiogaláxias amostradas da	
	literatura em ordem crescente de redshift. A primeira coluna mostra a identi-	
	ficação da fonte, a segunda coluna o redshift. A terceira coluna ( $K_{linha}$ ) nos dá	
	a magnitude na banda K corrigida por contaminação devido a linhas de emissão.	
	A quarta coluna nos dá a densidade de fluxo em 850 $\mu m,$ enquanto que a última	
	coluna nos dá as cores óptico / submilimétrico.	137

## AGRADECIMENTOS

Uma das primeiras conseqüências práticas deste trabalho é que com ele eu adquiri dívidas de gratidão inumeráveis, as quais demorarei boa parte de minha vida para saldar.

É muito difícil enumerar todas as pessoas que tiveram um impacto, direto ou indireto, na eleboração desta tese. Com certeza estarei cometendo muitas omissões e injustiças, mas a imperfeição faz parte da natureza humana, e eu não poderia deixar de mencionar as seguintes pessoas:

Sou imensamente grato a meus pais, Seu Mauro e Dona Marta, pelo carinho, apoio, paciência e confiança. Não é bem o que vocês imaginavam, mas espero que lhes agrade...

Minha irmãzinha, Simone, continua sendo minha mecenas e patrocinadora. Obrigado pelo apoio, amizade e paciência. Não há como quantificar o quanto você foi importante para a minha caminhada nestes últimos anos, mas lhe sou imensamente grato.

Meu irmãozinho caçula, Murilo, e minha cunhadinha Elisângela. Vocês trouxeram muitas alegrias às nossas vidas, e nos legaram a pequena Muriel, sobrinha querida e afilhada estimada. Obrigado pela amizade e o companheirismo.

Aos meus avós paternos, Luís e Ana, e meus avós maternos, Argemiro e Francisca. Infelizmente eles não estão mais presentes em nosso convívio, e não poderão testemunhar parte da obra, imperfeita é verdade, que eles iniciaram no milênio passado... Mas acho que eles se orgulhariam!

Minha profunda admiração e respeito ao meu orientador, Amâncio Friaça. Obrigado pela paciência com os meus tropeços ao longo destes anos. Que nosso convívio possa ser ainda mais produtivo nos dias vindouros.

O layout desta tese eu devo ao amigo Fernando "froig" Roig. Valeu, Fernando!!

Os grandes amigos Eduardo "Duds" Amores e Ronaldo "Monstro" Savarino, os dois neuróticos esquisitões. E não posso me esquecer da Roseli, que foi louca o suficiente para se casar com o Monstro (ninguém é perfeito...), mas que mesmo assim é uma excelente pessoa. Sem dúvida nenhuma, o IAG não seria o mesmo sem vocês por aqui... Obrigado pelo estímulo e pela companhia!

Os amigos Marcelo "Punk" Yatabe e Francisco "Chiquinho" Moriya, meus companheiros para os momentos de aperto. Sempre que precisei, a ajuda de vocês nunca faltou! Obrigado pelo apoio.

Aos colegas do IAG, Abílio, Adrian, Alan, Alberto, Alessandro, Alexandre Roman, Anderson, Anselmo, Cássio, Cláudio, Diego, Dinah, Dimitri & Aline, Ednílson, Eduardo Cypriano, Elysandra, Fabíola, Gustavo Amaral, Gustavo Rojas, Iranderly "IRAS", José Henrique, Juan, Júlio Klafke, Júlio Camargo, Luciana, Mairan, Marcelo Allen, Marcus Vinícios, Natália, Nélson, Paula, Raimundo, Rodolfo Smiljanic, Rodolfo Valentim e Ulisses. Obrigado por fazerem parte de meu cotidiano nestes últimos anos.

Aos colegas que deixaram o IAG e partiram para outros rumos, obrigado pelo convívio que tivemos.

Minha gratidão às garotas da secretaria, Ana, Carminha, Conceição, Marina e Walquíria; e também às meninas da biblioteca, Célia, Conceição e Magda. Vocês me ajudaram por tantas vezes que eu nem sei como agradecer.

Ao pessoal da informática, Eder, Marco, Patrícia Regina e Ulisses. O apoio de vocês foi muito importante!

Obrigado ao pessoal da portaria e aos vigias do IAG pelo apoio durante as noites de atendimento ao público.

Agradeço ao corpo docente do IAG, por me fornecer o conhecimento e os meios necessários para elaborar esta tese. Sou grato também pela paciência e tolerância com as quais fui tratado durante o mestrado e agora, no meu doutorado.

Não posso me esquecer de meus parentes, amigos e todas as pessoas que fazem parte do meu círculo de convivência, por me possibilitarem suportar esta árdua caminhada até aqui. Em especial do amigo Roberto (*in memorian*), irmão do Chiquinho, que morreu de uma maneira trágica e inesperada, e deixa saudades para quem o conheceu.

Por fim, agradeço ao CNPQ por financiar esta pesquisa e as outras atividades relacionadas ao doutorado.

# 1. INTRODUÇÃO

O presente trabalho é a continuação do trabalho que desenvolvemos no mestrado, junto ao IAG. Como tal, ele materializa-se como uma ampliação, um aprofundamento e uma atualização de nossa atividade precedente.

Atualização, na medida em que alguns resultados recentes, inexistentes à época de nosso mestrado, foram incorporados ao trabalho, como por exemplo novos resultados de laboratório referentes a "*features* dos PAHs, e os novos dados observacionais de galáxias, mediante os resultados dos novos satélites, tais como o ISO e o Spitzer, por exemplo.

Aprofundamento, pois exploramos um pouco mais vários dos assuntos que abordamos no mestrado e desenvolvemos ferramentas com um alcance mais abrangente que as que tínhamos em mãos. A inclusão de nuvens moleculares ao nosso modelo e a rotina que desenvolvemos para calcular a distribuição de tamanho de grãos pelo método da regularização de Tikhonov encaixam-se nesta perspectiva, pois elas aumentaram a confiabilidade de nossos modelos e nos permitirão dar passos mais ousados (e robustos) num futuro próximo.

Ampliação, visto que estudamos em muito mais detalhe as linhas devido aos PAHs e calculamos como utilizar as razões dessas linhas como diagnósticos de evolução de galáxias.

Nos últimos anos, nossa compreensão sobre a formação e a evolução de galáxias tem avançado muito rapidamente, como um resultado de esforços teóricos e observacionais.

Do lado observacional, novos instrumentos (HST, Gemini, Keck, ISO, COBE, SCUBA, etc) têm permitido o estudo direto de populações galácticas em diferentes comprimentos de onda, até redshifts próximos de z = 5 (Granato et al. 2000). Ao combinar as observações no ultravioleta (UV), no óptico (Steidel & Hamilton 1992, Lilly et al. 1996, Madau et al 1996), no infravermelho médio (Rowan-Robinson et al. 1997) e no submilimétrico (Hughes et al. 1998), nós podemos começar a reconstruir a história de formação estelar de galáxias em épocas nas quais a maior parte de suas estrelas estavam se formando.

Do lado teórico, muitos tipos de modelos - entre os quais os modelos semi-analíticos se destacam - vêm sendo empregados na tentativa de se predizer as propriedades observáveis das galáxias (luminosidades, cores, tamanhos, morfologias, etc), para vários redshifts, obtendo sucessos encorajadores (Granato et al. 2000). E é nesse contexto teórico que nosso trabalho se encaixa.

Observações realizadas nas últimas décadas, particularmente no regime infravermelho, vêm demonstrando claramente que a poeira, a qual contém uma grande fração dos elementos pesados ejetados das estrelas, é um dos mais importantes componentes do meio interestelar (ISM). A distribuição espectral de energia (SED) resultante de sistemas estelares é substancialmente modificada pela presença de poeira em suas cercanias e no meio interestelar (ISM, em inglês), e em muitos casos relevantes a SED pode ser radicalmente alterada.

Como evidências da presença e importância da poeira, podemos mencionar os envelopes de poeira circunstelar ao redor de estrelas evoluídas, a poeira difusa na Via-Láctea produzindo a extinção interestelar, a descoberta de emissão infravermelha por galáxias e as galáxias infravermelhas ultra-luminosas (ULIRG's) na 'era IRAS', a poeira que circunda o núcleo em AGNs (um ingrediente essencial do modelo unificado para AGNs), a radiação de fundo cosmológica em infravermelho (COBE), e a descoberta de sítios de formação estelar extremamente ativa em altos redshifts (SCUBA, ISO).

A poeira reprocessa os fótons emitidos por estrelas na região óptica-ultravioleta do espectro eletromagnético, convertendo-os em radiação infravermelha. Este mecanismo é particularmente intenso em galáxias passando por fortes episódios de formação estelar, o qual ocorre preferencialmente dentro de densas nuvens moleculares. De fato, a poeira pode afetar a evolução galáctica porque ela modifica as condições físicas e químicas do ISM. Em particular, a formação estelar é pelo menos favorecida pela presença de poeira, visto que esta protege as nuvens densas da radiação estelar ultravioleta e as mantém em temperaturas baixas o suficiente de modo a permitir o início da instabilidade gravitacional.

Com pouquíssimas excessões, os modelos de formação e evolução de galáxias empregados até agora têm ignorado a extinção e a emissão por poeira interestelar, calculando apenas a emissão estelar direta na faixa do ultravioleta, óptico e infravermelho próximo. Esta situação tem ocorrido em grande parte devido à carência de modelos físicos realísticos para se prever os efeitos da poeira.

Nós mostraremos neste trabalho alguns resultados de nosso modelo auto-consistente para a

absorção e re-emissão de radiação por poeira em galáxias elípticas jovens.O presente modelo estende o modelo quimiodinâmico previamente utilizado para o estudo da evolução de esferóides (Friaça & Terlevich 1998). A extensão referida se dá através do cálculo de extinção por poeira (principalmente na região do ultravioleta) da luz emitida pela população estelar e sua re-emissão na região do infravermelho-submilimétrico.

Nós aplicamos o modelo quimiodinâmico de Friaça & Terlevich (1998) para esferóides jovens juntamente com o cálculo auto-consistente para a absorção e re-emissão de radiação por poeira ao estudo de algumas classes de objetos de interesse astronômico. O modelo quimiodinâmico foi aperfeiçoado pela inclusão no setor de distribuição de poeira, de nuvens moleculares nas regiões de formação estelar. Agora o modelo de poeira possui duas componentes: o meio interestelar difuso, descrito pelo modelo de multi-telas e as nuvens densas, representadas por nuvens esféricas que encerram as estrelas recém-formadas. Além disso, a distribuição do tamanho dos grãos foi calculada de tal forma a levar em conta de maneira consistente a contribuição de cada um dos componentes de poeira para a SED final da galáxia: silicatos, grafites e PAHs.

Utilizamos o modelo para calcular a SED de galáxias "starburst" e "ULIRGs" (*Ultra Lumi*nous InfraRed Galaxies, com  $L_{IR} = L(8-1000 \ \mu) \ge 10^{12} L_{\odot}$ ), com ênfase nas região infravermelha e submilimétrica do espectro. O nosso modelo fiducial, exibido em detalhe, descreve a evolução de uma galáxia elíptica luminosa (luminosidade hoje em dia de  $L_B \approx 0.6L_B^{\nu}$ , onde  $L_B^{\nu}$  é a quebra da função de Schechter descrevendo a função de luminosidade de galáxias). A partir desse modelo fiducial, variando a massa e outras características (como a relação dispersão de velocidade - massa, por exemplo), nós o estendemos a diversas classes de galáxias. Fizemos aplicações a "Lyman Break Galaxies" e a Radiogaláxias. Comparamos nossos resultados com os dados observacionais disponíveis na literatura.

No capítulo 2 descrevemos o modelo quimiodinâmico de Friaça & Terlevich (1998) e o modelo de produção de poeira (Archibald et al. 2002). Descrevemos como os dois modelos foram estruturados e suas principais características.

No capítulo 3 discutimos a extinção e a emissão de radiação por poeira, bem como alguns modelos de poeira. Discutimos como obter parâmetros necessários para se construir um modelo de poeira a partir de estudos da curva de extinção. Descrevemos um pouco a poeira interestelar, seus componentes químicos mais aceitos juntamente com suas características mais marcantes. Discorremos rapidamente sobre a opacidade em baixos e altos redshifts e a curva de extinção na Via-Láctea e nas Nuvens de Magalhães. Por fim, descrevemos a maneira com a qual distribuímos a poeira em nossos modelos. No capítulo 4 fazemos uma descrição mais detalhada dos Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (PAHs). Discutimos dois modelos que descrevem o comportamento desses anéis de carbono, suas diferenças e semelhanças. Descrevemos o modelo de PAH que empregamos e o comportamento dessas partículas quando ionizadas. Logo após, descrevemos o modelo que empregamos para calcular as flutuações de temperatura em pequenos grãos de grafite e em PAH's, baseado no modelo de Purcell (1976) posteriormente aprofundado por Aannestad (1989).

No capítulo 5 apresentamos aplicações para o nosso modelo de absorção e re-emissão de radiação por poeira para galáxias elípticas jovens, com a inclusão de nuvens moleculares, cálculos de espalhamento por grãos de poeira, e um aperfeiçoamento das eficiências de absorção dos PAHs, tanto para o estado neutro quanto para o ionizado. Estudamos os resultados do modelo sobre o campo de radiação do modelo quimiodinâmico, calculando a absorção no ultravioleta / óptico e a SED no infravermelho resultante. Aplicamos o modelo ao estudo das LBG's (*Lyman Break Galaxies*), de Radiogaláxias com emissão no submilimétrico e de galáxias ULIRGs. Também demonstramos como as razões de linhas de PAHs podem ser utilizadas como indicativos de evolução galáctica.

Perspectivas e conclusões estão reunidas no capítulo 6.

4

# 2. O MODELO QUIMIODINÂMICO

O instrumento fundamental neste trabalho é o modelo quimiodinâmico para formação e evolução de galáxias (Friaça & Terlevich 1994,1998). Este modelo acopla um solucionador de evolução química do gás e das estrelas de galáxias a um código hidrodinâmico uni-dimensional. O intuito do código é acompanhar em detalhes a evolução e o comportamento radial do gás e das estrelas durante a formação de galáxias elípticas.

Uma galáxia do modelo possui três componentes: gás, estrelas e um halo de matéria escura. O gás e as estrelas interagem entre si, trocando massa e metais, através da formação estelar e do retorno de gás pelas estrelas devido a ventos estelares, nebulosas planetárias e supernovas.

O modelo quimiodinâmico foi estendido através da inclusão da produção de poeira no seu setor evolução química, permitindo o cálculo da absorção e re-emissão da radiação por poeira da população estelar em galáxias (Guimarães 2001). Incluiu-se três espécies de grãos: grandes grãos de silicato e carbono; pequenos grãos de grafite; e hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (PAHs). Considerou-se a re-emissão pelos grãos em equilíbrio termodinâmico com o campo de radiação (com flutuações de temperatura para os pequenos grãos de grafite e os PAHs). Os grãos de poeira foram distribuídos espacialmente segundo um modelo de múltiplas telas e em nuvens moleculares. Considerou-se a absorção verdadeira e os efeitos de espalhamento causado por eles.

O modelo possibilita o conhecimento do fluxo radial de gás na galáxia elíptica, permitindo traçar os gradientes de metalicidade e, em particular, a formação de um núcleo (*core*) central de alta metalicidade nestas galáxias. Este *core* é formado rápido o suficiente para explicar a abundância de metais inferidas para quasares a altos redshifts.

A taxa de formação estelar e a sua subseqüente realimentação do meio interestelar (MIE) por

estrelas evoluídas regula os episódios de ventos, *outflow* e o *cooling flow*, afetando deste modo a reciclagem do gás e o enriquecimento químico do meio intergaláctico.

Uma importante característica das galáxias-modelo é a presença, durante um estágio de sua evolução, de um complexo padrão de fluxo, com *inflow* em determinadas regiões e *outflow* em outras. Entretanto, todos os modelos de galáxias exibem durante seus estágios avançados de evolução um vento galáctico em seu limite externo e, em seus estágios iniciais, um *inflow* para o núcleo da galáxia.

As características do *inflow* interno podem explicar a luminosidade bolométrica de um quasar hospedado no centro da galáxia, assim como a evolução da luminosidade óptica dos quasares.

O modelo quimiodinâmico permitiu esclarecer diversos tópicos relacionados com a formação e evolução de galáxias elípticas, e com a conexão entre galáxias elípticas jovens e quasares: 1) a formação de um núcleo de alta metalicidade em galáxias elípticas; 2) os gradientes de metalicidade radiais em galáxias elípticas; 3) o enriquecimento químico do meio intra-aglomerado por galáxias elípticas; 4) a evolução da luminosidade de núcleos jovens de galáxias elípticas/quasares.

Pela importância do modelo quimiodinâmico para o nosso trabalho, consideramos oportuno fornecer neste capítulo informações mais detalhadas sobre ele.

#### 2.1. DESCRIÇÃO DO MODELO QUIMIODINÂMICO

Há duas classes de modelos comumente empregados em estudos de evolução de galáxias elípticas: o modelo hidrodinâmico, que tem por objetivo reproduzir a evolução do gás que emite radiação em raios-X; e o modelo de evolução química de zona única, que procura reproduzir a evolução global do gás e das estrelas, fornecendo resultados sobre a abundância de metais. Ambos os modelos, porém, dão apenas uma descrição muito restrita dos primeiros bilhões de anos da galáxia elíptica.

Um problema central nos modelos hidrodinâmicos é que o gás (ou meio interestelar) representa o principal componente da galáxia jovem, o qual não apenas reage à deposição de energia das estrelas como também, via formação estelar, estabelece a população estelar. Além do mais, a deposição de energia, massa e metais no meio interestelar resulta das gerações de estrelas formadas. Deste modo, em um cálculo completo de realimentação estelar para o gás, toda a história de formação estelar deve ser armazenada.

Os modelos de evolução química de zona única não seguem a evolução dinâmica do gás e, em particular, a evolução do vento galáctico, o qual é um ingrediente central em muitos desses modelos. A distribuição do gás e o campo de velocidades não são descritos por esses modelos, visto que a situação é muito mais complexa do que a existência ou não de um vento galáctico. O fluxo de gás não é necessariamente coordenado ao longo da galáxia; pode haver *inflow* em um determinado raio e *outflow* no outro. Além disso, esses modelos não dão informação sobre a distribuição espacial das estrelas formadas e os gradientes de metalicidade.

O modelo quimiodinâmico combina um algorítmo que resolve a evolução química em múltiplas zonas e um código hidrodinâmico unidimensional. Desta forma, evita-se um grande número de incertezas aos quais os modelos de zona única estão sujeitos.

A galáxia elíptica, suposta esférica, é subdividida em diversas zonas esféricas e a evolução hidrodinâmica do seu meio interestelar é calculada. Posteriormente, as equações de evolução química para cada zona são resolvidas levando-se em conta o fluxo do gás.

Friaça & Terlevich (1998) usam uma galáxia com 100 zonas, sendo o limite interno estipulado em 100 parsecs e o limite externo no raio de maré da galáxia. Um total de aproximadamente 100 gerações de estrelas ultrapassando 13 Giga-anos (13 Ganos) é armazenado para os cálculos de evolução química.

A duração das gerações de estrelas aumenta com a idade estelar, variando de  $10^6$  anos para as estrelas formadas recentemente, até aproximadamente  $3 \times 10^8$  anos para as estrelas mais velhas. Os modelos incluem inibição de formação estelar quando a densidade é baixa demais ou quando o gás está em expansão, mas a formação estelar nunca é abruptamente interrompida: ela continuava mesmo após o primeiro vento galáctico ter se estabelecido.

#### 2.1.1. A Evolução Hidrodinâmica

A evolução hidrodinâmica do meio interestelar esfericamente simétrico é obtida pela resolução das equações hidrodinâmicas para a conservação da massa, a conservação do momento e a conservação da energia:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho u) = \alpha \rho_* - \nu \rho, \qquad (2.1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} - \frac{GM}{r^2} - \alpha \frac{\rho_*}{\rho} u, \qquad (2.2)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + u\frac{\partial U}{\partial r} = \frac{p}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + u\frac{\partial \rho}{\partial r}\right) - \Lambda \rho + \alpha \frac{\rho_*}{\rho} \left(U_{inj} + \frac{u^2}{2} - U - \frac{p}{\rho}\right).$$
(2.3)

Das equações acima, temos que  $\rho$  é a densidade do gás,  $\rho_*$  é a densidade de massa estelar, u é a velocidade, p é a pressão, U é a energia interna específica e  $\Lambda$  é a função de resfriamento. A equação de estado  $U = (3/2)p/\rho$  completa o sistema de equações.

A massa total M é a soma de três componentes: a massa de gás  $M_g$ , a massa de estrelas  $M_*$  e a massa do halo escuro (*dark halo*)  $M_h$ . O gás e as estrelas trocam massa através da formação estelar e da perda de massa por parte das estrelas (fenômenos de supernovas, nebulosas planetárias e ventos estelares). O halo escuro não interage com o gás e as estrelas; ele é dado por uma distribuição estática de densidade de massa:

$$\rho_h(r) = \rho_{h0} [1 + (r/r_h)^2]^{-1}, \qquad r \le r_t, \tag{2.4}$$

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

Os modelos iniciam com uma protogaláxia inteiramente gasosa com abundâncias químicas primordiais (Y=0.24, Z=0). O gás bariônico cai para o centro do halo escuro e subseqüentemente forma estrelas.

O processo de formação estelar e a restituição de matéria ao meio interestelar por estrelas em seus estágios finais de evolução são representados pela taxa de formação estelar específica  $\nu$  e pela taxa de retorno do gás  $\alpha$ . Os termos  $\alpha \rho_* \in \nu \rho$  na equação de continuidade conectam a densidade de gás à densidade de massa estelar  $\rho_*$ . É esperado que as estrelas não permaneçam nas zonas nas quais elas foram formadas. Além disso, as posições finais para onde elas se moverem deverão reproduzir o perfil de densidade de uma galáxia realística. Isto é levado em consideração no modelo ao se mover radialmente cada uma das zonas de estrelas formadas recentemente em um tempo de queda-livre para uma posição final tal que a distribuição resultante de massas estelares siga um perfil de King:

$$\rho_*(r) = \rho_{*0} [1 + (r/r_c)^2]^{-3/2}, \qquad r \le r_t, \tag{2.5}$$

onde  $\rho_{*0}$  é a densidade estelar central e  $r_*$  é o raio de núcleo estelar. Tanto a distribuição estelar quanto o halo escuro são truncados no raio comum  $r_t$ , a partir do qual não há formação estelar.

Supõe-se que as estrelas morrem como supernovas (SNe) ou como nebulosas planetárias, momento no qual ocorre a injeção instantânea de massa e energia para o meio interestelar. A energia por unidade de massa injetada no gás pelas estrelas evoluídas pode ser dividida em três componentes, devidas às supernovas de Tipo I (SNe I), supernovas de Tipo II (SNe II) e à perda de massa estelar quiescente (nebulosas planetárias e ventos estelares):

$$U_{inj} = (\alpha_{SNI} E_{SNI} / M_{SNI} + \alpha_{SNII} E_{SNII} / M_{SNII} + \alpha_* U_{inj,*}) / \alpha, \qquad (2.6)$$

onde  $\alpha_{SNI}$  é a taxa específica de retorno de gás por supernovas SNe I,  $\alpha_{SNII}$  é a taxa específica de retorno de gás por supernovas SNe II, e  $\alpha_*$  é a perda de massa estelar quiescente ( $\alpha = \alpha_{SNI} + \alpha_{SNII} + \alpha_*$ ).  $M_{SNI}$  e  $M_{SNII}$  representam a massa ejetada pelas supernovas, enquanto  $E_{SNI}$  e  $E_{SNII}$  representam a energia cinética liberada pelas supernovas. Aqui, SNe I representa apenas a supernova de Tipo Ia, uma vez que as supernovas de Tipo Ib foram incluídas entre as supernovas de Tipo II.

O gás que foi ejetado pelas estrelas na forma de vento ou nebulosa planetária é termalizado à temperatura dada pela dispersão de velocidades das estrelas, isto é,  $U_{inj,*} = (3/2)\sigma_*^2$ , onde  $\sigma_*$ é a dispersão de velocidades estelares em uma dimensão.

A função de resfriamento adotada  $\Lambda(T)$ , definida de tal forma que  $\Lambda(T)\rho^2$  é a taxa de resfriamento por unidade de volume, leva em consideração as variações das abundâncias de gás previstas pelos cálculos de evolução química. Por simplicidade, ao invés de considerar as abundâncias de todos os elementos incluídos nos cálculos de evolução química, a função de resfriamento adotada depende apenas das abundâncias de O e Fe, os quais são os principais dissipadores de calor para  $T > 10^5$  K. No cálculo da função de resfriamento, as abundâncias dos outros elementos que não Fe e O foram escalonadas pela abundância do oxigênio através da relação:

$$y_i = y_{i,P} + (y_{i,\odot} - y_{i,P})y_O/y_{O,\odot},$$
(2.7)

onde  $y_i$  é a abundância numérica do elemento i (a função de resfriamento leva em consideração as emissões do H, He, C, N, O, Ne, Mg, Si, S, Cl, Ar e Fe),  $y_{i,P}$  é a abundância primordial do elemento i (a saber, Y=0.24 e Z=0.0) e  $y_{i,\odot}$  é a abundância solar do elemento i (Grevesse & Anders 1989). O banco de dados atômicos usados na determinação da função de resfriamento provém do código de fotoionização AANGABA (Gruenwald & Viegas 1992). Uma novidade nestes modelos é a auto-consistência entre a hidrodinâmica, a evolução química e a física atômica, visto que a função de resfriamento é calculada com base nas abundâncias químicas atuais obtidas da modelagem quimiodinâmica.

As equações hidrodinâmicas com simetria esférica são resolvidas usando o código de diferenças finitas, sendo o modo Euleriano empregado em Friaça & Terlevich (1998), com os pontos da grade espaçados logaritmicamente. A grade possui entre 150 e 300 células, sendo que a primeira célula possui 50 parsecs de largura. A margem mais interna da célula está localizada em 100 parsecs e a borda externa se localiza a cerca de duas vezes o raio de maré da galáxia. A viscosidade artificial para o tratamento dos choques segue a formulação de Tsharnutter & Winkler (1979) baseado nas equações de Navier-Stokes. Esta forma de viscosidade artificial se anula para uma

contração homóloga.

As condições da borda externa com relação a pressão e densidade são derivadas ao se incluir uma célula externa fictícia, cuja densidade e a pressão são obtidas da extrapolação por lei de potência sobre o raio, ajustada às cinco células reais mais externas. A condição de contorno interior se ajusta em consonância ao fluxo que prevalece localmente: *inflow* ou *outflow*. Durante o *inflow* a velocidade na borda interna é extrapolada das velocidades nas bordas das células mais internas, enquanto que durante o *outflow* a velocidade na margem interior é zero.

As condições iniciais supõem uma protogaláxia inteiramente gasosa  $(M_* = 0)$ , com temperatura de gás em  $T_0 = 10^4$  K, abundâncias químicas primordiais e distribuição de densidade idêntica àquela do halo escuro. Os modelos foram evoluídos até a época presente  $(t_G = 13 \text{ Gano})$ . Uma cosmologia com  $H_0 = 50 \text{ km s}^{-1} \text{ Mpc}^{-1}$  e  $\Omega = 1$  foi adotada no artigo e em nosso trabalho.

#### 2.1.2. A Evolução Química

A evolução química se processa com a formação da estrela fora do meio interestelar, a evolução desta última e a subseqüente ejeção de gás da estrela para o meio interestelar na forma de ventos, nebulosas planetárias e supernovas. O modelo quimiodinâmico usa as formulações convencionais de evolução química utilizadas em modelos clássicos de zona única a fim de facilitar a comparação com os trabalhos anteriores.

Dentro de cada zona esférica na qual a galáxia modelo foi dividida, a evolução das abundâncias de nove espécies químicas (He, C, N, O, Mg, Si, S, Ca Fe) é calculada ao se resolver as equações básicas de evolução química (Talbot & Arnett 1973, Tinsley 1980, Matteucci & Tornambè 1987). O modelo quimiodinâmico não utiliza a aproximação de reciclagem instantânea para o enriquecimento químico: ao invés disso, *delays* para o gás restituído pelas estrelas ao meio interestelar são calculados a partir dos tempos de vida das estrelas na seqüência principal ( $t_m$ , em bilhões de anos), onde

$$\log m = 0.0558 \log^2 t_m - 1.338 \log t_m + 7.764, \tag{2.8}$$

para massas estelares  $m \leq 6.6 \,\mathrm{M}_{\odot}$  (Renzini & Buzzoni 1986), e

$$t_m = 1.2m^{-1.85} + 0.003 \tag{2.9}$$

para  $m > 6.6 \,\mathrm{M}_{\odot}$  (Güsten & Mezger 1983). Supõe-se mistura instantânea com o meio interestelar para o material ejetado pelas estrelas.

A relação da taxa de formação estelar (TFE) com o conteúdo de gás é expressa como  $\psi(r,t) = \nu\rho$ , onde  $\nu$  é a taxa de formação estelar específica (*Gano*<sup>-1</sup>, por exemplo). Como não há teorias

de formação estelar amplamente aceitas, segue-se a formulação de Schmidt (1959, 1963), isto é, uma dependência de  $\nu$  com uma potência da densidade do gás,

$$\nu = \nu_0 (\rho/\rho_0)^{n_{SF}}.$$
(2.10)

Para  $n_{SF} = 0$  temos o modelo linear de Schmidt ( $\psi \propto \rho$ ), enquanto  $n_{SF} = 1$  implica o modelo quadrático de Schmidt ( $\psi \propto \rho^2$ ). Não se espera que a TFE siga estritamente uma lei de potência com a densidade; o parâmetro  $n_{SF}$  apenas descreve a não-linearidade da dependência da TFE com o conteúdo de gás. Entretanto, de acordo com Friaça & Terlevich (1998), há boas razões teóricas e observacionais para se acreditar que a TFE depende ao menos linearmente do conteúdo de gás.

Os modelos utilizados em nosso trabalho possuem a denominada TFE padrão ('standard'), a qual possui  $n_{SF} = 1/2$ , o que significa que o tempo de escala para formação estelar é proporcional ao tempo dinâmico local (Larson 1974).

A normalização da TFE na equação 2.10 foi tomada com  $\nu_0 = 10 \text{ Gano}^{-1}$ , em acordo com a escala de tempo de formação estelar de ~  $10^8$  anos exigida pelos modelos de evolução química a fim de reproduzir as razões supersolares de [Mg/Fe] encontradas em galáxias elípticas gigantes (Matteucci & Tornambé 1987; Matteucci 1992).

O valor fiducial para a densidade de gás  $\rho_0$  é adotado como sendo a densidade média inicial de gás dentro do raio de *core* do halo. Inclui-se a inibição da formação estelar quando o gás está em expansão ( $\nabla . u > 0$ ) ou quando o resfriamento é ineficiente (ou seja, quando o tempo de resfriamento  $t_{coo} = (3/2)k_BT/\mu m_H \Lambda(T)\rho$  é maior que o tempo dinâmico  $t_{dyn} = (3\pi/16 G \rho)^{1/2})$ . Especificamente,  $\nu$  como definido na equação 2.10 é multiplicado pelos fatores de inibição (1 +  $t_{dyn} \max(0, \nabla . u))^{-1}$  e  $(1 + t_{coo}/t_{dyn})^{-1}$ .

A taxa de formação estelar (por unidade de volume) para estrelas de massa m é dada por  $\psi(r,t)\phi(m)$ , onde  $\phi(m)$  é a função de massa inicial (FMI) por número. Supõe-se que a FMI é independente do tempo e da posição espacial, sendo representada por  $\phi(m) = C m^{(1+x)}$ , com x = 1.35 (a FMI de Salpeter), normalizada sobre a faixa de massas  $m = 0.1 - 100 \text{ M}_{\odot}$ .

A restituição de massa para o meio interestelar depende da massa estelar inicial. Estrelas na faixa de massa de  $0.1 < m/M_{\odot} < 8$  finalizam suas vidas como nebulosas planetárias e deixam como remanescentes anãs-brancas de hélio ou C-O com massas estelares menores que 1.4 M<sub> $\odot$ </sub>. Estrelas com massa acima de 8 M<sub> $\odot$ </sub> finalizam suas vidas como supernovas de Tipo II (SNe II). Nenhuma distinção é feita entre SNe II e a supernova Tipo Ib (SNe Ib), sendo que a SNe Ib é considerada como uma SNe II a qual perdeu seu envelope de hidrogênio antes da explosão.

Supõe-se que supernovas Tipo Ia (SNe Ia) se originam de sistemas binários de massa total na

faixa de  $3 < m/M_{\odot} < 16$ , onde a estrela principal evolui até se tornar uma anã-branca C-O. A transferência de massa da estrela secundária (a qual evolui mais lentamente) aciona a deflagração de carbono sobre a estrela primária quando esta última alcança a massa de Chandrasekhar (Whelan & Iben 1973). O cálculo da taxa de SNe Ia segue de Greggio & Renzini (1983). Um importante parâmetro neste cenário é a variável  $A_{SNI}$ , a fração de massa da FMI entre  $3 < m/M_{\odot} < 16$  que vai para sistemas binários dando origem a SNe Ia. Seguindo Matteucci & Tornambé (1987) e Matteucci (1992), Friaça & Terlevich (1998) adotam  $A_{SNI} = 0.1$ . Este valor pode ser verificado a posteriori ao se comparar as taxas de SNe Ia preditas e observadas em galáxias elípticas.

As prescrições de nucleossíntese para os envelopes de estrelas de massa intermediária ( $0.8 < m/M_{\odot} < 8$ ) são tomados de Renzini & Voli (1981) (com os parâmetros  $\alpha_c = 0, \eta = 0.33$ ). Também considera-se a produção de N secundário via ciclo CNO através da queima em camadas dos envelopes de estrelas massivas ( $m > 8 M_{\odot}$ ) seguindo o caso B de Talbot & Arnett (1973) (100% de conversão em N dos envelopes de C e O). Para estrelas na faixa de massa de  $8-10 M_{\odot}$ , as prescrições de nucleossíntese são aquelas sugeridas por Hillebrandt (1982).

O modelo quimiodinâmico utiliza *yields* dependentes da metalicidade para SNe II, SNe Ia, e o meio interestelar. Para as SNe II, ele utiliza os *yields* dependentes da metalicidade retirados de Woosley & Weaver (1995), os quais abarcam estrelas com massas M = 12, 13, 15, 18, 20, 22, 25, 30, 35 e 40 M<sub> $\odot$ </sub>, e metalicidades Z/Z<sub> $\odot$ </sub> = 0, 10<sup>-4</sup>, 10<sup>-2</sup>, 10<sup>-1</sup> e 1. Os *yields* da SNIa resultantes de anãs brancas com a massa de Chandrasekhar foram retirados de Iwamoto et al. (1999): seus modelos W7 (estrela progenitora de metalicidade inicial Z=Z<sub> $\odot$ </sub>) e W70 (metalicidade inicial Z=0). Os *yields* para o meio interestelar (0.8 - 8 M<sub> $\odot$ </sub>), com metalicidades iniciais Z=0.001, 0.004, 0.008, 0.02 e 0.4, são os de van den Hoek & Groenewegen (1997) (o caso  $\eta_{AGB} = 4$  deles).

Para os yields de SNe II cujos progenitores possuem massa entre 10 e 40 M<sub> $\odot$ </sub>, eles usaram um valor para a reação  ${}^{12}C(\alpha, \gamma){}^{16}O$  que é 1.7 vezes maior do que o valor de Caughlan & Fowler (1988). Os resultados dos cálculos de nucleossíntese para estrelas mais massivas que  $\approx 18 \, M_{\odot}$ dependem criticamente da escolha de valores desta taxa de reação. Desde que Woosley & Weaver (1995) não calcularam modelos para estrelas progenitoras de SNe II mais massivas do que 40  $M_{\odot}$ , extrapola-se seus *yields* para a faixa de massas compreendidas entre 40-100  $M_{\odot}$ , baseados na tendência dos *yields* com o aumento da massa derivados do trabalho de Woosley & Weaver (1986).

Para massas acima de 30  $M_{\odot}$ , os resultados também dependem da energia cinética suposta no infinito  $(KE_{\infty})$  para o pistão da explosão. Se  $KE_{\infty}$  não é grande o suficiente, há algum retorno (*back fall*) de material, e um remanescente mais massivo (um buraco negro) é formado, aprisionando os produtos da nucleossíntese e reduzindo os *yields*, em especial aqueles do ferro. Grandes valores de  $KE_{\infty}$  evitam o retorno de material e levam a uma quantidade maior de ferro ejetado.

A seqüência A dos modelos de Woosley & Weaver possui um  $KE_{\infty}$  quase constante, de forma que ocorre retorno de material, um buraco negro é formado e há pouca ejeção de ferro. Friaça & Terlevich (1998) usam a seqüência com  $KE_{\infty}$  aumentando com a massa (modelos S30B, S35C and S40C de Woosley & Weaver), resultando em grandes *yields* para o ferro e em remanescentes menores.

Adota-se a relação (Massa Inicial / Massa Final) dada por Iben & Renzini (1983) para as anãs-brancas remanescentes de estrelas desacompanhadas (excluem-se os sistemas binários) com massa inicial na faixa de  $0.1 < m/M_{\odot} < 8$ . Já as estrelas mais massivas que  $8 M_{\odot}$ , as quais explodem em SNe II (ou SNe Ib), deixam uma estrela de nêutrons de 1.4 M<sub> $\odot$ </sub> como remanescente. Supõe-se também que SNe Ia não deixam remanescentes.

De modo a calibrar o setor de evolução química do modelo quimiodinâmico, consideramos um modelo de zona única de referência, representando uma galáxia inicialmente gasosa com massa  $M_G = 10^{12}$  M<sub>☉</sub> e sem halo escuro. Adota-se uma lei de formação estelar linear, ou seja,  $\nu_{SF} = \nu_0 = constante$ . Seguindo a relação  $\nu = 8.6(M_G/10^{12} M_{\odot})^{-0.115}$  Gano<sup>-1</sup> (onde 1 Gano = 1 bilhão de anos) derivado por Arimoto & Yoshii (1987),  $\nu_0$  é adotado como sendo 9 Gano<sup>-1</sup>. O modelo pertence à classe de modelos com vento galáctico impelido por supernovas, nos quais um vento galáctico é estabelecido em um tempo  $t_{gw}$ . Neste tempo, o gás é varrido da galáxia e a formação estelar é desligada para sempre. A condição para o início do vento galáctico é que  $E_{th} > -\Omega_G$ , onde  $E_{th}$  é o conteúdo térmico dos remanescentes de supernovas da galáxia e  $\Omega_G$  é a energia de ligação gravitacional da galáxia. A energia térmica de cada remanescente individual de supernova evolui de acordo com Cox (1972), sendo que  $\Omega_G$  é dado por  $\Omega_G = -1.66 \times 10^{60} (M_G/10^{12} \, M_{\odot})^{1.45}$  (Saito 1979). Este modelo dá  $t_{gw} = 0.81$  Gano, em bom acordo com  $t_{qw} = 1.01$  Gano do modelo A2 de Matteucci (1992).

A Figura 2.1 nos mostra a evolução das abundancias de C, N, O, Mg e Fe para o modelo de referência. A fim de ilustrar o efeito do parâmetro de convecção  $\alpha_c$  dos modelos de Renzini & Voli (1981) para os *yields* das estrelas de massas intermediárias ( $0.8 < M < 8 M_{\odot}$ ), são mostradas simulações para o caso deles ( $\alpha_c = 0, \eta = 0.33$ ) e para o caso ( $\alpha_c = 1.5, \eta = 0.33$ ). O efeito de  $\alpha_c$  pode ser visto na evolução de [N/H] (as razões entre colchetes denotam a razão das abundâncias de massa relativas aos seus valores solares, ou seja, [X/H]=(X/H)/(X/H)\_{\odot}).



**Figura 2.1** A evolução das razões de abundâncias para os modelos de zona única. A figura ilustra o efeito do parâmetro de convecção  $\alpha_c$  dos modelos de Renzini & Voli (1981) para os *yields* das estrelas de massa intermediária. Retirado de Friaça & Terlevich 1998.

Para  $\alpha_c = 0$ , há apenas produção secundária de N, enquanto que para  $\alpha_c = 1.5$  há alguma produção primária de N devido à queima na base do envelope estelar. Antes de  $3 \times 10^7$  anos, há apenas produção secundária de N por estrelas de alta massa e o ritmo de enriquecimento de N é aproximadamente proporcional à metalicidade do gás. Para tempos posteriores, o *yield* das estrelas com m < 8 M<sub>o</sub> é importante, e no caso em que  $\alpha_c = 0$ , também as estrelas de massas intermediárias produzem apenas N secundário, de modo que [N/H] possui uma evolução suave até algumas vezes  $10^8$  anos, quando ele alcança valores altamente supersolares. Entretanto, no caso  $\alpha_c = 1.5$ , [N/H] mostra um aumento acentuado para  $\sim 3 \times 10^7$  anos devido à primeira ejeção de N primário por estrelas de massa intermediária. Note-se também o rápido aumento nas abundâncias de elementos- $\alpha$  (O, Mg) ejetados por SNe II, a qual alcança abundâncias solares em  $\sim 10^8$  anos. Por contraste, o enriquecimento do Fe é atrasado com respeito àquele do O ([Fe/H] torna-se solar em  $\sim 3 \times 10^8$  anos) desde que o Fe é produzido principalmente em SNe Ia, a qual possui progenitores de vida longa.

#### 2.1.3. Evolução do Meio Interestelar e Taxa de Formação Estelar

Friaça & Terlevich (1998) constroem uma seqüência de modelos de galáxias parametrizadas de acordo com a massa luminosa total (inicial) dentro do raio de maré,  $M_G = M_g + M_*$  (a massa luminosa da galáxia abrange os componentes estelares e gasosos, os quais são facilmente observáveis, principalmente nas faixas ópticas e de raios-X, respectivamente). Os modelos são também caracterizados pela razão do halo com a massa luminosa (inicial),  $M_h/M_G$ , o raio de *core* do halo,  $r_h$ , e o raio de maré da galáxia,  $r_t$  (ver equação 2.4).

Eles adotam  $M_h/M_G = 6$ , o que corresponde a um  $\Omega_b = 0.023$  (densidade de matéria bariônica) para a densidade total de matéria utilizada ( $\Omega_M = 0.3$ ), valores estes consistentes com aqueles encontrados pela equipe do WMAP (Spergel et al. 2003). O parâmetro de truncamento do halo escuro ( $r_t/r_h$ ) possui efeitos significativos sobre o desenvolvimento do vento gaáctico e sobre os "outflows".

A grade de simulações cobre  $M_G$  entre  $10^{11}$  e  $5 \times 10^{12}$  M<sub>☉</sub>, e  $r_h$  na faixa de 2.5 – 15 kpc. O raio de maré adotado é  $r_t = 28r_h$ . A escolha das relações  $r_h - r_t - M_G$  é baseada nas leis de escala de Sarazin & White (1987), cujo modelo de uma galáxia elíptica possui uma distribuição de halo escuro (equação 2.4) mais uma distribuição estelar dada por um perfil de King (equação 2.5). A densidade estelar central  $\rho_{*0}$  e o raio de *core* estelar  $r_c$  na equação 2.5 são relacionados com a dispersão de velocidade central  $\sigma_*$  através da condição de Virial  $4\pi G \rho_{*0} r_c = 9\sigma_*^2$ . Além disso, os modelos de galáxias seguem uma relação de Faber-Jackson,  $\sigma_* = 200(L_B/L_B^*)^{1/4}$  km s<sup>-1</sup> (Terlevich 1992), com  $L_B$  relacionada a  $M_G$  através da relação  $[M/L_B] = 10$ , a razão massa-luminosidade típica para uma galáxia com  $L^*$ , ou de maneira equivalente,  $\sigma_* = 150.5(M/10^{11} \,\mathrm{M}_{\odot})^{1/4}$  km s<sup>-1</sup>.

O chamado **modelo fiducial** possui  $M_G = 2 \times 10^{11}$  M<sub> $\odot$ </sub> e uma taxa de formação estelar (TFE) padrão ( $n_{SF} = 1/2$ ). Devido aos episódios de *inflow* e vento galáctico que ocorrem durante a evolução da galáxia, a massa luminosa  $M_G(t_G)$  da galáxia no tempo atual (em  $t_G = 13$  Gano) é ~ 20% maior do que a massa luminosa inicial  $M_G$ . O modelo fiducial possui  $L_B = 2.4 \times 10^{10}$  $L_{\odot}$  hoje (t=13 Ganos), ou seja, um pouco menor que a luminosidade de corte da função de luminosidade de Schechter ( $L_B^* = 3.7 \times 10^{10}$   $L_{\odot}$ ), e, portanto, é representativo da população de galáxias elípticas.

Na primeira aplicação deste modelo, Friaça & Terlevich (1998) investigaram a relação entre galáxias elípticas jovens e atividade QSO. A faixa de massas relevante para elípticas de alta massa hospedando um quasar luminoso é de  $M_G = 10^{11} - 2 \times 10^{12} \, M_{\odot}$ . Neste caso, a massa estelar da galáxia é ~ 20% maior do que  $M_G$ . A normalização da taxa de formação estelar
(TFE) era adotada como  $\nu = 10 \text{ Ganos}^{-1}$  de tal modo a reproduzir a razão [Mg/Fe] suprasolar de elípticas gigantes. Em trabalhos posteriores, investigando sistemas com massas presumivelmente menores, tais como LBGs (*Lyman Break Galaxies*) e BCS (*Blue Core Spheroids*),  $M_G$  foi diminuída para  $M_G = 5 \times 10^9 \text{ M}_{\odot}$ (Friaça & Terlevich 1999, 2001).

A Tabela 2.1 apresenta a evolução do gás e dos componentes estelares. A primeira coluna identifica o modelo: o número indica  $M_G$ , a massa inicial da protogaláxia em unidades de  $10^{11}$  $M_{\odot}$ ; o número entre parêntesis é  $n_{SF}$  para os modelos nos quais  $n_{SF} \neq 1/2$ . A coluna (2) nos dá  $r_h$ . As colunas (3) e (4) nos mostram a massa atual (em  $t_G = 13$  Gano) em gás e estrelas da galáxia. As colunas seguintes exibem as características do vento galáctico, o qual aparece em todos os modelos:  $t_w$  é o tempo de início do vento galáctico;  $t_{w,e}$  é o fim da fase de vento inicial, definida quando a massa de gás é reduzida a cerca de 10% de sua quantidade em  $t_w$ ;  $M_*(t_w)$  e  $M_g(t_w)$  são a massa de estrelas e a massa de gás na galáxia em  $t_w$ ;  $M_w$  e  $M_{w,Fe}$  representam a massa total e a massa em ferro ejetada pelo vento até  $t_G$ .

Modelo	$r_h$ (kpc)	$M_*(t_G)$ (10 <sup>11</sup> M <sub>☉</sub> )	$M_g(t_G)$ (M <sub>☉</sub> )	$t_w$ (Gano)	$t_{w,e}$ (Gano)	$M_*(t_w)$ (10 <sup>11</sup> M <sub>☉</sub> )	$M_g(t_w)$ (10 <sup>11</sup> M <sub>☉</sub> )	$^{M_w}_{(10^{11} \mathrm{M_{\odot}})}$	${}^{M_{w,Fe}}_{(10^8 \mathrm{M_{\odot}})}$
1	2.5	1.32	$1.70 \times 10^{7}$	1.09	1.49	1.39	0.58	0.72	2.74
2	3.5	2.38	$4.73 \times 10^{7}$	1.17	1.60	2.53	1.28	1.42	4.93
5	5	5.90	$2.76 \times 10^{8}$	1.25	1.99	6.05	3.36	4.22	12.7
10	7	11.6	$2.06 \times 10^{9}$	1.51	2.68	11.5	6.73	6.45	25.1
20	10	23.7	$2.77 \times 10^{10}$	1.65	3.56	22.0	14.0	12.0	31.6
50	15	66.4	$2.14 \times 10^{11}$	2.22	5.40	59.3	34.0	18.2	49.8
2(1/3)	3.5	2.83	$5.23 \times 10^{7}$	1.32	1.69	3.03	0.94	1.10	5.60
2(0)	3.5	1.33	$1.49 \times 10^{7}$	0.044	0.373	0.65	1.34	0.68	3.96

Tabela 2.1 Massa da galáxia e evolução do vento (Friaça & Terlevich 1998).

Consideramos a seguir a evolução da galáxia fiducial. Desde que as condições iniciais estão fora do equilíbrio (o gás é inicialmente frio), ao se iniciar os cálculos o gás cai para o centro da galáxia e é comprimido, dando origem a choques que aquecem rapidamente o gás no *core* até aproximadamente a temperatura de virial do sistema ( $T \sim 10^7$  K). Uma formação estelar altamente eficiente está ocorrendo através da galáxia como um todo e rapidamente dá origem a uma população estelar jovem. As supernovas de Tipo II aparecem depois de  $3.2 \times 10^6$  yr com a explosão das primeiras estrelas massivas e, logo após, o aquecimento por supernovas domina a energética do meio interestelar.

A Figura 2.2 nos mostra a evolução da taxa de supernovas sobre a galáxia como um todo para o modelo fiducial. Seguindo o violento surto de formação estelar inicial, as primeiras SNe II surgem em  $3.2 \times 10^6$  anos. A taxa de SNe II alcança um máximo de 155 SNe (100 anos)<sup>-1</sup>  $(10^{11} M_{\odot})^{-1}$  em  $3.9 \times 10^8$  anos e decresce rapidamente depois de 1 Gano. O máximo principal



**Figura 2.2** A evolução das taxas de supernovas para o modelo fiducial. As taxas foram normalizadas para a massa inicial da protogaláxia  $(2 \times 10^{11} M_{\odot})$ . Retirado de Friaça & Terlevich 1998.

da taxa de SNe II reflete a formação estelar em curso durante os primeiros Ganos da galáxia. A taxa de SNe II presente é desprezível  $(3.8 \times 10^{-4} \text{ SNe II } (100 \text{ anos})^{-1} (10^{11} \text{ M}_{\odot})^{-1} \text{ em } 13$ Ganos).

As SNe II são seguidas pelas SNe I, as quais aparecem em  $2.9 \times 10^7$  anos e alcançam uma taxa máxima de 19 SNe I (100 anos)<sup>-1</sup> ( $10^{11} M_{\odot}$ )<sup>-1</sup> em 7.6 × 10<sup>8</sup> anos. Apenas a taxa de SNe I é significante nas fases evolucionárias posteriores (t > 2 Ganos) da galáxia elíptica, quando a taxa de formação estelar cai e a taxa de SNe II é drasticamente reduzida.

A evolução do perfil da velocidade do gás é mostrado na Figura 2.3.

Três estágios podem ser dintingüidos na evolução do meio interestelar da galáxia. O primeiro estágio é um *inflow global* extendendo-se desde o limite interno do modelo até o raio de maré. No início deste estágio, o *inflow* se origina do assentamento do gás no poço potencial do halo escuro. Quando a densidade central aumentou o suficiente para permitir que perdas radiativas sejam importantes, um vigoroso *cooling flow* é estabelecido na região interior a 1kpc. Logo após, depois que as primeiras supernovas aparecem, o aquecimento por supernovas direciona um vento



**Figura 2.3** Perfil de velocidade do gás para o modelo fiducial em algumas escalas de tempo de evolução. As linhas são nomeadas de acordo com o tempo (em Gano) que elas representam. O painel de cima permite-nos seguir o estágio global de *inflow* da evolução do meio interestelar; o painel inferior mostra o vento parcial (t = 1.2 e 1.6 Gano) e os estágios de vento total (t = 2, 5, e 13 Gano). Retirado de Friaça & Terlevich 1998.

em raios intermediários, separando o '*inflow* global' em um *cooling flow* interior que alimenta o núcleo da galáxia, e em um '*inflow* externo' caindo para a galáxia. O vento avança em direção ao raio de maré da galáxia.

