

AstroBioQuímica em ambientes inóspitos: estudo de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos em galáxias ativas

Dinalva A. Sales e Carla M. Canelo

Universidade Federal do Rio Grande

Resumo

Galáxias ativas (AGN) são aquelas em que buracos negros supermassivos (SMBHs) em seus núcleos estão capturando matéria através de um disco de acreção. Dentro do paradigma dos AGNs, um ponto ainda em debate é o do surgimento dessa atividade, desde qual o mecanismo que a provoca até como isso afeta a poeira e as moléculas nas galáxias. Para avançar nossos conhecimentos nesta questão, é preciso a realização de estudos sobre a origem e a alimentação dos SMBHs em AGNs através das emissões moleculares em galáxias, como em galáxias Megamaser de hidroxila (OHMGs), Seyfert e Starburst. Este trabalho mostra que, em AGNs, moléculas orgânicas de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (PAHs) são maiores (> 180 átomos de carbono) do que em galáxias com região de formação estelar. Este fato implica que PAHs sobrevivem às intensas radiações e evoluem ao longo da evolução do Universo, em que vão crescendo e incorporando nitrogênios. Esses heterociclos policíclicos aromáticos nitrogenados (PANHs), que podem variar a emissão da banda de PAH em 6.2 μm , podem fornecer o elo perdido entre a bioquímica dos PAHs, vistos no gás e poeira das galáxias, e as nucleobases que constituem o maquinário codificador da vida na Terra.

Abstract

Active galaxies (AGNs) are those in which supermassive black-holes (SMBHs) in their core are capturing matter through an accretion disk. Within the paradigm of AGNs, a point still under debate originates this activity, from what mechanism causes it to how does it affect dust and molecules in galaxies. In order to advance our knowledge in this question, one must conduct studies on the origin and feeding of SMBHs in AGNs through molecular emissions in galaxies, such as OH Megamaser galaxies (OHMGs), Seyfert and Starburst galaxies. This work shows that, in AGNs, organic molecules of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) are larger (>180 carbon atoms) than in galaxies with star formation region. This fact implies that PAHs survive the intense radiation and evolve throughout the evolution of the universe, where they grow and incorporate nitrogen. These polycyclic aromatic nitrogen heterocycles (PANHs), which can vary the PAH band emission at 6.2 μm , can provide the missing link between the biochemistry of PAHs, seen in the gas and dust of galaxies, and the nucleobases that constitute the coding machinery of life on Earth.

Palavras-chave: astronomia extragaláctica, astrobiologia, astroquímica, núcleo ativo de galáxias.

Keywords: extragalactic astronomy, astrobiology, astrochemistry, active galactic nuclei.

DOI: [10.47456/Cad.Astro.v3n2.38711](https://doi.org/10.47456/Cad.Astro.v3n2.38711)

1 Introdução

Considerando-se a classe de macromoléculas e sua relevância no estudo do Universo, os hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (PAHs) representam um arranjo efetivo que pode acumular cerca de 15% do carbono no meio interestelar (ISM), sendo o material orgânico dominante no espaço [1]. Essas moléculas podem ter contribuído para a construção do material pré-biótico que formou a vida na Terra, especialmente quando seus átomos de hidrogênio ou carbono são substituídos por nitrogênio, dando origem aos PANHs (hete-

rociclos policíclicos aromáticos nitrogenados). Os espectros no infravermelho médio (MIR) de objetos galácticos e extragalácticos são dominados por bandas de emissão fortes a 3.3, 6.2, 7.7, 8.6, 11.3 e 12.7 μm , geralmente atribuídas aos PAHs e espécies relacionadas [2].

Embora PAHs sejam abundantes e onipresentes em quase todos os ambientes astrofísicos relacionados com gás, poeira e iluminação por fótons ultravioleta (UV) [3], o estudo de PAHs tem se concentrado principalmente em objetos galácticos. Inclusive, por muito tempo acreditou-se que

galáxias que possuem buracos-negros supermassivos (SMBH), nomeadas como núcleo ativo de galáxias (AGNs), possuem um intenso e energético campo de radiação oriundo do disco de acreção do SMBH capaz de destruir as moléculas de PAHs próximas dos SMBHs dos AGNs. A falta de dados com alta resolução angular e espectral ajudou a dificultar a compreensão das propriedades físico-químico dos PAHs e de seu uso como ferramenta de diagnóstico da fonte de ionização em galáxias. Graças aos espectros obtidos com os telescópios espaciais ISO e Spitzer, as análises dos PAHs em fontes extragalácticas foram largamente ampliadas e muitos autores produziram diagramas de diagnósticos usando as intensidades de bandas dos PAHs como uma ferramenta para distinguir as contribuições vinda de diferentes tipos de fontes de ionização, estelar no caso de galáxias Starburst ou lei de potência vinda do disco de acreção do AGN [4–15].

