

Adriana Ribeiro da Silva

**Estudo de Hidrocarbonetos Policíclicos
Aromáticos e gás ionizado em galáxias com
núcleo ativo**

São José dos Campos, SP

2021

Adriana Ribeiro da Silva

Estudo de Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos e gás ionizado em galáxias com núcleo ativo

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física e Astronomia, como complementação dos créditos necessários para obtenção do grau de Doutora em Física e Astronomia.

Universidade do Vale do Paraíba – Univap

Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento –IP&D

Programa de Pós-Graduação em Física e Astronomia

Orientadora: Dra. Ângela Cristina Krabbe

Coorientadora: Dra. Diana Paula de Pinho Andrade

São José dos Campos, SP

2021

TERMO DE AUTORIZAÇÃO DE DIVULGAÇÃO DA OBRA

Ficha catalográfica

Ribeiro da Silva, Adriana

Estudo de Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos e gás ionizado em galáxias com núcleo ativo / Adriana Ribeiro da Silva; orientador, Ângela Cristina Krabbe; co-orientador Diana Paula de Pinho Andrade. - São José dos Campos, SP, 2021. 83 p.

Tese (Doutorado) - Universidade do Vale do Paraíba, São José dos Campos. Programa de Pós-Graduação em Física e Astronomia. Inclui referências

1. Física e Astronomia. 2. Assinatura de PAHs. 3. Galáxias: Seyfert e Starburst. 4. PAHdb. 5. Astroquímica. I. Cristina Krabbe, Ângela, orient. II. Paula de Pinho Andrade, Diana, co-orient. III. Universidade do Vale do Paraíba. Programa de Pós-Graduação em Física e Astronomia. IV. Título.

Eu, Adriana Ribeiro da Silva, autor(a) da obra acima referenciada:

Autorizo a divulgação total ou parcial da obra impressa, digital ou fixada em outro tipo de mídia, bem como, a sua reprodução total ou parcial, devendo o usuário da reprodução atribuir os créditos ao autor da obra, citando a fonte.

Declaro, para todos os fins e efeitos de direito, que o Trabalho foi elaborado respeitando os princípios da moral e da ética e não violou qualquer direito de propriedade intelectual sob pena de responder civil, criminal, ética e profissionalmente por meus atos.

São José dos Campos, 06 de Março de 2022.



Autor(a) da Obra

Data da defesa: 06 / 12 / 2021

ADRIANA RIBEIRO DA SILVA

**"ESTUDO DE HIDROCARBONETOS POLICÍCLICOS AROMÁTICOS E GÁS IONIZADO
EM GALÁXIAS COM NÚCLEO ATIVO."**

Tese aprovada como requisito parcial à obtenção do grau de Doutor, do Programa de Pós-Graduação em Física e Astronomia, do Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento da Universidade do Vale do Paraíba, São José dos Campos, SP, pela seguinte banca examinadora:

PROF. DR. SERGIO PILLING GUAPYASSU DE OLIVEIRA

PROF.ª DR.ª ANGELA CRISTINA KRABBE

PROF.ª DR.ª DIANA PAULA DE PINHO ANDRADE - UFRGS

PROF.ª DR.ª MIRIANI GRISELDA PASTORIZA - UFRJ

PROF.ª DR.ª WANIA WOLFF - UFRJ

Prof.ª Dr.ª Lúcia Vieira

Diretora do IP&D - Univap

São José dos Campos, 05 de dezembro de 2021.

Aos meus graciosos e engenhosos filhos, João Elias Silva Monteiro e George Lucas Silva Monteiro, que dão muito orgulho e felicidade a minha vida.

Agradecimentos

- A Deus, minha maior fortaleza, sem a qual nem eu e nem mais nada existiria.
- À família, em especial minha mãe, irmã, irmãos, avó, avô, sogra e sogro. Essas são as pessoas que estão na minha base para as tomadas de decisões que venho fazendo e que me apoiam estrutural e emocionalmente para finalização deste trabalho.
- Às pessoas especiais: Adriano Francisco Monteiro dos Santos, meu adorável e inteligente esposo, que sempre esteve ao meu lado, apoiando e ensinando Astrofísica. Assim como meu amigo de longa data Michael Hanaki, por todo o apoio estrutural dado nesta trajetória.
- A amigos como Marina Rachid, Celso Júnior, Victor Bonfim, Will Robson e Mark Armah.
- À Dra. Carla Canelo, pelas valiosas contribuições com argumentações teóricas e compartilhamento de ferramentas fundamentais para desenvolvimento deste trabalho. A M.Sc Yanna Martins por nos ajudar entender melhor como usar o código PAHFIT. Ao Dr. José Hernandez pela cooperação nas discussões dos resultados. Agradeço também ao Dr. Christiaan Boersma, do Centro de Pesquisa Ames da NASA, por prontamente tirar minhas dúvidas sobre o uso do código PAHdb.
- Não menos importante, registro aqui meus agradecimentos às Dras. Ângela Krabbe e Diana Andrade, minhas orientadoras, que me ajudaram a tornar essa pesquisa uma realidade. Agradeço também ao Dr. Oli Dors, que por diversas vezes me aconselhou e me deu dicas importante para o desenvolvimento desse trabalho. Agradeço também ao professor Dr. Sérgio Pilling, por ter aceitado me orientar no início dessa jornada. Aproveito e estendo os agradecimentos a todos os funcionários da UNIVAP que me ajudaram direta ou indiretamente no andamento deste Doutorado.
- Por fim, à CAPES pela bolsa de estudo, sem a qual esse estudo não seria possível. Assim como o Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento da Universidade do Vale do Paraíba e o Observatório do Valongo da Universidade Federal do Rio de Janeiro por toda estrutura concedida para a realização desse projeto.

Resumo

O presente trabalho apresenta um estudo para uma amostra de galáxias com núcleos ativos visando caracterizar os principais tipos de moléculas de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (PAHs) presentes nesses objetos e as condições físicas locais de suas fontes irradiantes, bem como as características do gás ionizado residente, pela combinação de dados infravermelho com o ótico. Foram construídos modelos de fotoionização com o código CLOUDY para reproduzir as relações das linhas de emissão óptica em combinação com as relações de intensidade de emissão de PAHs. Verificou-se que as espécies contendo 10 até 82 átomos de carbono são as mais abundantes na amostra. Supõe-se que famílias de espécies com apenas dois ou três anéis fundidos, como amidas aromáticas pequenas, são alvos importantes que devem ser considerados em estudos experimentais/teóricos, bem como em estudos observacionais. Verifica-se que os modelos de fotoionização de Núcleo Ativo de Galáxias (AGNs) reproduzem a maioria dos dados observacionais em $\log(6.2/11.3)$ versus $\log([\text{N II}]\lambda 6584/\text{H}\alpha)$ usando o índice espectral de raios-X de $\alpha_{\text{ox}} = -1.4$. O fluxo PAH pequenos, bem como o fluxo de PAHs ionizados e de Heterocíclicos Nitrogenados Policíclicos Aromáticos (PANH) diminuem à medida que o parâmetro de ionização ($\log U$) aumenta. A relação de intensidade de 6.2/11.3 PAH apresenta anticorrelação entre a abundância de oxigênio e $\log U$, no sentido de que a razão 6.2/11.3 diminui com o aumento da abundância de oxigênio e $\log U$. Finalmente, verificou-se que o grau de ionização das espécies de PAH aumenta com a diminuição da razão 11.3/7.7 e o $\log U$, de acordo com os modelos propostos por Draine & Li.

Palavras-chave: Assinaturas. PAHs. Galáxias. Seyfert. *Starburst*. PAHdb. Astroquímica.

Abstract

The work presents a study for a sample of galaxies with active nuclei to characterize the main type of PAH molecules present in these objects and the local physical conditions of their irradiating sources, as well as the characteristics of the residing ionized gas, by combining optical and infrared data. Photoionization models were built with the CLOUDY code to reproduce optical emission line ratios in combination with PAH intensity ratios. Species were found containing 10 – 82 carbon atoms how be the most abundant in the sample. It is suggested that family the species with only two or three fused rings of and a nitrogen hanging, such as small aromatic amides are important targets worthy of consideration in future experimental/theoretical as well as observational studies. Verified which the AGN photoionization models reproduce most of the observational data in the $\log(6.2/11.3)$ versus $\log([N II]\lambda 6584/H\alpha)$ diagram with the optical to X-ray spectral index of $\alpha_{ox} = -1.4$. The flux of small PAH, as well as the flux of ionized PAHs and PANH, decrease as the logarithm of the ionization parameter ($\log U$) increases. The 6.2/11.3 PAH intensity ratio presents anti correlation between the oxygen abundance and $\log U$, in the sense that the 6.2/11.3 ratio decreases as the oxygen abundance and $\log U$ increases. Finally, found that the ionization degree of PAH species increases with the decreasing of the 11.3/7.7 ratio and the $\log U$, in agreement with the models proposed by Draine & Li.

Keywords: Signature. PAH. Galaxy. Seyfert. Starburst. PAHdb. Astrochemistry.

Lista de ilustrações

Figura 1 – (a) Estrutura dos PAHs $C_{10}H_8N$ (esquerda) e $C_{48}H_{22}$ (direita) mapeados na atmosfera de Titã (LÓPEZ-PUERTAS <i>et al.</i> , 2013). (b) Espectro observado em direção ao plano Galáctico, mostrando as bandas de PAHs (YAMAMOTO, 2017).	15
Figura 2 – Esquema qualitativo do processo de formação de PAHs proposto por Merino <i>et al.</i> (2014) que pode ser atribuído à abordagem <i>bottom-up</i>	18
Figura 3 – Diagrama da evolução de espécies de PAHs a partir dos <i>grandPAHs</i> acordando com a hipótese <i>top-down</i>	19
Figura 4 – Representação esquemática da química de carbono interestelar relacionado à abordagem <i>top-down</i>	20
Figura 5 – O ciclo de vida dos PAHs grandes	21
Figura 6 – Ciclos de vida estelar e evolução dos PAHs.	22
Figura 7 – Assinatura de C_{60} e C_{70} na nebulosa planetária Tc 1	24
Figura 8 – Painel esquerdo (a): Assinatura de PAHs no espectro IR de duas regiões da nebulosa Iris. Painel direito (b): Exemplo de assinatura de PAH no IR (painel inferior) em duas posições na nebulosa IRIS mostrando os diferentes tipos de estruturas/espécies de PAHs presentes.	25
Figura 9 – Painel superior: Espectros no IR observados na região nuclear das galáxias NGC 4676 e Mrk 471 extraídos do projeto Spitzer/ATLAS. Painel inferior: Espectros óticos observados na região nuclear das galáxias NGC 4676 e Mrk 471 extraídos do SDSS, DR16.	28
Figura 10 – Painel superior: Espectros IR brutos observados e compilados do Atlas IRS/Spitzer. Painel inferior: Espectros óticos brutos observados e compilados do espectrógrafo DR16 SDSS-IV.	30
Figura 11 – Diagrama BPT de Ke03 para uma amostra de galáxia observada pelo SDSS segregando as regiões das suas principais fonte de ionização.	31
Figura 12 – Diagrama diagnóstico para galáxias desta amostra ($[O III]/H\alpha$) versus ($[N II]/H\alpha$). A curva preta sólida representa o limite superior teórico para as regiões de formação estelar proposto por Kewley <i>et al.</i> (2001), e a curva preta tracejada é o limite empírico de formação de estrelas proposto por Kauffmann <i>et al.</i> (2003). A região entre as linhas Ke01 e Ka03 é denominada região composta.	32
Figura 13 – Decomposição espectral de 5-15 μm da NGC 4676 usando o código PAHFIT.	36

Figura 14	–Distribuição das espécies de PAHs em tamanho, carga e composição dentro da versão 3.2 do PAHdb.	37
Figura 15	–Ajuste espectral da emissão da galáxia <i>Starburst</i> NGC 4676 PAHdb usando o código PAHdb. As espécies de PAHs mais relevantes para o fluxo total são mostradas em percentual, e a qualidade do ajuste é quantificada pelo parâmetro de norma euclidiana.	37
Figura 16	–Ajuste espectral das emissões das galáxias usando o código PAHdb. As assinaturas de PAHs mais relevantes para o fluxo total são indicadas em diferentes cores.	44
Figura 17	–Continuação Figura 16.	45
Figura 18	–As duas espécies mapeadas mais relevantes na região nuclear das amostras sobrepostas à imagem e espectro de PAHs da galáxia NGC 4676.	47
Figura 19	–Emissão de PANHs por bandas	50
Figura 20	–Tamanho e carga das seis espécies mais relevantes de PAHs por objeto.	51
Figura 21	–Grade modelo de fotoionização de $\log(6.2/11.3)$ versus $\log([\text{N II}]\lambda 6584/\text{H}\alpha)$. As linhas tracejadas conectam os resultados do modelo de fotoionização com a mesma metalicidade, enquanto as linhas sólidas conectam os modelos com o mesmo logaritmo do parâmetro de ionização U . Os pontos azuis representam as razões de intensidade de linha observacional da amostra considerada neste trabalho, e os pontos cinza representam os dados de Smith <i>et al.</i> (2007). Os valores assumidos da metalicidade (Z/Z_{\odot}) e $\log U$ valores são indicados.	53
Figura 22	–À esquerda: A abundância de oxigênio ($12 + \log(\text{O}/\text{H})$) em função da razão de intensidade das bandas de PAHs em $6.2/11.3 \mu\text{m}$. À direita: Relação entre o logaritmo do parâmetro de ionização do hidrogênio ($\log U$) e a razão de bandas $6.2/11.3 \mu\text{m}$. Os pontos azuis representam as galáxias da amostra e os pontos cinza, a amostra SINGs de galáxias de Smith <i>et al.</i> (2007). A linha sólida preta é o ajuste linear aos dados	54
Figura 23	–Percentual de contribuição de PAHs pequenos e PANHs versus $\log U$ (à esquerda) e PAHs pequenos e ionizados versus $\log U$ (à direita). As linhas sólidas vermelhas e azuis representam os melhores ajustes entre a porcentagem de fluxo total da população (PAHs pequenos, PAHs ionizados e PANHs) e $\log U$	55
Figura 24	–Proporção da emissão de PAHs ionizados <i>versus</i> razão das bandas $11.3/7.7 \mu\text{m}$ em função do $\text{Log } U$	57

Figura 25 –Decomposição espectral da amostra na faixa de 5 a 15 μm em componentes do contínuo total (linha azul), contínuo estelar (linha vermelha), linhas iônicas (linha verde), assinatura de PAHs e características de poeira (linha laranja) e bestfit modelo (linha roxa). O espectro observado é mostrado em pontos pretos.	69
Figura 26 –Similar Figura 25	70

Sumário

1	Introdução	14
2	Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos e as galáxias	17
2.1	Processamento dos PAHs	17
2.2	Importância dos PAHs	19
2.3	Assinaturas de PAHs	24
2.4	PAHs e as condições físicas do ambiente em que residem	25
2.5	Galáxias Seyfert e Starburst	27
3	Dados Observacionais	29
4	Análise dos dados	33
4.1	Análise dos dados no Infravermelho	33
4.2	Análise dos dados no ótico	36
4.2.1	Determinação da densidade eletrônica	39
4.2.2	Determinação da temperatura eletrônica	39
4.2.3	Abundância química	40
5	Resultados e discussões	43
5.1	Espécies de PAHs identificadas	43
5.1.1	Atribuição das espécies de PAHs nos espectros	43
5.1.2	Espécies mais relevantes e degenerescência	46
5.1.3	Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos Nitrogenados	48
5.1.4	Tamanho e Cargas das espécies identificadas	49
5.2	Propriedades físicas do gás ionizado das galáxias	51
5.3	Correlação entre PAHs versus condições físicas do gás ionizado	53
5.3.1	Abundância de oxigênio e o parâmetro de ionização	53
5.3.2	PAHs pequenos, ionizados e nitrogenados versus parâmetro de ionização	54
6	Conclusões e perspectivas	58
	Referências	60
	APÊNDICE A Componentes PAHFIT	68

APÊNDICE B	Mapeamento das assinaturas de espécies de PAHs que estão contribuindo com a emissão no IR: Nove amostras de galáxias <i>Seyfert</i> e três amostras de galáxias <i>Staburst</i>. NesSas tabelas, omitem-se todas as espécies que contribuem com <1% para a emissão total.	71
APÊNDICE C	Artigo publicado	83

1 Introdução

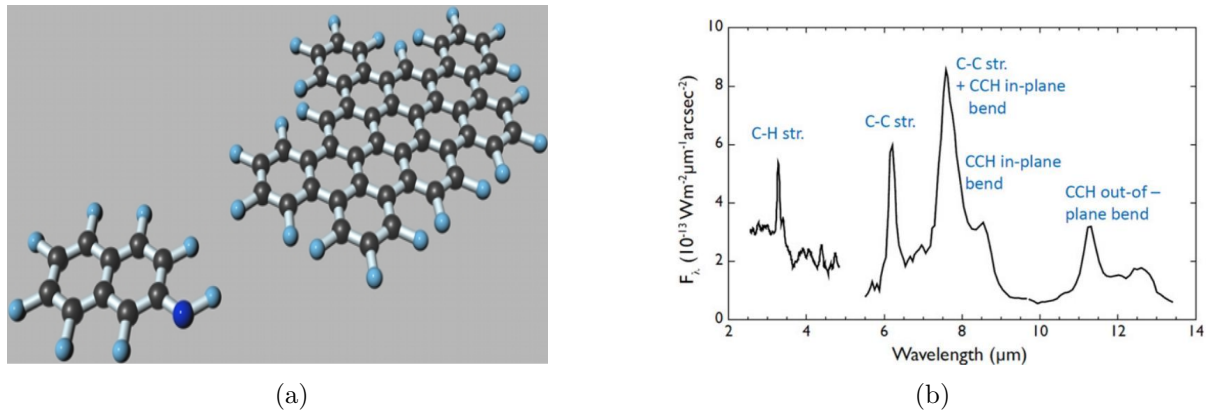
Sabe-se que a origem da maioria dos elementos químicos ocorreu no interior das estrelas com posterior injeção ao meio interestelar (ISM, do inglês *Interstellar Medium*). É nesse contexto que os elementos químicos dão origem a diversos tipos de moléculas, desde diatômicas até grandes moléculas, como os hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (PAHs, do inglês *Polycyclic Aromatic Hydrocarbons*). Tais hidrocarbonetos representam um grupo de moléculas-chave que influencia processos macroscópicos do ISM, tal como a formação de estrelas e a evolução de galáxias (CANDIAN; ZHEN; TIELENS, 2018).

PAHs são compostos orgânicos formados por carbono e hidrogênio, contendo dois ou mais anéis aromáticos condensados. Na Terra eles são gerados pela queima incompleta de matéria orgânica, como combustíveis fósseis e gorduras saturadas. Nos ambientes espaciais, os PAHs estão associados às emissões na região do infravermelho próximo e médio dos espectros de diversos objetos estelares em forma de fortes bandas espectrais em 3.3, 6.2, 7.7, 8.6, 11.3, 12.7 μm (PEETERS *et al.*, 2017). Tais emissões são causadas pela radiação ultravioleta (UV), de origem estelar ou de núcleos ativos de galáxias, que é absorvida sobre uma estrutura molecular de PAH, elevando seu estado de carga de neutro para excitado onde a energia, deste alto estado eletrônico, é transferida para energia em estados vibracionais entre as ligações desta molécula de PAH. Tais vibrações provocam a fragmentação em espécies moleculares e/ou o decaimento energético fluorescente em forma de emissões no infravermelho.

As Figuras 1a e 1b ilustram, respectivamente, as estruturas e as bandas espectrais de emissões dos PAHs, como observadas em alguns objetos estelares. Esse grupo de moléculas aparece próxima a regiões de fotodissociação, absorve radiação preferencialmente no ultravioleta e reemite uma grande fração desta radiação no infravermelho entre as regiões espectrais de 3-20 μm .

A pesquisa com os PAHs remonta à década de 80, quando observações iniciais no infravermelho (IR) começaram a revelar bandas largas de emissões em direção a certos objetos Galácticos. Um "quebra-cabeça" de longa data na Astronomia observacional, que começou com o diagnóstico de bandas difusas interestelares (DIB, do inglês *Diffuse Interstellar Bands*). A partir de então, os PAHs foram propostos como candidatos a portadores das DIBs (ZWET; ALLAMANDOLA *et al.*, 1985). No entanto, se os PAHs podem ser os causadores das DIBs, pois seus perfis e formas de emissões são semelhantes, então que tipos de PAHs, ou seja, quais espécies de PAHs exatamente estão contribuindo para as emissões em IR observadas? Quais espécies de PAHs são mais comuns em diferentes tipos de objetos astrofísicos?

Figura 1 – (a) Estrutura dos PAHs $C_{10}H_8N$ (esquerda) e $C_{48}H_{22}$ (direita) mapeados na atmosfera de Titã (LÓPEZ-PUERTAS *et al.*, 2013). (b) Espectro observado em direção ao plano Galáctico, mostrando as bandas de PAHs (YAMAMOTO, 2017).



Fonte: ESA / NASA Ames PAHdb e YAMAMOTO, 2017.

Em busca dessas respostas e outras questões relacionadas aos PAHs, vários pesquisadores têm se esforçado em procurar e fornecer soluções. Entre estes: estão grupos experimentais, tentando reproduzir as condições verificadas por observações no IR; astrônomos observacionais, estudando espectros observados das emissões dos PAHs, e pesquisadores teóricos, desenvolvendo códigos para prever possíveis composições químicas de espécies de PAHs no ISM também estão engajados neste problema.

O presente trabalho apresenta um estudo para uma amostra de galáxias com núcleos ativos visando caracterizar os principais tipos de moléculas de PAHs presentes nesses objetos e as condições físicas locais de suas fontes irradiadoras, bem como as características do gás ionizado residente, pela combinação de dados infravermelho com o ótico. Condições físicas locais do gás ionizado, como temperatura, densidade eletrônica, abundância química do oxigênio, e parâmetro de ionização serão obtidas por meio da intensidade das linhas de emissões de íons presentes no espectro observado. Possíveis correlações entre as propriedades físicas do gás ionizado e as populações de PAHs serão obtidas para a amostra estudada. Para isso, os procedimentos a seguir serão considerados.

1. Identificar as possíveis populações de espécies que estão contribuindo com as assinaturas de PAHs presentes na amostra de galáxias Seyfert e Starburst;
2. Estudar a natureza molecular dos PAHs em relação ao número de átomos de carbono, carga e presença de heteroátomo, a fim de correlacioná-la às condições físicas estimadas do gás ionizado em que estas moléculas residem;
3. Estimar as condições físicas do gás ionizado através da combinação de modelos de fotoionização e intensidades de linhas de emissão, tais como $[O III]\lambda 4363$,

$[\text{O III}]\lambda 4959$, $[\text{O III}]\lambda 5007$, $[\text{N II}]\lambda 5755$, $[\text{N II}]\lambda 6548$, $[\text{N II}]\lambda 6584$, $[\text{S II}]\lambda 6717$ e $[\text{S II}]\lambda 6731$.

4. Construir uma grade de modelos de fotoionização para verificar se as emissões observadas no IR e ótico podem ser reproduzidas por esses modelos, a fim de investigar correlações entre as emissões observadas e a dureza da fonte ionizante, entre outros parâmetros.

Este trabalho está estruturado da seguinte forma: no Capítulo 2 uma discussão sobre o processamento, relevância e assinaturas dos PAHs é apresentada. Ainda nesse capítulo, expõe-se uma breve revisão sobre os objetos a serem considerados nesse estudo. Os dados observacionais considerados nesse trabalho são discutidos, bem como os critérios de seleção da amostra são apresentados no Capítulo 3. O Capítulo 4 elenca todos os métodos utilizados no processamento dos dados. No Capítulo 5, os resultados são apresentados e discutidos, e no capítulo 6 finaliza-se com as conclusões e perspectivas para trabalhos.

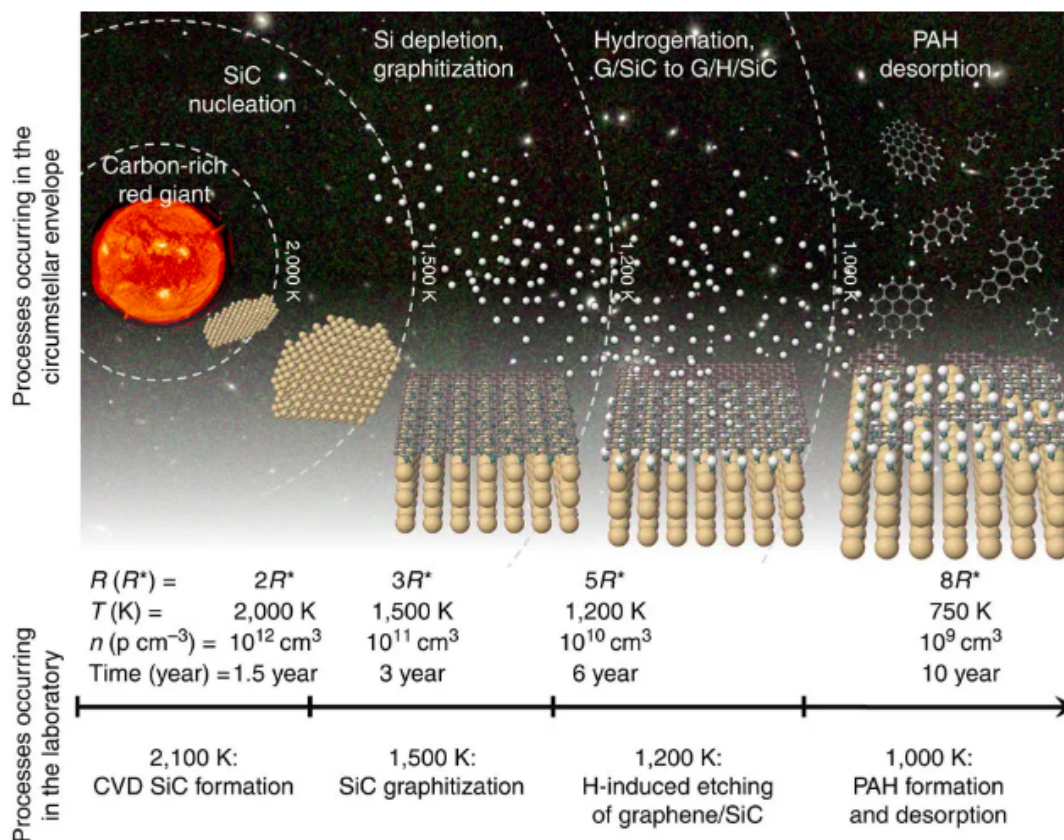
2 Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos e as galáxias

2.1 Processamento dos PAHs

O mecanismo de formação dos PAHs baseia-se principalmente na reação em fase gasosa conhecida como abordagens *bottom-up* e *top-down*. O mecanismo *bottom-up* ocorre quando pequenas moléculas se agrupam para formar espécies mais complexas, como por exemplo, pequenos hidrocarbonetos como o acetileno, que, ao sofrer reação de adição com o hidrogênio, geram o radical fenil que, ao passar pelo mesmo processo, anéis aromáticos passam a se adicionar ao radical fenil, originando espécies de PAHs. Ambas as espécies tornam o ISM mais enriquecido quimicamente (TIELENS, 2008). Já o *top-down* acontece quando as macromoléculas são quebradas para formar moléculas menores no ISM. Abaixo estão alguns estudos que corroboram tais abordagens.

- Merino *et al.* (2014) demonstraram que espécies aromáticas podem ser formadas de forma eficiente na superfície da poeira estelar abundante em carvão de silício (SiC) exposto ao hidrogênio atômico sob condições de pressão e temperatura análogas ao ISM. A Figura 2 apresenta as quatro etapas desse processo de formação de PAHs interestelares e moléculas aromáticas-alifáticas no envoltório de uma estrela evoluída. Peverati *et al.* (2016) demonstraram computacionalmente que os processos *bottom-up* são mais prováveis de ocorrer (a partir de C₂H₂), ao invés de *top-down*. Além disso, Dunk *et al.* (2013) demonstraram experimentalmente que o fulereno pode ser sintetizado pelo processo *bottom-up*. A detecção de material aromático como isômeros de cianonaftaleno e ciano-ciclopentadieno, assim como HC₁₁N e HC₄NC entre outros, observado com radiotelescópio na nuvem molecular escura e fria, TCM-1 (MCGUIRE *et al.*, 2021), sustenta a abordagem *bottom-up*.
- Andrews *et al.* (2015) demonstraram que os *grandPAHs* próximos a estrelas são ionizados, desidrogenados e fragmentados, tomando as formas mais estáveis de compostos alotrópicos de carbono, como os fulerenos devido à radiação UV. O conceito de *grandPAHs* foi definido por Tielens (2013) como um conjunto de espécies de PAHs mais estáveis, capazes de sobreviver ao intenso processamento no ISM e, como tal, dominam a população dos PAHs no espaço. A Figura 3 apresenta um diagrama da evolução de espécies de PAHs a partir dos *grandPAHs*, em que é representada uma intensa formação de PAHs no limite entre a nuvem molecular e

Figura 2 – Esquema qualitativo do processo de formação de PAHs proposto por Merino *et al.* (2014) que pode ser atribuído à abordagem *bottom-up*.

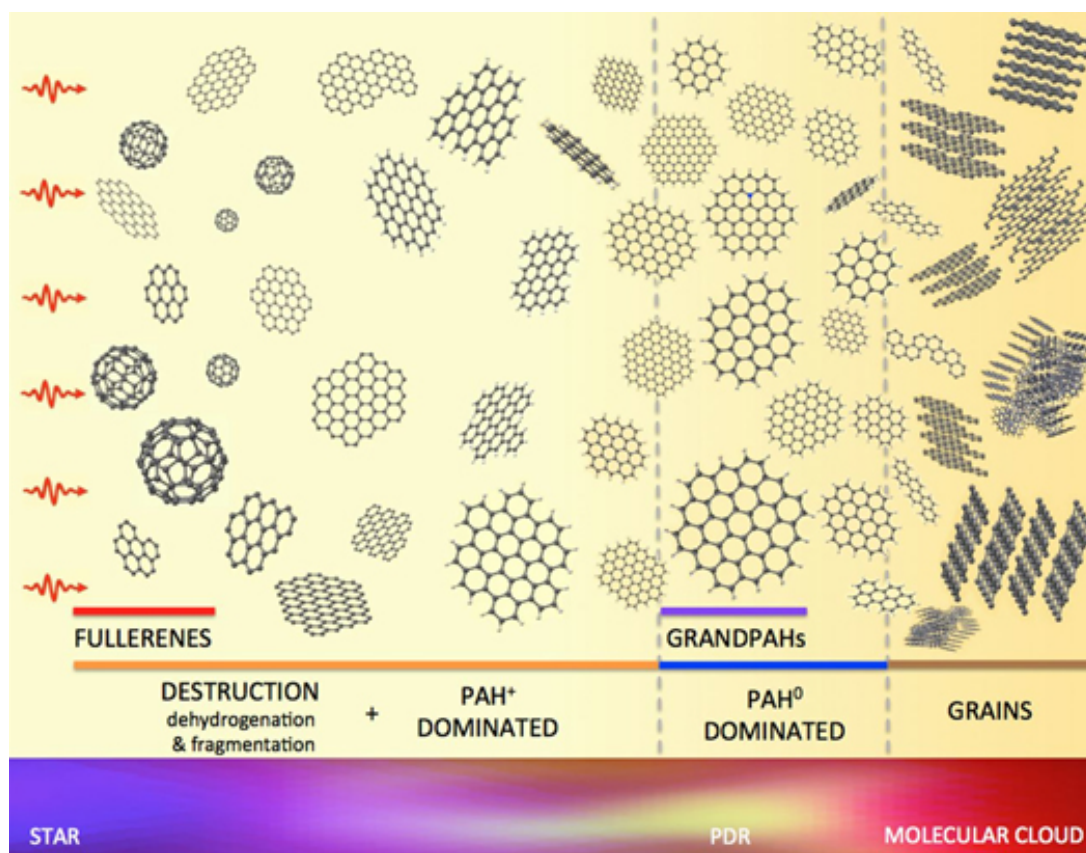


Fonte: Merino *et al.* (2014)

a região de fotodissociação (PDR, do inglês *Photodissociation Region*) da nebulosa de reflexão NGC 7023.

