

MODELAGEM COMPUTACIONAL DE HIDROCARBONETOS AROMÁTICOS POLICÍCLICOS EM NEBULOSAS PLANETÁRIAS

Julia Fischer¹, Dinalva A. Sales², Carla Canelo³, Isabel Aleman⁴, Stavros Akras⁵,
Juliano Marangoni⁶

¹Universidade Federal do Rio Grande - FURG, juh.fischer@gmail.com;

²Universidade Federal do Rio Grande - FURG, dsales@furg.br;

³Grupo de Pesquisa INOVENTER - FURG, camcanelo@gmail.com;

⁴Universidade Federal de Itajubá - UNIFEI, bebel.aleman@gmail.com;

⁵National Observatory of Athens - NOA, stavrosakras@gmail.com;

⁶Universidade Federal do Rio Grande - FURG, julianomarangoni@furg.br.

RESUMO: Nebulosas Planetárias são objetos extremamente importantes por enriquecerem o meio interestelar com diversos elementos produzidos por sua nucleossíntese, e contribuir com a evolução química das galáxias. Com isso, temos a formação de moléculas de Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (PAHs), que são as moléculas orgânicas mais abundantes no espaço e em ambientes astrofísicos relacionados com gás, poeira e iluminação por fótons ultravioleta, detalhadamente estudadas pelo seu grande potencial para formar moléculas prebióticas. Neste trabalho foram utilizados dados de fluxos e propriedades obtidos a partir do espectro infravermelho de uma amostra de 145 nebulosas, que receberam tratamento e análise estatística multivariada para redução dos dados e aplicação da correlação de Spearman para montagem de diagramas diagnósticos com os maiores coeficientes, possibilitando a caracterização física e química das moléculas presentes nesses ambientes, reconhecendo a colaboração destes objetos na formação e avanço dessas moléculas. A partir disto é possível observar um maior potencial de ionização molecular em nebulosas com raios maiores, além de evidenciar que nebulosas com raio menor possuem maior emissão luminosa no infravermelho (IR), sendo essa emissão predominantemente de moléculas pequenas de PAHs.

Palavras-chave: Nebulosas Planetárias; PAHs; Astroquímica; Astrobiologia.

1. INTRODUÇÃO

Quando estrelas de baixa e média massa (0,8 a 8 massas solares) chegam aos seus últimos estágios evolutivos, elas expulsam suas camadas mais externas e permanece apenas um núcleo estelar quente e compacto que ionizará essa matéria ejetada, formando um envoltório de plasma. Esse estágio é chamado de Nebulosa Planetária (NP) e é muito importante por enriquecer o meio interestelar com os elementos formados durante os processos de nucleossíntese da estrela. Essa matéria se resfriará e se misturará com o meio, cumprindo um papel importante na evolução química das galáxias.

Essa nuvem gasosa circunstelar possui material ionizado, mas também grande quantidade de material neutro e molecular. Esse material, produz, por exemplo, linhas de emissão intensas detectadas no infravermelho médio nos comprimentos de 3.3, 6.2, 7.7, 8.6 e 11.2 μm (LI, 2004; SALES *et al.*, 2010, 2013; RUSCHEL-DUTRA *et al.*, 2014), que podem representar até 50% da luminosidade nessa faixa espectral

e foram objeto de intensas investigações desde sua primeira observação em NPs, na década de 1970 (GILLET *et al.*, 1973). Essas bandas foram atribuídas às moléculas de Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (PAHs) e tem grande importância no estudo da Astroquímica e Astrobiologia pelo seu potencial para formar moléculas prebióticas (CANELO *et al.*, 2018, e referências ali contidas).

O estudo de PAHs em ambientes astrofísicos como as NPs pode trazer respostas sobre a trajetória evolutiva dessas moléculas e a enorme contribuição que esses objetos tiveram na sua formação. O presente trabalho se aproxima dessas respostas através da busca por correlações entre algumas propriedades das NPs e o comportamento físico e químico de suas moléculas de PAHs.