Alguns trabalhos propuseram diagramas de diagnósticos que mostram que a emissão no MIR de AGNs é claramente diferente daquelas dominadas por um núcleo Starburst – galáxia dominada por formação estelar [4, 5, 11, 12, 16]. Eles perceberam que o espectro de um AGN extremamente luminoso apresenta as bandas dos PAHs muito fracas ou até mesmo ausentes, uma vez que a radiação vinda do núcleo ativo estaria destruindo a poeira localizada próxima ao núcleo. Por outro lado, quando analisa-se os espectros de Starbursts, essas bandas são muito intensas e muita atenção foi destinada para tentar discriminar se a radiação que excita essas moléculas provem das estrelas ou do AGN. Atualmente, a detecção de PAHs a até uma dúzia de parsecs do AGN indica a presença de um material empoeirado, como um toro nuclear ou disco, que permite a sobrevivência dessas moléculas em ambientes tão próximos a AGNs [12, 14, 17–20]. Este trabalho resume alguns resultados importantes para a AstroBioQuímica em ambientes inóspitos como galáxias ativas, AGNs e Starburst. Será apresentado resultados de estudos físico-químico de moléculas de PAHs usando dados públicos espectroscópicos observados com o telescópio espacial Spitzer.

1.1 Estruturas dos hidrocarbonetos aromáticos policíclicos

Os PAHs são moléculas orgânicas que possuem uma rede hexagonal planar aromática formada

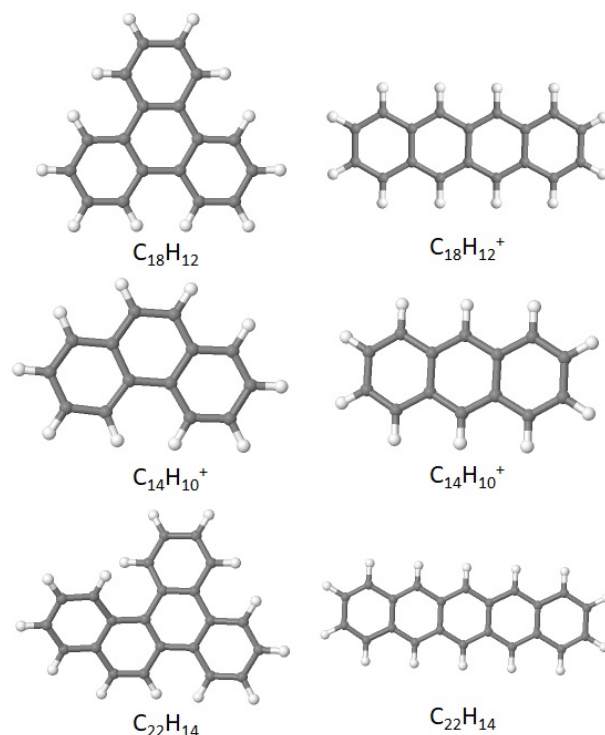


Figura 1: Estrutura molecular dos PAHs. Pericondensados encontram-se à esquerda e os catacondensados à direita juntamente com seus respectivos tamanhos.

por átomos de carbono. Essa geometria hexagonal produz uma grande energia de ligação entre esses átomos de carbono, o que tornam essas moléculas bastante estáveis e conseqüentemente de difícil dissipação [21]. Pelo fato do ISM favorecer a hidrogenação e devido à sua robustez, a estrutura mais comum do carbono nesse meio está na forma de PAHs e, além disso, eles também estão entre as mais abundantes espécies moleculares que devem ter sido transportadas quase intactas aos planetas [22].

A falta de tecnologias para calcular as propriedades óticas desses PAHs hipotéticos atrasou muito sua implementação nos modelos de grãos e esse cenário só pôde ser melhorado quando se desenvolveu técnicas laboratoriais e computacionais mais avançadas. No entanto, atualmente é possível encontrar espectros de emissão e absorção disponíveis na literatura [23–25]. Alguns autores disponibilizam espectros modelados [26] e, inclusive, existe uma grande biblioteca do “NASA AMES Research Center PAH IR Spectral Database” formada por 4.233 espectros teóricos modelados usando teoria do funcional de densidade (DFT; ver, por exemplo, Ref. [27]).