O segundo estágio começa quando o vento alcança o raio de maré da galáxia, em  $t_w = 1.17$ Gano. Este estágio se caracteriza por um 'vento parcial', ou seja, um cooling flow nas regiões internas da galáxia e um vento nas regiões externas.  $t_w$  é identificado com o começo do vento galáctico, o qual causa uma quase completa perda do meio interestelar. Quanto mais gás é consumido pela formação estelar e expelido pelo vento, mais a região de estagnação separando o cooling flow interno e o vento se move para o interior, e em 1.8 Gano o cooling flow alcançou a fronteira interior a 100 pc, de forma que um vento é estabelecido de 100 pc até o raio de maré, caracterizando o terceiro estágio, o estágio de vento total. O vento no raio de maré alcança uma velocidade de pico de 1860 km s<sup>-1</sup> em 2 Ganos, e decresce posteriormente, conforme o aquecimento por supernovas diminui devido ao decrescimento na taxa de SNe I.

A Figura 2.4 mostra a evolução da massa estelar e a fração de gás para a galáxia fiducial:



**Figura 2.4** Evolução da massa estelar (linha sólida) e da fração de gás (linha pontilhada) para o modelo fiducial. Retirado de Friaça & Terlevich 1998.

O gás é o principal componente da galáxia durante o primeiro Gano de evolução da galáxia elíptica. Ele é transformado em estrelas por uma alta taxa de formação estelar, mas o consumo de gás não é completo desde que um *'infall'* contínuo de gás supre constantemente a galáxia com gás. O aumento da massa da galáxia devido ao *infall* de gás continua até o início do vento galáctico, em  $t_w = 1.17$  Gano. Neste tempo, a massa da galáxia quase que dobrou  $(M_G(t_w) = 3.8 \times 10^{11} \text{ M}_{\odot})$ , e aproximadamente um terço da massa da galáxia está na forma de gás. O vento galáctico que se segue é tão massivo que quase todo o gás remanescente é removido da galáxia.

O gás expelido com o vento galáctico representa uma fração significativa da massa da galáxia  $(1.3 \times 10^{11} \text{ M}_{\odot} \text{ de } t_w \text{ até } 13 \text{ Gano})$ . A remoção de gás é muito rápida: 50% (90%) do gás é expelido em  $2.3 \times 10^8$  anos ( $4.3 \times 10^8$  anos) depois de  $t_w$ . O resultado líquido do *inflow* inicial, vento galáctico e perdas estelares é que a massa da galáxia na época atual é ~ 20 % maior do que a massa protogaláctica inicial.

A Figura 2.5 (painel superior) mostra a evolução da taxa de formação estelar total (TFE) sobre toda a galáxia e para a região interior a 1kpc, para a galáxia fiducial. A TFE total possuiu inicialmente um valor de 230  $M_{\odot}$  ano<sup>-1</sup>. Quanto mais gás do *inflow* inicial cai dentro



**Figura 2.5** Painel superior: evolução da TFE sobre a região interior a 1kpc (linha sólida superior) e sobre toda a galáxia (linha sólida inferior), bem como a evolução da luminosidade bolométrica da população estelar da galáxia inteira no modelo fiducial (linha pontilhada). Painel inferior: evolução da TFE específica ponderada sobre a região interna a 1kpc (linha superior) e sobre toda a galáxia (linha inferior). Retirado de Friaça & Terlevich 1998.

da galáxia, mais o gás é comprimido reduzindo desta forma a escala de tempo da formação estelar. Conseqüentemente, a TFE eleva-se a um máximo de 480  $M_{\odot}$  ano<sup>-1</sup> em 6 × 10<sup>8</sup> anos. Durante o primeiro Gano, a TFE está tipicamente em torno de 300  $M_{\odot}$  ano<sup>-1</sup>. Em ~ 1 Gano, a depleção do gás pela formação estelar reduz a TFE abaixo de 100  $M_{\odot}$  yr<sup>-1</sup>. O início do vento galáctico em 1.17 Gano leva a uma drástica redução da TFE para ~ 10<sup>-2</sup>  $M_{\odot}$  ano<sup>-1</sup> em menos do que 0.5 Gano. Enquanto a TFE total mostra níveis mais ou menos constantes durante o primeiro Gano de evolução, a TFE interior (dentro do raio de 1 kpc) mostra variações dramáticas, devido às curtas escalas de tempo para o reabastecimento do gás e inibição da formação estelar. Ela varia de 0.9  $M_{\odot}$  ano<sup>-1</sup> em t = 0 para um máximo de 70  $M_{\odot}$  ano<sup>-1</sup> em 7 × 10<sup>8</sup> anos, com alguns breves episódios de 'starburst'. Do ponto de vista observacional, a TFE interior é talvez mais interessante do que a TFE total porque apenas as regiões internas da galáxia, devido aos seus brilhos superficiais intensos, podem ter atividade de formação estelar detectável em altos redshifts. A evolução da luminosidade bolométrica das populações estelares da galáxia fiducial como um todo (painel superior da Figura 2.5) foi calculada usando-se os modelos de evolução espectrofotométrica de Bruzual & Charlot (1993). Inicialmente, a luminosidade aumenta estavelmente enquanto uma população estelar jovem está sendo estabelecida. Em  $3.3 \times 10^8$  anos, a população estelar jovem alcança  $10^{11}$  M<sub> $\odot$ </sub>. Uma luminosidade máxima de  $2.3 \times 10^{12}$  L<sub> $\odot$ </sub> é alcançada em  $6.1 \times 10^8$  anos, quando a massa estelar é de  $2 \times 10^{11}$  M<sub> $\odot$ </sub>. O pico em luminosidade segue de perto o máximo em TFE, desde que neste tempo a contribuição principal para a luminosidade se origina das estrelas de alta massa. A TFE mantém aproximadamente os mesmos níveis durante o primeiro Gano da galáxia.

O painel inferior da Figura 2.5 mostra a evolução da TFE específica média dentro da região interior a 1kpc e sobre toda a galáxia. As escalas de tempo para formação estelar na região interna ( $10^8$  anos) são muito menores do que as escalas para a galáxia como um todo (1 Gano).

A TFE específica média para a galáxia como um todo está entre 1 e 3  $\text{Gano}^{-1}$  durante o primeiro Gano, enquanto que para a região interna a 1kpc (a qual sofre um violento 'starburst') ela é de ~ 30  $\text{Gano}^{-1}$  durante o mesmo primeiro Gano.

#### 2.1.4. O Vento Galáctico

Nos estágios iniciais de evolução da galáxia, o conteúdo de gás é sempre alto. O gás é transformado em estrelas por uma alta taxa de formação estelar, mas o o gás nunca é completamente consumido por causa do 'infall' global, o qual supre constantemente a galáxia com gás. O aumento de massa devido ao 'infall' continua até o início do vento galáctico, o qual remove quase todo o gás da galáxia.

Como nos modelos clássicos de ventos impulsionados por supernovas, o início do vento galáctico ocorre mais tardiamente para as galáxias mais massivas (ver Tabela 2.1); além disso, ele remove o gás mais lentamente nestas galáxias. Para a grande maioria dos modelos de Friaça & Terlevich (1998), o vento ocorre depois de 1 Gano e persiste até a presente época.

Como mostrado na Figura 2.6, o vento galáctico pode ser muito rico em metais. As abundâncias de gás na região central rapidamente se tornam supersolares: em r = 100 pc, [O/H] > 1 em ~  $10^8$  anos, e [Fe/H] > 1 em ~  $3 \times 10^8$  anos. Depois que o vento tiver se desenvolvido na região intermediária da galáxia, uma frente de gás rica em metais avança de dentro para fora da galáxia. Quando o vento alcança o raio de maré da galáxia ( $t_w = 1.17$  Gano), a metalicidade do gás em  $r_t$  é baixa ( $[O/H]=1.2 \times 10^{-2}$  e  $[Fe/H]=1.1 \times 10^{-2}$ ), embora nas regiões internas o gás seja rico em metais ([O/H]=2.9 e [Fe/H]=5.6 em 1 kpc).



**Figura 2.6** Perfis radiais de [Fe/H] e [O/H] para o gás do modelo fiducial em algumas épocas: 0.03 Gano (linha sólida), 0.35 Gano (linha tracejada curta), 1 Gano (linha tracejada longa), 1.6 Gano (linha pontilhada), 1.9 Gano (pontilhado com traços curtos), 4.4 Ganos (pontilhado com traços longos), 13 Ganos (traços curtos e longos). Retirado de Friaça & Terlevich 1998.

Há um atraso entre a remoção de massa e a remoção de metais pelo vento. Quando 90% do gás tiver sido removido (em 1.59 Gano), a metalicidade no raio de maré ([O/H]=0.8 e [Fe/H]=1.4) será ainda baixa em comparação com as abundâncias internas ([O/H]=3.2 e [Fe/H]=8.9 em 1 kpc). Apenas em 1.77 Gano, a frente de gás rica em metais alcança o raio de maré ([O/H]=1.3 e [Fe/H]=8.1 em  $r_t$ ), e um gradiente de abundância de gás relativamente raso é estabelecido. Depois deste tempo, o vento galáctico é muito rico em metais.

A metalicidade máxima é alcançada em ~ 2 Ganos ([O/H]=1.3 e [Fe/H]=8.9 em  $r_t$ ), e então decresce devido ao efeito de diluição da perda de massa estelar, quando uma grande fração de gás rico em H é restituída por estrelas de baixa massa. A metalicidade atual do gás ainda é alta ([O/H]=1.1 e [Fe/H]=3.0 em  $r_t$ ). É interessante notar que o gradiente de oxigênio é mais acentuado do que o gradiente de ferro ([O/H]=2.8 e [Fe/H]=3.9 em 1 kpc).

Desde que o gás removido com o vento representa uma quantidade de massa comparável com

o componente estelar da galáxia, ele terá um importante impacto sobre o meio intra-aglomerado ou intragrupo onde a galáxia está localizada. Em particular, o vento galáctico carrega metais sintetizados pelas estrelas e por isso ele é de grande importância para a compreensão do enriquecimento químico do meio intragaláctico.

É interessante notar que a fase de vento tardia (isto é, de t = 1.60 Gano em diante) perfaz a mais importante contribuição para o enriquecimento em ferro. Apenas  $6.9 \times 10^7 \, M_{\odot}$  de ferro é expelida durante a fase inicial de vento, ou seja, 14% de todo o ferro ejetado pela galáxia. O enriquecimento por oxigênio do meio intra-aglomerado ocorre muito mais cedo, com  $4.7 \times 10^8$  $M_{\odot}$  sendo ejetadas durante a fase inicial de vento, ou seja, metade da quantidade total de oxigênio ( $9.83 \times 10^8 \, M_{\odot}$ ) ejetada durante a época atual. Este resultado não é inesperado, já que o ferro se origina principalmente das SNe Ia, e o tempo de vida longo das progenitoras destas supernovas resulta em um atraso no enriquecimento do ferro. Por contraste, o vento primário remove o gás pré-enriquecido por elementos-alfa produzidos em SNe II durante os primeiros  $10^8$ anos de evolução.

#### 2.1.5. Abundâncias de Populações Estelares

A Tabela 2.2 nos mostra as abundâncias da população estelar na época atual ( $t_G = 13$  Gano):  $\langle [Mg/H] \rangle_1 \in \langle [Fe/H] \rangle_1$  são as abundâncias de Mg and Fe ponderadas em massa sobre a região interior a 1kpc;  $\langle [Mg/H] \rangle_{10} \in \langle [Fe/H] \rangle_{10}$  são as abundâncias de Mg and Fe ponderadas em massa sobre a região dentro de 10 kpc (10 kpc é aproximadamente o raio efetivo de uma galáxia com  $L^*$ ). A notação para os modelos é a mesma que na Tabela 2.1.

Modelo	$\langle [Mg/H] \rangle_1$	$\langle [Fe/H] \rangle_1$	$\langle [Mg/H] \rangle_{10}$	$\langle [Fe/H] \rangle_{10}$
1	2.20	1.38	1.30	0.716
2	2.57	1.53	1.38	0.754
5	2.59	2.05	1.54	0.943
10	3.40	2.22	1.58	0.935
20	3.52	2.89	1.58	0.979
50	4.30	3.98	1.69	1.420
2(1/3)	2.59	1.65	1.46	0.824
2(0)	1.57	0.66	0.77	0.283

Tabela 2.2 Abundâncias químicas estelares na época atual (Friaça & Terlevich 1998)

O core ( $r \lesssim 1 \text{ kpc}$ ) das galáxias do modelo quimiodinâmico é rico em metais, em acordo com as

metalicidades de 2-3 para os núcleos das galáxias elípticas, derivadas de observações dos índices de Mg<sub>2</sub>. Para o modelo fiducial, tanto o magnésio quanto o ferro exibem superabundâncias centrais na época atual ([Mg/H]=3.4 e [Fe/H]=2.5 em 100 pc; [Mg/H]=2.0 e [Fe/H]=1.2 em 1 kpc). Em raios maiores, entretanto, as abundâncias se tornam subsolares ([Mg/H]=0.67 e [Fe/H]=0.29 em 10 kpc), indicando a presença de gradientes de abundância na população estelar galáctica.

A Figura 2.7 nos mostra a evolução das abundâncias de magnésio e ferro da população estelar em alguns raios para o modelo fiducial, permitindo-nos derivar os gradientes de metalicidade. Espera-se que os gradientes de abundância sejam mais planos quando a dependência da taxa de formação estelar com a densidade é mais fraca.



**Figura 2.7** A evolução do [Mg/H] (curvas sólidas) e do [Fe/H] (curvas pontilhadas) da população estelar em alguns raios para o modelo fiducial. As curvas superior, média e inferior referem-se aos raios de 100 pc, 1 kpc, e 10 kpc, respectivamente. Note que as curvas de r = 100 pc e r = 1 kpc, tanto para o magnésio [Mg/H] como para o ferro [Fe/H], não se cruzam. Retirado de Friaça & Terlevich 1998.

Um importante vínculo para a evolução química é dado pelas razões de abundância derivadas das intensidades das linhas de Mg e Fe (baseadas nos índices do Mg<sub>2</sub>, Fe5270 e Fe5335). Parece que o Mg é superabundante com respeito ao Fe em elípticas gigantes. A razão [Mg/Fe] exibe um grande espalhamento em torno de 1.5-2.0 (Worthey et al 1992), a qual é interpretada como uma

assinatura do enriquecimento por SNe II, implicando que a formação de uma galáxia elíptica foi muito rápida, ou de outro modo o enriquecimento de ferro por SNe Ia poderia ter mudado a razão [Mg/Fe] para valores solares ou subsolares.

O modelo prevê uma faixa de 1.1 - 1.8 para [Mg/Fe], reproduzindo bem as observações e indicando que uma escala de tempo típica de  $10^8$  anos, escolhida como normalização da TFE baseada em resultados de modelos de zona única, é também apropriada para os modelos dinâmicos que eles exploraram.

Um resultado importante que pode ser derivado da Tabela 2.2 é que a metalicidade aumenta com a massa da galáxia, e assim a bem conhecida relação massa-metalicidade para galáxias elípticas é reproduzida pelo modelo quimiodinâmico. A relação massa-metalicidade é uma conseqüência da ocorrência de ventos galácticos, os quais aparecem mais tarde para galáxias com poços potenciais mais profundos, permitindo assim um maior enriquecimento de metal para o gás e as estrelas formadas dele. A consistência do cenário de vento galáctico pode ser vista dos resultados da Tabela 2.1, a qual mostra que, dada uma lei de formação estelar, o tempo para o início do vento galáctico aumenta com a massa da galáxia.

# 2.2. PRODUÇÃO DE POEIRA NO MODELO QUIMIODINÂMICO

De modo a obtermos a evolução da quantidade de poeira durante a evolução das galáxias elípticas, acrescentou-se (Friaça & Dunlop, em preparação) ao setor de evolução química do modelo quimiodinâmico a produção de poeira. Nos concentramos inicialmente na determinação do carbono e do silício na forma de poeira.

Os mecanismos de produção, crescimento e destruição de poeira são muito complexos e conhecidos de maneira incipiente. Acredita-se que núcleos para a condensação de grãos de poeira se formam principalmente em regiões do meio interestelar que são mais protegidas dos fótons ultravioleta. De acordo com Franceschini (2000), os principais locais de produção de poeira são:

 Envelopes de Protoestrelas: Durante o processo de formação de uma estrela, uma nebulosa solar é formada. Ali, os grãos de silicatos podem ser formados e soprados além pelo vento da fase T Tauri.

2) Estrelas Evoluídas Frias: Na atmosfera fria de estrelas gigantes evoluídas, grãos de poeira podem influenciar e impulsionar um forte vento estelar, em particular os grãos de grafite das estrelas carbonadas e os grãos de silicatos em estrelas tipo OH-IR. Estrelas com massa M <

 $8 \,\mathrm{M}_{\odot}$  são importantes produtores de poeira. Estrelas de massa maiores como as Wolf-Rayets, as quais possuem altas taxas de perda de massa, são muito raras.

3) Supernovas de Tipo II: Estas são provavelmente os mais importantes contribuidores para a formação de poeira, como foi provado por uma variedade de testes, como aqueles fornecidos pelo excesso infravermelho na curva de luz e a extinção nas estrelas de fundo causados pelo material ejetado em supernovas. Evidências diretas da produção de poeira vieram do estudo do caso da supernova 1987a (Moléculas de CO e Si foram encontradas no material ejetado), das manchas escuras observadas na nebulosa do Caranguejo, do mapeamento infravermelho de Cassiopéia-A realizado pelo ISO, o qual resolveu a emissão 'clumpy' associada com os nódulos em rápido movimento.

4) Supernovas Tipo I: Estas possuem um papel incerto. Ainda não há evidências diretas de sua contribuição para a formação de poeira, a qual poderia ser relevante para resolver o problema da depleção do ferro.

5) O Meio Interestelar em Geral: Este se constitui também na região de um lento crescimento de grãos em torno de núcleos de condensação pré-existentes (*cores* refratários): é desta forma que grãos de gelo 'sujos' são produzidos.

Dado que a poeira foi formada nas regiões mencionadas acima, as equações de evolução química da poeira seguem uma formulação análoga àquela do componente químico gasoso do meio interestelar. Apresentamos a seguir a descrição desse conjunto de equações de evolução química tanto para a fase gasosa como para a fase de poeira do meio interestelar da galáxia.

## 2.2.1. A evolução Química do Meio Interestelar

Utilizou-se o modelo de multizonas para a evolução química da galáxia no qual a formação de estrelas, fluxos de gás e os remanescentes em expansão de supernovas representam o papel dominante na determinação das abundâncias dos vários elementos no gás e nas fases sólidas do meio interestelar.

Seja  $\rho_{ISM}(A,\mathbf{r},\mathbf{t})$  a densidade de massa volumétrica *total* (gás + poeira) no meio interestelar (ISM = interestellar medium) de um elemento estável A que está localizado no tempo t em um raio r. A densidade volumétrica de massa,  $\rho_{ISM}(\mathbf{r},\mathbf{t})$ , de *todos* os elementos A é dada pela somatória:

$$\rho_{ISM}(r,t) = \sum_{\{A\}} \rho_{ISM}(A,r,t)$$
(2.11)

As equações para a evolução de  $\rho_{ISM}(\mathbf{r},t)$  e  $\rho_{ISM}(A,\mathbf{r},t)$  em um dado raio r e no tempo t são

dados por:

$$\frac{d\rho_{ISM}(r,t)}{dt} = -\Psi(r,t)$$

$$\int_{M_l}^{M_u} \Psi[r,t-\tau(M)] \phi(M) \left[\frac{M_{ej}(M,Z)}{M_{av}}\right] dM \qquad (2.12)$$

e

$$\frac{d\rho_{ISM}(A,r,t)}{dt} = -Z_{ISM}(A,r,t) \Psi(r,t)$$

$$\int_{M_l}^{M_u} \Psi(r,t-\tau(M)) \phi(M) \left[\frac{M_{ej}(A,M,Z)}{M_{av}}\right] dM \qquad (2.13)$$

onde  $\Psi(\mathbf{r},\mathbf{t})$  é a taxa de formação estelar por unidade de volume, e  $\tau(M)$  é o tempo de vida de uma estrela de massa M. A função  $\phi(\mathbf{M})$  é a função de massa inicial (FMI).  $\mathbf{M}_{ej}(\mathbf{M},\mathbf{Z})$  e  $\mathbf{M}_{ej}(A,\mathbf{M},\mathbf{Z})$  são, respectivamente, a massa total e a massa do elemento A que são ejetadas por uma estrela de massa M e metalicidade inicial Z de volta ao meio interestelar.  $\mathbf{M}_{av}$  é a massa das estrelas formadas ponderada pela FMI, enquanto que o parâmetro  $\mathbf{Z}_{ISM}(A,\mathbf{r},\mathbf{t})$  na equação (2.13) é a fração de massa de um dado elemento no meio interestelar, definida como:

$$Z_{ISM}(A, r, t) \equiv \frac{\rho_{ISM}(A, r, t)}{\rho_{ISM}(r, t)}$$
(2.14)

Re-escrevendo a equação (2.13) como uma soma explícita de suas várias contribuições, teremos:

$$\frac{d\rho_{ISM}(A, r, t)}{dt} = -Z_{ISM}(A, r, t) \Psi(r, t) \\
+ \int_{M_{l}}^{M_{b1}} \Psi[r, t - \tau(M)] \phi(M) \left[\frac{M_{ej}(A, M, Z)}{M_{av}}\right] dM \\
+ A_{SNI}\left(\frac{M_{ej}^{I}(A)}{M_{av}}\right) \int_{M_{b1}}^{M_{b2}} \phi(M_{b}) dM_{b} \\
\times \int_{\mu_{m}}^{\frac{1}{2}} f(\mu) \Psi(r, t - \tau(\mu M_{b})) d\mu \\
+ (1 - A_{SNI}) \int_{M_{b1}}^{M_{b2}} \Psi(r, t - \tau(M)) \phi(M) \left[\frac{M_{ej}(A, M, Z)}{M_{av}}\right] dM \\
+ \int_{M_{b2}}^{M_{u}} \Psi[r, t - \tau(M)] \phi(M) \left[\frac{M_{ej}(A, M, Z)}{M_{av}}\right] dM$$
(2.15)

O primeiro termo na equação (2.15) representa a taxa de remoção do elemento A do meio interestelar devido a formação estelar: ao se formarem, estas novas estrelas sequestram parte do material do meio interestelar.

O segundo termo representa a taxa de enriquecimento do elemento devido a estrelas na faixa de massa  $\{M_l, M_{b1}\}$ , onde  $M_l$  é o limite inferior de massa da FMI e  $M_{b1}$  é o limite inferior de massa de sistemas binários que se tornam SNe Ia.

A terceira equação representa a taxa de enriquecimento de A devido a sistemas binários que se transformam em SN Ia, onde  $M_{ej}^{I}(A)$  é a massa do elemento A sintetizada na explosão,  $M_{b1}$ e  $M_{b2}$  são, respectivamente, os limites inferiores e superiores de massa para os sistemas binários que se tornam supernovas Tipo Ia ( $M_{b1} = 3M_{\odot}$  e  $M_{b2} = 16M_{\odot}$ ). O parâmetro  $A_{SNI}$  determina as taxas relativas de eventos de supernova de Tipo Ia para estrelas evoluindo isoladamente (em nebulosas planetárias ou SNe II) na faixa de massas { $M_l$ ,  $M_{b1}$ }.

O quarto termo representa o enriquecimento devido a sistemas binários que não passam por eventos de SN Ia e estrelas isoladas que dão origem a nebulosas planetárias ou SNe II. O quinto e último termo representa a taxa de enriquecimento do elemento A devido a estrelas massivas que se tornam SNe II, onde onde  $M_u$  é o limite superior de massa da FMI e  $M_{b2}$  é o limite superior de massa de sistemas binários que se tornam SNe Ia.

# 2.2.2. A Evolução Química da Poeira

A evolução de um elemento A na poeira pode ser descrita de maneira similar àquela empregada para os elementos no meio interestelar (equação 2.15) como:

$$\frac{d\rho_{dust}(A,r,t)}{dt} = -Z_{dust}(A,r,t)) \Psi(r,t) \\
+ \int_{M_{l}}^{M_{b1}} \Psi[t-\tau(M)] \phi(M) \left[\frac{\delta_{cond}^{w}(A)M_{ej}(A,M,Z)}{M_{av}}\right] dM \\
+ A_{SNI} \left(\frac{\delta_{cond}^{I}(A)M_{ej}(A)}{M_{av}}\right) \int_{M_{b1}}^{M_{b2}} \phi(M_{b}) dM_{b} \int_{\mu_{m}}^{\frac{1}{2}} f(\mu)\Psi[r,t-\tau(\mu M_{b})] d\mu \\
+ (1-A_{SNI}) \int_{M_{b1}}^{M_{b2}} \Psi[r,t-\tau(M)] \phi(M) \left[\frac{\delta_{cond}^{w}(A)M_{ej}(A,M,Z)}{M_{av}}\right] dM \\
+ \int_{M_{b2}}^{M_{u}} \Psi(r,t-\tau(M)) \phi(M) \left[\frac{\delta_{cond}^{II}(A)M_{ej}(A,M,Z)}{M_{av}}\right] dM \\
- \frac{\rho_{dust}(A,r,t)}{\tau_{SNR}(A,r,t)} + \frac{\rho_{dust}(A,r,t)}{\tau_{accr}(A,r,t)} \left[1 - \frac{\rho_{dust}(A,r,t)}{\rho_{ISM}(A,r,t)}\right] (2.16)$$

onde

$$Z_{dust}(A, r, t) \equiv \frac{\rho_{dust}(A, r, t)}{\rho_{ISM}(r, t)}$$
(2.17)

é a fração de massa do elemento A aprisionada em poeira, e os parâmetros  $\delta^w_{cond}(A)$ ,  $\delta^I_{cond}(A)$ , e  $\delta^{II}_{cond}(A)$  representam a eficiência de condensação do elemento A em ventos estelares, em supernovas de Tipo I e em supernovas de Tipo II, respectivamente.

A equação (2.16) introduz dois novos termos que afetam a evolução da poeira no meio interestelar: o sexto termo da equação, que é a taxa com a qual o elemento A é devolvido à fase de gás com a destruição da poeira por remanescentes de supernovas; e o sétimo e último termo, que representa a taxa com a qual um elemento A é removido dos gás pela acreção sobre partículas de poeira *pré-existentes* em nuvens moleculares. Os parâmetros  $\tau_{SNR}(A, r, t) \in \tau_{accr}(A, r, t)$  são, respectivamente, as escalas de tempo para esses processos.

# 2.2.3. Os Yields da Produção da Poeira

Fazemos a distinção entre estrelas com massa abaixo de  $M_w = 8 M_{\odot}$ , e aquelas com massas acima deste valor. Para estrelas com massa  $M \leq M_w$ , o rendimento da poeira para cada massa é determinado simplesmente pela razão C/O do material ejetado. Quando a razão C/O é maior do que um, nós supomos que todo átomo de oxigênio se une a um carbono formando CO, e que o *excesso* de carbono está aprisionado em *'poeira carbonácea'*, no nosso caso grafite. Em caso contrário (C/O < 1), supõe-se que todos os elementos refratários (vamos considerar aqui apenas o silício) e aproximadamente uma quantidade igual de oxigênio *por número* se condensam fora do gás. Esta poeira se constituirá nos nossos *silicatos*.

Para ser mais quantitativo,  $M_{ej}(A,M)$  é a massa de um elemento A no material ejetado e  $M_{dust}(A,M)$  é a massa de A que está encerrada na poeira. Considerando o silício (Si) como elemento refratário, adotou-se a seguinte prescrição para se calcular a composição da poeira e a eficiência de produção nas várias fontes estelares:

1) Para estrelas com M  $\leq$  M<sub>w</sub> = 8 M<sub> $\odot$ </sub>:

a) para massas estelares Mnas quais  $\mathrm{C/O}>1$ no material ejetado

$$M_{dust}(C,M) = \delta^{w}_{cond}(C) \left[ M_{ej}(C,M) - \frac{3}{4} M_{ej}(O,M) \right]$$
  
$$M_{dust}(Si,M) = 0$$
(2.18)

b) para massas estelares M nas quais C/O < 1 no material ejetado

$$M_{dust}(C, M) = 0$$
  

$$M_{dust}(Si, M) = \delta^{w}_{cond}(Si) M_{ej}(Si, M)$$
(2.19)

2) Para estrelas com M >  $M_w = 8 M_{\odot}$ :

$$M_{dust}(C, M) = \delta_{cond}^{II}(C) M_{ej}(C, M)$$
  

$$M_{dust}(Si, M) = \delta_{cond}^{II}(Si) M_{ej}(Si, M)$$
(2.20)

Uma equação idêntica àquela de (1.20) foi usada para SNe Ia, mas com o termo  $\delta_{cond}^{II}(A)$  trocado por  $\delta_{cond}^{I}(A)$ .

As equações acima supõem que em estrelas com massas  $\langle M_w$ , o carbono e o oxigênio ejetados são misturados microscopicamente, de forma que a máxima quantidade possível de CO é formada. Para estrelas de alta massa e SNe Ia, admitimos que o material ejetado foi misturado apenas microscopicamente, permitindo a formação de grãos de silicatos e carbonáceos.

Em princípio, poderíamos seguir a composição detalhada da poeira retornada para o meio interestelar por cada massa estelar, bastando para isso escolher a combinação correta de  $\delta_{cond}$ para cada elemento. Seguindo Dwek (1998), a escolha  $\delta_{cond}^w(A) = 1$  e  $\delta_{cond}(A)^{II} = \delta_{cond}(A)^I$ = 0.8 para o silício, e o valor de  $\delta_{cond}^w(A) = 1$  e  $\delta_{cond}(A)^{II} = \delta_{cond}(A)^I = 0.5$  para o carbono constitui o caso B dos modelos quimiodinâmicos com produção de poeira, o qual visa reproduzir as propriedades da poeira na Galáxia, enquanto que ( $\delta_{cond}^w(A)$ ,  $\delta_{cond}(A)^{II}$ ,  $\delta_{cond}(A)^I$ ) = (1.0, 0.9, 0.9) para o silício e (1.0, 0.7, 0.7) para o carbono constitui o caso A de produção muito eficiente de poeira, o qual vai ser o nosso modelo fiducial de produção de poeira.

Os valores de  $\delta_{cond} < 1$  para supernovas de Tipo II e Ia levam em consideração a possível condensação incompleta dos elementos nestes objetos e a possível destruição das substâncias condensadas em supernovas durante sua injeção no meio interestelar. A escolha de  $\delta_{cond}$  para estes objetos é inteiramente arbitrária.

# 2.2.4. A Destruição dos Grãos de Poeira

Grãos de poeira circunstelares formados por perda de massa quiescente devem ser alterados durante sua fase de injeção no meio interestelar. Eles podem ser estilhaçados, coagulados, ou aumentados por acresção no *outflow* interestelar, mas espera-se que eles sobrevivam à fase de injeção. Este não é o caso para as partículas condensadas em supernovas, as quais são injetadas em velocidades que excedem os 1000 km/s dentro das cavidades de supernovas contendo gás circunstelar/interestelar aquecido por choques.

No meio interestelar, os grãos podem ser destruídos por fragmentação (*'sputtering'*) térmica, evaporação em colisões grão-grão, sublimação térmica e fragmentação química. Destes processos, a destruição de grãos por remanescentes de supernovas é o mecanismo mais importante para trazer a poeira de volta para a fase de gás (Dwek 1998).

Seja  $m_{dest}(A, \mathbf{r}, t)$  a massa total do elemento A que, inicialmente encerrado na poeira, é devolvido ao gás por um único remanescente de supernova em expansão, localizado na posição r e no tempo t, durante seu tempo de vida evolucionário. A taxa com a qual A é retornado ao gás é dada por:

$$\left[\frac{d\rho_{dust}(A, r, t)}{dt}\right]_{SNR} = m_{dest}(A, r, t) \ \mathcal{R}_{SN}(r, t)$$
(2.21)

onde  $\mathcal{R}_{SN} = \mathcal{R}_{SNIa} + \mathcal{R}_{SNII}$  é a taxa combinada de eventos SNe Ia e SNe II na galáxia em unidades de pc<sup>-3</sup> Gano<sup>-1</sup>. A equação (2.21) também pode ser escrita na forma:

$$\left[\frac{d\rho_{dust}(A,r,t)}{dt}\right]_{SNR} = \rho_{dust}(A,r,t) \left[\frac{m_{dest}(A,r,t)}{\rho_{dust}(A,r,t)}\right] \mathcal{R}_{SNR}(A,r,t) \equiv \frac{\rho_{dust}(A,r,t)}{\tau_{SNR}(r,t)} \quad (2.22)$$

a qual define o tempo de vida do elemento A contra a destruição por remanescentes de supernovas. O parâmetro  $\tau_{SNR}$  é a escala de tempo para a destruição do grão por remanescentes de supernova.

O valor de  $\tau_{SNR}$  representa um papel importante ao se calcular a depleção interestelar do elemento A. Cálculos de  $\tau_{SNR}$  envolvem o conhecimento da física da destruição do grão por fragmentação térmica e colisões grão-grão, bem como as aplicações dessas taxas de destruição de grãos para os choques interestelares e o remanescentes de supernovas.

A evaporação da poeira por colisões grão-grão é o processo mais difícil de modelar; contudo, ela se torna o mecanismo de destruição por grãos dominante durante a fase radiativa da evolução do remanescente, quando a maior parte do meio interestelar é varrida. Na modelização das eficiências de destruição de grãos por choques radiativos, o tempo de vida global dos grãos refratários foi estimado em  $\sim 0.4 e 0.22$  Gano para os grãos carbonáceos e os silicatos, respectivamente.

Espera-se também que os tempos de vida da destruição dos grãos varie sobre o tempo de vida da galáxia. Para explorar esta dependência temporal, seja  $m_{dest}$  a massa de poeira destruída por um único remanescente de supernova. Podemos escrever que:

$$m_{dest}(A, r, t) = \left(\frac{\rho_{dust}(A, r, t)}{\rho_{ISM}(A, r, t)}\right) \epsilon M_{SNR}$$
(2.23)

onde  $M_{SNR}$  é a massa total do gás do meio interestelar varrido pelo remanescente de supernova durante seu tempo de vida, e o parâmetro  $\epsilon$  representa uma eficiência de destruição média do grão.

O tempo de vida da destruição do grão será então:

$$\tau_{SNR}(A, r, t) = \left(\epsilon \ M_{SNR}\right)^{-1} \left[\frac{\rho_{ISM}(r, t)}{\mathcal{R}_{SN}(r, t)}\right]$$
(2.24)

A quantidade de massa do meio interestelar varrida em uma dada velocidade por um remanescente de supernova isolado não depende da densidade do ambiente, sendo esta uma conseqüência simples da conservação de momento durante os últimos estágios de sua evolução. Se ignorarmos a fraca dependência de  $\epsilon$  com a densidade do meio interestelar, então a quantidade  $\epsilon M_{SNR}$ pode ser suposta constante com o tempo.



Figura 2.8 A produção de poeira na galáxia fiducial. Friaça & Dunlop, em peparação.

A Figura 2.8 nos mostra a evolução temporal da quantidade de poeira produzida para a galáxia fiducial. Observe que de 0.3 Gano em diante, a quantidade de poeira possui uma evolução similar a da quantidade de gás em nossa galáxia fiducial.

Em aproximadamente 1 Gano, a instauração do vento galáctico expulsa boa parte do material do meio interestelar. É por essa razão que há um forte declínio na massa de gás e poeira em nossa galáxia. A massa total da galáxia continua aproximadamente constante (embora declinante) porque as estrelas não são expulsas pelo vento galáctico; elas apenas perdem massa lentamente através da evolução estelar tardia (ventos estelares, nebulosas planetárias e supernovas). Uma maior eficiência na condensação dos grãos (maiores  $\delta^w_{cond}(A)$ ,  $\delta_{cond}(A)^{II}$ ,  $\delta_{cond}(A)^I$ ) se manifesta na maior massa de poeira do caso B.

# 3. A POEIRA INTERESTELAR

A poeira está presente em quase todos os ambientes astronômicos, desde os discos e envelopes em torno das estrelas até os objetos pré-galácticos, como as linhas de absorção dos quasares e os "Damped Lyman  $\alpha$  Systems", passando pelas galáxias espirais, elípticas, irregulares, "starbursts" e galáxias ativas. Ela exerce um papel central na astrofísica do meio interestelar, desde a termodinâmica e química do gás até a dinâmica da formação estelar.

Os grãos de poeira, por intermédio de sua abundância e composição química, dão forma ao espectro das galáxias e influenciam na determinação de suas propriedades físicas subjacentes, pois eles atenuam a radiação em comprimentos de onda curtos e re-emitem parte desta radiação no infravermelho. Estima-se que cerca de 30% ou mais da energia das estrelas emitida na forma de luz é reprocessada pela poeira e emitida na forma de radiação infravermelha (Bernstein et al. 2002).

Se alguém ainda tiver dúvidas sobre a importância da poeira, podemos utilizar mais um exemplo um pouco mais quantitativo. Em nossa Galáxia, a razão gás/grão é de cerca de 100:1. Desde que o meio interestelar (MIE) é cerca de 10% da massa bariônica de nossa Galáxia, os grãos de poeira compreendem proximadamente cerca de 0.1% deste total. Ao mesmo tempo, eles absorvem grosseiramente entre 30-50% da luz estelar emitida pela Galáxia e a re-emitem como emissão no contínuo do infravermelho distante. Isto significa que apenas 0.1% dos bárions são responsáveis no final das contas por um terço ou até cerca de metade da luminosidade bolométrica da Galáxia!

Os grãos de poeira são também os sítios primários de formação molecular, e acredita-se que eles são os responsáveis por essencialmente toda a formação de hidrogênio molecular  $(H_2)$  no meio interestelar. A química molecular é inimaginável sem os grãos de poeira para agir como locais de reação.

Já numa escala mais ampla, acredita-se que a formação de sistemas planetários inicia-se quando os grãos de poeira em um disco proto-estelar começam a coagular em grãos maiores, conduzindo aos "protoplanetas" (*planetesimals*, em inglês) e eventualmente aos planetas, levando no processo sua carga de moléculas orgânicas complexas com eles. Portanto, a poeira não é apenas o principal construtor de moléculas, mas ela também pode ser pensada como um dos principais ingredientes de formação planetária, e também da vida.

De maneira geral, podemos afirmar que a poeira interestelar determina como a galáxia se parece, como o meio interestelar (MIE) da galáxia se comporta, e também o processo de formação estelar que cria a galáxia visível. Compreender as propriedades das partículas de poeira interestelar é essencial não apenas para a interpretação do espectro galáctico, mas também para uma melhor compreensão do Universo como um todo, visto que a poeira é uma entidade ubíqua que permeia toda a atividade de caráter astronômico.

Já faz mais de 75 anos que a descoberta de Trumpler sobre o excesso de cor nas estrelas forneceu a prova definitiva sobre a existência de poeira interestelar (Trumpler 1930). Ele encontrou que as estrelas distantes eram obscurecidas por alguma coisa em acordo com a lei do inverso do quadrado da distância, e concluiu que o espaço interestelar no plano galáctico continha "finas partículas de poeira cósmica de vários tamanhos... produzindo a absorção seletiva observada" (Draine, 2003). Entretanto, mesmo passado todo este tempo, ainda hoje muitos aspectos da natureza da poeira interestelar permanecem obscuros.

A presença de grãos de poeira no meio interestelar pode ser deduzida observacionalmente basicamente por duas maneiras (Pogge 2006):

#### Interação com a Luz Estelar

Nós inferimos a presença de grãos de poeira ao longo de uma dada linha de visada por seus efeitos sobre a luz das estrelas que passam por essa linha de visão. Estes efeitos incluem:

1. Extinção total e seletiva (dependente do comprimento de onda) da luz estelar que passa através de regiões "empoeiradas", devido a uma combinação de absorção e espalhamento.

2. Reflecção da luz estelar por nuvens ricas em poeira localizadas atrás das estrelas brilhantes (Nebulosas de Reflecção).

3. Polarização da luz, tanto aquela resultante do espalhamento, quanto aquela proveniente da passagem da luz através de regiões com grãos de poeira não-esféricos alinhados macroscopicamente. 4. Absorção da luz estelar em bandas de silicatos, ou nas várias bandas dos gelos (gelo de  $H_2O$  e gelo de  $CO_2$ ).

#### Emissão por Grãos de Poeira

Grãos de poeira também emitem radiação eletromagnética que é diretamente detectável:

 Emissão térmica no contínuo de grãos de poeira em equilíbrio radiativo com o campo de radiação local. Esta radiação emerge em comprimentos de onda que vão do infravermelho médio (Mid-IR) até o infravermelho distante (Far-IR ou FIR).

2. Emissão térmica no contínuo devido ao aquecimento fora do equilíbrio que ocorre em pequenos grãos (flutuações de temperatura), os quais emitem em comprimentos de onda que vão do infravermelho próximo (Near-IR, ou NIR) ao infravermelho médio, ou seja, entre  $1\mu m$ até cerca de  $25\mu m$ .

3. Bandas de emissão no infravermelho (IR) de grãos aquecidos. Muitas destas bandas, entretanto, não foram ainda positivamente identificadas (ou mesmo identificadas).

4. Emissão em rádio no contínuo devido a grãos em rotação (radiação de dipolo elétrico e magnético). Apenas recentemente esta radiação foi descoberta como uma parte do fundo em rádio da Galáxia, e as explicações para ela sã o convincentes, embora ainda temporárias.

Neste capítulo iremos discutir um pouco sobre a teoria e os parâmetros necessários para se construir um modelo de extinção e re-emissão de radiação por poeira. Partiremos de uma perspectiva histórica, introduzindo o conceito de curva de extinção e a construção do modelo de poeira.

# 3.1. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Para elaborar esta seção baseamo-nos nos textos de Spitzer (1978) e Whittet (1992).

Ao se medir a luz proveniente de uma estrela, normalmente observamos o fluxo  $F_{\nu}$  [erg  $s^{-1}cm^{-2}ster^{-1}Hz^{-1}$ ], definido como sendo a integral da intensidade específica  $I_{\nu}$  [erg  $s^{-1}cm^{-2}Hz^{-1}$ ] sobre o ângulo sólido da imagem estelar.

Suponha que grãos de poeira esféricos de raio a são distribuidos uniformemente com densidade numérica  $n_d$  por unidade de volume ao longo da linha de visada para uma estrela distante. O número de grãos contidos dentro de uma coluna cilíndrica de comprimento L e área seccional unitária é dado por  $N_d = n_d L$ . Considerando um elemento discreto da coluna com comprimento dL, a redução fracional em intensidade da luz estelar em um dado comprimento de onda devido à extinção dentro do elemento é dada por:

$$\frac{dI}{I} = -n_d \sigma_d dL, \tag{3.1}$$

onde  $\sigma_d$  é a seção de choque óptica (ou seção de choque de extinção). Integrando-se a equação 3.3 por todo o comprimento da trajetória da luz, teremos

$$I = I_0 e^{-\tau}, \tag{3.2}$$

onde  $I_0$  é o valor inicial de I (L = 0) e

$$\tau = -n_d \sigma_d L = N_d \sigma_d \tag{3.3}$$

é a profundidade óptica de extinção devido à poeira.

Expressando a redução de intensidade em magnitudes, temos que a extinção interestelar no comprimento de onda  $\lambda$  ( $A_{\lambda}$ ) é calculada por:

$$A_{\lambda} = -2.5 \log \frac{I}{I_0} = 1.086 N_d Q_{ext} s_{\nu} = 1.086 \tau(\lambda), \qquad (3.4)$$

onde  $N_d$  é o número de grãos de poeira por centímetro quadrado ao longo da linha de visada da Terra até a estrela, e  $s_{\nu}$  é a seção de choque geométrica de um único grão. Para grãos esféricos, temos que

$$s_{\nu} = \pi a^2, \tag{3.5}$$

onde a é o raio do grão.

A Equação 3.4 deve ser integrada sobre todos os parâmetros que caracterizam os grãos, incluindo composição química, tamanho, forma e orientação. Por exemplo, se ao invés de grãos com um raio constante a nós tivéssemos uma distribuição de tamanho tal que n(a)da é o número de grãos por unidade de volume na linha de visada, com raios de tamanho entre a e a + da, então a equação 3.4 deveria ser calculada como:

$$A_{\lambda} = 1.086\pi \int a^2 Q_{ext}(a) n(a) da \quad . \tag{3.6}$$

A quantidade adimensional  $Q_{ext}$  é o fator de eficiência de extinção, definido em termos da seção de choque óptica  $\sigma_d$  através da relação:

$$Q_e = \frac{\sigma_d}{s_\nu} = \frac{\sigma_d}{\pi a^2} \quad . \tag{3.7}$$

Em geral,  $Q_{ext}$  pode ser dividido em termos de **Absorção**  $(Q_{abs})$  e **Espalhamento**  $(Q_{scat})$ :

$$Q_{ext} = Q_{abs} + Q_{scat},\tag{3.8}$$

com a parte de espalhamento sendo comumente expressa em termos do Albedo  $(\omega)$ 

$$\omega = \frac{Q_{scat}}{Q_{ext}}.$$
(3.9)

Desta forma, um grão idealizado que apenas espalhasse a luz deveria ter  $\omega = 1$ , enquanto que um grão que apenas absorvesse a luz teria  $\omega = 0$ .

Há uma dependência angular adicional para o espalhamento, no sentido que os grãos são fortemente espalhados para a frente. Mas não entraremos em detalhes aqui. Um tratamento aprofundado sobre este tópico pode ser encontrado em *van de Hulst* (1981).

Para partículas de gelo,  $Q_{scat} \gg Q_{abs}$ , mas  $Q_{abs} \neq 0$ . Assim, mesmo os grãos que espalham a luz mais fortemente absorvem alguma parte da radiação incidente e se aquecem. E isso significa que eles devem possuir alguma emissão térmica também.

Há dois casos limites de interesse (ver van de Hulst 1981, para um tratamento rigoroso) que relacionam o comprimento de onda  $\lambda$  com o raio *a* da partícula:

#### 1) Grandes Comprimentos de Onda ; $a \ll \lambda$ :

No caso simplificado de esferas dielétricas sem absorção, nós teremos que

$$Q_{ext} \approx Q_{scat}$$
  
 $Q_{scat} \propto \lambda^{-4}.$  (3.10)

Portanto, no limite para grandes comprimentos de onda, e quando  $a \ll \lambda$ , temos o caso clássico do Espalhamento Rayleigh.

#### 2) Pequenos Comprimentos de Onda; $a \gg \lambda$ :

Neste limite os grãos de poeira atuam como uma bola esférica opaca, macroscópica. Se permitirmos que o grão tenha um termo de absorção finito, em grandes comprimentos de onda:

$$Q_{abs} > Q_{scat}$$

$$Q_{abs} \approx \lambda^{-1}.$$
(3.11)

Como veremos adiante,  $Q_{ext} \propto \lambda^{-1}$  é aproximadamente o que observamos na curva de extinção interestelar nas partes Ultravioleta/Infravermelho Próximo do espectro eletromagnético.

Para se estudar em detalhes as propriedades observadas da extinção interestelar e do avermelhamento, é essencial usar estrelas de fundo com características espectrais conhecidas. O grau de avermelhamento ou a 'extinção seletiva' de uma estrela no sistema UBV de Johnson é quantificado com o excesso de cor:

$$E_{B-V} = (B-V) - (B-V)_0 = A_B - A_V, \qquad (3.12)$$

onde (B - V) é o valor observado do índice de cor e  $(B - V)_0$  é o valor intrínseco do índice de cor;  $A_B$  é a extinção (em magnitudes) para a banda azul B e  $A_V$  é a extinção (em magnitudes) para a banda visual V. Como a extinção é sempre maior no filtro B do que no filtro V,  $E_{B-V}$ é uma quantidade positiva para estrelas avermelhadas e zero (dentro dos erros observacionais) para estrelas que não sofreram avermelhamento. As cores intrínsicas são determinadas como uma função do tipo espectral ao se estudar estrelas próximas e estrelas em altas latitudes galácticas, as quais possuem pouco ou nenhum avermelhamento. Por analogia com a Equação 3.8, o excesso de cor pode ser definido para qualquer par de bandas passantes fotométricas que se queira escolher.

A extinção normalizada  $E_{norm}$  pode ser definida como:

\_

$$E_{norm} = \frac{A(\lambda) - A(\lambda_2)}{A(\lambda_1) - A(\lambda_2)}$$
$$= \frac{E(\lambda - \lambda_2)}{E(\lambda_1 - \lambda_2)} .$$
(3.13)

Ela deve ser independente dos parâmetros estelares e determinada simplesmente pelas propriedades de extinção do meio interestelar. Curvas normalizadas para diferentes estrelas podem ser superpostas e comparadas. As curvas de extinção teóricas deduzidas da equação 3.4 para um dado modelo de grão também podem ser normalizadas da mesma forma para permitir comparações diretas entre as observações e a teoria.

As curvas de extinção são tradicionalmente normalizadas com respeito às bandas passantes B e V no sistema de Johnson, com  $\lambda_V \approx 5500$  Å (o comprimento de onda central do filtro V de Johnson) e  $\lambda_B \approx 4400$  Å (o comprimento de onda central do filtro B de Johnson). Desta forma, a quantidade geralmente ajustada em uma curva de extinção é

$$E_{norm} = X(\lambda) = \frac{E(\lambda - V)}{E(B - V)} \quad . \tag{3.14}$$

Ao invés de se construir um gráfico de X contra o comprimento de onda  $\lambda$ , é mais comum ajustar a lei de extinção em termos do número de onda  $\lambda^{-1}$ . Uma vantagem em se proceder desta forma é que a eficiência de absorção  $Q_{ext} \to 0 \text{ com } \lambda \to \infty$ . E desde que  $A_{\lambda} \propto \tau_{\lambda} \propto Q_{ext}$ , a extinção também se aproximará de zero em comprimentos de onda muito longos. Assim, a intersecção da curva da lei de extinção com o eixo das ordenadas neste tipo de gráfico nos dará:

$$X(\lambda \to \infty) = \frac{A_{\lambda} - A_{V}}{E(B - V)}$$
$$= -\frac{A_{V}}{E(B - V)} = -R \quad . \tag{3.15}$$



Portanto, o valor de R pode ser lido diretamente da interceptação da curva de extinção no eixo das ordenadas (ver Figura 3.1).

**Figura 3.1** Uma típica curva de extinção representada graficamente como  $E(\lambda - V)/E(B - V)$  contra  $1/\lambda \ (\mu m^{-1})$ . Retirado de Cardelli 1994.

A relação entre a extinção total em um dado comprimento de onda e o excesso de cor correspondente varia com a dependência da extinção com o comprimento de onda, a assim chamada Curva de Extinção (ver Figura 3.1). No sistema de Johnson, a extinção na banda passante visual pode ser relacionada a  $E_{B-V}$  através da relação:

$$A_V = R_V E_{B-V},\tag{3.16}$$

onde  $R_V$  é chamado de razão entre a extinção visual total e a extinção visual seletiva. A quantidade  $E_{B-V}$  é medida diretamente, enquanto  $A_V$  é conhecida apenas se  $R_V$  pode ser determinado. Teoricamente, espera-se que  $R_V$  dependa da composição e distribuição de tamanho dos grãos.

Este simples modelo de um parâmetro para a poeira parece se ajustar razoavelmente bem para comprimentos de onda entre ~ 3000 Å e 7000 Å. Entre ~ 7000 Å e ~ 8 $\mu$ m, a lei de extinção é essencialmente independente de  $R_V$ , mas no ultravioleta, contudo, há variações consideráveis na extinção observada, de tal forma que múltiplos parâmetros são necessários para ajustá-la adequadamente. Um exemplo deste tipo de ajuste pode ser encontrado na parametrização de Fitzpatrick & Massa (1990) para a curva de extinção no ultravioleta, a qual utiliza seis parâmetros livres.