2. METODOLOGIA

Para as análises foram utilizados dados observacionais de 145 nebulosas obtidos com o Telescópio Espacial Spitzer descritos a seguir. Foram também utilizadas algumas propriedades da amostra selecionada, publicada em (STANGHELLINI *et al.*, 2010, 2012). As propriedades utilizadas são: luminosidade total no infravermelho (LIR), distância ao centro galáctico (R_{Gal}), raio da nebulosa (R), temperatura da poeira (T_{dust}), densidade eletrônica (N), classe de excitação (EC) e temperatura da estrela central (T^{*}).

2.1. Tratamento de dados observacionais

Este trabalho utiliza dados de espectros de baixa resolução ($R \sim 60 - 127$) coletados pelo espectrógrafo infravermelho (IRS) (HOUCK *et al.*, 2004), e que foram observados pelo telescópio espacial Spitzer (WERNER *et al.*, 2004). Eles foram reduzidos e são distribuídos publicamente no catálogo CASSIS (LEBOUTEILLER *et al.*, 2011).

Com os espectros em mãos, utilizamos a ferramenta PAHFIT (SMITH *et al.*, 2007) para decompor esses espectros do IRS e determinar os fluxos de interesse, separando a emissão do contínuo estelar e térmico, além da absorção de silicato e as linhas de emissão iônicas e moleculares.

A partir dos fluxos das bandas iônicas e moleculares de interesse, são calculadas as razões, que podem descrever características físico-químicas dessas moléculas. As razões utilizadas aqui são de $11.3\mu\text{m}/7.7\mu\text{m}$, para determinar o potencial de ionização das moléculas de PAHs, já que a banda de $11.3\mu\text{m}$ é predominantemente emitida por moléculas neutras, e $7.7\mu\text{m}$ por moléculas ionizadas (BAUSCHLICHER *et al.*, 2008). Também é usada a razão de $6.2\mu\text{m}/7.7\mu\text{m}$, que reflete o tamanho das

moléculas emissoras, já que $6.2\mu\text{m}$ é uma banda característica de moléculas menores (n° de átomos de carbono < 180). Além dessas, calculamos a razão das linhas iônicas de $[\text{NeIII}]/[\text{NeII}]$, que reflete a dureza do campo de radiação local (THORNLEY *et al.*, 2000).

2.2. Análise estatística

O primeiro passo na análise dos dados foi conferir a normalidade bivariada, para tentar trabalhar com uma correlação linear. Para isso foi aplicado o teste de normalidade univariado Shapiro-Wilk em todas as variáveis, e os testes Mardia, Doornik-Hansen, Royston e Henze-Zirkler de normalidade bivariada.

Os únicos dados que mostraram normalidade no teste Shapiro-Wilk foram os dados da razão $[\text{NeIII}]/[\text{NeII}]$ e da densidade eletrônica (N), com p valores de 0.5451 e 0.5745, respectivamente. Porém nenhuma combinação entre as variáveis apresentou um bom resultado nos testes de normalidade bivariada, além de apresentarem alguns valores atípicos. Por isso optou-se por construir uma matriz de correlação pelo método não paramétrico de Spearman, que mede a dependência entre as variáveis através de uma função monotética, buscando prioritariamente relações não lineares. A matriz apresenta valores mais próximos dos extremos 1 e -1 quando houver uma forte correlação, sendo valores positivos uma correlação direta e valores negativos uma correlação inversa.

Depois da construção da matriz, foram selecionados os valores mais altos encontrados de correlação entre as propriedades e foram construídos diagramas de dispersão para melhor visualização e interpretação dos resultados.

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A figura 1 apresenta a matriz de correlação construída pelo método Spearman a partir das propriedades calculadas para a amostra de NPs. Com ela conseguimos observar alguns valores altos, tanto positivos quanto negativos, que podem indicar alguma correlação importante. Vamos discutir aqui os coeficientes de correlação superiores ou iguais a 0.50, que sugerem que os dados têm uma correlação de aproximadamente 50%.