- Berné e Tielens (2012) mostraram que a abundância de PAHs da nebulosa de emissão NGC 7023 diminui com a distância em relação à estrela central, enquanto, ao mesmo tempo, a abundância do fulereno aumenta, indicando que os fulerenos podem ser formados por uma fotoquímica, abordagem *top-down* a partir de PAHs grandes, com mais de 60 átomos de carbonos. Mais tarde, Zhen *et al.* (2014) mostraram, pela primeira vez, evidências experimentais da viabilidade química de tal rota de formação do fulereno, isto é, pelo abordagem *top-down*. Posteriormente, Berné, Montillaud e Joblin (2015) apresentaram, por meio de modelo fotoquímico, a possibilidade de formar o C_{60} a partir do $C_{66}H_{20}$ mediante irradiação de fótons no ultravioleta originários das estrelas na nebulosa NGC 7023. Seus resultados indicam ser improvável PAHs maiores que $C_{66}H_{20}$ contribuir significativamente para a formação do C_{60} , sendo que PAHs com menos de 60 átomos de C tendem a se fragmentar em espécies menores. A Figura 4 representa uma visão geral da abordagem *top-down*, na qual a fotoquímica dos PAHs no ISM ocorre na presença de fótons UV e pela combinação de efeitos de desidrogenação e fragmentação que

Figura 3 – Diagrama da evolução de espécies de PAHs a partir dos *grandPAHs* acordando com a hipótese top-down.



Fonte: [Andrews et al. \(2015\)](#)

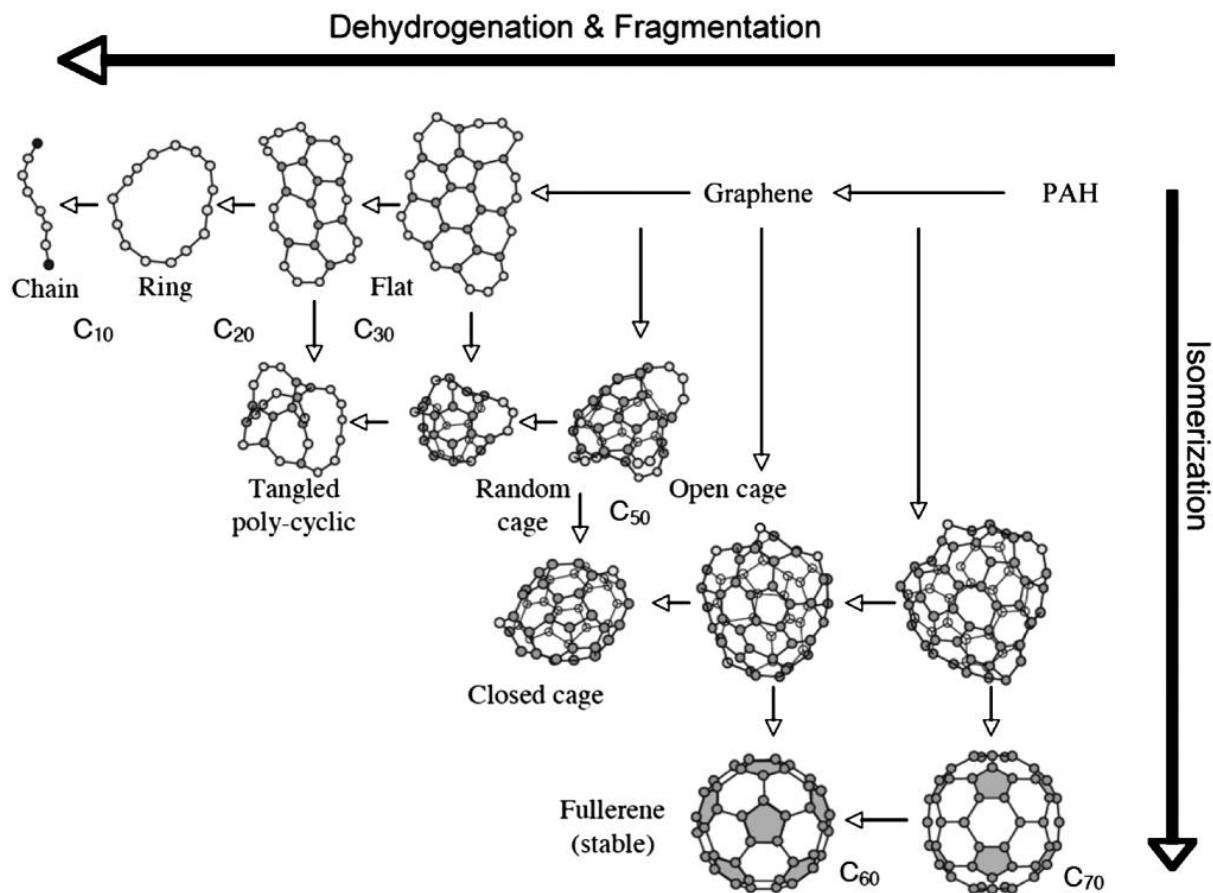
favorecem a formação de espécies menores e a isomerização levando à formação de fullerenos.

2.2 Importância dos PAHs

Entre as relevâncias típicas dos PAHs, destaca-se como principal seu perfil de traçador de regiões de formação estelar e seu importante papel frente ao aquecimento do gás neutro no ISM em função do seu baixo potencial de ionização (5 a 7 eV), o que favorece o desencadeamento de processos físico-químico nos ambientes astronômicos ([TIELENS, 2008](#)), assim como sua elevada abundância em diversos objetos estelares. Depois do H₂ e CO, os PAHs são provavelmente as moléculas mais abundantes no Universo ([SCHKENNER, 2015](#)).

Além dos PAHs possuírem um importante papel no balanço de energia do ISM, eles também são responsáveis pela maior parte do aquecimento fotoelétrico do gás nas PDRs, onde agem tanto como aquecedores, como resfriadores, pela emissão no IR, segundo [Bakes e Tielens \(1994\)](#). Outrossim, os PAHs são moléculas importantes do ponto de vista de diagnóstico galáctico, já que suas emissões podem ser usadas como um calibrador das

Figura 4 – Representação esquemática da química de carbono interestelar relacionado à abordagem *top-down*.



Fonte: Tielens (2013)

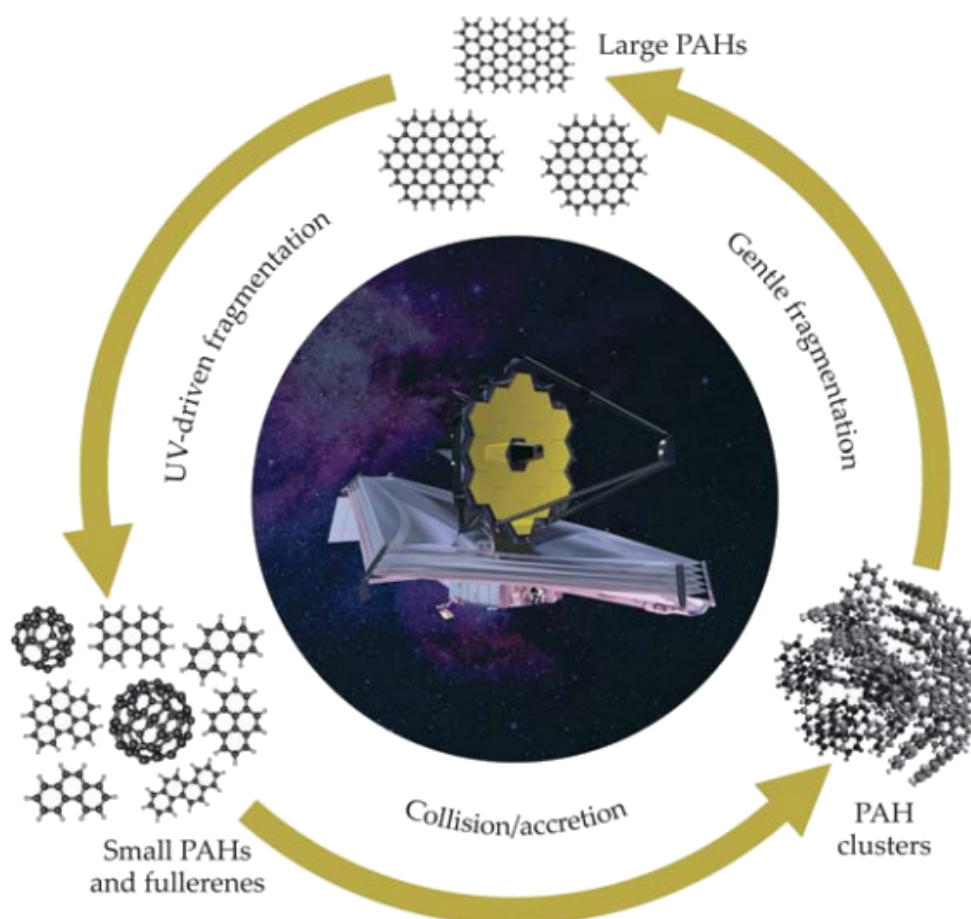
taxas de formação estelar em galáxias com buracos negros supermassivos, por exemplo (ALONSO-HERRERO, 2013).

Estudos mostram que os PAHs representam uma das formas mais abundantes de carbono no Universo, sendo que aproximadamente 15% do carbono elementar do Universo está na forma de PAHs (CANDIAN; ZHEN; TIELENS, 2018). As emissões no infravermelho médio (MIR, do inglês *Mid-Infrared*) são dominadas por bandas desta classe de moléculas (JOBLIN; LÉGER; MARTIN, 1992). Acredita-se que 50% da luminosidade emitida no MIR pode ser devido às bandas mais fortes dos PAHs (TIELENS, 2008).

Com as abundâncias estimadas e os processos de formação *bottom-up* e *top-down* reconhecidos, diversas abordagens sobre os ciclos dos PAHs e seu papel dentro da astroquímica têm sido especulados em muitas publicações. A Figura 5 mostra uma sugestão do ciclo de vida de grandes moléculas compostas de carbonos no ISM apresentado por Candian, Zhen e Tielens (2018). No centro da figura está uma ilustração do telescópio espacial *James Webb*, que auxiliará a melhor caracterizar esse ciclo de vida. Nessa representação, os aglomerados de PAHs são fragmentados em PAHs grandes

e, posteriormente, fragmentados em PAHs pequenos e fulerenos, devido à interação com fótons UV. Esses PAHs pequenos e fulerenos podem formar aglomerados moleculares por meio de colisões e reações entre si. Os aglomerados são mantidos juntos por forças fracas de Van der Waals. Colisões ou absorções de fótons de baixa energia decompõem os aglomerados em PAHs menores, que interagem entre si para formar PAHs grandes novamente. Essa abordagem concorda com os resultados apresentados por [Rapacioli, Joblin e Boissel \(2005\)](#), que demonstraram que PAHs pequenos, dentro de ambientes típicos de nuvens moleculares, podem colidir e se agrupar em estruturas maiores e, quando expostos a campos UV fortes próximos à estrelas brilhantes, esses PAHs maiores podem fragmentar-se e mudar de um isômero para outro, reiniciando o ciclo.

Figura 5 – O ciclo de vida dos PAHs grandes

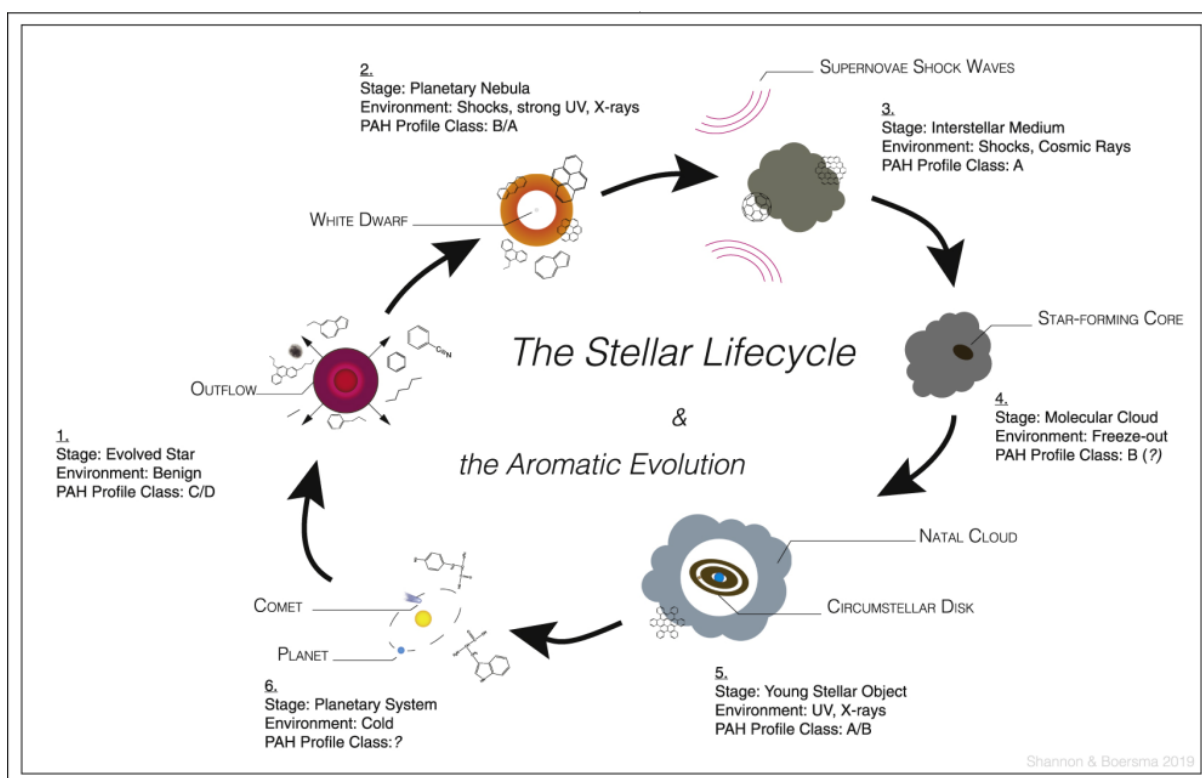


Fonte: [Candian, Zhen e Tielens \(2018\)](#)

A Figura 6 mostra uma idealização simples do ciclo de vida de estrelas de baixa massa e massa intermediária, apresentada por [Shannon e Boersma \(2019\)](#), sobrepostas com a evolução dos compostos aromáticos exibindo a formação. O ciclo de vida dos PAHs - ou seja, sua formação, evolução e destruição - são, previsivelmente, dependentes dos ambientes em que residem. Uma descrição de cada uma das etapas desse ciclo evolutivo

dos PAHs sob seis ambientes astrofísicos são discutidos a seguir.

Figura 6 – Ciclos de vida estelar e evolução dos PAHs.



Fonte: Shannon e Boersma (2019)

1. Estrela evoluída: Acredita-se que os PAHs são formados no envoltório de estrelas do ramo assintótico das gigantes (AGB, do inglês *asymptotic giant branch*), que são ricas em carbono (JOBLIN; TIELENS; CHERCHNEFF, 2011).
2. Nebulosa planetária: Ventos produzidos por estrelas evoluídas ejetam os PAHs para o meio interestelar, onde são processados por fótons energéticos de UV distante, UV extremo e raios-X. É nessa fase que os PAHs provavelmente perdem cadeias e grupos laterais alifáticos.
3. Meio interestelar: O material nebular é dissipado e ejeta os PAHs sobreviventes no ISM onde são expostos a mais fótons e partículas energéticas, como raios cósmicos. Explosões de supernovas próximas às regiões do ISM enriquecida com PAHs também reduzem a população de PAHs devido ao choque de gás, sobrevivendo apenas os membros mais estáveis (MICELOTTA; JONES; TIELENS, 2011; MICELOTTA *et al.*, 2012). Por outro lado, a quebra e a pulverização de grãos reabastecerão parte da população de PAHs (JONES; TIELENS; HOLLENBACH, 1996).
4. Nuvens moleculares gigantes: O material interestelar pode se aglomerar mais uma vez para formar nuvens moleculares gigantes e, em seus densos núcleos formadores de estrelas, os PAHs congelarão (COOK *et al.*, 2015). Durante esse estágio, ocorre

processamento por radiação UV e raios cósmicos dos PAHs adsorvidos no gelo, além de adição e oxidação de grupos nesses PAHs. Apesar de alguns PAHs serem desorvidos pela interação ocasional de raios cósmicos, a maioria permanecerá adsorvida.

5. Disco protoestelar: Na fase de formação estelar, a protoestrela em formação aquecerá regiões próximas a ela e desorverá os PAHs congelados. Possíveis alterações na população de PAHs devido às reações fotoquímicas no gelo podem ocorrer. O processamento dos PAHs também ocorre no disco protoplanetário impulsionado pelos fótons UV estelares, raios-X e partículas energéticas estelares. Nesse ambiente, os PAHs são capazes de manter alterações químicas feitas na sua fase condensada, e a dragagem de material do plano intermediário para a superfície do disco mantém uma química ativa (TIELENS, 2013).
6. Sistema planetário: Uma vez formado o sistema planetário, os PAHs serão incorporados ao material rochoso, planetesimais e cometários que entregam grande parte do reservatório orgânico e volátil ao planeta em formação. Dessa forma, os PAHs podem desempenhar um papel importante na formação da vida, fornecendo uma estrutura molecular para a construção do ácido ribonucleico (RNA, do inglês Ribonucleic acid) (EHRENFREUND *et al.*, 2006). Dessa etapa, surge a relevância prebiótica dos PAHs, que será discutida na seção seguinte.

À medida que o sistema estelar evolui, o ciclo inteiro se repete.

É importante destacar também a importância dos PAHs na formação de moléculas prebióticas. Neste caso, PAHs com vários anéis de carbonos podem apresentar heteroátomos associados em sua estrutura como os derivados nitrogenados (N-PAHs), mais comumente conhecidos como PANHs, e os oxigenados (O-PAHs).

PANHs são PAHs nitrogenados que vêm ganhando relevância nos estudos de astrobiologia por indicarem possuir um papel crítico na formação de moléculas prebióticas, as quais podem ser precursoras da vida, como, por exemplo, álcoois e aminoácidos. Estudos demonstram que moléculas prebióticas podem se estruturar para formarem protocélulas (DEAMER; SZOSTAK, 2010). Dessa forma, os PANHs vêm despertando interesse prebiótico, ou seja, incentivando estudos voltados para entender possíveis mecanismos, padrões e/ou elos entre a química dessas espécies no ISM e as nucleobases que compõem todos os seres vivos (EHRENFREUND *et al.*, 2006). Por isso, investigar os PAHs do ponto de vista prebiótico deve ser considerado, tanto na avaliação da estabilidade quanto na produção de espécies prebióticas nos ambientes astrofísicos. O trabalho apresentado por Canelo *et al.* (2018) mostra que os perfis das bandas de PANHs são predominantes em 6.2 μm em uma amostra de 155 galáxias tipo Starburst,

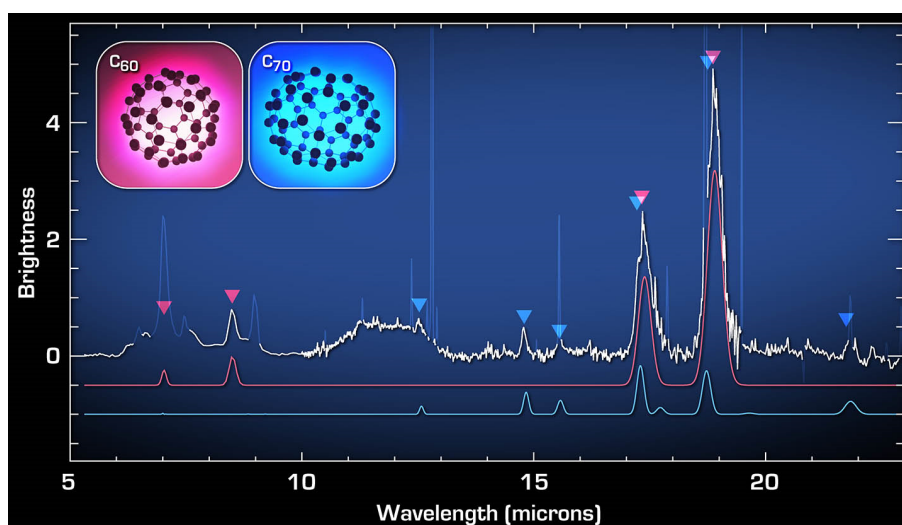
concluindo que os PANHs constituem outro reservatório de nitrogênio no Universo, além do nitrogênio na fase gasosa e no gelo do ISM.

Os resultados de [Coelho, Friaça e Mendoza \(2021\)](#) indicam que os PAHs podem ser espécies intermediárias importantes na produção de heterocíclicos de nitrogênio (pirrol e piridina). As altas abundâncias derivadas para a piridina, por meio da modelagem da Nebulosa Cabeça de Cavalo, usando o código PDR MEUDON, reforçam a importância desse tipo de estudo.

2.3 Assinaturas de PAHs

Apesar de a evidência das bandas largas de PAHs ser bem clara ao se observar uma variedade de objetos astrofísicos no IR, a assinatura dos PAHs ainda é um enigma. Afirmar qual a espécie de PAH, quantos átomos ela possui, qual o tipo de carga e arranjo espacial que está formando as características observadas no espectro é um desafio na Astrofísica. Um exemplo dos primeiros marcos da resolução desse enigma foi o mapeamento das bandas de fulerenos C_{60} e C_{70} proeminentes em 7.0, 8.5, 17.4 e 18.9 μm na nebulosa planetária Tc1 observada por [Cami *et al.* \(2010\)](#), onde foi estimado que a presença de C_{60} representa de 0.1 a 1.5% do carbono presente no envoltório de estrelas evoluídas. Esta estimativa também foi encontrada por [García-Hernández *et al.* \(2010\)](#). A Figura 7 mostra a assinatura de C_{60} (em rosa) e C_{70} (em azul), observada na nebulosa planetária Tc1 com o Espectrógrafo Infravermelho (IRS), a bordo do telescópio espacial Spitzer, sobreposta às assinaturas dos dois fulerenos em questão obtidas a partir de espectros de laboratório.

Figura 7 – Assinatura de C_{60} e C_{70} na nebulosa planetária Tc1



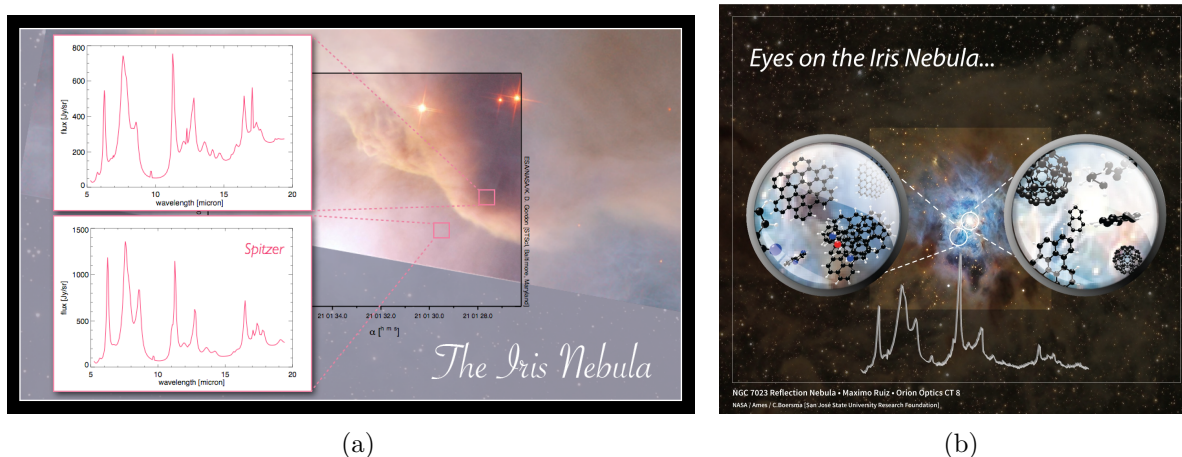
Fonte: NASA/JPL-Caltech/J. Cami, University of Western Ontario/SETI Institute.

Diversos outros trabalhos têm sido realizados de maneira experimental em laboratórios ou por meio de cálculos teóricos para a detecção da emissão das bandas de

fulereno em outros objetos estelares, tais como: nebulosa de reflexão (SELLGREN *et al.*, 2010; PEETERS *et al.*, 2012; BOERSMA; RUBIN; ALLAMANDOLA, 2012), objetos estelares jovens (ROBERTS; SMITH; SARRE, 2012) e nuvens difusas no ISM local (BERNÉ *et al.*, 2017). Também foi demonstrado em laboratório que o C_{60}^+ é responsável pela emissão das DIBs 9 577 e 9 632 Å no ISM (CAMPBELL *et al.*, 2015). Deste modo, o fulereno em objetos estelares galácticos é uma das assinaturas de PAHs que mais vêm sendo estudadas recentemente.

A Figura 8a mostra a assinatura de PAHs no espectro do IR de duas regiões da nebulosa Iris. A Figura 8b ilustra um exemplo de assinatura de PAH no IR (painel inferior) na nebulosa Iris, expondo os diferentes tipos de estruturas de PAHs presentes (painel superior). Os PAHs grandes, que produzem a maior parte da emissão entre a estrela e a nuvem molecular, são também apresentados na Figura 8b. É mostrada também a região circundante da estrela, onde os PAHs maiores são destruídos pela radiação UV dura e pelos fragmentos de PAHs, sendo os PAHs menores e os fulerenos dominantes.

Figura 8 – Painel esquerdo (a): Assinatura de PAHs no espectro IR de duas regiões da nebulosa Iris. Painel direito (b): Exemplo de assinatura de PAH no IR (painel inferior) em duas posições na nebulosa IRIS mostrando os diferentes tipos de estruturas/espécies de PAHs presentes.



Fonte: NASA Ames PAHdb.

2.4 PAHs e as condições físicas do ambiente em que residem

As mudanças observadas nas características da população de PAHs são um resultado das mudanças em condições físicas como densidade, força do campo de radiação UV, temperatura e abundância dos ambientes em que residem (SIDHU *et al.*, 2021). Dessa forma, a clara dependência dos PAHs com seu ambiente local torna-os uma ferramenta importante para provar e determinar as condições físicas dos ambientes.

Diversos estudos apresentam correlações entre os PAHs e a metalicidade, demonstrando, entre outros, a relação entre esses dois constituintes galácticos. Seok,

Hirashita e Asano (2014) concluíram por modelo de evolução química em galáxias que a abundância de PAHs é baixa em baixas metalicidades ¹ ($Z < 0.1 Z_{\odot}$), mas aumenta rapidamente além de uma certa metalicidade ($Z > 0.3 Z_{\odot}$). Por outro lado, Maragkoudakis *et al.* (2018) encontraram que as variações na banda $17 \mu\text{m}$ dependem do tipo de objeto, no entanto, não verificaram dependência da metalicidade para as regiões H II extragalácticas e galáctica. O impacto da dependência dos PAHs com a temperatura pode ser verificado nos estudos de Hanine *et al.* (2020), por meio dos quais concluíram que o tamanho das espécies de PAHs formadas aumenta com o aumento da temperatura até 800 K, formando anéis de até 32 átomos de carbono e sendo correlacionados com o nível de desidrogenação, o que pode tornar essas moléculas altamente reativas (CHEN, 2018), característica que pode intensificar a formação de grandes PAHs.

Os PAHs também têm sido utilizados como calibradores para a formação estelar em galáxias. Shipley *et al.* (2016) verificaram que a luminosidade total do PAH ($6.2\mu\text{m} + 7.7\mu\text{m} + 11.3\mu\text{m}$) se correlaciona linearmente com a taxa de formação estelar (SFR) medida pela luminosidade em $H\alpha$ e corrigida pela extinção (usando a soma da emissão $H\alpha$) observada e a luminosidade correspondente de $24 \mu\text{m}$ como estabelecido por Kennicutt Robert C. *et al.* (2009), com uma pequena dispersão de 0.14 dex. A dispersão é semelhante àquela observada na comparação de outros indicadores precisos de SFRs, mostrando que os valores derivados de PAHs também são precisos.

Ainda, a presença de PAHs em galáxias com núcleo ativo (AGN, do inglês *Active galactic nucleus*) tem despertado muito interesse nessa área. A ionização das moléculas de PAH, bem como do gás ionizado ao redor do núcleo das galáxias Seyfert, é dominada pela dureza da radiação proveniente do disco de acreção em volta do buraco negro supermassivo. Madden *et al.* (2006) e Maragkoudakis *et al.* (2018) descobriram que a razão da intensidade total dos PAHs com a intensidade de grãos muito pequenos diminui com o aumento da dureza de radiação, conforme traçado por $[\text{Ne III}]/[\text{Ne II}]$, indicando que campos de radiação mais duros são os grandes responsáveis pela destruição de PAHs em regiões de baixa metalicidade. Além disso, (SALES; PASTORIZA; RIFFEL, 2010; SALES *et al.*, 2013) estudaram 186 galáxias Seyfert e Starburst e concluíram que galáxias Seyfert parecem apresentar moléculas de PAH maiores (≥ 180 átomos de carbono) do que galáxias Starburst. Esses estudos propõem que as moléculas de PAHs podem sobreviver perto de AGNs, uma vez que seus toros empoeirados provavelmente fornecem densidades de coluna necessárias para proteger os PAHs do campo de radiação rígido, conforme Alonso-Herrero *et al.* (2014), Ruschel-Dutra *et al.* (2014).

¹ Em Astronomia, metalicidade é a abundância dos elementos presentes em um objeto que são mais pesados do que o hidrogênio e hélio.

2.5 Galáxias Seyfert e Starburst

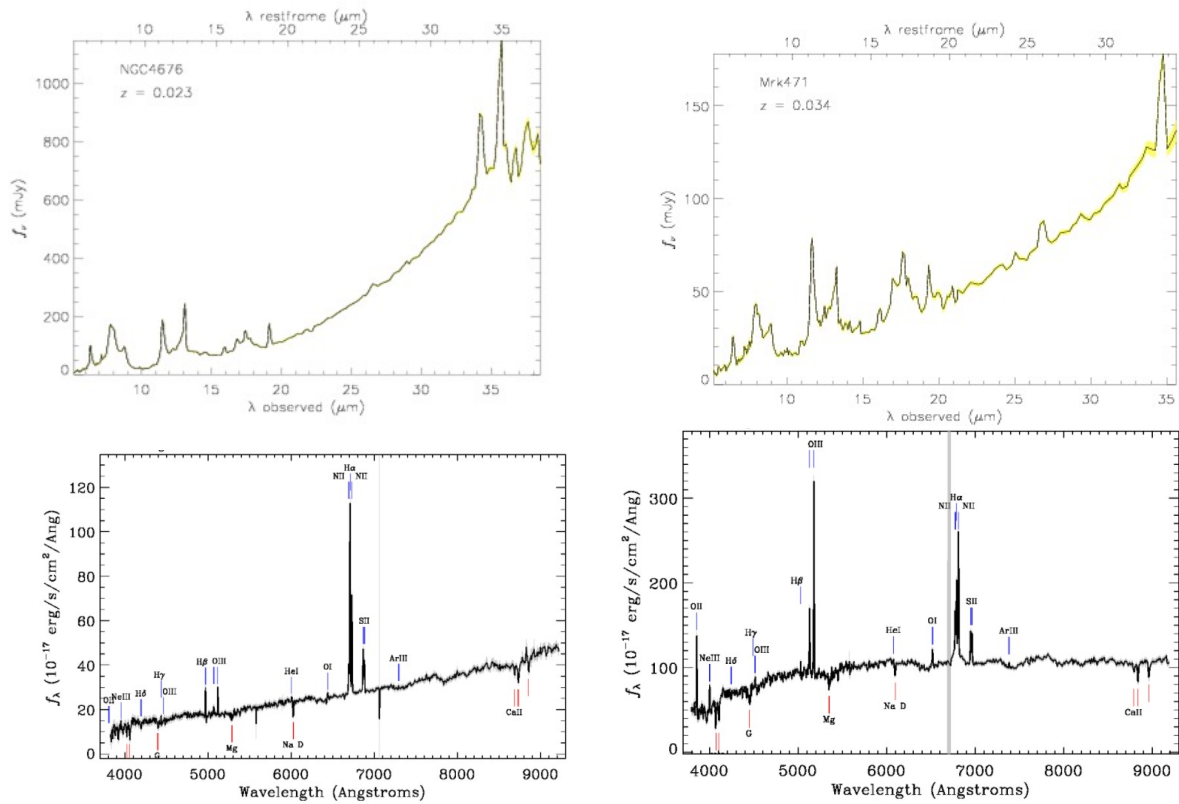
Os AGNs são galáxias que possuem uma região compacta no seu centro, com uma alta luminosidade, cerca de $10^{12}L_{\odot}$ no IR sendo emitida do seu núcleo. Tal luminosidade se estende por todo espectro eletromagnético, cuja origem é não térmica. Dessa forma, essa luminosidade não pode ser oriunda de estrelas (OLIVEIRA; SARAIVA, 2014). Estudos mostram que essa fonte intensa de radiação é devido à presença de matéria interestelar, sendo acretaada por um buraco negro central, onde a gravidade faz o gás cair em movimento circular, liberando alta energia neste processo, e tornando-se uma fonte ionizante do gás que permanece em volta (OSTERBROCK; FERLAND, 2006).