As fontes primárias da variação da curva de extinção no ultravioleta são a intensidade, a largura, e o comprimento de onda central do "bump" em 2175 Å; e a inclinação e a curvatura da extinção no contínuo ultravioleta para comprimentos de onda menores que  $\sim 3000$  Å. Um exemplo destas variações pode ser visto na Figura 3.2.

# 3.2. A CURVA DE EXTINÇÃO POR POEIRA

A primeira manifestação da poeira interestelar que chamou a atenção dos astrônomos foi a sua habilidade em extinguir a luz interestelar que passa por ela. O exemplo mais óbvio são as nuvens (Nebulosas) escuras que podem ser vistas a olho nu na Via-Láctea, como por exemplo o Saco de Carvão, nebulosa observada próxima à estrela de Magalhães, a estrela alfa da constelação do Cruzeiro do Sul. O caso mais simples com que podemos lidar é aquele de uma estrela distante ou outro objeto atrás de uma região empoeirada.

Observacionalmente,  $R_V$  possui valores que variam entre 3 e 6 (ver Figura 3.2), mas mais freqüentemente a extinção interestelar encontra-se expressa em termos de um dos dois específicos regimes:

- $R_V = 3.1$ , o qual é típico do meio interestelar difuso;
- $R_V = 5$ , o qual é típico de nuvens moleculares densas.

Deve-se tomar cuidado, porém. Esta divisão em dois valores característicos não significa que  $R_V$  seja necessariamente bimodal. Acredita-se que o valor maior para  $R_V$  seja uma conseqüência de diferentes distribuições de tamanho de grãos em ambientes de alta densidade, quando comparados com os ambientes de baixa densidade, de forma que um grande  $R_V$  indicaria em média grandes grãos. Mas esta divisão pode ser resultante também de diferenças nas propriedades detalhadas dos grãos, como por exemplo a presença ou ausência de mantos de gelo.



**Figura 3.2** Extinção no comprimento de onda  $\lambda$ , relativo a extinção em I = 9000 Å, como uma função do inverso do comprimento de onda  $\lambda^{-1}$ , para regiões da Via-Láctea caracterizadas por diferentes valores de  $R_V \equiv A_V/\text{E(B-V)}$ , onde  $A_B$  é a extinção em B = 4400 Å,  $A_V$  é a extinção em V = 5500 Å, e o "*reddening*" E(B - V)  $\equiv A_B - A_V$ . Note o rápido aumento na extinção no ultravioleta ( $\lambda \leq 0.2\mu$  m) para regiões com  $R_V \leq 4$ . A normalização por núcleos de hidrogênio é de  $A_I/N_H \approx 2.6 \times 10^{22} cm^2/H$ . Os features de absorção dos silicatos em 9.7  $\mu$ m e as bandas interestelares difusas são vistas com dificuldade. Retirado de Draine (2003).

É importante enfatizar que  $R_V$  é um fator empírico introduzido para se levar em conta as diferenças observadas na "lei de extinção universal" vista em diferentes ambientes. Nós ainda não compreendemos completamente a física por trás dele.

Devemos encarar  $R_V$  como uma medida da inclinação relativa da curva de extinção, de tal forma que grandes valores de  $R_V$  correspondem a curvas de extinção mais planas com o comprimento de onda. No limite  $R_V \to \infty$ , a curva de extinção é completamente plana, significando que todos os comprimentos de onda são absorvidos de maneira igual, o que corresponde a um "absorvedor (ou sorvedouro) ideal cinza". O fato do valor de  $R_V$  estar entre 3 e 5 indica para nós que a poeira interestelar com certeza não se comporta como um absorvedor ideal.

Na Figura 3.2 podemos ver o comportamento de curvas de extinção com diferentes valores

de  $R_V$ , para várias regiões da Via-Láctea. Nela podemos notar que para  $\lambda^{-1} \leq 1.5 \ \mu m^{-1}$  (o que equivale a cerca de 7000 Å) as curvas são visualmente indistingüíveis, ao menos nesta escala. Já numa escala mais ampliada, veríamos que as curvas se tornam bem assemelhadas em torno de  $\lambda \geq 1.2 \ \mu$ m.

Em comprimentos de onda que vão do ultravioleta ao infravermelho próximo, a lei de extinção interestelar subjacente possui a forma  $A_{\lambda} \propto \lambda^{-1}$ , com desvios significativos em comprimentos de onda longos e curtos. Enquanto há modelos para curvas de extinção interestelar baseadas em misturas de grãos específicos, que discutiremos mais adiante, a curva de extinção interestelar padrão é determinada empiricamente através de medidas espectroscópicas de fontes obscurecidas e não obscurecidas.

No infravermelho, a extinção é uma função que varia suavemente com o comprimento de onda até  $\approx 10 \ \mu\text{m}$ , região a partir da qual a banda de absorção dos Silicatos aumenta a extinção ligeiramente. Em comprimentos de onda mais curtos ( $\lambda < 1.2 \ \mu\text{m}$ ), as curvas de extinção divergem para diferentes valores de  $R_V$ , com a extinção maior para  $R_V = 2.75$ . Nas cercanias do ultravioleta, o forte "bump" em 2175 Å é o *feature* dominante, alterando a forma subjacente proporcional a  $1/\lambda$  da curva de extinção.

# 3.2.1. A Extinção e a Densidade Colunar de Hidrogênio

A quantidade de extinção visual ao longo de uma linha de visada através do meio interestelar é fortemente correlacionada com a densidade colunar total de Hidrogênio. Usando tanto as bandas Ly $\alpha$  do HI como a Lyman-Werner do  $H_2$  no ultravioleta, Bohlin et al. (1978) derivaram a extinção visual,  $A_V$ , por unidade de densidade colunar total de Hidrogênio,  $N_H$ , no meio interestelar difuso:

$$A_V/N_H \approx 5.35 \times 10^{-22} mag \ cm^2,$$
 (3.17)

para  $R_V = 3.1$ .

Esta razão não é universal, como foi mostrado por Rachford et al. (2002) em observações com o FUSE (*Far Ultraviolet Spectroscopic Explorer*) com 23 estrelas com linhas de visada possuindo  $A_V > 1$  através das chamadas nuvens translúcidas. Eles encontraram que a extinção por unidade de densidade colunar total de Hidrogênio cresce com o aumento de  $R_V$ . Um bom ajuste empírico com incertezas em torno de 10% é dado pela parametrização:

$$A_{I_C}/N_H = [2.96 - 3.55 ((3.1/R_V) - 1)] \times 10^{-22} \ mag \ cm^2.$$
(3.18)

Em geral, esses valores são muito úteis na prática. Por exemplo (Pogge 2006), ao se fazer

observações de um objeto extragaláctico em uma linha de visada ao longo do meio interestelar difuso, pode-se utilizar as observações da densidade colunar total de HI ao longo daquela linha de visada, corrigida pela a fração estimada de  $H_2$ , para avaliar o montante da extinção Galáctica em primeiro plano na direção daquele objeto. Tais estimativas são fornecidas pelo NED (*NASA Extragalactic Database*) para todos os objetos pesquisados.

De forma alternativa, medidas de extinção na direção de uma fonte Galáctica particular podem ser usadas para se fazer uma estimativa razoável da densidade colunar total de H ao longo daquela linha de visada, o que é útil saber quando se planeja fazer observações no ultravioleta distante ou nos raios-X moles, onde a absorção por Hidrogênio é um tópico importante.

## 3.2.2. Estrutura Fina na Curva Extinção Interestelar

Em adição à estrutura geral do contínuo, a curva de extinção interstelar possui uma boa quantidade de "estruturas finas" na forma de linhas de absorção e de emissão por componentes discretos originados nos próprios grãos de poeira. Estes perfis (*features*, em inglês) são extremamente importantes, pois eles nos dão pistas vitais sobre a composição e estrutura dos grãos de poeira.

# a) O "BUMP" em 2175 Å:

A característica mais marcantes da curva de extinção é uma larga protuberância ("bump", em inglês) centrada em torno de ~  $2175 \pm 30$  Å na qual há absorção adicional acima do comportamento aproximado de  $\lambda^{-1}$  nos comprimentos de onda adjacentes. Este perfil tem sido atribuído a partículas ricas em carbono, seja na forma de grafite, de grãos de carbono amorfo hidrogenado, ou nas várias formas aromáticas do carbono, mas os modelos ainda não obtiveram sucessso em reproduzir todos os detalhes (tais como as variações no comprimento de onda central e a largura do *feature*). É uma coisa notável que o *feature* possua uma forte dependência com a metalicidade do gás, com a protuberância no ultravioleta parecendo ligeiramente mais fraca na curva de extinção da Grande Nuvem de Magalhães (metalicidade 50% do valor solar), mas essencialmente ausente na na curva de extinção da Pequena Nuvem de Magalhães (metalicidade de 10% do valor solar).

O melhor candidato para explicar o 'bump' em 2175 Å são os pequenos grãos de grafite, sendo que o raio destes grãos situa-se entre 4 Å e 100 Å.

# b) "Features" dos Silicatos no Infravermelho Médio :

Os mais fortes deles são um conjunto de bandas largas centradas em aproximadamente em  $9.7\mu$ m e  $18\mu$ m, sendo que o *feature* em  $9.7\mu$ m está associado com a ligação Si-O e os modos estendidos (*"stretching mode"*, em inglês) nos minerais de silicatos, que geralmente se originam em torno de  $10\mu$ m, e portanto sua identificação é suficientemente segura.

O fato de que a banda em  $9.7\mu$ m é relativamente sem *features*, ao contrário do que é observado em cristais de silicatos de laboratório, sugere que este "silicato astronômico" possui primariamente uma natureza mais amorfa do que cristalina.

A banda em  $18\mu$ m é muito provavelmente devida aos modos de ligação de O-Si-O em silicatos, e é também relativamente bem identificada. Uma banda em  $11.3\mu$ m tem sido temporariamente identificada com os modos "stretch/bend" da ligação Si-C no carbeto de silício, sendo usualmente detectada em envelopes de poeira em torno de estrelas carbonadas. Devido ao fato de que estes compostos estão ligados a objetos sólidos, os níveis de energia detectados estã o distorcidos com relação às bandas moleculares puras vistas no laboratório, tornando uma identificação unívoca e exata muito difícil.

#### c) Bandas Interestelares Difusas ("DIBs"):

Estes são features fracos, muito largos ( $FWHM \ge 1$ Å) vistos em comprimentos de onda visíveis (ver Figura 3.3). Desde que foram descobertas em 1922 (Heger 1922) até os dias de hoje, nenhuma das cerca de 154 DIBs foram seguramente identificadas (Draine 203). O fato das bandas serem muito largas exclui moléculas com menos de 5 átomos na fase gasosa, portanto é mais provável que as DIBs sejam associadas com populações de grãos de poeira.

A DIB mais forte está localizada em  $\lambda = 4430$  Å. A intensidade das DIBs está correlacionada com a extinção por poeira, mas a conexão física exata com os grãos de poeira ainda é incerta (isto é, sabemos que as DIBs e os grãos de poeira não estão relacionados, mas não podemos ainda de maneira convincente prever quais DIBs aparecerão e com quais intensidades a partir de primeiros princípios). A identidade e a física dos portadores das DIBs ainda são um mistério para a pesquisa do meio interestelar.

#### d) "Features" Alifáticos do C-H em 3.4µm:

Este é um *features* largo de extinção em  $3.4\mu$ m, visto ao longo de linhas de visada onde a extinção interestelar é muito alta ( $A_V > 10$ ), associado com grãos de material refratário desde que ele é visto freqüentemente em regiões de gás atômico difuso (Adamson et al. 1990).

Ele é identificado com o modo *stretching* da ligação C-H em hidrocarbonetos alifáticos (Sandford et al. 1991). Sua origem não é clara (Pendleton & Allamandola 2002), mas sugestões



**Figura 3.3** Bandas interestelares difusas (DIBs) em torno da região entre 5700 Å e 6670 Å. Retirado de Draine (2003).

incluem resíduos de hidrocarbonetos produzidos por fotólise no ultravioleta (UV) de mantos de gelo em grãos (Greenberg et al. 1995), carbono hidrogenado amorfo (Duley et al. 1998) e mantos de hidrocarbonetos em grãos de silicatos.

## e) Gelos Interestelares:

Os features mais forte dos gelos são a banda " stretch" de O-H em  $3.1\mu$ m, associada ao gelo de água ( $H_2O$ ); mais dois features não-identificados em  $6.1\mu$ m e  $6.8\mu$ m; e uma banda em  $15.2\mu$ m positivamente identificada com o gelo de  $CO_2$ , que foi descoberta com o ISO (ver Whittet et al. 1996).

Outras bandas de gelo são as de CO,  $CH_4$ ,  $NH_3$ , e  $CH_3OH$ . Acredita-se que estas bandas se originam em "mantos" gelados que envolvem grãos de poeira em nuvens moleculares densas. Os mantos de gelo não são normalmente encontrados em grãos do meio interestelar, pelo fato de que a exposição ao campo de radiação do meio interestelar em geral sublima os gelos (por exemplo, *features* de gelo de água na nuvem escura de Touro só são vistas quando  $A_V > 3.3$ ).

As bandas de gelo são borradas em *features* largos porque os gelos estão condensados numa fase sólida sobre um grão sólido. Um *features* de gelo denominado XCN em 4.62 $\mu$ m é atribuído a uma ligação  $C \equiv N$ , mas o portador correspondente a "X" ainda não foi identificado (Chrysos-

tomou et al. 1996, Hough et al. 1996).

O monóxido de carbono (CO) é a molécula mais comumente observada na fase de gás, mas pode se condensar como uma "geada" sobre grãos de poeira quando a temperatura cai abaixo de ~ 17K. Tal condensação pode levar a uma depleção significativa do CO para fora da fase de gás nas regiões mais internas das nuvens moleculares. O gás carbônico ( $CO_2$ ) ainda não foi positivamente observado na fase de gás (apesar de numerosas buscaas), mas é visto como um gelo condensado sobre a superfície de grãos. Em ambos os casos, a forma das bandas de gelo depende da presença de água e o estado das moléculas na fase de gelo.

## f) "Features" dos Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (PAHs):

Estes compõem uma família de cinco (com certeza) bandas estreitas de emissão em  $3.3\mu$ m,  $6.2\mu$ m,  $7.7\mu$ m,  $8.6\mu$ m,  $11.3\mu$ m e  $12.7\mu$ m, muitas vezes associados com *features* mais fracos no visível em fontes brilhantes (ver Figura 3.4). Alguns também foram observados em absorção, particularmente o *features* em  $6.2\mu$ m e possivelemente o de  $3.3\mu$ m (ver Sturm et al. 2000).



**Figura 3.4** "Features" em emissão de PAHs no espectro de  $5\mu$ m a  $15\mu$ m da nebulosa de reflecção NGC 7023. Retirado de Draine (2003).

Previamente eles foram chamados de "Bandas Não-Identificadas do Infravermelho" (UIB,

em inglês), mas agora elas são mais genericamente referidas como os "Bandas Aromáticas do Infravermelho (AIB)", porque eles estão associados a grãos carbonáceos aromáticos, sendo que os portadores mais prováveis parecem ser os Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (PAHs). Eles são vistos na direção de Nebulosas Planetárias, cirrus em altas-latitudes, regiões HII, nebulosas de reflexão, e objetos estelares jovens, principalmente em regiões densas (ver Tielens et al. 1999 para uma revisão, Lu et al. 2003). Os *features* das AIBs observados nesta ampla gama de objetos são muito similares (em posição e largura), considerando-se que para esses objetos o campo de radiação estelar e a temperatura efetiva variam muito, comparando-se uns com os outros (de 1 a 104 vezes o campo de radiação interestelar padrão,  $T_{\rm eff} = 11000$  a 50000 K), conforme pode ser visto em Boulanger 1999.

Todos os *features* de PAHs foram observados no meio interestelar difuso (ver Mattila et al. 1996). Em moléculas com anel de carbono aromático, os modos vibracionais opticamente ativos resultantes são os vários modos *bending* e *stretching* das ligações C-H e C-C, que correspondem razoavelmente bem aos *features* observados.

O feature em  $3.3\mu$ m é associado com os modos stretchingdo C-H, enquanto que o modo stretching do C-C é associado com as bandas em  $6.2\mu$ m e  $7.7\mu$ m, sendo que os outros são associados com vários modos bending da ligação C-H (no mesmo plano ou fora de plano). Uma associação detalhada é difícil porque espera-se que os PAHs de laboratório divirjam daqueles imersos nos ambiente com campo de radiação mais duros do espaço interestelar.

Allamandola et al. (1989) também indicam que podem ocorrer determinados *features* em certos comprimentos de onda, dependendo do número de átomos de carbono vizinhos à ligação C-H no modo *bending* fora de plano (ver Figura 3.4). Eles são mostrados na Figura 3.4 (ver também a Figura 3.5 para uma ilustração dos modos de ligação mono, duo, trio e quartet) e são os que seguem:

- $11.3\mu$ m, quando não há H adjacente (mono H);
- 12.0µm, quando há dois H adjacentes (duo H);
- $12.7\mu m$ , quando há três H adjacentes (trio H);
- 13.55μm, quando há quatro H adjacentes(quartet H);

Os features em 8.6  $\mu$ m são extremamente sensíveis à intensidade da banda de absorção em 9.7  $\mu$ m dos silicatos, enquanto que o features em 12.7  $\mu$ m é contaminado pela linha do [NeII] em 12.8  $\mu$ m.

Outras sugestões para os portadores dos *features* de PAHs são os grãos muito pequenos consistindo de carbono amorfo hidrogenado (HACs, em inglês - ver Duley & Williams 1981,



Figura 3.5 A estrutura de 4 moléculas de PAHs. Podemos ver exemplos de sítios de mono H, duo H, trio H, e quartet H. Retirado de Draine (2003).

Borghesi et al. 1987, Jones et al. 1990) ou compostos carbonáceos ("Quenched Carbonaceous Composites - QCCs -", em inglês) como sugerido por Sakata et al. (1987,1990), carvão (ver Papoular et al. 1989, 1993), fulerenos (Webster 1993), e nanodiamantes interestelares (Jones & d'Hendecourt 2000).

Embora eles sejam associados com moléculas de PAH, até agora nenhum "portador" particular de PAH foi positivamente identificado para qualquer um dos *features*. As comparações entre as observações e os espectros de laboratório são sempre próximas, mas nunca próximas o suficiente. Isto levou alguns pesquisadores a suspeitar que os *features* dos PAHs surgem de misturas complexas de portadores diferentes (misturas de PAHs neutros e positivamente carregados, como discutido por Allamandola et al.1999). As propostas incluem moléculas livres de PAHs, aglomerados de PAHs, e partículas compostas ao menos em parte por PAHs.

Outros pesquisadores investigaram o que acontece aos espectros de vários PAHs, HACs, etc, quando eles são "danificados" ou "modificados" pelo ambiente radiativo duro do espaço interstelar (ionização, adição ou perda de hidrogênio, etc.). Desde que tais condições não podem ser facilmente reproduzidas nos laboratórios (ao menos, ninguém conseguiu ainda), isto é muito difícil de testar. Cálculos detalhados em mecânica quântica ainda estão além de nossa capacidade computational para tais moléculas complexas, embora grandes progressos estejam acontecendo. Por fim, as origens dos PAHs permanecem desconhecidas e esta é uma questão sujeita a considerável especulação.

#### g) Bordas de Absorção de Raios-X:

Os grãos de poeira também podem absorver e dispersar Raios-X, embora para um fóton de Raios-X, um grão de poeira se pareça com uma nuvem densa de gás atômico, com as energias das bordas sendo modificadas pelo fato dos grãos serem materiais sólidos ao invés de gasosos. Bordas de absorção fotoelétricas foram vistas para o Carbono, o Oxigênio, o Ferro, o Magnésio, e o Silício com os telescópios Chandra e XMM (Paerels et al. 2001, Takei et al. 2002, Schulz et al. 2002).

#### h) Emissão no Contínuo:

Dois componentes de emissão no contínuo podem se originar da poeira:

i. A "Emissão Vermelha Estendida " (Extended Red Emission, ou ERE em inglês), uma banda larga em emissão sem *features*que atinge o ponto máximo entre ~ 6100Å e 8200Å. Em algumas nebulosas esta emissão pode contribuir tanto quanto 30% -50% do fluxo na banda fotométrica I (centrada em ~ 8800Å). É quase certamente de origem fotoluminescente: a absorção de um fóton óptico ou ultravioleta seguido por sua re-emissão.

Em algumas nebulosas a eficiência de conversão pode ser tão alta quanto 10%. O material fotoluminescente mais provável é algum tipo de material carbonáceo, mas nenhuma identificação conclusiva com um portador em particular (PAHs, pequenos silicatos ou grãos carbonáceos, etc) foi feita.

# ii. A Radiação Térmica no Contínuo devido aos Grãos de Poeira. Há duas possibilidades aqui:

a) O Contínuo no Infravermelho Distante (FIR, com  $\lambda > 60\mu$ m) originado de grãos aquecidos (*warms*) de tamanho normal (raio > 0.01 $\mu$ m, ou seja 100Å) em equilíbrio térmico com o campo de radiação ambiente ( $T_{grão} \approx 20K - 40K$ ). Esta emissão inclue as emissões mais frias de "cirrus" (grãos em equilíbrio com o campo de radiação interestelar - ISRF) e a poeira mais quente associada com os aglomerados de estrelas, especialmente em regiões de formação estelar.

b) O Contínuo entre  $3\mu m$  -  $30\mu m$  originado do aquecimento de pequenos grãos (tamanhos de 5Å - 50Å) fora do equilíbrio térmico a temperaturas que vão de umas poucas centenas de graus Kelvin até uns poucos milhares de graus Kelvin. Ou seja, a emissão devido a flutuações de temperatura em pequenos grãos.

Em geral, a emissão térmica não é bem descrita pela radiação de corpo negro, pois ela se constitui num espectro de corpo negro modificado por uma dependência da emissividade com o comprimento de onda ( $\lambda^{-1}$  ou  $\lambda^{-2}$ ).

# 3.2.3. A Curva de Extinção Extragaláctica

Correções para o efeito de avermelhamento por poeira são cruciais quando observações em múltiplos comprimentos de onda são usadas para derivar quantidades intrínsecas para uma galáxia. A poeira suprime (extingüe) a radiação seletivamente, com a luz ultravioleta no referencial de repouso da galáxia sendo mais afetada que a emissão óptica e infravermelha. Como uma complicação adicional, limitações em resolução angular usualmente produzem observações de regiões galácticas não-resolvidas, e o avermelhamento *efetivo* da radiação emergente é determinado por detalhes de geometria da tríade poeira-gás-estrelas.

De acordo com Calzetti (2001) e Calzetti & Heckman (1999), o grau com o qual a luz é afetada em galáxias jovens e/ou distantes é difícil de quantificar, a medida que o conteúdo de metais (e conseqüentemente de poeira) por unidade de massa é apenas um dos parâmetros a se levar em consideração: a opacidade de uma galáxia é também determinada por sua fração de gás. Embora as galáxias atuais sejam mais ricas em metais do que as galáxias a altos redshifts, as primeiras podem ser menos opacas, visto que elas possuem uma grande fração do gás encerrado em estrelas, removendo desta forma poeira do meio interestelar.

No passado, mais gás estava disponível por unidade de massa; assim, mesmo pequenas metalicidades possuem efeitos potencialmente maiores em termos de capacidade de obscurecimento da poeira associada. Por fim, devemos também considerar as incertezas introduzidas pela distribuição desconhecida da poeira na galáxia. Os efeitos sobre a luz ultravioleta e visível das várias geometrias de emissores e absorvedores têm sido discutidos por vários autores, sendo esta a maior incerteza em qualquer modelo de opacidade em galáxias.

#### A Curva de Extinção nas Nuvens de Magalhães

A Via-Láctea, a Pequena Nuvem de Magalhães (SMC, em inglês) e a Grande Nuvem de Magalhães (LMC, em inglês) são as únicas três galáxias para as quais a lei de avermelhamento foi bem estabelecida. Isso se deve á dificuldade intrínseca em se observar estrelas em galáxias externas.

As leis de avermelhamento no ultravioleta para os três sistemas são inteiramente diferentes, com o enfraquecimento do 'bump' em 2175 Å e o aumento da inclinação da curva de extinção no

ultravioleta, constituindo uma seqüência que vai da Via-Láctea, passando pela Grande Nuvem de Magalhães e finalmente chegando à Pequena Nuvem de Magalhães. Segundo Kinney et al. (1994), a diferença tem sido atribuída a variações na composição da poeira devido às diferenças em metalicidade entre as três galáxias, mas esta interpretação é difícil de verificar.



**Figura 3.6** Curva de extinção ultravioleta para a Grande Nuvem de Magalhães (LMC). A curva média para as estrelas amplamente distribuídas na LMC (curva com os círculos sólidos) é comparada com aquela para a região de 30 Doradus na LMC (curva tracejada) e com a Via-Láctea (curva pontilhada). Retirado de Whittet 1992.

O estudo das leis de extinção por poeira nas Nuvens de Magalhães é especialmente fascinante porque o gás interestelar em ambas as galáxias possui abundâncias químicas que são substancialmente diferentes daquelas apropriadas para nossa galáxia. Por exemplo, a abundância de oxigênio nas regiões HII da LMC é cerca de duas vezes menor do que em regiões HII da Via-Láctea, emquanto que na SMC este fator é cerca de cinco vezes menor. Tais diferenças nas abundâncias químicas do gás interestelar em outras galáxias pode implicar em possíveis
diferenças na população de poeira interestelar, e conseqüentemente em suas respectivas leis de extinção.

A Figura 3.6 nos mostra duas curvas de extinção distintas calculada para a Grande Nuvem de Magalhães (LMC). Aquela para as estrelas na vizinhança do complexo de 30 Doradus é anômala visto que o '*bump*' em 2175 Å é débil e a ascensão no ultravioleta distante (FUV) é particularmente rápida, comparada com a Galáxia. Estrelas menos amplamente distribuídas na LMC apresentam uma curva de extinção mais normal. Entretanto, é notável que a curva geral da LMC seja similar àquela da Via-Láctea, assemelhando-se, particularmente, com curvas para estrelas individuais com avermelhamento por nuvens difusas.



Figura 3.7  $Q(\lambda)$ , a profundidade óptica normalizada com  $\tau_{\lambda,\beta}^{linha}$  (profundidade óptica calculada usando-se as linhas de emissão observadas  $H_{\alpha}$  e  $H_{\beta}$ , supondo uma razão intrínseca de Balmer  $H_{\alpha}/H_{\beta} = 2.87$  e corrigindo para a extinção da Via-láctea em primeiro plano) para a Via-áctea, a Pequena e a Grande Nuvem de Magalhães. A linha contínua mostra a curva de extinção calculada ao se comparar as razões de linhas de  $H_{\alpha}$  e  $H_{\beta}$  para duas galáxias espirais. Retirado de Kinney et al 1994.

Para o caso da Pequena Nuvem de Magalhães (SMC), parece que a lei de extinção carece do '*bump*' em 2175 Å visto na lei de extinção para a Via-Láctea (e em menor grau na LMC); de fato, a extinção parece seguir uma simples lei de  $\lambda^{-1}$  através do visível e do ultravioleta. Entretanto, neste caso os resultados devem ser considerados com cautela visto que as leis de extinção são disponíveis para apenas poucas estrelas da SMC.

A curva de extinção para as três galáxias pode ser vista na Figura 3.7. Apesar de ser uma característica facilmente reconhecível na curva de extinção, o '*bump*' em 2175 Å não pode ser utilizado como um calibrador confiável da quantidade de poeira em uma galáxia. Sua profundidade intrínseca é diferente para diferentes galáxias, como pode ser visto na Figura 3.7. Além disso, o '*bump*' dentro da própria Via-Láctea muda suas características ao longo de diferentes linhas de visada (Calzetti 1998).

A natureza da variabilidade do '*bump*' de galáxia para galáxia não é completamente claro, embora ele provavelmente seja o reflexo de uma distribuição de tamanho de grão variável e/ou de mudanças na razão dos ingredientes de poeira com as características do meio interestelar local e variações de ambiente (Calzetti 1998). E mesmo que a curva de extinção fosse independente das características da galáxia, a profundidade observada do '*bump*' em 2175 Å é uma função não apenas da quantidade total de poeira ao longo da linha de visada, mas também da distribuição geométrica da poeira relativa aos emissores.

### A Opacidade

Métodos clássicos para se calcular a curva de extinção (por exemplo, o método de diferença de cor) não são adequados para galáxias distantes. Entretanto, faz-se necessário algum tipo de correção para o avermelhamento nessas galáxias. O parâmetro que geralmente é levado em consideração para este tipo de estudo é a opacidade.

Calzetti & Heckman (1999) assinalam que a opacidade por poeira em uma galáxia é determinada pela combinação de três ingredientes: a densidade de coluna de poeira, a curva de extinção e a distribuição geométrica da poeira na galáxia. Eles adotam como curva de extinção a curva para a Pequena Nuvem de Magalhães, a qual segundo eles é a melhor curva disponível para galáxias com formação estelar, baixa metalicidade e altos redshifts. Afirmam também que a escolha de uma curva de extinção é importante apenas para  $\lambda < 2800$ Å, já que as três curvas de extinção conhecidas dão valores de atenuação similares para comprimentos de onda mais avermelhados.

### I) A Opacidade a Baixos Redshifts:

Diferentes autores têm tomado diferentes abordagens para o problema da determinação da opacidade das galáxias no Universo local.

Os métodos mais largamente usados em caso de galáxias de discos são (Calzetti 2001): testes da dependência do brilho superficial com a inclinação, comparações em múltiplos comprimentos de onda, e a análise estatística de variações na cor e no número de contagens induzidas por uma galáxia de primeiro plano para fontes de fundo.

A técnica mais promissora para se medir a opacidade de poeira de uma galáxia é aquela que mede o obscurecimento produzido por uma galáxia em primeiro plano sobre uma fonte de fundo (Calzetti 1998). As fontes de fundo podem ser ou galáxias distantes ou outra galáxia próxima coincidindo em parte com a primeira ao longo da linha de visada (White, Keel & Conselice 2000). Com esta técnica, a fonte de luz é externa a, e assim não contaminada por, a galáxia para qual a opacidade está sendo medida. Por conseguinte, todas as complicações devido à geometria complexa da poeira dentro da galáxia são circundadas, a medida que a galáxia em primeiro plano atua como uma cortina de poeira em frente das fontes de fundo. Até então, estudos têm se concentrado em galáxias espirais como objetos de primeiro plano.

Outra técnica potencialmente poderosa em se determinar a opacidade de uma galáxia é medir a razão entre a emissão estelar no ultravioleta(UV)-óptico-NIR(infravermelho próximo) e a emissão por poeira no FIR (infravermelho distante). Esta razão representa a quantidade de radiação estelar que foi absorvida pela poeira e re-irradiada no FIR. O poder do método é que ele se baseia unicamente em conservação de energia. A deficiência é que uma determinação acurada do balanço de energia requer a amostragem de toda a faixa de comprimentos de onda desde o ultravioleta distante (FUV) até o infravermelho distante (FIR), enquanto, em geral, apenas alguns dados esparsos pontuais estão disponíveis ao longo do espectro.

Ainda de acordo com Calzetti (2001), há evidências apoiando que as galáxias no Universo local não são geralmente muito opacas. Os dados disponíveis sugerem que a poeira absorve ~ 1/3, e provavelmente não mais que 2/3 da luz estelar total em galáxias locais. A fração da radiação estelar reprocessada na janela IRAS de 8  $\mu$ m a 120  $\mu$ m é de cerca de 25% – 30% (Soifer & Neugebauer 1991); isto implica que a emissão infravermelha corresponde a uma fração em torno de 35% a 40% da energia bolométrica total dentro de 100 Mpc local, uma vez que sejam incluídas correções bolométricas da janela IRAS em toda a faixa do infravermelho.

Na Tabela 3.1 podemos ver alguns valores estimados para a opacidade de Galáxias Locais (até  $\sim 100$  Mpc), abrangendo desde as elípticas e lenticulares até as irregulares (Calzetti 2001).

Galaxy Type	$L_{dust}/L_{bol}^{a}$	$A_{0.15,f}{}^{b}$	$A_{0.15}$ <sup>c</sup>	$A_{B,f}{}^{b}$	$A_B^{c}$	$A_{I,f}$ <sup>b</sup>	$A_I^c$	$A_{K,f}^{b}$	$A_K^c$
E/S0	0.05 - 0.15	0.10 - 0.20		0.05 - 0.10		0.02 - 0.04		< 0.02	
Sa–Sab		0.40 - 0.65	0.90 - 1.25	0.20 - 0.40	0.50 - 0.75	0.10 - 0.15	0.30 - 0.40	$\lesssim 0.05$	$\lesssim 0.15$
Sb–Scd	0.45 - 0.65	0.60 - 0.80	1.20 - 1.45	0.30 - 0.50	0.65 - 0.95	0.15 - 0.20	0.40 - 0.45	0.05 - 0.10	0.15 - 0.20
Irr	0.25 - 0.40	0.30 - 0.45	0.60 - 0.75	0.10 - 0.15	0.30 - 0.40	$\sim 0.05$	$\sim 0.15$	$\lesssim 0.02$	$\lesssim 0.06$

Tabela 3.1 Atenuação Média por poeira em Galáxias Locais. Retirado de Calzetti (2001)

<sup>a</sup>Fração da radiação bolométrica absorvida e/ou espalhada pela poeira.

<sup>b</sup>Atenuação "Face-on", em magnitudes, no comprimento de onda/banda especificado. Os valores para as bandas B e I são derivados de várois autores. Os outros comprimentos de onda são dos modelos 4 para galáxias E/S0, e do modelo 5 para para os discos e galáxias irregulares (ver seção 2.2 de Calzetti 2001).

<sup>c</sup>Atenuação por inclinação média para os discos e galáxias irregulares do modelo 5 (ver seção 2.2 de Calzetti 2001).  $A_{0.15}$  refere-se à atenuação em  $\lambda = 0.15 \mu m$ .

#### II) A Opacidade a Altos Redshifts:

Em altos redshifts, a quantidade de comprimentos de onda amostrados é mais limitada do que a baixos redshifts, visto que a faixa ultravioleta e óptica no referencial de repouso da galáxia é observada ('redshifted') na faixa óptica e infravermelha do espectro, respectivamente; assim, as determinações de opacidade são menos seguras do que no universo local.

De acordo com Calzetti (1998), deveríamos esperar que a opacidade por poeira fosse um problema menor em altos redshifts, já que galáxias jovens são também pobres em metais e, conseqüentemente pobres em poeira. Entretanto, baixas metalicidades estão acopladas com grandes densidades de coluna de gás, as quais podem em princípio produzir opacidades nãodesprezíveis. Em adição, as técnicas observacionais padrão para a observação dessas galáxias a altos redshifts têm como alvo a emissão ultravioleta no referencial de repouso, uma faixa de comprimento de onda muito sensível aos efeitos de obscurecimento por poeira.

Calzetti (1998) menciona estudos que indicam que entre 70% e 90% da luz ultravioleta é perdida em obscurecimento por poeira, em galáxias localizadas a altos redshifts.

A comparação de múltiplos comprimentos de onda é o único acesso prático para se medir a opacidade por poeira de galáxias além de umas poucas centenas de megaparsecs. Contudo, por causa das dificuldades de observacionais, a cobertura de comprimento de onda de uma amostra típica é limitada a algumas poucas janelas, muitas vezes com pouca sobreposição de amostra para amostra (Calzetti 1999). As medidas do conteúdo, natureza, e efeitos de opacidade da poeira em galáxias distantes estão ainda em uma etapa inicial: o quadro é bastante incompleto e controvertido, mas grandes avanços foram feitos nos últimos anos com as missões espaciais (ISO, Spitzer, COBE, FIRAS, SCUBA).

A primeira evidência da presença de poeira em sistemas a altos redshifts veio do estudo de *Damped Lya Systems* (DLA). a razão metais-poeira nas DLAs está em torno de 50%–60% daquela da Via-Láctea; isto combinado com a em geral baixa metalicidade indica que as DLAs

são sistemas relativamente transparentes, com razões gás-poeira entre 2% e 25% daquela da Galáxia (Calzetti 1999).

A ausência da associação do "bump" em absorção de 2175 Å com as DLAs levou Pei et al. (1991) a concluir que a curva de extinção para esses sistemas é provavelmente similar àquela observada nas Nuvens de Magalhães.

### 3.3. MODELOS PARA GRÃOS DE POEIRA

A poeira interestelar é completamente caracterizada por sua composição química, sua morfologia, a distribuição de tamanho de grãos de suas várias partículas, e pela abundância, relativa ao hidrogênio, de seus constituintes elementais (Zubko et al. 2004).

A extinção por poeira no espaço interestelar adiciona importantes vínculos que nos ajudam a especificar a natureza dos grãos. A dependência da extinção com o comprimento de onda, agora conhecida sobre um intervalo de comprimentos de onda que se estende desde  $0.1\mu m$  até aproximadamente  $1000\mu m$ , fornece informação importante sobre a distribuição de tamanho das partículas de poeira, enquanto que a quantidade total de extinção no óptico para uma linha de visada, juntamente com o conhecimento da densidade de coluna de hidrogênio, é o principal determinante para a razão gás-poeira interestelar.

O avermelhamento observado através dos comprimentos de onda óptico e infravermelho próximo restringem o tamanho da poeira interestelar à faixa de tamanho sub-micrométrica. Já a ascensão não-linear continuada da extinção através do ultravioleta distante aponta para a existência de pequenos grãos quando comparados com os comprimentos de onda no ultravioleta. Por outro lado, as quantidades relativas de extinção no visual e no ultravioleta distante ajudam a especificar a razão de massa dos grãos muito pequenos, absorvendo principalmente no ultravioleta, para os grandes grãos de tamanho sub-micrométricos, os quais contribuem com absorção e espalhamento através do faixa espectral infravermelho próximo/óptico/ultravioleta. O grande grau de variação espacial nesta razão indica que as variações na distribuição de tamanho dos grãos são similarmente grandes dentro de nossa galáxia. (Witt 2000).

Os modelos de poeira interestelar desenvolveram-se com o avanço dos dados observacionais. O primeiro modelo de poeira interestelar compreensível foi aquele elaborado por Mathis, Rumpl, & Nordsieck (1977, conhecido como MRN). E até recentemente, este era o modelo de poeira mais popular.

A "receita de grãos" do modelo MRN é composta de seis materiais diferentes: Grafite (C),

Carbeto de Silício (SiC), Ferro (Fe), Magnetita  $(Fe_3O_4)$ , Olivinas, e os Piroxênios. Qualquer combinação de dois materiais desta lista forneceu ajustes razoáveis para a curva de extinção interestelar observada entre 1100 Å e 1 $\mu$ m, contanto que pelo menos um dos dois materiais fosse a grafite. Mathis et al (1977) concluíram então que a maior parte da extinção na galáxia é devido ao Grafite, juntamente com algum montante de silicatos de várias espécies misturados.

Há, naturalmente, problemas com a "receita de grãos" do MRN:

1) As propriedades ópticas dos materiais compostos por silicatos nas condições do espaço interestelar são fundamentalmente desconhecidas. Especialmente o índice da refração,  $\mu$ , que pode ser substancialmente diferente dos valores encontrados nas "amostras puras" utilizadas em laboratório, devido aos efeitos resultantes de fótons ultravioleta ou raios cósmicos, que podem alterar sua estrutura. De maneira análoga, todos esses materiais possuem índices de refração dependentes da temperatura.

2) Ninguém sabe as propriedades ópticas apropriadas para se usar no grafite em condições interestelares. O grafite possui diferentes indices refrativos ( $\mu$ ) para os seus diferentes arranjos estruturais, mas ninguém sabe ao certo qual arranjo estrutural assumir. E eles são o dependentes da temperatura.

3) O declive da lei de potência da distribuição de tamanho de grãos faz o ajuste à curva de extinção interestelar observada ser insensível ao limite inferior de massa (o limite do espalhamento Rayleigh) e o tamanho máximo (espalhamento cinza).

Draine & Lee (1984) atualizaram a "receita de grãos" do modelo MRN introduzindo melhores propriedades ópticas, inclusive índices de refração dependentes da temperatura, e incluíram ajustes para as medidas de extinção em comprimentos de onda mais longos (na época em que o modelo de MRN foi lançado as medições da curva de extinção interestelar além de 1  $\mu$ m eram incertas). Outra inovação foi a introdução dos "silicatos interestelar fictícios, um componente com a parte imaginária do índice da refração planejada para fazer as partes visível e infravermelha da curva de extinção concordarem com as observações da extinção em direção ao aglomerado do Trapézio na Nebulosa de Órion.

Na receita de Draine & Lee, o grafite ainda constitui a maior parte da extinção interestelar em comprimentos de onda do ultrtavioleta ao visível, com os silicatos dominando na faixa do infravermelho entre  $10\mu$ m e  $50\mu$ m, e o grafite que novamente fica dominante para  $\lambda \gtrsim 70\mu$ m no infravermelho distante, mas agora com  $Q_{abs} \propto \lambda^{-2}$ . Para  $\lambda \ge 1$  mm, a observação mostra que  $Q_{abs} \propto \lambda^{-2}$ , mas o material responsável ainda é desconhecido.

A primeira evidência observacional da imcompletude do modelo MRN de poeira foi fornecida

pelo estudo de todo o céu promovido pelo IRAS, que forneceu o espectro médio de emissão em infravermelho (IR) nos comprimentos de onda de 12  $\mu$ m, 25  $\mu$ m, 60  $\mu$ m, e 100  $\mu$ m do meio interestelar difuso. A observação mostrou um excesso de emissão em 12  $\mu$ m e 25  $\mu$ m em cima daquele esperado pela poeira aquecida pelo campo local de radiação interestelar (ISRF, em inglês), e irradiando na temperatura de equilíbrio da poeira. Draine & Anderson (1985) sugeriram que a distribuição de tamanho de grãos do MRN deveria ser extendida até grãso muito pequenos (VSGs, em inglês), com raios de ~ 5Å, os quais sofrem de flutuações de temperatura quando aquecidos pelo campo de radiação interestelar local.

Allamandola, Tielens, & Barker (1985), e Léger & Puget (1984) identificaram estes pequenos grãos com os Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (PAHs), moléculas cuja presença no meio interestelar foi inferida por intermédio da onipresença de *features* de emissão em 3.3  $\mu$ m, 6.7  $\mu$ m, 7.6  $\mu$ m, 8.6  $\mu$ m, e 11.3  $\mu$ m, além de outras linhas mais recentemente. Devemos lembrar que a identificação dos PAHs com estes *features* no infravermelho não é universalmente aceita, conforme já mencionamos quando falamos sobre a estrutura fina na curva extinção interestelar, e como também pode ser visto na revisão feita por Tokunaga (1997).

O DIRBE (Diffuse Infrared Background Experiment e o FIRAS Far Infrared Absolute Spectrophotometer, instrumentos a bordo do satélite COBE Cosmic Background Explorer, forneceram a mais extensa cobertura em comprimento de onda (3.5  $\mu$ m a 1000  $\mu$ m) da emissão infravermelha do meio interestelar difuso, e evidência indireta para a emissão dos PAHs nesta fase do meio interestelar (Dwek et al. 1997).

Dwek e colaboradores (1997) tentaram ajustar a extinção interestelar e a emissão difusa no infravermelho usando uma mistura de silicato sem envoltórios ("bare", em inglês) e partículas de grafite com as constantes ópticas de Draine & Lee (1984), e PAHs com as propriedades ópticas de Désert et al. (1990). O modelo não conseguiu reproduzir a extinção interestelar observada, principalmente em conseqüência da natureza não-física das propriedades ópticas adotadas para os PAHs na região do ultravioleta/óptico. Draine & Li (2001) e Li & Draine (2001) melhoraram este modelo usando uma caraterização mais realista das propriedades ópticas do PAHs, baseados em medições de laboratório. Contudo, o seu modelo necessita que um montante excessivo do Mg, Si, e Fe seja encerrado na poeira, quase duas vezes o ferro disponível para um meio interestelar com abundâncias solares.

Um modelo completo para grãos interestelares deve fornecer informações detalhadas sobre a composição, distribuição de tamanho, propriedades ópticas, estrutura física e formato dos grãos interestelares, as quais devem ser amplamente consistente com uma grande lista de vínculos observacionais (atualmente em rápida expansão). Em adição, tal modelo deverá também nos permitir antecipar corretamente fenômenos observacionais ainda não vistos.

De acordo com Dwek (2005), um modelo de poeira interestelar viável deveria ajustar todos os vínculos observacionais originários primeiramente da interação da poeira com o campo de radiação incidente ou com o gás do ambiente. Esses vínculos incluem:

1. A extinção, o obscurecimento, e o avermelhamento da luz estelar;

 A emissão infravermelha dos envelopes ao redor das estrelas as diferentes fases do meio interestelar (HI difusa, regiões H II, regiões de fotodissociação – ou *PDRs*, em inglês –, e nuvens moleculares);

3. O modelo de depleção de elementos e vínculos de abundâncias interestelares;

4. A emissão vermelha extendida vista em várias nebulosas;

5. A presença de raios-X, ultravioleta, e halos visuais em volta de fontes variáveis (binárias de raios-X, estrelas Nova, e Supernovas);

6. A presença de estruturas nas nas bordas de absorção de raios-X nos espectros de fontes de raios-X;

7. A reflecção e polarização da luz estelar;

8. A emissão em microondas, presumivelmente devido a grãos de poeira em rotação;

9. A presença de poeira interestelar e anomalias isotópicas em meteoritos e no sistema solar;

10. A produção de fotoelétrons necessários para se aquecer regiões de fotodissociação (PDRs) neutras;

11. A emissão infravermelha de plasmas que emitem raios-X.

A despeito dos substanciais avanços na área, tal modelo completo ainda não existe. Não é razoável esperar que um único modelo de poeira ajuste simultaneamente todos esses vínculos observacionais, desde que eles variam em diferentes ambientes astrofísicos, reetindo as modificações regionais nas propriedades da poeira.

Contudo, um modelo de poeira interestelar viável deve ser derivado ao se ajustar simultaneamente pelo menos um conjunto básico de vínculos observacionais. Além disso, ele deve constituir-se de partículas com propriedades ópticas, físicas e químicas realistas, e necessitam de não mais do que a abundância no meio interestelar de qualquer elemento dado a ser confinado n a poeira.

O que temos são alguns modelos quase completos que satisfazem ao menos alguns subconjuntos de vínculos observacionais, e também um grande número de modelos mais limitados, atendendo a vínculos mais específicos. Estes últimos tipos de modelos têm sido projetados para explicar vínculos observacionais únicos, sem mesmo tentar se aproximar da completeza.

Na prática, a maioria dos modelos de poeira interestelar foram construídos ao se derivar as abundâncias e distribuições de tamanho de alguns sólidos bem estudados, como o grafite ou o silicato, utilizando observações selecionadas tais como a extinção interestelar média, a polarização, ou a emissão infravermelha difusa como vínculo; e então os modelos foram verificados quanto à coerência com outros vínculos observacionais tais como a dependência do albedo com o comprimento de onda e as abundâncias interestelares (Dwek 2005).

As propriedades da poeira expõem variações signicativas ao longo de diferentes linhas de visada. Algumas das evidências observacionais de tais variações são (Draine 2003):

• as variações no declive do aumento no ultravioleta distante e a intensidade do "bump" em 2175Å;

• a riqueza de estruturas minerais e gelo visto em estrelas desenvolvidas, mas que setão ausentes no meio interestelar difuso;

• variações no padrão de depleção de elementos nas fases quentes, mornas, e frias do meio interestelar.

Essas variações provavelmente resultam da existência de uma grande variedade de fontes de produção de poeira, as quais produzem poeira com diferentes composições químicas e estruturas minerais; e do fato de que o meio interestelar não é homogeneamente misturado. Além disso, o processamento do grão no meio interestelar por meio de estilhaçamento térmico, as colisões grão-grão, a coagulação de grãos, e a acresção em nuvens desempenham um papel importante na produção de grandes variações espaciais nas propriedades da poeira. Tais variações se mani-festam na extinção do óptico/ultravioleta observada e na emissão infravermelha de galáxias.

Há vários modelos de poeira na literatura que utilizam uma grande gama de tipos de grãos e composições químicas. Destes últimos podemos mencionar silicatos e grafites (com ou sem envoltórios), hidrocarbonetos aromáticos policícliclos (PAH's), carbono amorfo, carbono amorfo hidrogenado, materiais orgânicos refratários e grãos fractais.

Quanto à função de distribuição de tamanhos, os modelos geralmente empregam uma distribuição em lei de potência (modelo MRN) ou exponencial, podendo alterar o intervalo de tamanho para os grãos.

Boas revisões sobre extinção, propriedades da poeira e os vários modelos de grãos são fornecidas por Savage & Mathis (1979), Mathis (1990), Dorschner & Henning (1995), Henning (1997), Draine (2003).

Dentre os modelos mais recentes de poeira, podemos citar os de Weingartner Draine (2001),

Li&Draine(2001), eZubko et al.(2004).

Informações mais detalhada sobre os aspectos observacionais e a física da poeira interestelar também podem ser encontrados em dHendecourt et al. (1999), Whittet et al. (2003), no artigo de revisão feito por Draine (2004), Krügel (2003), no volume 154 do ApJSS (2004) dedicado às primeiras observações do Telescópio Espacial Spitzer, e em Dwek (2005).

O modelo de poeira que iremos adotar se baseia em dois trabalhos. O primeiro deles é o trabalho de Siebenmorgen & Krügel 1992 (de agora em diante SK92), o qual se constitui numa extensão dos modelos clássicos de grãos. Este modelo estima satisfatoriamente o espectro emitido pela poeira em alguns ambientes, a saber: a vizinhança solar, duas nebulosas de reflexão, uma nebulosa planetária e uma região de formação estelar (a frente de ionização em Órion A, uma região H II).

O segundo trabalho no qual nos baseamos é o de Efstathiou et al 2000 (Ef2000), os quais tomaram por base o modelo de SK92. Ef2000 versa sobre modelos de transferência radiativa da emissão de radiação em galáxias 'starburst', abrangendo desde a porção ultravioleta do espectro até o milimétrico.

A seguir, vamos descrever com um pouco mais de profundidade um modelo de poeira elaborado por SK92.

Para derivar as propriedades dos grãos interestelares em seu modelo, SK92 levaram em consideração os seguintes condições:

• Os vínculos de abundância cósmica sobre os elementos formadores de poeira;

- A curva de extinção interestelar;
- As ressonâncias em 9.7  $\mu m$  e 18  $\mu m$  (atribuídas aos silicatos);

• A emissão infravermelha em banda larga da poeira aquecida como observada, por exemplo, em regiões de formação estelar;

- Os 'features' estreitos de emissão infravermelha (atribuídos aos PAH's);
- A dependência com o comprimento de onda e a intensidade da polarização;
- As observações da luz espalhada;

• As bandas de absorção infravermelhas atribuídas aos envoltórios de 'gelo' em torno de grãos protegidos da radiação ultravioleta.

A Figura 3.8 nos mostra a curva de extinção interestelar média. O modelo de poeira mostrado no gráfico foi tomado por SK92 para ajustar a vizinhança solar.

SK92 dividiram a curva de extinção em três regiões de comprimento de onda, sendo que em cada região um conjunto particular de grãos é responsável pela extinção. De maneira es-



**Figura 3.8** A curva de extinção interestelar média. O círculos representam os dados de Savage & Mathis, enquanto que a linha cheia se refere ao modelo de SK92 para a vizinhança solar. As contribuições dos três componentes de poeira são mostradas separadamente: os grandes grãos, os pequenos grãos de grafite e os PAH's. Retirado de Siebenmorgen & Krügel 1992.

quemática, temos que:

a) Região de  $\lambda^{-1} < 2$   $\mu m^{-1}$ : Esta parte da curva de extinção pode ser explicada através dos grandes grãos, com raio aproximado entre 100 Å e 2500 Å. Há dois tipos de partículas grandes: os silicatos astronômicos e o carbono amorfo. Em nosso modelo consideraremos os silicatos astronômicos e o grafite no lugar do carbono amorfo.

b) Ressonância em 2175 Å: O melhor candidato para explicar o 'bump' nesta região são os pequenos grãos de grafite. O raio destes grãos situa-se entre 4 Å e 100 Å.

c) A Região de  $\lambda > 5.9 \mu m^{-1}$  (FUV - Ultravioleta Distante): Das três explicações possíveis para ajustar esta região da curva de extinção (uma segunda ressonância do grafite, pequenos grãos de silicatos, PAH's), SK92 optaram pelos PAH's. Vamos utilizar dois componentes de PAH's: um pequeno PAH e um 'cluster' (aglomerado) de PAH's.