As moléculas de PAHs podem apresentar di-

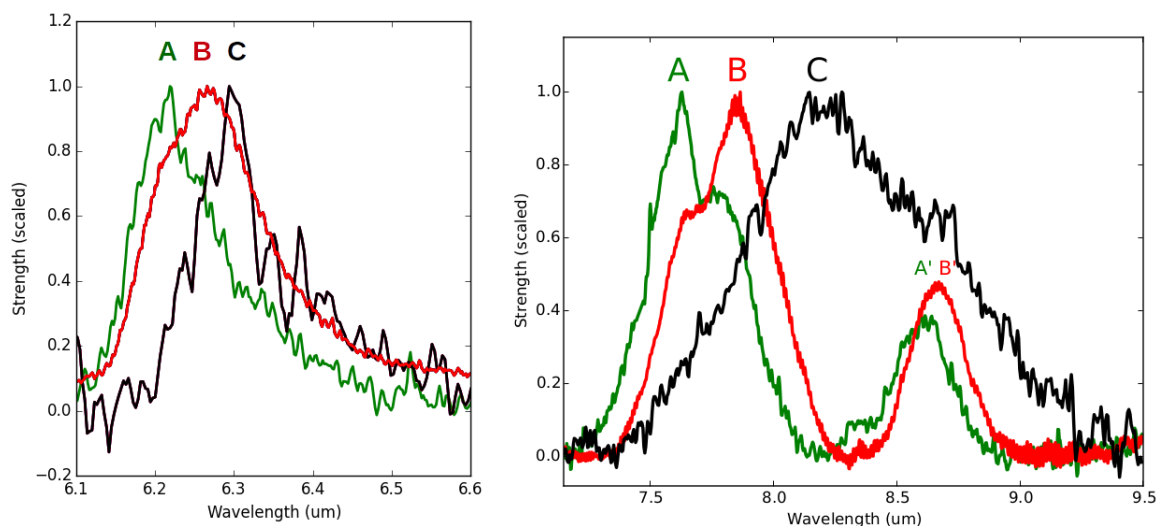


Figura 2: Visão geral das possíveis diferenças no perfil das bandas 6.2, 7.7 e 8.6 μm , divididas em três classes (A, B e C) e ilustradas pelos espectros normalizados dos objetos: A – região HII IRAS 23133+6050; B – estrela Pós-AGB HD 44179; e C – estrela Pós-AGB IRAS 13416 - 6243. Espectros normalizados disponibilizados por [28,29].

versas estruturas, das quais pode se destacar os pericondensados, catacondensados e aqueles que tem seus anéis aromáticos ligados por uma ligação simples entre carbonos $C - C$. Os aromáticos pericondensados são moléculas que compartilham, pelo menos, um átomo de carbono entre três anéis, como o coroneno, ovaleno, perileno, pireno, etc. Enquanto que nos aromáticos catacondensados nenhum carbono pertence a mais do que dois anéis (veja a Figura 1). É valioso lembrar que os PAHs mais estáveis são os mais compactos e menos suscetíveis à reatividade química e fragmentação, como os pericondensados e os PAHs simétricos [30].

Também é importante destacar o comportamento das bandas de PAH da região espectral do MIR entre 3 e 12 μm em uma amostra composta por mais de 200 galáxias dominadas por Starburst em diferentes redshift. As variações nos perfis causadas por diversos fatores – desde condições físicas locais como características da população de PAHs – levaram à divisão das bandas em três classes A, B e C, ou classes de Peeters, exemplificadas na Figura 2. No caso da banda de 6.2 μm , a observação do desvio do pico de emissão para o azul da classe A só pode ser reproduzido pela emissão de um caso especial da molécula de PAHs, onde a mesma, catalizou o nitrogênio disponível tornando-se PANHs [31,32]. Perfis da classe A dessa banda têm se mostrado dominantes no Universo, inclusive em galáxias distantes e especialmente naqueles com emissão dominada

por intensa formação estelar, Starburst [33,34].

2 Amostra e tratamento dos dados

O estudo das moléculas orgânicas de PAHs está pautado em derivar as propriedades vibracionais dessas moléculas, conseqüentemente, o melhor intervalo espectral para esse estudo é o MIR. Nas últimas décadas os melhores dados espectroscópicos nesse comprimento de onda foram observados pelo telescópio espacial Spitzer através do instrumento *The Infrared Spectrograph* (IRS) [35]. A importância do telescópio Spitzer é ter dados de imagens e espectros no MIR de fácil acesso e análise, assim como, disponibilidade pública na literatura. Além disso, vale a pena relatar que o mesmo trouxe muito avanço científico das emissões moleculares e de poeira dos objetos galáctico e extragaláctico, onde, mostrou-se um importante precursor para o atual telescópio espacial James Webb.

A bandeja do IRS é composta por quatro espectrógrafos separados, cada par de instrumento contém espectrógrafos com baixa ($R = \lambda/\Delta\lambda \sim 60-120$) e alta resolução ($R = \lambda/\Delta\lambda \sim 600$). Os módulos de baixa resolução são nomeados como *short-low* (SL) e *long-low* (LL) e os de alta resolução como *short-high* (SH) e *long-high* (LH). A Tabela 1 apresenta mais informações sobre o IRS (para mais detalhes, ver Ref. [35]).

Os resultados mostrados nesse estudo utilizou dados espectroscópicos públicos de galáxias ativas

Tabela 1: Propriedades do IRS

Módulo	Array	Escala Espacial do Pixel	Ordem	Tamanho da Fenda	λ (μm)	R ($\lambda/\Delta\lambda$)	Tamanho Espacial ¹ da Extração
Short-Low	Si:As	1.8''	SL2	3.6'' × 57''	5.2 - 7.7	80 - 128	7.2''
			SL1	3.7'' × 57''	7.4 - 14.5	64 - 128	
Long-Low	Si:Sb	5.1''	LL2	10.5'' × 168''	14.0 - 21.3	80 - 128	21.42''
			LL1	10.7'' × 168''	19.5 - 38.0	64 - 128	
Short-High	Si:As	2.3''	SH	4.7'' × 11.3''	9.9 - 19.6	~ 600	-
Long-High	Si:Sb	4.5''	LH	11.1'' × 22.3''	18.7 - 37.2	~ 600	-

¹Tamanho padrão da extração do programa SPICE do Spitzer.

observados com o telescópio Spitzer. A amostra de AGNs foi composta com os seguintes critérios: (i) selecionar um grande número de galáxias Seyfert que tivessem dados espectrais disponíveis nos arquivos públicos do Spitzer; (ii) escolher objetos que tivessem espectros no intervalo entre 5.2 e 38 μm ; e (iii), incluir na amostra galáxias do tipo Starburst e regiões H II para realizar uma análise comparativa.