O primeiro coeficiente de interesse é o de 0.66, entre a variável de temperatura da estrela central da nebulosa (T^*) e a classe de excitação (EC), que indica que as duas aumentam juntas, ou seja nebulosas com estrelas centrais mais quentes tem uma classe de excitação maior e vice versa. Essa correlação é conhecida pois as classes de excitação são definidas utilizando as linhas mais fortes do espectro nebuloso,

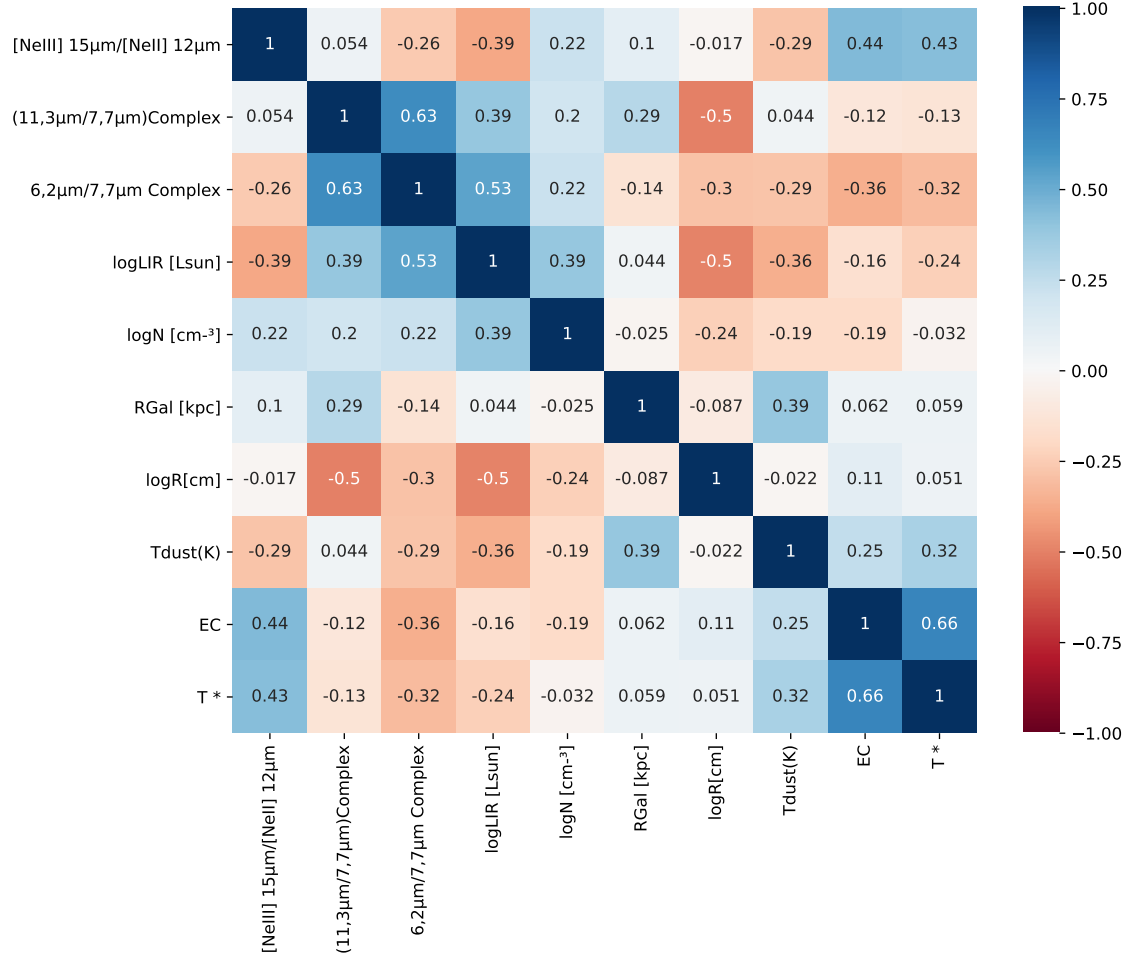


Figura 1. Matriz de Correlação.
Fonte: Autor.

linhas que dependem da temperatura da estrela central desses objetos (MARTINS *et al.*, 2002).