Os grandes grãos provêm a maior parte da emissão e absorção em grandes comprimentos de onda. Eles são responsáveis pela ascensão linear na curva de extinção e pela emissão no infravermelho distante (FIR) e nas regiões do submilimétrico. Eles também são responsáveis pelas ressonâncias dos silicatos em 9.7  $\mu m$  e 18  $\mu m$ .

Os pequenos grãos de grafite explicam o '*bump*' em 2175 Å e o 'ombro' (*shoulder*) no infravermelho médio (MIR). Eles emitem primordialmente em comprimentos de onda do infravermelho médio (MIR). Por causa de seu pequeno tamanho, eles sofrem dramáticas flutuações em temperatura.

Os PAH's são necessários para ajustar a curva de extinção no infravermelho próximo (NIR), para infravermelho médio e para a elevação não-linear no ultravioleta distante (FUV). Acreditase que eles são os responsáveis pelos *features* de absorção infravermelhos em 3.3, 6.2, 7.7, 8.6 e 11.3  $\mu m$  (Puget & Léger 1989, Allamandola et al 1989). Os PAH's absorvem principalmente no ultravioleta distante e em menor extensão no visível.

De forma geral, podemos definir os parâmetros básicos dos componentes da poeira como sendo: tamanho do grão  $(a_{-} \in o \text{ limite inferior, enquanto } a_{+} \in o \text{ limite superior, em Å})$ , a eficiência de absorção  $(Q_{abs}(a, \lambda))$  e a distribuição de tamanhos de grão. Para os PAH's, ainda devemos acrescentar o número de átomos de carbono por PAH  $(N_C^{PAH} = N_C)$  e o número de átomos de H  $(N_H^{PAH} = N_H)$ , necessários para calcular os parâmetros anteriores.

#### 3.3.1. Espécies Químicas de Poeira

Espera-se que os grãos de poeira sejam compostos de materiais refratários abundantes (principalmente carbono, silício, etc.) e misturas de Hidrogênio e outros gases abundantes, como o Oxigênio. A composição do grão determina o ídice da refração nessário para se calcular as suas propriedades ópticas.

Nã o há um único tipo de grão suficiente para representar os vários ambientes interestelares: necessita-se de uma mistura de tipos diferentes de grãos formados em condições físicas diferentes. Os materiais principais sã o os silicatos e materiais carbonáceos (gerados a partir do carbono), com gelos de compostos voláteis, como a água ou gás carbônico ( $CO_2$ ) por exemplo, condensados nas suas superfícies, formando os mantos de gelo. Os grãos metálicos puros (como por exemplo esferas ou agulhas metálicas) também foram considerados.

Em geral, espera-se que os silicatos forneç am uma fração substancial da massa total em grãos de poeira no meio interestelar, seguido por compostos carbonáceos.

Nosso conhecimento sobre a composição dos grãos interestelares é proveniente principalmente de seus perfis de espectroscópicos de absorção e emissão, e das depleções de elementos químicos observadas. De acordo com Li & Draine (2001), a visão mais aceita sobre os grãos interestelares nos diz que eles são compostos de silicatos amorfos e alguma forma de material carbonáceo.

Os silicatos amorfos são inferidos a partir do modo estendido ("stretching mode", em inglês) do Si-O em 9.7 $\mu$ m e dos perfis de absorção nas regiões interestelares do "bending mode" em 18 $\mu$ m, relativo à ligação O-Si-O. Além disso, há o fato de que as abundâncias cósmicas de elementos pesados tais como Si, Fe e Mg são altamente depletadas.

O material carbonáceo é deduzido principalmente a partir dos fortes perfis (*features*) interestelares em absorção - no caso, a corcova em 2200 Å - e o fato de que os silicatos sozinhos não serem capazes de prover a extinção necessária, deduzida das observações.

- O modelo de poeira que nós adotamos consiste de três componentes:
- 1) Grandes Grãos de Silicato e Grafite;
- 2) Pequenos Grãos de Grafite;
- 3) Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (PAH's, em inglês).

Como vimos anteriormente, cada um destes componentes é responsável principalmente por uma parte da curva de extinção por poeira, podendo também ter contribuições em outras regiões da mesma curva.

Silicatos são compostos cujos ânions estão constituídos por átomos de silício e oxigênio. Greenberg (1978) chama de silicatos as seguintes substâncias: a 'enstatita'  $(Fe, Mg)SiO_3$ , a olivina  $(Fe, Mg)_2SiO_4$ , o dióxido de silício  $SiO_2$  e o que ele nomeia (sem dar maiores explicações) silicato amorfo generalizado.

Draine & Lee (1984) usam a olivina  $[(Mg, Fe)_2 SiO_4]$  como silicato, enquanto que Laor & Draine (1993) chamam de 'silicato astronômico' a substância  $MgFeSiO_4$ . Para o nosso modelo, vamos seguir o artigo de SK92, os quais adotam como silicato o composto  $Mg_{1.7}Fe_{0.3}SiO_4$ , com uma a massa molecular de 150 u.m.a. e densidade de  $\rho_{sil} = 2.5 \quad g/cm^3$ .

O grafite é uma variedade alotrópica do carbono. Nele, os átomos de carbono estão dispostos em camadas, nas quais cada átomo de carbono está rodeado de outros três aos quais está ligado por ligações simples ou duplas. As camadas são mantidas unidas por forças de Van der Waals muito fracas. Possue elétrons livres, por isso é bom condutor de eletricidade e calor. Vamos adotar para o grafite uma densidade de  $\rho_{graf} = 2.26 \quad g/cm^3$  (Draine & Lee 1984, Laor & Draine 1993).

PAH's são conhecidos por serem extremamente estáveis entre a família de compostos orgânicos, por causa da grande energia de ligação dos átomos de carbono na rede hexagonal planar aromática. Sua presença no meio interestelar como a forma mais comum para pequenos aglomerados de carbono não é surpreendente, visto que o ambiente interestelar favorece a hidrogenação. É muito fácil encontrar informações abundantes e aprofundadas sobre as características físicas de silicatos e grafites (densidade, capacidade térmica, entalpia, eficiência de absorção, constantes ópticas, etc.); todavia, o mesmo não se dá no mesmo grau com os PAH's. Por estes se constituírem em uma espécie química mais 'exótica' (quando comparada a silicatos e grafite) e pela importância que eles têm em nosso trabalho, vamos fazer uma descrição um pouco mais aprofundada sobre eles no próximo capítulo.

### 3.3.2. As Eficiências de Absorção

A seção de choque para partículas de poeira de silicatos e grafite é dada por:

$$\sigma(a,\lambda) = \pi a^2 Q_{abs}(a,\lambda) \tag{3.19}$$

onde  $Q_{abs}(a, \lambda)$  é a eficiência de absorção da poeira e a é o raio do grão. Os valores de  $Q_{abs}(a, \lambda)$ para os silicatos e grafites – calculados por Laor & Draine (1993) para grãos de formatos esféricos a partir da teoria de Mie, usando a aproximação de Rayleigh-Gans e óptica geométrica – foram retirados dos artigos de Draine & Lee (1984) e Weingartner & Draine (1999).

Nesse trabalho usamos as seções de choque para absorção e espalhamento computadas por B. T. Draine para 81 raios dos grãos desde 0.001 to 10  $\mu$ m em passos logarítmicos  $\delta \log a = 0.05$ , e disponíveis no endereço:

http://www.astro.princeton.edu/ draine/dust/dust.diel.html.

Organizamos esses dados em duas 'bibliotecas de grãos' (uma para silicatos e outra para grafites), com valores de laboratório para  $Q_{abs}(a, \lambda)$  em vários comprimentos de onda. Para cada grão temos o valor de  $Q_{abs}(\lambda)$  em 241 comprimentos de onda ( $\lambda$ 's) diferentes, no intervalo  $0.001 \mu m \leq \lambda \leq 1000 \mu m$ . Para os silicatos, empregamos a versão mais moderna denominada 'silicatos suavizados' (Weingartner & Draine 1999).

A eficiência de absorção em alguns raios diferentes para o grafite pode ser vista na Figura 3.8, enquanto que a Figura 3.9 nos mostra a eficiência de absorção para os silicatos. O cálculo para a seção de choque dos PAH's vai ser mostrado em detalhes no próximo capítulo.

Fizemos uma alteração na biblioteca de grãos de Li & Draine no que concerne aos grandes grãos (com raio a > 100 Å), tanto para os silicatos quanto para os grafites. Originalmente para estes grãos, a eficiência de absorção para  $\lambda > 100\mu$ m se comportava como  $Q_{abs}^{big} \propto \lambda^{-2}$ . Com base nos ajustes que fizemos para ARP 220 e algumas outras galáxias, nós chegamos à conclusão de que considerando  $Q_{abs}^{big} \propto \lambda^{-1.6}$  fornecia resultados mais compatíveis com as



**Figura 3.9** Eficiência de absorção  $Q_{abs}$  para grãos esféricos de grafite (as curvas são nomeadas pelo raio *a* do grão em  $\mu m$ ). O gráfico da esquerda nos mostra  $Q_{abs}$  para 300 Å  $< \lambda < 1 \ \mu m$ . O gráfico do lado direito nos mostra  $\lambda Q_{abs}/a$  para  $\lambda > 1\mu m$ . Para  $a = 1\mu m$ ,  $Q_{abs}$  foi computada em três temperaturas diferentes: T=298K, T=100K e T=20K. Retirado de Draine & Lee 1984.



**Figura 3.10** Eficiência de absorção  $Q_{abs}$  para grãos esféricos de "silicatos astronômicos" (as curvas são nomeadas pelo raio *a* do grão em  $\mu m$ ). O gráfico da esquerda nos mostra  $Q_{abs}$  para 300 Å  $< \lambda < 1 \ \mu m$ . O gráfico do lado direito nos mostra  $\lambda Q_{abs}/a$  para  $\lambda > 1 \ \mu m$ . Retirado de Draine & Lee 1984.

observações. Portanto, esta será a eficiência de absorção que adotaremos para grandes grãos (com raio a > 100 Å), quando  $\lambda > 100 \mu$ m.

# 3.4. A TEMPERATURA DOS GRÃOS INTERESTELARES

Os grãos interestelares trocam energia com o ambiente no qual estão inseridos como um resultado da emissão e absorção de radiação, de colisões com outras partículas e através de reações químicas exotérmicas na superfície.

Em impactos de grãos com átomos de gás, íons e moléculas, se a energia cinética média da partícula projétil é maior antes que após a colisão, então a partícula projétil concede energia à partícula alvo (no nosso caso, o grão de poeira). Este é um eficiente mecanismo para o resfriamento do gás, e tem como resultado o aquecimento do grão.

Entre as reações químicas exotérmicas que podem ocorrer na superfície do grão, podemos mencionar a recombinação próton-elétron (recombinação de hidrogênio, com liberação de 13.6 eV de energia) e a formação da molécula de hidrogênio (4.48 eV de energia liberada). Uma fração da energia liberada será transferida para a rede cristalina do grão, aquecendo-o, enquanto que o resto aparecerá como energia de excitação e/ou energia cinética do produto da reação (Whittet 1992).

Podemos afirmar que a temperatura de estado estacionário (equilíbrio) é determinada em primeiro lugar por processos radiativos, pois em geral o aquecimento radiativo é dominante. Entretanto, esta afirmação não é válida em nuvens de densidades muito altas.

Considere um grão de poeira esférico de raio **a** num campo de radiação. A potência absorvida pelo grão do campo de radiação será dada por:

$$W_{abs} = c(\pi a^2) \int_0^\infty u_\lambda Q_{abs}(\lambda) d\lambda \qquad [erg/cm^2/s], \qquad (3.20)$$

onde  $Q_{abs}$  é o fator de eficiência de absorção para o grão, e  $u_{\lambda}$  é a densidade de energia do campo de radiação (erg/cm<sup>3</sup>). Note que se o grão fosse composto por um material perfeitamente dielétrico, nenhuma energia seria absorvida ( $Q_{abs} = 0$ ); entretanto, todos os sólidos reais absorvem energia em alguma quantidade, seja por suas propriedades intrínsecas ou seja pela presença de impurezas.

A potência irradiada pelo grão é:

$$W_{rad} = 4\pi (\pi a^2) \int_0^\infty Q_{emit}(\lambda) B_\lambda(T_{gr\tilde{a}o}) d\lambda \qquad [erg/cm^2/s], \tag{3.21}$$

onde  $Q_{emit}(\lambda)$  é o fator de eficiência do grão para a emissão (usualmente chamada de emissividade), e

$$B_{\lambda}(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{exp(hc/\lambda KT) - 1} \qquad [erg/cm^2/s/\mathring{A}], \qquad (3.22)$$

é a função d Planck. Segue da lei de Kirchhoff que  $Q_{abs}(\lambda)$  e  $Q_{emit}(\lambda)$  são de fato idênticos em um dado comprimento de onda, e nós podemos trocá-los nas equações (3.32) e (3.33) por uma única função (em nosso caso vamos usar  $Q_{abs}$ ). Para o equilíbrio entre as taxas de ganho e perda de energia interna, nós temos que  $W_{abs} = W_{rad}$  e assim,

$$\int_0^\infty u_\lambda Q_{abs}(\lambda) d\lambda = \frac{4\pi}{c} \int_0^\infty Q_{abs}(\lambda) B_\lambda(T_{gr\tilde{a}o}) d\lambda \qquad [erg/cm^2/s/\mathring{A}],\tag{3.23}$$

Em outras palavras, podemos calcular a temperatura do grão no estado estacionário  $T_{grão}$ igualando o aquecimento do grão por absorção de fótons com o resfriamento por emissão de fótons. Uma outra maneira de se escrever a equação (3.35) é a que segue:

$$\int_0^\infty u_\lambda Q_{abs}(\lambda) d\lambda = 4 \ \langle Q(a, T_{gr\tilde{a}o}) \rangle \sigma T_{gr\tilde{a}o}^4 \qquad [erg/cm^2/s], \tag{3.24}$$

onde o lado esquerdo da equação nos dá a energia absorvida pelo grão do campo de radiação, enquanto que o lado direito nos mostra a energia emitida pelo grão a uma temperatura  $T_{grão}$ .

Na equação 3.36,  $\sigma$  é a constante de Stefan-Boltzmann (erg/ $cm^2/s/K^4$ ) e  $\langle \mathbf{Q}(\mathbf{a}, \mathbf{T}_{\mathbf{grão}}) \rangle$  é a emissividade tomada por média com a função de Planck:

$$\langle Q(a, T_{gr\tilde{a}o}) \rangle \equiv 15 \left(\frac{hc}{\pi kT}\right)^4 \int_0^\infty Q_{abs}(a, \lambda) \lambda^{-5} \left[exp \left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1\right]^{-1} d\lambda \tag{3.25}$$

Devemos enfatizar que grãos de poeira **não são** corpos negros. Em sua maioria, eles são irradiadores muito ineficientes em grandes comprimentos de onda, com uma eficiência de emissão  $Q_{emiss} \propto \lambda^{-1} - \lambda^{-2}$ . Isto significa que os grãos irão alcançar uma temperatura de equilíbrio que é bem mais quente que a temperatura de um corpo negro perfeito imerso no mesmo campo de radiação.

Em geral, as temperaturas de equilíbrio dos grãos está na faixa de 30K50K ou mais, o que significa que eles irradiam predominantemente em comprimentos de onda do infravermelho distantes – de 50 $\mu$ m a 100 $\mu$ m. Como não são corpos negros, eles irradiarão como um corpo negro modificado, com uma emissividade fortemente dependente do comprimento de onda.

Enquanto a maior parte dos grãos são espalhadores quase perfeitos em termos de suas propriedades óticas (isto é,  $Q_{scat} >> Q_{abs}$ ), deve-se enfatizar que  $Q_{abs}$ , embora pequeno, é não-nulo. Como tal, alguns dos fótons incidentes são absorvidos pelo grão e causam o seu aquecimento. Os grãos preferencialmente absorvem/espalham mais no azul (e portanto os fótons mais energéticos), de tal forma que o montante de aquecimento por fóton é considerável. O grão quente re-irradia esta energia como radiação do contínuo térmico em comprimentos de onda do infravermelho distantes.

Uma estrela emite radiação principalmente no ultravioleta, no visível, e no infravermelho próximo, onde a eficiência de absorção depende grosseiramente de  $\lambda^{-1}$  a  $\lambda^{-2}$ , assim a maior parte da absorção de grãos é também preferencialmente na faixa do ultravioleta/visível/infravemelho próximo. A maior parte da emissão, contudo, está na região do infravermelho médio/infravermelho distante, por causa da pequena temperatura da poeira (entre algumas dezenas a umas poucas centenas de graus Kelvin).

O cirros infravermelho descoberto em comprimentos de onda do infravermelho distantes pelo IRAS e COBE/DIRBE é proveniente de grãos de poeira em equilíbrio térmico com o campo de radiação interestelar. Isto lhe dá uma temperatura mais ou menos uniforme de 18K21K ao longo do céu.

A Emissão Cirros domina a aparência do meio interstelar em comprimentos de onda de  $100\mu$ m e mais longos. Os grãos de poeira aquecidos por estrelas individuais ou grupos de estrelas em ambientes empoeirados (p. ex., nebulosas de reflexão ou regiões de formação de estelar) têm temperaturas de equilíbrio um tanto mais altas, na faixa de 40K80K variedade, com a emissão atingindo o ponto máximo perto  $60\mu$ m.

A emissão térmica de grã os aquecidos de poeira em equilíbrio térmico domina a emissão no contínuo infravermelho distante das galáxias, contribuindo tanto quanto 30% a 50% da luminosidade bolométrica da Via-Láctea. Isto significa realmente que aproximadamente a metade da luz estelar emitida na Galáxia é absorvida e re-irradiada pela poeira. Em outras galáxias, o contínuo no infravermelho distante varia amplamente: de <1% da luminosidade bolométrica total em galáxias Elípticas e S0 com pouca ou nenhuma poeira e gás, até quase 100% nas galáxias Starburts mais extremas (as chamadas *Ultraluminous Far-Infrared Galaxies*, ou ULIRGs).

Testamos nossa implementação do cálculo da temperatura de estado estacionário para grãos de silicatos e grafites de vários raios, sujeitos ao campo de radiação da vizinhança solar apresentado no artigo de Mezger, Mathis & Panagia (1982). Este foi o mesmo campo adotado por Draine & Lee (1984), que vai ser a nossa fonte de comparação.

Uma representação analítica da intensidade média do campo de radiação  $(F_{\lambda}^{\odot} = 4\pi J_{\lambda} \text{ em})$ 



Figura 3.11 Campo de radiação interestelar para a vizinhança solar. A figura foi elaborada com base no artigo de Mezger, Mathis & Panagia 1982.

erg  $cm^{-2}s^{-1}\mu m^{-1}$ ) no espaço interestelar da vizinhança solar é dado por:

$$\begin{array}{ll} 0 \to 912 \mathring{A} = 0.0912 \mu m & 4\pi J_{\lambda}^{\odot} = 0 \\ 0.0912 \to 0.110 \mu m & 4\pi J_{\lambda}^{\odot} = 38.57 \ \lambda_{\mu m}^{3.4172} \\ 0.1100 \to 0.134 \mu m & 4\pi J_{\lambda}^{\odot} = 2.045 \ \times 10^{-2} \\ 0.1340 \to 0.246 \mu m & 4\pi J_{\lambda}^{\odot} = 7.1156 \ \times 10^{-4} \lambda_{\mu m}^{-1.6678} \\ 0.2460 \to \infty & 4\pi J_{\lambda}^{\odot} = 4\pi [ \ W_1 B_{\lambda}(T_1) + W_2 B_{\lambda}(T_2)] \end{array}$$
(3.26)

com  

$$T_1 = 7500K, W_1 = 1.00 \times 10^{-14}$$
  
 $T_2 = 4000K, W_2 = 1.65 \times 10^{-13}$ 

O gráfico com o campo resultante da expressão acima pode ser visto na Figura 3.11.

Com o campo de radiação em mãos, tratamos de calcular qual seria a temperatura de estado estacionário que os grãos que adotamos iriam alcançar. A confrontação de nossos resultados com os de Draine & Lee pode ser vista na Tabela 3.2.

A seguir, calculamos a temperaturas de estado estacionário que os silicatos e os grafites alcançariam quando submetidos ao campo de radiação de uma galáxia fiducial do modelo quimiodinâmico, com a idade de  $3.0 \times 10^8$  anos. Escolhemos a região distante 1kpc do núcleo

Resultados Draine & Lee $(1984)$			Nossos Resultados			
Raio $[\mu m]$	Grafite (K)	Silicato (K)	Raio $[\mu m]$	Grafite (K)	Silicato (K)	
0.01000	20.00	17.90	0.01000	20.33	17.70	
0.02000	19.70	17.30	0.01995	20.43	17.76	
0.03000	19.60	17.00	0.03162	20.27	17.31	
0.05000	19.30	16.50	0.05012	20.17	16.49	
0.10000	18.80	15.40	0.10000	19.56	15.41	
0.20000	17.30	14.90	0.19950	17.82	14.81	
0.30000	16.20	14.70	0.31620	16.36	14.49	
0.50000	14.80	14.40	0.50120	14.89	14.04	
1.00000	12.70	13.40	1.00000	12.78	13.10	

**Tabela 3.2** Temperatura de Estado Estacionário para os grãos de silicato e grafite no campo de radiação galático local.

da galáxia (um campo muito intenso) e a região distante 98 kpc do núcleo, na qual o campo de radiação é muito menos intenso e ainda assim mais forte que o campo galático local. Os resultados podem ser vistos na Tabela 3.3.

**Tabela 3.3** Temperatura de Estado Estacionário para os grãos de silicato e grafite submetidos aos campos de radiação da galáxia fiducial do modelo quimiodinâmico de Friaça & Terlevich (1998).

	SILICATOS	3	GRAFITES			
Raio $[\mu m]$	R = 1 kpc	R = 98 kpc	Raio $[\mu m]$	R = 1 kpc	R = 98 kpc	
0.01000	$92.07~\mathrm{K}$	24.49 K	0.01000	$110.0 {\rm K}$	$25.31~\mathrm{K}$	
0.02000	$90.36 {\rm ~K}$	$24.08~{\rm K}$	0.01995	$106.3~{ m K}$	$24.79~\mathrm{K}$	
0.03000	$84.32~\mathrm{K}$	$22.56~\mathrm{K}$	0.03162	$96.59~\mathrm{K}$	$23.14~\mathrm{K}$	
0.05000	$78.45~\mathrm{K}$	$21.03~{\rm K}$	0.05012	$88.76~\mathrm{K}$	$21.71 { m K}$	
0.10000	$69.57~\mathrm{K}$	$18.69 { m K}$	0.10000	$76.56~{ m K}$	$19.35~\mathrm{K}$	
0.20000	$64.18~{\rm K}$	$17.26~\mathrm{K}$	0.19950	$68.59~\mathrm{K}$	$17.73~\mathrm{K}$	
0.30000	$57.20~\mathrm{K}$	$15.40~\mathrm{K}$	0.31620	$57.45~\mathrm{K}$	$15.43~\mathrm{K}$	
0.50000	$53.02~\mathrm{K}$	$14.30~\mathrm{K}$	0.50120	$50.45~\mathrm{K}$	$14.04~\mathrm{K}$	
1.00000	$47.20~\mathrm{K}$	$12.78~\mathrm{K}$	1.00000	$40.87~{\rm K}$	$12.12~\mathrm{K}$	

Podemos notar na Tabela 3.2 que mesmo nas regiões mais externas de nossa galáxia fiducial, a temperatura de estado estacionário para os silicatos e grafites é ainda superior àquela alcançada no campo galático local.

## 3.5. CÁLCULOS DA MASSA DE POEIRA

Uma quantidade muitas vezes derivada do espectro térmico observado da poeira é uma estimativa da massa total de poeira presente em uma região (por exemplo, a massa de poeira integrada sobre uma galáxia observada no infravermelho distante com o IRAS ou ISO).

O espectro observado da poeira opticamente fina será um espectro de corpo negro modificado:

$$L_{\nu} = N_g 4\pi a^2 Q_{\nu}(a)\pi B_{\nu} T_d \tag{3.27}$$

onde  $N_g$  é o número total de grãos de poeira na galáxia, e *a* é um tamanho típico (assumindo grãos esféricos). A lei de emissividade usual para a poeira é:

$$Q_{emit}(\nu) \approx \left(\frac{2\pi a\nu}{c}\right)^p$$
 (3.28)

Como antes, o índice da lei de potência, p, tem valores entre 1 e 2. A massa total está relacionada ao número de grãos e as suas massas individuais. Para grãos esféricos de um tamanho característico dado (normalmente tomado como sendo  $a = 0.1 \mu$ m), e uma densidade média de grã o típica de  $\rho_g = 2$  gcm3:

$$M_g \approx N_g \frac{4\pi}{3} a^3 \rho_g \tag{3.29}$$

A prática habitual é calcular a razão de fluxo em uns dois comprimentos de onda, por exemplo em  $60\mu$ m e  $100\mu$ m, já que a razão de fluxo é independente da distância à fonte (o fluxo observado varia com  $1/d^2$ ), e desta forma estima-se  $T_d$  assumindo-se um índice para a lei de potência da emissividade. Dado  $T_d$ , pode-se entã o derivar a massa de poeira dada uma estimativa da distância até a fonte (Pogge 2006).

A fonte primária de incertezas sistemáticas na estimativa de  $M_g$  vem da falta de conhecimento a priori do índice da lei de potência da emissividade. Na literatura, as estimativas da massa de poeira de galáxias são geralmente baseadas em razões de fluxo de  $60\mu m/100\mu m$  derivadas de observações do IRAS onde este problema é especialmente crítico.

Enquanto é possível estimar a temperatura da poeira em cerca de aproximadamente 10K com fluxos de  $60/100\mu$ m, a despeito da escolha da inclinação assumida para a emissividade, as estimativas da massa de poeira resultantes podem diferir por mais de 2 a 3 ordens da magnitude. As melhores estimativas de temperaturas e as massas de poeira são derivadas da observação em comprimentos de onda milimétricos e submilimétricos (ou seja, as janelas de 450  $\mu$ m, 800  $\mu$ m e 1mm do SCUBA). Estas bandas estão no limite de longos comprimentos de onda para grãso de poeira com 0.1  $\mu$ m de raio, onde a lei de emissividade é estimada como tendo um índice de lei de potência muito próximo de 2.

## 3.6. O FORMATO DOS GRÃOS

Para o formato das partículas de poeira, os grãos esféricos são normalmente considerados porque eles permitem soluções analíticas diretas. A realidade, contudo, é que os grãos não são esféricos. Por exemplo, a polarização observada da luz estelar passando através de grãos de poeira exige que os grãos sejam não-esféricos. Ainda assim, nós podemos aprender algo sobre a mistura básica de propriedades da poeira mesmo se continuarmos adotando o procedimento simples de só considerar grãos esféricos. A não-esfericidade dos grãos deve entrar como correções não-triviais às previsões de modelos de grãos esféricos. A forma detalhada do grão, contudo, é uma consideração importante para solucionar a dinâmica do grão (o giro térmico e supertérmico dos grãos), a física e a química da formação molecular em superfícies de grãos (os grãos nãoesféricos têm áreas superficiais maiores para um dado volume de grão), etc.

Alguns pesquisadores têm considerado grãos fractais que são "cultivados" numericamente ao se aderir simples grãos esféricos uns nos outros, enquanto outros consideram grãos que são formados como agulhas muito pequenas ou fiapos (como fiapos de ferro) e resolveram tratá-los como "antenas" clássicas para deduzir a sua interação com a luz (Pogge 2006). Espera-se que as formas verdadeiras dos grãos sejam de fato fractais por natureza, embora ainda não se saiba se a introdução da matemática dos fractais ao problema irá "iluminá-lo" de fato.

# 3.7. A DISTRIBUIÇÃO DE TAMANHO DE GRÃOS

O tamanho do grão é um importante parâmetro para o cálculo da seção de choque de um grão de poeira. Por conseguinte, uma função básica de amplo interesse astronômico é a função de distribuição de tamanho (raio) dos grãos de poeira interestelares n(a), a qual não pode ser determinada de maneira unívoca das observações. Desde que as contribuições de cada componente de poeira para a extinção interestelar é proporcional a  $a^2 Q_{ext}(a, \lambda) \times n(a)$ , com  $Q_{ext}$  sendo o fator de eficiência de extinção, a distribuição de raios de partículas pode ser determinada apenas ao se fazer considerações sobre as constantes ópticas do material que constitui o grão e detalhes especiais do modelo de grãos.

A prática corrente ao se derivar a distribuição de tamanho de grãos é postular uma mistura de componentes de poeira supostos como sendo os ingredientes da poeira em nuvens difusas, para a qual as constantes ópticas são bem conhecidas; a seguir, calculam-se funções n(a) que ajustam a dependência em comprimento de onda observada para a curva de extinção. De acordo com Li & Draine (2001), o tamanho dos grãos, deduzidos a partir de curvas de extinção e de polarização interestelares dependentes do comprimento de onda, podem ser separadas em dois domínios:

1) Grãos com raio  $a > 0.02 \mu m$ , os quais incluem os "grãos clássicos" (com  $a \gtrsim 0.1 \mu m$ ), que são primariamente responsáveis pela extinção, polarização e e espalhamento em comprimentos de onda no visível;

2) Grãos "muito pequenos", com  $a < 0.02 \mu$ m, os quais contribuem principalmente para a extinção do ultravioleta no vácuo.

Enquanto a distribuição de tamanhos para a componente "clássica" dos grãos é relativamente bem restringida pelos ajustes de curvas de extinção interestelar observadas para uma dada composição de poeira assumida a priori, nosso conhecimento sobre a distribuição de tamanhos para a componente "muito pequena" dos grãos de poeira é muito pobre, devido ao fato de que para  $\lambda \gtrsim 0.1 \mu$ m estes grãos já estarem no limite de Rayleigh, e que portanto sua seção de choque de extinção por unidade de volume será independente do tamanho, de tal forma que a curva de extinção no ultravioleta/ultravioleta distante (FAR-UV) apenas restringe o volume total em massa desta componte de grãos.

De acordo com Dorschner & Henning (1995), Greenberg, em 1973, foi o primeiro a decompor a curva de extinção em domínios de tamanhos de grão característicos e discernir três tipos de grãos: "grãos clássicos" dielétricos ( $\approx 0.1 \mu m$ ) responsáveis pela extinção no espectro óptico e no infravermelho próximo, grãos de grafite responsável pelo '*bump*' em 2175 Å e grãos de silicatos para o ultravioleta distante. No que diz respeito à distribuição de tamanhos, especialmente aquela dos 'grãos clássicos', Greenberg recomendou a utilização da função de distribuição de raios do tipo

$$n(a) \propto exp(-Ca^3)$$
 . (3.30)

Tais funções de distribuição são obtidas como soluções de equações diferenciais descrevendo um estado estacionário entre destruição colisional de grãos e crescimento contínuo de grãos por condensação do gás. O parâmetro C depende da probabilidade por unidade de tempo de que uma partícula de tamanho a seja destruída e da taxa de crescimento de grãos.

Vamos considerar agora a colisão entre grãos. Suponha que dois grãos são estilhaçados em uma colisão, deixando como resultado fragmentos menores de grãos. Experimentos de laboratório e uma teoria simples (ver o apêndice B do livro de Evans, 1994) sugerem que quando isso acontece a distribuição de massa dos fragmentos n(m) (isto é, o número de fragmentos com massa m no intervalo entre  $m \rightarrow m + dm$ ) é dada por

$$n(m)dm \propto m^{-k}dm \tag{3.31}$$

onde k é uma constante.

Como já mencionamos anteriormente, no contexto dos grãos de poeira interestelar é mais conveniente considerar a distribuição de tamanho, ou seja, o número n(a)da de grãos com raio a no intervalo entre  $a \rightarrow a + da$ . Com isso temos que

$$n(a)da = n(m)dm \tag{3.32}$$

onde o intervalo de tamanho da corresponde ao intervalo de massa dm.

Para grãos esféricos com densidade  $\rho$  teremos que

$$m = \frac{4\pi a^3 \rho}{3}$$
  
$$dm = 4\pi a^2 \rho da \quad . \tag{3.33}$$

Com um pouco de manipulação algébrica teremos que

$$n(a) = n(m)\frac{da}{dm} \propto m^{-k}a^2 \propto a^{-l}$$
(3.34)

onde l = 2 - 3k.

Um tratamento simples para o problema da distribuição de tamanho de grãos resultantes do estilhaçamento após colisão leva ao resultado de

$$n(a)da \propto a^{-3}da \tag{3.35}$$

Este resultado é interessante para a discusssão que faremos a seguir.

Um ajuste muito amplo da extinção galáctica média com múltiplos grãos como componentes foi realizado por Mathis, Rumpl & Nordsieck (1977), num trabalho que ficou conhecido como modelo MRN. Eles conseguiram reproduzir muito precisamente a curva de extinção entre  $0.1\mu m$ e  $1.0\mu m$  com a soma de um componente de natureza grafítica com um outro componente (tipicamente silicatos, mas os seus resultados não eram particurlamente sensíveis ao segundo componente). A distribuição de tamanhos para as partículas foi de

$$n(a) \propto a^{-3.5}$$
 , (3.36)

onde a é o tamanho da partícula. Este resultado é muito próximo ao resultado obtido ao se considerar a fragmentação de partículas numa colisão entre grãos.

Tendo em vista a distribuição de tamanho de grãos no meio interestelar, em geral não esperaríamos justificá-la por intermédio de colisões entre grãos, haja visto que o número de grãos por unidade de volume no espaço interestelar é muito baixo ( $\simeq 10^{-6}m^{-3}$ ). A conclusão (Evans 1994) por conseguinte é que os grãos interestelares se formam no meio ambiente das estrelas, onde a distribuição de tamanho de grãos é estabelecida, e são então ejetados para o espaço interestelar. Isto também é compatível com outras exigências para a origem da poeira interestelar.

A lei de potência no modelo MRN se extende desde 0.005  $\mu m$  até aproximadamente 1  $\mu m$ para o componente grafítico, e desde 0.025  $\mu m$  até 0.25  $\mu m$  para o (provável) componente de silicato. Os dois componentes contribuem com um número aproximadamente igual de partículas em um dado tamanho de grão. Um dos resultados importantes deste estudo é que as partículas de grafite são necessárias em todos os tamanhos para explicar a extinção observada, além de serem os responsáveis por uma significativa fração da extinção em todos os comprimentos de onda entre  $0.1-1.0\mu m$ . Quando Mathis et al (1977) estenderam suas análises para 10  $\mu m$ , então tornou-se necessário um componente de silicatos para reproduzir as características da curva de extinção naquela região.

Deve-se lembrar que Mathis, Rumpl & Nordsieck, ao ajustarem a curva de extinção interestelar média, estavam tratando a poeira apenas no meio interestelar geral, e não deduzindo o que quer que seja sobre as propriedades da poeira em nuvens moleculares, onde o crescimento dos grãos por mantos de acresção ou por aglutinação em choques deve alterar significativamente a distribuição de tamanhos e composição dos grãos de poeira (Stein & Soifer 1983).

O modelo MRN é utilizado ainda hoje em dia, só que com algumas extensões quanto á faixa de tamanho dos grãos. Outros tipos de distribuições de tamanho também foram tentadas, algumas como uma extensão do modelo MRN (Weingartner & Draine 2001, por exemplo), outras tateando em novas possibilidades (Kim et al. 1994, Zubko et al. 2004). Um artigo interessante relatando parte da evolução histórica das distribuições de tamanho de grãos pode ser encontrado em Clayton et al. (2003).

Dorschner & Henning (1995) mencionam o trabalho de Kim et al (1994), onde se obtém a distribuição de tamanho dos grãos das curvas de extinção e polarização não adotando o modelo de MRN, mas utilizando o Método de Máxima Entropia (MEM, em inglês). Para se aplicar este método é vantajoso possuir curvas planas; por isso os autores usaram uma distribuição de massa modificada, m(a)da, a qual também é favorável para a implementação de vínculos sobre a abundância cósmica e a depleção, ao invés da distribuição em número n(a). A distribuição resultante desviou-se da lei de potência do modelo MRN e mostrou um '*cutt-off*' superior muito

menos abrupto.

Para o nosso modelo teremos a seguinte distribuição de tamanhos, juntamente com o intervalo de raios adotado:

- 1) Grandes Grãos de Silicato:  $n(a) \propto a^{-3.5}$ , com 100 Å < a <2500 Å.
- 2) Grandes Grãos de Grafite:  $n(a) \propto a^{-3.5}$ , com 100 Å < a < 2500 Å.
- 3) Pequenos Grãos de Grafite:  $n(a) \propto a^{-4}$ , com 10 Å < a < 100 Å.
- 4) **PAH's:**  $n(a) \equiv dn/dN_C \propto N_C^{-2.25}$ , com  $24 \le N_C \le 486$ .

Iremos considerar os oito PAH's pericondesados superaromáticos de nossa biblioteca, desde  $N_C = 24$  (o Coroneno) até  $N_C = 486$ . Em conformidade com outros autores (Désert et al. 1990, Dwek et al. 1998, Silva et al. 1998), adotamos uma distribuição relativamente plana para os tamanhos dos PAHs,  $dn/dN_C \propto N_C^{-2.25}$ , com  $24 \leq N_C \leq 486$ . Devido à geometria planar dos PAHs, a distribuição em  $N_C$  se traduz diretamente em uma distribuição em raio a, pois  $a \propto N_C$ . Consideramos oito espécies de PAHs, todos os pericondensados superaromáticos desde  $N_C = 24$ até  $N_C = 486$  (por vezes, chamamos o  $C_{486}H_{54}$  de aglomerado de PAHs). Essa distribuição com um peso alto para PAHs maiores reflete o fato de que as moléculas menores são facilmente destruídas não só por fótons de UV, como por choques de supernovas no MIE.

Vamos considerar que todo o silício na forma de poeira previsto pelo modelo será encerrado em grãos de silicatos. Do carbono disponível para formar os grãos, vamos considerar que 80% dele irá para a formação dos grandes grãos de grafite, e 10% irá para a formação dos pequenos grãos e os restantes 10% para a formação dos PAHs.

Como os pequenos grãos sofrem de flutuações de temperatura, e este cálculo é bastante demorado (vide próximo capítulo), assim como SK92 vamos utilizar apenas 5 grãos com os raios: 12.59 Å, 19.95 Å, 31.62 Å, 50.12 Å e 79.43 Å. Estes raios correspondem a cinco intervalos logarítmicos igualmente espaçados entre 10 Å e 100 Å. Também aplicaremos as flutuações de temperatura para os PAHs utilizados em nosso modelo.

As distribuições para os grãos de silicatos e os grãos de grafite se baseiam em SK92 e Ef2000.

Também exploramos um pouco outras alternativas para a distribuição de tamanho de grãos. O Método da Máxima Entropia, apesar de aplicações em um número muito grande de áreas, nos pareceu menos promissor que o Método da Regularização de Tikhonov (ver o Apêndice A). Este último apresenta ferramentas que parecem ser mais robustas e melhor documentadas que o MEM. Falaremos um pouco mais sobre ele a seguir.

### 3.7.1. O Método da Regularização de Tikhonov

Por um certo tempo, buscamos alternativas mais robustas e mais gerais para o modelo MRN de distribuição de tamanho de grãos, pois ela pode ter um impacto importante sobre nosso trabalho: muito provavelmente a distribuição de tamanho de grãos tem um peso forte na diferença entre as curvas de extinção da Via-Láctea e as das Nuvens de Magalhães.

Posteriormente, deparamo-nos com o trabalho de Zubko et al. (2004), o qual formalizava melhor o trabalho que queríamos desenvolver. Os autores utilizavam o chamado Método da Regularização de Tikhonov (MRT), um método matemático bem estabelecido e desenvolvido para resolver equações integrais de Fredholm de primeiro tipo, mal-condicionadas; justamente o tipo de problema que teríamos de enfrentar para calcular a distribuição de tamanho de grãos.

Vamos mostrar um exemplo de como utilizar o Método da Regularização de Tikhonov (Zubko 1997, Zubko et al. 2004) para calcular a distribuição de tamanho de grãos para a nossa biblioteca de Silicatos, Grafites e PAHs.

O problema que iremos resolver pode ser enunciado da seguinte forma:

Seja  $f_i(a)da$  a função distribuição de tamanho do grão,  $\tau(\lambda)$  a extinção média por comprimento de onda,  $N_H$  a densidade colunar de hidrogênio na linha de visada e  $Q_{ext}(\lambda, a)$  a eficiência de absorção do grão de raio a no comprimento de onda  $\lambda$ . Temos que:

$$\frac{\tau(\lambda)}{N_H} = \sum_{i=1}^n \int [\pi a^2 Q_{ext}(\lambda, a)] f_i(a) da$$
$$\equiv \sum_{i=1}^n \int K(\lambda, a) f_i(a) da, \qquad (3.37)$$

onde  $K(\lambda, a)$  é chamado de kernel da equação integral.

A Equação (3.37) é uma equação integral de Fredholm de primeiro tipo, e sua solução é um típico problema inverso mal-condicionado.

Se discretizarmos o segundo membro da Equação 3.37, teremos a seguinte roupagem para o problema:

$$b = Ax + e, \tag{3.38}$$

onde A é uma matrix  $m_X n$  (m = 360 linhas representando 360 comprimentos de onda diferentes, enquanto que n = 150 representa o número de raios de grãos que utilizaremos: 68 silicatos, 68 grafites e 14 PAHs), **b** (curva de extinção observacional) e **e** (erro ou ruído) são vetores de tamanho m, e **x** (número de grãos por intervalo de raio) é um vetor de tamanho n. A matriz A e o vetor **b** são conhecidos, e **e** é assumido como sendo o erro da discretização do kernel  $K(\lambda, a)$  combinado com os erros observacionais sobre a curva de extinção.

Resolver a Equação (3.38) é equivalente a minimizar o seguinte funcional suavizador (Golub 1997, Zubko 1997, Zubko et al. 2004):

$$\Psi[F^{(\alpha)}(a)] = \Phi_d[F^{(\alpha)}(a)] + \alpha \Phi_s[F^{\alpha}(a)], \qquad (3.39)$$

onde as duas partes são (I) o funcional de discrepância,

$$\Phi_d[F^{(\alpha)}(a)] = \frac{1}{n_D} \sum_{j=1}^{n_D} \left[ \frac{\int K(x_j, a) F^{(\alpha)}(a) da - D(x_j)}{w(x_j)} \right]^2,$$
(3.40)

e (II) o funcional estabilizante de Tikhonov ou estabilizador,

$$\Phi_s[F^{(\alpha)}(a)] = \int [F^{(\alpha)}(a)]^2 + \beta [dF^{(\alpha)}(a)/da]^2 da.$$
(3.41)

Temos que  $D(x_j)$  são os vínculos observacionais (no nosso caso,  $\tau(\lambda)$ ),  $\alpha$  é um parâmetro de regularização ( $\alpha \ge 0$ ),  $\beta$  é um parâmetro de ajuste dimensional ( $\beta \ge 0$ ), w(x) é a função peso e  $n_D$  é o número de dados a serem ajustados.

Uma característica interessante do MRT é qua as incertezas sobre os vínculos observacionais são levadas em consideração no cálculo da solução, bem como as incertezas resultantes em se discretizar a integral na forma de uma somatória.

De acordo com Golub & von Matt (1997), o Método de Morozov determina  $\alpha$  tal que

$$\phi_{Mor}(\alpha) := \alpha^2 \mathbf{b}^T (AA^T + \alpha I)^{-2} \mathbf{b} = ||\mathbf{e}||_2.$$
(3.42)

A primeira derivada de  $\phi_{Mor}(\alpha)$  é dada por

$$\phi'_{Mor}(\alpha) := 2\alpha \mathbf{b}^T A (A^T A + \alpha I)^{-3} A^T \mathbf{b}.$$
(3.43)

Empregamos como critério de parada o Princípio da Discrepância de Morozov. Ele estabelece que o valor de  $\alpha$  é escolhido de tal forma que a norma do residual  $\mathbf{b} - A\mathbf{x}_{\alpha}$  iguala a norma do termo do erro:

$$||\mathbf{b} - A(A^T A + \alpha I)^{-1} A^T \mathbf{b}||_2 = ||\mathbf{e}||_2.$$
(3.44)

Com o procedimento de cálculo devidamente construído e testado, aplicamos o algorítmo resultante para determinar a distribuição de tamanho de grãos para a curva de extinção da estrela Sk 69°210, situada na Grande Nuvem de Magalhães (Gordon et al. 2003). Sua curva de extinção é representada na forma dos parâmetros de Fitizpatick & Massa (1990).

Apesar de possuir Rv típico do Meio Interestelar Difuso, a estrela Sk 69°210 é fortemente avermelhada, e portanto poderia servir de teste para simular um meio interestelar muito rico em poeira.

Para implementar o MRT, como parâmetro de entrada tivemos que calcular os erros sobre a curva de extinção da estrela Sk 69°210. Por conta disso, tivemos que fazer a propagação de erros em cima dos parâmetros de Fitizpatick & Massa que representam a curva de extinção. Estes cálculos podem ser vistos no Apêndice B.

A distribuição de tamanho de grãos resultante pode ser vista na Figura 3.12. Note que as curvas não são absolutamente suaves, algo que estamos tentando melhorar ainda mais em nosso programa, mas são coerentes com o que esperaríamos encontrar tendo por base outros trabalhos que consultamos (Zubko et al. 2004, por exemplo).

O quão adequado é esta distribuição de tamanho de grãos pode ser melhor avaliado ao se analisar a Figura 3.13, na qual nós reconstruimos a curva de extinção da estrela Sk 69°210 com base na distribuição que calculamos. A curva de extinção que obtivemos não é perfeita (embora ainda haja espaço para melhorias), mas está em excelente acordo com a curva experimental dentro dos erros observacionais.

Portanto, agora estamos aptos a calcular a distribuição de tamanho de grãos para qualquer curva de extinção que quisermos ajustar, desde que tenhamos a curva representada através dos parâmetros de Fitizpatrick & Massa, o que aparentemente se tornou um procedimento comum na literatura.

Ainda não implementamos a distribuição de tamanhos de grãos segundo o MRT em nossos códigos. Antes aperfeiçoaremos nossos algorítmos para só então verificar o impacto do MRT sobre nossos resultados.

# 3.8. MODELOS DE DISTRIBUIÇÃO DE POEIRA

A geometria da poeira é o fator determinante na aparência de uma galáxia (Calzetti 1998). Isto é especialmente verdade quando a galáxia não é resolvida, e apenas sua luz integrada espacialmente pode ser medida, como ocorre para a maior parte das galáxias e, com mais razão, para objetos a altos redshifts.

Grandes quantidades de poeira podem ser escondidas em uma distribuição 'clumpy'; se os



Figura 3.12 Distribuição de tamanho de grãos de nosso modelo que melhor ajusta a curva de extinção da estrela Sk 69°210.



**Figura 3.13** Curva de Extinção para a estrela Sk 69°210, localizada na Grande Nuvem de Magalhães. A curva com linha mais fina representa os dados observacionais, e a curva tracejada representa a faixa dos erros. A curva mais forte indica o melhor ajuste que obtivemos resultante de nossos cálculos de distribuição de tamanho de grãos.

*clumps* de poeira são pequenos e compactos, as regiões entre os *clumps* proporcionam linhas de visada claras o suficiente de forma que a galáxia aparecerá quase como se fosse livre de poeira. Uma mistura homogênea de poeira e gás possui um efeito similar: a maior contribuição para a luz que emerge da galáxia vem de suas camadas mais externas, enquanto que as regiões mais internas são geralmente opacas. A distribuição espectral de energia emergente resultante parece quase que não-avermelhada, mas com intensidade muito mais reduzida do que no caso livre de poeira. Como resultado, a massa total e o conteúdo estelar da galáxia serão subestimados por um fator que depende de uma maneira não-linear com o conteúdo total de poeira.



**Figura 3.14** Representação esquemática das cinco configurações entre poeira e gás ionizado. De cima para baixo elas são: (1) tela de poeira uniforme; (2) tela de poeira '*clumpy*'; (3) 'placa' (*slab*) de espalhamento uniforme; (4) placa de espalhamento '*clumpy*'; (5) modelo de poeira interna. Retirado de Calzetti et al (1994).

Calzetti et al (1994) discutem cinco modelos para a distribuição relativa de gás e poeira em galáxias, abarcando diferentes configurações de distribuições relativas de gás ionizado e poeira, esquematizando várias situações físicas dentro de uma galáxia. A descrição dos modelos, com base na Figura 3.14, é a seguinte:

(1) Tela de poeira uniforme: Esta é a configuração clássica assumida quando se corrige a emissão de uma estrela por avermelhamento. Neste modelo a tela está fisicamente distante da

nuvem de gás ionizado, de forma que o efeito da poeira é extinguir o fluxo de radiação da fonte, isto é, remover fótons da linha de visada através da absorção e espalhamento por grãos de poeira. Pode ser uma super-simplificação no caso de galáxias.

(2) Tela de poeira 'clumpy': Como no modelo 1, a poeira está localizada em uma tela distante da nuvem de gás. A diferença para o caso anterior é que a poeira está organizada em 'clumps'. Esta configuração pode ser considerada mais realística que o modelo 1.

(3) Placa de espalhamento uniforme: A poeira se localiza próxima à fonte de radiação, indicando que a região emissora subentende um grande ângulo centrado sobre o grão de poeira. Neste caso a ação do espalhamento por poeira é não apenas remover fótons da linha de visada (contribuindo, juntamente com a absorção, para o espalhamento), mas também transferir fótons de volta para a linha de visada. Desta forma, o espalhamento fornece uma importante contribuição positiva para a radiação emergente.

(4) *Placa de espalhamento 'clumpy'*: Da mesma forma que no modelo 3, mas a poeira está distribuída em *'clumps'*.

(5) Modelo de poeira interna: A poeira e o gás ionizado estão misturados uniformemente, e o modelo esquematiza a situação na qual poeira está presente internamente à associação estelar OB.

Seguindo Calzetti (1998), as regiões *starburst* de galáxias são caracterizadas por altas densidades de energia. Ventos de estrelas massivas e explosões de supernovas injetam energia no meio interestelar criando ondas de choque e *outflows* de gás. As ondas de choque produzidas por supernovas devem ser os principais responsáveis pela destruição dos grãos de poeira, enquanto que os *outflows* de gás podem se desenvolver em "superventos" e ejetar significativas quantidades de gás interestelar e poeira para fora das regiões de formação estelar. Desta forma, o ambiente *starburst* deve ser bastante inóspito para a poeira.

Se pouca poeira difusa está presente dentro do local de *starburst*, a principal fonte de opacidade é dada pela poeira que circunda a região. Esta poeira é interna à galáxia, mas externa (ou principalmente externa) à região do *starburst*. Um modelo simples resultante destas considerações nos leva a uma geometria na qual uma camada esférica de poeira circunda uma fonte de luz central. Tal descrição é mais acurada para o avermelhamento afetando a emissão de gás nebular no óptico / infravermelho próximo.

A Figura 3.15 nos mostra uma aplicação que Calzetti (1998) fez para os modelos de poeira em galáxias com formação estelar ativa. A figura nos mostra o excesso de cor  $E_g(B-V)$  para uma amostra de galáxias *starburst*, medido por dois pares de razões de linhas nebulares: a amplamente usada  $H\alpha/H\beta$  e a  $H\beta/Br\gamma$ . Os dois excessos de cor são diagnósticos sensíveis da geometria de poeira.