Dessa forma, a amostra final de galáxias ativas é composta por 186 objetos, dos quais 15 AGNs foram estudados pela primeira vez na Ref. [12], 83 AGNs estudados na Ref. [36], 22 galáxias Starburst do trabalho [37], 59 regiões H II extragalácticas e LINERs do estudo da Ref. [8] e 7 regiões H II da galáxia M101 da amostra da Ref. [11]. A amostra do estudo sobre o perfil de PAH em 6.2 μm é composta por 257 galáxias cuja emissão foi considerada dominada por Starbursts (mais informações nas Refs. [38, 39]).

Os dados espectrais são tratados seguindo técnicas padrão para o IRS do Spitzer e para isso foi usado imagens de *background* (imagem obtida de uma região próxima da fonte que tenha apenas luz do céu), *flat-field*,¹ *máscaras* para remoção de pixels ruins e *dark*. Para fazer a calibração em comprimento de onda observou-se espectros dos objetos PNM 1-42, NGC 7293, NGC 6781, NGC 7027, G 333.9+00.6 e NGC 6543. Informações detalhadas sobre cada passo podem ser obtidas no *IRS Instrument Handbook*.² Para a amostra de galáxias dominadas por Starburst os dados tratados estão públicos e foram obtidos pelo projeto Spitzer/IRS Atlas [38, 39].

¹É importante relatar que a imagem de *flat-field* é corrigida pela luz zodiacal.

²<http://irsa.ipac.caltech.edu/data/SPITZER/docs/irs/irsinstrumenthandbook/1/>

3 Propriedades dos PAHs em ambientes inóspitos

Como é perceptível o estudo da “AstroBioQuímica” é uma ciência multidisciplinar e este trabalho tem como principal objetivo investigar as propriedades físico-químico das moléculas orgânicas de PAHs ao longo da evolução do Universo para encontrar o elo perdido entre a bioquímica dessas moléculas e as nucleobases do DNA e RNA que constituem o maquinário codificador da vida na Terra. Nesse sentido é possível derivar as propriedades de PAHs em amostra de galáxias ativas do tipo AGNs e Starburst.

3.1 Tamanho e estado de ionização dos PAHs em AGNs

A Figura 3 mostra as 186 galáxias distribuídas em um diagrama teórico (ver Ref. [40]), que é utilizado para derivar as propriedades do estado de ionização e o tamanho das moléculas de PAHs através das razões de bandas observadas 6.2 $\mu\text{m}/7.7\mu\text{m}$ e 11.3 $\mu\text{m}/7.7\mu\text{m}$, respectivamente. As razões teóricas 6.2 $\mu\text{m}/7.7\mu\text{m}$ × 11.3 $\mu\text{m}/7.7\mu\text{m}$ são as linhas tracejadas calculadas em [40]. Os objetos foram divididos em Seyfert 1, Seyfert 2, Starburst e H II+LINER e são representados no diagrama por círculos preenchidos, círculos vazios, triângulos preenchidos e triângulos vazios, respectivamente (mais informações podem ser encontradas na Ref. [12]).

Também podemos verificar nessa figura que os pontos observados estão espalhados nas regiões entre as linhas teóricas dos PAHs neutros e ionizados [40], corroborando com estudos prévios (por exemplo, Refs. [40–43]). A partir do diagrama de diagnóstico pode-se concluir que as linhas de

emissão dos PAHs tanto para AGNs quanto para objetos com baixo potencial de ionização (Starburst e LINER) são uma composição apropriada de várias moléculas com diferentes tamanhos e uma adequada fração de ionização (cargas neutras para ionizadas).

Ainda na Figura 3, percebe-se uma clara separação das galáxias por tipos de atividades. Essa segregação sugere que os objetos com alto potencial de ionização possuem moléculas com mais de 180 átomos de carbono ($6.2\mu\text{m}/7.7\mu\text{m} < 0.2$). Por outro lado, a maioria dos objetos com baixo potencial de ionização estão localizados na região que indica que as moléculas são formadas com menos de 180 átomos de carbono, ou seja, possuem valores de $0.2 < 6.2\mu\text{m}/7.7\mu\text{m} < 0.4$ (ver estudo completo na Ref. [12]).

Ademais, é possível ver na figura que as galáxias tipo Seyfert estão localizadas próximo da região dos PAHs ionizados, enquanto que a maioria dos Starburst, H II e LINERs estão próximos a linha que representa os PAHs neutros. Esses resultados obtidos sugerem que os AGNs possuem valores, tanto da fração de ionização quanto do tamanho dos PAHs, maiores comparado com as galáxias Starburst. Entretanto, uma localização preferencial das galáxias Seyfert 1 e Seyfert 2 não pôde ser definida com esse diagrama (ver estudo completo na Ref. [12]).