As galáxias Seyferts são um tipo de AGNs cuja luminosidade bolométrica varia de 10^9 a $10^{12}L_{\odot}$ e contribui em torno de 50% com a luminosidade total da galáxia no ótico. Tem como notoriedade a presença de linhas de emissões fortes de elementos pesados com alto potencial de ionização (≥ 100 eV), como o $[\text{Fe VII}]\lambda 6087 \text{ \AA}$, $[\text{Fe X}]\lambda 6374 \text{ \AA}$, $[\text{S VIII}]\lambda 9913 \text{ \AA}$ e $[\text{Ca VIII}]\lambda 23218 \text{ \AA}$ (OLIVA *et al.*, 1994). As Seyferts podem ser divididas em Seyfert 1 e 2, sendo que o critério de distinção corresponde à presença de linhas alargadas e estreitas no seu espectro nuclear. As Seyfert 1 apresentam linhas de emissão permitidas, como $\text{H}\alpha$ e $\text{H}\beta$, alargadas, enquanto as linhas proibidas são sempre estreitas. Já as galáxias Seyfert 2 apresentam apenas linhas de emissão estreitas, sejam estas proibidas ou permitidas.

As galáxias do tipo Starburst (SB) são conhecidas como regiões de alta formação estelar entre 10 a 300 M_{\odot} /ano, enquanto a Via-Láctea é de apenas 2 M_{\odot} /ano (SCHNEIDER, 2014), por exemplo. É uma região com alta densidade de gás, além de abundante em poeira e frequentemente está envolvida em processo de fusões intergalácticas, desencadeando atividades contínuas de formação de estrela com tipo espectral O e B. Tais estrelas são as maiores responsáveis pela ionização do gás nesse tipo de objeto. Todas essas características favorecem uma alta abundância química nesse ambiente galáctico. Além de ser um tipo de galáxia das mais brilhantes do Universo, as Starburst também são responsáveis pelo enriquecimento químico do Universo e pela produção de metais ao longo de várias gerações estelares. Segundo Gallego *et al.* (1995), é possível que todas as galáxias passem por uma fase de formação intensa em algum momento de seu ciclo de vida, alimentando a ideia de que todas as demais galáxias já passaram ou ainda passarão por um estágio de galáxia Starburst; por conseguinte, acredita-se que as Starburst sejam uma fase específica de evolução galáctica.

A presença de bandas de PAHs é claramente visível na região nuclear dos espectros observados no IR tanto em Seyfert, como em Starburst. Por isso, os objetos em estudos demonstram-se propícios ao mapeamento desta população de PAHs que pode estar contribuindo com a emissão no IR. A presença de linhas de emissão metálicas

Figura 9 – Pannel superior: Espectros no IR observados na região nuclear das galáxias NGC 4676 e Mrk 471 extraídos do projeto Spitzer/ATLAS. Pannel inferior: Espectros óticos observados na região nuclear das galáxias NGC 4676 e Mrk 471 extraídos do SDSS, DR16.



Fonte: Projeto Spitzer/IRS Atlas e SDSS, DR16.

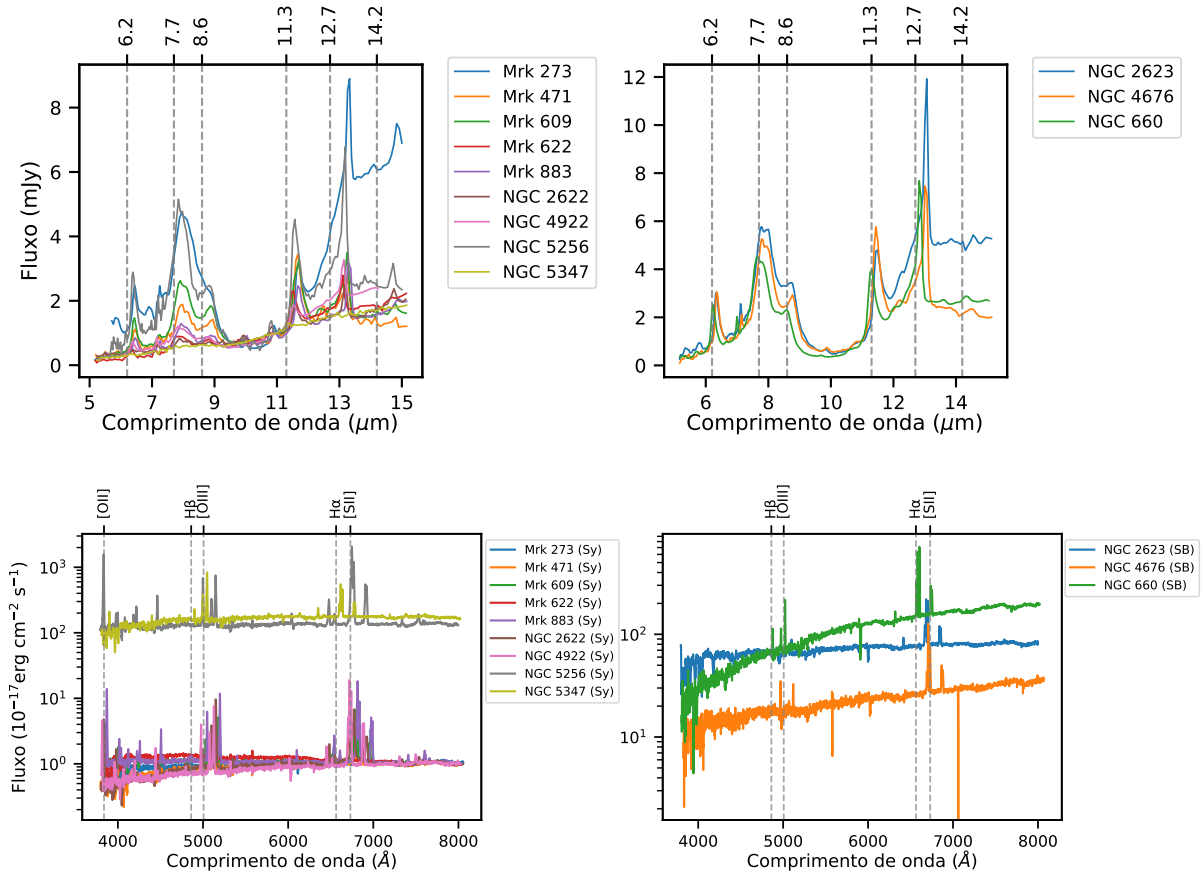
como: [O III] λ 4363, H β , [O III] λ 4959, [O III] λ 5007, [N II] λ 5755, [N II] λ 6548, H α , [N II] λ 6584, [S II] λ 6717 e [S II] λ 6731 também são perceptíveis em galáxias Seyfert e Starburst. Desta forma, é possível estimar as condições físicas da região gasosa ionizada, como abundância do oxigênio, temperatura e densidade eletrônica nesses objetos. Além disso, a relação das linhas de emissão em combinação com modelos de fotoionização pode ser usada para determinar a dureza da fonte ionizante e a metalicidade do gás. Nesse contexto, podem-se verificar possíveis correlações entre as regiões de gases ionizados e as regiões de fotodissociação, onde persistem os PAHs. A Figura 9 mostra o espectro no IR, com a presença das bandas de emissão de PAHs e o espectro no ótico para as galáxias NGC 4676 e Mrk 471, respectivamente, que são dois objetos de estudo deste trabalho.

3 Dados Observacionais

O presente trabalho é baseado em uma amostra de galáxias Seyfert e Starburst selecionadas a partir do Atlas Spitzer/IRS de [Hernán-Caballero e Hatziminaoglou \(2011\)](#). Esse Atlas é uma compilação de dados espectrofotométricos e fotométricos de fontes extragalácticas observadas com o espectrógrafo IRS (IRS, do inglês *Infrared Spectrograph*) a bordo do telescópio espacial Spitzer ([HOUCK *et al.*, 2004](#)) e incluem observações de baixa resolução ($R \sim 100$), contendo aproximadamente 750 espectros de galáxias com propriedades espectrais do infravermelho médio, assim como, dados auxiliares (*redshift*, fotometria ótica, etc). Foram selecionadas todas as galáxias Seyfert e Starburst com redshift $z < 0.04$ do Atlas Spitzer/IRS com espectros no intervalo de comprimento de onda de 5 - 15 μm . Além disso, todos os espectros selecionados correspondem aproximadamente à região nuclear das galáxias. Todos os espectros infravermelhos foram obtidos no modo *staring*, exceto para [Buchanan *et al.* \(2006\)](#) e [Wu *et al.* \(2009\)](#), que utilizaram o modo de mapeamento espectral, mas apenas o espectro nuclear foi dado. A partir dessa amostra preliminar, foram selecionados somente os objetos com espectros no ótico no Sloan Digital Sky Survey (SDSS) DR16 ([AHUMADA *et al.*, 2019](#)), que são obtidos com o espectrógrafo BOSS acoplado a um telescópio de 2.5 m do Observatório Apache Point. A faixa espectral considerada está entre 3 600 – 10 400 Å, com uma resolução espectral de $R = 1\,560$ a 3 700 Å e $R = 2\,270$ a 6 000 Å, e o diâmetro da fibra é de 3 segundos de arco. Na Tabela 1 são listadas as propriedades gerais da amostra de galáxias selecionadas.

Na Figura 10, os espectros brutos observados da amostra, compilados diretamente do Atlas IRS/Spitzer e do SDSS-IV, são mostrados. O painel da esquerda corresponde às galáxias do tipo Seyfert (superior: IR e inferior: ótico); e, do painel direito, às do tipo Starburst (superior: IR e inferior: ótico). Dessa forma, é possível visualizar as bandas de PAHs presentes em 6.2, 7.7, 8.6, 11.3, 12.6 e 14.2 μm , em toda a amostra dos espectros IR, assim como, as principais linhas de emissões no ótico utilizadas neste trabalho.

Figura 10 – Painel superior: Espectros IR brutos observados e compilados do Atlas IRS/Spitzer. Painel inferior: Espectros óticos brutos observados e compilados do espectrógrafo DR16 SDSS-IV.



A fonte ionizante de cada galáxia foi inicialmente retirada da literatura. No entanto, com o objetivo de confirmar a classificação da fonte ionizante das galáxias, já reportada na literatura e listada na Tabela 1, utilizamos o diagrama $[\text{O III}]\lambda 5007/\text{H}\beta$ vs $[\text{N II}]\lambda 6548/\text{H}\alpha$. Os diagramas de diagnóstico inicialmente propostos por Baldwin, Phillips e Terlevich (1981) e revisitados por Kewley *et al.* (2001) (Ke01), comumente conhecidos como diagramas BPT, são usados para distinguir objetos ionizados por estrelas massivas (SFs), AGN, e regiões de linha de emissão nuclear de baixa ionização (LINERs).

Esses diagramas diagnósticos utilizam razões das intensidades de linhas como $[\text{O III}]\lambda 5007/\text{H}\beta$ vs $[\text{N II}]\lambda 6548/\text{H}\alpha$ e $[\text{O III}]\lambda 5007/\text{H}\beta$ vs $[\text{S II}](\lambda 6717 + \lambda 6731)/\text{H}\alpha$ e $[\text{O III}]\lambda 5007/\text{H}\beta$ vs $[\text{O I}]\lambda 6300/\text{H}\alpha$. Ke01 estabeleceu uma linha teórica de formação estelar máxima, a partir do limite superior de modelos de fotoionização estelar. Dessa forma, galáxias que ocupam a região abaixo dessa linha são ionizadas por estrelas, ou seja, são Starburst e, acima, são galáxias Seyfert por serem ionizadas por AGN e/ou choques. Posteriormente Kauffmann *et al.* (2003) (Ka03) estabeleceram uma linha

Tabela 1 – Objetos selecionados e suas respectivas informações, incluindo o nome da fonte, referência IR, tipo de galáxia, coordenadas equatoriais (α e δ), magnitude absoluta na banda visual (M_B), luminosidade bolométrica na banda visual (L_V) e luminosidade infravermelha L_{IR} .

Objeto	Referencia IR	Tipo de galáxia	$\alpha(2000)^a$	$\delta(2000)^a$	z^a	$M_B(\text{mag})^a$	$L_V (L_\odot)^a$	$L_{IR} (L_\odot)^a$
Mrk 273	Wu <i>et al.</i> (2009)	Seyfert [1]	13 ^h 44 ^m 421	55 ^h 53 ^m 130	0.038	-22.34	8.37×10^{10}	7.94×10^{10}
MrK 471	Deo <i>et al.</i> (2007)	Seyfert [1]	14 ^h 22 ^m 554	32 ^h 51 ^m 030	0.034	-22.80	4.58×10^{10}	4.21×10^{10}
Mrk 609	Deo <i>et al.</i> (2007)	Seyfert [1]	03 ^h 25 ^m 253	-06 ^h 08 ^m 380	0.034	-22.48	6.58×10^{10}	4.85×10^{10}
Mrk 622	Deo <i>et al.</i> (2007)	Seyfert [1]	08 ^h 07 ^m 410	39 ^h 00 ^m 150	0.029	-21.44	3.18×10^{10}	1.85×10^{10}
Mrk 883	Deo <i>et al.</i> (2007)	Seyfert [1]	16 ^h 29 ^m 529	24 ^h 26 ^m 380	0.038	-22.19	2.70×10^{10}	3.95×10^{10}
NGC 660	Brandl <i>et al.</i> (2006)	LINER [1]	01 ^h 43 ^m 024	13 ^h 38 ^m 444	0.003	-21.50	1.32×10^{10}	2.02×10^{10}
NGC 2622	Deo <i>et al.</i> (2007)	Seyfert [5]	08 ^h 38 ^m 109	24 ^h 53 ^m 430	0.023	-22.80	4.75×10^{10}	6.35×10^{10}
NGC 2623	Brandl <i>et al.</i> (2006)	Starburst [2]	08 ^h 38 ^m 241	25 ^h 45 ^m 169	0.018	-21.80	3.35×10^{10}	1.74×10^{11}
NGC 4676	Brandl <i>et al.</i> (2006)	Starburst [3]	12 ^h 46 ^m 101	30 ^h 43 ^m 550	0.009	-20.97	2.20×10^{10}	5.15×10^{10}
NGC 4922	Wu <i>et al.</i> (2009)	Seyfert [4]	13 ^h 01 ^m 249	29 ^h 18 ^m 400	0.024	-22.20	2.75×10^{10}	...
NGC 5256	Wu <i>et al.</i> (2009)	Seyfert [4]	13 ^h 38 ^m 175	48 ^h 16 ^m 370	0.028	-22.85	5.23×10^{10}	1.06×10^{11}
NGC 5347	Buchanan <i>et al.</i> (2006)	Seyfert [1]	13 ^h 53 ^m 178	33 ^h 29 ^m 270	0.008	-20.33	4.65×10^9	3.43×10^9

Referências: [1] Veron-Cetty e Veron (2003); [2] Keel (1984); [3] Liu e Jr (1995) [4] Rush, Malkan e Spinoglio (1993); [5] Deo *et al.* (2007).

Nota: ^a Extraída da *NASA Extragalactic Database* (NED).

empírica separando regiões ionizadas por estrelas de AGNs. A Figura 11 mostra o diagrama BPT obtido por Kewley *et al.* (2006) para uma amostra de aproximadamente 500 galáxias com dados do SDSS DR4.

O diagrama $[\text{O III}]\lambda 5007/\text{H}\beta$ vs $[\text{N II}]\lambda 6548/\text{H}\alpha$ obtido para nossa amostra de galáxias é mostrado na Figura 12. A curva sólida preta representa o limite superior teórico para as regiões de formação de estrelas propostas por Ke01 e a curva tracejada preta é o limite empírico de formação estelar proposto Ka03. De acordo com a Figura 12, algumas galáxias apresentaram uma classificação diferente da literatura. Entretanto, a região nuclear das galáxias de nossa amostra é ionizada por AGN incluindo as galáxias que estão entre as linhas Ke01 e Ka03, região denominada região composta, onde o objeto é ionizado tanto por estrelas quanto por AGN. Assim, ao longo do texto, vamos nos referir a nossa amostra de galáxias como AGNs.

Figura 11 – Diagrama BPT de Ke03 para uma amostra de galáxia observada pelo SDSS segregando as regiões das suas principais fonte de ionização.

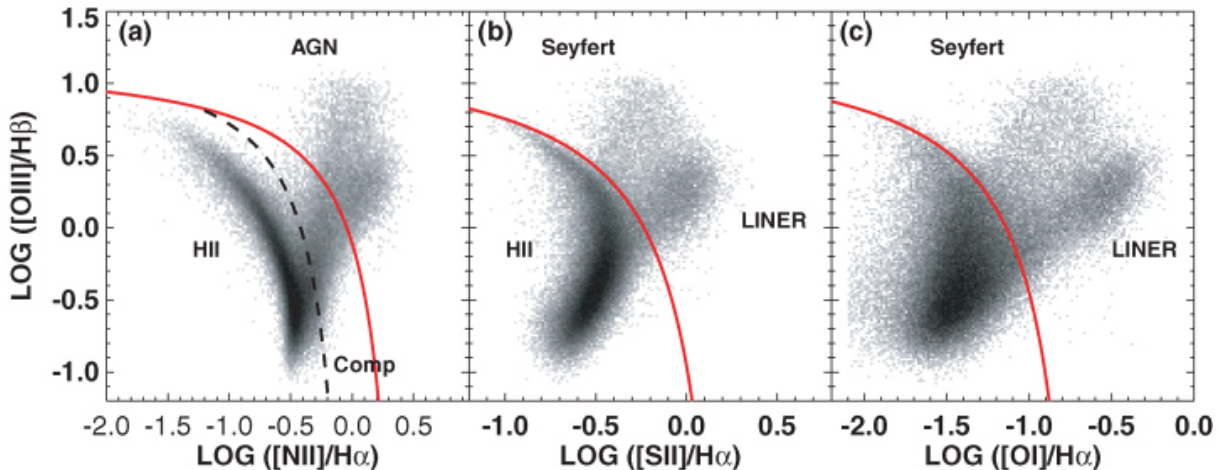
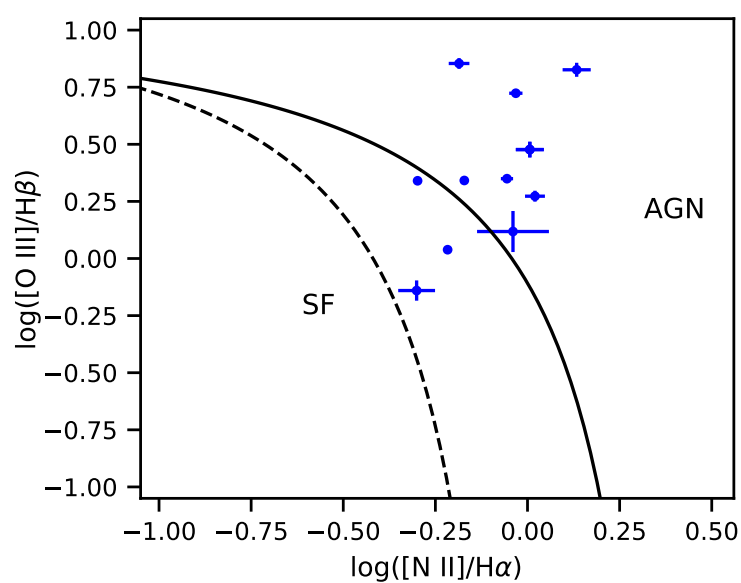


Figura 12 – Diagrama diagnóstico para galáxias desta amostra ($[\text{O III}]/\text{H}\alpha$) versus ($[\text{N II}]/\text{H}\alpha$). A curva preta sólida representa o limite superior teórico para as regiões de formação estelar proposto por Kewley *et al.* (2001), e a curva preta tracejada é o limite empírico de formação de estrelas proposto por Kauffmann *et al.* (2003). A região entre as linhas Ke01 e Ka03 é denominada região composta.



4 Análise dos dados

Neste capítulo serão apresentados os métodos e procedimentos utilizados ao longo desse trabalho para análises dos dados. O capítulo foi dividido em duas partes principais: a primeira diz respeito a análise de dados no infravermelho, e a segunda, no óptico.

4.1 Análise dos dados no Infravermelho

Os métodos utilizados para as análises no IR objetivam verificar as espécies que produzem as bandas em emissão dos PAHs, ou seja, as assinaturas de PAHs. Para tanto, realizou-se o tratamento dos espectros brutos extraídos do Atlas IRS/Spitzer para posteriormente proceder análises espectrais na faixa de comprimento de onda do óptico extraído do *Sloan Digital Sky Survey* (SDSS) do *Data Release 16* (DR16), cujo detalhamento está descrito na seção 5.2.

Primeiramente todos os espectros foram corrigidos pelo *redshift*, através da tarefa **dopcor** do IRAF ¹. Os valores de *redshift* adotados na correção encontram-se listados na Tabela 1.

A seguir, a decomposição espectral foi necessária, uma vez que o espectro observado das galáxias Seyfert e Starburst no IR contém uma diversidade de componentes de emissão. As características de PAHs estão presentes com um contínuo emitido por estrelas velhas e frias, assim como de pequenos grãos de poeira. Ainda, muitas das características dos PAHs estão misturadas com proeminentes linhas de emissão proibidas, como a do [Ne II] λ 12.8 μ m, sobreposta à banda do PAH em 12.7 μ m. Especialmente nos espectros de baixa resolução, é necessário separar as bandas de PAHs das componentes do contínuo e das bandas de absorção.

Para a decomposição das diversas componentes dos espectros das galáxias dessa amostra, assim como as medidas das intensidades das características dos PAHs, foi utilizado o programa PAHFIT, desenvolvido por Smith *et al.* (2007).

O PAHFIT é um algoritmo baseado em IDL (do inglês *Interactive Data Language*), desenvolvido para decompor os espectros IRS de baixa resolução do *Spitzer* nos diferentes componentes, que são:

- As bandas de PAHs, resolvidas ou não, e que estão em comprimentos de onda, como 6.2, 7.7, 11.3, 12.7 e 14.2 μ m. Essas bandas são representadas por perfis de Drude,

¹ IRAF: Image Reduction and Analysis Facility

que consideram o cálculo da seção de choque dos PAHs, a largura a meia altura (FWHM, do inglês *Full Width at Half Maximum*) e o comprimento de onda central das bandas.

- O contínuo estelar, cuja emissão é representada por um corpo negro a uma temperatura fixa de 5 000 K.
- O contínuo térmico da poeira, que é representado por 8 corpos negros com temperaturas de 35, 40, 50, 65, 90, 135, 200, e 300 K.
- As linhas de emissão, que incluem as linhas rotacionais do hidrogênio molecular (H_2) e linhas iônicas dos elementos, tais como, Ar II, S, Ne, O, Fe e Si. As linhas de emissão são representadas por perfis gaussianos com larguras estabelecidas a partir da resolução instrumental.
- A extinção pela poeira, que é obtida como uma combinação de uma lei de potência juntamente com as bandas de absorção dos silicatos com picos em 9.7 e 18 μm .

Os comprimentos centrais e as larguras à meia altura das linhas de emissão e das bandas de PAHs utilizadas nos ajustes foram os sugeridos por [Smith *et al.* \(2007\)](#) e estão listados na Tabela 2.

A Figura 13 mostra a decomposição do espectro observado no IR da galáxia Starburst NGC 4676 no intervalo de 5 a 15 μm através do código PAHFIT, em que suas representações são dadas por: contínuo de poeira (azul), bandas de PAH (laranja), linhas iônicas (verde), linhas estelares (vermelho), melhor ajuste (roxo) e observado (preto). A decomposição espectral para os demais objetos da amostra é apresentada no Apêndice A. A Tabela 3 apresenta as estimativas dos fluxos de PAHs obtidas usando o código PAHFIT.

Após a decomposição espectral, passou-se para a análise das bandas dos hidrocarbonetos policíclicos aromáticos usando o Banco de Dados Espectroscópico Ames PAH IR da NASA versão 3.2 (PAHdb) ([BOERSMA *et al.*, 2014](#); [JR *et al.*, 2018](#)), o qual é uma biblioteca de espectros de PAHs calculados teoricamente e/ou medidos experimentalmente para uma variedade de tamanhos, estruturas, estado de ionização e heteroátomos. A partir desse banco de dados, os espectros podem ser analisados de forma *on-line*² ou *off-line*.

Neste trabalho o ajuste das bandas de PAHs foi realizado usando a versão *on-line*. Como parâmetros de entrada ao código PAHdb foi selecionado o perfil de linha Gaussiana com FWHM de 15 cm^{-1} e deslocamento uniforme para todas as bandas de 15 cm^{-1} para

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

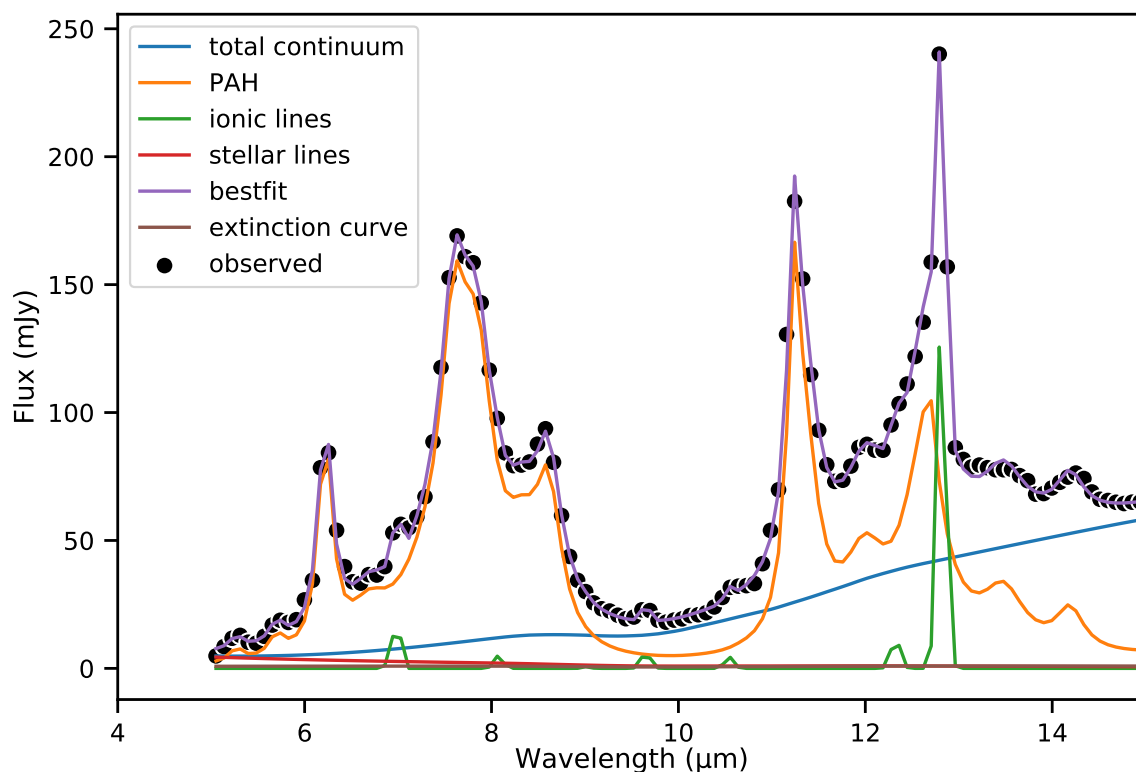
Tabela 2 – Parâmetros das Linhas de Emissão e das Bandas de PAHs do Código PAHFIT.

Linha	$\lambda(\mu\text{m})$	FWHM (μm)	Linha	$\lambda(\mu\text{m})$	FWHM (μm)
H2 S(7)	5.511	0.053	PAH	5.27	0.179
H2 S(6)	6.109	0.053	PAH	5.70	0.200
H2 S(5)	6.909	0.053	PAH	6.22	0.187
[ArII]	6.985	0.053	PAH	6.69	0.468
H2 S(4)	8.026	0.100	PAH	7.42	0.935
[ArIII]	8.991	0.100	PAH	7.60	0.334
H2 S(3)	9.665	0.100	PAH	7.85	0.416
[SIV]	10.511	0.100	PAH	8.33	0.417
H2 S(2)	12.278	0.100	PAH	8.61	0.336
[NeII]	12.813	0.100	PAH	10.68	0.214
[NeIII]	15.555	0.140	PAH	11.23	0.135
H2 S(1)	17.035	0.140	PAH	11.33	0.363
[SIII]	18.713	0.140	PAH	11.99	0.540
[OIV]	25.910	0.340	PAH	12.62	0.530
[FeII]	25.989	0.340	PAH	12.69	0.165
H2 S(0)	28.221	0.340	PAH	13.48	0.539
[SIII]	33.48	0.340	PAH	14.04	0.225
[SiII]	34.815	0.340	PAH	14.19	0.355
			PAH	15.90	0.318
			PAH	16.45	0.230
			PAH	17.04	1.108
			PAH	17.375	0.209
			PAH	17.87	0.286
			PAH	18.92	0.359
			PAH	33.10	1.655

Coluna (1): Linha de emissão atômica e/ou banda de emissão de PAH. Coluna (2): Comprimento de onda central. Coluna (3): FWHM.

Tabela 3 – Fluxos integrados de PAHs em unidades de 10^{-16} W/m² obtidos usando o código PAHFIT.

Objeto	6.2 μm	6.7 μm	7.4 μm	7.6. μm	7.8 μm	8.6 μm	11.2 μm	11.3 μm	12.6 μm	12.7 μm
	7.7 μm Complexo			11.3 μm Complexo			12.6 μm Complexo			
MrK 273	39.40	36.70	96.60	51.90	82.80	31.40	12.10	7.53	23.10	2.34
Mrk 471	3.79	0.49	0.06	5.60	5.80	3.28	1.42	5.79	3.54	0.26
Mrk 609	15.20	4.76	9.52	24.40	25.40	14.40	3.52	15.30	8.50	1.33
Mrk 622	3.74	1.45	3.59	5.19	5.52	2.95	2.31	4.76	3.81	0.00
Mrk 883	2.97	0.74	0.36	4.22	3.67	1.77	0.96	3.19	1.57	0.36
NGC 660	263.00	112.00	434.00	322.00	496.00	235.00	39.60	216.00	156.00	23.90
NGC 2622	0.59	0.43	0.00	1.57	1.53	0.56	0.58	1.53	0.23	0.22
NGC 2623	46.80	19.20	93.80	51.10	86.80	50.80	12.70	24.40	30.50	4.03
NGC 4676	21.60	7.49	28.30	27.50	31.50	15.40	6.51	14.80	12.30	1.59
NGC 4922	16.00	8.02	21.60	18.40	21.90	10.10	4.04	10.10	7.13	1.23
NGC 5256	32.10	11.10	54.30	41.30	49.10	23.00	7.18	18.50	19.50	0.54
NGC 5347	7.20	10.00	28.80	2.63	8.32	4.79	0.92	6.49	5.99	0.00

Figura 13 – Decomposição espectral de 5-15 μm da NGC 4676 usando o código PAHFIT.

melhor simular os efeitos de oscilador harmônico que as bandas de PAHs portam. A Figura 14 mostra a distribuição das espécies de PAHs em tamanho, carga e composição dentro da versão atual desse código.

Todas as espécies de PAHs foram obtidas utilizando o ajuste entre os espectros observados no IR em combinação com o banco de dados. Na Figura 15 apresenta-se o ajuste encontrado para o espectro de NGC 4676 utilizando o código PAHdb. Tal figura mostra as principais espécies que estão contribuindo para a emissão no IR deste objeto, de modo que se pode verificar a qualidade do ajuste medido pela norma euclidiana ³, cujo resultado é exibido no canto superior da figura. Os ajustes obtidos para os outros objetos da amostra são expostos nas Figuras 16 e 17 da seção resultado.

4.2 Análise dos dados no ótico

Esta seção descreve os métodos utilizados para a determinação das condições físicas como: densidade e temperatura eletrônica, abundância do oxigênio e parâmetro de ionização do gás ionizado das galáxias em estudo. Tais condições foram estimadas por meio da intensidade das linhas de emissão em combinação com modelos de fotoionização.

³ A norma euclidiana é um método matemático que mede a distância entre dois pontos, neste caso, distância entre os pontos do espectro observado e o teórico. Portanto, quanto menor a norma euclidiana, melhor a qualidade do ajuste.

Figura 14 – Distribuição das espécies de PAHs em tamanho, carga e composição dentro da versão 3.2 do PAHdb.