Figura 3.15 O excesso de cor  $E_g(B-V)$  derivado da razão de linha do hidrogênio  $H\beta/Br\gamma$  como uma função da mesma quantidade derivada da razão  $H\alpha/H\beta$ . As barras de erro representam incertezas de 1  $\sigma$ . Os dados são comparados com três modelos para a distribuição de poeira: uma tela *screen* em primeiro plano; uma camada *'clumpy'* em primeiro plano, com cerca de 10 *'clumps'* ao longo da linha da visada; e uma mistura homogênea de poeira e gás, a qual simula o caso de poeira interna. Para pequenos valores de  $E_g(B-V)$  os modelos são degenerados; entretanto, grandes  $E_g(B-V)$  podem ser explicados apenas por distribuições em primeiro plano (o modelo de tela homogênea e o modelo de camada *clumpy*. Geometrias de poeira *clumpy* com mais do que 10 *clumps* ao longo da linha de visada se localizam entre a linha contínua e a linha tracejada-pontilhada. Retirado de Calzetti (1998).

#### 3.8.1. O Modelo de Telas

Neste trabalho utilizamos o modelo de tela de poeira uniforme (modelo 1), o qual parece ajustar bem os dados da Figura 5.2. Realizamos um tratamento de transporte radiativo muito simples, empregando um certo número de telas em raios selecionados. Este modelo **'multi-telas'** possui, para o modelo fiducial, telas nos raios r = 250 pc, 1 kpc, 2kpc, 4 kpc, 8 kpc, 16 kpc e 70 kpc.

No modelo de tela não se leva em conta efeitos de espalhamento, e a profundidade óptica  $\tau(\lambda)$ da cada tela é dada por  $\tau(\lambda) = k_{\lambda} \Delta r/\cos\theta$ , onde  $k_{\lambda}$  é o coeficiente de extinção da poeira,  $\theta$  é o ângulo entre o feixe de luz e a normal à tela e  $\Delta r$  é a espessura da tela. Colocamos  $\Delta r \ll r$  para cada tela e projetamos as densidades de coluna de poeira contidas dentro de camadas esféricas cujos pontos médios são os raios das telas. Assim, a tela em r = 250 pc concentra a poeira entre r = 0 pc e r = 0.5 kpc, aquela em r = 1 kpc, a poeira entre 0.5 kpc e 1.5 kpc, e assim por diante.

Para galáxias que não a fiducial, os raios das telas são escalonados de acordo com  $r_h$ . Assim, no modelo com  $M_G = 10^{12} M_{\odot}$ , as telas se situam a r = 0.5, 2, 4, 8, 16, 140 kpc.

Esperamos que o modelo de multi-telas nos forneça resultados finais mais realísticos que o de uma única tela, compensando as possíveis limitações de se usar um modelo a primeira vista tão idealizado, não obstante o excelente acordo com os dados observacionais obtidos por Calzetti (1998) e mostrados na Figura 5.2.

Devemos lembrar que o modelo de tela é apenas uma representação conveniente para a distribuição de poeira na galáxia, e que ele não implica que a poeira afetando o contínuo estelar se encontra necessariamente em uma tela homogênea formando um primeiro plano.

Antes de estudar o comportamento e as aplicações a objetos astrofísicos do modelo de poeira convoluído ao modelo quimiodinâmico, vamos explicitar de que maneira procedemos para efetuar os cálculos que gerarm os gráficos que analisaremos a seguir.

As cores, as luminosidades e as extinções são calculadas como se segue: em primeiro lugar, a SED é calculada usando os modelos espectrofotométricos de Bruzual & Charlot (versão 1998), para uma FMI de Salpeter com faixa de massas entre 0.1 e 100  $M_{\odot}$ , e metalicidades de Z = 0.0001 e 0.1 (as metalicidades utilizadas são fornecidas pelo modelo quimiodinâmico). Após isso, a emissão da população estelar é extinta segundo o modelo de multi-telas, e é adicionado o componente de re-emissão infravermelho devido à poeira.

Ao se obter quantidades observadas na Terra (cores e magnitudes), as SED's no referencial de repouso são afetadas pelo redshift de observação, avermelhadas pela opacidade da Lyman  $\alpha$  Forest (Madau 1995) e, quando for o caso, convoluídas pelas curvas de sensibilidade das cores consideradas.

### 3.8.2. O Modelo de Nuvens Moleculares

O meio interestelar (MIE) consiste de duas fases: o gás e a poeira. O modelo quimiodinâmico fornece em cada ponto da galáxia a abundância dos elementos químicos considerados tanto na fase de gás como na de poeira.

Além da caracterização intensiva do MIE, pelas fases, que caracterizam o MIE em cada ponto, o MIE também deve ser caracterizado extensivamente, pela sua distribuição espacial, pela sua geometria. Supomos uma geometria na qual o MIE consiste de dois componentes, o MIE difuso e as nuvens moleculares (MCs = molecular clouds).

As nuvens moleculares constituem a fase densa do gás com poeira, e nelas estão imersos os objetos estelares jovens (YSOs). Elas são a contraparte de alta densidade do gás difuso com poeira, que constitui os *cirrus* do meio interestelar.

O MIE difuso segue a distribuição do gás geral dada pelos resultados do modelo quimiodinâmico. As nuvens moleculares seguem a distribuição das estrelas jovens, pois as estrelas nascem em nuvens moleculares, e as estrelas muito jovens permanecem um período de tempo imersas nas MCs, revelando-se como fontes de infravermelho, e, posteriormente, como regiões HII.

Portanto, nossa galáxia consiste de três componentes: estrelas, MIE difuso e MCs. A emissividade por unidade de volume (ergs  $cm^{-3} s^{-1} ster^{-1} cm^{-1}$ ) da galáxia em cada ponto é dada pela soma das contribuições dos três componentes acima:

$$j_{\lambda} = j_{\lambda}^* + j_{\lambda}^{mc} + j_{\lambda}^d \,.$$

A emissão do componente estelar decorre diretamente da distribuição espacial de idades e metalicidades das estrelas, que é uma saída do modelo quimiodinâmico. A emissão do componente difuso ido MIE é calculada pelo modelo de multi-telas. A seguir veremos como obtemos a emissão das MCs.

Na Galáxia virtualmente toda formação estelar ocorre em nuvens moleculares. Mapas de CO e outros traçadores mostram que as MCs não são uniformes, mas objetos extremamente estruturados, contendo regiões de maior densidade, os "cores", onde a formação estelar está de fato acontecendo. Isto implica o aglomeramento de estrelas jovens em diferentes locais dentro das nuvens moleculares gigantes (GMCs), como é confirmado por imageamento em infravermelho. Os primeiros estágios evolutivos das estrelas são ocultados às observações ópticas e uma fração significativa, senão toda, da emissão, rica em raios-X, dos objetos estelares jovens é reprocessada por poeira e reemitida no IV. Os ventos estelares poderosos das estrelas massivas juntamente com "outflows" e alto fluxo ionizante contribuem para a destruição das nuvens moleculares

em uma escala de tempo comparável a vida de estrelas OB,  $\sim 10$  Manos. Assim, as estrelas gradualmente se livram do gás da MC mãe e se tornam visíveis no óptico.

Em nosso modelo, as nuvens moleculares seguem a distribuição das estrelas jovens. Aqui, por estrelas jovens, entendemos estrelas como uma idade inferior a uma idade limite  $t_{mc}$ , o tempo de destruição das MCs, que, na maior parte dos simulações que realizamos, tomamos como maior do que 10 Manos (esta idade corresponde ao tempo de vida na sequência principal de uma estrela de 16 M<sub> $\odot$ </sub>). Contudo, no caso mais geral,  $t_{mc}$  é um dos parâmetros do modelo. Após o tempo  $t_{mc}$ , supomos que a MC onde a estrela nasceu começa a se dissipar e que, após algum tempo, a estrela está totalmente visível e livre.

O tempo de residência  $t_{mc}$  da estrela recém nascida na MC, determina a fração da luz estelar que pode escapar da região de formação estelar. Supomos que cada geração de estrelas nasce na MC e progressivamente escapa. O escape progressivo é representado admitindo-se que todas as estrelas estejam dentro da nuvem até o tempo  $t_{mc}$ , e que todas as estrelas estarão livres em um tempo  $2t_{mc}$ , quando a nuvem molecular estará inteiramente dissipada. Isso é representado pela fração f da energia estelar que é reprocessada dentro da nuvem, que é f = 1 (sem escape de luz estelar) até  $t_{mc}$ , e, após, decrescendo-se linearmente f em função do tempo t:

$$f = \begin{cases} 1 & \text{if } t \le t_{mc} ,\\ 2 - t/t_{mc} & \text{if } t_{mc} < t < 2 t_{mc} ,\\ 0 & \text{if } t > 2 t_{mc} . \end{cases}$$
(3.45)

Espera-se que a massa de gás nas MCs seja proporcional à massa total de estrelas jovens. Portanto, se a massa total de estrelas jovens (idades inferiores a  $t_{mc}$ ) em uma zona da galáxia em torno de uma posição r e em um tempo t, for  $M_yo(r,t)$ , a massa do gás em nuvens moleculares naquela zona  $M_{g,mc}(r,t)$  deve seguir  $M_{g,mc}(r,t) = \eta_{yo}M_{yo}(r,t)$ . O parâmetro  $\eta_{yo}$  não deve ser muito diferente de um. Em nossos cálculos, fixamos  $\eta_{yo} = 1$ . Decorre dos nossos cálculos  $f_{mc} = M_{g,mc}(r,t)/M_{gas}(r,t)$ , a fração do gás total  $M_{gas}(r,t)$  em MCs.  $f_{mc}$  pode ser estimada a partir de observações, e é um fator limitador da taxa de formação estelar.

Estimativas recentes na Galáxia sugerem que metade da massa de hidrogênio é H<sub>2</sub> molecular, a maior parte em nuvens com diâmetros maiores do que  $\gtrsim 10$  pc. Em nossos cálculos comparamos  $f_{mc}$  à fração  $f_{cold}$  do gás frio, definido como aquele com temperaturas abaixo de 2 × 10<sup>4</sup> K. Este valor de temperatura corresponde aproximadamente ao máximo da função de resfriamento devido à recombinação do hidrogênio. Abaixo dessa temperatura, todo hidrogênio encontra-se essencialmente neutro.
No disco da Galáxia, o componente quente  $(T > 2 \times 10^4 \text{ K})$  é um componente menor, e a massa de gás se divide essencialmente entre gás atômico, correspondendo a uma fração ~ 0.5 do gás total. e gás molecular, como  $f_{mc} \sim 0.5$  Em outros ambientes diferentes do disco da Galáxia,  $f_{mc}$  deve ser distinto do valor 0.5, o valor típico para o disco Galáctico. Em nosso cálculos sempre que o valor de  $f_{mc}$  fixado for acima da fração de gás frio, substutuímos  $f_{mc}$  por essa fração. Como  $f_{mc}$  decorre de  $\eta_{yo}$  e da taxa de formação estelar, decidimos manter  $\eta_{yo} = 1$  como uma constante das MCs e inibir a taxa de formação estelar, de modo a  $f_{mc}$  permanecer  $\leq f_{cold}$ . Em geral, isso só ocorre, nos modelos para esferóides, nas regiões mais externas da galáxia.

Em nosso modelo de MCs, as nuvens moleculares têm todas massa  $M_{mc}$  e raio  $r_{mc}$ . Observações da Galáxia indicam que, tipicamente,  $M_{mc} \sim 10^5 - 10^6 \,\mathrm{M_{\odot}}$ , and  $r_{mc} \sim 10 - 50$ pc. Estes são os limites dentro dos quais variaremos estes parâmetros.  $M_{g,mc}(r,t)$ , a massa do gás em nuvens moleculares em cada zona da galáxia, também pode ser expressa em termos do número de nuvens moleculares por zona galáctica,  $N_{mc}(r,t)$ , como  $M_{g,mc}(r,t) = N_{mc}(r,t)M_{mc}$ .

Assim, nosso modelo de nuvens moleculares tem um número de parâmetros, muitos deles vinculados pelas observações, ou calculados pelo modelo quimiodinâmico.

- $M_{mc}$ , massa das MCs
- $\eta_{uo}$ , razão entre a massa do gás em MCs e a massa das estrelas jovens
- $t_{mc}$ , tempo de residência das estrelas nas MCs
- $r_{mc}$ , raio das MCs

Em nossos calculos, fixamos  $M_{mc}$  como  $M_{mc} = 10^6 \,\mathrm{M_{\odot}}$ . Além disso, adotamos com valor fiducial para  $t_{mc}$ ,  $t_{mc} = 50$  Manos.

A distribuição de estrelas em uma GMC real implica uma distribuição de temperatura, com muitos "hot spots" e regiões mais frias distribuídas aleatóriamente. Aqui, contornando esta situação complexa, cada MC é representada por uma distribuição esférica uniforme de gás e poeira, de raio externo  $r_{mc}$  e raio interno  $r_{sub}$ , onde se dá a extinção e a reemissão no IV. Dentro do espaço ôco interno à  $r_{sub}$  situam-se as estrelas, que são representadas fazendo-se toda sua luminosidade provir de um ponto no centro da MC. O raio  $r_{sub}$  é necessário para se evitar regiões excessivamente quentes na poeira, e corresponde ao raio onde a poeira atinge uma temperatura máxima (para cada espécie de grão considerada – grãos de silicato, de grafite, e PAHs) igual à temperatura de sublimação  $T_{sub}$ . Fixamos  $T_{sub}$  com 500 K. Com este valor a temperatura média de uma nuvem molecular ~ 50 K.

Como a profundidade óptica de uma MC é alta inclusive no IV (valores de  $A_K \approx 10$  são frequentemente encontrados em nosso modelo), devemos realizar o transporte radiativo de um modo próprio para a distribuição esférica de poeira considerada, incluindo auto-absorção da radiação secundária produzida pela própria poeira. A simetria esférica simplifica algo o problema de transporte radiativo. Utiliza-se o método iterativo clássico em que a temperatura é computada em cada iteração a partir da condição de equilíbrio radiativo local dos grãos de poeira com o campo de radiação computado na iteração anterior. Baseamo-nos nos procedimentos descritos por Efstathiou & Rowan-Robinson (1990) e Collison & Fix (1991)

# 4. HIDROCARBONETOS AROMÁTICOS POLICÍCLICOS - PAHs

Há cerca de meio século atrás, Platt (1956) propôs que grãos muito pequenos ou moléculas grandes com raios  $\gtrsim 10$ Å poderiam estar presentes no espaço interestelar. Donn (1968) posteriormente sugeriu que partículas do tipo hidrocarbonetos aromáticos policíclicos poderiam ser responsáveis pela extinção interestelar no ultravioleta (UV). No entanto, a incapacidade em determinar as propriedades ópticas detalhadas destas "partículas de Platt" e a limitada informação observacional da extinção interestelar no UV/UV-distante (UV/far-UV) evitou desenvolvimentos posteriores destas idéias (Greenberg 1960).

Com o lançamento em janeiro de 1983 do IRAS (*Infrared Astronomical Satellite*), uma importante nova janela para os "grãos muito pequenos" foi aberta pelas observações no infravermelho (IR), e estudos referentes a esse tema ganharam uma grande motivação.

Estudos fotométricos de nebulosas de reflexão em comprimentos de onda curtos  $(2 - 5\mu m)$ realizados por Sellgren (1984) não apenas mostraram um excesso de emissão nesses comprimentos de onda, mas também uma independência característica da temperatura de cor com a distância até a estrela. Isto foi interpretado por Sellgren como uma evidência para a emissão por grãos aquecidos a temperaturas muito altas após a absorção de um único fóton. Tais emissões dependem apenas da energia do fóton e das propriedades das partículas, e não da intensidade do campo de radiação.

A emissão no contínuo do infravermelho próximo por nebulosas de reflexão (Sellgren, Werner, & Dinerstein 1983, Sellgren 1984) e a emissão em cirrus em  $12\mu$ m e  $25\mu$ m detectada pelo IRAS (Boulanger & Pérault 1988), indicaram explicitamente a presença de um componente de poeira

interestelar muito pequeno, desde que grandes grãos (com raios ~  $0.1\mu$ m) aquecidos pela luz estelar difusa possuem emissão insignificante em tais comprimentos de onda, ao passo que grãos muito pequenos (com raios  $\leq 0.01\mu$ m) podem ser temporariamente aquecidos a temperaturas muito altas ( $\geq 1000$  K, dependendo do tamanho de grão, sua composição química, e a energia do fóton), como foi primeiramente salientado por Greenberg (1968). Medidas subseqüentes feitas pelo instrumento DIRBE (*Diffuse Infrared Background Experiment*) do satélite COBE (*Cosmic Background Explorer*) confirmaram isso, e emissões adicionais em banda larga foram detectadas em 3.5 $\mu$ m e em 4.9 $\mu$ m (Arendt et al. 1998).

Mais recentemente, espectrômetros a bordo do Telescópio Espacial Spitzer (anteriormente chamado de SIRTF, Space Infrared Telescope Facility) e do ISO (Infrared Space Observatory, ver Mattila et al. 1996) mostraram que o meio interestelar difuso irradia fortemente em features em emissão nos comprimentos de onda de  $3.3\mu$ m,  $6.2\mu$ m,  $7.7\mu$ m,  $8.6\mu$ m, e  $11.3\mu$ m. Estes features de emissão, vistos pela primeira vez no espectro da nebulosa planetária NGC 7027 e em BD+30°3639 (Gillett, Forrest, & Merrill 1973), têm sido observados num vasto leque de ambientes astronômicos, incluindo nebulosas planetárias e protoplanetárias, nebulosas de reflexão, regiões HII, envelopes "circumstelares" (ao redor das estrelas), e galáxias exteriores (ver Tielens et al. 1999 para um revisão, Lu et al. 2003).

Freqüentemente referidos como as "Bandas Não-Identificadas do Infravermelho" (ou UIR, em inglês), estes *features* de emissão agora são normalmente associados aos hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs, em inglês), os quais são excitados vibracionalmente pela absorção de um único fóton da região Ultravioleta/Visível do espectro eletromagnético (Léger & Puget 1984; Allamandola, Tielens, & Barker 1985), muito embora outros portadores também tenham sido propostos. Os mecanismos de emissão propostos para as bandas UIR – excitação de PAHs em fase gasosa por fótons UV seguido por conversão interna e emissão fluorescente no IR – é apoiada por medidas de laboratório (Cherchneff & Barker 1989; Brenner & Barker 1989; Kurtz 1992; Cook et al. 1998) e por investigações teóricas sobre o processo de aquecimento e resfriamento de PAHs no espaço interestelar (Allamandola, Tielens, & Barker 1989; Barker & Cherchneff 1989; d'Hendecourt et al. 1989; Draine & Li 2001).

Quando o processamento posterior dos dados do IRAS revelaram emissões de nuvens interestelares em  $12\mu$ m e  $25\mu$ m mais fortes que o esperado (Boulanger, Baud, & van Albada 1985), Weiland et al. (1986) mostraram que esta emissão poderia ser explicada se um número muito grande de grãos com raios entre 3Å e 10Å estivessem presentes. O próximo passo foi dado por Désert, Boulanger, & Puget (1990), Siebenmorgen & Krügel (1992), Schutte, Tielens, & Allamandola (1993), e Dwek et al. (1997), que incluíram os PAHs como um componente essencial dos grãos intertestelares.

Os features de emissão no infravermelho-médio em  $3.3\mu$ m,  $6.2\mu$ m,  $7.7\mu$ m,  $8.6\mu$ m,  $11.3\mu$ m e  $12.7\mu$ m se constituem em uma poderosa ferramenta de diagnóstico para as condições físicas em galáxias externas com poeira. Aproximadamente dez por cento da luminosidade bolométrica de uma galáxia pode ser irradiado nestes *features*, tornando sua observação possível mesmo em galáxias tênues e distantes (Tacconi-Garman et al. 2005).

Elaborados inicialmente a partir de trabalhos baseados em solo (Roche et al. 1991, Moorwood 1986), os estudos de emissão extragaláctica de PAHs foram ampliados consideravelmente através dos dados obtidos em espectroscopia de baixa resolução com o ISO. Por exemplo, Genzel et al. (1998), Lutz et al. (1998), Rigopoulou et al. (1999), e Tran et al. (2001) utilizaram a intensidade dos PAHs (relativa ao contínuo) como uma ferramenta para quantitativamente separar as contribuições de "Starbursts" e "AGNs" à contribuição total de energia das galáxias com poeira brilhantes no infravermelho (Starbursts, AGNs e ULIRGs).

Os trabalhos de Lutz et al. (1998) e Laurent et al. (2000) mostraram que a emissão no infravermelho médio (MIR) de uma galáxia hospedando um AGN dominante é claramente diferente daquela dominada por um "Starburst" nuclear, porque o AGN aquece o toróide de poeira que o rodeia. Talvez devido à destruição da poeira pela poderosa emissão radiativa do AGN, as bandas de emissão em 6.2, 7.7, 8.6, 11.3, e  $12.7\mu$ m (usualmente atribuídas aos PAHs) são extremamente fracas ou ausentes do espéctro MIR dos poderosos AGNs, e isto pode fornecer um diagnóstico adicional se a extinção do nú cleo na região do MIR não é muito grande. E Laurent et al. (2000, 2001) desenvolveram um diagnóstico que discrimina a origem do contínuo próprio da galáxia entre AGN e Starburst com base em suas formas.

De acordo com Tacconi-Garman e colaboradores (2005), os principais fatos observacionais nos quais estas análises são baseadas são os que seguem:

1. A emissão dos PAH é forte e onipresente em galáxias normais e "Starburst", com pequena variação na forma e intensidade de fonte para fonte (Helou et al. 2000, Rigopoulou et al. 1999). Enquanto observações em nossa galáxia mostram uma clara diminuição na emissão dos PAHs ao se aproximar de uma estrela quente, ou quando se vai para o interior de regiões de fotodissociação (PDRs, em inglês) e regiões HII (ver Boulanger et al. 1988, Verstraete et al. 1996), estas variações em escala galáctica oscilam em torno de um valor médio, fazendo da emissão dos PAHs um marcador valioso da emissão estelar no ultravioleta mole.

2. A emissão dos PAHs é fraca (ou possui uma pequena largura equivalente) próximo a um

AGN forte, como indicado ao se fazer mapeamentos com uma resolução de ~ 5" (Mirabel et al. 1999, Le Floc'h et al. 2001). Note, no entanto, que esta resolução não é suficientemente alta para distingüir entre a diluição dos PAHs por um contínuo quente de uma fonte nuclear (pontual) de um lado (Moorwood 1999), e a destruição dos PAHs por outro lado. Próximo ao núcleo os PAHs são mais provavelmente destruídos pela radiação ultravioleta extrema (EUV)/Raios-X do AGN (Voit 1992). A emissão dos PAHs freqüentemente é detectada em escalas maiores nos hospedeiros do AGN (Clavel et al. 2000).

3. A emissão de PAH é fraca em galáxias de baixa metalicidade (ver Madden et al. 2000, Contursi et al. 2000).

As investigações usando missões infravermelhas atuais e futuras fazem e continuarão a fazer um uso extenso dos PAHs como uma ferramenta para se estudar as galáxias brilhantes infravermelhas em altos redshifts, e como um vínculo para a contribuição da formação de estelar e dos AGNs para o fundo cósmico no infravermelho. A aplicação dos diagnósticos de PAHs desenvolvidos localmente é, entretanto, motivo de cautela, visto que fontes brilhantes a altos redshifts podem ter metalicidades mais baixas e densidades de formação estelar mais altas.

# 4.1. A CARACTERIZAÇÃO DOS PAHs

Dentre a família de compostos orgânicos, os PAH's são conhecidos por serem extremamente estáveis, devido à grande energia de ligação dos átomos de carbono na rede hexagonal planar aromática. Sua presença no meio interestelar como a forma mais comum para pequenos aglomerados de carbono não é surpreendente, visto que o ambiente interestelar favorece a hidrogenação.

Até o início da década de noventa, entretanto, dificuldades técnicas em se calcular de maneira confiável os espectros de emissão e absorção dos PAH's colocava em dúvida a utilização da 'hipótese PAH' nos modelos astrofísicos (Allamandola et al 1999, Puget & Léger 1989). Entretanto, a situação melhorou muito com o desenvolvimento de técnicas especiais de laboratório, e já podemos contar com bancos de dados confiáveis sobre os espectros dessas moléculas (Allamandola et al 1999, Hudgins & Allamandola 1999, Li & Draine 2001, Mattioda et al. 2005).

A grosso modo, podemos dividir os PAH's em três categorias: os pericondensados, os catacondensados, e aqueles cujos anéis aromáticos são ligados através de uma ligação simples entre carbonos C - C. Esta classificação é bem ilustrada na Figura 4.1.

Os aromáticos pericondensados são aqueles onde alguns átomos de carbono pertencem a três anéis, como acontece no coroneno, ovaleno, perileno, pireno, etc. Já nos catacondensados



Figura 4.1 Tipos de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAH's): a) pericondensados (circuncoroneno); b) linear ou catacondensado (pentaceno); c) bifenil. Retirado de Omont 1986, mas seguindo a nomenclatura de Salama et al 1996.



**Figura 4.2** Estrutura de alguns PAH's pericondensados e catacondensados. Os átomos de hidrogênio, localizados na periferia, não são representados. Retirado de Salama et al 1996.

nenhum carbono pertence a mais do que dois anéis.

Três subclasses de catacondensados podem ser definidas: os *acenos*, que são sistemas nos quais todos os anéis são unidos linearmente (antraceno, pentaceno,...); os *fenos*, que possuem um sistema anguloso ou curvado (fenantreno, tetrafeno, pentafeno,...); e um terceiro grupo de PAH's que não pertence nem aos fenos e nem aos acenos, tais como o criseno e o piceno.

A Figura 4.2 ilustra a classificação acima, juntamente com o formato estrutural de alguns PAH's. Note que, com respeito aos termos catacondensado e pericondensado, Omont (1986) e Salama et al (1996) adotam nomenclaturas inversas para a classificação dos PAH's. Resolvemos seguir a nomenclatura de Salama et al(1996), visto que os prefixos gregos  $\kappa \alpha \tau \dot{\alpha}$ – (de cima para baixo) e  $\pi \varepsilon \rho \dot{\iota}$ – (em volta de) parecem mais coerentes logicamente com a identificação que Salama e colaboradores fizeram.

Os PAH's mais estáveis são os mais compactos; por causa disso, não iremos considerar hidrocarbonetos do tipo do bifenil. Também podemos adiantar que os hidrocarbonetos catacondensados deverão ser muito menos estáveis que os pericondensados com o mesmo número de anéis; isso porque a estrutura mais linear dos catacondensados gera diferenças inerentes na energia de ressonância, tornando-os menos estáveis que os pericondensados. É por esse motivo que deveremos concentrar nossos esforços nesses últimos.

Para trabalhar com os PAH's, criamos uma pequena biblioteca, a qual consiste atualmente de 15 PAH's diferentes, sendo 9 PAHs do tipo pericondensados e 6 PAHs com formatos circulares, com geometria muito próxima àquela dos pericondensados. Nesta biblioteca estão registrados o número de carbonos e o número de hidrogênios de cada PAH. Estes dois parâmetros são suficientes para que possamos calcular as propriedades físicas relevantes ao nosso trabalho, a saber: tamanho, eficiência de absorção e capacidade térmica.

Os PAH's selecionados foram amostrados da literatura (Allamandola et al 1989, Léger et al 1989, Salama et al 1996) ou foram construídos via fórmula empírica (usada em PAH's com mais de 50 átomos de carbono) mencionada em Salama et al (1996):

 $C_{6n^2}H_{6n}$ , para os aromáticos pericondensados. Representam as estruturas mais estáveis para um dado número de anéis, e são geralmente referidos como os "superaromáticos".

 $C_{4n+2}H_{2n+4}$ , para aromáticos catacondensados.

Apesar de mencionarmos os catacondensados, não iremos utilizá-los em nossos cálculos.

O número de carbonos para os PAH's de nossa biblioteca se situa entre:  $24 \le N_C \le 600$ . Entre as espécies aromáticas representadas em nossa biblioteca, podemos mencionar: o Coroneno  $(C_{24}H_{12})$ , o Ovaleno  $(C_{32}H_{14})$ , o Hexabenzo-Coroneno  $(C_{42}H_{18})$ , o o Circum-Coroneno  $(C_{54}H_{18})$ , e o Circum-Ovaleno  $(C_{66}H_{20})$ , entre outros.

As fórmulas químicas e a estrutura espacial de alguns PAH's podem ser vistas na Figura 4.3, onde também são mostrados alguns exemplos de isômeros (PAHs com a mesma fórmula químicas, mas com configurações espaciais diferentes).



**Figura 4.3** Estrutura de alguns PAH's contendo entre 18 - 30 átomos de carbono. Espécies nesta faixa de tamanho são largamente responsáveis pelos *features* interestelares de emissão infravermelha. Os números dentro dos anéis representam a quantidade de átomos de hidrogênio pertencentes a cada anél. Retirado de Allamandola et al 1989.

Isômeros são compostos que possuem a mesma fórmula molecular, mas diferentes estruturas moleculares ou diferentes arranjos dos átomos no espaço. Por conta disso, os isômeros planos têm geralmente propriedades físicas e químicas diferentes. Só para se ter uma idéia, Salama et al (1996) calcularam que existam cerca de 43 isômeros entre os PAH's com número de carbonos entre 20 e 24. Destes, o número das espécies mais estáveis está em torno de 11.

Em um primeiro momento, não iremos utilizar todos os PAH's de nossa biblioteca. Em nossos

cálculos consideramos 8 espécies de PAHs superaromáticos, desde o Coroneno  $(C_{24}H_{12})$  até o  $C_{486}H_{54}$ , que até onde sabemos não possui um nome definido. Podemos comparar nossos resultados com o trabalho de Siebenmorgen & Krügel (1992, doravante SK92), os quais trabalharam em seus modelos com dois tipos de PAH's: os chamados pequenos PAH's, com 25 átomos de carbono (o Metilcoroneno) e os clusters de PAH's, com mais de 100 átomos de carbono, sendo que para estes últimos o número exato de carbonos dependia do ambiente ao qual o modelo era empregado.

De fato, o  $C_{486}H_{54}$  possui uma razão (átomos de H) / (átomos de C) igual a 0.11, o que é compatível com os valores encontrados por Siebenmorgen & Krügel para regiões de formação estelar, dentro de seu modelo.

Efstathiou et al. (2000), em seu modelo para Starbursts a altos redshifts consideraram, do mesmo modo que SK92, duas espécies de PAHs, porém adotando o Metilcoroneno e um aglomerado de PAH's com cerca de 500 átomos de carbono.

# 4.2. A EFICIÊNCIA DE ABSORÇÃO DOS PAHs

A eficiência de absorção  $(Q_{abs})$  é o principal parâmetro de um PAH num contexto astronômico. É a partir dela que podemos calcular o quanto o grão absorve de energia do campo de radiação ao qual está sujeito, que temperatura ele alcança e de que forma ele re-emite esta radiação nos vários comprimentos de onda.

Nesta seção vamos apresentar dois modelos que utilizamos para calcular a eficiência de absorção dos PAHs.

A primeira forma de se calcular o  $Q_{abs}$  é proveniente dos trabalhos de Léger, d'Hendecourt & Défourneau (1989) e Désert, Boulanger & Puget (1990). O trabalho destes autores foi apresentado de maneira sistematizada num artigo de Dwek e colaboradores (1997), e por causa disso vamos nomeá-lo de **O Modelo de Dwek**. Este foi o modelo que utilizamos para elaborar o nosso trabalho de mestrado.

A segunda maneira seria utilizando a biblioteca de constantes ópticas para PAHs elaboradas por Li & Draine (2001). O trabalho deles se baseia também nos artigos de Léger, d'Hendecourt, & Défourneauet (1989) e Désert et al. (1990). Só que eles fizeram algumas modificações, que serão mostradas ao descrevermos o modelo deles. Chamaremos este modelo como o **Modelo de** Li & Draine. Por fim, apresentaremos o nosso modelo, que tem por base os modelos de Dwek e de Li & Draine, mas com algumas alterações com relação aos modelos originais.

#### 4.2.1. O Modelo de Dwek

O cálculo das eficiências de absorção dos PAHs no Modelo de Dwek segue a formulação de Léger, d'Hendecourt & Défourneau (1989) e de Désert, Boulanger, & Puget (1990).

Neste modelo, a seção de choque dos PAH ( $\sigma_{PAH}(\lambda)$ ) é representada como uma soma de termos (UV-visual, contínuo IR e linhas IR), da maneira que se segue:

$$\sigma_{PAH}(\lambda) = \sigma_{UV-vis}(\lambda) + \sigma_{IRc}(\lambda) + \sigma_{IRl}(\lambda)$$
(4.1)

onde

$$\sigma_{UV-vis}(\lambda) = 10^{-18} N_c \left[ p_1 f_v(x) + p_2 f_u(x) \right] \mathcal{C}\left(\frac{x}{x_c}\right) \quad cm^2$$

$$\sigma_{IRc}(\lambda) = \frac{3.3 \times 10^{-20}}{\lambda(\mu m)} N_c \exp\left(-\left(\frac{\lambda_m}{\lambda}\right)^2\right) \quad cm^2 \tag{4.2}$$

$$\sigma_{IRl}(\lambda) = \sum_{j} \sigma_{j} \times exp\left(-\frac{(\lambda - \lambda_{j})^{2}}{2(\Delta \lambda_{j})^{2}}\right)$$

 $N_c$ é o número de átomos de carbono no PAH,

$$x\equiv 1/\lambda(\mu m),\,p_1=4.0$$
e $p_2=1.1$ são parâmetros numéricos,

$$\begin{split} x_c &\equiv \frac{12.5}{a_{PAH}({\rm \AA})} \ , \\ \lambda_m &= \ 10 \ \mu{\rm m} \ , \end{split}$$

 $a_{PAH}(\text{\AA}) = 10\sqrt{N_c/120}$  é o raio de um PAH. Segundo Omont (1986), esta relação para o raio do PAH é válida apenas para os pericondensados, os quais possuem uma distribuição planar circular. Para se obter o tamanho dos catacondensados, deve-se usar uma outra relação, visto que o conceito de raio não faria muito sentido para esta categoria.

As funções  $f_u, f_v$ , e  $\mathcal{C}(y)$  são dadas por:

$$f_{u}(x) = (x - 5.9)^{2} (0.1x + 0.41) \text{ para } x \ge 5.9 \ \mu m^{-1}$$
  
= 0 se não  
$$f_{v}(x) = 1.0 \text{ para } x \ge x_{l} \equiv 4 \ \mu m^{-1}$$
  
=  $x^{2} (3x_{l} - 2x)/x_{l}^{3}$  para  $x \le x_{l}$  (4.3)

$$\mathcal{C}(y \equiv x/x_c) = \pi^{-1} \arctan(10^3 (y-1)^3/y) + 0.5$$
(4.4)

Supõe-se que os *features* espectrais dos PAH's são funções Gaussianas no formato. A seção de choque é representada como uma soma sobre o 'feature' j, onde

 $\sigma_j$ é o valor da seção de choque no centro da linha  $\lambda_j$ ,

 $\{\sigma_j/10^{-21} \ cm^2\} = \{35N_H, \ 4.1N_c, \ 2.9N_c, \ 3.0N_H, \ 47N_H\},$  para, respectivamente, as bandas 3.3, 6.2, 7.7, 8.6, e 11.3 µm (Léger, d'Hendecourt, & Défourneau 1989),

 $N_H$  é o número de hidrogênios no PAH.

Os  $\Delta \lambda_j$ 's são as larguras equivalentes dos *features j*, satisfazendo a condição de que a integral da seção de choque sobre a linha é igual a  $\mathcal{A}_j \equiv \lambda_j (\mu m)^2 \times f_j / 1.13 \times 10^{20}$ , onde  $f_j$  é a força adimensional do oscilador harmônico.

As larguras de linhas são dadas:  $\Delta \lambda_j(\mu m) = 3.53 \times 10^{-17} f_j \lambda_j(\mu m)^2 / \sigma_j(cm^2)$ . Os valores resultantes para  $\Delta \lambda_j(\mu m)$  são {0.0165, 0.070, 0.274, 0.157, 0.115} para { $\lambda_j(\mu m)$ } = {3.3, 6.2, 7.7, 8.6, 11.3}, respectivamente.

Devemos observar no presente modelo que para se obter a eficiência de absorção dos PAH's, estes serão tratados como se fossem círculos num plano, visto que podemos calcular apenas suas seções de choque. Portanto, teremos que:

$$Q(a,\lambda)_{PAH} = \frac{\sigma_{PAH}(\lambda)}{\pi (a_{PAH})^2}$$
(4.5)

O Modelo de Dwek possui um problema: quando nos dirigimos para comprimentos de onda muito curtos (menores que 912 Å),  $Q_{abs}$  atinge valores muito altos (para  $\lambda$ 's muito pequenos, pode até mesmo alcançar valores como 900 ou superiores). Mas o modelo quimiodinâmico nos fornece um campo de radiação que vai até  $\lambda = 296$  Å, de forma que neste modelo só consideramos  $Q_{abs}$  para os PAH's até os valores de  $\lambda$  no ultravioleta que não superassem um valor crítico de  $Q_{abs} = 1.98$ , valor este que encontramos para alguns grafites tomados de Draine & Lee (1984). Sempre que  $Q_{abs}$  calculado para o PAH seja superior a 1.98 na região do ultravioleta, consideramos a eficiência de absorção do PAH como sendo nula (zero) nesta região.

As figuras 4.4 e 4.5 nos mostram a eficiência de absorção para o Coroneno  $(C_{24}H_{12})$  e para o que consideramos como um aglomerado de PAH's  $(C_{486}H_{54})$ . Observe que as 'linhas' em 3.3, 6.2, 7.7, 8.6 e 11.3  $\mu m$  são claramente visíveis nas duas figuras.



**Figura 4.4** Eficiência de absorção  $Q_{abs}$  para o Coroneno  $(C_{24}H_{12})$ .



**Figura 4.5** Eficiência de absorção  $Q_{abs}$  para o aglomerado de PAH's ( $C_{486}H_{54}$ ).

## 4.2.2. A Extensão de Q<sub>abs</sub> para o Ultravioleta-Extremo/Raios-X Moles

Como havíamos comentado anteriormente, o Modelo de Dwek é incorreto quando nos dirigimos para comprimentos de onda muito curtos (Extremo-Ultravioleta/Raios-X Moles):  $Q_{abs}$ atinge valores irreais.

O modelo quimiodinâmico nos fornece um campo de radiação que vai até  $\lambda = 296$  Å, de forma que apenas considerar  $Q_{abs} = 0$  para pequenos comprimentos de onda teria um impacto muito negativo em nosso trabalho, especialmente no que diz respeito à extinção por poeira, visto que os PAHs são os principais responsáveis pela extinção na região que vai do Ultravioleta aos Raios-X Moles.

Para contornar este problema, baseamo-nos no trabalho de Bakes et al. (2001). Desde que as propriedades de absorção no ultravioleta dos PAHs e pequenos grãos aromáticos são dominadas pelo sistema do elétron  $\pi$ , como acontece para o grafite, os autores adotaram a seção de choque de absorção ( $\sigma_{abs}$ ) dos cálculos para os pequenos grãos de grafite feitos por Draine & Lee (1984). Para partículas pequenas em comparação com o comprimento de onda (isto é, no limite de Rayleigh),  $\sigma_{abs}$  fica em escala com o tamanho do PAH, ou seja, com o número de átomos de Carbono. Isto é confirmado pelas medições de Verstraete et al. (1990) e resulta do trabalho de Bakes & Tielens (1994).

A seção de choque de absorção ( $\sigma_{abs}$ ) é expressa por:

$$\sigma_{abs}(\nu) = 2.16 \times 10^{-17} N_C Q_{0.003\mu m}(\nu) \ cm^2, \tag{4.6}$$

onde  $Q_{0.003\mu m}(\nu)$  é a eficiência de absorção dependente do comprimento de onda dos fótons do ultravioleta distante para um grão de grafite de tamanho 0.003  $\mu$ m (Draine & Lee 1984) e  $N_C$ é o número de átomos de Carbono no PAH.

A comparação entre os valores de  $Q_{abs}$  do Coroneno e do Aglomerado de PAHs, via Modelo de Dwek, e a correção proposta por Bakes & Tielens podem ser vistas nas Figuras 4.6 e 4.7.

Esta equação leva em consideração a dependência da seção de choque de absorção com o comprimento de onda. Além disso, os autores fazem a suposição de que esta seção de choque no ultravioleta é independente da carga do PAH.

A partir desta equação, e juntamente com uma costura com os valores de  $Q_{abs}$  calculados segundo o formalismo do Modelo de Dwek, fomos capazes de construir eficiências de absorção de PAHs válidas para toda a região do espectro que vai dos Raios-X moles até o submilimétrico, conforme pode ser visto nas Figuras 4.8 e 4.9.



**Figura 4.6** Eficiência de absorção  $Q_{abs}$  para o Coroneno  $(C_{24}H_{12})$  segundo o Modelo de Dwek e a correção proposta por Bakes & Tielens (1994).



**Figura 4.7** Eficiência de absorção  $Q_{abs}$  para o aglomerado de PAH's  $(C_{486}H_{54})$  segundo o Modelo de Dwek e a correção proposta por Bakes & Tielens (1994).



**Figura 4.8** Eficiência de absorção  $Q_{abs}$  para o Coroneno  $(C_{24}H_{12})$ , com a correção para o Ultravioleta/Raios-X Moles.



**Figura 4.9** Eficiência de absorção  $Q_{abs}$  para o aglomerado de PAH's  $(C_{486}H_{54})$  corrigida para o Ultravioleta/Raios-X Moles.

## 4.2.3. O Modelo de Li & Draine

O modelo de PAHs de Li & Draine é bem descrito em Li & Draine (2001). Foi de lá que transcrevemos a descrição abaixo.

Eles adotam uma densidade de massa para o grafite de  $\approx 2.24$  g cm<sup>-3</sup>. O "raio" *a* de um PAH que contém  $N_{\rm C}$  átomos de Carbono é *definido* como sendo o raio de uma esfera com a densidade de carbono do grafite contendo o mesmo nmero de átomos de Carbono, isto é,  $a = 1.286 N_{\rm C}^{1/3}$  Å.

No Modelo de Li & Draine faz-se uma transição das propriedades ópticas dos PAHs para as do grafite em a = 50Å, considerando-se as seções de choque dos grãos carbonáceos como sendo

$$C_{\rm abs}^{\rm carb}(a,\lambda) = \xi_{\rm PAH} C_{\rm abs}^{\rm PAH}(a,\lambda) + (1-\xi_{\rm PAH}) C_{\rm abs}^{\rm gra}(a,\lambda)$$
(4.7)

$$\xi_{\text{PAH}}(a) = (1 - q_{\text{gra}}) \times \min\left[1, (a_{\xi}/a)^3\right], \quad a_{\xi} = 50\text{\AA}, \quad q_{\text{gra}} = 0.01$$
 (4.8)

onde  $C_{\rm abs}^{\rm PAH}$  e  $C_{\rm abs}^{\rm gra}$  são, respectivamente, a seção de choque de absorção dos grãos de grafite e PAHs com raio *a* no comprimento de onda  $\lambda$ ;  $a_{\xi}$  é o raio do grão onde a transição das propriedades dos PAHs para as do grafite começam;  $0 < q_{\rm gra} \ll 1$  de forma que mesmo para pequenos grãos carbonáceos eles introduzem uma pequena quantidade de absorção no contínuo;  $\xi_{\rm PAH}$ , o "peso" dos PAHs, cai de  $1 - q_{\rm gra}$  a zero coforme *a* aumenta de  $a_{\xi}$  até o infinito.

A escolha deles para  $\xi_{\text{PAH}}$  é inteiramente arbitrária, mas segundo eles o espectro infravermelho resultante é insensível ao comportamento detalhado de  $\xi_{\text{PAH}}$  desde que  $\xi_{\text{PAH}} = (1 - q_{\text{gra}})$  para  $a \leq 30$ Å e  $\xi_{\text{PAH}} \leq 0.5$  para  $a \gtrsim 100$ Å. Como exemplo, eles mencionam que a função mais plana,  $\xi_{\text{PAH}}(a) = (1 - q_{\text{gra}}) \times \min \{1, 1/[1 + (a/a_{\xi} - 1)^3]\}$ , resulta em um espectro modelo que é quase indistingüível daquele da equação (4.8).

No modelo, uma molécula de PAH é caracterizada pelo número de átomos de carbono  $(N_{\rm C})$ , a razão de hidrogênio para carbono (H/C), e a carga (neutro ou carregado). A proporção H/C é determinada pela estrutura aromática. Desde que parece provável que os PAHs astronômicos são relativamente pericondensados, como favorecido por considerações de estabilidade e pelo fato de que grandes PAHs compactos fornecem uma melhor compatibilidade para as posições das bandas interestelares de PAHs interestelares, eles assumem que

$$H/C = \begin{cases} 0.5, & N_C \le 25, \\ 0.5/\sqrt{N_C/25}, & 25 \le N_C \le 100, \\ 0.25, & N_C \ge 100, \end{cases}$$
(4.9)

função esta que para  $N_{\rm C} < 100$  se aproxima dos valores dos PAHs compactos, simétricos. Mas eles também consideraram uma razão mais alta de H/C, a qual é mais apropriada para PAHs com estruturas mais abertas.

Li & Draine construíram as seções de choque de absorção para os PAHs neutros e ionizados, tanto para o ultravioleta distante (Far-UV) quanto para o infravermelho distante (Far-IR), a partir de medidas de laboratório disponíveis e guiados por observação astronômicas - ver o Apêndice A de Li & Draine (2001) para os detalhes.

As seções de choque resultantes são caracterizadas por um conjunto de Perfis de Drude: a transição  $\sigma$ - $\sigma^*$  com um pico em  $\lambda_0^{-1} \simeq 14 \mu m^{-1}$ , a transição  $\pi$ - $\pi^*$  com  $\lambda_0^{-1} \simeq 4.6 \mu m^{-1}$ ; o modo stretching da ligação C-H ( $\lambda_0 = 3.3 \mu m$ ); os dois "stretching modes" da ligação C-C ( $\lambda_0 = 6.2, 7.7 \mu m$ ); o "in-plane bending mode" da ligação C-H ( $\lambda_0 = 8.6 \mu m$ ); os três "out-of-plane bending modes" da ligação C-H ( $\lambda_0 = 11.3, 11.9, 12.7 \mu m$ ); e uns poucos features débeis provavelmente devido aos "bending modes" da ligação C-C ( $\lambda_0 = 16.4, 18.3, 21.2, 23.1 \mu m$ ). Além desses features discretos, há també m um contínuo de absorção que vai desde o ultravioleta distante (Far-UV), passando pelo ultravioleta próximo (Near-UV)/visível, até chegar ao infravermelho distante (Far-IR).

A seção de choque por átomo de Carbono  $(C_{\rm abs}^{\rm PAH}/N_{\rm C})$ é considerada como sendo

$$\begin{aligned} \frac{C_{abs}^{\text{PAH}}(\lambda)}{N_{\text{C}}} &= C_{abs}^{\text{gra}}(\lambda)/N_{\text{C}} & x > 17.25; \\ &= (126.0 - 6.4943x) \times 10^{-18} \text{ cm}^2/\text{C}, & 15 < x < 17.25; \\ &= S_1(\lambda) + (-3.0 + 1.35x) \times 10^{-18} \text{ cm}^2/\text{C}, & 10 < x < 15; \\ &= (66.302 - 24.367x + 2.950x^2 - 0.1057x^3) \\ &\times 10^{-18} \text{ cm}^2/\text{C}, & 7.7 < x < 10; \\ &= S_2(\lambda) + \left[1.8687 + 0.1905x + 0.4175(x - 5.9)^2 + \\ & 0.04370(x - 5.9)^3\right] \times 10^{-18} \text{ cm}^2/\text{C}, & 5.9 < x < 7.7; \\ &= S_2(\lambda) + (1.8687 + 0.1905x) \times 10^{-18} \text{ cm}^2/\text{C}, & 3.3 < x < 5.9; \\ &= 34.58 \times 10^{-18 - 3.431/x} \times \text{cutoff}(\lambda, \lambda_c) + \\ &+ \sum_{j=3}^{14} S_j(\lambda) \text{ cm}^2/\text{C}, & x < 3.3; \quad (4.10) \end{aligned}$$

onde  $x \equiv (\lambda / \mu m)^{-1}$ .

As transições ultravioletas  $\sigma$ - $\sigma^* \in \pi$ - $\pi^* (j=1,2)$ , os modos stretching do C-H (j=3), stretching do C-C (j=4,5), "in-plane bending" do C-H (j=6), "out-of-plane bending" do C-H (j=7,8,9), bending do C-H (j=10,11,12,13), e o contínuo do infravermelho distante são representados por perfis Drude, com a contribuição da seção de choque de absorção por átomo de Carbono para o feature j dada por

$$S_j(\lambda) \equiv \frac{2}{\pi} \frac{\gamma_j \lambda_j \sigma_{\text{int},j}}{(\lambda/\lambda_j - \lambda_j/\lambda)^2 + \gamma_j^2},\tag{4.11}$$

onde a Tabela 4.1 lista os valores do comprimento de onda central  $\lambda_j$ , o parâmetro de alargamento  $\gamma_j$ , e a intensidade de absorção integrada<sup>1</sup>

$$\sigma_{\text{int},j} \equiv \int S_j(\lambda) d\lambda^{-1} = \frac{\pi}{2} S_j(\lambda_j) \gamma_j \lambda_j^{-1}.$$
(4.12)

A função  $\operatorname{cutoff}(\lambda, \lambda_c)$  e o comprimento de onda de corte  $\lambda_c$ , determinado pelo tamanho do PAH (o número de anéis de benzeno fundidos) são definidas pelas equações que descreveremos a seguir.

Eles adotam o corte de Désert et al. (1990),

$$\operatorname{cutoff}(\lambda,\lambda_c) = \frac{1}{\pi} \arctan\left[\frac{10^3(y-1)^3}{y}\right] + \frac{1}{2}, \quad y = \lambda_c/\lambda, \tag{4.13}$$

onde o comprimento de onda de corte  $\lambda_c$  – a borda de absorção visual – é derivada das extensas discussões de Salama et al. (1996):

$$\left[\frac{\lambda_{\rm c}}{\mu{\rm m}}\right] = \begin{cases} 1/(3.804M^{-0.5} + 1.052), \text{ para PAHs neutros;} \\ 1/(2.282M^{-0.5} + 0.889), \text{ para PAHs cátions;} \end{cases}$$
(4.14)

onde M, o número de anéis de benzeno fundidos, vale aproximadamente  $M \approx 0.4 N_{\rm C}$  para  $N_{\rm C} > 40$ ,  $M \approx 0.3 N_{\rm C}$  para  $N_{\rm C} < 40$  ( $N_{\rm C}$  é o número de átomos de Carbono).

Eles incluíram os fatores de aumento  $E_{6.2}$ ,  $E_{7.7}$ , e  $E_{8.6}$  na intensidade das bandas de 6.2, 7.7, and 8.6  $\mu$ m<sup>-2</sup>. Os valores de  $E_{6.2} = E_{7.7} = E_{8.6} = 1$  são aqueles de laboratío, mas eles são incapazes de reproduzir satisfatoriamente o espectro astronômico, a menos que se admita que  $E_{6.2}$ ,  $E_{7.7}$  e  $E_{8.6} > 1$ . Para os *features* 7.7 e 11.3  $\mu$ m, dados de laboratório indicam uma intensidade relativa de banda de  $\sigma_{int,7.7}/\sigma_{int,11.3} \approx 1.3$  para PAHs neutros e  $\approx 12$  para PAHs ionizados (assumindo H/C = 1/3).