Depois podemos avaliar o coeficiente de 0.63, entre as razões $11.3\mu\text{m}/7.7\mu\text{m}$ e $6.2\mu\text{m}/7.7\mu\text{m}$, que sugere uma correlação alta e positiva entre as variáveis. Isso indica que o grau de ionização das moléculas diminui quando as moléculas menores de PAHs dominam essa emissão.

O próximo índice que chama a atenção é o de 0.53 entre a luminosidade no infravermelho (LIR) e a razão $6.2\mu\text{m}/7.7\mu\text{m}$, que pode indicar uma relação entre a predominância de emissão de moléculas pequenas e uma alta luminosidade no IR.

Temos dois coeficientes de -0.5, em que vemos uma correlação inversa entre variáveis, uma entre o raio das nebulosas (R) e a razão $11.3\mu\text{m}/7.7\mu\text{m}$ e outra entre o raio (R) e a luminosidade emitida (LIR). A primeira indica que quando temos nebulosas com raios maiores na amostra as moléculas de PAHs tem um maior potencial de ionização, ou seja a emissão recebida pertence mais a moléculas em sua maioria ionizadas, enquanto com raios menores as moléculas estão mais neutras. Já essa segunda correlação revela que o raio também está correlacionado a luminosidade

no infravermelho emitida pelas nebulosas, mas inversamente, no caso as nebulosas menores emitiriam mais no IR e as maiores emitiriam menos.

Para confirmar visualmente esse comportamento dos dados, foram construídos os gráficos de dispersão entre as variáveis que melhor se correlacionaram, com os histogramas das variáveis na diagonal principal para entender melhor os casos abordados, como podem ser vistos na figura 2.