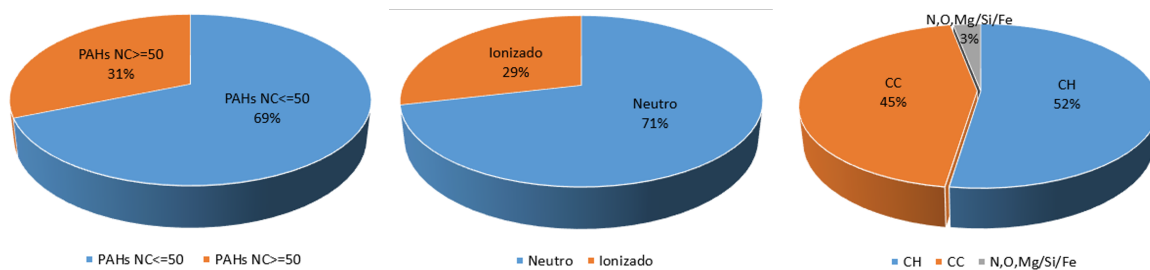
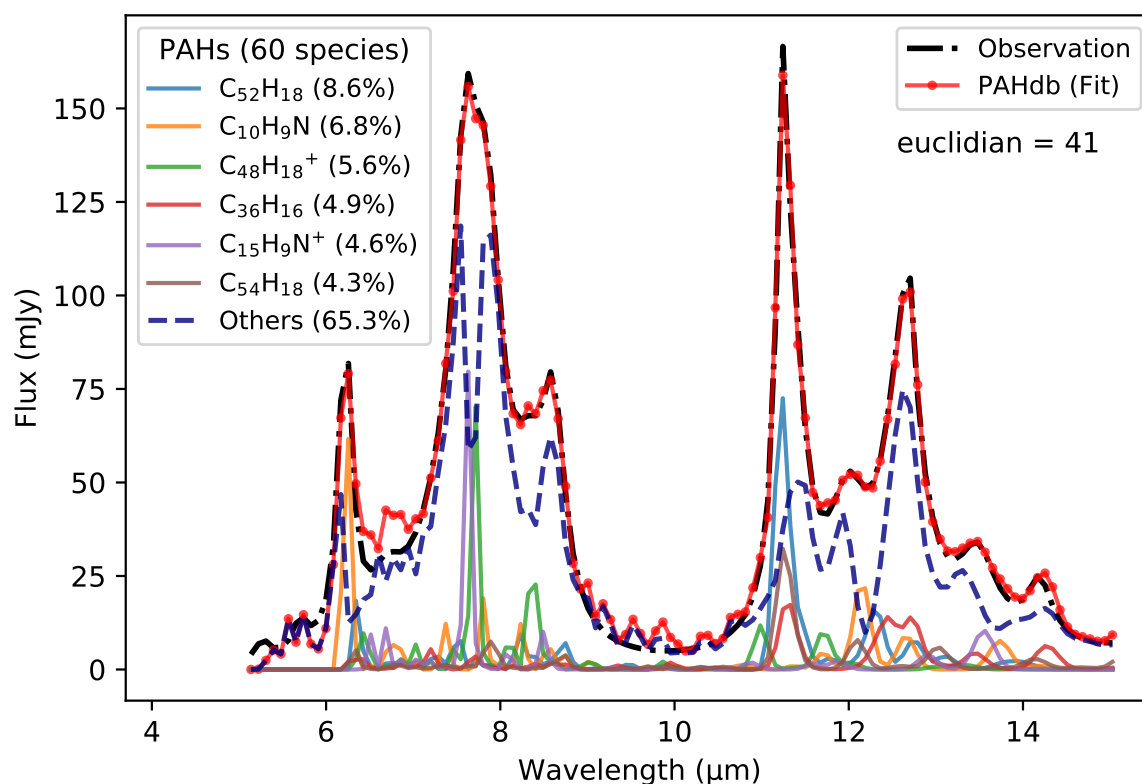


Figura 15 – Ajuste espectral da emissão da galáxia *Starburst* NGC 4676 PAHdb usando o código PAHdb. As espécies de PAHs mais relevantes para o fluxo total são mostradas em percentual, e a qualidade do ajuste é quantificada pelo parâmetro de norma euclidiana.



Todos os espectros foram corrigidos pelo *redshift*, através da tarefa **dopcor** do IRAF. Os valores de *redshift* adotados na correção estão listados na Tabela 1.

As componentes de absorção provenientes da componente estelar podem alterar as intensidades medidas das linhas de emissão presentes no espectro. Esse efeito é mais importante, embora não restrito, nas linhas de Balmer. Assim, a contribuição da população estelar deve ser subtraída de cada espectro para investigarmos as propriedades físicas do gás ionizado das galáxias. Para isso, o código de síntese população estelar STARLIGHT de [Fernandes et al. \(2005\)](#) foi utilizado. Este ajusta o espectro observado com uma combinação de modelos de populações estelares simples (SSPs) de [Bruzual e Charlot \(2003\)](#). Esses modelos são baseados em uma biblioteca de

alta resolução espectral de espectros estelares observados, os quais fornecem a evolução espectral detalhada das SSPs a uma resolução de 3 Å, em um intervalo de comprimento de onda de 3200-9500 Å, a diferentes metalicidades. As SSPs utilizadas nesse trabalho compreendem quinze idades, $t=[0.01; 0.003; 0.005; 0.01; 0.025; 0.04; 0.1; 0.3; 0.6; 0.9; 1.4; 2.5; 5; 11 \text{ e } 13] 10^9$ anos, e três metalicidades, $Z=[0.2; 1 \text{ e } 2.5]Z_{\odot}$. O ajuste é realizado para encontrar um valor mínimo da equação de [Fernandes *et al.* \(2005\)](#)

$$\chi^2 = \sum [O_{\lambda} - M_{\lambda}\omega_{\lambda}] \quad (4.1)$$

sendo O_{λ} o espectro observado, M_{λ} o espectro modelado, e ω_{λ}^{-1} o erro em cada comprimento de onda. Regiões com linhas de emissão, espúrias e resíduos da subtração do céu são mascaradas adotando ω_{λ}^{-1} .

Uma vez que a contribuição apenas do gás ionizado foi separada no espectro, as intensidades das linhas de emissão foram obtidas através de ajustes gaussianos das linhas sobre um contínuo local linear. No caso em que as linhas estavam sobrepostas, o ajuste de múltiplos perfis gaussianos foi utilizado para medir a intensidade de cada uma. Estas medidas foram obtidas através da tarefa **splot** do IRAF, e os fluxos foram estimados para as linhas [O III] $\lambda 4363$, $H\beta$, [O III] $\lambda 4959$, $\lambda 5007$, [N II] $\lambda 5755$, [N II] $\lambda 6548$, $H\alpha$, [N II] $\lambda 6584$, [S II] $\lambda 6717$ e [S II] $\lambda 6731$. As estimativas dos erros das medidas foram estimadas via razão sinal ruído entre cada linha de emissão e o contínuo. Em seguida, foi feita a correção devido ao avermelhamento, já que este efeito diminui o fluxo das linhas de emissão em função do comprimento de onda observado.

Para a correção pelo avermelhamento nos fluxos observados utilizou-se a expressão

$$\frac{I(\lambda)}{I(H\beta)} = \frac{F(\lambda)}{F(H\beta)} \times 10^{c(H\beta)[f(\lambda)-f(H\beta)]} \quad (4.2)$$

sendo $I(\lambda)$ a intensidade do fluxo corrigido por avermelhamento em um dado comprimento de onda; $F(\lambda)$ a intensidade do fluxo observado; $f(\lambda)$ a dependência da extinção com o comprimento de onda; e $c(H\beta)$ o coeficiente de extinção interestelar.

O coeficiente de extinção interestelar foi calculado utilizando a razão de linhas $H\alpha/H\beta$ e comparando-a com a razão de linhas teóricas dada por [Osterbrock e Ferland \(2006\)](#) para uma temperatura de 10 000 K e densidade eletrônica de 100 cm^{-3} . A função de avermelhamento utilizada para as correções dos fluxos foi obtida por [Savage e Mathis \(1979\)](#), considerando-se $H\alpha/H\beta = 2.86$. Na Tabela 4 são apresentadas as intensidades das linhas de emissão corrigidas pelo avermelhamento, as estimativas dos erros por linha de emissão, assim como o coeficiente de extinção interestelar.

Tabela 4 – Intensidades de linha de emissão corrigidas pelo avermelhamento em $10^{-17} \text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1}/\text{Å}$ e o coeficiente de extinção logarítmica, $c(\text{H}\beta)$. O fluxo para $\text{H}\beta$ e $\text{H}\alpha$ são 100 e 286, respectivamente.

Galáxia	[O III] λ 4959	[O III] λ 5007	[N II] λ 6548	[N II] λ 6584	[S II] λ 6716	[S II] λ 6731	$c(\text{H}\beta)$
MrK 273	77 \pm 2	224 \pm 5	87 \pm 2	252 \pm 7	79 \pm 2	65 \pm 2	1.29 \pm 0.02
Mrk 471	226 \pm 10	670 \pm 28	131 \pm 9	389 \pm 24	96 \pm 8	84 \pm 7	0.69 \pm 0.05
Mrk 609	178 \pm 4	529 \pm 11	90 \pm 3	266 \pm 8	49 \pm 2	52 \pm 3	0.67 \pm 0.03
Mrk 622	101 \pm 9	300 \pm 15	98 \pm 6	290 \pm 18	65 \pm 4	56 \pm 4	0.67 \pm 0.05
Mrk 883	73 \pm 1	219 \pm 1	48 \pm 1	144 \pm 2	74 \pm 1	58 \pm 1	0.39 \pm 0.01
NGC 660	66 \pm 4	187 \pm 6	105 \pm 5	300 \pm 13	75 \pm 3	58 \pm 3	1.55 \pm 0.04
NGC 2622	310 \pm 8	947 \pm 23	186 \pm 9	569 \pm 23	175 \pm 10	184 \pm 11	0.04 \pm 0.04
NGC 2623	46 \pm 6	131 \pm 18	91 \pm 14	261 \pm 41	75 \pm 12	58 \pm 9	1.30 \pm 0.14
NGC 4676	25 \pm 3	72 \pm 5	50 \pm 4	143 \pm 12	63 \pm 5	44 \pm 4	1.29 \pm 0.07
NGC 4922	75 \pm 1	220 \pm 2	66 \pm 1	193 \pm 3	50 \pm 1	48 \pm 1	1.00 \pm 0.01
NGC 5256	37 \pm 1	109 \pm 1	58 \pm 1	174 \pm 1	63 \pm 1	58 \pm 1	0.53 \pm 0.01
NGC 5347	239 \pm 8	714 \pm 23	62 \pm 3	186 \pm 9	75 \pm 4	66 \pm 4	0.55 \pm 0.04

4.2.1 Determinação da densidade eletrônica

A densidade eletrônica pode ser determinada por meio das razões de intensidades de duas linhas de emissão emitidas por um mesmo tipo de íon com transições de energias de excitação muito próximas, e cujas taxas de excitação relativa entre os níveis dependem apenas da razão de seus pesos estatísticos. Tendo os níveis diferentes probabilidades de transição radiativa ou taxa de desexcitação colisional, a população relativa destes, assim como a razão de suas linhas, possuem grande dependência em relação à densidade eletrônica (OSTERBROCK; FERLAND, 2006). É esse o caso de íons com configuração fundamental do tipo p^3 , ou seja, íons com 3 elétrons na sua camada de valência. Nesse sentido alguns sensores de densidade como [O II](λ 3727/ λ 3729), [Ar IV](λ 4711/ λ 4740), e [S II](λ 6717/ λ 6731) podem ser utilizados. Assim, a densidade eletrônica foi estimada a partir da razão [S II](λ 6717/ λ 6731), usando a rotina **temden** do pacote **nebular** do **STSDAS/IRAF**, assumindo uma temperatura eletrônica de 10 000 K.

4.2.2 Determinação da temperatura eletrônica

A temperatura eletrônica do gás ionizado em nebulosas pode ser derivada a partir da razão entre as linhas de emissão de um mesmo íon, com configuração fundamental do tipo p^2 e energias de excitação consideravelmente diferentes, pois as taxas relativas de excitação para o nível superior e inferior dependem fortemente da temperatura (OSTERBROCK; FERLAND, 2006). Exemplos de razões de linhas de emissão associadas a íons com esta configuração são [O III](λ 4959 + λ 5007)/ λ 4363 e [N II](λ 6548 + λ 6584)/ λ 5755). A temperatura eletrônica foi estimada através das razões de linhas [O III](λ 4959 + λ 5007)/ λ 4363 e [N II](λ 6548 + λ 6584)/ λ 5755), usando a rotina **temden** do pacote **nebular** do **STSDAS/IRAF**, assumindo as densidades eletrônicas estimadas da razão [S II](λ 6717/ λ 6731).

4.2.3 Abundância química

Conhecer a abundância química de AGNs e regiões de formação estelar é fundamental para a compreensão dos processos de enriquecimento químico desses objetos e, por consequência, para a compreensão da evolução química do Universo. Uma das formas de estimar a metalicidade, ou seja, a abundância química desta classe de objetos é determinando a abundância do oxigênio, o que pode ser feito via estimativa da quantidade de oxigênio ionizado nas regiões gasosas desses objetos.

a) Método direto - Método Te

O oxigênio é o elemento mais utilizado como referência para a metalicidade global da fase gasosa Z (JR; BRESOLIN; GARNETT, 2003); (HÄGELE *et al.*, 2008) de nebulosas gasosas. Esse elemento possui linhas de emissão proeminentes, e seus estágios de ionização mais importantes estão presentes nos espectros ópticos desses objetos. Um dos métodos mais confiáveis para determinar a abundância de oxigênio é baseado na razão entre linhas proibidas de oxigênio e linhas de hidrogênio, na temperatura e densidade eletrônica, especialmente para regiões de formação estelar e nebulosas planetárias. Esse método é conhecido como método- T_e .

A abundância do O^{2+} e O^+ em relação ao H^+ pode ser obtida através das seguintes equações,

$$12 + \log \left(\frac{O^{2+}}{H^+} \right) = \log \left(\frac{I([O \text{ III}]\lambda 4959) + I([O \text{ III}]\lambda 5007)}{I(H\beta)} \right) + 6.144 + \frac{1.251}{t_3} - 0.55 \log(t_3) \quad (4.3)$$

e

$$12 + \log \left(\frac{O^+}{H^+} \right) = \log \left(\frac{I([O \text{ II}]\lambda 3726 + \lambda 3729)}{I(H\beta)} \right) + 5.992 + \frac{1.583}{t_2} - 0.681 \log(t_2) + \log(1 + 2.3n_e), \quad (4.4)$$

em que n_e é a densidade eletrônica em unidades de 10^4 cm^{-3} , t_2 e t_3 é a temperatura para a baixa e alta zona de ionização, respectivamente. Essas temperaturas podem ser obtidas usando a razão de linhas $[N \text{ II}](\lambda 6548 + \lambda 6584)/\lambda 5755$ e $[O \text{ III}](\lambda 4959 + \lambda 5007)/\lambda 4363$, para t_2 e t_3 , respectivamente.

Uma vez determinadas as abundâncias iônicas do O^{2+} e O^+ , abundância total é obtida por

$$\frac{O}{H} = \text{ICF}(O) \times \left[\frac{O^{2+}}{H^+} + \frac{O^+}{H^+} \right] \quad (4.5)$$

em que o fator de correção de ionização (ICF, do inglês *Ionization Correction Factors*) é uma quantidade que representa a contribuição de íons não observados ao determinar a abundância total de um elemento.

É importante ressaltar que a determinação da temperatura eletrônica envolve a medição das linhas aurorais, como [O III] λ 4363 e [N II] λ 5755. No entanto, essas linhas são muito fracas e geralmente caem abaixo do nível de detectabilidade nos espectros de regiões H II de alta metalicidade. Infelizmente, não detectamos linhas de emissão sensíveis à temperatura [O III] λ 4363 e [N II] λ 5755 nos espectros da nossa amostra de galáxias, e então o método direto não pode ser usado na determinação da abundância de O/H. Portanto, nesse trabalho, a abundância de O/H foi determinada combinando as razões de linhas de emissão observadas com uma grade de modelos de fotoionização, conforme descrito a seguir.

b) Método indireto - Modelos de fotoionização

Neste trabalho modelos de fotoionização foram construídos usando a versão 17.02 do código CLOUDY (FERLAND *et al.*, 2017), a fim de comparar as razões de intensidade das linhas de emissão observadas com as estimadas pelos modelos de fotoionização. Os parâmetros de entrada dos modelos são brevemente descritos a seguir. Para mais detalhes sobre esses parâmetros, consulte Dors *et al.* (2015), Dors *et al.* (2017), Dors *et al.* (2020) e Carvalho *et al.* (2020).

1. Distribuição de energia espectral (SED): A SED utilizada foi a típica de AGNs, consistindo na soma do componente *Big Bump* com um pico de ≈ 1 Ryd, que é parametrizado pela temperatura de pico assumida como 1.5×10^5 K e uma lei de potência de raios-X com índice espectral $\alpha_{ox} = -1.4$, que é um valor representativo para AGNs Miller *et al.* (2010), Zhu *et al.* (2019a).
2. Metalicidade (Z): A metalicidade utilizada em relação ao valor solar (Z/Z_{\odot}) foi 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0, 3.5 e 4.0. A abundância de oxigênio solar assumida é $12 + \log(O/H)_{\odot} = 8.69$ Asplund *et al.* (2009), Prieto, Lambert e Asplund (2001), cujas abundâncias 8.40, 8.69, 8.86, 8.99, 9.08, 9.16, 9.23 e 9.29 correspondem às metalicidades listadas acima, respectivamente.
3. Parâmetro de ionização (U): O parâmetro de ionização é definido por $U = Q(H) / 4\pi R_0^2 n c$, em que $Q(H)$ é o número de fótons ionizantes emitidos por segundo pela fonte ionizante; R_0 é a distância da fonte de ionização à superfície interna da nuvem de gás ionizado em cm; n é a densidade de partícula em cm^{-3} ; e c é a velocidade da luz em km s^{-1} . Considerou-se o logaritmo de U na faixa de -4,0

$\leq \log U \leq -1,0$ aproximadamente os mesmos valores considerados por [Feltre, Charlot e Gutkin \(2016\)](#) para AGN.

4. Densidade de elétrons: Assumiu-se um valor de densidade de elétrons de $N_e = 500 \text{ cm}^{-3}$, constante no raio nebuloso. A densidade de elétrons (N_e) derivada de $[\text{S II}]\lambda 6717/\lambda 6731$ para a amostra de galáxias está na faixa de 111 a 922 cm^{-3} , com uma densidade média de $N_e = 411 \text{ cm}^{-3}$.
5. Raio interno e externo: o raio interno de 3 pc foi assumido, que é a distância da fonte ionizante para a região de gás iluminada. É um valor típico para galáxias Seyfert de acordo com [Balmaverde et al. \(2016\)](#). O raio externo foi assumido como aquele em que a temperatura eletrônica do gás atinge o valor de 150 K, raio de parada da execução do código.
6. PAH: A distribuição de tamanho de PAHs é dada por uma lei de potência na forma $a^{-3,5}$, na qual a é o raio de PAH e o número de átomos de carbono varia de 30 a 500 de tamanho de 10 *bins*, segundo [Abel et al. \(2008\)](#).

Construiu-se uma grade de modelos com $\alpha_{ox} = -1.1$ e -1.4 e verificou-se que os resultados do modelo de fotoionização reproduzem a maioria das relações de linha observadas, assumindo o índice espectral óptico para raio-X $\alpha_{ox} = -1.4$. Para $\alpha_{ox} = -1,1$ (não mostrado aqui), há mais pontos que não são reproduzidos pelos modelos de fotoionização. Portanto, adotamos $\alpha_{ox} = -1.4$. Esse valor é representativo de AGNs típicos, conforme descrito no manual Hazy do CLOUDY code ⁴, e apontado por ([MILLER et al., 2011](#); [ZHU et al., 2019b](#)) e ([DORS et al., 2019](#)).

⁴ http://web.physics.ucsb.edu/~phys233/w2014/hazy1_c13.pdf

5 Resultados e discussões

A seguir serão apresentados os resultados obtidos a partir das análises dos espectros da amostra no IR e no ótico. Em geral, a análise no IR resultou na indicação das espécies que mais estão contribuindo com as assinaturas de PAHs, assim como seus respectivos perfis de emissão em tamanho, carga e composição na amostra; enquanto a análise no ótico resultou na estimativa de condições físicas do gás nas galáxias como densidade e temperatura eletrônica, abundância química do oxigênio e parâmetro de ionização possibilitando identificar correlações entre tais condições físicas da região ótica com as características das regiões do IR para os objetos em estudo.

5.1 Espécies de PAHs identificadas

Conhecer as condições físico-químicas dos ambientes onde os PAHs e PANHs estão inseridos é de grande importância para o entendimento da formação e destruição molecular com possibilidade de formação de novos compostos. Além disso, compreender a ligação entre o estágio evolutivo dos ambientes e as espécies aromáticas neles presentes é um enigma carente de estudos. Por isso, muitas questões foram levantadas sobre quais espécies aromáticas podem ser encontradas em ambientes espaciais, ao mesmo tempo que estudos teóricos foram conduzidos para determinar as frequências de vibração de potenciais candidatos, em consonância com [Ricca *et al.* \(2018\)](#), [Mattioda *et al.* \(2020\)](#). Neste trabalho, apresentam-se resultados que contribuem para incrementação de atuais e futuros estudos sobre essas questões.

5.1.1 Atribuição das espécies de PAHs nos espectros

A abundância de PAHs (PAH%) refere-se à porcentagem da contribuição na emissão IR de cada espécie no fluxo total das assinaturas de PAHs na faixa espectral entre 5–15 μm . Tal porcentagem foi estimada somando-se o fluxo integrado de cada espécie dividido pela soma do fluxo integrado de todas as espécies dentro do intervalo IR em estudo. Desta forma, constatou-se que as galáxias possuem de 49 a 77 espécies que estão contribuindo com suas respectivas emissões.

As Figuras [16](#) e [17](#) mostram os espectros IR das galáxias deste trabalho ajustados usando o código PAHdb. As assinaturas de PAHs mais relevantes para o fluxo total são mostradas em percentual, e a qualidade do ajuste é quantificada pelo parâmetro euclidiano.

Figura 16 – Ajuste espectral das emissões das galáxias usando o código PAHdb. As assinaturas de PAHs mais relevantes para o fluxo total são indicadas em diferentes cores.

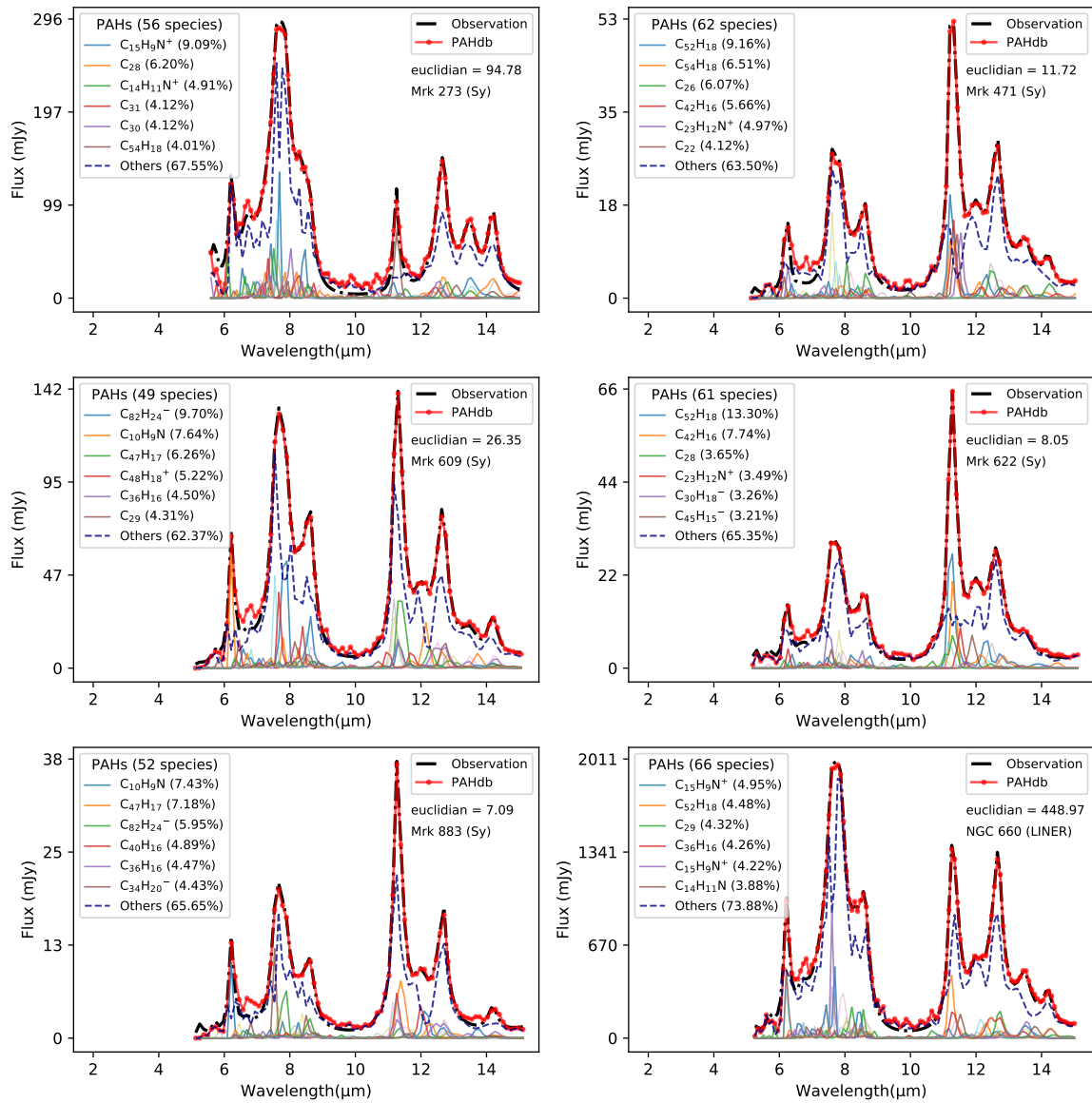
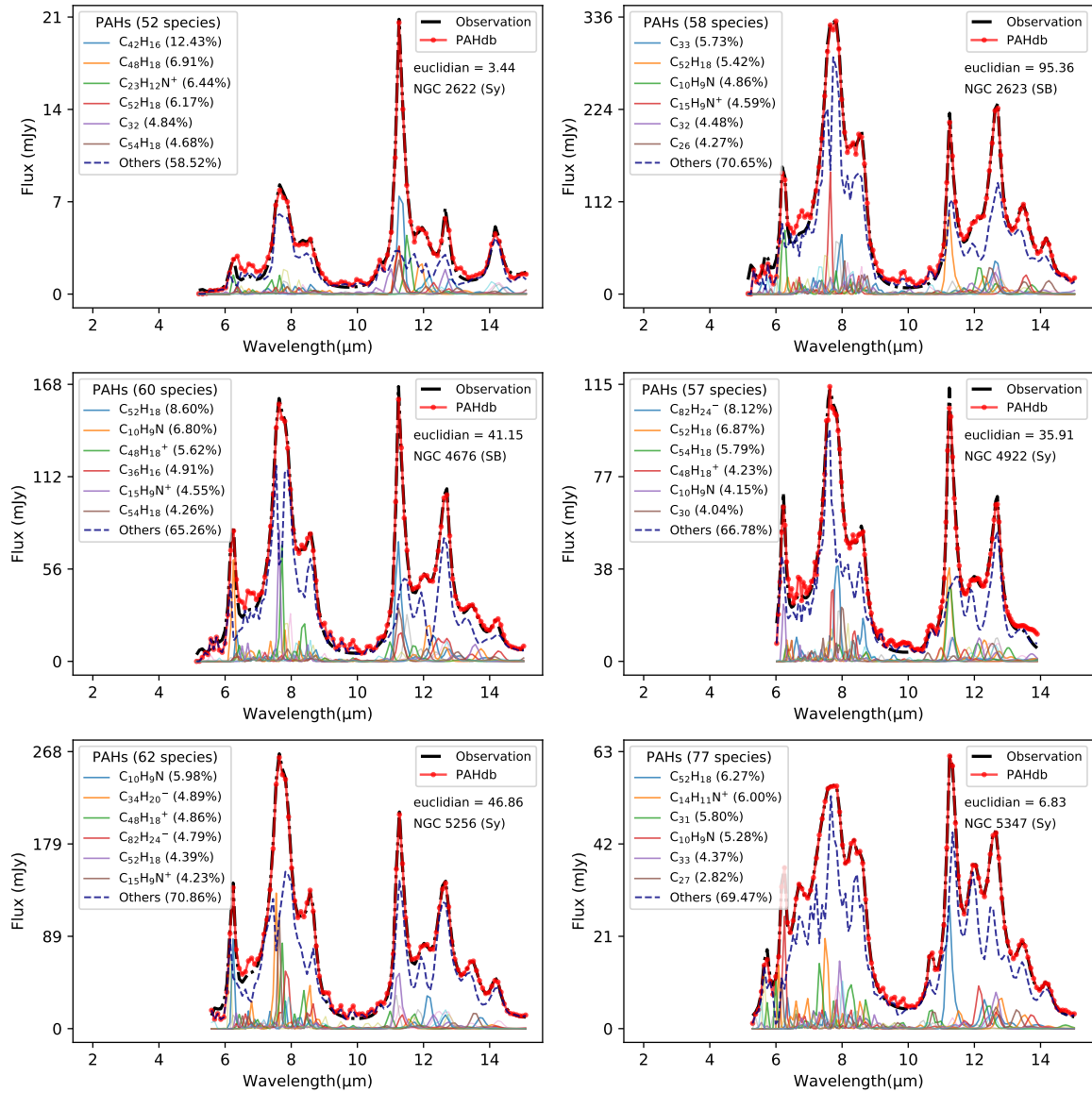


Figura 17 – Continuação Figura 16.



A Tabela 5 apresenta todas as espécies obtidas pelo ajuste do espectro observado no IR realizado pelo código PAHdb para a galáxia NGC 4676. Nesta tabela podem-se ver a Unidade identificadora (UID), a fórmula química, o estado de carga e o percentual de contribuição de emissão estimado para cada espécie desse objeto. A UID diz respeito à fórmula estrutural da espécie, de forma a discernir entre os diferentes isômeros. No apêndice B, as Tabelas 8 a 18 apresentam as espécies para as demais galáxias da amostra.

Tabela 5 – Espécies de PAHs que estão contribuindo com a emissão do IR na galáxia NGC 4676 derivados pelo código PAHdb.