Para ajustar melhor os dados observacionais, eles adotam  $E_{7.7}=2$  (para reproduzir a intensidade do *feature* mais forte observado em 7.7  $\mu$ m),  $E_{6.2} = 1.5E_{7.7} \approx 3$  (resultados observacionais de estudos do meio interestelar difuso, de nebulosas planetárias, de nebulosas de reflexão e de regiões HII), e  $E_{8.6} = E_{7.7} \approx 2$  (porque para a maioria dos objetos a intensidade do *feature* em 8.6  $\mu$ m é consistente com a intensidade do *feature* em 7.7  $\mu$ m). Maiores informações podem ser encontradas em Li & Draine (2001).

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>A seção de choque integrada sobre o comprimento de onda  $\overset{\text{R}}{\int}S_j(\lambda)d\lambda = \lambda_j^2\sigma_{\text{int},j}$ .

 $<sup>^{2}</sup>$ A intensidade absoluta das bandas para algumas espécies de PAHs varia consideravelmente entre diferentes grupos de laboratório e entre resultados experimentais e resultados teóricos. As seções de choque integradas podem diferir de um valor de 1.5–20 entre diferentes estudos experimentais, ou entre estudos experimentais e estudos teóricos (ver Langhoff 1996).

				FΨ	/HM	$\sigma_{\mathrm{int},j} \equiv \int$	$\sigma_{\mathrm{int},j} \equiv \int S_j(\lambda) d\lambda^{-1}$	
j	$\lambda_j \ (\mu { m m})$	$\substack{\lambda_j^{-1} \\ (\mathrm{cm}^{-1})}$	$\gamma_j$	$\gamma_j \lambda_j \ (\mu{ m m})$	$\gamma_j \lambda_j^{-1}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\frac{\rm neutro}{(10^{-20} {\rm cm/C})}$	ionizado $(10^{-20} \mathrm{cm/C})$	
1	.0722	138500	0.195	.0141	27000	$7.97 \times 10^7$	$7.97 \times 10^7$	
2	.2175	46000	0.217	.0473	10000	$1.23  imes 10^7$	$1.23 \times 10^7$	
3	3.3	3030	0.012	0.04	37	$197  imes \mathrm{H/C}$	$44.7 \times \mathrm{H/C}$	
$4^{\mathrm{a}}$	6.2	1610	0.032	0.20	52	$19.6 \times E_{6.2}$	$157 \times E_{6.2}$	
$5^{\mathrm{a}}$	7.7	1300	0.091	0.70	118	$60.9 \times E_{7.7}$	$548 \times E_{7.7}$	
$6^{\mathrm{a}}$	8.6	1161	0.047	0.40	54	$34.7 \times E_{8.6} \times \mathrm{H/C}$	$242 \times E_{8.6} \times \mathrm{H/C}$	
$7^{\mathrm{b}}$	11.3	886	0.018	0.20	16	$427 \times (1/3) \mathrm{H/C}$	$400 \times (1/3) \mathrm{H/C}$	
$8^{\rm b}$	11.9	840	0.025	0.30	21	$72.7 \times (1/3) \mathrm{H/C}$	$61.4 \times (1/3) \mathrm{H/C}$	
$9^{\mathrm{b}}$	12.7	787	0.024	0.30	19	$167  imes (1/3) \mathrm{H/C}$	$149 \times (1/3) \mathrm{H/C}$	
$10^{\rm c}$	16.4	610	0.010	0.16	6	5.52	5.52	
$11^{\rm d}$	18.3	546	0.036	0.66	20	6.04	6.04	
$12^{\rm d}$	21.2	472	0.038	0.81	18	10.8	10.8	
$13^{\rm d}$	23.1	433	0.046	1.07	20	2.78	2.78	
$14^{\rm e}$	26.0	385	0.69	18.0	266	15.2	15.2	

Tabela 4.1 Parâmetros para os perfis de Drude para o modelo de PAHs de Li & Draine.

<sup>a</sup>Com  $E_{6,2}=1$ ,  $E_{7,7}=1$  e  $E_{8,6}=1$  obtém-se as intensidades de banda medidas em laboratório. O espectro infravermelho observado do meio interestelar difuso é melhor ajustado pelo modelo de poeira com  $E_{6,2}=3$ ,  $E_{7,7}=2$  e  $E_{8,6}=2$ 

<sup>b</sup>Para os modos "*out-of-plane bending*" do C-H, o fator  $\frac{1}{3}$  origina-se da suposição de que os PAHs possuem igual número de H nas formas solo, duet, e trio para as unidades de CH adjacentes.

 $^{c}\mathrm{Largura}$  de banda de Moutou et al. (2000).

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

<sup>e</sup>Para reproduzir o fraco contínuo em absorção para  $\lambda > 14\mu$ m, conforme medido por Moutou et al. (1996).

Para levar em consideração a emissão no contínuo entre 1–5 $\mu$ m que interpõ-se ao feature em 3.3 $\mu$ m, emissão esta detectada em vários objetos astronômicos (a Barra de Órion, várias nebulosas de reflexão, galáxias normais, galáxias Starburst, etc), a Equação (4.7) e a Equação (4.8) fazem  $C_{\rm abs}$  incluir uma fração  $q_{\rm gra}$  da opacidade por átomo de Carbono do grafite, resultando numa opacidade no contínuo que se extende ao infravermelho, mesmo quando  $a < a_{\xi}$ .

A emissão observada dos *features* de PAHs estão em  $\lambda \leq 25 \,\mu$ m, sendo que estas emissões possuem contribuições primariamente de partículas com raios  $a \leq 40$  Å, as quais podem ser aquecidas até  $\geq 100$  K por um fóton com  $hc/\lambda < 13.6$  eV. Portanto, os *features* em emissão observados dos PAHs requerem apenas que  $a_{\xi} \geq 25$  Å. Li & Draine tomaram  $a_{\xi} \approx 50$  Å, de forma que o *features* em *absorção* de 6.2  $\mu$ m estivesse em acordo com as observações. Mas este valor de  $a_{\xi}$  – bem como a forma da transição das propriedades ópticas das partículas tipo-PAH para as partículas tipo-grafite – não é estabelecido em bases sólidas, já que o espectro de emissão calculado é relativamente insensível a variações de  $a_{\xi}$  na faixa de 25 – 100 Å. Espectros calculados no infravermelho com  $a_{\xi} = 25$ Å ou  $a_{\xi} = 75$ Å são quase idênticos àqueles para  $a_{\xi} = 50$ Å.

Ao compararmos os PAHs do Modelo de Dwek com os PAHs do Modelo de Li & Draine, há alguns comentários que julgamos relevantes fazer. Com certeza os PAHs de Li & Draine ajustam melhor os dados observacionais, mas isso não quer dizer que eles possuam uma natureza física mais real que os PAHs do Modelo de Dwek, considerando-se que ambos são modelos.

Esta situação é a mesma que para os "silicatos interestelares astronômicos": eles foram elaborados com um índice de refrao escolhido especificamente para reproduzir a curva de extinção interestelar observada. Portanto, eles não representam um determinado tipo verdadeiro de grão de silicato, mas em vez disso mais provavelmente um conjunto do silicatos astrofsico com diferentes tipos e montantes de contaminação, e uma mistura de formas cristalinas e amorfas.

Individualmente, talvez os PAHs de Dwek estejam mais próximos de um PAH real que os de Li & Draine, mas com certeza estes últimos ajustam melhor a curva de extinção interestelar.

**Tabela 4.2** Comparação entre algumas espécies químicas de nossa biblioteca de PAHs com as do Modelo de Li & Draine. Selecionamos os primeiros seis PAHs de Li & Draine que tinham o número de carbonos mais próximos daqueles do nosso modelo.

MODELO	) DE DWEK		MODELO DE LI & DRAINE		
NOME	FÓRMULA	RAIO [Å]	NOME	FÓRMULA	RAIO [Å]
Coroneno	$C_{24}H_{12}$	4.47	Coroneno (?)	$C_{21}H_{11}$	3.55
Ovaleno	$C_{32}H_{14}$	5.17	Ovaleno (?)	$C_{30}H_{14}$	3.98
Circum - Pireno	$C_{42}H_{16}$	5.92	Circumpireno (?)	$C_{42}H_{16}$	4.47
Circum-Coroneno	$C_{150}H_{30}$	6.71	???	$C_{59}H_{19}$	5.01
$Circum^2 Pireno$	$C_{80}H_{22}$	8.17	$Circum^2 Pireno$ (?)	$C_{83}H_{23}$	5.62
$Circum^{3}Coroneno$	$C_{150}H_{30}$	11.18	???	$C_{166}H_{42}$	7.08

Na Tabela 4.2 nós mostramos a diferença entre os PAHs de Dwek com os PAHs de Li & Draine. Como dito anteriormente, os PAHs de Dwek parecem ser individualmente mais reais que os de Li & Draine.

## 4.2.4. O Nosso Modelo de PAHs

Para descrever o Nosso Modelo de PAHs, vamos adotar a mesma formalização utilizada tanto por Dwek quanto por Li & Draine.

Neste modelo, a seção de choque dos PAH ( $\sigma_{PAH}(\lambda)$ ) é representada como uma soma de

termos (UV-visual, contínuo IR e linhas IR):

$$\sigma_{PAH}(\lambda) = \sigma_{UV-vis}(\lambda) + \sigma_{IRc}(\lambda) + \sigma_{IRl}(\lambda)$$
(4.15)

O raio de um PAH é dado por  $a_{PAH}(\text{\AA}) = 10\sqrt{N_c/120}$ , em acordo com a relação de Omont (1986) para os PAHs pericondensados (possuem uma distribuição planar circular).

 $N_c$ é o número de Carbonos contidos no PAH, enquanto que  $N_H$ é o número de hidrogênios.

Devemos observar no presente modelo que para se obter a eficiência de absorção dos PAH's, estes serão tratados como se fossem círculos num plano, visto que podemos calcular apenas suas seções de choque. Portanto, teremos que:

$$Q(a,\lambda)_{PAH} = \frac{\sigma_{PAH}(\lambda)}{\pi (a_{PAH})^2}$$
(4.16)

Como nossa formulação segue a de Dwek para definir o tamanho do PAH, temos que nossos PAHs serão maiores que os de Li & Draine quando comparamos espécies com o mesmo número de carbonos.

PERICONDENSA	ADOS	OUTROS TIPOS		
Coroneno	$C_{24}H_{12}$	Ovaleno	$C_{32}H_{14}$	
Circum – Coroneno	$C_{54}H_{18}$	Circumpireno	$C_{42}H_{16}$	
$Circum^2 Coroneno$	$C_{96}H_{24}$	Hexabenzo coroneno	$C_{42}H_{18}$	
$Circum^{3}Coroneno$	$C_{150}H_{30}$	Dicoronileno	$C_{48}H_{20}$	
???	$C_{216}H_{36}$	Circum - Ovaleno	$C_{66}H_{20}$	
???	$C_{294}H_{42}$	$Circum^2 Pireno$	$C_{80}H_{22}$	
???	$C_{384}H_{48}$			
???	$C_{486}H_{54}$			
???	$C_{600}H_{60}$			

Tabela 4.3 Espécies químicas de nossa biblioteca de PAHs.

Na Tabela 4.3 mostramos as espécies químicas de PAHs contidas em nossa biblioteca. A princípio só iremos utilizar os oito primeiros PAHs pericondensados, mas os outros já estão disponíveis caso queiramos ampliar nossos modelos em número de espécies.

## A Região do Ultravioleta Distante / Raios-X Moles

Para esta região do espectro, nossa formulação seguirá a correção proposta por Bakes et al. (2001).

Ou seja, a seção de choque de absorção  $(\sigma_{abs})$  é expressa por:

$$\sigma_{abs}(\nu) = 2.16 \times 10^{-17} N_C Q_{0.003\mu m}(\nu) \ cm^2, \tag{4.17}$$

onde  $Q_{0.003\mu m}(\nu)$  é a eficiência de absorção dependente do comprimento de onda dos fótons do ultravioleta distante para um grão de grafite de tamanho 0.003  $\mu$ m (Draine & Lee 1984), e  $N_C$ é o número de átomos de Carbono no PAH.

#### O Contínuo Ultravioleta - Visível

Para o contínuo no Ultravioleta-Visível, nossa formulação é a mesma que a de Dwek:

$$\sigma_{UV-vis}(\lambda) = 10^{-18} N_c \left[ p_1 f_v(x) + p_2 f_u(x) \right] \mathcal{C}\left(\frac{x}{x_c}\right) \quad cm^2 \tag{4.18}$$

onde  $N_c$  é o número de átomos de carbono no PAH,

 $x\equiv 1/\lambda(\mu m), \quad p_1=4.0 \quad {\rm e} \quad p_2=1.1$ são parâmetros numéricos,  $x_c\equiv \frac{12.5}{a_{PAH}({\rm \AA})} \ ,$   $\lambda_m=~10~\mu{\rm m} \ ,$ 

As funções  $f_u, f_v$ , e  $\mathcal{C}(y)$  são dadas por:

$$\mathcal{C}(y \equiv x/x_c) = \pi^{-1} \arctan(10^3 (y-1)^3/y) + 0.5$$
(4.20)

Fizemos uma emenda entre as regiões Raios-X Moles/Ultravioleta Extremo com a parte Ultravioleta/Visível do espectro de tal forma que aproveitássemos o máximo possível da formulação de Dwek, e que a transição fosse a mais suave possível, embora algum ressalto fosse inevitável.

#### O Contínuo do Infravermelho

Consideramos que os PAHs possuem uma opacidade no contínuo infravermelho, dada por uma fração  $q_{gra}$  da opacidade por átomo de C do grafite, como sugerido por Li & Draine (2001), que favorem um valor de  $q_{gra} \approx 0.01$ .

Especificamente, adotamos:

$$\sigma_{IRl} = q_{gra} \times \pi a_{PAH}^2 Q(a_0, \lambda), \tag{4.21}$$

onde  $a_0$  é um tamanho de referência do grão de grafite.

Fixamos o valor de  $q_{gra} = 0.01$  e adotamos  $a_0 = 1$  Å, a mesma dimensão de um PAH com 120 átomos de carbono, segundo a expressão  $a_{PAH} = 10^{-7} (N_C/120)^{1/2}$ . Esse contínuo no infravermelho é exigido para dar conta da emissão contínua no infravermelho próximo entre 1 e 5  $\mu$ m, subjacente à *feature* de PAH em 3.3  $\mu$ m, detectada em vários objetos astronômicos, incluindo a Barra de Órion, nebulosas de reflexão, galáxias normais, e as galáxias starburst prototípicas M82 e NGC 253 (Sturm et al. 2000). Essa emissão no contínuo infravermelho provavelmente é na realidade um quase-contínuo de várias bandas vibracionais dos PAHs muito fracas, em grande número e com muitas harmônicas. (Léger & Puget 1984; Allamandola et al. 1985, 1989; Sellgren et al. 1996). Transições eletrônicas intra-bandas também podem contribuir um contínuo infravermelho devido às bandas se tornarem mais cerradas a medida que cresce o tamanho dos PAHs e/ou com a ionização dos PAHs (Allamandola et al. 1989; Tielens et al. 1999).

A calibração do fator  $q_{gra} \approx 0.01$  foi feita por Li & Draine (2001), a partir de observações da linha a 3.3 µm em NGC 1333, na Barra de Órion e no Retângulo Vermelho, utilizando as razãos linha/contínuo determinadas (tão altas quando ~ 30), e suas estimativas de seção de choque para a linha,  $\sigma_{\text{int},3.3\mu\text{m}}$ . Escolhemos a expressão de  $\sigma_{IRl}$  acima em preferência àquela de Désert et al. (1990) (Eq. 4.2) por dois motivos. Em primeiro lugar, embora esses autores tenham calibrado seu contínuo nas observações da nebulosa de reflexão NGC 2023, o máximo do seu contínuo ocorre um pouco acima abaixo de 10 µm, e em 3 – 5 µm esá muito abaixo do contínuo detectado em outas objetos. Em segundo lugar, a Eq. 4.3 prevê, para longos comprimentos de onda, um comportamento  $\propto \lambda^{-1}$ , que é o típico da região do ultravioleta ao infravermelho próximo do espectro. Contudo, para a o infravermelho médio e distante, espera-se uma dependência das eficiência da absorção mais próxima de  $\propto \lambda^{-2}$ , como é o caso dos grafites de Li & Draine (2001). Assim, o contínuo de Li & Draine fica acima do Désert et al. (1990) em 2 – 5 µm, e abaixo para para  $\lambda > 20$  µm.

#### Os "Features" dos PAHs

Para representar os *features* dos PAHs utilizamos a formulação de Li & Draine (2001). O modelo deles se baseia em dados observacionais mais recentes que aqueles do Modelo de Dwek e possui um ajuste melhor com os dados observacionais.

Portanto, as seções de choque resultantes para os *features* dos PAHs são caracterizadas por um conjunto de Perfis de Drude: o modo *stretching* da ligação C-H ( $\lambda_0 = 3.3\mu$ m); os dois "*stretching modes*" da ligação C-C ( $\lambda_0 = 6.2, 7.7\mu$ m); o "*in-plane bending mode*" da ligação C-H ( $\lambda_0 = 8.6\mu$ m); os três "*out-of-plane bending modes*" da ligação C-H ( $\lambda_0 = 11.3, 11.9, 12.7\mu$ m); e uns poucos *features* débeis provavelmente devido aos "*bending modes*" da ligação C-C ( $\lambda_0 = 16.4, 18.3, 21.2, 23.1\mu$ m).

Desta forma, a seção de choque por átomo de Carbono  $(C_{\rm abs}^{\rm PAH}/N_{\rm C})$  para os *features* no infravermelho é dada por:

$$\frac{C_{\rm abs}^{\rm PAH}(\lambda)}{N_{\rm C}} = 34.58 \times 10^{-18 - 3.431/x} \times \mathcal{C}\left(\frac{x}{x_c}\right) + \sum_{j=3}^{14} S_j(\lambda) \quad \text{cm}^2/\text{C}, \qquad x < 3.3; \qquad (4.22)$$

onde temos que

$$x \equiv (\lambda/\mu m)^{-1}, \ x_c \equiv \frac{12.5}{a_{PAH}(\text{\AA})}$$
 e  
 $\mathcal{C}(y \equiv x/x_c) = \pi^{-1} \arctan(10^3 \ (y-1)^3/y) + 0.5$  (4.23)

Os modos stretching do C-H (j=3), stretching do C-C (j=4,5), "in-plane bending" do C-H (j=6), "out-of-plane bending" do C-H (j=7,8,9), bending do C-H (j=10,11,12,13), e o contínuo do infravermelho distante são representados por perfis Drude, com a contribuição da seção de choque de absorção por átomo de Carbono para o feature j dada por

$$S_j(\lambda) \equiv \frac{2}{\pi} \frac{\gamma_j \lambda_j \sigma_{\text{int},j}}{(\lambda/\lambda_j - \lambda_j/\lambda)^2 + \gamma_j^2},\tag{4.24}$$

onde a Tabela 4.1 lista os valores do comprimento de onda central  $\lambda_j$ , o parâmetro de alargamento  $\gamma_j$ , e a intensidade de absorção integrada

$$\sigma_{\text{int},j} \equiv \int S_j(\lambda) d\lambda^{-1} = \frac{\pi}{2} S_j(\lambda_j) \gamma_j \lambda_j^{-1}.$$
(4.25)

A função  $\operatorname{cutoff}(\lambda, \lambda_c)$  e o comprimento de onda de corte  $\lambda_c$ , determinado pelo tamanho do PAH (o número de anéis de benzeno fundidos) são definidas pelas equações que descreveremos a seguir. Em nosso modelo adotamos o corte de Désert et al. (1990),

$$\operatorname{cutoff}(\lambda,\lambda_c) = \frac{1}{\pi} \arctan\left[\frac{10^3(y-1)^3}{y}\right] + \frac{1}{2}, \quad y = \lambda_c/\lambda, \tag{4.26}$$

onde o comprimento de onda de corte  $\lambda_c$  – a borda de absorção visual – é derivada das extensas discussões de Salama et al. (1996):

$$\left[\frac{\lambda_{\rm c}}{\mu{\rm m}}\right] = \begin{cases} 1/(3.804M^{-0.5} + 1.052), & \text{para PAHs neutros;} \\ 1/(2.282M^{-0.5} + 0.889), & \text{para PAHs cátions;} \end{cases}$$
(4.27)

onde M, o número de anéis de benzeno fundidos, vale aproximadamente  $M \approx 0.4 N_{\rm C}$  para  $N_{\rm C} > 40$ ,  $M \approx 0.3 N_{\rm C}$  para  $N_{\rm C} < 40$  ( $N_{\rm C}$  é o número de átomos de Carbono).

Um parâmetro adicional que ainda não discutimos é o grau de hidrogenação ( $\alpha_{H/C}$ ) do PAH. Segundo SK92, o número de átomos de hidrogênio ligados aos anéis periféricos em um PAH depende de sua história e do ambiente. Os átomos de hidrogênio são menos fortemente ligados (4.5 eV) do que os átomos de carbono (7.5 eV), e portanto terão a tendência de serem removidos em campos de radiação mais duros e intensos, resultando em uma desidrogenação do PAH e em uma redução de  $\alpha_{H/C}$ . O grau de hidrogenação irá afetar a razão entre as bandas vibracionais  $C - H \in C = C$ .

O parâmetro  $\alpha_{H/C}$  é usado para descrever o número de átomos de hidrogênio relativo ao número de átomos de carbono em um PAH. Em aglomerados de PAH's, a desidrogenação tornase ineficaz por causa de sua alta densidade de modos vibracionais nos quais a energia do fóton absorvido é rapidamente dissipada. Sem desidrogenação, teremos como valores de  $\alpha_{H/C} = 0.5$ para o Coroneno e  $\alpha_{H/C} = 0.11$  para o  $C_{486}H_{54}$ . Contudo, valores de 0.01 e menores não estão excluídos em ambientes astronômicos com radiação muito intensa e/ou dura (SK92).

# 4.3. A IONIZAÇÃO DOS PAHs

Nas últimas décadas, muitos autores trabalharam nos desafios envolvidos no cálculo nas taxas de reação para a química de grãos e PAHs no meio interestelar. Ficou evidente que os PAHs constituem uma parte importante do complexo conjunto de moléculas presentes nos muitos ambientes astronômicos observados, tais como regiões HII, nebulosas de reflexão, nuvens moleculares e difusas.

Omont (1986), via a emissão infravermelha, estimou que a abundância de PAHs no meio interestelar era da ordem de  $10^{-7}$  por átomo H. Prevê-se que os PAHs sejam as moléculas mais

abundantes no meio interestelar depois do hidrogênio molecular  $(H_2)$  e o monóxido de carbono (CO), de acordo com Ruiterkamp et al. (2005).

Devido ao seu baixo potencial de ionização (6 - 7 eV), as moléculas de PAH podem ser ionizadas pela emissão fotelétrica (Allamandola et al. 1985; van der Zwet & Allamandola 1985; Lepp & Dalgarno 1988; Bakes & Tielens 1994). Por outro lado, PAHs também podem adquirir carga através de colisões com elétrons e íons (Draine & Sutin 1987). O processo de carga do grão foi reanalisado mais recentemente por Weingartner & Draine (2001).

Se quisermos utilizar os *features* dos PAHs no infravermelho próximo como um diagnósticos galáctico (seja de idade, de formação estelar ou outra propriedade qualquer), precisamos levar em conta a ionização destas espécies químicas.

A intensidade (e principalmente a intensidade relativa) de alguns destes *features* é extremamente dependente do grau de ionização do PAH, e por conta disso temos que calcular adequadamente o grau de ionização que os PAHs utilizados em nossos modelos deverão sofrer quando expostos aos campos de radiação de intensidades variadas presentes ao longo de nossas galáxias fiduciais. E não só o grau de ionização, mas também de que maneira os parâmetros físicos deles (eficiência de absorção, capacidade térmica) se alteram com a alteração da carga.

As intensidades relativas dos *features* dos PAHs podem ser usados para identificar o grau de ionização dos PAHs. Por isso, eles podem fornecer pistas sobre o campo de radiação incidente, densidade de elétrons, e a temperatura de gás.

A diferença mais óbvia entre PAHs neutros e ionizados é a intensidade relativa dos modos de ligação C–C na região de 7.7  $\mu$ m a 7.9  $\mu$ m, comparado com o modo de ligação C–H "*out-of-plane bending*" em 11.3  $\mu$ m e em comprimentos de onda mais maiores (Allamandola et al. 1999).

Os PAHs ionizados emitem mais fortemente nos *features* em  $6\mu$ m -  $9\mu$ m do que na região de  $10\mu$ m -  $13\mu$ m, enquanto que os PAHs neutros, a região de  $10\mu$ m  $13\mu$ m domina (isso levando-se em conta os PAHs de Li & Draine).

Os modelos de Draine & Li (2001) demonstram que a razão F7.9/F11.3 aumenta com o tamanho da molécula de PAH, desde que PAHs maiores geralmente têm uma razão C/H também maior. Contudo, uma mudança de neutro para ionizado aumenta a razão muito mais significativamente, por um fator de ~ 10.

Nos campos de radiação presentes em quase todas as situações astrofísicas aqui consideradas, os PAHs se encontram ionizados. Utilizaremos portanto, em geral, os parâmetros para os PAHs ionizados das 12 linhas no infravermelho, listados por Li & Draine (2001) e que aparecem na Tabela 4.1.



**Figura 4.10** Diferença entre as eficiências de absorção  $Q_{abs}$  calculadas segundo o Modelo de Dwek (linha tracejada) para o PAH neutro e o nosso modelo de PAH ionizado (linha contínua), para o Coroneno ( $C_{24}H_{12}$ ) e o aglomerado de PAH's ( $C_{486}H_{54}$ ). Para o Modelo de Dwek aplicamos a correção para o Ultravioleta/Raios-X Moles. Já o nosso modelo segue a prescrição do Modelo de Li & Draine para a elaboração dos *features* e do contínuo no infravermelho próximo e médio.

O principal efeito da ionização dos PAHs será sobre a intensidade das linhas de emissão no infravermelho. A ionização implica em redução das linhas devidas a ligações C–H (como 3.3, 8.6 e  $11.3\mu$ m) e uma elevação da intensidade das linhas devidas a ligações C–C (como 6.2 e  $7.7\mu$ m).

Na Figura 4.10 mostramos a diferença entre as eficiências de absorção  $Q_{abs}$  para o Coroneno  $(C_{24}H_{12})$  e o aglomerado de PAH's  $(C_{486}H_{54})$ , calculadas segundo o Modelo de Dwek e o Nosso Modelo de PAHs ionizados. Note que no Nosso Modelo aparecem muito mais linhas (as 7 linhas após 11.3  $\mu$ m) que no modelo de Dwek.

Também merece atenção o fato de que o nosso contínuo entre ~ 1 $\mu$ m e ~ 13 $\mu$ m é muito superior ao contínuo de Dwek, especialmente nas regiões entre 2 $\mu$ m  $\lesssim \lambda \lesssim 6 \mu$ m. Já para  $\lambda \gtrsim 14 \mu$ m, o contínuo de Dwek é superior ao nosso. Além disso, com excessão da linha em 3.3  $\mu$ m, todas as demais linhas ionizadas aumentam de intensidade quando comparadas com as linhas neutras.

Mais de dez anos de observações no infravermelho médio e trabalhos de laboratório com os PAHs se passaram entre os trabalhos pioneiros de Léger et al. (1989) e Desert et al. (1990), com relação ao trabalho mais recente de Li & Draine (2001), o que permitiu melhores estimativas do contínuo no infravermelho e das linhas dos PAHs no infravermelho médio (MIR), bem como a identificação de novas linhas relacionadas aos PAHs até então desconhecidas. Podemos dizer que a "Era ISO & Spitzer" sucedeu a "Era IRAS".

Na Figura 4.11 mostramos a diferença entre as eficiências de absorção  $Q_{abs}$  para o Coroneno  $(C_{24}H_{12})$  e o aglomerado de PAH's  $(C_{486}H_{54})$ , calculadas segundo o Nosso Modelo, para os PAHs Ionizados e Neutros. Podemos observar que o principal impacto da ionização dos PAHs sobre a eficiência de absorção se dá na intensidade das linhas.

Os features entre 4µm e 21µm são os que possuem seus valores aumentados, enquanto que para os features com  $\lambda > 20\mu$ m praticamente não houve aumento (ou diminuição) na intensidade. O feature em 3.3µm é o único para o qual a intensidade diminui quando o PAH está ionizado. E também podemos observar que, para a região de  $\lambda > 26\mu$ m, a eficiências de absorção aumenta ligeiramente para os PAHs ionizados.



**Figura 4.11** Diferença entre as eficiências de absorção  $Q_{abs}$  de PAHs neutros (linha tracejada) e ionizados (linha contínua), para o nosso modelo. Aqui são mostrados o Coroneno ( $C_{24}H_{12}$ ) e o aglomerado de PAH's ( $C_{486}H_{54}$ ). Como podemos observar, a ionização tende a aumentar a emissão das linhas entre 5  $\mu$ m e 10  $\mu$ m, e a diminuir a emissão em 3.3  $\mu$ m.

# 4.4. FLUTUAÇÕES DE TEMPERATURA

Os 'grãos muito pequenos' e as 'moléculas muito grandes' podem sofrer intensas variações de temperatura sobre condições interestelares típicas. Sempre que há um evento de aquecimento discreto no qual o 'input' de energia é consideravelmente maior do que o conteúdo de energia média do grão, esses grãos alcançam temperaturas significativamente maiores que os valores de "estado estacionário".

Por não se comportarem necessariamente como as grandes partículas o fazem, essas 'micropartículas' são muito difíceis de serem interpretadas. Como resultado dessas flutuações de temperatura, a distribuição de temperatura para os pequenos grãos deve ser muito alargada, ao contrário do que ocorre para os grandes grãos, cuja distribuição de temperatura pode ser bem representada por uma função delta em torno da temperatura de estado estacionário do grão.

A taxa na qual os fótons da radiação estelar são absorvidos pelas micropartículas deverá ser, em ordem de magnitude, desde uma vez a cada minuto até uma vez a cada hora. O tempo para o estabelecimento do equilíbrio térmico dentro de um grão de raio a é  $a^2/D$ , onde D é a difusividade térmica dentro do grão, com o valor de  $D \approx 10^{-9}$  segundos ou menos. Desta forma, para qualquer escala de tempo superior a 1 nanossegundo, a temperatura 'instantânea' de um grão individual é bem definida.

A taxa na qual os fótons de grandes comprimentos de onda (infravermelho) são emitidos por um grão é cerca de  $10^3$  vezes maior do que a taxa com a qual os fótons de pequenos comprimentos de onda (UV) são absorvidos, de forma que dificilmente há qualquer flutuação de temperatura aleatória ('random') no grão enquanto ele resfria. Para um estudo mais aprofundado destas relações, o artigo de Aannestad (1989) é muito didático.

De acordo com Siebenmorgen, Krügel & Mathis (1992), há três situações básicas (combinadas ou não) nas quais se deve considerar como as flutuações de temperatura alteram a distribuição de temperatura dos grãos (e conseqüentemente seu espectro de emissão):

- (a) Quando os grãos são pequenos;
- (b) Quando o campo de radiação é fraco;
- (c) Quando o campo de radiação é muito intenso.

O tratamento para flutuações de temperatura que iremos descrever a seguir baseia-se no trabalho que desenvolvemos no mestrado (Guimarães 2001). O que faremos aqui é um resumo bastante sucinto com os resultados principais do capítulko da dissertação sobre flutuações de temperatura. Ao leitor interessado em conhecer mais profundamente este tópico, recomendamos a leitura do capítulo da dissertação sobre o tema e as referências às quais ele remete.

# 4.4.1. Equações Básicas

Um grão interestelar de raio a irá absorver fótons do campo de radiação interestelar a uma taxa  $(r_{abs})$  de

$$r_{abs} = \int_{0}^{13.6eV} \pi a^2 \ Q_{abs}(E) \ n(E) \ dE \quad [f \acute{o} tons/s], \tag{4.28}$$

onde  $Q_{abs}$  é a eficiência de absorção da partícula em comprimentos de onda do ultravioleta (um número adimensional), n(E) é a intensidade média de fótons [fótons  $cm^{-2}s^{-1}eV^{-1}$ ].

Um fato relevante que não podemos esquecer é que a eficiência de absorção da partícula varia com a temperatura do grão, conforme pode ser visto no gráfico da direita da Figura 3.9: para o grão de raio  $1\mu m$ , a eficiência de absorção aumenta com a diminuição da temperatura. Não iremos levar este fato em consideração.

O tempo médio entre absorção de fótons  $(\tau_{abs})$  é dado por

$$\tau_{abs} = \frac{1}{r_{abs}} \quad [segundos]. \tag{4.29}$$

A Figura 4.6 nos mostra a variação da temperatura ao longo do tempo para quatro grãos de raios diferentes, sujeitos a um campo de radiação médio. note que para grãos de raios muito grandes (acima de 100 Å), a temperatura não varia muito, enquanto o mesmo não pode ser dito para os pequenos grãos.

Imediatamente após ter absorvido o fóton, a energia se difunde rapidamente através do grão, de tal forma que o tempo de difusão da energia no grão é muito menor que o tempo médio entre a absorção de fótons. Com isso, a temperatura de um pequeno grão é bem definida com o seu resfriamento. Por outro lado, os fótons infravermelhos emitidos durante o resfriamento são tipicamente menos energéticos que um fóton ultravioleta por um fator de milhares de vezes, e portanto o resfriamento do grão é "suave", exceto para as temperaturas mais baixas.

Se a temperatura do grão é superior a 5 K, então a escala de tempo para a emissão de fótons é bem menor que aquela para a absorção de fótons (Aannestad 1989), e a emissão pode ser tratada como sendo contínua.

A potência irradiada por um grão entre absorções de fótons é :

$$\frac{dH}{dt} = 4\pi a^2 \int_0^\infty Q_{IR} \pi B_\lambda(T) \, d\lambda \quad [erg/s], \tag{4.30}$$



**Figura 4.12** Um dia na vida de um grão interestelar: a temperatura do grão versus o tempo para quatro tamanhos de grãos, com os grãos aquecidos pelo campo de radiação interestelar médio. Grãos com  $a \gtrsim 200$ Å têm uma temperatura quase constante, mas um grão com raio  $a \lesssim 100$ Å mostram aumentos evidentes na temperatura depois de cada absorção de fóton, com resfriamento gradual entre os eventos de absorção de fótons. Retirado de Draine (2003).

onde H é a entalpia da partícula [ergs], t é o tempo [segundos],  $Q_{IR}$  é a eficiência de emissão no infravermelho, e  $B_{\lambda}(T)$  é a função de Planck [erg cm<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup> Å<sup>-1</sup>].

A expressão geral para a "curva de resfriamento" de uma partícula pode ser obtida através das equações a seguir, onde onde H é a entalpia da partícula [ergs], t é o tempo [segundos], T é a temperatura [K] e C(T) é a capacidade térmica do grão [erg K<sup>-1</sup>]:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{dH}{dT}\frac{dT}{dt} \tag{4.31}$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{dH/dt}{dH/dT} \tag{4.32}$$

$$\frac{dH}{dT} = C(T). \tag{4.33}$$

Substituindo a equação 4.6 na equação 4.5, obteremos a "curva de resfriamento" entre a absorção de fótons:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{4\pi a^2}{C(T)} \int_0^\infty Q_{IR} \pi B_\lambda(T) d\lambda \quad [K/s].$$
(4.34)

A distribuição de "períodos de resfriamento"  $\tau$  entre a absorção de fótons é dada pela dis-

tribuição de Poisson:

$$P(\tau) = \frac{1}{\tau_{abs}} \exp\left[-\frac{\tau}{\tau_{abs}}\right]$$
(4.35)

A probabilidade de que um grão resfrie até uma temperatura T é então calculada como sendo:

$$P_t(T) = \int_{\tau_{min}(T)}^{\infty} P(\tau)d\tau = \frac{1}{\tau_{abs}} exp\left[-\frac{\tau_{min}(T)}{\tau_{abs}}\right],$$
(4.36)

onde  $\tau_{min}(T)$  é o mínimo período de tempo necessário para se alcançar a temperatura T.

 $\tau_{min}(T)$  é determinado pela curva de resfriamento dT/dt via a equação:

$$\tau_{min}(T) = \int_{T_0}^T dT / (dT/dt) \quad [segundos], \tag{4.37}$$

onde  $T_0$  é a temperatura de pico imediatamente após a absorção do fóton e T é a temperatura final que o grão irá alcançar após resfriar.

A temperatura de pico  $T_0$  depende da energia do fóton E bem como da temperatura  $T_1$  justo antes da absorção do fóton:

$$\int_{T_1}^{T_0} C(T)dT = E \quad [erg], \tag{4.38}$$

onde C(T) é a capacidade térmica do grão.

Várias aproximações têm sido empregadas para o valor de  $T_1$ . Em geral, e a não ser que indiquemos no texto, a temperatura adotada será de  $T_1 \simeq 2.73K$ , a temperatura de fundo da radiação de corpo negro, em acordo com Dwek (1986).

Dada a função  $\tau_{min}(T)$ , a quantidade fracional de tempo que um grão gasta entre as temperaturas  $T \in T + dT$  é dada por:

$$G_E(T) \ dT = \frac{dt}{\tau_{abs}} \ P_t(T), \tag{4.39}$$

$$G_E(T) = \frac{1}{\tau_{abs}(dT/dt)} \exp\left[-\frac{\tau_{min}(T)}{\tau_{abs}}\right]$$
(4.40)

Nesta expressão supõe-se que  $T < T_0(E)$  (ou seja, que a temperatura final do grão após o resfriamento é menor que sua temperatura de pico, após absorver um fóton). Uma outra maneira de se visualizar esta condição é considerar que E é maior que uma certa energia mínima  $E_{min}(T)$ , obtida da equações 4.10 e 4.11 ao se substituir T por  $T_0$ . Se  $E < E_{min}(T)$ , não há contribuição para  $G_E(T)$ .

Finalmente,  $G_E(T)$  deve ser ponderado sobre o espectro de fótons  $n_p(E)$  para se obter a função de distribuição de temperatura final:

$$G(T) = \tau_{abs} \int_{0}^{13.6eV} G_E(T) \ \pi a^2 \ Q_{abs}(E) \ n_p(E) \ dE \quad [K^{-1}].$$
(4.41)

## 4.4.2. Parâmetros Físicos

Para a eficiência de absorção  $Q_{abs}$  do grafite, utilizamos como padrão aquelas encontradas nos artigos de Draine & Lee (1984) e Weingartner & Draine (1999), conforme descrito no Capítulo 3.

Um exemplo de eficiência de absorção dada por Draine pode ser visto na Figura 4.13. Nessa figura, nós mostramos o comportamento da eficiência de absorção para quatro grãos de grafite com raios diversos, indo desde 10 Å até 80 Å.



Figura 4.13 Eficiência de absorção do grafite para alguns raios de grão, elaborado com base no artigo de Draine & Lee 1984.

Os valores para eficiência de absorção dos PAHs podem ser vistos na seção 4.2.3 deste capítulo. Para a capacidade térmica do grafite, nós utilizamos a capacidade térmica dada por Markelov, Volga & Buchnev (1973), válida para a faixa de temperaturas entre 10-2000 K. Esta relação foi retirada do artigo de Dwek et al. (1997) e é expressa por:

$$C_{grf}(T) = 2.2 \times 10^7 \sum_{n=3}^{5} a_n T^n / \sum_{n=0}^{5} b_n T^n \quad [erg \ K^{-1} cm^{-3}], \tag{4.42}$$

onde os coeficientes são dados por:  $\{a_3, a_4, a_5\} = \{0.10273, 4.4354 \times 10^{-2}, 2.2124 \times 10^{-4}\}, e \{b_0, b_1, b_2, b_3, b_4, b_5\} = \{1.0003 \times 10^{-12}, 3.6909 \times 10^4, 1129.71, 30.4420, 1.2888 \times 10^{-2}, 1.0 \times 10^{-4}\}.$ 

Para calcular a capacidade térmica dos PAH's, seguimos o artigo de Dwek et al (1997). Em temperaturas superiores a 300 K, a capacidade térmica dos PAH's pode ser calculada usando o método aditivo de grupo, descrito por Stein, Golden & Benson (1997). Neste método um PAH é decomposto em quatro grupos carbônicos caracterizados pela composição dos vizinhos mais próximos. Vamos chamar estes grupos de  $A,B,C \in D$ .

O número de membros de cada grupo em um dado PAH não é independente: algumas relações simples podem ser derivadas envolvendo  $N_c \equiv N_A + N_B + N_C + N_D$ , o número total de carbonos em um PAH, e o número de membros de cada grupo. Para um PAH totalmente hidrogenado, o número de átomos de hidrogênio é dado por  $N_H = \sqrt{6N_c}$  (ver Omont 1986), e  $N_A = N_H$  pela definição de grupo.

A capacidade térmica de um dado PAH à temperatura T,  $C_{PAH}(T)$ , é então calculada pela técnica aditiva de grupos através da soma:

$$C_{PAH}(T) = f_H N_A C_A(T) + N_B C_B(T) + N_C C_C(T) + N_D C_D(T)$$
(4.43)

onde os N's representam o número de membros do grupo no PAH e  $f_H$  representa o grau de hidrogenação do PAH ( $f_H$  é igual a zero para um PAH totalmente 'desidrogenado'). Seguindo Stein, Golden & Benson (1997), nós admitimos que  $C_C$  é igual a  $C_B$ , e substituimos os valores dos N's na equação para  $C_{PAH}(T)$ , dada para um PAH completamente hidrogenado ( $f_H = 1$ ):

$$C_{PAH}(T) = N_c \left[ \sqrt{\frac{6}{N_c}} (C_A + C_B - 2C_D) + \frac{6}{N_c} (C_D - C_B) + C_D \right]$$
(4.44)

Para valores suficientemente grandes de  $N_c$ , a capacidade térmica se iguala ao limite do grafite.

A capacidade térmica dos vários grupos na faixa de temperaturas entre 300 e 3000 K é dada por Stein (1978) e Stein & Fahr (1985). Aos valores apresentados por Stein & Fahr (uma tabela com onze valores para cada um dos grupos), nós ajustamos a estes valores um polinômio de grau 6.

Fazendo-se algumas substituições em alguns passos intermediários, nós teremos a capacidade térmica para os PAH's como uma soma de polinômios de grau 6, a qual pode ser escrita da seguinte maneira:

$$C_{PAH}(T) = N_H \sum_{n=0}^{6} a_n T^n + N_c \sum_{n=0}^{6} b_n T^n + \sum_{n=0}^{6} c_n T^n \qquad [J \ mole^{-1} \ K^{-1}], \qquad (4.45)$$

onde os coeficientes são dados por

 $\{a_{0-6}\} = \{27.8408, -0.11373, 2.2903 \times 10^{-4}, -2.02263 \times 10^{-7}, 9.27398 \times 10^{-11}, -2.15391 \times 10^{-14}, 2.00033 \times 10^{-18}\}$  $\{b_{0-6}\} = \{-18.64024, 0.1362, -1.92486 \times 10^{-4}, 1.47558 \times 10^{-7}, -6.30645 \times 10^{-11}, 1.40855 \times 10^{-14}, -1.27792 \times 10^{-18}\}$
$\{c_{0-6}\} = \{-115.142, \ 0.50166, \ -8.67177 \times 10^{-4}, \ 7.35562 \times 10^{-7}, \ -3.32388 \times 10^{-10}, \ 7.66823 \times 10^{-14}, \ -7.09378 \times 10^{-18}\}.$ 

Desde que o método aditivo de grupos falha para temperaturas de PAH abaixo de ~ 300 K, seguimos a indicação de Dwek et al (1997); ajustamos o valor da capacidade térmica nesta faixa de temperatura com os valores do grafite, ponderado-os de modo a unir suavemente estes valores com aqueles calculados pelo método aditivo de grupos. Os valores resultantes (de acordo com Dwek et al) para a capacidade térmica em  $erg K^{-1}$ , válidos para T  $\leq$  2000 K, são dados por:

$$\log_{10}[C_{PAH}(T)/N_c] = -21.26 + 3.1688 \ \log_{10}T - 0.401894 \ (\log_{10}T)^2 \tag{4.46}$$

# 5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Antes de discutirmos os resultados de nosso trabalho, vamos rever os parâmetros dos nossos modelos.

O modelo fiducial consiste de uma galáxia elíptica de massa  $M_G = 2 \times 10^{11} \, \mathrm{M_{\odot}}$  e uma taxa de formação estelar (TFE) padrão ( $n_{SF} = 1/2$ ). O raio de *core* do halo foi escolhido com  $r_h = 3.5 \,\mathrm{kpc}$ , enquanto que o raio de maré da galáxia está situado em  $r_t = 98 \,\mathrm{kpc}$ . As condições iniciais supõem uma protogaláxia inteiramente gasosa ( $M_* = 0$ ), com temperatura de gás em  $T_0 = 10^4 \,\mathrm{K}$ , abundâncias químicas primordiais e distribuição de densidade idêntica àquela do halo escuro. Neste capítulo também empregamos um modelo com  $M_G = 10^{12} \,\mathrm{M_{\odot}}$  e  $r_h = 7 \,\mathrm{kpc}$ .

Utilizamos para testes dois modelos de produção de poeira. O Modelo B consiste de  $(\delta_{cond}^w(A), \delta_{cond}(A)^{II}, \delta_{cond}(A)^I) = (1.0, 0.8, 0.8)$  para o silício e (1.0, 0.5, 0.5) para o carbono. Já no Modelo A (o modelo fiducial de produção de poeira), os parâmetros adotados,  $(\delta_{cond}^w(A), \delta_{cond}(A)^{II}, \delta_{cond}(A)^I) = (1.0, 0.9, 0.9)$  para o silício e (1.0, 0.7, 0.7) para o carbono, representam uma produção muito eficiente de poeira. Os parâmetros  $\delta_{cond}^w(A), \delta_{cond}^I(A)$ , e  $\delta_{cond}^{II}(A)$  representam a eficiência de condensação do elemento A em ventos estelares, em supernovas de Tipo I e em supernovas de Tipo II, respectivamente. No presente trabalho utilizamos apenas o Modelo A de produção de poeira, pois é o mais eficiente.

Dividimos a poeira produzida em três tipos básicos: grandes grãos de silicatos e grafites, pequenos grãos de grafite e hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAH's).

Os silicatos em nosso modelo possuem massa molecular de 150 u.m.a. (o que corresponde à fórmula química  $Mg_{1.7}Fe_{0.3}SiO_4$ ) e densidade  $\rho_{sil} = 2.5g/cm^3$ . Para o grafite adotamos uma densidade  $\rho_{graf} = 2.26g/cm^3$ .

Há dois parâmetros que utilizaremos para definir os PAH's: o número de átomos de carbono

 $N_C$  e o número de átomos de hidrogêni<br/>o  $N_H$ . Um terceiro parâmetro é obtido a partir de  $N_C$ , o raio do PAH, o qual é calculado pela relação  $a_{PAH}(\text{\AA}) = 10\sqrt{N_c/120}$ .

Os valores de eficiência de absorção  $Q_{abs}(a, \lambda)$  e de espalhamento  $Q_{scat}(a, \lambda)$  para os silicatos e os grafites foram retirados dos artigos de Draine & Lee (1984) e Weingartner & Draine (1999). Para os PAH's, seguimos a nossa formulação, descrita no capítulo 4. Consideramos a absorção verdadeira e o espalhamento causados pelos grãos localizados no meio interestelar difuso e nas nuvens moleculares, quando estamos falando sobre a extinção que o campo de radiação sofre devido aos grãos de poeira.

Enquanto que nas nuvens moleculares os efeitos do espalhamento são considerados de um modo próprio, dentro de um cálculo de transferência radiativa em uma distribuição esférica, para o gás difuso adotamos um tratamento simplificado da transferência radiativa. Consideramos apenas efeitos sobre o componente primário da radiação, que consiste da luz estelar, principalmente no óptico-UV, das estrelas fora das nuvens moleculares e ignoramos a autoabsorção por poeira da radiação secundária reirradiada por poeira principalmente no IV. Os efeitos do espalhamento são aproximados por meio de uma profundidade óptica efetiva, dada pela média geométrica dos coeficientes de extinção total e de absorção  $\tau_{eff}^2 = \tau_a(\tau_a + \tau_s)$ . De fato, a opacidade relativamente baixa da poeira no IR, onde ocorre a reemissão por poeira, implica que, na maior parte dos casos, o MIE é transparente aos seus próprios fótons.

Para a distribuição de tamanho de grãos juntamente com o intervalo de raios considerados, nós adotamos:

- 1) Grandes Grãos de Silicato:  $n(a) \propto a^{-3.5}$ , com 100 Å < a <2500 Å.
- 2) Grandes Grãos de Grafite:  $n(a) \propto a^{-3.5}$ , com 100 Å < a < 2500 Å.
- 3) Pequenos Grãos de Grafite:  $n(a) \propto a^{-4}$ , com 10 Å < a < 100 Å.
- 4) **PAH's:**  $n(a) \equiv dn/dN_C \propto N_C^{-2.25}$ , com  $24 \le N_C \le 486$ .

Para os pequenos grãos de grafite, utilizamos apenas 5 grãos com os raios: 12.59 Å, 19.95 Å, 31.62 Å, 50.12 Å e 79.43 Å. Estes raios correspondem a cinco intervalos logaritmicamente espaçados entre 10 Å e 100 Å. Para estes grãos, consideramos um tratamento de flutuações de temperaturas.

Iremos considerar os oito PAH's pericondesados superaromáticos de nossa biblioteca, desde  $N_C = 24$  (o Coroneno) até  $N_C = 486$ . Também para os PAHs consideramos um tratamento de flutuações de temperaturas

Vamos considerar que todo o silício produzido pelo modelo será encerrado em grãos de silicatos. Do carbono disponível para formar os grãos, vamos considerar que 80% dele irá para a formação dos grandes grãos de grafite, 10% irá para a formação de pequenos grãos de grafite e os 10% restantes irão para a formação dos PAH's.

Além da quantidade de poeira, da sua repartição em silicatos, grafites e PAH's, devemos também especificar a distribuição espacial de poeira para determinarmos adequadamente a curva de extinção da galáxia e a distribuição espectral da energia emergente. Isto foi discutido no capítulo 3, na seção 3.8, a qual versava sobre os modelos de distribuição de poeira.

A seguir, vamos mostrar alguns resultados que obtivemos com nosso modelo.

## 5.1. A EVOLUÇÃO DE GALÁXIAS ELÍPTICAS

Nesta seção, iremos avaliar os resultados do modelo quimiodinâmico convoluído com o modelo auto-consistente de absorção e re-emissão de radiação por poeira, com a inclusão de nuvens moleculares e espalhamento pelos grãos.

A Figura 5.1 apresenta a SED (*Spectral Energy Distribution*) da galáxia fiducial de nosso modelo, com idade de 0.3 Ganos, e em duas situações distintas. No painel da direita nós aplicamos o tratamento de flutuações de temperatura para os pequenos grãos de grafite e os PAHs, enquanto que no painel da esquerda este tratamento não foi feito.

Vamos agora analisar as características importantes que podem ser observadas nos dois painéis:

#### a) Painel da Esquerda - SEM Flutuações de Temperatura:

- Neste painel podemos constatar a ausência do *feature* em 3.3 μm, o qual necessita de temperaturas altas para os PAHs.
- A contribuição dos PAHs para a SED no infravermelho próximo é inexistente, pois sem flutuações de temperatura eles não alcançam temperaturas muito altas.
- Para os grãos imersos no MIE, a emissão no infravermelho entre 7 μm e ~ 30 μm é dominada pelos PAHs, que em equilíbrio com o campo de radiação estelar devem alcançar temperaturas superiores aos dos demais grãos.

#### a) Painel da Direita - COM Flutuações de Temperatura:

- Podemos constatar a presença do *feature* em 3.3 μm, devido às flutuações de temperatura dos PAHs.
- Forte contribuição dos PAHs para o infravermelho próximo.

• A emissão devido aos pequenos grãos de grafite em temperaturas transientes domina a emissão dos grãos entre a região que vai de 17  $\mu$ m até 30  $\mu$ m.