Uma outra forma compreender o processo de emissão das moléculas de PAHs é testar diagramas de diagnósticos que envolvem bandas predominantemente aparentes em moléculas com cargas neutras ($8.6\mu\text{m}$ e $11.3\mu\text{m}$) e ionizadas ($6.2\mu\text{m}$ e $7.7\mu\text{m}$). De fato, tais diagramas demonstraram que existem correlações entre razões que usam essas linhas [9, 10, 42]. Como esses estudos utilizaram amostras formadas em sua maioria por galáxias Starburst, também foram construídos novos diagramas com os 98 AGNs e 22 Starburst da amostra desse trabalho.

Logo, foi possível fazer uma análise quantitativa do comportamento da ionização dos PAHs em AGNs e Starburst usando diagramas diagnóstico $6.2\mu\text{m}/11.3\mu\text{m} \times 7.7\mu\text{m}/11.3\mu\text{m}$ e $6.2\mu\text{m}/8.6\mu\text{m} \times 7.7\mu\text{m}/8.6\mu\text{m}$, o qual envolve emissão das moléculas ionizadas ($7.7\mu\text{m}$ e $6.2\mu\text{m}$) e neutras ($8.6\mu\text{m}$ e $11.3\mu\text{m}$; ver figuras 6–9 da Ref. [12]). Importante ressaltar que quando é analisado amostra das galáxias AGNs a dispersão nas propriedades das moléculas de PAHs em galá-

xias com SMBHs e galáxias com formação estelar aumenta e não existe uma clara separação das propriedades das moléculas orgânicas de PAHs entre AGNs e galáxias com formação estelar. Esses resultados podem ser investigado melhor com a nova geração de dados de maior qualidade espacial e espectral que serão disponibilizada pelo telescópio espacial James Webb (ver figuras 6–9 da Ref. [12]).

Sales et al (2010) mostram diagramas de diagnósticos com as moléculas de PAHs em AGNs e galáxias com formação estelar onde concluem que objetos com baixo potencial de ionização possuem valores menores para a razão de PAHs entre $7.7\mu\text{m}/8.6\mu\text{m} < 6$, ressaltando novamente uma indicação que as moléculas de PAHs podem possuir propriedades diferentes em galáxias com SMBHs [12].

Portanto, uma das principais conclusões do estudo da “AstroBioQuímica” de ambientes inóspitos como galáxias ativas, AGNs, é que de uma forma geral, as moléculas de PAHs presentes nos AGNs são maiores que em galáxias Starburst. Além disso, de acordo com a Ref. [44], os grandes valores de $7.7\mu\text{m}/8.6\mu\text{m}$ e $7.7\mu\text{m}/11.3\mu\text{m}$ indica que a maioria das moléculas nesses AGNs estão no estado ionizado.

Em suma, os resultados que podem ser concluídos através dos diagramas de diagnóstico usando as moléculas de PAHs e indicadores de potencial de ionização das fontes AGNs e formação estelar (Figura 3 e figuras 6–9 da Ref. [12]) apresentam uma clara evidência de que a fração de ionização e tamanho dessas moléculas aumentam de galáxias Starburst para AGNs. É importante ressaltar novamente que uma nova janela de oportunidade para avançar o conhecimento sobre a evolução do material orgânicas ao longo da evolução do Universo poderá ser acessadas ao passo que os dados do telescópio espacial James Webb forem observados, assim, os resultados derivados essa amostra de galáxias poderá mostrar suporte para futuras interpretações do estudo da “AstroBioQuímica” (mais resultados podem ser acessados nas Refs. [12–14, 17, 33, 34, 45]).

4 Evolução das características dos PAHs ao longo da evolução do Universo

Como já mencionado, a variação nos perfis das bandas de PAH pode estar relacionada com a po-

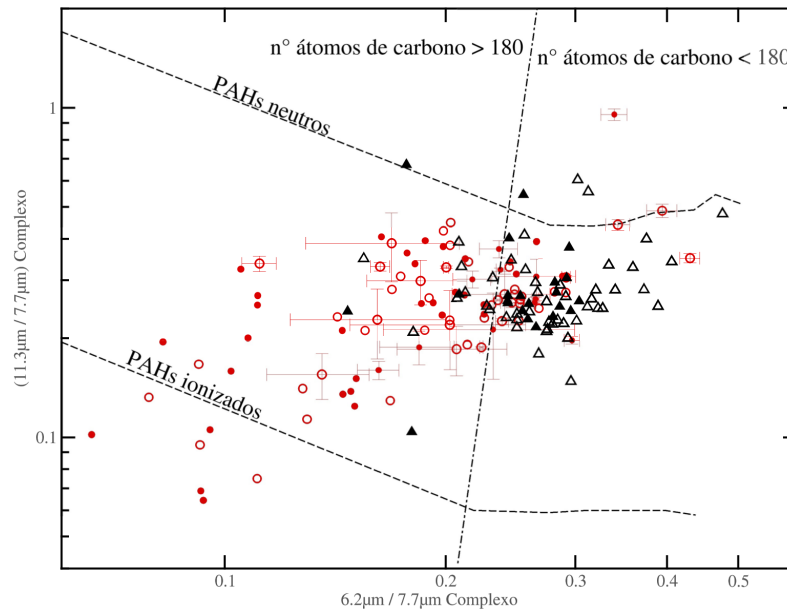


Figura 3: Diagrama de diagnóstico da razão $6.2\mu\text{m}/7.7\mu\text{m} \times 11.3\mu\text{m}/7.7\mu\text{m}$. As linhas pontilhadas representam as intensidades teóricas dos PAHs ionizados e neutros da Ref. [40]. A linha traço-ponto mostra a posição onde a molécula de PAH tem 180 átomos de carbono. Os triângulos vazios representam as regiões H II+LINER da amostra das Refs. [8,11], os triângulos preenchidos representam as galáxias Starburst da Ref. [37], os círculos preenchidos e vazios são Seyfert 1 e Seyfert 2 da amostra desse trabalho e da amostra da Ref. [36]. As barras de erros são apresentadas para os 15 novos AGNs e representam bem os erros da amostra total.