UID	Fórmula	Carga	%	UID	Fórmula	Carga	%
3173	C ₅₂ H ₁₈	0	8.62	425	C ₁₀ H ₈ O ₂ ⁺	1	0.92
473	C ₁₀ H ₉ N	0	6.79	2436	C ₂₇	0	0.75
636	C ₄₈ H ₁₈ ⁺	1	5.62	243	C ₃₁ H ₁₄ N ⁺	1	0.74
128	C ₃₆ H ₁₆	0	4.89	2857	C ₃₂	0	0.66
468	C ₁₅ H ₉ N ⁺	1	4.55	2547	C ₂₉	0	0.57
836	C ₅₄ H ₁₈	0	4.22	2379	C ₂₂	0	0.55
2955	C ₃₃	0	3.95	2499	C ₂₈	0	0.54
591	C ₃₂ H ₁₄	0	3.61	258	C ₅₂ H ₁₈ N ₂ ⁺	1	0.53
3205	C ₈₂ H ₂₄ ⁻	-1	3.20	2733	C ₃₁	0	0.48
2542	C ₂₉	0	3.18	723	C ₆₀ ⁻	-1	0.46
627	C ₄₀ H ₁₆ ⁻	-1	3.16	2660	C ₃₀	0	0.37
2758	C ₃₁	0	3.02	2893	C ₃₂	0	0.35
2684	C ₃₁	0	2.98	157	C ₄₂ H ₂₂ ⁻	-1	0.31
3102	C ₃₄	0	2.93	2427	C ₂₆	0	0.28
480	C ₁₄ H ₁₁ N ⁺	1	2.84	478	C ₁₄ H ₁₁ N ⁺	1	0.27
816	C ₂₆ H ₁₆ ⁻	-1	2.70	269	C ₁₂ H ₈ N ₂ ⁻	-1	0.27
2391	C ₂₄	0	2.68	705	C ₅₄ ⁺	1	0.24
496	C ₉ H ₈ ⁺	1	2.63	2650	C ₃₀	0	0.16
3060	C ₃₃	0	2.23	2748	C ₃₁	0	0.16
167	C ₁₁₂ H ₂₆ ⁻	-1	2.23	2226	C ₂₈ H ₁₄	0	0.15
625	C ₄₀ H ₁₆	0	2.17	726	C ₂₈ H ₁₄	0	0.14
477	C ₁₄ H ₁₁ N	0	1.95	121	C ₇₈ H ₂₂ ⁻	-1	0.13
268	C ₁₂ H ₈ N ₂ ⁺	1	1.90	420	C ₁₀ H ₈ O ₂	0	0.13
2279	C ₂₆ H ₁₆	0	1.59	3020	C ₃₃	0	0.13
3180	C ₅₆ H ₂₀ ⁺	1	1.26	2612	C ₃₀	0	0.12
3151	C ₃₄	0	1.10	2362	C ₁₈	0	0.10
822	C ₃₄ H ₂₀ ⁻	-1	1.09	2745	C ₃₁	0	0.09
2791	C ₃₂	0	1.03	1994	C ₃₀ H ₁₆	0	0.06
3215	C ₁₀₂ H ₂₆ ⁺	1	1.00	2422	C ₂₆	0	0.04
3022	C ₃₃	0	0.93	424	C ₁₀ H ₈ O ₂	0	0.02

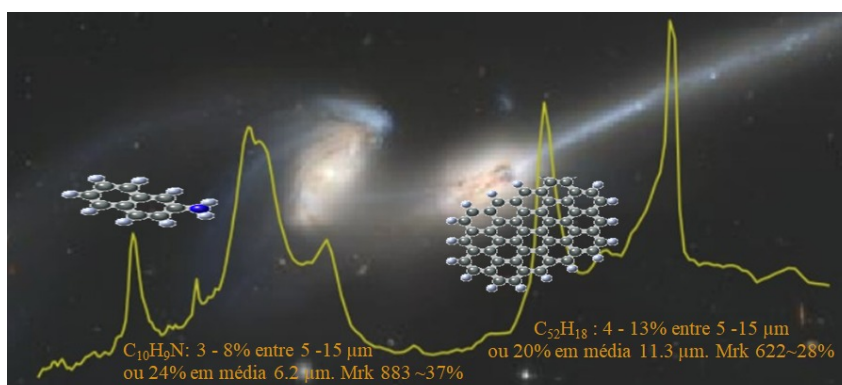
5.1.2 Espécies mais relevantes e degenerescência

Conforme pode ser visto nas Figuras 16 e 17, assim como nas tabelas de saída do código PAHdb no Apêndice B, as espécies identificadas mais relevantes contêm entre 10 e

82 átomos de carbono, enquanto as espécies em geral podem ser compostas de 9 até 170 átomos de carbono.

Entre os hidrocarbonetos puros, destaca-se a espécie $C_{52}H_{18}$ (UID 3173), que está presente em 3/4 das galáxias e contribui com cerca de 4 a 13% nos fluxos na faixa espectral entre 5–15 μm ; essa espécie contribui com 20% em média na emissão da banda 11.3 μm , tendo como destaque as galáxias Mrk 622, NGC 2623 e NGC 4676, cujo percentual de contribuição é de 25 a 28%. Já entre as espécies nitrogenadas, a $C_{10}H_9N$ (UID 471) está presente em 92% da amostra, contribuindo com cerca de 3 a 8% nos fluxos na faixa de 5–15 μm ; e 24% em média na emissão da banda 6.2 μm . Nos objetos Mrk 609 e Mrk 883, estas espécies contribuem com 35 e 37%, respectivamente, para essa banda. A Figura 18 exhibe as duas espécies que foram mapeadas como sendo as mais relevantes nas amostras sobrepostas à imagem da galáxia NGC 4676.

Figura 18 – As duas espécies mapeadas mais relevantes na região nuclear das amostras sobrepostas à imagem e espectro de PAHs da galáxia NGC 4676.



O íon molecular $C_{10}H_9N^+$ também está presente em várias galáxias analisadas neste trabalho, além da espécie $C_{14}H_{11}N$. Espécies semelhantes, como benzonitrila, também chamada de cianobenzeno (C_6H_5CN) e cianonaftalenos ($C_{10}H_7N$) já foram detectados na nuvem molecular escura TMC-1, como mostram [McGuire *et al.* \(2018\)](#), [McGuire *et al.* \(2021\)](#), [McCarthy e McGuire \(2021\)](#). A confirmação de hidrocarbonetos com CN, como cianobenzeno em TMC-1 e outras fontes, melhora a compreensão dos processos químicos que podem ocorrer no ISM. As reações entre hidrocarbonetos insaturados com CN são geralmente exotérmicas e sem barreira de ativação. Além disso, CN é um radical abundante na maioria das nuvens moleculares. Como os derivados ciano têm momentos de dipolo significativos, eles são alvos fáceis de detectar em rádio e, portanto, terão espectros de rotação brilhantes, segundo [McCarthy e McGuire \(2021\)](#).

Sabe-se que há degenerescência nos ajustes dos espectros utilizando o banco de dados PAHdb, não sendo possível garantir que $C_{52}H_{18}$, $C_{10}H_9N$ estejam sempre presentes nos espectros das galáxias aqui estudadas. Para investigar o impacto da degenerescência, excluíram-se as espécies $C_{52}H_{18}$, $C_{10}H_9N$ e $C_{14}H_{11}N$ da base de dados

antes de fazer um novo ajuste; mesmo assim, os espectros de PAH ainda podem ser reproduzidos, mas a qualidade do ajuste diminui, e a norma euclidiana tem um resultado um pouco pior. Nesse contexto, vale a pena considerar que a espécie $C_{14}H_{11}N$ é simplesmente $C_{10}H_9N$ com a adição de um anel aromático. Essa molécula está presente em 60% da amostra e contribui com 2 a 6% do fluxo total. Para exemplificar essa condição, utilizou-se como exemplo o ajuste do espectro da galáxia Mrk 273 realizado usando todo o banco de dados, o que resulta na contribuição de 56 espécies, ajuste que pode ser visto na Figura 16, com uma norma euclidiana próxima a 95. Quando as espécies $C_{52}H_{18}$, $C_{10}H_9N$, $C_{14}H_{11}N$ e seus isômeros (15 espécies) foram removidos, o ajuste ao código PAHdb resultou em 53 espécies que estão contribuindo para o fluxo da galáxia, e o valor da norma euclidiana foi de 108, ou seja, 13% pior em relação ao melhor ajuste obtido. Nesse caso, algumas novas espécies foram introduzidas, bem como a quantidade relativa das espécies foi ligeiramente modificada, quando comparada com o primeiro ajuste. Porém, essas novas espécies apresentam as mesmas características das espécies excluídas, sendo, em sua maioria, PAHs pequenos puros ou com heteroátomo (N ou O) com dois ou três anéis aromáticos fundidos. Portanto, embora as moléculas excluídas sejam mais apropriadas, as moléculas da mesma família também reproduzem os espectros das galáxias, e a presença e a quantidade (relativa) das espécies de PAH não são determinadas de forma exclusiva.

A tabela 6 lista a contribuição dos tipos de PAHs identificados neste estudo agrupados em quatro categorias: desidrogenados, puros, nitrogenados e heteroátomos. Esses agrupamentos foram adaptados da proposta anterior de [Andrews *et al.* \(2015\)](#). Os PAHs podem ser classificados em diferentes categorias com base em suas propriedades químicas e estruturais. Os desidrogenados, por exemplo, são aqueles que não contêm átomos de hidrogênio em sua estrutura, enquanto os puros são aqueles que consistem apenas de anéis aromáticos. Os nitrogenados contêm átomos de nitrogênio em sua estrutura, e os heteroátomos contêm outros elementos químicos, como oxigênio ou enxofre.

5.1.3 Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos Nitrogenados

[Hudgins, Jr e Allamandola \(2005\)](#) demonstraram que apenas o nitrogênio incorporado aos anéis aromáticos é capaz de reproduzir as observações interestelares da banda de $6.2 \mu\text{m}$ em comprimentos de onda mais curtos por meio de processo experimental. Além disso, [Boersma, Bregman e Allamandola \(2013\)](#) propuseram que os cátions de PANH dominam as emissões de 6.2 e $11.0 \mu\text{m}$ em regiões ligeiramente densas da PDR na NGC 7023, e também são responsáveis pelas emissões em 7.7 , 8.6 , 12.0 e $12.7 \mu\text{m}$.

A Figura 19 apresenta a contribuição na emissão IR entre as assinaturas de PAHs

Tabela 6 – Contribuição da emissão IR agrupada por tipo de PAHs.

Object	Desidrogenado (%)	PAHs Puro (%)	PANHs (%)	Heteroátomo (%)
Mrk 273	42.1	25.1	32.5	0.3
Mrk 471	31.5	53.3	11.9	3.4
Mrk 609	32.2	55.3	10.4	2.0
Mrk 622	36.2	48.9	10.8	4.2
Mrk 883	28.6	60.0	8.3	3.1
NGC 660	33.8	44.3	19.0	3.0
NGC 2622	37.3	51.1	10.8	0.8
NGC 2623	35.2	41.4	23.4	0.0
NGC 4676	30.2	48.9	19.9	1.1
NGC 4992	32.0	49.9	15.9	2.2
NGC 5256	31.6	48.6	19.4	0.4
NGC 5347	47.8	36.2	15.1	1.3

em 6.2, 7.7 e 11.3 μm das dez espécies de PANHs identificadas neste trabalho ($\text{C}_{10}\text{H}_9\text{N}$, $\text{C}_{14}\text{H}_{11}\text{N}$, $\text{C}_{15}\text{H}_9\text{N}^+$, $\text{C}_{23}\text{H}_{12}\text{N}^+$ e seus isômeros). De maneira geral, tais espécies de PANHs neutros e catiônicos, geram em média 32% na banda 6.2 μm da amostra. Em algumas galáxias, como NGC 2623, esse valor chega a cerca de 54%. Além de contribuem, em média, com cerca de 5% do fluxo da banda em 11.3 μm , atingindo o valor de 22.6% na Mrk 273.

A importância dos PAHs contendo N na emissão total de nossa amostra também está de acordo com os resultados obtidos por [Canelo *et al.* \(2018\)](#) e [Canelo *et al.* \(2021\)](#). Esses estudos investigaram a contribuição das Classes de Peeters para as bandas de PAH de 6.2, 7.7 e 8.6 μm [Peeters *et al.* \(2002\)](#) em galáxias Starburst, por meio de análise de espectros de MIR (infravermelho médio). Os objetos estudados por esses autores foram classificados predominantemente com perfil classe A, que é atribuída a emissões IR típicas dos PANH e, portanto, confirmando a presença de tais moléculas na amostra.

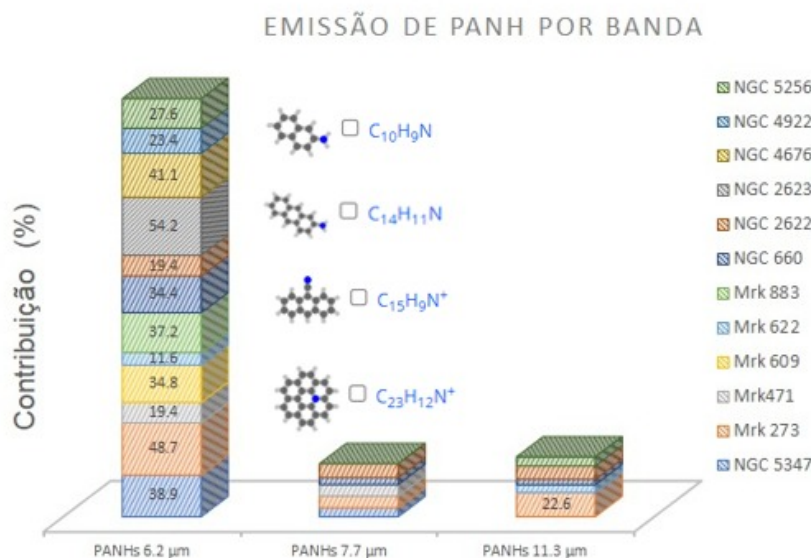
5.1.4 Tamanho e Cargas das espécies identificadas

A população de PAHs identificada na nossa amostra de galáxias mostrou-se predominantemente composta por espécies pequenas¹ e neutras com média de 81 e 68%, respectivamente. Esses valores são consistentes com os fornecidos por [Martins-Franco e Menéndez-Delmestre \(2021\)](#), que concluíram que a população de PAHs é formada predominantemente por espécies pequenas e neutras numa amostra de espectros MIR de aproximadamente 700 galáxias obtida com Spitzer/IRS.

Nesse sentido, atribui-se um perfil de objeto jovem ou pouco evoluído às fontes

¹ No presente trabalho, PAHs pequenos são considerados como tendo um número de átomos de carbono inferior a 50 ($N_C < 50$), enquanto PAHs grandes contêm $N_C \geq 50$ átomos.

Figura 19 – Emissão de PANHs por bandas



estudadas, uma vez que, PAHs pequenos são consistentes com objetos com perfil de variação espectral classe A e, segundo [Silva-Ribeiro et al. \(2021\)](#) 67% desta amostra pode ser caracterizada com tal perfil. Importante ressaltar que as variações espectrais no perfil de emissão denominada de classe A, B e C ([PEETERS et al., 2002](#)) estão vinculadas ao tipo da fonte. De forma que as fontes caracterizadas como classe A consistem em material interestelar iluminado por estrela, regiões H II, nebulosas de reflexão e o ISM em geral nas galáxias. Classes B estão associadas a material circunstelar, incluindo nebulosa planetária e uma variedade de objetos pós-AGB. No entanto fontes de classe C são limitadas a alguns objetos pós-AGB extremamente ricos em carbono ([TIELENS, 2008](#)).

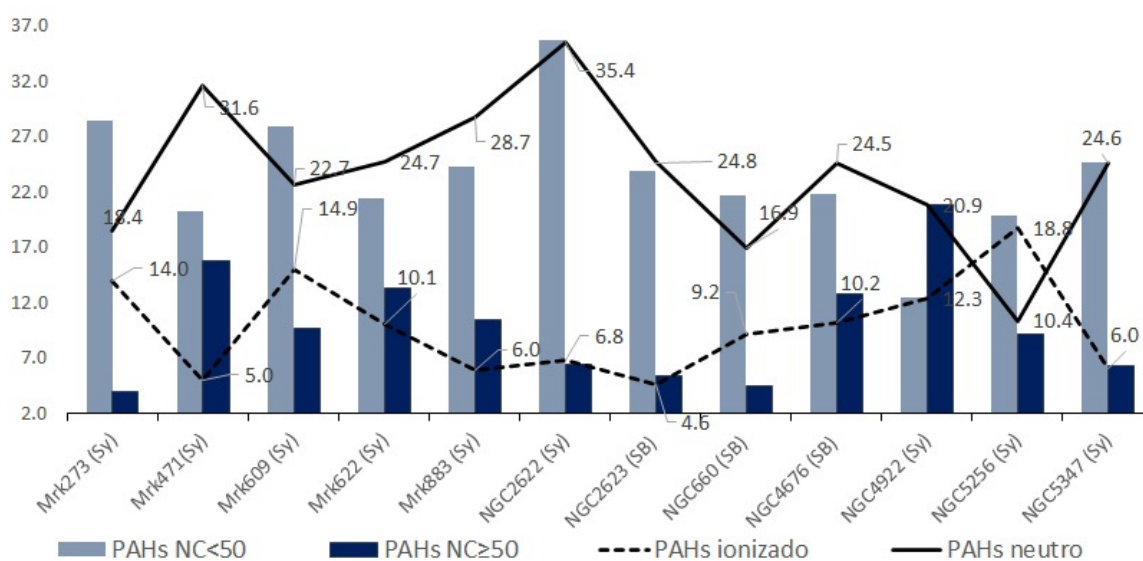
[Boersma, Bregman e Allamandola \(2013\)](#) e [Andrews et al. \(2015\)](#) mostraram que a dominância das emissões de moléculas pequenas aumenta com a proximidade da fonte ionizante. Como no presente trabalho toda a análise espectral foi realizada na região nuclear dos objetos, é razoável relacionar a conclusão de ambos os estudos à alta concentração de espécies pequenas encontrada. [Draine e Li \(2001\)](#) também demonstraram esse comportamento quando propuseram que PAHs pequenos emitem principalmente nas bandas 6.2 e 7.7 μm, enquanto PAHs grandes emitem em comprimentos de onda maiores, conforme [Allamandola, Hudgins e Sandford \(1999\)](#).

Em relação às espécies neutras, sua predominância também é esperada em regiões de fotodissociação, onde a espécie pode ser protegida devido a ambientes de alta densidade/baixa temperatura. De fato, [Allamandola, Hudgins e Sandford \(1999\)](#) demonstraram que absorções produzidas pelos PAHs neutros, em comparação àquelas produzidas pelos mesmos PAHs na forma catiônica, aparecem em diferentes regiões do IR quando esses PAHs são pequenos. De acordo com [Bauschlicher Charles W., Peeters e](#)

Allamandola (2008), PAHs pequenos emitem na região 5 - 9 μm , enquanto as emissões em comprimentos de onda mais curtos do perfil 11.3 μm seriam produzidas por moléculas neutras de PAH.

Afim de apurar mais informações sobre as espécies obtidas a partir do ajuste com o código PAHdb, realizou-se uma análise sobre as espécies que possuem maior contribuição na emissão por objeto. A partir de então, verificou-se que existem seis espécies cujas emissões juntas representam entre 27 e 43% da emissão total dos seus objetos. Tais valores podem ser vistos no canto superior esquerdo das Figuras 16 e 17. Constatou-se também que, entre tais espécies mais relevantes, as moléculas $\text{C}_{52}\text{H}_{18}$, $\text{C}_{10}\text{H}_9\text{N}$, $\text{C}_{82}\text{H}_{24}$, $\text{C}_{36}\text{H}_{16}$, $\text{C}_{15}\text{H}_9\text{N}^+$, $\text{C}_{42}\text{H}_{16}$ são as mais recorrentes em toda a amostra, tanto em presença, como em percentual de contribuição. A Figura 20 mostra o tamanho e carga das seis espécies mais relevantes por objeto, permitindo ver que espécies pequenas (com menos do que 50 átomos de carbono) e neutras são predominantes.

Figura 20 – Tamanho e carga das seis espécies mais relevantes de PAHs por objeto.



Nota: Os valores apontados são oriundos do somatório do percentual de contribuição em fluxo das seis espécies mais relevantes.

5.2 Propriedades físicas do gás ionizado das galáxias

As regiões de gás ionizado presentes nas galáxias são compostas principalmente de hidrogênio e hélio, além de outros elementos quimicamente conhecidos, por exemplo, metais, como oxigênio, nitrogênio, enxofre, argônio, entre outros, que estão presentes em menor abundância. A emissão desses elementos é observada nos espectros óticos dessas regiões como linhas de emissão, que são geradas por processos físicos de recombinação, como as linhas da série de Balmer do hidrogênio, ou excitação colisional, como as linhas

[O III] λ 5007, [N II] λ 6548, por exemplo. Dentre os parâmetros físicos fundamentais para caracterizar as regiões ionizadas encontram-se a densidade e temperatura eletrônica, a metalicidade e o parâmetro de ionização.

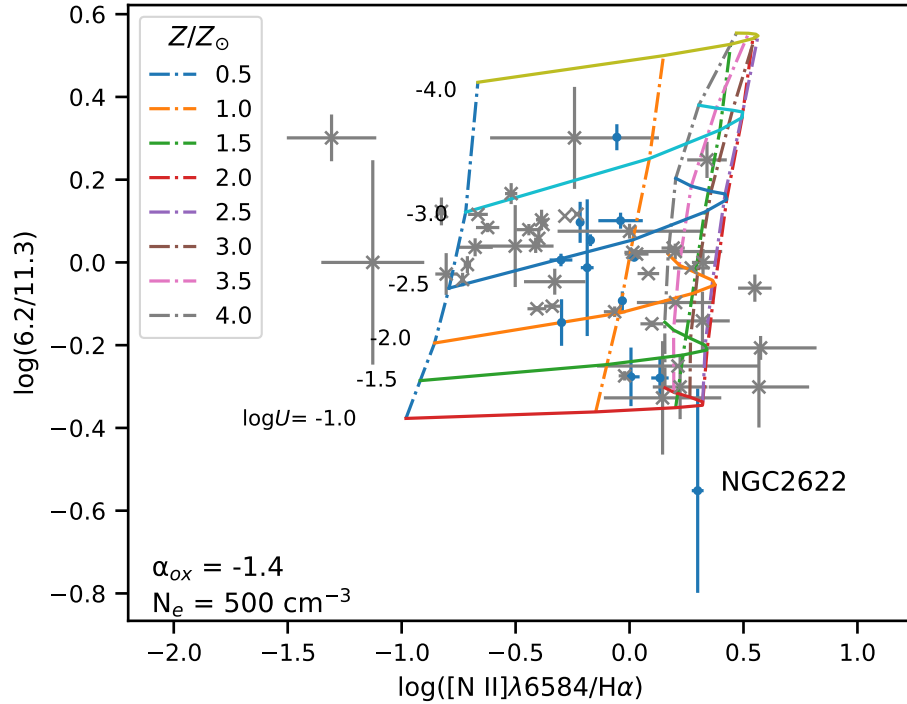
Tabela 7 – Propriedades físicas estimadas

Galáxia	N_e	$T_e(\text{OIII})$	$T_e(\text{N II})$	$12 + \log(\text{O}/\text{H})$	$\log(U)$
Mrk 273	266	12439	10839	8.64 ± 0.01	-3.42 ± 0.11
Mrk 471	414	19600	...	8.83 ± 0.03	-1.28 ± 0.23
Mrk 609	1120	19217	...	8.69 ± 0.02	-2.08 ± 0.08
Mrk 622	311	8.76 ± 0.04	-1.33 ± 0.33
Mrk 883	186	17574	8411	8.62 ± 0.02	-2.00 ± 0.33
NGC 660	175	...	9531	8.70 ± 0.01	-2.37 ± 0.05
NGC 2622	358	...	16970
NGC 2623	165	8.67 ± 0.05	...
NGC 4676	35	8.60 ± 0.02	-2.62 ± 0.10
NGC 4922	670	19279	11293	8.63 ± 0.00	-2.55 ± 0.05
NGC 5256	468	14929	8635	8.61 ± 0.01	-2.69 ± 0.15
NGC 5347	390	15671		8.64 ± 0.03	-2.35 ± 0.61

A Figura 21 mostra o diagrama de $\log(6.2/11.3)$ versus $\log([\text{N II}]\lambda 6584/\text{H}\alpha)$, expondo os dados observados e os resultados do modelo de fotoionização obtidos com o código CLOUDY, assumindo $\alpha_{\text{ox}} = -1.4$. Vale a pena mencionar que a razão das linhas [N II] λ 6584/H α é altamente sensível à metalicidade, medida pela abundância de oxigênio (O/H) e tem uma pequena (embora não desprezível) dependência em relação ao parâmetro de ionização, conforme, por exemplo, (KEWLEY; NICHOLLS; SUTHERLAND, 2019; CARVALHO *et al.*, 2020). Um comportamento oposto é obtido para o $\log(6.2/11.3)$, que mostra uma dependência mais forte com relação ao grau de ionização do gás (representado por U) principalmente para os valores mais altos de U ao invés de com a metalicidade.

A fim de estender essa análise a outras fontes com uma gama mais ampla de metalicidades, foram incluídos nesse estudo dados da literatura de uma amostra do *Spitzer Infrared Nearby Galaxies Survey* (SINGs) estudados por Smith *et al.* (2007), em que as relações de emissão de 6.2/11.3 e 6.2/7.7 foram consideradas. Os valores de $\log([\text{N II}]\lambda 6584/\text{H}\alpha)$ desta amostra foram retirados de Moustakas *et al.* (2010). Esta amostra é composta por Seyfert, LINERS e galáxias Starburst. A Tabela 7 apresenta as estimativas da densidade e temperatura eletrônica, da abundância química do oxigênio e do parâmetro de ionização para a nossa amostra de objetos.

Figura 21 – Grade modelo de fotoionização de $\log(6.2/11.3)$ versus $\log([\text{N II}]\lambda 6584/\text{H}\alpha)$. As linhas tracejadas conectam os resultados do modelo de fotoionização com a mesma metalicidade, enquanto as linhas sólidas conectam os modelos com o mesmo logaritmo do parâmetro de ionização U . Os pontos azuis representam as razões de intensidade de linha observacional da amostra considerada neste trabalho, e os pontos cinza representam os dados de [Smith *et al.* \(2007\)](#). Os valores assumidos da metalicidade (Z/Z_{\odot}) e $\log U$ valores são indicados.



Para calibrar a metalicidade em função do $\log(6.2/11.3)$, o logaritmo do parâmetro de ionização e os valores de metalicidade para cada objeto da amostra foram obtidos da interpolação linear entre os modelos mostrados na Figura 21.

5.3 Correlação entre PAHs versus condições físicas do gás ionizado

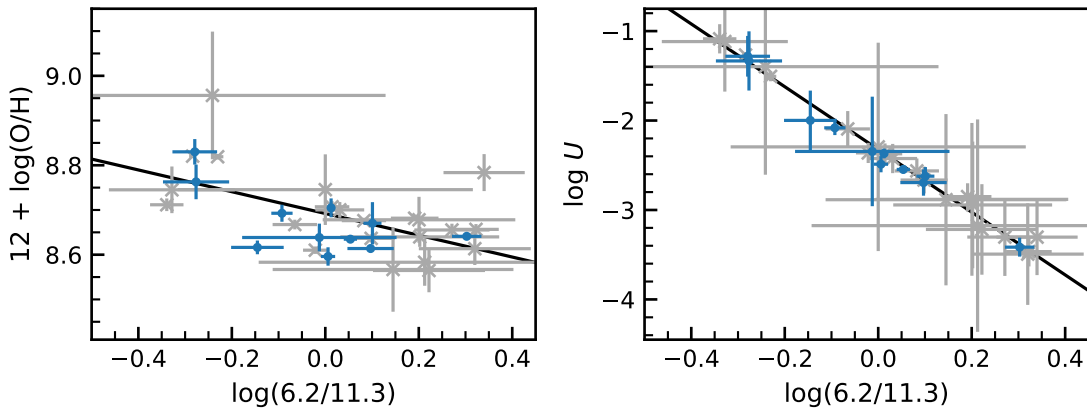
5.3.1 Abundância de oxigênio e o parâmetro de ionização

O efeito do campo de radiação e metalicidade nas intensidades e larguras equivalentes de PAH têm sido reportado por vários autores na literatura. Devido ao campo de radiação significativo de AGNs revelado pela presença de um contínuo significativo de poeira quente, os PAHs pequenos podem ser destruídos, o que tende a diminuir as intensidades de 6.2 e 11.3 μm ([STURM *et al.*, 2000](#); [DESAI *et al.*, 2007](#); [DIAMOND-STANIC](#); [RIEKE, 2010](#)). [Smith *et al.* \(2007\)](#) realizaram um estudo para uma amostra de Seyfert, LINER e galáxias Starburst, e encontraram uma tendência do aumento da luminosidade integrada das bandas de PAHs, em relação ao infravermelho total, com o aumento da abundância de oxigênio. Além disso, esses autores verificaram que a relação de intensidade relativa de PAH em 7.7/11.3 não varia com a dureza da

radiação, medida a partir da razão $[\text{Ne III}]/[\text{Ne II}]$ Starburst, mas mostra uma dependência para AGNs, especialmente para $[\text{Ne III}]/[\text{Ne II}] > 0.1$. No entanto, [Maragkoudakis *et al.* \(2018\)](#) verificaram uma dependência muito fraca na razão das bandas 7.7/6.2 com a dureza do campo de radiação (índice de ionização) para as regiões H II ao longo das galáxias M 83 e M 33.

A Figura 22 apresenta a razão de emissão de 6.2/11.3 em função da abundância de oxigênio, $12 + \log(\text{O}/\text{H})$, e o logaritmo do parâmetro de ionização do hidrogênio, $\log U$ para a amostra de galáxias deste trabalho e a amostra SINGs de ([SMITH *et al.*, 2007](#)). Nota-se que a intensidade da razão 6.2/11.3 dos PAHs apresenta uma correlação linear com a abundância de oxigênio e o parâmetro de ionização $\log U$. Os melhores ajustes foram obtidos pelas funções $12 + \log(\text{O}/\text{H}) = -0.24 \times \log(6.2/11.3) + 8.69$ com $R = -0.58$ e $\log(U) = -3.51 \times \log(6.2/11.3) - 2.32$ com $R = -0.99$, em que R é o coeficiente de correlação de Pearson. É importante enfatizar que é a primeira vez que se verifica que modelo de fotoionização pode reproduzir a maioria dos dados observacionais de $\log(6.2/11.3)$ versus $\log([\text{N II}]\lambda 6584/\text{H}\alpha)$.

Figura 22 – À esquerda: A abundância de oxigênio ($12 + \log(\text{O}/\text{H})$) em função da razão de intensidade das bandas de PAHs em $6.2/11.3 \mu\text{m}$. À direita: Relação entre o logaritmo do parâmetro de ionização do hidrogênio ($\log U$) e a razão de bandas $6.2/11.3 \mu\text{m}$. Os pontos azuis representam as galáxias da amostra e os pontos cinza, a amostra SINGs de galáxias de [Smith *et al.* \(2007\)](#). A linha sólida preta é o ajuste linear aos dados



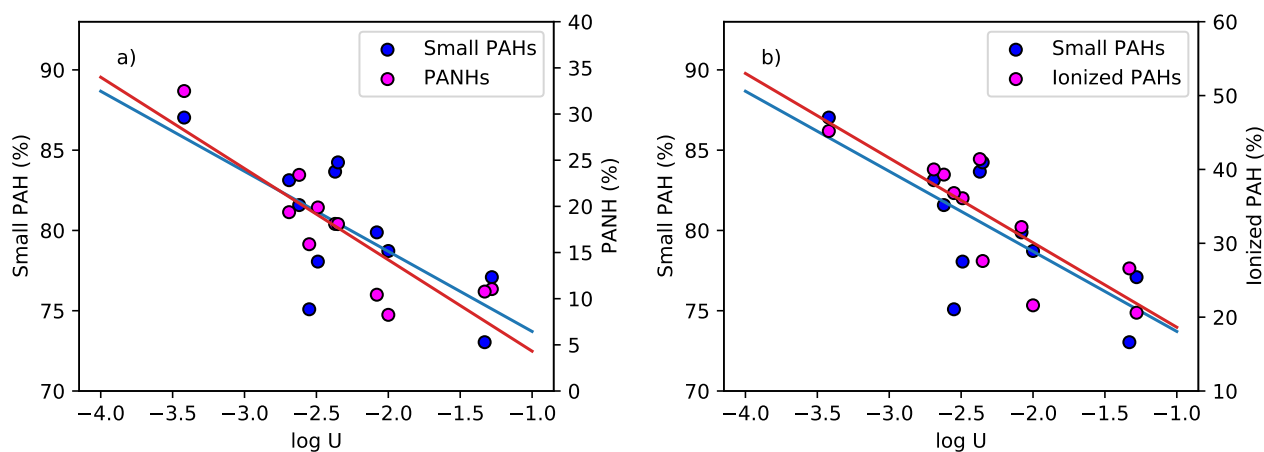
5.3.2 PAHs pequenos, ionizados e nitrogenados versus parâmetro de ionização

É amplamente conhecido que o tamanho e o grau de ionização dos PAHs podem estar diretamente relacionados às condições físicas do ambiente em que residem ([TIELENS, 2005](#); [SIDHU *et al.*, 2021](#)), em especial às do campo de radiação a que estão submetidos. Dessa forma, o parâmetro de ionização, $\log U$, torna-se um fator importante para sua caracterização.

Também amplamente conhecido que o tamanho e o estado de ionização das espécies de PAHs podem estar diretamente relacionados com as condições físicas do ambiente local (TIELENS, 2005; SIDHU *et al.*, 2021), especialmente do campo ionizante, que é caracterizado pelo parâmetro de ionização $\log U$.

Nesta seção, a relação entre a contribuição de PAHs pequenos, ionizados e PANHs em função de $\log U$ é apresentada. A Figura 23 mostra, à esquerda, um gráfico que relaciona o percentual de contribuição da população de PAHs pequenos e nitrogenados como o parâmetro de ionização. Já à direita desta figura, adiciona-se a correlação entre os PAHs ionizados com o parâmetro $\log(U)$. Pode-se verificar que as contribuições das espécies pequenas, tanto de PAHs quanto de PANHs, diminuem à medida que o parâmetro de ionização de hidrogênio aumenta (painel esquerdo). A correlação é muito forte em ambos os casos, pois apresenta coeficiente de Pearson $R = -0.71$ para os PAHs pequenos e $R = -0.86$ para os PANHs, com melhor ajuste linear para $\text{PAHs}_{\text{pequeno}(fluxo)} = -4.9 \log(U) + 68.76$ e para $\text{PANHs}_{(fluxo)} = -9.9 \log U - 5$.