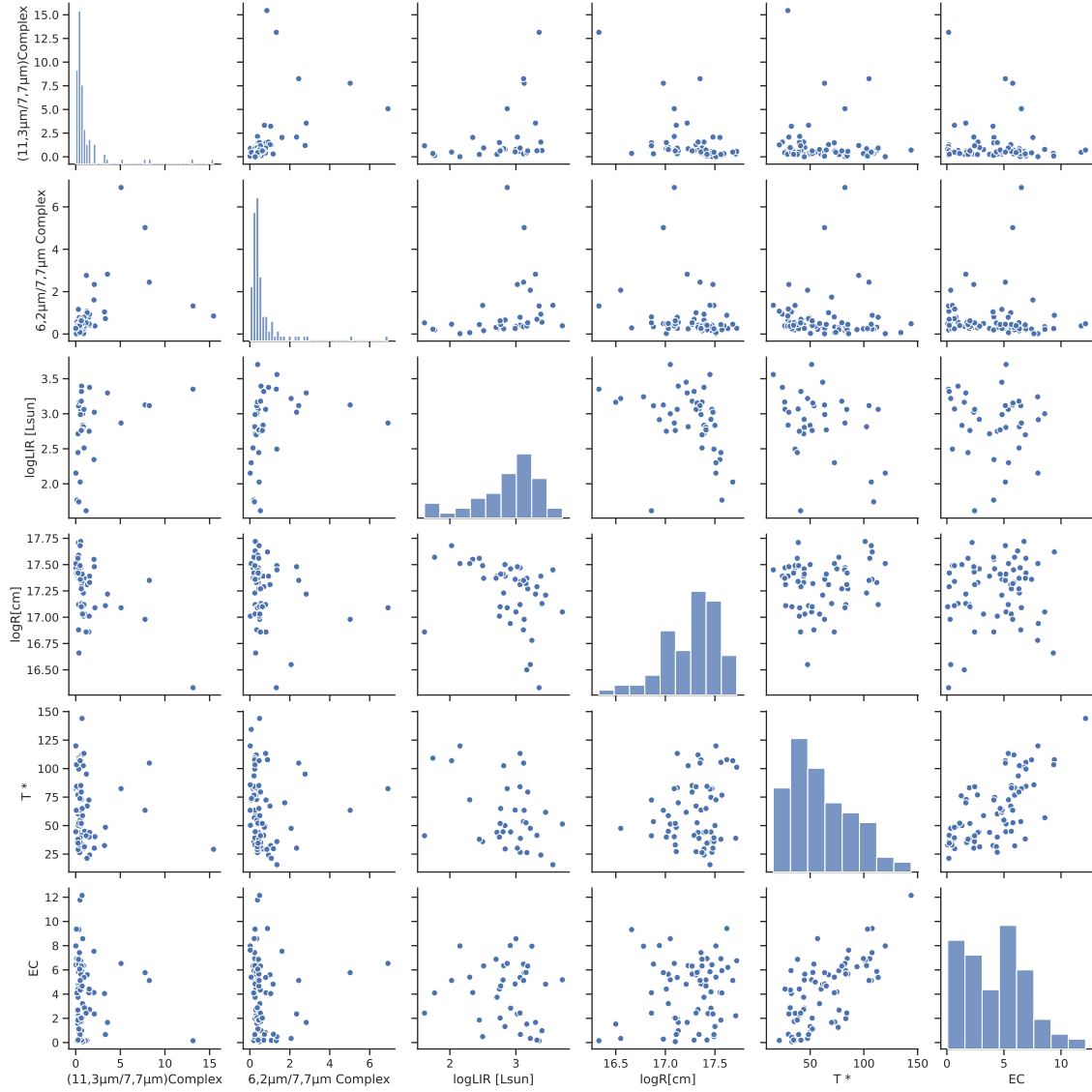


Figura 2. Gráficos de dispersão e histograma das variáveis.

Fonte: Autor.

4. CONCLUSÕES

Para explorar a correlação entre dados astronômicos é importante estudar e entender o comportamento individual deles, reduzindo as possibilidades de estimar uma caracterização errada para esses objetos. Com as análises realizadas aqui, pôde-se caracterizar e reconhecer valores significativos de correlação entre algumas

propriedades das NPs e as moléculas de PAHs.

Nossa análise mostra uma tendência entre valores da classe de excitação, temperatura da estrela central e o raio da nebulosa se correlacionarem positivamente, assim como as razões das moléculas de PAHs e alguns dados como o raio da nebulosa e luminosidade se relacionarem inversamente e ainda sugerirem uma relação exponencial.

Este trabalho possibilitou a interpretação de alguns dados iniciais, mas ainda planeja-se investigar melhor os resultados, e unir as análises estatísticas feitas para interpretações mais completas, que descrevam melhor a evolução dos PAHs nesses ambientes. Outros índices observados aqui ainda vão ser avaliados e explorados, adicionando dados das características químicas da poeira e das morfologias das nebulosas, aprimorando essa análise.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul (FAPERGS) por fomentarem essa pesquisa.