pulação molecular emissora. A Figura 4 mostra uma representação dessa variação na banda de PAH em $6.2\mu\text{m}$ pelo redshift de uma sub-amostra de galáxias com emissão dominada por Starburst, retirada do catálogo de espectros já tratados do Spitzer/IRS ATLAS [46]. Após a subtração do contínuo e do ajuste da banda de $6.2\mu\text{m}$, os comprimentos de onda centrais foram distribuídos ao longo dos respectivos redshifts, juntamente com a separação das classes de Peeters.

Como é possível ver na Figura 4, a classe A de PAHs é dominante até nos redshifts mais elevados. Conseqüentemente, pode-se perceber que além de uma evidente presença da emissão de PANHs ao longo da evolução do Universo ($z < 2$), também, é notório que os PANHs estão presentes na maioria das galáxias dominadas por Starburst. Esse tipo de análise pode ampliar o censo do nitrogênio no Universo, uma vez que PANHs representariam um reservatório adicional desse elemento, em condições de densidade e temperaturas distintas daquelas da fase gasosa e em gelos (mais informações desse estudo podem ser vistas nas Refs. [33,34,45]).

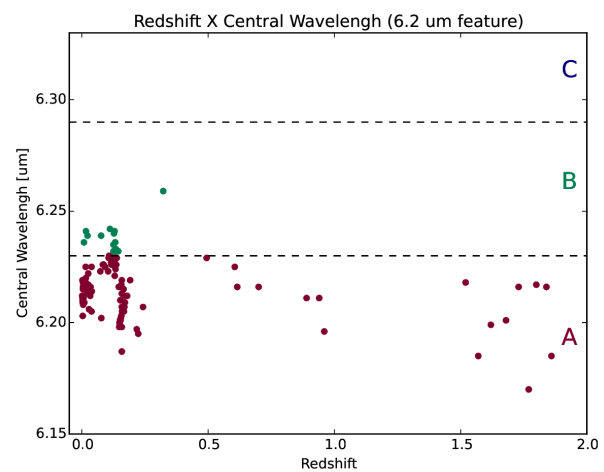


Figura 4: Gráfico do comprimento de onda central da banda de $6.2\mu\text{m}$ pelo redshift das fontes. Os espectros foram extraídos da amostra do Spitzer/IRS ATLAS [46] de galáxias com emissão dominada por Starburst. As linhas tracejadas pretas mostram o limite entre as três classes de Peeters. Classe A – cor de vinho; Classe B – verde; e Classe C – azul, que não possui representantes [45].

Agradecimentos

Dinalva A. Sales agradece ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul (FAPERGS).

Sobre as autoras

Dinalva Aires de Sales (dinalvaires@gmail.com) é Graduada em Matemática e Mestre em Física e Astronomia pela Universidade do Vale do Paraíba, e Doutora em Física pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul, onde também atuou como pós-doutoranda. Foi NASA Postdoctoral Fellow no Rochester Institute of Technology (2012/2013). Tem experiência na área de astrofísica, atuando principalmente nos seguintes temas: núcleo ativo de galáxia, galáxias em interação, moléculas complexas, espectroscopia e imageamento. Atualmente é professora adjunta do Instituto de Matemática, Estatística e Física (IMEF) da Universidade Federal do Rio Grande (IMEF-FURG). Foi Coordenadora do Programa de Pós-Graduação em Física (PPG-Física) do IMEF-FURG (2019-2021) e atualmente é Coordenadora de Bolsas Institucionais da Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação (PROPEP) da FURG.

Carla Martinez Canelo (camcanelo@gmail.com) é integrante do Grupo de Pesquisa INOVENTER CNPq da Universidade Federal do Rio Grande. É Graduada em Física pela Universidade de São Paulo, Mestre e Doutora em Astronomia pela mesma instituição. Possui experiência na área de astronomia, com ênfase em astrobiologia, astroquímica e em divulgação científica.