Figura 23 – Percentual de contribuição de PAHs pequenos e PANHs versus $\log U$ (à esquerda) e PAHs pequenos e ionizados versus $\log U$ (à direita). As linhas sólidas vermelhas e azuis representam os melhores ajustes entre a porcentagem de fluxo total da população (PAHs pequenos, PAHs ionizados e PANHs) e $\log U$.



A principal razão para uma diminuição na fração de PAHs pequenos e PANHs com o aumento do parâmetro de ionização pode ser devido ao fato de que o último fator está diretamente relacionado com o aumento da taxa de fragmentação dos PAHs pequenos e PANHs, já que estes têm menor energia de dissociação do que as espécies de PAHs grandes, conforme Peeters *et al.* (2005). Por exemplo, a energia de dissociação para a formação do cátion $C_3H_3^+$ oriundo do naftaleno ($C_{10}H_8$) e do benzeno (C_6H_6) é 19 eV e 14 eV, respectivamente (NIST webbook²). Além disso, a energia de dissociação é menor para PANHs do que para PAHs pequenos. Para dissociação de hidrocarboneto aromático 2-

² <https://webbook.nist.gov/chemistry/>

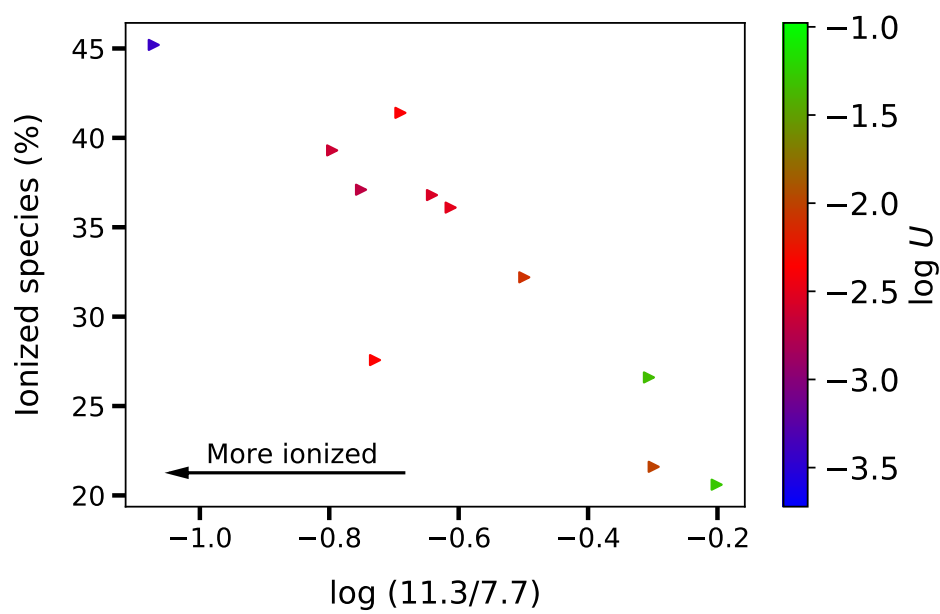
metilpiridina, C_6H_7N , no cátion C_5H_6 a energia é 12.87 eV, e, como a maioria dos PANHs em nossa amostra são amidas (um grupo amida fora do anel), a energia de dissociação é ainda mais baixa. Por exemplo, para dissociação de hidrocarboneto aromático Anilina, C_6H_7N , no cátion C_5H_6 a energia média é 11.96 eV. Isso explica por que a fração dos PANHs menores caem ($\sim 35\%$ para $\sim 5\%$) mais rápido do que os PAHs pequenos ($\sim 90\%$ para $\sim 75\%$). Da mesma forma, a menor porcentagem de PANHs (valor médio de 17%) em relação aos pequenos PAHs (81%) poderia ser explicada por suas taxas mais altas de dissociação reduzindo seu tempo de meia-vida, segundo Peeters *et al.* (2005). Portanto, a fração de PAHs pequenos e PANHs diminui à medida que o fator U aumenta.

Segundo O'Dowd *et al.* (2009), uma fonte de AGN destrói preferencialmente espécies pequenas de PAH com seu forte campo de radiação, favorecendo o predomínio de espécies grandes. Como consequência, o meio é mais enriquecido metalicamente devido à alta destruição de PAHs pequenos. Os estudos de Sales, Pastoriza e Riffel (2010) sugeriram que os Seyferts tendem a apresentar uma emissão IR dominada por moléculas de PAH com mais de 180 átomos de carbono, enquanto outros objetos, como Starburst, normalmente formam moléculas com menos de 180 carbonos. Na verdade, o toro também pode explicar a dominância dos PAHs menores em nossa amostra, uma vez que este pode proteger a destruição dos PAHs do campo de radiação mais duro do AGN na região empoeirada da amostra.

O painel direito da Figura 23 também mostra que a fração de ionização dos PAHs diminui à medida que o fator de ionização aumenta. O coeficiente de correlação é $R = -0.84$, e o ajuste linear é dado por $PAHs_{ionizados}(fluxo) = -11.4 \log U + 7.2$. Este resultado pode ser explicado se a taxa de fragmentação de PAHs for maior que a taxa de ionização, então, neste caso, a porcentagem de PAHs pequenos e ionizados diminui à medida que o fator U aumenta. Além disso, Jochims *et al.* (1994) mostraram que os PAHs contendo menos de 30-40 átomos de carbono, quando fotoexcitados, tendem a se dissociar em vez de relaxar por emissão infravermelha. No caso de PAHs maiores, a principal forma de relaxamento ocorrerá por meio da emissão infravermelha (SALES; PASTORIZA; RIFFEL, 2010; SALES *et al.*, 2013) e Sales *et al.* (2013).

Para verificar se os resultados deste trabalho estão de acordo com os modelos clássicos de Draine e Li (2001), testou-se a relação entre a porcentagem de PAHs ionizados determinada a partir do PAHdb através da razão das bandas de PAHs em $11.3/7.7 \mu m$ (observado) e o parâmetro de ionização determinado a partir dos modelos de fotoionização. Isto é mostrado na Figura 24, e verifica-se que o grau de ionização das espécies de PAH aumenta com a diminuição da razão $11.3/7.7 \mu m$ e com o decréscimo do parâmetro de ionização. O ajuste neste caso foi $Espécies\ Ionizadas(\%) = -28.11 \log(11.3/7.7) + 16.22$, com $R = -0.90$.

Figura 24 – Proporção da emissão de PAHs ionizados *versus* razão das bandas 11.3/7.7 μm em função do $\text{Log } U$.



6 Conclusões e perspectivas

Neste estudo utilizamos dados no ótico e no infravermelho de uma amostra de galáxias com núcleo ativo para caracterizar as populações de PAHs presentes nesses objetos, bem como relacioná-las com as condições físicas locais do gás ionizado e de seu campo de radiação. Os dados no infravermelho foram selecionados do ATLAS Spitzer/IRS e consistem em espectros de baixa resolução na faixa de comprimento de onda de 5-15 μm e *redshift* local, e os espectros óticos foram compilados do Sloan Digital Sky Survey, DR16, na faixa de comprimento de onda de 3 600 até 10 400Å. Modelos de fotoionização foram obtidos usando o código CLOUDY versão 17.02 para reproduzir as razões de intensidade das linhas de emissão observadas. As principais conclusões são resumidas como segue:

1. Espécies contendo 10 – 82 átomos de carbono são as mais abundantes na nossa amostra de galáxias, enquanto as espécies em geral podem ser compostas por 9–170 carbonos;
2. Dependendo da galáxia da amostra, a população de PAH pode conter até 95% de espécies pequenas (a média sendo 81%) e 79% de PAHs neutros (a média sendo 68%);
3. Entre os hidrocarbonetos puros, $\text{C}_{52}\text{H}_{18}$ merece atenção, já que se encontra em 75% da amostra, contribuindo com cerca de 5 a 13% nos fluxos das galáxias;
4. No que diz respeito aos PANHs, essas espécies contribuem com cerca de 8–32% da emissão total nos objetos estudados (17% em média). Amidas aromáticas, como $\text{C}_{10}\text{H}_9\text{N}$, $\text{C}_{10}\text{H}_9\text{N}^+$, $\text{C}_{14}\text{H}_{11}\text{N}$ e $\text{C}_{15}\text{H}_9\text{N}^+$ estão entre as espécies mais relevantes que contribuem para o fluxo emissor de IR. $\text{C}_{10}\text{H}_9\text{N}$ é uma espécie importante, que está presente em 92% da nossa amostra.
5. Embora não seja possível garantir que as amidas aromáticas mencionadas acima e $\text{C}_{52}\text{H}_{18}$ estejam sempre presentes nos espectros das galáxias aqui estudadas, devido à degenerescência, a remoção dessas moléculas produz uma piora no ajuste e uma adição de moléculas da mesma família (PAHs pequenos e amidas aromáticas, além de pequena adição de Oxi-PAHs), sugerindo que PANHs pequenas são

responsáveis por parte significativa da emissão das galáxias na amostra. Assim, sugere-se que as amidas aromáticas, assim como seus cátions, sejam considerados em futuros estudos e observações experimentais/teóricas, com o objetivo de buscar sua detecção interestelar em comprimentos de onda de rádio;

6. Pela primeira vez, foi mostrado que modelos de fotoionização de AGN com $\alpha_{ox} = -1.4$ reproduziram os dados observados no diagrama $\log(6.2/11.3)$ versus $\log([N II]\lambda 6584 / H\alpha)$;
7. A razão de intensidade das bandas 6.2/11.3 apresenta uma anticorrelação linear entre a abundância de oxigênio e o $\log U$, no sentido de que a relação 6.2/11.3 diminui à medida que a abundância de oxigênio e o $\log U$ aumenta;
8. Na amostra, a contribuição dos PAHs pequenos no fluxo da galáxia, assim como a contribuição de PAHs ionizados e PANHs, apresentam uma tendência de diminuição à medida que o parâmetro de ionização de hidrogênio aumenta. Observa-se uma anticorrelação linear entre esses parâmetros. Propõe-se que este comportamento está diretamente relacionado com o aumento da taxa de fragmentação dos PAHs menores e PANHs em alto U , uma vez que eles têm menor energia de dissociação do que os PAHs maiores. Além disso, a energia de dissociação é menor para PANHs do que para PAHs menores, de acordo com o comportamento observado, em que a fração de PANHs cai mais rápido (de 35% a 5%) do que a dos PAHs pequenos (de 90% para 75%) no intervalo de $\log U$ considerado. Por outro lado, a diminuição da contribuição dos PAHs ionizados com o aumento do fator U pode ser explicada se a taxa de fragmentação de PAH for maior do que a taxa de ionização.
9. Verificou-se que a contribuição das espécies ionizadas aumenta com a diminuição da razão de 11.3/7.7 e do parâmetro de ionização ($\log U$), de acordo com os modelos propostos por [Draine e Li \(2001\)](#).

Como uma das perspectivas, está o estudo em laboratório da estabilidade e fragmentação de algumas moléculas presentes na amostra a partir da Espectrometria de Massa por Tempo de Voo (TOF-MS, do inglês Time of Flight-Mass Spectrometry) a fim de indicar os fragmentos mais abundantes para serem trabalhados em química teórica no futuro, com a intenção de calcular suas frequências rotacionais e sugerir buscas através de telescópios.

Referências

- ABEL, N. *et al.* Sensitivity of pdr calculations to microphysical details. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 686, n. 2, p. 1125, 2008.
- AHUMADA, R. *et al.* The sixteenth data release of the sloan digital sky surveys: First release from the apogee-2 southern survey and full release of eboss spectra. *arXiv preprint arXiv:1912.02905*, 2019.
- ALLAMANDOLA, L. J.; HUDGINS, D. M.; SANDFORD, S. A. Modeling the Unidentified Infrared Emission with Combinations of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. *The Astrophysical Journal*, v. 511, n. 2, p. L115–L119, fev. 1999.
- ALONSO-HERRERO, A. Agn and star formation activity in local luminous and ultraluminous infrared galaxies. *arXiv preprint arXiv:1302.2033*, 2013.
- ALONSO-HERRERO, A. *et al.* Nuclear 11.3 μm pah emission in local active galactic nuclei. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Oxford University Press, v. 443, n. 3, p. 2766–2782, 2014.
- ANDREWS, H. *et al.* Pah emission at the bright locations of pdrs: the grandpah hypothesis. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 807, n. 1, p. 99, 2015.
- ASPLUND, M. *et al.* The chemical composition of the sun. *Annual review of astronomy and astrophysics*, Annual Reviews, v. 47, p. 481–522, 2009.
- BAKES, E.; TIELENS, A. The photoelectric heating mechanism for very small graphitic grains and polycyclic aromatic hydrocarbons. *The Astrophysical Journal*, v. 427, p. 822–838, 1994.
- BALDWIN, J. A.; PHILLIPS, M. M.; TERLEVICH, R. Classification parameters for the emission-line spectra of extragalactic objects. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, IOP Publishing, v. 93, n. 551, p. 5, 1981.
- BALMAVERDE, B. *et al.* The hst view of the innermost narrow line region. *Astronomy & Astrophysics*, EDP Sciences, v. 586, p. A48, 2016.
- BAUSCHLICHER CHARLES W., J.; PEETERS, E.; ALLAMANDOLA, L. J. The Infrared spectra of very large, compact, highly symmetric, polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). *The Astrophysical Journal*, v. 678, n. 1, p. 316–327, maio 2008.
- BERNÉ, O. *et al.* Detection of buckminsterfullerene emission in the diffuse interstellar medium. *Astronomy & Astrophysics*, EDP Sciences, v. 605, p. L1, 2017.
- BERNÉ, O.; MONTILLAUD, J.; JOBLIN, C. Top-down formation of fullerenes in the interstellar medium. *Astronomy & Astrophysics*, EDP sciences, v. 577, p. A133, 2015.
- BERNÉ, O.; TIELENS, A. G. Formation of buckminsterfullerene (c60) in interstellar space. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 109, n. 2, p. 401–406, 2012.

- BOERSMA, C. *et al.* The NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database Version 2.00: Updated Content, Web Site, and On(Off)line Tools. *The Astrophysical Journal Supplement*, v. 211, n. 1, p. 8, mar. 2014.
- BOERSMA, C.; BREGMAN, J.; ALLAMANDOLA, L. Properties of polycyclic aromatic hydrocarbons in the northwest photon dominated region of ngc 7023. i. pah size, charge, composition, and structure distribution. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 769, n. 2, p. 117, 2013.
- BOERSMA, C.; RUBIN, R.; ALLAMANDOLA, L. Spatial analysis of the polycyclic aromatic hydrocarbon features southeast of the orion bar. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 753, n. 2, p. 168, 2012.
- BRANDL, B. *et al.* The mid-infrared properties of starburst galaxies from spitzer-irs spectroscopy. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 653, n. 2, p. 1129, 2006.
- BRUZUAL, G.; CHARLOT, S. Stellar population synthesis at the resolution of 2003. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Blackwell Science Ltd Oxford, UK, v. 344, n. 4, p. 1000–1028, 2003.
- BUCHANAN, C. L. *et al.* Spitzer irs spectra of a large sample of seyfert galaxies: a variety of infrared spectral energy distributions in the local active galactic nucleus population. *The Astronomical Journal*, IOP Publishing, v. 132, n. 1, p. 401, 2006.
- CAMI, J. *et al.* Detection of c60 and c70 in a young planetary nebula. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 329, n. 5996, p. 1180–1182, 2010.
- CAMPBELL, E. K. *et al.* Laboratory confirmation of c 60+ as the carrier of two diffuse interstellar bands. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 523, n. 7560, p. 322–323, 2015.
- CANDIAN, A.; ZHEN, J.; TIELENS, A. G. G. M. The aromatic universe. *Physics Today*, v. 71, n. 11, p. 38–43, nov. 2018.
- CANELO, C. M. *et al.* Variations in the 6.2 μm emission profile in starburst-dominated galaxies: a signature of polycyclic aromatic nitrogen heterocycles (panhs)? *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Oxford University Press, v. 475, n. 3, p. 3746–3763, 2018.
- CANELO, C. M. *et al.* Profile comparison of the 6-9 μm polycyclic aromatic hydrocarbon bands in starburst-dominated galaxies. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 507, n. 4, p. 6177–6195, nov. 2021.
- CARVALHO, S. *et al.* Chemical abundances of seyfert 2 agns–ii. n2 metallicity calibration based on sdss. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Oxford University Press, v. 492, n. 4, p. 5675–5683, 2020.
- CHEN, T. Formation of covalently bonded polycyclic aromatic hydrocarbons in the interstellar medium. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 866, n. 2, p. 113, 2018.
- COELHO, L. d. S.; FRIAÇA, A. C. d. S.; MENDOZA, E. Possible routes for the formation of prebiotic molecules in the horsehead nebula. *arXiv preprint arXiv:2106.04666*, 2021.

- COOK, A. M. *et al.* Photochemistry of polycyclic aromatic hydrocarbons in cosmic water ice: The role of pah ionization and concentration. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 799, n. 1, p. 14, 2015.
- DEAMER, D. W.; SZOSTAK, J. W. *The origins of life: A subject collection from Cold spring harbor perspectives in biology*. [S.l.]: Cold Spring Harbor Laboratory Press, 2010.
- DEO, R. *et al.* Spitzer irs observations of seyfert 1.8 and 1.9 galaxies: a comparison with seyfert 1 and seyfert 2. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 671, n. 1, p. 124, 2007.
- DESAI, V. *et al.* PAH emission from ultraluminous infrared galaxies. *The Astrophysical Journal*, v. 669, n. 2, p. 810–820, nov. 2007.
- DIAMOND-STANIC, A. M.; RIEKE, G. H. Infrared views of a complete sample of active galactic nuclei. In: *American Astronomical Society Meeting Abstracts #215*. [S.l.: s.n.], 2010. (American Astronomical Society Meeting Abstracts, v. 215), p. 353.05.
- DORS, O. *et al.* On the central abundances of active galactic nuclei and star-forming galaxies. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Oxford University Press, v. 453, n. 4, p. 4102–4111, 2015.
- DORS, O. *et al.* Chemical abundances of seyfert 2 agns–iii. reducing the oxygen abundance discrepancy. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Oxford University Press, v. 496, n. 3, p. 3209–3221, 2020.
- DORS, O. L. *et al.* New quantitative nitrogen abundance estimations in a sample of seyfert 2 active galactic nuclei. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters*, Oxford University Press, v. 468, n. 1, p. L113–L117, 2017.
- DORS, O. L. *et al.* Semi-empirical metallicity calibrations based on ultraviolet emission lines of type-2 AGNs. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 486, n. 4, p. 5853–5866, jul. 2019.
- DRAINE, B. T.; LI, A. Infrared emission from interstellar dust. i. stochastic heating of small grains. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 551, n. 2, p. 807, 2001.
- DUNK, P. W. *et al.* Metallofullerene and fullerene formation from condensing carbon gas under conditions of stellar outflows and implication to stardust. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 110, n. 45, p. 18081–18086, 2013.
- EHRENFREUND, P. *et al.* Experimentally tracing the key steps in the origin of life: the aromatic world. *Astrobiology*, Mary Ann Liebert, Inc. 2 Madison Avenue Larchmont, NY 10538 USA, v. 6, n. 3, p. 490–520, 2006.
- FELTRE, A.; CHARLOT, S.; GUTKIN, J. Nuclear activity versus star formation: emission-line diagnostics at ultraviolet and optical wavelengths. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, The Royal Astronomical Society, v. 456, n. 3, p. 3354–3374, 2016.
- FERLAND, G. J. *et al.* The 2017 release Cloudy. *Revista Mexicana de Astronomía y Astrofísica*, v. 53, p. 385–438, out. 2017.

- FERNANDES, R. C. *et al.* Semi-empirical analysis of sloan digital sky survey galaxies—i. spectral synthesis method. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, The Royal Astronomical Society, v. 358, n. 2, p. 363–378, 2005.
- GALLEGO, J. *et al.* The current star formation rate of the local universe. *The Astrophysical Journal Letters*, IOP Publishing, v. 455, n. 1, p. L1, 1995.
- GARCÍA-HERNÁNDEZ, D. *et al.* Formation of fullerenes in h-containing planetary nebulae. *The Astrophysical Journal Letters*, IOP Publishing, v. 724, n. 1, p. L39, 2010.
- HÄGELE, G. F. *et al.* Precision abundance analysis of bright h ii galaxies. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Blackwell Publishing Ltd Oxford, UK, v. 383, n. 1, p. 209–229, 2008.
- HANINE, M. *et al.* Formation of interstellar complex polycyclic aromatic hydrocarbons: Insights from molecular dynamics simulations of dehydrogenated benzene. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 900, n. 2, p. 188, 2020.
- HERNÁN-CABALLERO, A.; HATZIMINAOGLOU, E. An atlas of mid-infrared spectra of star-forming and active galaxies. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Blackwell Publishing Ltd Oxford, UK, v. 414, n. 1, p. 500–511, 2011.
- HOUCK, J. R. *et al.* The infrared spectrograph*(irs) on the spitzer space telescope. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, IOP Publishing, v. 154, n. 1, p. 18, 2004.
- HUDGINS, D. M.; JR, C. W. B.; ALLAMANDOLA, L. Variations in the peak position of the 6.2 μm interstellar emission feature: A tracer of n in the interstellar polycyclic aromatic hydrocarbon population. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 632, n. 1, p. 316, 2005.
- JOBLIN, C.; LÉGER, A.; MARTIN, P. Contribution of polycyclic aromatic hydrocarbon molecules to the interstellar extinction curve. *The Astrophysical Journal*, v. 393, p. L79–L82, 1992.
- JOBLIN, C.; TIELENS, A.; CHERCHNEFF, I. The formation of polycyclic aromatic hydrocarbons in evolved circumstellar environments. *European Astronomical Society Publications Series*, EDP Sciences, v. 46, p. 177–189, 2011.
- JOCHIMS, H. W. *et al.* Size effects on dissociation rates of Polycyclic Aromatic Hydrocarbon cations: Laboratory Studies and Astrophysical Implications. *The Astrophysical Journal*, v. 420, p. 307, jan. 1994.
- JONES, A.; TIELENS, A.; HOLLENBACH, D. Grain shattering in shocks: The interstellar grain size distribution. *The Astrophysical Journal*, v. 469, p. 740, 1996.
- JR, C. W. B. *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*, IOP Publishing, v. 234, n. 2, p. 32, 2018.
- JR, R. C. K.; BRESOLIN, F.; GARNETT, D. R. The composition gradient in m101 revisited. ii. electron temperatures and implications for the nebular abundance scale. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 591, n. 2, p. 801, 2003.

- KAUFFMANN, G. *et al.* The host galaxies of active galactic nuclei. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, The Royal Astronomical Society, v. 346, n. 4, p. 1055–1077, 2003.
- KEEL, W. Optical properties of spiral galaxies with strong nuclear radio sources-active nuclei, starbursts, and composite objects. *The Astrophysical Journal*, v. 282, p. 75–84, 1984.
- Kennicutt ROBERT C., J. *et al.* Dust-corrected Star Formation Rates of Galaxies. I. Combinations of H α and Infrared Tracers. *The Astrophysical Journal*, v. 703, n. 2, p. 1672–1695, out. 2009.
- KEWLEY, L. J. *et al.* Theoretical modeling of starburst galaxies. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 556, n. 1, p. 121, 2001.
- KEWLEY, L. J. *et al.* The host galaxies and classification of active galactic nuclei. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Blackwell Publishing Ltd Oxford, UK, v. 372, n. 3, p. 961–976, 2006.
- KEWLEY, L. J.; NICHOLLS, D. C.; SUTHERLAND, R. S. Understanding Galaxy Evolution Through Emission Lines. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, v. 57, p. 511–570, ago. 2019.
- LIU, C. T.; JR, R. C. K. Spectrophotometric properties of merging galaxies. *The Astrophysical Journal*, v. 450, p. 547, 1995.
- LÓPEZ-PUERTAS, M. *et al.* Large abundances of polycyclic aromatic hydrocarbons in titan's upper atmosphere. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 770, n. 2, p. 132, 2013.
- MADDEN, S. C. *et al.* Ism properties in low-metallicity environments-i. mid-infrared spectra of dwarf galaxies. *Astronomy & Astrophysics*, EDP Sciences, v. 446, n. 3, p. 877–896, 2006.
- MARAGKOUidakis, A. *et al.* PAHs and star formation in the H II regions of nearby galaxies M83 and M33. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 481, n. 4, p. 5370–5393, dez. 2018.
- MARTINS-FRANCO, Y.; MENÉNDEZ-DELMESTRE, K. Starbursts versus active galactic nuclei: Studying astrochemistry of dusty galaxies. *Astronomische Nachrichten*, v. 342, n. 1-2, p. 186–190, jan. 2021.
- MATTIODA, A. *et al.* The nasa ames pah ir spectroscopic database: The laboratory spectra. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, IOP Publishing, v. 251, n. 2, p. 22, 2020.
- MCCARTHY, M. C.; MCGUIRE, B. A. Aromatics and cyclic molecules in molecular clouds: A new dimension of interstellar organic chemistry. *Journal of Physical Chemistry A*, v. 125, n. 16, p. 3231–3243, abr. 2021.
- MCGUIRE, B. A. *et al.* Detection of the aromatic molecule benzonitrile (c-C₆H₅CN) in the interstellar medium. *Science*, v. 359, n. 6372, p. 202–205, jan. 2018.

- MCGUIRE, B. A. *et al.* Detection of two interstellar polycyclic aromatic hydrocarbons via spectral matched filtering. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 371, n. 6535, p. 1265–1269, 2021.
- MERINO, P. *et al.* Graphene etching on sic grains as a path to interstellar polycyclic aromatic hydrocarbons formation. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 5, p. 3054, 2014.
- MICELOTTA, E.; JONES, A.; TIELENS, A. Polycyclic aromatic hydrocarbon processing by cosmic rays. *Astronomy & Astrophysics*, EDP Sciences, v. 526, p. A52, 2011.
- MICELOTTA, E. R. *et al.* The formation of cosmic fullerenes from arophatic clusters. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 761, n. 1, p. 35, 2012.
- MILLER, B. P. *et al.* X-ray emission from optically selected radio-intermediate and radio-loud quasars. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 726, n. 1, p. 20, 2010.
- MILLER, B. P. *et al.* X-ray emission from optically selected radio-intermediate and radio-loud quasars. *The Astrophysical Journal*, v. 726, n. 1, p. 20, jan. 2011.
- MOUSTAKAS, J. *et al.* Optical spectroscopy and nebular oxygen abundances of the spitzer/sings galaxies. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, IOP Publishing, v. 190, n. 2, p. 233, 2010.
- O'DOWD, M. J. *et al.* Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in galaxies at $z \sim 0.1$: The Effect of Star Formation and Active Galactic Nuclei. *The Astrophysical Journal*, v. 705, n. 1, p. 885–898, nov. 2009.
- OLIVA, E. *et al.* Size and physical conditions of the coronal line region in a nearby seyfert 2: the circinus galaxy. *Astronomy and Astrophysics*, v. 288, p. 457–465, 1994.
- OLIVEIRA, K. de S.; SARAIVA, M. d. F. O. *Astronomia e astrofísica. Livraria da Física, Rio Grande do Sul*, 2014.
- OSTERBROCK, D. E.; FERLAND, G. J. *Astrophysics Of Gas Nebulae and Active Galactic Nuclei*. [S.l.]: University science books, 2006.
- PEETERS, E. *et al.* The rich 6 to 9 μ m spectrum of interstellar pahs. *Astronomy & Astrophysics*, EDP Sciences, v. 390, n. 3, p. 1089–1113, 2002.
- PEETERS, E. *et al.* The pah emission characteristics of the reflection nebula ngc 2023. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 836, n. 2, p. 198, 2017.
- PEETERS, E. *et al.* The 15–20 μ m emission in the reflection nebula ngc 2023. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 747, n. 1, p. 44, 2012.
- PEETERS, Z. *et al.* Formation and photostability of n-heterocycles in space-i. the effect of nitrogen on the photostability of small aromatic molecules. *Astronomy & Astrophysics*, EDP Sciences, v. 433, n. 2, p. 583–590, 2005.
- PEVERATI, R. *et al.* Insights into hydrocarbon chain and aromatic ring formation in the interstellar medium: Computational study of the isomers of and and their formation pathways. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 830, n. 2, p. 128, 2016.

PRIETO, C. A.; LAMBERT, D. L.; ASPLUND, M. The forbidden abundance of oxygen in the sun. *The Astrophysical Journal Letters*, IOP Publishing, v. 556, n. 1, p. L63, 2001.

RAPACIOLI, M.; JOBLIN, C.; BOISSEL, P. Spectroscopy of polycyclic aromatic hydrocarbons and very small grains in photodissociation regions. *Astronomy & Astrophysics*, EDP Sciences, v. 429, n. 1, p. 193–204, 2005.

RICCA, A. *et al.* Polycyclic Aromatic Hydrocarbons with Straight Edges and the 7.6/6.2 and 8.6/6.2 Intensity Ratios in Reflection Nebulae. *The Astrophysical Journal*, v. 854, p. 115, fev. 2018.

ROBERTS, K. R.; SMITH, K. T.; SARRE, P. J. Detection of c60 in embedded young stellar objects, a herbig ae/be star and an unusual post-asymptotic giant branch star. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Blackwell Publishing Ltd Oxford, UK, v. 421, n. 4, p. 3277–3285, 2012.

RUSCHEL-DUTRA, D. *et al.* A mid-IR comparative analysis of the Seyfert galaxies NGC 7213 and NGC 1386. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 438, n. 4, p. 3434–3442, mar. 2014.

RUSH, B.; MALKAN, M. A.; SPINOGLIO, L. The Extended 12 Micron Galaxy Sample. *The Astrophysical Journal Supplement*, v. 89, p. 1, nov. 1993.

SALES, D. A.; PASTORIZA, M. G.; RIFFEL, R. Polycyclic aromatic hydrocarbon and emission line ratios in active galactic nuclei and starburst galaxies. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 725, n. 1, p. 605, 2010.

SALES, D. A. *et al.* Polycyclic aromatic hydrocarbon in the central region of the seyfert 2 galaxy ngc 1808. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Oxford University Press, v. 429, n. 3, p. 2634–2642, 2013.

SAVAGE, B. D.; MATHIS, J. S. Observed properties of interstellar dust. *Annual review of astronomy and astrophysics*, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 17, n. 1, p. 73–111, 1979.

SCHKENNER, S. *Laboratory astrochemistry: From molecules through nanoparticles to grains*. [S.l.]: Wiley-VCH Verlag, 2015.

SCHNEIDER, P. *Extragalactic astronomy and cosmology: an introduction*. [S.l.]: Springer, 2014.

SELLGREN, K. *et al.* C60 in reflection nebulae. *The Astrophysical Journal Letters*, IOP Publishing, v. 722, n. 1, p. L54, 2010.