REFERÊNCIAS

- Bauschlicher Jr, C. W., Peeters, E., Allamandola, L. J. “The infrared spectra of very large, compact, highly symmetric, polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs)”. Em: **The Astrophysical Journal** 678 (2008), pp. 316. DOI: 10.1086/533424.
- Canelo, C. M., Friaça, A. C., Sales, D. A., Pastoriza, M. G., Ruschel-Dutra, D. “Variations in the 6.2 μm emission profile in starburst-dominated galaxies: a signature of polycyclic aromatic nitrogen heterocycles (PANHs)?”. Em: **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society** 475.3 (2018), pp. 3746-3763. DOI: 10.1093/mnras/stx3351.
- Gillet, F. C., Forrest, W. J., Merrill, K. M. “8-13-micron spectra of NGC 7027, BD+30 3639, and NGC 6572”. Em: **The Astrophysical Journal** 183 (1973), pp. 87-93.
- Houck, J. R., Roellig, T. L., Van Cleve, J., Forrest, W. J., Herter, T., Lawrence, C. R., Teplitz, H. I. The infrared spectrograph*(IRS) on the Spitzer space telescope. Em: **The Astrophysical Journal Supplement Series** 154 (2004), pp. 18. DOI: 10.1086/423134
- Lebouteiller, V., Barry, D. J., Spoon, H. W. W., Bernard-Salas, J., Sloan, G. C., Houck, J. R., Weedman, D. W. “CASSIS: the cornell atlas of spitzer/infrared spectrograph sources”. Em: **The Astrophysical Journal Supplement Series** 196 (2011), pp. 8. DOI: 10.1088/0067-0049/196/1/8
- Li A., “Interaction of Nanoparticles with Radiation”. Em: **ASP Conference Series Astrophysics of Dust** 309 (2004), pp. 417.

- Martins, L. P., Viegas, S. M. “Gas temperature and excitation classes in planetary nebulae”. Em: **Astronomy and Astrophysics** 387.3 (2002), pp. 1074-1082. DOI: 10.1051/0004-6361:20020469
- Ruschel-Dutra, D., Pastoriza, M., Riffel, R., Sales, D. A., Winge, C. “A mid-IR comparative analysis of the Seyfert galaxies NGC 7213 and NGC 1386”. Em: **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society** 438.4 (2014), pp. 3434-3442. DOI: 10.1093/mnras/stt2448
- Sales, D. A., Pastoriza, M. G., Riffel, R. “Polycyclic aromatic hydrocarbon and emission line ratios in active galactic nuclei and starburst galaxies”. Em: **The Astrophysical Journal** 725 (2010), pp. 605. DOI: 10.1088/0004-637X/725/1/605
- Sales, D. A., Pastoriza, M. G., Riffel, R., Winge, C. “Polycyclic aromatic hydrocarbon in the central region of the Seyfert 2 galaxy NGC 1808”. Em: **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society** 429.3 (2013), pp. 2634-2642. DOI: 10.1093/mnras/sts542
- Smith, J. D. T., Draine, B. T., Dale, D. A., Moustakas, J., Kennicutt Jr, R. C., Helou, G., Walter, F. “The mid-infrared spectrum of star-forming galaxies: global properties of polycyclic aromatic hydrocarbon emission”. Em: **The Astrophysical Journal** 656.2 (2007), pp. 770. DOI: 10.1086/510549
- Stanghellini, L., Haywood, M. “The galactic structure and chemical evolution traced by the population of planetary nebulae”. Em: **The Astrophysical Journal** 714.2 (2010), pp. 1096. DOI: 10.1088/0004-637X/714/2/1096
- Stanghellini, L., García-Hernández, D. A., García-Lario, P., Davies, J. E., Shaw, R. A., Villaver, E., Perea-Calderón, J. V. “The nature of dust in compact Galactic planetary nebulae from Spitzer spectra”. Em: **The Astrophysical Journal** 753.2 (2012), pp. 172. DOI: 10.1088/0004-637X/753/2/172
- Thornley, M. D., Schreiber, N. M. F., Lutz, D., Genzel, R., Spoon, H. W., Kunze, D., Sternberg, A. “Massive star formation and evolution in starburst galaxies: mid-infrared spectroscopy with the ISO Short Wavelength Spectrometer”. Em: **The Astrophysical Journal** 539.2 (2000), pp. 641. DOI: 10.1086/309261
- Werner, M. W., Roellig, T. L., Low, F. J., Rieke, G. H., Rieke, M., Hoffmann, W. F., Cruikshank, D. P. “The Spitzer space telescope mission”. Em: **The Astrophysical Journal Supplement Series** 154 (2004), pp. 1. DOI: 10.1086/422992