Referências

- [1] P. Ehrenfreund et al., *Experimentally Tracing the Key Steps in the Origin of Life: The Aromatic World*, *Astrobiology* **6**, 490 (2006).
- [2] A. Li, *Interaction of Nanoparticles with Radiation*, in *Astrophysics of Dust*, editado por A. N. Witt, G. C. Clayton e B. T. Draine (2004), vol. 309 de *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, 417. [ArXiv: astro-ph/0311066](https://arxiv.org/abs/astro-ph/0311066).
- [3] A. G. G. M. Tielens, *Interstellar Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Molecules*, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* **46**, 289 (2008).
- [4] R. Genzel et al., *What Powers Ultraluminous IRAS Galaxies?*, *Astrophysical Journal* **498**, 579 (1998). [ArXiv:astro-ph/9711255](https://arxiv.org/abs/astro-ph/9711255).
- [5] D. Lutz et al., *The Nature and Evolution of Ultraluminous Infrared Galaxies: A Mid-Infrared Spectroscopic Survey*, *Astrophysical Journal Letters* **505**, L103 (1998). [ArXiv: astro-ph/9806270](https://arxiv.org/abs/astro-ph/9806270).
- [6] D. Rigopoulou et al., *A Large Mid-Infrared Spectroscopic and Near-Infrared Imaging Survey of Ultraluminous Infrared Galaxies: Their Nature and Evolution*, *Astronomical Journal* **118**, 2625 (1999). [ArXiv:astro-ph/9908300](https://arxiv.org/abs/astro-ph/9908300).
- [7] Q. D. Tran et al., *Isocam-Cvf 5-12 Micron Spectroscopy of Ultraluminous Infrared Galaxies*, *Astrophysical Journal* **552**, 527 (2001). [ArXiv:astro-ph/0101187](https://arxiv.org/abs/astro-ph/0101187).
- [8] J. D. T. Smith et al., *The Mid-Infrared Spectrum of Star-forming Galaxies: Global Properties of Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Emission*, *Astrophysical Journal* **656**, 770 (2007). [ArXiv:astro-ph/0610913](https://arxiv.org/abs/astro-ph/0610913).
- [9] F. Galliano, *PAHs in Galaxies: their Properties and Evolution*, *astro-ph* (2006). [ArXiv: astro-ph/0610852](https://arxiv.org/abs/astro-ph/0610852).
- [10] F. Galliano et al., *Variations of the Mid-IR Aromatic Features inside and among Galaxies*, *Astrophysical Journal* **679**, 310 (2008). [ArXiv:0801.4955](https://arxiv.org/abs/0801.4955).
- [11] K. D. Gordon et al., *The Behavior of the Aromatic Features in M101 H II Regions: Evidence for Dust Processing*, *Astrophysical Journal* **682**, 336 (2008). [ArXiv:0804.3223](https://arxiv.org/abs/0804.3223).
- [12] D. A. Sales, M. G. Pastoriza e R. Riffel, *Polycyclic Aromatic Hydrocarbon and Emission Line Ratios in Active Galactic Nuclei and Starburst Galaxies*, *Astrophysical Journal* **725**, 605 (2010). [ArXiv:1010.2170](https://arxiv.org/abs/1010.2170).
- [13] D. A. Sales et al., *The Compton-thick Seyfert 2 Nucleus of NGC 3281: Torus Constraints*

- from the 9.7 μm Silicate Absorption, *Astrophysical Journal* **738**, 109 (2011). [ArXiv:1106.5731](#).
- [14] D. A. Sales et al., *Polycyclic aromatic hydrocarbon in the central region of the Seyfert 2 galaxy NGC 1808*, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **429**(3), 2634 (2013). [ArXiv:1212.1357](#).
- [15] D. A. Sales et al., *An Embedded Active Nucleus in the OH Megamaser Galaxy IRAS16399-0937*, *Astrophys. J.* **799**(1), 25 (2015). [ArXiv:1411.1261](#).
- [16] O. Laurent et al., *Mid-infrared diagnostics to distinguish AGNs from starbursts*, *Astronomy and Astrophysics* **359**, 887 (2000). [ArXiv:astro-ph/0005376](#).
- [17] D. Ruschel-Dutra et al., *A mid-IR comparative analysis of the Seyfert galaxies NGC 7213 and NGC 1386*, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **438**(4), 3434 (2014). [ArXiv:1401.1989](#).
- [18] A. Alonso-Herrero et al., *Nuclear 11.3 μm PAH emission in local active galactic nuclei*, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **443**(3), 2766 (2014). [ArXiv:1407.1154](#).
- [19] A. Alonso-Herrero et al., *A mid-infrared spectroscopic atlas of local active galactic nuclei on sub-arcsecond resolution using GTC/CanariCam*, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **455**(1), 563 (2016). [ArXiv:1510.02631](#).
- [20] T. Monfredini et al., *Destruction and multiple ionization of PAHs by X-rays in circumnuclear regions of AGNs*, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **488**(1), 451 (2019). [ArXiv:1808.07626](#).
- [21] A. Omont, *Physics and chemistry of interstellar polycyclic aromatic molecules*, *Astronomy and Astrophysics* **164**, 159 (1986).
- [22] P. Ehrenfreund et al., *Astrophysical and astrochemical insights into the origin of life*, *Reports on Progress in Physics* **65**, 1427 (2002).
- [23] L. J. Allamandola, D. M. Hudgins e S. A. Sandford, *Modeling the Unidentified Infrared Emission with Combinations of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons*, *The Astrophysical Journal* **511**, L115 (1999).
- [24] D. M. Hudgins e L. J. Allamandola, *The Spacing of the Interstellar 6.2 and 7.7 Micron Emission Features as an Indicator of Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Size*, *Astrophysical Journal Letters* **513**, L69 (1999).
- [25] A. L. Mattioda, D. M. Hudgins e L. J. Allamandola, *Experimental Near-Infrared Spectroscopy of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons between 0.7 and 2.5 μm* , *Astrophysical Journal* **629**, 1188 (2005).
- [26] A. Li e B. T. Draine, *On Ultrasmall Silicate Grains in the Diffuse Interstellar Medium*, *Astrophysical Journal Letters* **550**, L213 (2001). [ArXiv:astro-ph/0012147](#).
- [27] C. W. Bauschlicher et al., *The NASA ames PAH IR spectroscopic database: Computational version 3.00 with updated content and the introduction of multiple scaling factors*, *The Astrophysical Journal Supplement Series* **234**(2), 32 (2018).
- [28] E. Peeters et al., *The rich 6 to 9 μm spectrum of interstellar PAHs.*, *Astronomy & Astrophysics* **390**, 1089 (2002). [ArXiv:astro-ph/0205400](#).
- [29] B. van Dienenhoven et al., *The Profiles of the 3-12 Micron Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Features*, *Astrophys. J.* **611**, 928 (2004). [ArXiv:astro-ph/0405098](#).
- [30] H. Andrews et al., *PAH Emission at the Bright Locations of PDRs: the grandPAH Hypothesis*, *Astrophys. J.* **807**(1), 99 (2015).
- [31] D. M. Hudgins, C. W. Bauschlicher, Jr. e L. J. Allamandola, *Variations in the Peak Position of the 6.2 μm Interstellar Emission Feature: A Tracer of N in the Interstellar Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Population*, *Astrophys. J.* **632**, 316 (2005).
- [32] A. Vats et al., *Theoretical study of infrared spectra of interstellar PAH molecules with N, NH, and NH₂ incorporation*, *Publications of the Astronomical Society of Japan* **74**(1), 161 (2022). [ArXiv:2112.14453](#).