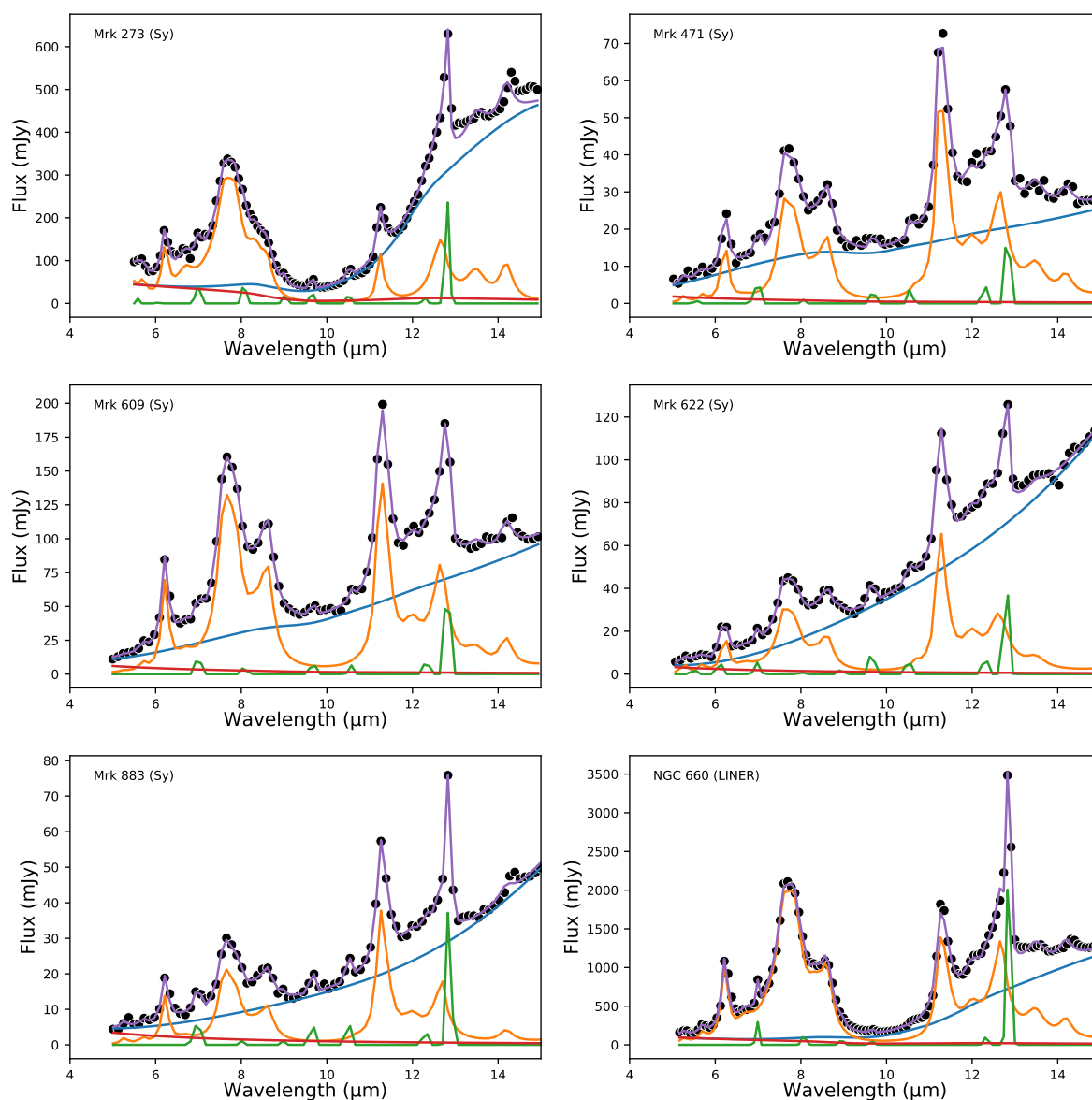
SEOK, J. Y.; HIRASHITA, H.; ASANO, R. S. Formation history of polycyclic aromatic hydrocarbons in galaxies. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, The Royal Astronomical Society, v. 439, n. 2, p. 2186–2196, 2014.

SHANNON, M. J.; BOERSMA, C. Examining the class b to a shift of the 7.7 μm pah band with the nasa ames pah ir spectroscopic database. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 871, n. 1, p. 124, 2019.

- SHIPLEY, H. V. *et al.* A new star formation rate calibration from polycyclic aromatic hydrocarbon emission features and application to high-redshift galaxies. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 818, n. 1, p. 60, 2016.
- SIDHU, A. *et al.* A principal component analysis of polycyclic aromatic hydrocarbon emission in NGC 2023. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 500, n. 1, p. 177–190, jan. 2021.
- SILVA-RIBEIRO, A. *et al.* Polycyclic aromatic hydrocarbons and the ionized gas in galaxies with active nuclei. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2021.
- SMITH, J.-D. T. *et al.* The mid-infrared spectrum of star-forming galaxies: global properties of polycyclic aromatic hydrocarbon emission. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 656, n. 2, p. 770, 2007.
- STURM, E. *et al.* ISO-SWS spectra of galaxies: Continuum and features. *Astronomy and Astrophysics*, v. 358, p. 481–493, jun. 2000.
- TIELENS, A. The molecular universe. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 85, n. 3, p. 1021, 2013.
- TIELENS, A. G. Interstellar polycyclic aromatic hydrocarbon molecules. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, Annual Reviews, v. 46, p. 289–337, 2008.
- TIELENS, A. G. G. M. *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium*. [S.l.: s.n.], 2005.
- VERON-CETTY, M.; VERON, P. VizieR online data catalog: Quasars and active galactic nuclei (veron+, 2003). *VizieR Online Data Catalog*, p. VII–235, 2003.
- WU, Y. *et al.* Spitzer/irs 5–35 μm low-resolution spectroscopy of the 12 μm seyfert sample. *The Astrophysical Journal*, IOP Publishing, v. 701, n. 1, p. 658, 2009.
- YAMAMOTO, S. *Introduction to Astrochemistry: Chemical Evolution from Interstellar Clouds to Star and Planet Formation*. [S.l.]: Springer, 2017.
- ZHEN, J. *et al.* Laboratory formation of fullerenes from pahas: Top-down interstellar chemistry. *The Astrophysical Journal Letters*, IOP Publishing, v. 797, n. 2, p. L30, 2014.
- ZHU, S. *et al.* Investigating the x-ray enhancements of highly radio-loud quasars at $z > 4$. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Oxford University Press, v. 482, n. 2, p. 2016–2038, 2019.
- ZHU, S. F. *et al.* Investigating the X-ray enhancements of highly radio-loud quasars at $z > 4$. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 482, n. 2, p. 2016–2038, jan. 2019.
- ZWET, G. Van der; ALLAMANDOLA, L. *et al.* Polycyclic aromatic hydrocarbons and the diffuse interstellar bands. *Astronomy and Astrophysics*, v. 146, p. 76, 1985.

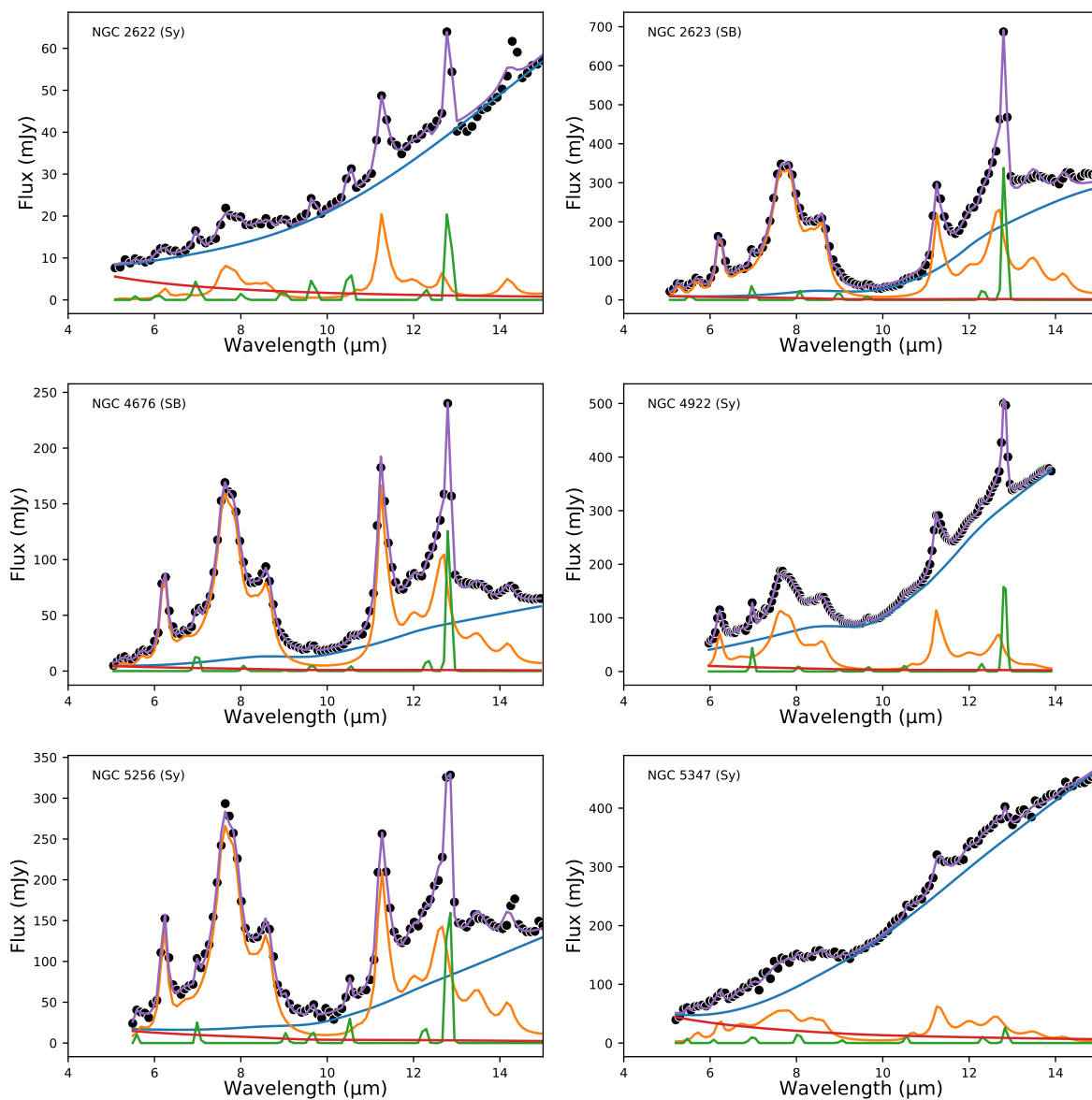
APÊNDICE A – Componentes PAHFIT

Figura 25 – Decomposição espectral da amostra na faixa de 5 a 15 μm em componentes do contínuo total (linha azul), contínuo estelar (linha vermelha), linhas iônicas (linha verde), assinatura de PAHs e características de poeira (linha laranja) e bestfit modelo (linha roxa). O espectro observado é mostrado em pontos pretos.



Autor.

Figura 26 – Similar Figura 25



APÊNDICE B – Mapeamento das assinaturas de espécies de PAHs que estão contribuindo com a emissão no IR: Nove amostras de galáxias *Seyfert* e três amostras de galáxias *Staburst*. Nessas tabelas, omitem-se todas as espécies que contribuem com $<1\%$ para a emissão total.

Tabela 8 – Espécies de PAHs que estão contribuindo para a emissão total no espectro de IR da galáxia Seyfert Mrk 273.

UID	Fórmula	Carga	%
470	C ₁₅ H ₉ N ⁺	1	9.1
2482	C ₂₈	0	6.2
480	C ₁₄ H ₁₁ N ⁺	1	4.9
2758	C ₃₁	0	4.1
2598	C ₃₀	0	4.1
37	C ₅₄ H ₁₈	0	4.0
2876	C ₃₂	0	3.6
2386	C ₂₄	0	3.4
281	C ₁₈ H ₁₂ ⁺	1	3.3
468	C ₁₅ H ₉ N ⁺	1	3.3
2464	C ₂₈	0	3.2
473	C ₁₀ H ₉ N	0	3.2
2427	C ₂₆	0	2.8
481	C ₁₄ H ₁₁ N	0	2.7
2955	C ₃₃	0	2.6
488	C ₁₃ H ₉ N ⁺	1	2.5
3910	C ₄₈ H ₂₆ ⁻	-1	2.4
269	C ₁₂ H ₈ N ₂ ⁻	-1	2.3
176	C ₈₄ H ₂₄ ⁻	-1	2.2
3151	C ₃₄	0	2.1
3162	C ₃₄ H ₁₆ ⁺	1	2.1
475	C ₁₀ H ₉ N	0	1.9
822	C ₃₄ H ₂₀ ⁻	-1	1.9
816	C ₂₆ H ₁₆ ⁻	-1	1.6
2808	C ₃₂	0	1.5
3205	C ₈₂ H ₂₄ ⁻	-1	1.4
2559	C ₂₉	0	1.4
705	C ₅₄ ⁺	1	1.4
122	C ₇₈ H ₂₂ ⁺	1	1.3
704	C ₅₄	0	1.1
476	C ₁₀ H ₉ N ⁺	1	1.1
2374	C ₂₂	0	1.1

Tabela 9 – Similiar a Tabela 8 porém para galáxia Seyfert Mrk 471.

UID	Fórmula	Charge	%
3173	C ₅₂ H ₁₈	0	9.0
836	C ₅₄ H ₁₈	0	6.7
2427	C ₂₆	0	6.1
620	C ₄₂ H ₁₆	0	5.7
233	C ₂₃ H ₁₂ N ⁺	1	5.0
2379	C ₂₂	0	4.1
2542	C ₂₉	0	4.0
468	C ₁₅ H ₉ N ⁺	1	3.7
2797	C ₃₂	0	3.7
636	C ₄₈ H ₁₈ ⁺	1	2.5
496	C ₉ H ₈ ⁺	1	2.3
443	C ₁₆ H ₁₁ O	0	2.3
2782	C ₃₂	0	2.1
837	C ₃₄ H ₂₀	0	2.0
817	C ₃₀ H ₁₈	0	2.0
2746	C ₃₁	0	1.9
1895	C ₃₀ H ₁₈	0	1.8
726	C ₂₈ H ₁₄	0	1.8
819	C ₃₀ H ₁₈ ⁻	-1	1.8
639	C ₉₀ H ₂₄ ⁺	1	1.8
18	C ₂₄ H ₁₂	0	1.6
3226	C ₃₁ H ₁₅	0	1.5
229	C ₂₃ H ₁₂ N	0	1.5
284	C ₂₂ H ₁₂	0	1.4
2391	C ₂₄	0	1.4
2955	C ₃₃	0	1.3
3151	C ₃₄	0	1.3
3188	C ₆₄ H ₂₀	0	1.3
424	C ₁₀ H ₈ O ₂	0	1.1
115	C ₆₆ H ₂₀	0	1.1
176	C ₈₄ H ₂₄ ⁻	-1	1.1
1990	C ₃₀ H ₁₆	0	1.0

Tabela 10 – Similiar a Tabela 8 porém para galáxia Seyfert Mrk 609.

UID	Fórmula	Charge	%
3205	$C_{82}H_{24}^-$	-1	9.7
473	$C_{10}H_9N$	0	7.7
76	$C_{47}H_{17}$	0	6.2
636	$C_{48}H_{18}^+$	1	5.3
128	$C_{36}H_{16}$	0	4.5
2427	C_{26}	0	4.4
2542	C_{29}	0	4.3
3200	$C_{80}H_{22}$	0	4.2
822	$C_{34}H_{20}^-$	-1	3.5
115	$C_{66}H_{20}$	0	3.5
2791	C_{32}	0	3.4
591	$C_{32}H_{14}$	0	3.2
625	$C_{40}H_{16}$	0	2.5
2758	C_{31}	0	2.3
496	$C_9H_8^+$	1	2.3
2857	C_{32}	0	2.1
425	$C_{10}H_8O_2^+$	1	2.0
3124	C_{34}	0	2.0
2598	C_{30}	0	2.0
31	$C_{24}H_{12}^{2+}$	2	2.0
2684	C_{31}	0	1.7
3192	$C_{64}H_{22}^+$	1	1.6
2938	C_{33}	0	1.5
269	$C_{12}H_8N_2^-$	-1	1.4
3151	C_{34}	0	1.3
726	$C_{28}H_{14}$	0	1.2
2436	C_{27}	0	1.2
2391	C_{24}	0	1.2
514	$C_{14}H_9^+$	1	1.0
2499	C_{28}	0	1.0
2911	C_{32}	0	1.0

Tabela 11 – Similiar a Tabela 8 porém para galáxia Seyfert Mrk 622.

UID	Fórmula	Charge	%
3173	C ₅₂ H ₁₈	0	13.3
620	C ₄₂ H ₁₆	0	7.8
2494	C ₂₈	0	3.6
233	C ₂₃ H ₁₂ N ⁺	1	3.5
724	C ₄₅ H ₁₅ ⁻	-1	3.3
819	C ₃₀ H ₁₈ ⁻	-1	3.3
3022	C ₃₃	0	3.2
2797	C ₃₂	0	3.1
639	C ₉₀ H ₂₄ ⁺	1	2.9
3188	C ₆₄ H ₂₀	0	2.8
2379	C ₂₂	0	2.6
468	C ₁₅ H ₉ N ⁺	1	2.4
2475	C ₂₈	0	2.3
443	C ₁₆ H ₁₁ O	0	2.2
159	C ₂₀ H ₁₀	0	2.1
116	C ₆₆ H ₂₀ ⁻	-1	2.1
2279	C ₂₆ H ₁₆	0	1.8
2391	C ₂₄	0	1.7
2684	C ₃₁	0	1.7
3124	C ₃₄	0	1.6
837	C ₃₄ H ₂₀	0	1.6
284	C ₂₂ H ₁₂	0	1.5
3020	C ₃₃	0	1.5
2791	C ₃₂	0	1.3
3040	C ₃₃	0	1.3
2925	C ₃₃	0	1.2
636	C ₄₈ H ₁₈ ⁺	1	1.2
258	C ₅₂ H ₁₈ N ₂ ⁺	1	1.2
705	C ₅₄ ⁺	1	1.2
465	C ₁₁ H ₇ N	0	1.2
496	C ₉ H ₈ ⁺	1	1.1
704	C ₅₄	0	1.1
18	C ₂₄ H ₁₂	0	1.1
485	C ₉ H ₇ N	0	1.0
2955	C ₃₃	0	1.0
2655	C ₃₀	0	1.0

Tabela 12 – Similiar a Tabela 8 porém para galáxia Seyfert Mrk 883.

UID	Fórmula	Charge	%
76	C ₄₇ H ₁₇	0	7.5
473	C ₁₀ H ₉ N	0	7.4
3205	C ₈₂ H ₂₄ ⁻	-1	6.0
625	C ₄₀ H ₁₆	0	4.9
128	C ₃₆ H ₁₆	0	4.5
171	C ₉₀ H ₃₀	0	4.4
822	C ₃₄ H ₂₀ ⁻	-1	4.4
2542	C ₂₉	0	4.2
636	C ₄₈ H ₁₈ ⁺	1	4.2
719	C ₈₀ H ₂₀	0	3.5
210	C ₁₈ H ₁₂ ⁻	-1	3.0
591	C ₃₂ H ₁₄	0	3.0
2226	C ₂₈ H ₁₄	0	2.9
3151	C ₃₄	0	2.8
108	C ₉₆ H ₂₄	0	2.8
668	C ₅₃ H ₁₈ Si	0	2.7
2598	C ₃₀	0	2.5
620	C ₄₂ H ₁₆	0	2.3
2362	C ₁₈	0	2.0
2436	C ₂₇	0	2.0
2758	C ₃₁	0	1.7
2684	C ₃₁	0	1.6
2782	C ₃₂	0	1.5
18	C ₂₄ H ₁₂	0	1.5
2911	C ₃₂	0	1.5
2638	C ₃₀	0	1.3
2797	C ₃₂	0	1.3
2391	C ₂₄	0	1.2
2791	C ₃₂	0	1.1
726	C ₂₈ H ₁₄	0	1.1

Tabela 13 – Similiar a Tabela 8 porém para galáxia *Starburst* NGC 660.

UID	Fórmula	Charge	%
470	$C_{15}H_9N^+$	1	5.0
3173	$C_{52}H_{18}$	0	4.5
2542	C_{29}	0	4.3
128	$C_{36}H_{16}$	0	4.3
468	$C_{15}H_9N^+$	1	4.2
481	$C_{14}H_{11}N$	0	3.9
167	$C_{112}H_{26}^-$	-1	3.8
157	$C_{42}H_{22}^-$	-1	3.4
2427	C_{26}	0	3.4
473	$C_{10}H_9N$	0	3.2
2955	C_{33}	0	3.1
2391	C_{24}	0	3.0
122	$C_{78}H_{22}^+$	1	2.9
496	$C_9H_8^+$	1	2.9
11	$C_{32}H_{14}^-$	-1	2.8
620	$C_{42}H_{16}$	0	2.7
3151	C_{34}	0	2.7
3205	$C_{82}H_{24}^-$	-1	2.6
100	$C_{48}H_{20}$	0	2.6
822	$C_{34}H_{20}^-$	-1	2.4
2791	C_{32}	0	2.3
2369	C_{21}	0	2.2
636	$C_{48}H_{18}^+$	1	2.2
2482	C_{28}	0	2.1
2758	C_{31}	0	2.0
573	$C_{32}H_{14}Mg^+$	1	1.9
518	$C_{14}H_9^+$	1	1.3
2720	C_{31}	0	1.3
3102	C_{34}	0	1.1
3124	C_{34}	0	1.1

Tabela 14 – Similiar a Tabela 8 porém para galáxia Seyfert NGC 2622.

UID	Fórmula	Charge	%
620	C ₄₂ H ₁₆	0	13.3
635	C ₄₈ H ₁₈	0	6.8
233	C ₂₃ H ₁₂ N ⁺	1	6.8
3173	C ₅₂ H ₁₈	0	6.4
2782	C ₃₂	0	4.7
2386	C ₂₄	0	4.2
176	C ₈₄ H ₂₄ ⁻	-1	3.2
521	C ₁₁ H ₉	0	3.1
470	C ₁₅ H ₉ N ⁺	1	2.8
37	C ₅₄ H ₁₈	0	2.8
2760	C ₃₁	0	2.6
819	C ₃₀ H ₁₈ ⁻	-1	2.6
2504	C ₂₉	0	2.3
116	C ₆₆ H ₂₀ ⁻	-1	2.3
2534	C ₂₉	0	2.2
3226	C ₃₁ H ₁₅	0	2.2
2463	C ₂₈	0	2.1
691	C ₉₆ H ₂₆	0	2.0
817	C ₃₀ H ₁₈	0	1.9
2427	C ₂₆	0	1.7
3101	C ₃₄	0	1.6
3161	C ₃₄ H ₁₆	0	1.5
2832	C ₃₂	0	1.4
2746	C ₃₁	0	1.3
18	C ₂₄ H ₁₂	0	1.2
269	C ₁₂ H ₈ N ₂ ⁻	-1	1.2
2503	C ₂₈	0	1.1
2638	C ₃₀	0	1.1
2494	C ₂₈	0	1.1
2783	C ₃₂	0	1.1

Tabela 15 – Similiar a Tabela 8 porém para galáxia *Starburst* NGC 2623.

UID	Fórmula	Charge	%
2955	C ₃₃	0	5.7
3173	C ₅₂ H ₁₈	0	5.4
473	C ₁₀ H ₉ N	0	4.9
468	C ₁₅ H ₉ N ⁺	1	4.6
2791	C ₃₂	0	4.5
2427	C ₂₆	0	4.3
2542	C ₂₉	0	4.2
3205	C ₈₂ H ₂₄ ⁻	-1	4.1
480	C ₁₄ H ₁₁ N ⁺	1	4.0
2758	C ₃₁	0	3.9
636	C ₄₈ H ₁₈ ⁺	1	3.4
2233	C ₂₈ H ₁₄	0	3.3
496	C ₉ H ₈ ⁺	1	3.0
627	C ₄₀ H ₁₆ ⁻	-1	2.8
167	C ₁₁₂ H ₂₆ ⁻	-1	2.7
822	C ₃₄ H ₂₀ ⁻	-1	2.6
3180	C ₅₆ H ₂₀ ⁺	1	2.6
479	C ₁₄ H ₁₁ N	0	2.5
481	C ₁₄ H ₁₁ N	0	2.5
836	C ₅₄ H ₁₈	0	2.4
2876	C ₃₂	0	2.3
3154	C ₃₄	0	2.0
816	C ₂₆ H ₁₆ ⁻	-1	1.9
268	C ₁₂ H ₈ N ₂ ⁺	1	1.5
269	C ₁₂ H ₈ N ₂ ⁻	-1	1.4
484	C ₉ H ₇ N ⁺	1	1.3
128	C ₃₆ H ₁₆	0	1.3
518	C ₁₄ H ₉ ⁺	1	1.2

Tabela 16 – Similiar a Tabela 8 porém para galáxia *Seyfert* NGC 4922.

UID	Fórmula	Charge	%
3205	$C_{82}H_{24}^-$	-1	8.1
3173	$C_{52}H_{18}$	0	6.9
836	$C_{54}H_{18}$	0	5.8
636	$C_{48}H_{18}^+$	1	4.2
473	$C_{10}H_9N$	0	4.1
2598	C_{30}	0	4.0
128	$C_{36}H_{16}$	0	3.6
3151	C_{34}	0	3.5
626	$C_{40}H_{16}^+$	1	3.5
2791	C_{32}	0	3.3
822	$C_{34}H_{20}^-$	-1	3.3
157	$C_{42}H_{22}^-$	-1	2.9
2436	C_{27}	0	2.9
2758	C_{31}	0	2.8
468	$C_{15}H_9N^+$	1	2.7
2391	C_{24}	0	2.7
503	$C_{11}H_8O$	0	2.2
2876	C_{32}	0	2.2
243	$C_{31}H_{14}N^+$	1	2.1
480	$C_{14}H_{11}N^+$	1	2.1
481	$C_{14}H_{11}N$	0	1.8
100	$C_{48}H_{20}$	0	1.7
3180	$C_{56}H_{20}^+$	1	1.7
3060	C_{33}	0	1.6
3124	C_{34}	0	1.5
233	$C_{23}H_{12}N^+$	1	1.4
2542	C_{29}	0	1.1
379	$C_{24}H_{16}$	0	1.1
2660	C_{30}	0	1.1
11	$C_{32}H_{14}^-$	-1	1.1
210	$C_{18}H_{12}^-$	-1	1.1

Tabela 17 – Similiar a Tabela 8 porém para galáxia *Seyfert* NGC 5256.

UID	Fórmula	Charge	%
473	C ₁₀ H ₉ N	0	6.0
822	C ₃₄ H ₂₀ ⁻	-1	4.9
636	C ₄₈ H ₁₈ ⁺	1	4.9
3205	C ₈₂ H ₂₄ ⁻	-1	4.8
3173	C ₅₂ H ₁₈	0	4.4
468	C ₁₅ H ₉ N ⁺	1	4.2
128	C ₃₆ H ₁₆	0	3.7
243	C ₃₁ H ₁₄ N ⁺	1	3.5
2391	C ₂₄	0	3.4
2955	C ₃₃	0	3.4
627	C ₄₀ H ₁₆ ⁻	-1	3.2
2427	C ₂₆	0	2.9
2937	C ₃₃	0	2.9
167	C ₁₁₂ H ₂₆ ⁻	-1	2.8
2758	C ₃₁	0	2.6
76	C ₄₇ H ₁₇	0	2.6
496	C ₉ H ₈ ⁺	1	2.5
470	C ₁₅ H ₉ N ⁺	1	2.4
2279	C ₂₆ H ₁₆	0	2.4
2542	C ₂₉	0	2.4
2660	C ₃₀	0	2.1
823	C ₅₄ H ₂₀	0	2.1
591	C ₃₂ H ₁₄	0	2.0
2857	C ₃₂	0	1.9
2876	C ₃₂	0	1.8
3022	C ₃₃	0	1.5
2553	C ₂₉	0	1.2
2499	C ₂₈	0	1.2
3159	C ₂₈ H ₁₄ ⁻	-1	1.1
620	C ₄₂ H ₁₆	0	1.1
3188	C ₆₄ H ₂₀	0	1.1
268	C ₁₂ H ₈ N ₂ ⁺	1	1.0

Tabela 18 – Similiar a Tabela 8 porém para galáxia Seyfert NGC 5347.

UID	Fórmula	Charge	%
3173	C ₅₂ H ₁₈	0	6.3
480	C ₁₄ H ₁₁ N ⁺	1	6.0
2758	C ₃₁	0	5.8
473	C ₁₀ H ₉ N	0	5.4
2955	C ₃₃	0	4.3
2436	C ₂₇	0	2.8
3205	C ₈₂ H ₂₄ ⁻	-1	2.7
2598	C ₃₀	0	2.4
2733	C ₃₁	0	2.4
625	C ₄₀ H ₁₆	0	2.3
2665	C ₃₁	0	2.2
2711	C ₃₁	0	2.1
2368	C ₂₁	0	2.1
2146	C ₂₉ H ₁₅	0	2.0
479	C ₁₄ H ₁₁ N	0	2.0
720	C ₆₀ ⁺	1	1.9
210	C ₁₈ H ₁₂ ⁻	-1	1.9
2450	C ₂₇	0	1.9
3232	C ₃₇ H ₁₅	0	1.7
2903	C ₃₂	0	1.7
178	C ₁₀₂ H ₂₆ ⁺	1	1.6
2876	C ₃₂	0	1.6
2358	C ₁₃	0	1.4
3271	C ₈₇ H ₂₅	0	1.4
2615	C ₃₀	0	1.3
26	C ₂₄ H ₁₂ Mg ⁺	1	1.3
18	C ₂₄ H ₁₂	0	1.3
636	C ₄₈ H ₁₈ ⁺	1	1.3
3108	C ₃₄	0	1.3
2797	C ₃₂	0	1.2
3060	C ₃₃	0	1.2
2984	C ₃₃	0	1.1
3122	C ₃₄	0	1.1
816	C ₂₆ H ₁₆ ⁻	-1	1.1
470	C ₁₅ H ₉ N ⁺	1	1.1
362	C ₁₆ H ₁₆ ⁺	1	1.0
2494	C ₂₈	0	1.0
724	C ₄₅ H ₁₅ ⁻	-1	<1

APÊNDICE C – Artigo publicado

Polycyclic aromatic hydrocarbons and the ionized gas in galaxies with active nuclei

A. Silva-Ribeiro,^{1*} A. C. Krabbe,¹ C. M. Canelo,² A. F. Monteiro,¹ Dinalva A. Sales³
J. A. Hernandez-Jimenez¹ and Andrade, D. P. P.⁴

¹Universidade do Vale do Paraíba, Av. Shishima Hifumi, 2911, Cep 12244-000, São José dos Campos, SP, Brazil

²Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas, Departamento de Astronomia, Universidade de São Paulo, 05508-090, Brazil.

³Instituto de Matemática, Estatística e Física, Universidade Federal do Rio Grande, 96203-900, RS, Brazil.

⁴Observatório do Valongo, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 20080-090, Brazil.

Accepted XXX. Received YYY; in original form ZZZ

ABSTRACT

We present a study for a sample of galaxies with active nuclei to characterize the main type of PAH molecules present in these objects and the local physical conditions of their irradiating sources, as well as the characteristics of the residing ionized gas, by combining optical and infrared data. Photoionization models were built with the CLOUDY code to reproduce optical emission line ratios in combination with PAH intensity ratios. We find that the species containing 10 – 82 carbon atoms are the most abundant in the sample. We suggest that family of species with only two or three fused rings of and a nitrogen hanging, such as small aromatic amides are important targets worthy of consideration in future experimental/theoretical as well as observational studies. We find that the AGN photoionization models reproduce most of the observational data in the $\log(6.2/11.3)$ versus $\log([\text{N II}]\lambda 6584/\text{H}\alpha)$ diagram with the optical to X-ray spectral index of $\alpha_{\text{ox}} = -1.4$. The flux of small PAH, as well as the flux of ionized PAHs and PANH, decrease as the logarithm of the ionization parameter ($\log U$) increases. The 6.2/11.3 PAH intensity ratio presents anti correlation between the oxygen abundance and $\log U$, in the sense that the 6.2/11.3 ratio decreases as the oxygen abundance and $\log U$ increases. Finally, we found that the ionization degree of PAH species increases with the decreasing of the 11.3/7.7 ratio and the $\log U$, in agreement with the models proposed by Draine & Li .

Key words: galaxies: active nuclei - ISM: molecules - methods: data analysis - astrochemistry

1 INTRODUCTION

Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) are organic compounds that contain two or more fused benzene rings and can also form large aromatic structures. Although the term PAHs refers to molecules containing only carbon and hydrogen atoms, the more general term "polycyclic aromatic compounds" also includes the functional derivatives, just like nitro-PAHs, Oxy-PAHs, and the heterocyclic analogues. Studies show that PAHs represent one of the most abundant forms of carbon in the Universe, with approximately 15 per cent of the elemental carbon of the Universe is in the form of PAHs (Candian et al. 2018). Besides, PAHs have an important role in heating the Interstellar Medium (ISM) since they have low ionization potential (Tielens 2008). This class of molecules is often observed in a wide range of astrophysical environments, including extragalactic sources such as Seyferts and Starbursts galaxies (Brandl et al. 2006; Smith et al. 2007; Sales et al. 2010, 2013). They present stronger

emission bands at 3.3, 6.2, 7.7, 8.6, 11.2, and 12.7 μm wavelength (e.g. Li 2020).

There is an astrobiological interest in PAHs due to their potential role in the formation of protocells, which may help to evaluate possible pathways for the origins of life on the early Earth. Like PAHs, Nitrogen-containing polycyclic aromatic hydrocarbons, known as PANHs, can fragment and form prebiotic molecules, such as ethanol and amino acids (Ehrenfreund et al. 2006). In addition, such species can self-assemble, originating from the formation of protocells (Schrum et al. 2010).