**Figura 5.1** SED da galáxia fiducial desde 3000 Å até 1 mm. No painel da esquerda não utilizamos flutuações de temperatura (note a ausência da linha de 3.3  $\mu$ m); no painel da direita há flutuações de temperatura para os pequenos grãos de grafite e os PAHs (note como suas linhas são mais intensas). A linha tracejada longa indica a contribuição das Nuvens Moleculares para a SED; a linha pontilhada representa a contribuição dos grandes grãos - grafites e silicatos com raio  $a > 100\mu$ m - presentes no meio interestelar (MIE); a linha tracejada curta representa os pequenos grãos de grafite no MIE, com flutuações térmicas e temperaturas em torno de poucas centenas de graus Kelvin; a linha fina representa os PAHs do MIE, com flutuações de temperatura, podendo alcançar transientemente 1500 K.

Podemos constatar que as flutuações de temperatura possuem um efeito dramático sobre a forma da SED. Sem sua inclusão nos cálculos, a linha de 3.3  $\mu$ m não apareceria. Também as flutuações de temperatura nos pequenos grãos de grafite possuem uma contribuição importante para o contínuo no infravermelho médio.

Mesmo com flutuações de temperatura, os *features* dos PAHs presentes na SED para  $\lambda \gtrsim$  12.7µm são produzidos preferencialmente nas Nuvens Moleculares. Para o painel da esquerda,

onde não ocorrem flutuações de temperatura, podemos dizer que os PAHs estão em maior número nas nuvens moleculares que no MIE, e também que alcançam maiores temperaturas de estado estacionário lá que no MIE.

Apesar de não sofrerem flutuações de temperatura (pois nas Nuvens Moleculares a densidade é muito alta), por estarem mais próximos da fonte de irradiação do que no MIE, os PAHs das nuvens moleculares alcançam temperaturas de até 500 K.

Os fatos das linhas dos PAHs para  $\lambda \gtrsim 12.7$ m serem produzidas preferencialmente em nuvens moleculares tornam estas linhas excelentes indicadores das condições físicas das nuvens moleculares, quando elas são detectadas. Particularmente, o *feature* em 16.4 µm parece ser mais intenso nos estágios iniciais das galáxias que em sua fase mais tardia, como veremos mais adiante.

Podemos concluir desta análise que um modelo elaborado sem flutuações de temperatura se apresenta como um modelo inconsistente. E que a linha em 3.3  $\mu$ m é o maior indicador deste fato.

A seguir, vamos analisar o impacto do fator  $t_{mc}$  (o tempo de confinamento da estrela dentro das Nuvens Moleculares) para a forma final da SED de nossas galáxias.

Na Figura 5.2, vemos a evolução temporal (entre 0.03 Gano e 1 Gano) da SED de nossa galáxia fiducial com o modelo fiducial de nuvens moleculares. Os parâmetros  $M_{mc}$  (a massa das Nuvens Moleculares),  $r_{mc}$  (o raio das Nuvens Moleculares), e  $t_{mc}$  (o tempo de confinamento da estrela dentro das Nuvens Moleculares) assumem, para o modelo fiducial de nuvens, os valores de  $M_{mc} = 10^6 \,\mathrm{M}_{\odot}, r_{mc} = 15 \,\mathrm{pc}$  e  $t_{mc} = 50 \,\mathrm{Manos}$ .

O que podemos observar na Figura 5.2 é que a intensidade da SED vai aumentando com o passar do tempo (as estrelas vão abandonando as nuvens moleculares) e seu formato na região do óptico/ultravioleta vai se alterando (se achatando).

O platô no visível/infravermelho próximo que se forma completamente em tempos tardios (t = 1 Gano) é devido ao aparecimento de gigantes vermelhas na população estelar.

A SED apresenta, em todas as idades, um mínimo no infravermelho próximo/médio (observe como o mínimo vai caminhando de  $\sim 2\mu$ m até cerca de  $\sim 5\mu$ m, de 0.03 Gano até 1 Gano). Esta região espectral é caracterizada pela emissão em bandas estreitas devidas aos PAH's.

No painel com 0.03 Gano é interessante notar um pequeno "bump" que se forma no infravermelh próximo e que depois aparentemente desaparece. Vamos voltar a falar sobre ele mais adiante.

Na Figura 5.3 apresentamos a evolução temporal (entre 0.03 Gano e 1 Gano) da SED de nossa galáxia fiducial com o modelo de nuvens moleculares alterado. Para testar o impacto de  $t_{mc}$  (o



**Figura 5.2** Evolução do campo de radiação da galáxia para o modelo fiducial de Nuvens Moleculares, onde:  $M_{mc}$  é a massa das Nuvens Moleculares,  $r_{mc}$  é o raio das Nuvens Moleculares, e  $t_{mc}$  é o tempo de confinamento da estrela dentro das Nuvens Moleculares. Para o modelo fiducial de Nuvens Moleculares, temos que  $M_{mc} = 10^6 \, M_{\odot}, r_{mc} = 15 \, \text{pc}, t_{mc} = 50 \, \text{Manos}.$  Observe a diminuição do 'feature" em 3.3  $\mu$ m com o passar do tempo.



**Figura 5.3** Evolução do campo de radiação da galáxia para o modelo de Nuvens Moleculares, onde:  $M_{mc} = 10^6 \,\mathrm{M_{\odot}}, r_{mc} = 15 \,\mathrm{pc}, t_{mc} = 25 \,\mathrm{Manos}$ . A linha tracejada indica a SED da galáxia com o modelo fiducial de Nuvens Moleculares ( $M_{mc} = 10^6 \,\mathrm{M_{\odot}}, r_{mc} = 15 \,\mathrm{pc} \,\mathrm{e} \,t_{mc} = 50 \,\mathrm{Manos}$ ). Observe a diminuição do 'feature" em 3.3  $\mu \mathrm{m}$  com o passar do tempo.

tempo de confinamentos das estrelas nas nuvens moleculares) em nossos modelos, reduzimos seu valor para  $t_{mc} = 25$  Manos (lembrando que o valor fiducial é de  $t_{mc} = 50$  Manos).

O que podemos observar é que até 0.3 Gano a emissão no ultravioleta/óptico/infravermelho próximo fica bem superior ao do modelo fiducial. Isto era de se esperar, pois as estrelas deixam as nuvens moleculares mais cedo, e com isso sua emissão é menos atenuada. Por outro lado, e também como conseqüência deste abandono "prematuro" das estrelas nas nuvens moleculares, a emissão no infravermelho distante/submilimétrico também é bastante reduzida.

Um fato interessante é que para o modelo com  $t_{mc} = 25$ , as linhas dos PAHs entre 0.1-0.3 Gano ficam ligeiramente mais intensas, especialmente entre 3  $\mu$ m e 10  $\mu$ m, o que aponta para uma maior contribuição dos PAHs do meio interestelar para a SED.

Sobre o "bump" no infravermelho próximo que aparece no modelo com 0.03 Gano, conforme comentamos anteriormente, ele parece inexistir no modelo com  $t_{mc} = 25$ .

Agora vamos alterar ainda mais o parâmetro  $t_{mc}$  e ver seu impacto sobre nossos modelos. O resultado pode se visto na Figura 5.4, onde apresentamos a evolução temporal (entre 0.03 Gano e 1 Gano) da SED de nossa galáxia fiducial com o modelo de nuvens moleculares alterado, com os valores dos demais parâmetros mantidos constantes (e iguais ao valor fiducial) e  $t_{mc} = 15$ Manos.

Com relação ao modelo fiducial, podemos constatar que o comportamento para o modelo com  $t_{mc} = 15$  é muito parecido com o do modelo com  $t_{mc} = 25$ , com a diferença que a emissão no ultravioleta/óptico/infravermelho ficou mais intensa, com a respectiva diminuição da emissão no infravermelho distante/submilimétrico, pelos motivos que já comentamos anteriormente. Também a emissão dos PAHs aumentou um pouco, mewsmo com relação ao modelo com  $t_{mc} = 25$ , o que nos faz concluir que este aumento de emissão se deve aos PAHs do meio interestelar. Com certeza o campo de radiação interestelar médio ficou muito mais intenso, e como conseqüência os PAHs alcançam temperaturas mais altas.

Um fato curioso é que no modelo com t = 0.03 Ganos há uma inversão entre os modelo fiducial e aquele com  $t_{mc} = 15$  Manos na intensidade da emissão em  $\lambda \gtrsim 200 \mu$ m: o modelo fiducial emite menos nesta faixa do espectro que o modelo com  $t_{mc} = 15$ . Isso pode significar que a temperatura média nas nuvens moleculares diminui (na Figura 5.4 podemos ver que elas possuem a maior contribuição para a emissão nesta região do espectro), portanto há mais grãos frios contribuindo para esta região.

Sobre o "bump" no infravermelho próximo que aparece no modelo com 0.03 Gano, conforme comentamos anteriormente, também neste modelo ele parece inexistir. Isso pode significar que



**Figura 5.4** Evolução do campo de radiação da galáxia para o modelo de Nuvens Moleculares, onde:  $M_{mc} = 10^6 \,\mathrm{M_{\odot}}, r_{mc} = 15 \,\mathrm{pc}, t_{mc} = 15 \,\mathrm{Manos}$ . A linha tracejada indica a SED da galáxia com o modelo fiducial de Nuvens Moleculares ( $M_{mc} = 10^6 \,\mathrm{M_{\odot}}, r_{mc} = 15 \,\mathrm{pc} \,\mathrm{e} \,t_{mc} = 50 \,\mathrm{Manos}$ ). Observe a diminuição do feature em 3.3  $\mu$ m com o passar do tempo.

ele possui uma origem nas nuvens moleculares, e muito provavelmente devido aos PAHs e/ou aos pequenos grãos de grafite.

Vamos analisar agora qual o impacto do parâmetro  $r_{mc}$  (o raio das nuvens moleculares) sobre os nossos modelos, na região do espectro que vai de  $4\mu m \leq \lambda \leq 24\mu m$ . Isto pode ser visto na Figura 5.5, na qual mostramos os resultados para o modelo fiducial e os resultados para um modelo com  $r_{mc} = 10$  pc.

Como a massa das nuvens moleculares não é alterada, com a diminuição do raio da nuvem temos que há um aumento da densidade. Como a densidade colunar de hidrogênio  $(N_H)$ segue a relação  $N_H \propto M_{mc}/r_{mc}^3$ , há um aumento em  $N_H$  e conseqüêntemente um aumento na profundidade óptica.

O modelo com  $r_{mc} = 10$  pc possui uma profundidade óptica bem maior. Para raios de nossa galáxia fiducial entre 0.5kpc e 3kpc, e para uma idade de 0.3Gano, a profundidade óptica é grande mesmo no infravermelho. Encontramos os valores  $A_V = 60$ ,  $A_{1500} = 303$  e  $A_K = 7.8$ (para o modelo com  $r_{mc} = 15$ pc, os valores são  $A_V = 28$ ,  $A_{1500} = 136$  e  $A_K = 3.5$ ).

Como a lei de extinção depende da metalicidade, no sentido de que, com mais metais disponíveis, mais grãos são produzidos para tempos mais tardios, a extinção aumenta ainda mais. Assim, em 1Gano temos  $A_V = 94$ ,  $A_{1500} = 435$  e  $A_K = 12$  para as nuvens com  $r_{mc} = 10$ pc, e  $A_V = 44$ ,  $A_{1500} = 195$  e  $A_K = 5.9$  para as nuvens com  $r_{mc} = 15$ pc.

Para as três idades podemos observar claramente a banda de absorção do silício em 9.7  $\mu$ m. Também em 18  $\mu$ m podemos perceber um outro *feature* de absorção do silício, embora ele seja mais fraco.que o de 9.7  $\mu$ m.

As linhas de 6.2  $\mu$ m, 7.7  $\mu$ m e 8.6  $\mu$ m são produzidas no meio interestelar (devido principalmente às flutuações de temperatura), e por isso praticamente não são afetadas pela diminuição de  $r_{mc}$ . Já as linhas de 11.3  $\mu$ m, 11.9  $\mu$ m e 12.7  $\mu$ m são produzidas tanto no meio interestelar quanto nas nuvens moleculares, e são afetadas. Já as linhas de 16.4  $\mu$ m em diante são produzidas principalmente nas nuvens moleculares (ver Figura 5.4), e elas são forten]mente afetadas.

A diminuição na Densidade de Fluxo para o modelo de nuvens moleculares com  $r_{mc} = 10$  pc pode ser explicada se considerarmos que ocorre uma auto-absorção dentro das nuvens, por causa do grande aumento na profundidade óptica, como dito anteriormente. Note-se que a diminuição é maior justamente para a região onde os *features* dos PAHs são produzidos principalmente dentro das nuvens moleculares, ou seja, na região com  $\lambda \gtrsim 16\mu$ m. E esta diferença se acentua com o envelhecimento da galáxia, ou seja, seu enriquecimento em metais.



**Figura 5.5** Influência de  $r_{mc}$  (o raio das nuvens moleculares) sobre a evolução temporal da Densidade de Fluxo  $(S_{\nu})$  na fase "Early" de nossa galáxia fiducial, na região do espectro entre 4  $\mu$ m e 24  $\mu$ m. A linha contínua indica o nosso modelo fiducial de Nuvens Moleculares ( $M_{mc} = 10^6$  $M_{\odot}$ ,  $r_{mc} = 15$  pc,  $t_{mc} = 50$  Manos), enquanto que a linha tracejada representa o modelo com  $r_{mc} = 10$  pc, onde as nuvens moleculares são mais densas. O modelo tracejado alcança intensidades menores devido ao efeito de alto-absorção que ocorre dentro das próprias nuvens, por causa dos PAHs.

### 5.2. RADIOGALÁXIAS COM EMISSÃO SUBMILIMÉTRICA

Nesta seção consideramos os resultados de nosso modelo para Radiogaláxias (Mauro 2001).

Os resultados do primeiro *survey* sistemático no submilimétrico de radiogaláxias a altos redshifts (1 < z < 5) foi apresentado por Archibald et al (2000). Esta amostragem de objetos representa uma oportunidade para se determinar a evolução de galáxias elípticas massivas a altos redshifts.

De fato, Friaça & Terlevich (1999) forneceram fortes indicações de que as LBGs seriam as contrapartes de esferóides no Universo local. Seria possível que as galáxias elípticas massivas, com  $\sigma > 250 \text{ km}s^{-1}$  (como é o caso das radiogaláxias), seriam vistas como LBGs a altos redshifts?

Contudo, este estudo das LBGs revelou que estes objetos a  $z \sim 3$  seriam as contrapartes jovens dos esferóides com  $0.1L^* < L < 3L^*$ hoje em dia. Por outro lado, a observação de radiogaláxias vermelhas (e portanto velhas) a redshifts  $\sim 1.5$  (Dunlop et al 1996; Spinrad et al 1997; Dunlop 1998) e o estudo com o modelo quimiodinâmico das galáxias vermelhas a altos redshifts (Jimenez et al 1999) revela que ao menos algumas elípticas mais brilhantes  $(M_B < -22)$  devem estar sendo formadas a  $z \sim 5$  ou a maiores redshifts. Isto nos leva a perguntar onde estariam as contrapartes a altos redshifts das elípticas brilhantes de hoje em dia. É possível que as elípticas jovens mais brilhantes constituiriam a seqüência a altas densidades colunares de poeira das LBGs. Elas seriam "massive dusty starbursts", relativamente fracos em "surveys" no óptico. De fato, um esferóide em formação deve se assemelhar a um "dusty starburst" (DSB) similar aos observados pelo IRAS a baixos redshifts. Há alguns DSBs com luminosidades bolométricas de até  $10^{13}$  $L_{\odot}$ . A baixos redshifts, tais DSBs ultra-luminosos são frequentemente perdidos em buscas no óptico, e foi preciso que a era IRAS fosse inaugurada para que esta população de objetos fosse reconhecida. Esta população provavelmente estaria sendo perdida nas buscas a altos redshifts conduzidas do visível e no infravermelho próximo. De fato, buscas muito profundas no submm conduzidas com o SCUBA sugerem que as amostras selecionadas opticamente podem estar perdendo uma população considerável de DSBs a altos redshifts (Smail et al 1997; Ivison et al 1998; Blain et al 1999). Dentro do cenário em que os esferóides são formados a altos redshifts, o Universo a altos redshifts deve conter uma população de análogos super-luminosos dos DSBs locais, visto que a rápida escala para enriquecimento em metais esperada para a formação de uma galáxia elíptica e da grande fração de gás implicar um grande obscurecimento por poeira. Neste caso, o melhor método para se descobrir esferóides em formação a altos redshifts é detectar a sua emissão de poeira aquecida por estrelas jovens, em  $60-100 \ \mu m$  "redshifted" para o sub-mm.

É interessante observar que, dentro do modelo quimiodinâmico, uma galáxia de alta massa (e.g.  $M_G \sim 10^{12} \,\mathrm{M_{\odot}}$ ) não parece apresentar extinções por poeira muito maiores do que aquelas do modelo fiducial ( $M_G \sim 2 \times 10^{11} \,\mathrm{M_{\odot}}$ ). Como podemos ver na Figura 5.9 (seção 5.3, página 142), embora o modelo com  $10^{12} \,\mathrm{M_{\odot}}$  tenda a apresentar  $A_{1500}$  maior que o do modelo fiducial ( $A_{1500} > 1$  para 0.7 Gano da vida do modelo com  $10^{12} \,\mathrm{M_{\odot}}$ , enquanto o modelo fiducial apresenta este valor de  $A_{1500}$  durante apenas 0.5 Gano), a diferença não é muito notável.

**Tabela 5.1** Magnitude, fluxo e cores óptico / submilimétrico de radiogaláxias amostradas da literatura em ordem crescente de redshift. A primeira coluna mostra a identificação da fonte, a segunda coluna o redshift. A terceira coluna ( $K_{linha}$ ) nos dá a magnitude na banda K corrigida por contaminação devido a linhas de emissão. A quarta coluna nos dá a densidade de fluxo em 850  $\mu m$ , enquanto que a última coluna nos dá as cores óptico / submilimétrico.

Fonte	z	Magnitude	$S_{\nu}(850\mu m)$	$L_{850\mu m}$
		$K_{linha}$	(mJy)	$\overline{L_{2.2\mu m/(1+z)}}$
13C368	1.132	17.34	$4.08 \pm 1.08$	$3.07 \pm 1.03$
4C13.66	1.450	18.20	$3.53\pm0.96$	$2.97 \pm 1.48$
6C0905 + 39	1.883	18.48	$3.62\pm0.89$	$3.01\pm0.88$
4C48.48	2.343	17.69	$5.05 \pm 1.05$	$1.21\pm0.33$
MG1016+058	2.765	19.3	$2.40\pm0.92$	$1.82\pm0.87$
4C24.28	2.879	18.7	$2.59 \pm 1.16$	$0.97\pm0.51$
4C28.58	2.891	19.0	$3.93\pm0.95$	$2.10\pm0.60$
6C1232 + 39	3.220	18.19	$3.86\pm0.72$	$0.78\pm0.19$
MG2141+192	3.592	19.37	$4.61\pm0.96$	$2.17\pm0.56$
6C0032 + 412	3.660	20.15	$2.64 \pm 1.20$	$2.24 \pm 1.17$
4C60.07	3.788	19.3	$17.11 \pm 1.33$	$6.78 \pm 1.15$
4C41.17	3.800	19.2	$12.10\pm0.88$	$4.34\pm0.72$
8C1435 + 635	4.250	19.64	$7.77\pm0.76$	$3.32\pm0.59$
6C0140 + 326	4.410	20.1	$3.33 \pm 1.49$	$2.01\pm0.95$

A Tabela 5.1 nos mostra a magnitude, o fluxo e as cores óptico / submilimétrico de algumas radiogaláxias amostradas da literatura, tendo como base os objetos da amostra de Archibald et al (2000).

Se considerarmos a amostra de Archibald et al (2000), o presente modelo é particularmente apto a reproduzir as cores submm - IV ( $[L_{850\mu m}/L_{2.2\mu m/(1+z)}]$  para as suas radiogaláxias com z >2 na faixa entre 0.78 ± 0.19 e 4.34 ± 0.72 (excluindo 4C6007 a z=3.788 e  $[L_{850\mu m}/L_{2.2\mu m/(1+z)}]$ = 6.78 ± 1.15). De fato, o modelo com  $M_G = 10^{12}$  M<sub>☉</sub> e caso B de produção de poeira prevê  $[L_{850\mu m}/L_{2.2\mu m/(1+z)}]$  entre 0.80 e 3.50, desde que o redshift de formação da galáxia seja elevado  $(z_{GF} \ge 5)$ . Como no caso das LBGs, a radiogaláxia dusty deve ser relativamente madura, com idade entre 0.2e2 Ganos.

Esta cor óptica / sub-milimétrica tem duas importantes características: a) é independente da cosmologia; b) as incertezas na correção-k para a banda K é evitada ao se estimar a luminosidade no comprimento de onda de repouso  $2.2\mu m/(1 + z)$ . Assim, o denominador de  $[L_{850\mu m}/L_{2.2\mu m/(1+z)}]$  mede a luminosidade de partes mais azuis do espectro para maiores redshifts.

As Figuras 5.6, 5.7 e 5.8 mostram a evolução da cor óptica / sub-milimétrica  $[L_{850\mu m}/L_{2.2\mu m/(1+z)}]$ prevista para o modelo fiducial e pelo modelo massivo com  $10^{12} M_{\odot}$  (linhas pontilhada e contínua, respectivamente) para os redshifts das galáxias da Tabela 5.1 com  $z \gtrsim 2$ .



Figura 5.6 Evolução de  $[L_{850\mu m}/L_{2.2\mu m/(1+z)}]$ .

O modelo massivo reproduz a cor óptica / sub-milimétrica de quase a totalidade das radiogaláxias-fontes sub-milimétricas. Alguns objetos (6C0905+39) são reproduzidos para idades do modelo se estendendo sobre uma ampla faixa. Outros (4C48.28), quando o modelo está em fases avançadas de sua evolução (t > 1 - 2 Ganos) ou (com menor probabilidade) quando é muito jovem (t < 0.03 - 0.1 Gano).



Figura 5.7 Evolução de  $[L_{850\mu m}/L_{2.2\mu m/(1+z)}]$ .

Deste modo, o sucesso do nosso modelo em reproduzir as cores óptica / sub-milimétrica sugere que as radiogaláxias-fontes submilimétricas são elípticas com poeira e idades  $\lesssim 3$  Ganos.

Um único objeto é discrepante. Trata-se de 4C60.07, que apresenta  $[L_{850\mu m}/L_{2.2\mu m/(1+z)}] =$ 



**Figura 5.8** Evolução de  $[L_{850\mu m}/L_{2.2\mu m/(1+z)}]$ .

 $6.78 \pm 1.15$ . Pode se tratar de uma elíptica jovem ainda mais massiva ou que nosso modelo de poeira (distribuição dos grãos, pescrições para a formação de poeira) tenham que ser modificados. Por outro lado, temos que estar atentos aos grandes erros envolvidos nas medidas no submilimétrico e à possibilidade, nunca inteiramente afastada, de más-identificações.

#### 5.3. LYMAN BREAK GALAXIES

Uma das mais importantes janelas ópticas para o Universo a altos redshifts provém da descoberta de galáxias com intensa formação estelar utilizando a técnica da quebra do contínuo de Lyman(Steidel, Pettini & Hamilton 1995). Os fundamentos do método são os seguintes: a SED de galáxias com formação estelar intensa é bastante plana a comprimentos de onda de 912 Å (o limite do contínuo de Lyman) ao vermelho. A opacidade do meio intergalático a altos redshifts (devido à densidade de coluna do HI presente na Lyman alpha Forest e em Lyman Limits Systems) provoca uma redução drástica (a quebra de Lyman = Lyman Break) a comprimentos de onda mais ao azul de 912 Å. Deste modo Steidel et al (1995) conceberam uma técnica para detectar galáxias com formação estelar a redshifts por volta de 3. Eles projetaram um conjunto de filtros  $U_n$ ,  $G \in R$  de modo que, para uma galáxia a um redshift  $\approx 3$ ,  $U_n$  caísse ao azul do limite de Lyman (912 Å no referencial de repouso da galáxia) e G imediatamente ao vermelho do limite de Lyman. Já  $G \in R$  cairiam no ultravioleta 'ladeando' 1500 Å antes de ser redshiftado.

Deste modo, um alto valor de  $U_n - G$  (assinalando a quebra de Lyman) e um pequeno G - R(assinalando um espectro plano no ultravioleta, característico de *starburst*) permitiria selecionar candidatos a galáxias com formação estelar intensa a altos redshifts, as assim chamadas *Lyman Break Galaxies* (LBGs). O critério de cores mais empregado, o chamado critério "marginal", seleciona como LBG's os objetos com  $G-R \leq 1.24$  e  $U_n - G \geq G-R+1.0$ , critérios freqüentemente complementados por  $R \leq 25.5$ , de modo a garantir a completeza da amostra, e  $U_n - G \geq 1.6$ , de modo a maximizar o número de galáxias na faixa de redshifts  $2.7 \leq z \leq 3.4$  (Steidel et al 1998). O chamado critério "robusto" utiliza  $U_n - G \geq G - R + 1.5$ .

A confirmação espectroscópica de que as LBGs do trabalho original de Steidel al (1995) eram de fato *starbursts* a  $z \sim 3$  foi apresentada por Steidel et al (1996). Atualmente, o número de LBG's supera a marca de 1000 objetos.

As LBGs já foram estudadas com o auxílio do modelo quimiodinâmico por Friaça & Terlevich (1999). Verificou-se que a LBG DSF2237+116 C2 é bem descrita pelo modelo fiducial de Friaça & Terlevich (1998). Em particular, confirmou-se as estimativas de Pettini et all (1998) de que

as LBGs estariam a apenas moderadas extinções por poeira no UV. Além do mais, Friaça & Terlevich (1999) sugeriram que as LBGs não são objetos demasiadamente jovens, tendo mais provavelmente idades entre 0.2 e 2 Ganos.



**Figura 5.9** Evolução da extinção a 1500 Å para o modelo fiducial de produção de poeira, com formação estelar continuada até 1 Gano. As linhas finas horizontais denotam os valores de  $A_{1500}$  deduzidas por Pettini et al (1998) para a LBG DSF2237+116 C2, supondo a lei de atenuação de Calzetti (1998) - linha fina superior - e da Pequena Nuvem de Magalhães - linha fina inferior. A linha pontilhada indica a galáxia fiducial ( $M_G = 2 \times 10^{11} \,\mathrm{M_{\odot}}$ ), enquanto que a linha contínua representa uma galáxia com  $M_G = 1 \times 10^{12} \,\mathrm{M_{\odot}}$ .

O presente modelo auto-consistente utilizando poeira novamente confirma estas previsões e fornece valores para  $A_{1500}$ , a extinção em 1500 Å (Figura 5.9). O modelo fiducial com caso B de produção de poeira fornece  $A_{1500} = 0.47$ , 1.12 e 0.62 para as idades 0.1, 0.3 e 1 Gano, respectivamente.

Para a DSF2237+116 C2, Pettini et al (1998) encontraram, supondo formação estelar continuada por  $10^9$  anos,  $A_{1500} = 0.75$  e 1.58 supondo leis de atenuação da Pequena Nuvem de Magalhães (PNM) e de Calzetti (1997), respectivamente.

Os nossos resultados fornecem uma formação estelar continuada por um período mais longo, tipicamente  $\sim 1$  Gano. Se estivermos próximos ao máximo de produção de poeira (t = 0.7



Gano), obtemos uma lei de extinção intermediária entre a da PNM e a de Calzetti.

**Figura 5.10** Evolução da cor G-R para o modelo fiducial situado a diversos redshifts. A linha fina horizontal assinala o limite  $G-R \leq 1.2$  para o critério de seleção por cor de LBG's. A linha pontilhada se refere ao redshift da LBG DSF2237+116 C2, bem ajustada pelo modelo fiducial (Friaça & Terlevich 1999). Esta LBG possui G-R = 1.13.

O modelo fiducial prevê uma extinção considerável  $(A_{1500} \ge 1 \text{ mag})$  durante durante boa parte da evolução da galáxia ((~ 0.5 Gano). Contudo esta extinção é moderada (1.5 mag) e, além disso, são excluídas identificações das LBG's com *starbursts* muito jovens (idade ~ 10<sup>7</sup> anos). No caso de DSF2237+116 C2, para formação estelar continuada durante 10<sup>7</sup> anos,  $A_{1500} = 1.14$  e 2.44, supondo respectivamente leis de atenuação da Pequena Nuvem de Magalhães e de Calzetti (Pettini et al 1998). Também devemos lembrar que um *starburst* tão jovem seria inconsistente com uma extinção tão alta, pois não haveria tempo para que a poeira tivesse se formado.

A Figura 5.10 mostra a evolução da cor G - R para o modelo fiducial. O critério de cor para seleção de LBG's,  $G - R \leq 1.2$ , é satisfeito durante o primeiro Gano pelo modelo fiducial sempre que ele se encontrar na faixa de redshifts 2.5 < z < 3.5 concentrando as LBG's descobertas pelos filtros  $U_n$  G R. Mesmo se o modelo fiducial estivesse a z = 3.7, ele seria selecionado como LBG sobre uma porção considerável de sua evolução. É interessante que as cor do modelo fiducial reproduz G - R = 1.13 de DSF2237+116 C2 (a z = 3.317) em t = 1.51 Gano, quando  $A_{1500} = 0.04$ . Neste caso, a cor relativamente vermelha desta LBG seria devido a uma população estelar relativamente velha ( $t \sim 1.5$  Ganos) e não devido á presença de poeira. Isto sugere que, entre as LBG's, mesmo as mais vermelhas, haja objetos não só com moderada extinção por poeira, como também com praticamente nenhuma extinção por poeira.

Deste modo, as LBG's não tenderiam a ser fontes submilimétricas particularmente intensas. De fato, há poucas LBG's detectadas no submilimétrico com o SCUBA, sendo a mais notável destas West MMD11 (Chapman et al 2000).

### 5.4. GALÁXIAS ULIRGs

Agora, vamos concentrar nossa atenção em galáxias ULIRGs. De acordo com Goldader et al. (2002), esses objetos formam uma classe significativa dos objetos analisados no IRAS all-sky survey. A luminosidade bolométrica dos ULIRGs, as galáxias com luminosidades infravermelhas mais intensas, são similares àquelas dos quasares selecionados opticamente. Um dos cenários possíveis é o de que os ULIRgs representam um estágio no "merger" de duas galáxias espirais ricas em gás. Durante o "merger", o gás molecular é direcionado para o núcleo, onde ele serve de combustível para um enorme surto de formação estelar e, talvez, atividade de AGN também. A poeira absorve e re-irradia a luz de estrelas jovens e/ou da AGN. E para complicar nossa compreensão do fenômeno, a maior parte da atividade energética acontece na parte interna da galáxia, em umas poucas centenas de parsecs, onde o pequeno tamanho angular e o meio interestelar(ISM) quase que completamente opaco evitam uma visão de eventos que ocorrem no núcleo.

Como representantes das ULIRGs, vamos trabalhar com Arp 220. Ela é considerada o arquétipo de galáxias infravermelhas ultraluminosas. Ela muito provavelmente é o resultado de um "merger" recente entre duas galáxias ricas em gás.

Em nosso modelo para Arp 220, utilizamos o modelo quimiodinâmico para uma galáxia com  $M_G = 2 \times 10^{11} \,\mathrm{M_{\odot}}$ . A massa atual para essa galáxia é  $M_G = 2.3 \times 10^{11} \,\mathrm{M_{\odot}}$ , comparável à massa de Arp 220. Com respeito às nuvens moleculares, em nossos calculos temos o valor para  $M_{mc}$  que é fixo em todas nossas simulações,  $M_{mc} = 10^6 \,\mathrm{M_{\odot}}$ . Adotamos o valor fiducial para  $t_{mc}$ ,  $t_{mc} = 50 \,\mathrm{Manos.}$  e  $r_{mc} = 15 \,\mathrm{pc.}$  Além disso, como em todas nossas simulações, adotamos  $\eta_{yo} = 1 \,\mathrm{e} \,T_{sub} = 500 \,\mathrm{K.}$ 

Nossos ajustes para esse objeto podem ser vistos na Figura 5.11, onde utilizamos duas de-



pendências em  $\lambda$  para a eficiência de absorção dos grandes grãos, para a região do espectro  $\lambda > 100 \mu m$ .

**Figura 5.11** As SED's da galáxia de nosso modelo fiducial ajustado aos dados observacionais encontrados na literatura para Arp 220. Utilizamos para a elaboração da figura uma galáxia com massa de  $2 \times 10^{11}$  M<sub>☉</sub>. As idades da galáxia do modelo são mostradas através da alternância entre linhas contínuas (0.03 e 0.30 Gano) e tracejadas(0.10 e 1.00 Gano). Os dados Observacionais foram retirados do NED (Nasa Extragalactic Database), Carico et al. (1988), Sanders et al. (1988), Smith, Aitken, & Roche (1989), Carico et al. (1990), Wynn-Williams & Becklin(1993), Rigopoulou, Lawrence, & Rowan-Robinson (1996), Klaas et al. (1997). No painel da esquerda mostramos um ajuste com a biblioteca de grãos de Draine & Lee (1984), na qual para grandes grãos (raio  $a \ge 100$ Å) temos que  $Q_{big} \propto \lambda^{-2}$ , com  $\lambda > 100 \mu$ m. No painel da direita fizemos uma alteração neste comportamento dos grandes grãos, fazendo com que  $Q_{big} \propto \lambda^{-1.6}$ . Note que o ajuste para  $\lambda > 200 \mu$ m não mais apresenta o deficit de um fator 3-4 que apresenta o modelo que adotava  $Q_{big} \propto \lambda^{-2}$ .

Não esperamos que o nosso modelo ajuste os dados observacionais de Arp 220, mas antes explore a semelhança entre um grande esferóide em formação e um outro caso de formação estelar estelar violenta em grande escala, que é o das ULIRGS, e, que como, um grande esferóide em formação, trata-se de um "dusty starburt". As diferenças, contudo, devem ser enfatizadas. Uma grande elíptica em formação deve ser antes um "clumpy merger", com um grande número de pequenas sub-unidades em fusão, uma situação, que, considerando a média do processo, é bem descrita pelo modelo quimiodinâmico. Já uma ULIRG resulta de uma grande fusão de uma galáxia de grande porte com uma forasteira rica em gás.

Por fim, a própria Arp 220 parece não ser uma ULIRG típica, porém, a mais bem estudada, visto ser a ULIRG mais próxima de nós, a um redshift z=0.018126. Assim, Arp 220 possui uma razão das features  $6.2/7.7 \ \mu m$  de 0.18, abaixo do valor típico das ULIRGs, 0.25, que, por sua vez é inferior à média das galáxias "starburt", que é 0.30 (Lutz et al. 1998). Ela é também extremamente obscurecida, sendo a que possui o  $A_V$  mais alto ( $A_V = 45$ ) da amostra de Rigopoulou et al. (1998). Isso é confirmado pelo estudo detalhado por Spoon et al. (2004) dos perfis das features 6.2, 7.7, 8.6 e 11.3  $\mu m$ , que revelam que Arp 220 possui um contínuo subjacente às linhas dos PAHS com um obscurecimento ainda mais extremo do que o padrão da galáxia IV obscurecida, NGC 4418.

Os dados na faixa de 100  $\mu$ m a 2 mm são relativamente independentes de detalhes do modelo e de processos alimentando a ULIRG ou LIRG (Starburst ou AGN) e mais dependentes da física dos grãos. De fato, observações no submilimétrico indicam que se se ajusta a emissividade nessa região por uma lei  $\epsilon_{\lambda} \propto B_{\lambda} \lambda^{-\beta}$ , onde  $B_{\lambda}$  é o espectro de corpo negro, então o  $\beta$  favorecido é menor do que 2 (Archibald et al. 2002). Lembremo-nos de que  $\beta$  provém da dependência do coeficiente de absorção com  $\lambda$ , ou seja,  $\kappa_{abs} \propto \lambda^{-\beta}$ .

Para os grãos dos silicatos e grafites do Draine,  $\kappa_{abs} \propto Q_{abs} \propto \lambda^{-2}$ , na região de 200  $\mu$ m a 1 mm. Agladze et al. (1996), a partir de experimentos de laboratório, favoreceu  $Q_{abs} \propto \lambda^{-1.6}$ nessa região. Esta também é a dependência de  $Q_{abs}$  com  $\lambda$  utilizada por Silva et al. (1998) para  $\lambda > 200\mu$ m em suas medidas para Arp 220.

#### 5.5. LINHAS DE PAHS COMO SONDAS DE EVOLUÇÃO DE GALÁXIAS

Nas galáxias com emissão no infravermelho, ou IRGs (=*infrared galalaxies*), classe de objetos incluindo as ULIRGs, as LIRGS, e galáxias starburst, o *feature* de PAH mais forte é, em geral a feature a 7.7  $\mu m$ , e ela tem sido usada em vários tipos de diagnósticos de IRGs.

Nem sempre as linhas de PAH são indicadoras diretas da taxa de formação estelar. De fato, as linhas de PAHs são devidas à absorção de radiação UV, que pode ser produzida tanto por estrelas jovens, como por AGNs, como por estágios avançados da evolução de estrelas velhas.

Assim, a razão linha/contínuo L/C(7.7  $\mu m$ ) permite discernir entre LIRGs e ULIRGs alimentadas por AGNs e por starbursts. A separação entre as duas classes corresponde a L/C(7.7  $\mu m$ )=1, as LIRGs abaixo desse valor correspondendo à alimentação por AGNs e acima por Starbursts (Lutz et al. 1998). Além disso, há uma tendência da razão L/C(7.7  $\mu m$ ) com a luminosidade no IV, no sentido de ULIRGs com maior luminosidade no IV possuirem menor L/C(7.7  $\mu m$ ), e assim, terem um maior peso de um AGN na alimentação da sua luminosidade no IV.

A razão de fluxos das linhas 6.2 e 7.7  $\mu m$  também é um importante indicador da natureza da fonte de radiação UV, AGN ou starburst. O valor típico para galáxias "starburst", é 0.30 enquanto para ULIRGs é 0.25 e tende a se reduzir quanto maior o peso de um AGN na alimentação da LIRG (Lutz et al. 1998).

Outras linhas indicam também a presença de uma população estelar, que, embora mais antiga, contribui com um campo de radiação no UV suficentemente intenso para produzir uma emissão considerável dessas linhas. Trata-se, por exemplo, entre as features mais intensas, das linhas a 11.3, 16.4 e 21.2  $\mu m$ . Tais linhas, contudo, não tem sido utilizadas extensivamente para diagnósticos de IRGs. Portanto, Guimarães & Friaça (2006, doravante GF06) utilizaram a linha 11.3  $\mu m$  em conjunto com a linha 7.7  $\mu m$  como diagnóstico da evolução de galáxias, visto que, com a "Era Spitzer", se tornam disponíveis observações de IRGs a altos redshifts (Yan et al. 2005, Elbaz et al. 2005, Marcillac et al. 2006). Utilizamos o modelo quimiodinâmico para a galáxia fiducial com  $M_G = 2 \times 10^{11} M_{\odot}$ .

Note que no modelo quimiodinâmico, como a formação estelar não é cortada após a ocorrência do vento galáctico, a formação estelar continua mesmo em elípticas velhas, embora a uma taxa bastante baixa. As estrelas formadas são dificilmente detectáveis no visível, mas têm uma assinatura mais notável no UV, e de, fato poderiam explicar o fato de que as elípticas se tornam mais luminosas para  $\lambda$ 's mais curtos do que 2000 Å. A partir dos resultados do modelo quimiodinâmico (Friaça & Terlevich 1998), elípticas com maior metalicidade, embora sejam mais vermelhas em cores no visível-IV próximo, possuem um "UV upturn" mais acentuado, o que corresponde às observações. Assim, sempre há um campo de radiação UV presente, que teria como uma das assinaturas a emissão de features de PAHs.

De fato, a motivação para o trabalho de GF06 é dupla. Ao mesmo tempo que há uma amostra de IRGs a altos redshifts, há observações de galáxias elípticas do Universo local apresenatando fortes linhas de PAHs (Kaneda et al. 2005), com a linhas a 11.3  $\mu m$  mais fortes que aquela a 7.7  $\mu m$ , que pode mesmo estar ausente. Essa situação é excepcional, pois em geral temos para as fontes IV clássicas o inverso, com a razão de fluxos nas linhas F(7.7  $\mu m$ )/F(11.3  $\mu m$ ) podendo ser superior a 10 (Lutz et al. 1998, Roelfsema 1996). Note que a linha 7.7  $\mu m$  é devida a ligações

C-C enquanto que a 11.3  $\mu m$  é devida a ligações C-H. Isso é interpretado como uma variação nas condições físicas locais, que promovem uma maior ou menor ionização dos PAHs.

O fato de que as elípticas a z = 0 apresentam a linha de 11.3  $\mu m$  mais forte que a linha de 7.7  $\mu m$  indica que a consideração da linha a 11.3  $\mu m$  deve ser redobrada. Como o modelo quimiodinâmico prevê de um modo natural a presença em elípticas de um campo de radiação UV intenso o suficiente na época atual para elas produzirem features de PAHs, GF06 calcularam a evolução das features a 7.7 e 11.3  $\mu m$  de uma galáxia elíptica até a época atual.

As Figuras de 5.12 a 5.15 mostram o espectro no infravermelho médio (4-24  $\mu m$ ) para diversos tempos, até a época atual (13 Ganos). As Figuras 5.12 e 5.13 apresentam a o espectro calculado utilizando-se as seções de choque para as linhas dos PAHs ionizados, enquanto que as Figuras 5.14 e 5.15 consideram PAHs neutros. Em todos os cálculos nesse trabalho temos utilizado PAHs ionizados, pois para a maior parte dos campos de radiação considerados, a intensidade no UV é suficiente para ionizar os PAHs. O emprego de PAHs neutros se deve à sugestão de Kaneda et al. (2005) de que em galáxias elípticas no Universo local, os PAHs estejam neutros, pois a intensidade da linha 11.3  $\mu m$ , que é devida a uma ligação C-H, cresce quando o PAH é neutro, enquanto que a feature a 7.7  $\mu m$  decresce.

Podemos ver, das Figuras 5.12 e 5.13, que para a evolução inicial da galáxia, a linha 7.7  $\mu m$  é bastante forte, sendo bem mais forte do que a da linha 11.3  $\mu m$ . Para tempos mais tardios, a intensidade da 7.7  $\mu m$  decresce bastante, e a da linha 11.3  $\mu m$  parece decrescer proporcionalmente, porém, ela, em virtude da sua largura relativamente estreita, sempre permanece perfeitamente visível, acima do contínuo, até a época atual.

Nas Figuras 5.14 e 5.15 podemos ver, que mesmo para o caso de PAHs neutros, que a linha 7.7  $\mu m$  é bastante intensa durante a evolução incial da galáxia, sendo de intensidade comparável à da linha 11.3  $\mu m$ . Porém, para tempos tardios, enquanto que a linha 7.7  $\mu m$  praticamente fica imersa no contínuo, a linha 11.3  $\mu m$  permanece bastante intensa, sendo fácilmente identificável em z = 0. De fato, a detectabilidade da linha a 11.3  $\mu m$  no tempo atual, para o caso de PAHs neutros, é maior do que a da linha 7.7  $\mu m$ , para o caso de PAHs ionizados. Outra feature que poderia ser importante é aquela 21.2  $\mu m$ , principalmente a redshifts mais elevados

Um ponto importante é que, embora a linha a 11.3  $\mu m$  seja, em alguns casos, bem mais fraca que a linha a 7.7  $\mu m$ , ela sempre está presente em qualquer tempo da evolução da galáxia, mesmo quando a linha 7.7 $\mu m$  está praticamente ausente.



**Figura 5.12** Evolução temporal inicial ("Early") da Densidade de Fluxo para o modelo fiducial de Nuvens Moleculares ( $M_{mc} = 10^6 \,\mathrm{M_{\odot}}$ ,  $r_{mc} = 15 \,\mathrm{kpc}$ ,  $t_{mc} = 50 \,\mathrm{Manos}$ ) com o caso fiducial para os PAHs (PAHs ionizados). Observe a pouca variação da linha de 11.3  $\mu \mathrm{m}$  com relação ao contínuo. Já a linha em 16.4  $\mu \mathrm{m}$  é uma das que possuem a maior variação. Observe também como o "feature em absorção dos silicatos em 9.6  $\mu \mathrm{m}$  vai aos poucos escavando a SED naquela região. Uma característica interessante destas SEDs é que o contínuo se apresenta crescente com o aumento do comprimento de onda.



**Figura 5.13** Evolução temporal tardia ("Late") da Densidade de Fluxo para o modelo fiducial de Nuvens Moleculares ( $M_{mc} = 10^6 \,\mathrm{M_{\odot}}$ ,  $r_{mc} = 15 \,\mathrm{kpc}$ ,  $t_{mc} = 50 \,\mathrm{Manos}$ ) com o caso fiducial para os PAHs (PAHs ionizados). Observe novamente a pouca variação da linha de 11.3  $\mu$ m com relação ao contínuo. Já a linha em 16.4  $\mu$ m sofre pouca variação. A depressão em torno de 9.6  $\mu$ m vai se aplainando com o passar do tempo. Uma característica interessante destas SEDs é que, ao contrário da figura anterior, o contínuo se apresenta decrescente com o aumento do comprimento de onda.



**Figura 5.14** Evolução temporal inicial ("Early") da Densidade de Fluxo para o modelo fiducial de Nuvens Moleculares ( $M_{mc} = 10^6 \,\mathrm{M_{\odot}}, r_{mc} = 15 \mathrm{kpc}, t_{mc} = 50 \mathrm{Manos}$ ), mas com um caso especial para os PAHs (PAHs neutros). Observe a pouca variação da linha de 11.3  $\mu$ m com relação ao contínuo. Já a linha em 16.4  $\mu$ m é uma das que possuem a maior variação. Também para as SEDs com PAHs neutros, o contínuo se apresenta crescente com o aumento do comprimento de onda, como ocorria com os PAHs ionizados.



**Figura 5.15** Evolução temporal tardia ("Late") da Densidade de Fluxo para o modelo fiducial de Nuvens Moleculares ( $M_{mc} = 10^6 \,\mathrm{M_{\odot}}$ ,  $r_{mc} = 15 \,\mathrm{kpc}$ ,  $t_{mc} = 50 \,\mathrm{Manos}$ ) mas com um caso especial para os PAHs (PAHs neutros). O comportamento é bastante assmelhado com aquele que acontecia com o modelo "Late" que utilizava PAHs ionizados. E aqui também o contínuo se apresenta decrescente com o aumento do comprimento de onda, ao contrário da figura anterior.

A Figura de 5.16 mostra a evolução das razões L/C, ou seja, entre  $S_{\nu}$  no pico da linha e do  $S_{\nu}$  do contínuo subjacente para as features a 7.7 e 11.3  $\mu m$ , assim como a razão das razão entre fluxos totais das linhas F(7.7  $\mu m$ )/F(11.3  $\mu m$ ). Para o cálculo da razão L/C, determinamos o contínuo conforme o procedimento especificado por Rigopulou et. al (1998): determinamos o contínuo em dois "pivot points", um do lado vermelho da linha e outro do lado azul, e interpolamos o contínuo na linha entre estes dois pontos. No caso da linha 7.7  $\mu m$ , conforme sugestão de Lutz (1998) utilizamos o contínuo a 5.9  $\mu m$ , próximo à asa vermelha da linha e o o contínuo a 10.9  $\mu m$ , algo distante da linha, mas evitando a absorçãao do silicato a 9.6  $\mu m$ . Para a linha a 11.3  $\mu m$ , utilizamos o mesmo "pivot point" em 10.9  $\mu m$ , e outro a 14.0  $\mu m$ , que evita, ao mesmo tempo, as linhas 11.3  $\mu m$  e 16.4  $\mu m$ , assim como a larga absorção do silicato a  $\sim 18\mu m$ .

A evolução da L/C(7.7  $\mu m$ ) mostra um grande decréscimo quando passa a época inicial de intensa formação estelar, sendo bastante pequena na época atual. Para o caso de PAHs ionizados, essa linha ainda seria detectável para uma elíptica atual, como uma razão L/C $\approx$  1. Porém, para PAHs neutros seria indetectável. Já a linha 11.3  $\mu m$  é bem mais promissora. Para o caso de PAHs neutros, sua razão L/C sempre é bastante alta, mesmo na época atual. E, mesmo para o caso de PAHs neutros, L/C= 1.6 em t = 13 Ganos, sendo, inclusive, maior do que a razão L/C da linha 7.7  $\mu m$ . Deste modo, mesmo que a ionização de PAHs predominasse em elípticas, a linha 11.3  $\mu m$  ainda seria a mais detectável.

A evolução da razão F(7.7  $\mu$ m)/F(11.3  $\mu$ m) é mesmo mais dramática. Enquanto que, para o caso de PAHs ionizados, esta razão permanece relativamente constante entre a época da formação da galáxia e os dias de hoje, no caso de PAHS neutros ela cai abruptamente após os primeiros 3 Ganos de evolução. De fato, a linha 7.7  $\mu$ m seria indetectável nos dias de hoje. Nesse caso, ela é relativamente forte durante a evolução inicial da galáxia, e após cai abruptamente. Já, para o caso de PAHs ionizados, ela varia entre 5 e um pouco acima de 10, valores compatíveis com muitas fontes IV do Universo local. Para o caso de PAHs neutros, a evolução dessa razão atinge, para galáxias elípticas em z = 0, valores muito baixos, consistentes com aqueles determinados por Kaneda et al. (1998) para sua amostra de elípticas. Seria interessante comparar com observações dessa razão a altos redshifts, mas para z > 2, a linha cai fora da cobertura espectral dos instrumentos mais sensíveis. Contudo, há uma determinação pelo Sptizer, dessa linha para fonte IRS 9, a um redshit z = 1.83. Inclusive, o redshift dessa IRG foi determinado pelas features dos PAHs. A Figura 15.16 representa esse objeto por uma linha espessa estendendo-se de t = 0 (supondo-se que ele acabou de se formar) até t = 3.04 Ganos (que seria sua idade, admitindo-se que se formou em z = 10). Vê-se que esse objeto já possui uma razão F(7.7  $\mu$ m)/F(11.3  $\mu$ m)



Figura 5.16 Evolução temporal das linhas dos PAHs, desde a formação da galáxia fiducial até 10 Ganos: as linhas contínuas representam os PAHs ionizados, enquanto que as linhas tracejadas indicam os PAHs neutros. No painel superior temos a razão da linha em 7.7  $\mu$ m com relação ao contínuo. No painel do meio temos a razão entre a linha em 11.3  $\mu$ m e o contínuo. No painel inferior temos a razão entre os fluxos totais nas linhas de 7.7  $\mu$ m e 11.3  $\mu$ m, no qual as linhas horizontais mostram os valores observacionais para algumas galáxias do universo local: NGC 2974, NGC 3962 e NGC 4589, com as distâncias respectivas de D=20.5 Mpc, D=21.7 Mpc, D=24.6 Mpc (Kaneda et al. 2005); e o objeto IRS 9 está a um redshift z=1.83 (Yan et al. 2005). Apenas no painel do meio, para a linha em 11.3  $\mu$ m, temos que a razão é maior para PAHs neutros que ionizados.

relativamente baixa, mais próxima da sua curva evolutiva esperada para PAHs neutros do que daquela para PAHs ionizados. Desse modo, em buscas profundas de IRGs, provavelmente a linha de 11.3  $\mu m$  seja mais indicada do que a de 7.7  $\mu m$ .

A linha de 11.3  $\mu m$  é, portanto, um importante sonda da evolução de galáxias, podendo ser observada a altos redshifts, independentemente do grau de ionização de PAHs. Sua produção exige temperaturas (ou transientes de temperatura) menores do que o da linha 7.7  $\mu m$ , e, que, portanto, pode ser produzida em um número maior de contextos astrofísicos.