- [33] C. M. Canelo et al., *Variations in the 6.2 μm emission profile in starburst-dominated galaxies: a signature of polycyclic aromatic nitrogen heterocycles (PANHs)?*, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **475**, 3746 (2018). [ArXiv:1708.07565](#).
- [34] C. M. Canelo et al., *Profile comparison of the 6-9 μm polycyclic aromatic hydrocarbon bands in starburst-dominated galaxies*, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **507**(4), 6177 (2021). [ArXiv:2109.01641](#).
- [35] J. R. Houck et al., *The Infrared Spectrograph (IRS) on the Spitzer Space Telescope*, *Astrophysical Journal Supplement Series* **154**, 18 (2004). [ArXiv:astro-ph/0406167](#).
- [36] J. F. Gallimore et al., *Infrared Spectral Energy Distributions of Seyfert Galaxies: Spitzer Space Telescope Observations of the 12 μm Sample of Active Galaxies*, *Astrophysical Journal Supplement Series* **187**, 172 (2010). [ArXiv:1001.4974](#).
- [37] B. R. Brandl et al., *The Mid-Infrared Properties of Starburst Galaxies from Spitzer-IRS Spectroscopy*, *Astrophysical Journal* **653**, 1129 (2006). [ArXiv:astro-ph/0609024](#).
- [38] A. Hernan-Caballero et al., *Mid-infrared spectroscopy of infrared-luminous galaxies at $z \sim 0.5-3$* , *MNRAS* **395**, 1695 (2009).
- [39] A. Hernán-Caballero e E. Hatziminaoglou, *An atlas of mid-infrared spectra of star-forming and active galaxies*, *MNRAS* **414**, 500 (2011).
- [40] B. T. Draine e A. Li, *Infrared Emission from Interstellar Dust. I. Stochastic Heating of Small Grains*, *Astrophysical Journal* **551**, 807 (2001). [ArXiv:astro-ph/0011318](#).
- [41] H. Kaneda et al., *Properties of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Local Elliptical Galaxies Revealed by the Infrared Spectrograph on Spitzer*, *Astrophysical Journal* **684**, 270 (2008). [ArXiv:0805.3257](#).
- [42] M. J. O'Dowd et al., *Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Galaxies at $z \sim 0.1$: The Effect of Star Formation and Active Galactic Nuclei*, *Astrophysical Journal* **705**, 885 (2009). [ArXiv:0909.2279](#).
- [43] L. K. Hunt et al., *The Spitzer View of Low-Metallicity Star Formation. III. Fine-Structure Lines, Aromatic Features, and Molecules*, *Astrophysical Journal* **712**, 164 (2010). [ArXiv:1002.0991](#).
- [44] C. W. Bauschlicher, Jr., E. Peeters e L. J. Allamandola, *The Infrared Spectra of Very Large, Compact, Highly Symmetric, Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs)*, *Astrophysical Journal* **678**, 316 (2008). [ArXiv:0802.1071](#).
- [45] C. M. Canelo, *O Mundo Aromático – dos PAHs no meio interestelar às condições bióticas*, Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo (USP), Brasil (2016). Disponível em https://www.iag.usp.br/pos/sites/default/files/d_carla_m_canelo_corrigeida.pdf, acesso em ago. 2022.
- [46] A. Hernán-Caballero e E. Hatziminaoglou, *An atlas of mid-infrared spectra of star-forming and active galaxies*, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **414**, 500 (2011). [ArXiv:1101.4794](#).