Ela não tem sido mais observada, contudo, porque, frequentemente, cai fora da faixa de comprimentos de onda cobertos pelos spectrógrafos utilizados, e, essa situação se torna mais difícil para objetos a altos redshifts, onde ela seria particularmente útil. Contudo, ela permite que se abra uma janela de observação para o Universo distante no futuro próximo, quando estiver disponível o observatório orbital Herschell. O espectrógrafo PACS, a bordo do Herschell permitirá espectroscopia na faixa  $80-210\mu m$ , que permitirá a detecção da feature 11.3  $\mu m$  para z > 6, exatamente uma das grandes fronteiras para as explorações em astronomia extragaláctica.

# 6. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

A astromomia submilimétrica abriu uma importante janela para a observação do Universo em altos redshifts, pois uma galáxia jovem massiva, que tem maior probabillidade de detecção em observações profundas é, na realidade, uma "dusty starburst". A emissão de poeira aquecida pela população estelar jovem apresenta um pico no infravermelho distante (FIR, *Far Infrared*), ao redor de 100  $\mu$ m. Aproveitando-se da correção-K negativa devido ao acentuado declive da SED no lado vermelho do pico no FIR, as observações submilimétricas foram muito bem sucedidas em detectar fontes galácticas a redshifts acima de 2 (Dunlop, Cirasuolo, McLure 2006).

Do outro lado do pico da SED destes "dusty starburst", a riqueza de espectro de linhas dos PAHs faz do MIR (MIR = Medium Infrared) e da região entre o MIR e o FIR uma nova janela para o universo a alto redshift (Guimarães & Friaça 2006). De fato, a região do MIR foi investigada por gerações sucessivas de observatórios orbitais, IRAS, ISO e Spitzer, e permitiu a descoberta de fontes extremamente fracas no óptico. E a detecção de *features* no infravermelho em 6 entre 8 fontes fracas a  $z \sim 2$ , metade das quais mais fracas do que  $R \gtrsim 25.5$  mag, demonstra o potencial de se usar a espectroscopia no MIR, especialmente as *features* dos PAHs para sondar diretamente populações de objetos opticamente fracos, porém luminosos no infravermelho, a altos redshifts (Yan et al. 2006).

Uma perspectiva fascinante é aberta pelo lançamento próximo do observatório Herschell, operando no FIR e no submilimétrico. Em particular, no espectrógrafo de média resolução PACS, a bordo do Herschell, será realizada a espectroscopia na faixa de 80  $\mu$ m a 210  $\mu$ m,o que permitirá a observação de *features* de PAHs com comprimentos de onda acima de 10  $\mu$ m para galáxias com redshifts acima de 5. De especial interesse será a observação do *feature* a 11.3  $\mu$ m, para z > 6, e que será uma importante sonda de "Terra Incógnita" do Universo antes da Época de Reionização.

Neste trabalho mostramos como os *features* a 7.7  $\mu$ m e, em especial, aquele a 11.3  $\mu$ m, constituem sondas de evolução de galáxias. Com o auxílio de um modelo quimiodinâmico, calculamos a distribuição dos PAHs no MIE de galáxias e sua evolução.

Mostramos como o espectro emergente dos PAHs fornece a assinatura das propriedades das nuvens moleculares que abrigam a formação estelar, como o tempo de vida das nuvens e seu raio. as razões das linhas a 6.2  $\mu$ m, 7.7  $\mu$ m, 8.6  $\mu$ m, 11.3  $\mu$ m e 12.7  $\mu$ m são úteis indicativos do estágio de evolução da galáxia. as linhas abaixo de 10  $\mu$ m são particularmente sensíveis à taxa de formação estelar, enquanto que aquelas acima de 10  $\mu$ m também respondem á população estelar geral.

Em trabalhos futuros iremos considerar outras linhas de PAHs não abordadas aqui. Duas *features* relativamente proeminentes a serem consideradas são aquelas a 16.4  $\mu$ m e 23.1  $\mu$ m. Como ambas são originárias de ligações C-C, a sua proporção deve refletir antes a natureza dos absorvedores (como a absorção dos silicatos a 18  $\mu$ m) do que diferenças na natureza da fonte.

Aliás, algo a ser incluído nas próximas versões de nosso modelo é a absorção por gelos, e, de um modo mais importante, dos gelos de água. De fato, há uma *feature* de absorção importante a 6.0  $\mu$ m devido ao gelo de água, e que afeta a linha a 6.2  $\mu$ m (Armus et al. 2004, Spoon et al 2004). A razão de linha 6.2/7.7  $\mu$ m é um indicador da presença de água na fonte e/ou no absorvedor da emissão dos PAHs.

Um outro aperfeiçoamento do nosso modelo é a inclusão do cálculo separado das abundâncias das diversas espécies grãos devido ao carbono - grafite, carbono amorfo e PAHs. No seu estágio atual, nosso modelo calcula apenas a quantidade total de silício em grãos ou de carbono em grãos. O cálculo separado de espécies, que poderia começar como uma distinção entre grãos de carbono (grafite e carbono amorfo) permitiria uma estimativa mais confiável da abundância de PAHs no MIE.

Devemos considerar com mais atenção a destruição seletiva dos PAHs não só por radiação ultravioleta extrema e raios-X moles, como também por choques de supernovas. De fato, este mecanismo já foi sugerido para explicar o deficit de emissão de PAHs em algumas galáxias Starburt (O'Halloran et al. 2006). Desse modo, as linhas dos PAHs forneceriam diagnósticos não só para abundâncias químicas e taxa de formação estelar, como também para a freqüência de supernovas.

Também devemos modelizar sistemas menores, como as galáxias "Starburst" e as BCDs (*Blue Compact Dwarfs*). A modelização desses sistemas é importante, pois eles seriam os análogos a

baixos redshifts das unidades galácticas de baixa massa (~  $10^8 - 10^9 M_{\odot}$ ), cujo "assembling" dariam origem às primeiras galáxias. Como esses processos ocorreram a redshifts ~ 10 ou maiores, em um meio intergaláctico não-ionizado e opaco ao ultravioleta, as linhas dos PAHs seriam as únicas *features* disponíveis para estas primeiras fontes protogalácticas, extremamente embebidas em poeira.

Para os silicatos, grafites e PAHs, pretendemos explorar outras distribuições de tamanho de grãos, como a que deduzimos em um primeiro estágio a partir do Método da Regularização de Tikhonov (MRT). Ele parece-nos muito promissor para a aplicação em altos redshifts pois, em um ambiente bastante diverso do Universo local, esta parece ser uma escolha tão robusta quanto adotar pura e simplesmente o modelo MRN (Mathis, Rumpl & Nordsieck 1977) para distribuição de tamanho de grãos. Além disso, a formulação do MRT nos permite acrescentar muitos outros vínculos ao problema, de forma que ele se constitui num instrumento que pode extrapolar em muito sua utilização primária.

Para utilizar os PAHs ionizados de maneira mais consistente, pretendemos implementar uma rotina que calcula a percentagem de PAHs no estado neutro e ionizado, tanto positiva quanto negativamente, dependendo do campo de radiação e das condições físicas do meio no qual ele está imerso. Com este intuito, vamos nos basear nos trabalhos de Ruiterkamp et al.(2005) e Weingartner & Draine (2001). Também há uma pequena correção para a eficiência de absorção dos PAHs ionizados na região entre 0.8  $\mu$ m e 2.4  $\mu$ m, publicada por Mattioda et al.(2005) e baseada em dados experimentais, que também pretendemos implementar para aperfeiçoar nossos modelos.

Por fim, um modelo mais realista de PAH's deveria levar em consideração também o grau de "desidrogenação" dessas moléculas. Segundo Allamandola et al (1989), a taxa com a qual um pequeno PAH ( $\simeq 20$  átomos de carbono) perde átomos de hidrogênio periféricos depende da taxa de absorção de fótons ultravioleta mais energéticos que 10 eV. Não levamos este fator em consideração nos nossos modelos, o que com certeza é algo que vai afetar a eficiência de absorção e a capacidade térmica dos PAHs. Este é outro tópico no qual pretendemos trabalhar.

# BIBLIOGRAFIA

- Aannestad P.A., 1989, in "Proc. Int. School of Physics Enrico Fermi on Evolution of Interstellar Dust and Related Topics", ed. A. Bonetti, J.M. Greenberg, & S. Aiello (New York: North-Holland),121
- Adamson A.J., Whittet D.C.B., Duley W.W., 1990, MNRAS, 243, 400
- Agladze N.I., Sievers A.J., Jones S.A., Burlitch J.M., Beckwith S.V.W., 1996, ApJ, 462, 1026

Allamandola L.J., Tielens A.G.G.M., Barker J.R., 1985, ApJ, 290, L25

Allamandola L.J., Tielens A.G.G.M., Barker J.R., 1989, ApJS, 71, 733

- Allamandola L.J., Hudgins D.M., Sandford S.A., 1999, ApJ, 511, L115
- Archibald E. N., Jimenez R., Dunlop J.S., Friaça, A. C. S, McLure R.J., Hughes D.H., 2002, MNRAS, 336, 353
- Arendt R.G., Odegard N., Weiland J.L., et al., 1998, ApJ, 508, 74
- Armus L., Charmandaris V., Spoon H.W.W., Houck J.R., Soifer B.T., Brandl B.R., Appleton P.N., Teplitz H.I., Higdon S.J.U., Weedman D.W., Devost D., Morris P.W., Uchida K.I., van Cleve J., Barry D.J., Sloan G.C., Grillmair C.J., Burgdorf M.J., Fajardo-Acosta S.B., Ingalls J.G., Higdon J., Hao L., Bernard-Salas J., Herter T., Troeltzsch J., Unruh B., Winghart M., 2004, ApJSS, 154, 178
- Bakes E. L. O., Tielens A. G. G. M., 1994, ApJ, 427, 822
- Bakes E. L. O., Tielens A. G. G. M., Bauschlicher C. W. Jr., 2001, ApJ, 556, 501
- Barker J.R., Cherchneff I., 1989, in Interstellar Dust (IAU Symposium 135), ed. L.J. Allamandola & A.G.G.M. Tielens (Dordrecht: Kluwer), 197
- Bernstein R.A., Freedman W.L., Madore B.F., 2002, ApJ, 571,107
- Bohlin R. C., Savage B. D., Drake J. F., 1978, ApJ, 224, 132
- Borghesi A., Bussoletti E., Colangeli L., 1987, ApJ, 314, 422B
- Boulanger F., Baud B., van Albada G.D., 1985, A&A, 144, L9
- Boulanger F., Beichman C., Desert F. X., Helou G., Perault M., Ryter C., 1988, ApJ, 332, 328
- Boulanger F., Pérault M., 1988, ApJ, 330, 964
- Boulanger F., 1999, in Solid Interstellar Matter: The ISO Revolution, ed. L. d'Hendecourt, C. Joblin, A. Jones (EDP Sciences, Les Ulis), Les Houches Ser., 11, 20
- Brandl B.R., Devost D., Higdon S.J.U., Charmandaris V., Weedman D., Spoon H.W.W., Herter T.L., Hao L., Bernard-Salas J., Houck J.R., Armus L., Soifer B.T., Grillmair C.J., Appleton P.N., 2004, ApJSS, 154, 188
- Brenner J.D., Barker J.R., 1992, ApJ, 388, L39
- Bruzual G., Charlot S., 1993, ApJ, 405, 538
- Bruzual G., 1998, PASP, 110, 1375
- Calzetti D., Kinney A.L., Storchi-Bergmann T., 1994, Apj, 429, 582
- Calzetti D., Heckman T.M., 1999, ApJ, 519, 27
- Calzetti D.,2001, PASP, Vol. 113, 790,1449
- Cardelli, J.A., 1994, in Cutri R.M., Latter W.B., eds, "The First Symposium on the Infrared Cirrus and Diffuse Interestellar Clouds", ASP Conf. 58. ASP, San Francisco, p. 25
- Carico D.P., Sanders D.B., Soifer B.T., Elias J.H., Matthews K., Neugebauer G., 1988, AJ, 95, 356
- Carico D.P., Sanders D.B., Soifer B.T., Matthews K., Neugebauer G., 1990, AJ, 100, 70
- Cherchneff I., Barker J.R., 1989, ApJ, 341, L21
- Chrysostomou A., Hough J.H., Whittet D.C.B., Aitken D.K., Roche P.F., Lazarian A., 1996, ApJ Lett., 465, L61
- Clavel J., Schulz B., Altieri B., Barr P., Claes P., Heras A., Leech K., Metcalfe L., Salama A., 2000, A&A, 357, 839
- Clayton G.C., Wolff M.J., Sofia U.J., Gordon K.D., Misselt K.A., ApJ, 588, 871
- Contursi A., Lequeux J., Cesarsky D., Boulanger F., Rubio M., Hanus M., Sauvage M., Tran D., Bosma A., Madden S., Vigroux L., 2000, A&A, 362, 310
- Dennefeld M., Boller T., Rigopoulou D., Spoon H.W.W., A&A, 406, 527
- Désert F.-X., Boulanger F., Shore S.N., 1986, A&A, 160, 295
- Désert F.-X., Boulanger F., Puget J.L., 1990, A&A, 237, 215
- Devost D., Brandl B.R., Armus L., Barry D.J., Sloan G.C., Charmandaris V., Spoon H., Bernard-Salas J., Houck J.R., 2004, APJSS, 154, 242

- d'Hendecourt L.B., Léger A., Boissel P., Désert F.X., 1989, in Interstellar Dust (IAU Symposium 135), ed. L.J. Allamandola & A.G.G.M. Tielens (Dordrecht: Kluwer), 207
- dHendecourt L., Joblin C., Jones A., eds., 1999, in "Solid Interstellar Matter: The ISO Revolution", Springer, Berlin.
- Donn B., 1968, ApJ, 152, L129
- Dorschner J., Henning T., 1995, The Astron. Astrophys. Rev., 6, 271
- Draine B.T., Lee H.M., 1984, ApJ, 285, 89
- Draine B.T., Anderson A., 1985, ApJ, 285, 89
- Draine B.T., Sutin B., 1987, ApJ, 320, 803
- Draine B.T., Li A., 2001, ApJ, 551, 807
- Draine B.T., 2003, Annu. Rev. Astron. Astrophys., 41, 241
- Draine B. T., 2004, in "Astrophysics of Dust", eds. Witt A. N., Clayton G. C., Draine B. T., ASP Conf. Series, vol. 309, ASP, San Francisco, p. 691.
- Duley W.W., Williams D.A., 1981, MNRAS, 196, 269
- Duley W.W., Scott A.D., Seahra S., Dadswell G., 1998, ApJ Lett., 503, L183
- Dunlop J.S., Peacock J.A., Spinrad H., Dey A., Jimenez. R., Stern D., Windhorst R.A., 1996, Nature, 381, 581
- Dunlop J.S., Cirasuolo M., McLure R.J., 2006, astro-ph/0606192
- Dwek E., 1986, ApJ, 302, 363
- Dwek E., Arendt R.G., Fixsen D.J., Sodroski T.J., Odegard N., Weiland J.L., Reach W.T., Hauser M.G., Kelsall T., Moseley S.H., Silverberg R.F., Shafer R.A., Ballester J., Bazell D., Isaacman R., 1997, ApJ, 475, 565
- Dwek E., 1998, ApJ, 501, 643
- Dwek E., 2005, in "Interstellar dust: what is it, how does it evolve, and what are its observational consequences?", AIP Conf. Proc. 761, 103
- Efstathiou A., Rowan-Robinson M., Siebenmorgen R., 2000, MNRAS, 313, 734
- Elbaz D., Flores H., Chanial P., Mirabel I.F., Sanders D., Duc P.-A., Cesarsky C.J., Aussel H., 2002, A&A, 381, L1
- Elbaz D., Le Floc'h E., Dole H., Marcillac D., 2005, A&A, 434, L1
- Fitzpatrick E.L., Massa D., 1990, ApJS, 72, 163
- Friaça A.C.S., Terlevich R., 1994, in "Violent Star Formation from 30 Doradus to QSOs", ed. G. Tenorio-Tagle. Cambridge, CUP, p. 424
- Friaça A.C.S., Terlevich R., 1998, MNRAS, 298, 399

- Friaça A.C.S., Terlevich R., 1999, MNRAS, 305, 90
- Friaça A.C.S., Terlevich R., 2001, MNRAS, 325, 335
- Friaça A.C.S., Alcaniz, J. S., Lima, J. A. S., 2005, MNRAS, 362, 1295
- Friaça A.C.S., Lanfranchi G., Matteucci F., 2006, submetido
- Genzel R., Lutz D., Sturm E., Egami E., Kunze D., Moorwood A. F. M., Rigopoulou D., Spoon H. W. W., Sternberg A., Tacconi-Garman L. E., Tacconi L., Thatte N., 1998, ApJ, 498, 579
- Gillett F.C., Forrest W.J., Merrill K.M., 1973, ApJ, 184, L93
- Golub G.H., von Matt U.,1997, "Tikhonov regularization for large scale problems", in Workshop on Scientic Computing, eds. G. H. Golub, S. H. Lui, F. Luk and R. Plemmons, Springer, New York
- Gordon K.G., Clayton G.C., Misselt K.A., Landolt A.U., Wollf M.J., 2003, ApJ, 594,279
- Greenberg J.M., 1960, ApJ, 132, 672
- Greenberg J.M., 1968, in Stars and Stellar Systems, Vol. VII, ed. B.M. Middlehurst & L.H. Aller (Chicago: Univ. of Chicago Press), 221
- Greenberg J.M., Li A., Mendoza-Gómez C.X., Schutte W.A., Gerakines P.A., de Groot M., 1995, ApJ Lett., 455, L177
- Gruenwald R.B., Viegas S.M., 1992, ApJS, 78, 153
- Guimarães M.C., 2001, Dissertação de Mestrado, IAG-USP, São Paulo.
- Guimarães M.C., Friaça A.C.S., 2006, MNRAS, submetido
- Heger M.L., 1922, Lick Observatory Bulletin, 337, 141
- Helou G., Lu Nanyao Y., Werner M.W., Malhotra S., Silbermann N., 2000, ApJ, 532, L21
- Henning T., 1997, in "Molecules in Astrophysics: Probes and Processes", E.F. van Dishoeck (ed.), Proceedings of IAU Symposium 178, p. 343
- Hough J.H., Chrysostomou A., Messinger D.W., Whittet D.C.B., Aitken D.K., Roche P.F., 1996, ApJ, 461, 902
- Hudgins D.M., Allamandola L.J., 1999, ApJ, 513, L69
- Iwamoto K., Brachwitz F., Nomoto K., Kishimoto N., Umeda H., Hix W.R., Thielemann F.-K., 1999, ApJS, 125, 439
- Jimenez R., Friaça, A. C. S, Dunlop J.S., Terlevich, R. J., Peacock J.A., & Nolan L.A., 1999, MNRAS, 305, L16
- Jones A.P., Duley W.W., Williams D.A., 1990, QJRAS, 31, 567
- Jones A.P., d'Hendecourt L., 2000, A&A, 355, 1191
- Kaneda H., Onaka T., Sakon I., 2005, ApJ, 632, L83

- Kinney A.L., Calzetti D., Bica E., Storchi-Bergmann T., 1994, ApJ, 429, 172
- Klaas U., Haas M., Heinrichsen I., Schulz B., 1997, A&A, 325, L21
- Krügel E., 2003, in "The Physics of Interstellar Dust", IOP Publishing, Bristol.
- Lanfranchi G., Friaça A.C.S., 2003, MNRAS, 343, 481
- Langhoff S.R., 1996, J. Phys. Chem., 100, 2819
- Laor A., Draine B.T., 1993, ApJ, 402, 441
- Laurent O., Mirabel I.F., Charmandaris V., Gallais P., Madden S.C., Sauvage M., Vigroux L., Cesarsky C., 2000, A&A, 359, 887
- Laurent O., Tran D., Lutz D., Genzel R., Mirabel I.F., 2001, ApSSS, 277, 101
- Le Floc'h E., Mirabel I.F., Laurent O., Charmandaris V., Gallais P., Sauvage M., Vigroux L., Cesarsky C., 2001, A&A, 367, 487
- Léger A., Puget J.L., 1984, A&A, 137, L5
- Léger A., d'Hendecourt L., Défourneau D., 1989, A&A, 216, 148
- Lepp S., Dalgarno A., 1988, ApJ, 335, 769
- Li A., Draine B.T., 2001, ApJ, 554, 778
- Lu N., Helou G., Werner M.W., Dinerstein H.L., Dale D.A., Silbermann N.A., Malhotra S., Beichman C.A., Jarrett T.H., 2003, ApJ, 588, 199
- Lutz D., Feuchtgruber H., Genzel R., Kunze D., Rigopoulou D., Spoon H. W. W., Wright C.M., Egami E., Katterloher R., Sturm E., Wieprecht E., Sternberg A., Moorwood A.F.M., de Graauw Th., 1996, A&A, 315, L269
- Lutz D., Genzel R., Sturm E., Kunze D., Spoon H. W. W., Rigopoulou D., Thornley M., Alexander T., Moorwood A.F.M., Sternberg A., de Graauw Th., 1997, Proc. First ISO Workshop Analytic Spectroscopy, 143L
- Lutz D., Spoon H.W.W., Rigopoulou D., Moorwood A.F.M., Genzel R., 1998, ApJ, 505, L103
- Madden S. C., 2000, NewAR, 44, 249
- Marcillac D., Elbaz D., Chary R.R., Dickinson M., Galliano F., Morrison G., 2006, A&A, 451, 57
- Markelov N.V., Volga V.I., Buchnev L.M., 1973, Zh. Fiz. Khim., 47, 1824
- Mathis J.S., Rumpl W., Nordsieck K.H., 1977, ApJ, 217, 425
- Mathis J.S., 1990, Annu. Rev. Astron. Astrophys., 28, 37
- Mattila K., Lemke D., Haikala L. K., Laureijs R. J., Leger A., Lehtinen K., Leinert C., Mezger P. G., 1996, A&A, 315, L353
- Mattioda A. L., Hudgins D. M., Allamandola L. J., 2005, ApJ, 629, 1188
- Mezger P.G., Mathis J.S., Panagia N., 1982, A&A, 105, 372

- Mirabel I.F., Laurent O., Sanders D.B., Sauvage M., Tagger M., Charmandaris V., Vigroux L., Gallais P., Cesarsky C., Block D.L., 1999, A&A, 341, 667
- Moorwood A.F.M., 1986, A&A, 166, 4
- Moorwood A. F. M., 1999, ISO observations of active galaxies, in The Universe as Seen by ISO, ed. P. Cox, & M. F. Kessler, ESA-SP427, 825
- Moutou C., Verstraete L., Sellgren K., & Léger A., 1999, in The Universe as Seen by ISO, ed. P. Cox & M. F. Kessler, ESA-SP427, 727
- Moutou C., Léger A., & d'Hendecourt L. 1996, A&A, 310, 297
- Moutou C., Verstraete L., Léger A., Sellgren K., & Schmidt W., 2000, A&A, 354, L17
- Nolan L. A., Dunlop J. S., Jimenez, R., 2001 MNRAS, 323, 385
- O'Halloran B., Satyapal S., Dudik R.P., 2006, ApJ, 641, 795
- Omont A., 1986, A&A, 164, 159
- Paerels F., Brinkman A.C., van der Meer R.L.J., Kaastra J.S., Kuulkers E., et al., 2001, ApJ, 546, 338
- Papoular R., Conard J., Giuliano M., Kister J., Mille G., 1989, A&A, 217, 204
- Papoular R., Breton J., Gensterblum G., Nenner I., Papoular R.J., Pireaux J.-J., 1993, A&A, 270, L5
- Pei Y.C., Fall S.M., & Bechtold J., 1991, ApJ, 378, 6
- Pendleton Y.J., Allamandola L.J., 2002, ApJ Suppl., 138, 75
- Platt J.R., 1956, ApJ, 123, 486
- Pogge R.W., notas de aula, http://www.astronomy.ohio-state.edu/ pogge/
- Puget J.L., Léger A., 1989, Annu. Rev. Astron. Astrophys., 27, 161
- Rachford B.L., Snow T.P., Tumlinson J., Shull J.M., Blair W.P., Ferlet R., Friedman S.D., Gry C., Jenkins E.B., Morton D.C., Savage B.D., Sonnentrucker P., Vidal-Madjar A., Welty D.E., York D.G., 2002, ApJ, 577, 221
- Rigopoulou D., Spoon H. W. W., Genzel R., Lutz D., Moorwood A. F. M., Tran Q. D., 1999, AJ, 118, 2625
- Roche P. F, Aitken D. K., Smith C. H., Ward M. J., 1991, MNRAS, 248, 606
- Roelfsema P.R., Cox P., Tielens A.G.G.M., Allamandola L.J., Baluteau J.-P., Barlow M.J., Beintema D., Boxhoorn D.R., Cassinelli J.P., Caux E., Churchwell E., Clegg P.E., de Graauw T., Heras A.M., Huygen R., van der Hucht K.A., Hudgins D.M., Kessler M.F., Lim T., Sandford S.A., 1996, A&A, 315, L289
- Roelfsema P.R., Cox P., Kessler M.F., Baluteau J.-P., 1998, ASPC, 132, 76

Rowan-Robinson M. et al., 1997, MNRAS, 289, 490

- Ruiterkamp R., Cox N.L.J., Spaans M., Kaper L., Foing B.H., Salama F., Ehrenfreund P., 2005, A&A, 432, 515
- Rybicki G.B., Lightman A.P., 1979, in "Radiative Processes Astrophysics", John Wiley and Sons, New York
- Sakata A., Wada S., Onaka T., Tokunaga A.T., 1987, ApJ, 320, L63
- Sakata A., Wada S., Onaka T., Tokunaga A.T., 1990, ApJ, 353, 543
- Salama F., Bakes E.L.O., Allamandola L.J., Tielens A.G.G.M., 1996, ApJ, 458, 621
- Sanders D.B., Soifer B.T., Elias J.H., Madore B.F., Matthews K., Neugebauer G., Scoville N.Z., 1988, ApJ, 325, 74
- Sandford S.A., Allamandola L.J., Tielens A.G.G.M., Sellgren K., Tapia M., Pendleton Y., 1991, ApJ, 371, 607
- Savage B.D., Mathis J.S., 1979, Annu. Rev. Astron. Astrophys., 17, 73
- Sellgren K., Werner M.W., Dinerstein H.L., 1983, ApJ, 271, L13
- Sellgren K., 1984, ApJ, 277, 623
- Schulz N.S., Cui W., Canizares C.R., Marshall H.L., Lee J.C., et al., 2002, ApJ, 556, 1141

Schutte W.A., Tielens A.G.G.M., Allamandola L.J., 1993, ApJ 415, 397

- Siebenmorgen R., Krügel E., 1992, A&A, 259, 614
- Siebenmorgen R., Krügel E., Mathis J.S., 1992, A&A, 266, 501
- Siebenmorgen R., Krügel E., Spoon H.W.W., A&A, 414, 123
- Silva L., Granato G.L., Bressan A., Danese L., 1998, ApJ, 509, 103
- Soifer B. T., & Neugebauer G., 1991, AJ, 101, 354
- Spergel D.N., et al., 2003, ApJS, 148, 175
- Spitzer L., 1978, in "Physical Processes in the Interestellar Medium", John Wiley & Sons, 149
- Spoon H.W.W., Moorwood A.F.M., Lutz D., Tielens A.G.G.M., Siebenmorgen R., Keane J.V., 2004, A&A, 414, 873
- Steidel C.C., Pettini M., Hamilton D., 1995, AJ, 110, 2519
- Steidel C.C., Gianvalisco M., Pettini M., Dickinson M., Adelberger K.L., 1996, ApJ, 462, L17
- Stein S.E., 1977, J. Phys. Chem., 82, 566
- Stein S.E., Fahr A., 1985, J. Phys. Chem., 89, 3714
- Stein S.E., Golden D.M., Benson S.W., 1997, J. Phys. Chem., 81, 314
- Stein W.A., Soifer B.T., 1983, Annu. Rev. Astron. Astrophys., 21, 177
- Sturm E., Lutz D., Tran D., Feuchtgruber H., Genzel R., Kunze D., Moorwood A.F.M., Thornley

M. D., 2000, A&A, 358, 481

- Tacconi-Garman L.E., Sturm E., Lehnert M., Lutz D., Davies R.I., Moorwood A.F.M., 2005, A&A, 432, 91
- Takei Y., Fujimoto R., Mitsuda K., Onaka T., 2002, ApJ, 581, 307
- Telesco C., 1999, in "Science with infrared surveys", Internet Resources for Professional Astronomy, ed. M. R. Kidger and I. Perez-Fournon and F. Sanchez, pag. 131-160
- Terlevich R. J., 1992, in Fillipenko A.V., ed.," Relationship between Active Galactic Nuclei and Starburst Galaxies", ASP Conf. 31. ASP, San Francisco, p. 133
- Terlevich R.J., Boyle B.J., 1993, MNRAS, 262, 491
- Tielens A.G.G.M., Hony S., van Kerckhoven C., Peeters E., 1999, in The Universe as Seen by ISO, ed. P. Cox & M. F. Kessler, ESA-SP427, 579
- Tokunaga A. T., 1997, in "Diffuse Infrared Radiation and the IRTS", ed. H. Okuda, T. Matsumoto, & T. L. Roellig (San Francisco: ASP), 149
- Tran Q. D., Lutz D., Genzel R., Rigopoulou D., Spoon H. W. W., Sturm E., Gerin M., Hines D. C., Moorwood A. F. M., Sanders D. B., Scoville N., Taniguchi Y., Ward M., 2001, ApJ, 552, 527
- Trumpler, R.J. 1930, PASP, 42, 214
- Tscharnuter W.M., Winkler K.H., 1979, Comp. Phys. Comm., 18, 171
- van de Hulst H.C., 1981, in Light Scattering by Small Particles, Dover Publications, inc., New York
- van den Hoeck L.B., Groenwegen M.A.T., 1997, A&AS, 123, 305
- van der Zwet G.P., Allamandola L.J., 1985, A&A, 146, 76
- Verstraete L., Leger A., d'Hendecourt L., Defourneau D., Dutuit O., 1990, A&A, 237, 436
- Verstraete L., Puget J. L., Falgarone E., Drapatz S., Wright C. M., Timmermann R., 1996, A&A, 315, L337
- Voit G.M., 1992, MNRAS, 258, 841
- Yan L., Chary R., L. Armus L., Teplitz H., Helou G., Frayer D., Fadda D., Surace J., Choi P., 2005, ApJ, 628, 604
- Webster A., 1993, MNRAS, 264, 121
- Weiland J.L., Blitz L., Dwek E., Hauser M. G., Magnani L., Rickard L.J., 1986, ApJ, 306, L101
- Weingartner J.C., Draine B.T., 1999, "Photoelectric Emission from Interstellar Dust: Grain Recoil Forces and Gas Heating", submitted to Astrophys. J. (astro-ph/9907251)Webster, A. 1993, MNRAS, 264, 121

Weingartner J.C., DraineB.T., 2001, ApJ, 548, 295

- Witt A.N., 2000, in "Astrochemistry: From Molecular Clouds to Planetary Systems", Y.C. Minh & E.F. van Dishoeck (eds.), Proceedings of IAU Symposium 197, p. 317
- Whittet D.C.B., Schutte W. A., Tielens A.G.G.M., Boogert A.C.A., de Graauw T., Ehrenfreund P., Gerakines P.A., Helmich F.P., Prusti T., van Dishoeck E.F., 1996, A&A, 315, L375
- Whittet D.C.B., 2003, in "Dust in the Galactic Environment", 2nd edition, IOP Publishing, Bristol.
- Zubko V.G., 1997, MNRAS, 289,305
- Zubko V.G., Dwek E., Arendt R.G., 2004, ApJSS, 152, 211

### Apêndice A

# MÉTODO DA REGULARIZAÇÃO DE TIKHONOV

Para o cálculo da distribuição de tamanho de grãos, tínhamos inicialmente a intenção de implementar um algorítmo do Método da Máxima Entropia (MEM, em inglês) a fim de poder calcular a distribuição de tamanhos de grãos para as nossas bibliotecas de Silicatos, Grafites e PAHs.

Pensávamos que os trabalhos de Kim et al. (1994), Kim & Martin (1995, 1996) e Clayton et al. (2003) pudessem nos servir de guia para essa tarefa, mostrando os detalhes técnicos que necessitávamos para a correta implementação do algorítmo, o que não ocorreu.

Tentamos fazer uma busca mais ampla sobre o MEM, e encontramos várias referências sobre o método em diversas áreas, desde estatística e computação chegando até mesmo em geofísica, medicina e linguística. Em geral o método era aplicado no tratamento, reconstrução e recuperação de imagens, seja em tomografia computadorizada e exames de eletroencefalograma (EEG), seja em processamento e filtragem de sinais, análise da dados astronômicos e reconstrução de imagens em radioastronomia. Todas as referências que encontramos ou eram por demais específicas para uma determinada área, de modo que sua adaptação para nosso problema em particular seria por demais complexa, ou senão eram muito generalizadas, privando-nos de detalhes técnicos necessários para sua correta implementação.

Um fato que nos chamou a atenção em nossas buscas foi o caráter um tanto dúbio do MEM para os matemáticos. Apesar desses métodos frequentemente funcionarem muito bem, os matemáticos ainda não sabem muito bem o porquê disso acontecer. Refletindo sobre o "status" do MEM dentro da matemática, podemos mencionar a seguinte afirmação de Gian-Carlo Rota (Indiscretes Thoughts, Birkhauser, Boston, MA, 1997): "O princípio da máxima entropia é uma das batatas quentes de nossos dias. Ele ainda não rompeu o mundo da estatística como fez a Lei de Bayes, mas ninguém ainda saiu-se bem em encontrar uma justificativa para ele. Talvez nós devamos fazer dele um dos axiomas da estatística".

Posteriormente, deparamo-nos com o trabalho de Zubko et al. (2004), o qual formalizava melhor o trabalho que queríamos desenvolver, e apresentava ferramentas que pareciam ser mais robustas e melhor documentadas que o MEM. Os autores utilizavam o chamado Método da Regularização de Tikhonov (MRT), um método matemático bem estabelecido e desenvolvido para resolver equações integrais de Fredholm de primeiro tipo, mal-condicionadas; justamente o tipo de problema que teríamos de enfrentar para calcular a distribuição de tamanho de grãos.

O Método da Regularização de Tikhonov (MRT) possui algumas vantagens sobre o MEM: além de precisar de um mínimo de "input" de informação, ele não assume uma forma paramétrica para a solução, ao contrário do que ocorre no MEM. Isso faz com que os resultados do MEM possuam mais "BIAS" que o MRT. Além disso, no MRT não precisamos escolher um valor para o parâmetro de "cutoff" que regula a largura da distribuição de tamanho de grão, o que acontece no MEM.

As vantagens mencionadas acima, aliadas ao fato de que o MRT possui uma documentação muito mais expressiva e detalhada que o MEM nos fizeram optar por uma mudança drástica na maneira de se calcular a distribuição de tamanho de grãos.

O problema de cálculo da distribuição de tamanho de grãos pode ser formalizado da seguinte maneira:

Seja  $f_i(a)da$  a função distribuição de tamanho do grão,  $\tau(\lambda)$  a extinção média por comprimento de onda,  $N_H$  a densidade colunar de hidrogênio na linha de visada e  $Q_{ext}(\lambda, a)$  a eficiência de absorção do grão de raio a no comprimento de onda  $\lambda$ . Temos que:

$$\frac{\tau(\lambda)}{N_H} = \sum_{i=1}^n \int [\pi a^2 Q_{ext}(\lambda, a)] f_i(a) da$$
$$\equiv \sum_{i=1}^n \int K(\lambda, a) f_i(a) da, \tag{A.1}$$

onde  $K(\lambda, a)$  é chamado de kernel da equação integral.

A equação (1) é uma equação integral de Fredholm de primeiro tipo, e sua solução é um típico problema inverso mal-condicionado.

Na abordagem da regularização, prova-se rigorosamente que resolver a equação (1) é equivalente a minimizar o seguinte funcional suavizador (Zubko 1997, Zubko et al. 2004):

$$\Psi[F^{(\alpha)}(a)] = \Phi_d[F^{(\alpha)}(a)] + \alpha \Phi_s[F^{\alpha}(a)], \qquad (A.2)$$

onde as duas partes são (I) o funcional de discrepância,

$$\Phi_d[F^{(\alpha)}(a)] = \frac{1}{n_D} \sum_{j=1}^{n_D} \left[ \frac{\int K(x_j, a) F^{(\alpha)}(a) da - D(x_j)}{w(x_j)} \right]^2,$$
(A.3)

e (II) o funcional estabilizante de Tikhonov, também chamado de estabilizador,

$$\Phi_s[F^{(\alpha)}(a)] = \int [F^{(\alpha)}(a)]^2 + \beta [dF^{(\alpha)}(a)/da]^2 da.$$
(A.4)

Temos que  $D(x_j)$  são os vínculos observacionais (no nosso caso,  $\tau(\lambda)$ ),  $\alpha$  é um parâmetro de regularização ( $\alpha \ge 0$ ),  $\beta$  é um parâmetro de ajuste dimensional ( $\beta \ge 0$ ), w(x) é a função peso e  $n_D$  é o número de dados a serem ajustados.

A solução é dada por  $F^{(\alpha)}$  que minimiza iterativamente  $\Psi$  para um  $\alpha$  que satisfaz a regra de discrepância:

$$\Phi_d[F^{(\alpha)}(a)] = \Phi_d[F^{(\alpha=0)}(a)] + \frac{1}{n_D} \sum_{j=1}^{n_D} \left[\frac{\sigma(x_j)}{w(x_j)}\right]^2,$$
(A.5)

onde  $\sigma(x_j)$  é a incerteza sobre  $D(x_j)$ .

Como parte da resolução do problema de se encontrar o valor de  $\alpha$  que minimiza o funcional suavizador (equação 2), implementamos duas rotinas para lidar com o cálculo de matrizes e a resolução de sistema de equações lineares: o Método dos Gradientes Conjugados, cujo código nós elaboramos a partir de indicações da literatura, e a Decomposição em Valores Singulares de uma matriz (SVD em inglês), sendo que esta última subrotina foi retirada de Numerical Recipes in Fortran 77

#### (http://library.lanl.gov/numerical/bookfpdf.html).

A decomposição de uma matriz em valores singulares é uma técnica muito útil. Com ela é possível analisarmos o grau de singularidade de uma matriz e, em alguns casos, até mesmo calcular a matriz inversa para uma matriz cujo determinante está muito próximo de zero. Ela também é o ponto de partida para a construção de inversas para matrizes de determinante igual a zero, as chamadas "pseudo-inversas".

Um exemplo bastante ilustrativo da força d o método da Decomposição em Valores Singulares pode ser visto na Figura A.1



**Figura A.1** Duas soluções numéricas para uma discretização  $64 \times 64$  de um problema inverso, uma Equação Integral de Fredholm de Primeiro Tipo na forma Ax = B. A parte esquerda mostra a solução calculada por meio do Método de Eliminação Gaussiana com Pivoteamento Parcial. A parte direita mostra a solução através do Método de Decomposição em Valores Singulares Truncada (TSVD, em inglês), juntamente com a solução exata (linha tracejada).

Após alguns percalços e comportamentos erráticos por parte de nosso programa, descobrimos que o algorítmo que utilizamos para calcular a Decomposição em Valores Singulares de uma matriz estava incorreta e/ou era inadequada para resolver o nosso problema. Simplesmente a tal subrotina não conseguia fazer o que era descrito no livro.

Após algumas buscas e testes razoavelmente exaustivos, conseguimos encontrar um conjunto de rotinas que conseguia decompor a matriz com que trabalhávamos em valores singulares. As rotinas pertenciam ao **Projeto LAPACK (Linear Algebra PACKage)**, uma livraria de subrotinas numéricas de álgebra linear elaboradas para alta performance em workstations, computadores vetoriais e multiprocessadores com memória compartilhada.

As subrotinas do LAPACK foram desenvolvidas para resolver sistemas de equações lineares simultâneas, soluções em mínimos quadrados de sistemas de equações lineares, problemas de auto-valores e problemas de valores singulares.

O que fizemos foi adicionar as subrotinas que necessitávamos do projeto LAPACK e compatibilizá-las com a estrutura geral do algorítmo que estávamos construindo. Com isso, nosso programa ganhou a adição de cerca de 20.000 (vinte mil) linhas de código. Também fizemos alterações na maneira pela qual calculamos o valor de  $\alpha$  e no número de linhas de nossa matriz kernel. O algorítmo final que empregamos para resolver o problema é melhor descrito como se segue:

Seja  $f_i(a)da$  a função distribuição de tamanho do grão,  $\tau(\lambda)$  a extinção média por comprimento de onda,  $N_H$  a densidade colunar de hidrogênio na linha de visada e  $Q_{ext}(\lambda, a)$  a eficiência de absorção do grão de raio a no comprimento de onda  $\lambda$ . Temos que:

$$\frac{\tau(\lambda)}{N_H} = \sum_{i=1}^n \int [\pi a^2 Q_{ext}(\lambda, a)] f_i(a) da$$
$$\equiv \sum_{i=1}^n \int K(\lambda, a) f_i(a) da, \tag{A.6}$$

onde  $K(\lambda, a)$  é chamado de kernel da equação integral.

A equação (1) é uma equação integral de Fredholm de primeiro tipo, e sua solução é um típico problema inverso mal-condicionado.

Na abordagem da regularização, prova-se rigorosamente que resolver a equação (1) é equivalente a minimizar o seguinte funcional suavizador (Zubko 1997, Zubko et al. 2004):

$$\Psi[F^{(\alpha)}(a)] = \Phi_d[F^{(\alpha)}(a)] + \alpha \Phi_s[F^{\alpha}(a)], \qquad (A.7)$$

onde as duas partes são (I) o funcional de discrepância,

$$\Phi_d[F^{(\alpha)}(a)] = \frac{1}{n_D} \sum_{j=1}^{n_D} \left[ \frac{\int K(x_j, a) F^{(\alpha)}(a) da - D(x_j)}{w(x_j)} \right]^2,$$
(A.8)

e (II) o funcional estabilizante de Tikhonov, também chamado de estabilizador,

$$\Phi_s[F^{(\alpha)}(a)] = \int [F^{(\alpha)}(a)]^2 + \beta [dF^{(\alpha)}(a)/da]^2 da.$$
(A.9)

Temos que  $D(x_j)$  são os vínculos observacionais (no nosso caso,  $\tau(\lambda)$ ),  $\alpha$  é um parâmetro de regularização ( $\alpha \ge 0$ ),  $\beta$  é um parâmetro de ajuste dimensional ( $\beta \ge 0$ ), w(x) é a função peso e  $n_D$  é o número de dados a serem ajustados.

A solução é dada por  $F^{(\alpha)}$  que minimiza iterativamente  $\Psi$  para um  $\alpha$  que satisfaz a regra de discrepância:

$$\Phi_d[F^{(\alpha)}(a)] = \Phi_d[F^{(\alpha=0)}(a)] + \frac{1}{n_D} \sum_{j=1}^{n_D} \left[\frac{\sigma(x_j)}{w(x_j)}\right]^2,$$
(A.10)

onde  $\sigma(x_j)$  é a incerteza sobre  $D(x_j)$ .

#### A.1. CRITÉRIO DE REGULARIZAÇÃO: CÁLCULO DE $\alpha$

A resolução de sistemas lineares mal-condicionados e problemas de mínimos quadrados lineares é uma tarefa frequente em análise numérica. Vamos considerar o sistema linear superdeterminado

$$b = Ax + e, \tag{A.11}$$

onde A é uma matrix  $m_X n$  (no nosso caso, m=725 linhas representando 725 comprimentos de onda diferentes, enquanto que n=150 representa o número de raios de grãos que utilizaremos: 68 silicatos, 68 grafites e 14 PAHs), com  $m \ge n$ , **b** (curva de extinção observacional) e **e** (erro ou ruído) são vetores de tamanho m, e **x** (número de grãos por intervalo de raio) é um vetor de tamanho n. A matriz A e o vetor **b** são conhecidos, e **e** é assumido como sendo um ruído aleatório.

No vetor **e** nós incluimos como ruído as incertezas sobre a curva de extinção e uma estimativa do erro ao se discretizar uma integral.

De acordo com Golub & von Matt (1997), o Método de Gfrerer-Rauss determina  $\alpha$  tal que

$$\phi_{GR}(\alpha) := \alpha^3 \mathbf{b}^T (AA^T + \alpha I)^{-3} \mathbf{b} = ||\mathbf{e}||_2.$$
(A.12)

A primeira derivada de  $\phi_{GR}(\alpha)$  é dada por

$$\phi_{GR}'(\alpha) := 3\alpha^2 \mathbf{b}^T A (A^T A + \alpha I)^{-4} A^T \mathbf{b}.$$
(A.13)

Como tínhamos uma função de  $\alpha$  e sua primeira derivada, seria muito fácil aplicar o Método de Newton-Raphson para obter iterativamente qual o valor de  $\alpha$ . Foi isso que fizemos, só que os resultados que obtivemos não faziam sentido: as iterações pareciam fugir do resultado verdadeiro, isso quando não havia um problema de convergência no cálculo da inversa das matrizes...

Posteriormente, percebemos que a equação que definia a derivada estava incorreta. Sua forma real seria:

$$\phi_{GR}'(\alpha) := 3\alpha^2 \mathbf{b}^T (AA^T + \alpha I)^{-3} \mathbf{b} - 3\alpha^3 \mathbf{b}^T (AA^T + \alpha I)^{-4} \mathbf{b}.$$
 (A.14)

Ainda restava o problema de se encontrar um critério de parada adequado para o cálculo de  $\alpha$ . Fazer com que os resíduos no Método de Newton-Raphson ficassem cada vez menores não seria adequado. Por isso empregamos o Princípio da Discrepância de Morozov. Ele estabelece que o valor de  $\alpha$  é escolhido de tal forma que a norma do residual  $\mathbf{b} - A\mathbf{x}_{\alpha}$  iguala a norma do termo do erro:

$$||\mathbf{b} - A(A^T A + \alpha I)^{-1} A^T \mathbf{b}||_2 = ||\mathbf{e}||_2.$$
(A.15)

Portanto, nosso critério de parada no Método de Newton-Raphson vai ser dado pela equação acima. Apesar dos percalços, agora somos realmente capazes de calcular qual o melhor valor de  $\alpha$  que regulariza o problema que queremos tratar, ainda que de uma maneira um tanto grosseira.

## Apêndice B

# PARÂMETROS DAS CURVAS DE EXTINÇÃO OBSERVACIONAIS

Um dos ingredientes básicos para o cálculo da distribuição de tamanho de grãos é a curva de extinção que deveremos usar como padrão para o ajuste de nosso modelo de poeira. Precisamos de uma boa amostra de curvas de extinção calculadas para estrelas em vários ambientes e com diferentes níveis de avermelhamento. Para tanto, utilizamo-nos do trabalho de Gordon et al. (2003), os quais estimaram as curvas para 45 estrelas na Pequena e Grande Nuvem de Magalhães.

Essas estrelas possuíam diferentes níveis de avermelhamento, sendo que a forma da curva de extinção foi representada segundo a parametrização de Fitzpatrick & Massa (1990):

$$E(x-V)/E(B-V) = C_1 + C_2 x + C_3 D(x, \gamma, x_0) + C_4 F(x),$$
(B.1)

onde  $x = \lambda^{-1}$ ,

$$D(x,\gamma,x_0) = \frac{x^2}{(x^2 - x_0^2)^2 + x^2\gamma^2},$$
(B.2)

$$F(x) = 0.5392(x - 5.9)^2 + 0.05644(x - 5.9)^3$$
(B.3)

para  $x \ge 5.9 e F(x) = 0$  para x < 5.9.

Todos os parâmetros utilizados são mostrados no artigo de Gordon et al. (2003) com os seus respectivos erros. Portanto também temos que calcular a propagação desses erros.

Sejam as seguintes relações:

$$A_1(C_1, C_2, C_3, C_4, x_0, \gamma) = C_1 + C_2 x + C_3 D(x, \gamma, x_0) + C_4 F(x),$$
(B.4)

$$A(\lambda) = \frac{A_1(\lambda)}{R_V} A_V + A_V.$$
(B.5)

Calculando a propagação dos erros teremos:

$$(\sigma_{A_1(\lambda)})^2 = C_3^2 \left[ \left( \frac{4x_0 x^2 (x^2 - x_0^2)}{[(x^2 - x_0^2)^2 + x^2 \gamma^2]^2} \right)^2 \sigma_{x_0}^2 + \left( \frac{-2x^4 \gamma}{[(x^2 - x_0^2)^2 + x^2 \gamma^2]^2} \right)^2 (\sigma_{\gamma})^2 \right] + (\sigma_{c_1})^2 + x^2 (\sigma_{c_2})^2 + F^2(x) (\sigma_{c_4})^2 + D^2(x, \gamma, x_0) (\sigma_{c_3})^2$$
(B.6)

$$(\sigma_{A(\lambda)}) = \left[ \left( \frac{A_V}{R_V} \right)^2 \sigma_{A_1}^2 + \left( \frac{A_1 A_V}{R_V^2} \right)^2 \sigma_{R_V}^2 + \left( \frac{A_1}{R_V} + 1 \right)^2 \sigma_{A_V}^2 \right]^{1/2}$$
(B.7)

A Figura B.1 nos mostra um tipo de curva de extinção que utilizaremos para tentar calcular a distribuição de tamanho de grãos. Ela foi ajustada em acordo com os parâmetros de Fitizpatick & Massa encontrados no artigo de Gordon et al. (2003). Os erros foram calculados de acordo com as equações B.6 e B.7.

Todas as curvas apresentadas no trabalho de Gordon e colaboradores estão limitadas a uma faixa de frequência que vai desde 2.198  $\mu m$  até 1160 Å . Mas ainda necessitamos de curvas de extinção confiáveis para baixos comprimentos de onda (abaixo de 1200 Ås), no ultravioleta. Esta região vai ter grande peso na determinação da distribuição de tamanho dos PAHs, e por isso nossa urgência em empregá-las nos nossos modelos.

Felizmente encontramos um artigo que pode nos ajudar a determinar mais adequadamente o impacto dos PAHs sobre a curva de extinção de nosso modelo. Trata-se do trabalho de Sasseen et al. (2002), onde eles calcularam uma curva de extinção média no ultravioleta distante (FUV), na região que vai desde 900 Å até 1200 Å. Esta curva complementa os dados que já dispomos de Gordon e colaboradores, e com isso vamos poder analisar uma região onde a contribuição dos PAHs supera em muito a dos outros componentes de nosso modelo de poeira.



**Figura B.1** Curva de extinção com as incertezas associadas para uma estrela localizada na Grande Nuvem de Magalhães. Apesar de possuir Rv típico do Meio Interestelar Difuso, a estrela é fortemente avermelhada (Gordon et al. 2003).

# Livros Grátis

(<u>http://www.livrosgratis.com.br</u>)

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração Baixar livros de Agronomia Baixar livros de Arquitetura Baixar livros de Artes Baixar livros de Astronomia Baixar livros de Biologia Geral Baixar livros de Ciência da Computação Baixar livros de Ciência da Informação Baixar livros de Ciência Política Baixar livros de Ciências da Saúde Baixar livros de Comunicação Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE Baixar livros de Defesa civil Baixar livros de Direito Baixar livros de Direitos humanos Baixar livros de Economia Baixar livros de Economia Doméstica Baixar livros de Educação Baixar livros de Educação - Trânsito Baixar livros de Educação Física Baixar livros de Engenharia Aeroespacial Baixar livros de Farmácia Baixar livros de Filosofia Baixar livros de Física Baixar livros de Geociências Baixar livros de Geografia Baixar livros de História Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura Baixar livros de Literatura de Cordel Baixar livros de Literatura Infantil Baixar livros de Matemática Baixar livros de Medicina Baixar livros de Medicina Veterinária Baixar livros de Meio Ambiente Baixar livros de Meteorologia Baixar Monografias e TCC Baixar livros Multidisciplinar Baixar livros de Música Baixar livros de Psicologia Baixar livros de Química Baixar livros de Saúde Coletiva Baixar livros de Servico Social Baixar livros de Sociologia Baixar livros de Teologia Baixar livros de Trabalho Baixar livros de Turismo