Canelo et al. (2018) analyzed the 6.2 μm PAH emission band for 155 predominantly starburst-dominated galaxies and distributed it into the Peeters' A, B and C classes (Peeters et al. 2002), revealing a predominance of 67 per cent of class A sources with band profiles corresponding to a central wavelength near 6.22 μm , which can only be explained by PANHs (Hudgins et al. 2005). In this way, the PANHs, in addition to nitrogen in the gas phase and ices of the ISM, could be another reservoir of nitrogen in the Universe.

Studies have shown that the physical conditions of the object under study at radiation and metallicity levels, for example, affect

* E-mail: adrianaufma@yahoo.com.br (KTS)

both approaches. [Hanine et al. \(2020\)](#) found that the size of the formed PAH species increases roughly with increasing temperature up to 800 K, forming rings up to 32 carbon atoms and being correlated with the level of dehydrogenation, which can make these molecules highly reactive ([Chen 2018](#)), characteristic that can intensify the formation of large PAHs. [Seok et al. \(2014\)](#), for example, concluded that the PAH abundance is low at low metallicities ($Z < 0.1 Z_{\odot}$), but increases rapidly beyond a certain metallicity ($Z > 0.3 Z_{\odot}$) by chemical evolution model in galaxies. On other hand, [Maragkoudakis et al. \(2018\)](#) found that variations on the 17 μm PAH band depend on the object type, however, there is no dependence on metallicity for both extragalactic H II regions and galaxies.

PAHs are also important molecules from the galactic diagnosis perspective because their emissions can be used as a calibrator for star formation in galaxies (e.g. [Shipley et al. \(2016\)](#); [Maragkoudakis et al. \(2018\)](#)). Such peculiarity has been a motivating factor for studying the presence of PAHs in active galaxy nuclei (AGNs). Seyfert galaxies are a type of AGNs whose notoriety show presence of PAH emission lines. The ionization of PAH molecules, as well as ionized gas surrounding central engine of the Seyfert galaxies, is dominated by the hardness radiation coming from accreting disk of the supermassive black hole environment. Interestingly, [Madden et al. \(2006\)](#) and [Maragkoudakis et al. \(2018\)](#) have found that the total PAH/Very Small Grains (VSG) intensity ratio decreases with increasing radiation hardness, as traced by $[\text{Ne III}]/[\text{Ne II}]$, indicating that harder radiation fields are largely responsible for the destruction of PAHs in low-metallicity regions. In addition, [Sales et al. \(2010, 2013\)](#) have studied 186 active and star-forming galaxies and could infer that active galaxies seems to present larger PAH molecules (≥ 180 carbon atoms) than starforming galaxies. They propose that PAH molecules can survive near to AGNs since their dusty tori is likely to provide column densities necessary to shield PAHs from the hard radiation field (see also [Alonso-Herrero et al. 2014](#); [Ruschel-Dutra et al. 2014](#)).

The nuclear region of the Seyfert and Starburst are excellent objects for studying the signatures of PAHs in order to map the main species of PAHs that are contributing to the emissions in the IR of Seyfert and Starburst galaxies. In additionally, the presence of metallic emission lines, such as $[\text{O II}] \lambda 3727$, $[\text{O III}] \lambda 4363$, $[\text{O III}] \lambda 4959$, $[\text{O III}] \lambda 5007$, $[\text{N II}] \lambda 5755$, $[\text{N II}] \lambda 6548$, $[\text{N II}] \lambda 6584$, $[\text{S II}] \lambda 6717$ and $[\text{S II}] \lambda 6731$, which are present in Seyfert and Starburst galaxies make it possible to estimate the physical conditions (oxygen abundance, density and electronic temperature) of the ionized gas regions. Besides, the ratio of emission lines in combination with photoionization models can be used to determine the hardness of ionizing source and the metallicity of the gas. In this context, it is the possible to verify correlations between the ionized gas regions and the photodissociation regions where PAHs persist.

Concerning the emission features at IR and optical wavelengths, studies have shown (e.g. [Schkenner \(2015\)](#)) that large carbon-based molecules (with $\sim 10 - 100$ atoms) in the gas phase, such as PAHs, long carbon chains or fullerenes should be possible carriers of Diffuse Interstellar Bands (DIBs) and the Unidentified Infrared (UIR) bands. However, the identification of the carriers of DIBs remains to be examined, with the exception of five bands attributed to C_{60}^+ [Tielens \(2013\)](#); [Campbell et al. \(2015\)](#). In this sense, the analysis of potential emitting molecules of the PAH population in astrophysical sources in comparison with optical data observed, for instance, can contribute to improving our understanding of those carries and the PAH chemistry in the Universe.

In this paper, we combined optical and infrared data of a sample

of Seyfert (Sy) and Starburst (SB) galaxies to characterize the main type of PAH molecules present in these objects and the local physical conditions of their irradiating sources, as well as the characteristics of the residing ionised gas. The paper is organized as follows. In Section 2 we describe the selection of our sample and the data utilized. In the Section 4 and 3 the data analysis is presented. The results and discussions are given in Section 5. The conclusion of the outcome is presented in Section 6.

2 OBSERVATIONAL DATA AND SAMPLE DESCRIPTION

We compiled from the literature a sample of Seyfert and Starburst galaxies with observed and reduced spectra in the infrared and optical. We selected all Starburst and Seyfert galaxies with redshift lower than 0.04 from the Spitzer/IRS ATLAS project¹ ([Hernández-Caballero & Hatziminaoglou 2011](#)) and with low-resolution ($R \sim 100$) spectra in the range from 5 to 15 μm , obtained with the Infrared Spectrograph (IRS, [Houck et al. 2004](#)) instrument on board the Spitzer Space Telescope ([Werner et al. 2004](#)). From this preliminary sample, we chose only objects with optical spectra in the Sloan Digital Sky Survey (SDSS) DR16 ([Ahumada et al. 2020](#)). Also, all the selected spectra approximately correspond to nuclear region of the galaxies. All the infrared spectra were obtained in staring-mode, except for [Buchanan et al. \(2006\)](#) and [Wu et al. \(2009\)](#), who utilized the spectral mapping mode, but only the nuclear spectrum was given. We used short-low spectroscopy module covering interval between 5.2 μm and 14.5 μm with a resolving power of $R \sim 60-127$ and slit size of 3.6 to 3.7 arcseconds per 57 arcseconds.

Table 1 lists the objects selected for this study, including some basic features. The ionizing source of each galaxy was initially taken from the literature. Diagnostic diagrams initially proposed by [Baldwin et al. \(1981\)](#) (e.g., $[\text{O III}]/\text{H}\beta$ versus $[\text{N II}]/\text{H}\alpha$, $[\text{O III}]/\text{H}\beta$ versus $[\text{S II}]/\text{H}\alpha$, and $[\text{O III}]/\text{H}\beta$ versus $[\text{O I}]/\text{H}\alpha$), which are commonly known as BPT diagrams are used to distinguish objects ionized by massive stars (SFs), AGN, and Low-ionization nuclear emission-line regions (LINERs). In order to verify the classification of the ionizing source of our sample, we show in Fig. 1 the diagram $[\text{O III}]/\text{H}\beta$ versus $[\text{N II}]/\text{H}\alpha$. The black solid curve represents the theoretical upper limit for the star-forming regions proposed by [Kewley et al. \(2001\)](#) and the black dashed curve is the empirical star-forming limit proposed by [Kauffmann et al. \(2003\)](#), hereafter Ke01 and Ka03, respectively. The blue dot-dashed curve represents the Seyfert-LINER dividing line (Ke01). According to Fig. 1, some galaxies presented a different classification from the literature. However, the nuclear region of the galaxies of our sample is ionized by AGN, including the galaxies that are between Ke01 and Ka03 lines, region denominated as composite region, where the object is ionized by SF and AGN. Then, throughout the text, we will refer to our sample of galaxies as AGNs.

The optical data compiled from SDSS were obtained with BOSS Spectrograph attached to 2.5 m telescope at Apache Point Observatory. The spectra range considered is between 3 600 and 10 400 \AA , spectral resolution of $R = 1 560$ at 3 700 \AA , $R = 2 270$ at 6 000 \AA and the fiber diameter is 3 arcsec.

Fig. 2 shows an optical spectrum of the nuclear region of the Starburst galaxy NGC 4676, where some emission lines are highlighted, and an infrared spectrum for the same galaxy with

¹ <http://www.denebola.org/atlas/>

Table 1. Selected objects and their respective information, including the source’s name, IR reference, nuclear type, equatorial coordinates (α and δ), absolute magnitude in visual band (M_B), bolometric luminosity in visual band (L_V) and infrared luminosity L_{IR} .

Object	IR Reference	Nuclear Type	α (2000) ^a	δ (2000) ^a	z^a	M_B (mag) ^a	L_V (L_\odot) ^a	L_{IR} (L_\odot) ^a
Mrk 273	Wu et al. (2009)	Seyfert [1]	13 ^h 44 ^m 42 ^s .1	55 ^h 53 ^m 13 ^s .0	0.038	-22.34	8.37×10 ¹⁰	7.94×10 ¹⁰
MrK 471	Deo et al. (2007)	Seyfert [1]	14 ^h 22 ^m 55 ^s .4	32 ^h 51 ^m 03 ^s .0	0.034	-22.80	4.58×10 ¹⁰	4.21×10 ¹⁰
Mrk 609	Deo et al. (2007)	Seyfert [1]	03 ^h 25 ^m 25 ^s .3	-06 ^h 08 ^m 38 ^s .0	0.034	-22.48	6.58×10 ¹⁰	4.85×10 ¹⁰
Mrk 622	Deo et al. (2007)	Seyfert [1]	08 ^h 07 ^m 41 ^s .0	39 ^h 00 ^m 15 ^s .0	0.029	-21.44	3.18×10 ¹⁰	1.85×10 ¹⁰
Mrk 883	Deo et al. (2007)	Seyfert [1]	16 ^h 29 ^m 52 ^s .9	24 ^h 26 ^m 38 ^s .0	0.038	-22.19	2.70×10 ¹⁰	3.95×10 ¹⁰
NGC 660	Brandl et al. (2006)	LINER [1]	01 ^h 43 ^m 02 ^s .4	13 ^h 38 ^m 44 ^s .4	0.003	-21.50	1.32×10 ¹⁰	2.02×10 ¹⁰
NGC 2622	Deo et al. (2007)	Seyfert [5]	08 ^h 38 ^m 10 ^s .9	24 ^h 53 ^m 43 ^s .0	0.023	-22.80	4.75×10 ¹⁰	6.35×10 ¹⁰
NGC 2623	Brandl et al. (2006)	Starburst [2]	08 ^h 38 ^m 24 ^s .1	25 ^h 45 ^m 16 ^s .9	0.018	-21.80	3.35×10 ¹⁰	1.74×10 ¹¹
NGC 4676	Brandl et al. (2006)	Starburst [3]	12 ^h 46 ^m 10 ^s .1	30 ^h 43 ^m 55 ^s .0	0.009	-20.97	2.20×10 ¹⁰	5.15×10 ¹⁰
NGC 4922	Wu et al. (2009)	Seyfert [4]	13 ^h 01 ^m 24 ^s .9	29 ^h 18 ^m 40 ^s .0	0.024	-22.20	2.75×10 ¹⁰	...
NGC 5256	Wu et al. (2009)	Seyfert [4]	13 ^h 38 ^m 17 ^s .5	48 ^h 16 ^m 37 ^s .0	0.028	-22.85	5.23×10 ¹⁰	1.06×10 ¹¹
NGC 5347	Buchanan et al. (2006)	Seyfert [1]	13 ^h 53 ^m 17 ^s .8	33 ^h 29 ^m 27 ^s .0	0.008	-20.33	4.65×10 ⁹	3.43×10 ⁹

References: [1] Véron-Cetty & Véron (2003); [2] Keel (1984); [3] Liu & Kennicutt (1995) [4] Rush et al. (1993); [5] Deo et al. (2007).

Note: ^a Taken from the NASA Extragalactic Database (NED).

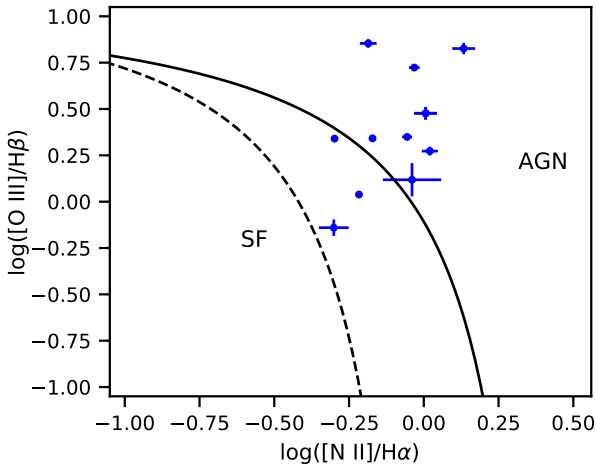


Figure 1. $[O\text{III}]/H\alpha$ versus $[N\text{II}]/H\alpha$ diagnostic diagram for galaxies of our sample. The black solid curve represents the theoretical upper limit for the star-forming regions proposed by Kewley et al. (2001), and the black dashed curve is the empirical star-forming limit proposed by Kauffmann et al. (2003). The region between the Ke01 and Ka03 lines is denominated composite region.

the main bands of PAHs indicated. All the compiled spectra were reduced and calibrated in flux and wavelength.

3 OPTICAL DATA ANALYSIS

The optical spectra from SDSS within the wavelength range of 3600-10400 Å were used to estimate some physical properties of the ionized gas through the use of emission line intensity ratios in combination with photoionization models. The spectrum of each galaxy was processed following the steps listed below:

- (i) The spectra were corrected to their rest-frame, adopting the values of z listed in Table 1.
- (ii) The pure nebular spectra were obtained after the subtraction

of stellar population contribution of the observed spectrum. To obtain the stellar population contribution we use the stellar population synthesis code *STARLIGHT* developed by Cid Fernandes et al. (2005); Mateus et al. (2006); Asari et al. (2007). The code fits an observed spectrum with a combination of simple stellar population (SSP) models excluding the emission lines and spurious features (bad pixels or sky residuals). We use the spectral basis of Bruzual & Charlot (2003) with 45 synthetic SSPs spectra with three metallicities, $Z = [0.2, 1, \text{and } 2.5] Z_\odot$, and 15 ages, $t = [0.01, 0.003, 0.005, 0.01, 0.025, 0.04, 0.1, 0.3, 0.6, 0.9, 1.4, 2.5, 5, 11, \text{and } 13] \times 10^9$ years. The synthetic SSP spectra have a spectral resolution of 3 Å and to obtain the same spectral resolution of observed spectra these were blended with an elliptical Gaussian function. For more details about the synthesis method see Cid Fernandes et al. (2005), Mateus et al. (2006), and Asari et al. (2007). The flux of the lines in the pure nebular spectra was measuring by using in-house fitting code, which fitting gaussian functions to the line profiles (Hernandez-Jimenez et al. 2013, 2015).

(iii) The residual extinction associated with the gaseous component for each galaxy was calculated by comparing the observational value for $H\alpha/H\beta$ ratio to the theoretical value of 2.86 obtained by Hummer & Storey (1987) for the Case B at electron temperature and density of 10000 K and 100 cm⁻³, respectively. For this, the following expression was considered

$$\frac{I(\lambda)}{I(H\beta)} = \frac{F(\lambda)}{F(H\beta)} \times 10^{c(H\beta)[f(\lambda)-f(H\beta)]} \quad (1)$$

where $I(\lambda)$ is the intensity (reddening corrected) of the emission line at a given wavelength λ , $F(\lambda)$ is the observed flux of the emission line, $f(\lambda)$ is the adopted reddening curve normalized to $H\beta$, and $c(H\beta)$ is the interstellar extinction coefficient.

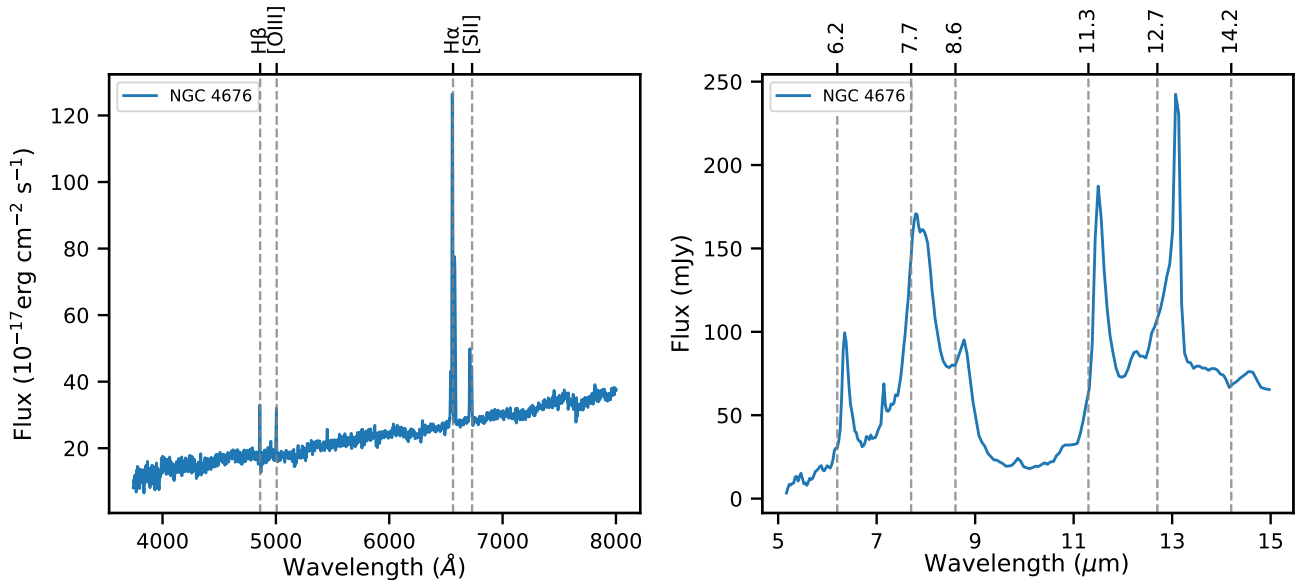
Table 2 lists the reddening function $f(\lambda)$, the reddening corrected emission line intensities $I(\lambda)$, and the logarithmic extinction coefficient $c(H\beta)$ for each object.

3.1 Oxygen abundance and ionization parameter

This section briefly discusses the methods used to estimate the oxygen abundance and the ionization parameter of the ionized gas in the galaxies.

Table 2. Reddening corrected emission-line intensities and the logarithmic extinction coefficient, $c(\text{H}\beta)$. The flux for $\text{H}\beta$ and $\text{H}\alpha$ are 100 and 286, respectively.

Object	[O III] λ 4959	[O III] λ 5007	[N II] λ 6548	[N II] λ 6584	[S II] λ 6716	[S II] λ 6731	$c(\text{H}\beta)$
$f(\lambda)$	-0.02	-0.04	-0.35	-0.39	-0.39	-0.43	
Mrk 273	77 \pm 2	224 \pm 5	87 \pm 2	252 \pm 7	79 \pm 2	65 \pm 2	1.29 \pm 0.02
Mrk 471	226 \pm 10	670 \pm 28	131 \pm 9	389 \pm 24	96 \pm 8	84 \pm 7	0.69 \pm 0.05
Mrk 609	178 \pm 4	529 \pm 11	90 \pm 3	266 \pm 8	49 \pm 2	52 \pm 3	0.67 \pm 0.03
Mrk 622	101 \pm 9	300 \pm 15	98 \pm 6	290 \pm 18	65 \pm 4	56 \pm 4	0.67 \pm 0.05
Mrk 883	73 \pm 1	219 \pm 1	48 \pm 1	144 \pm 2	74 \pm 1	58 \pm 1	0.39 \pm 0.01
NGC 660	66 \pm 4	187 \pm 6	105 \pm 5	300 \pm 13	75 \pm 3	58 \pm 3	1.55 \pm 0.04
NGC 2622	310 \pm 8	947 \pm 23	186 \pm 9	569 \pm 23	175 \pm 10	184 \pm 11	0.04 \pm 0.04
NGC 2623	46 \pm 6	131 \pm 18	91 \pm 14	261 \pm 41	75 \pm 12	58 \pm 9	1.30 \pm 0.14
NGC 4676	25 \pm 3	72 \pm 5	50 \pm 4	143 \pm 12	63 \pm 5	44 \pm 4	1.29 \pm 0.07
NGC 4922	75 \pm 1	220 \pm 2	66 \pm 1	193 \pm 3	50 \pm 1	48 \pm 1	1.00 \pm 0.01
NGC 5256	37 \pm 1	109 \pm 1	58 \pm 1	174 \pm 1	63 \pm 1	58 \pm 1	0.53 \pm 0.01
NGC 5347	239 \pm 8	714 \pm 23	62 \pm 3	186 \pm 9	75 \pm 4	66 \pm 4	0.55 \pm 0.04

**Figure 2.** Left panel: the observed optical spectrum for the nuclear region of NGC 4676 obtained with SDSS. Right panel: the observed infrared spectrum for the nuclear region of NGC 4676 obtained with IRS of Spitzer.

Oxygen is the element widely used as a proxy for global gas-phase metallicity Z (Kennicutt et al. 2003); (Hägele et al. 2008) of gaseous nebulae. This element has prominent emission lines, and their most important ionization stages are present in the optical spectra of these objects. One of the most reliable methods to determine the oxygen abundance is based on the ratio between oxygen forbidden lines and hydrogen lines, and the electron temperature (T_e), specially for star-forming regions and planetary nebulae. Measurements of the auroral lines, such as [O III] λ 4363, and [N II] λ 5755, are necessary to determine T_e . Unfortunately, they are very faint and often drop below the detectability level in the spectra of high-metallicity H II regions. This method is known as the T_e -method or direct method. Unfortunately, we do not detect temperature-sensitive emission lines [O III] λ 4363, and [N II] λ 5755 in the spectra of the galaxies, and then the direct method could not be used to determine the O/H abundance.

Here, we determine the O/H abundance combining the observed emission line ratios with a grid of photoionization models. The photoionization model grids were built using version 17.02

of the CLOUDY code (Ferland et al. 2017) in order to compare the observational emission-line intensity ratios for the galaxies in our sample with the photoionization model predictions for similar emission-line intensity ratios. The input parameters of the models are briefly described in the following, however, for more details to these parameters see Dors et al. (2015, 2017, 2020) and (Carvalho et al. 2020).

(i) The Spectral Energy Distribution (SED): The SED utilized was typical of AGNs, consisting of the sum from the Big Bump component peaking at ≈ 1 Ryd, which is parametrized by the temperature of the bump assumed to be 1.5×10^5 K and, an X-ray power law with spectral index $\alpha_x = -1.0$, representing the non-thermal X-ray radiation. The continuum between 2 keV and 2500 Å is described by a power law with the optical to X-ray spectral index α_{ox} , which is defined by

$$\alpha_{ox} = \frac{\log[F(2 \text{ keV})/F(2500 \text{ \AA})]}{\log[\nu(2 \text{ keV})/\nu(2500 \text{ \AA})]}, \quad (2)$$

where F is the flux at 2 keV, 2500 Å and ν are the corresponding frequencies (Tananbaum et al. 1979). Therefore, the α_{ox} is the power-law slope connecting the monochromatic flux at 2500 Å and at 2 keV and display hard X-ray spectra. For instance, SEDs with small values of α_{ox} , e.g. -2, represent an ionization source with a very soft spectrum yielding models with a very low ionization degree (e.g. ?).

(ii) Metallicity (Z): The metallicities used in relation with the solar value (Z/Z_{\odot}) was 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0, 3.5 and 4.0. The assumed solar oxygen abundance is $12 + \log(\text{O}/\text{H})_{\odot} = 8.69$ (Asplund et al. 2009; Allende Prieto et al. 2001) whose abundances 8.40, 8.69, 8.86, 8.99, 9.08, 9.16, 9.23, and 9.29, correspond to the above listed metallicities, respectively.

(iii) Ionization Parameter (U): The ionization parameter is defined by $U=Q(\text{H})/4\pi R_0^2 n c$, where the $Q(\text{H})$ is the number of ionizing photons emitted per second by the ionizing source, R_0 is the distance from the ionization source to the inner surface of the ionized gas cloud in cm, n [cm^{-3}] is the total hydrogen density (ionized, neutral, and molecular), and c is the speed of light in km s^{-1} . We considered the logarithm of U in the range of $-4.0 \leq \log U \leq -1$, about the same values considered by Feltre et al. (2016) for AGNs.

(iv) Electron Density: We assumed for the models an electron density value of $N_e = 500 \text{ cm}^{-3}$, constant in the nebular radius. The electron density (N_e) derived from the $[\text{S II}]\lambda 6717/\lambda 6731$ for our sample of galaxies is in the range of 111 to 922 cm^{-3} , with a mean density of $N_e = 411 \text{ cm}^{-3}$.

(v) Inner and outer radius: The inner radius of 3 pc was assumed, which is the distance from the ionizing source to the illuminated gas region. It is a typical value for Seyfert galaxies (Balmaverde et al. 2016). The outer radius was assumed to be the one where the electron temperature of the gas reaches 150 K. It is worth to mentioning that studies has found evidences that the inner wall of the dust torus has around several tenths of a parsec from the central engine (e.g. (Xie et al. 2017)). However, models with different combinations of $Q(\text{H})$, inner radius and N_e but that result in the same U are homologous models with about the same predicted emission-line intensities (Bresolin et al. 1999) and (?).

(vi) PAH: The size distribution for PAHs is given by a power law of the form $a^{-3.5}$, where a is the PAH radius and the number of carbon atoms range from 30 to 500, and 10 size bins (Abel et al. 2008).

In order to extend this analysis to other sources with a wider range of metallicities, we included data taken from the sample of the Spitzer Infrared Nearby Galaxies Survey (SINGs) by Smith et al. (2007), in which the 6.2/11.3 and 6.2/7.7 emission ratios were considered. The $\log([\text{N II}]\lambda 6584/\text{H}\alpha)$ values of this sample were taken from Moustakas et al. (2010). This sample is composed of Seyfert, LINERS and, star forming galaxies.

In Fig. 3, a diagram $\log(6.2/11.3)$ versus $\log([\text{N II}]\lambda 6584/\text{H}\alpha)$, the observational data and the photoionization model results obtained with the CLOUDY code, assuming $\alpha_{\text{ox}} = -1.4$, are shown. It is worth to mention that $[\text{N II}]\lambda 6584/\text{H}\alpha$ line ratio is highly sensitive to the metallicity, as measured by the oxygen abundance (O/H) and has a small (although not negligible) ionization parameter dependence (e.g. Kewley et al. 2019; Carvalho et al. 2020). An opposite behaviour is derived for the $\log(6.2/11.3)$, which shows a stronger dependence with the ionization degree of the gas (represented by U) mainly for the highest values of U rather than with the metallicity. We built grid of models with $\alpha_{\text{ox}} = -1.1$ and -1.4 and verify that the photoionization model results reproduce the majority of the observed line ratios assuming from the optical to X-ray spectral

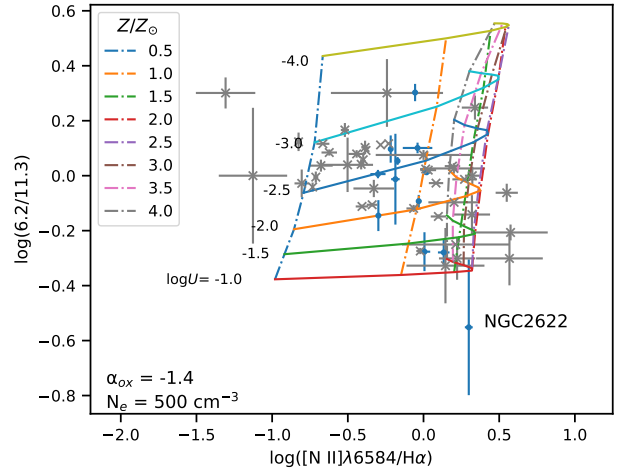


Figure 3. $\log(6.2/11.3)$ versus $\log([\text{N II}]\lambda 6584/\text{H}\alpha)$ diagram. Dashed lines connect photoionization model results with the same metallicity, while solid lines connect models with the same logarithm of the ionization parameter U , as indicated. The blue points represent the observational line intensity ratios from the sample considered in this work, and the gray points represent data from Smith et al. (2007). The assumed values of the metallicity (Z/Z_{\odot}) and $\log U$ values are indicated.

Table 3. The oxygen abundance and the ionizing parameter U .

Object	$12 + \log(\text{O}/\text{H})_{\odot}$	$\log(U)$
Mrk 273	8.64 ± 0.01	-3.42 ± 0.11
Mrk 471	8.83 ± 0.03	-1.28 ± 0.23
Mrk 609	8.69 ± 0.02	-2.08 ± 0.08
Mrk 622	8.76 ± 0.04	-1.33 ± 0.33
Mrk 883	8.62 ± 0.02	-2.00 ± 0.33
NGC 660	8.70 ± 0.01	-2.37 ± 0.05
NGC 2622
NGC 2623	8.67 ± 0.05	-2.62 ± 0.10
NGC 4676	8.60 ± 0.02	-2.49 ± 0.09
NGC 4922	8.63 ± 0.00	-2.55 ± 0.05
NGC 5256	8.61 ± 0.01	-2.69 ± 0.15
NGC 5347	8.64 ± 0.03	-2.35 ± 0.61

index $\alpha_{\text{ox}} = -1.4$ (see Fig. 3), while for $\alpha_{\text{ox}} = -1.1$ (not shown here), there are more points that are not reproduced by the photoionization models. Therefore, we adopted $\alpha_{\text{ox}} = -1.4$. This value is representative of typical AGNs, as described in the Hazy manual of the CLOUDY code², and pointed out by Miller et al. (2011); Zhu et al. (2019) and Dors et al. (2019). To calibrate the metallicity as a function of the $\log(6.2/11.3)$, we calculated the logarithm of the ionization parameter and the metallicity values for each object of our sample by linear interpolations between the models shown in Fig. 3. Table 3 lists the oxygen abundance and the ionization parameter U derived by linear interpolation between the models.

² http://web.physics.ucsb.edu/~phys233/w2014/hazy1_c13.pdf

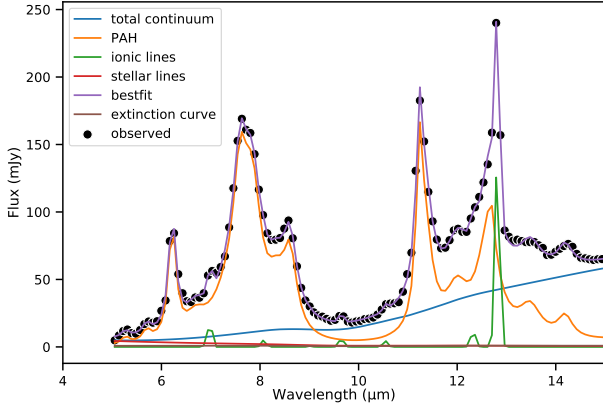


Figure 4. Detailed decomposition of NGC 4676 from 5 to 15 μm obtained with the PAHFIT code in components of the total continuum, ionic lines, stellar stars, best-fit model, and PAH features.

4 INFRARED DATA ANALYSIS

4.1 PAHFIT

The mid-IR spectrum of any object is composed of a diversity of components, such as dust and stellar continuum, emission features from PAHs, forbidden spectral lines from Ne, Ar, S, and Fe, and rotational lines from molecular hydrogen. In low-resolution spectra, these components are blended, and it is necessary to separate them. We employed the spectrum fitting tool PAHFIT (Smith et al. 2007) to decompose the 5 to 15 μm low-resolution Spitzer’s IRS spectra and obtain the fluxes for different PAH features from our sample.

The default PAHFIT parameters were adopted in the fitting. The dust continuum was represented by blackbodies at fixed temperatures of $T = 35, 40, 50, 65, 90, 135, 200,$ and 300 K. Drude profiles were applied to recover the full strength of dust emission features, with PAH emissions at central wavelengths of 5.3, 5.7, 6.2, 6.7, 7.4, 7.6, 7.7, 7.8, 8.3, 8.6, 10.7, 11.2, 11.3, 12.0, 12.6, 12.7, 13.5, 14.0 and 14.2 μm . From these measurements, we analyzed the emissions of 6.2 μm PAH, 7.7 μm PAH complex, and 11.3 μm PAH complex. The 7.7 μm PAH complex is the sum of 7.6, 7.7 and 7.8 μm , while 11.3 μm PAH complex is the sum of 11.2 and 11.3 μm .

The integrated PAH fluxes analyzed in this work are given in Table 4. Fig. 4 shows the detailed decomposition of the starburst galaxy NGC 4676 from 5 to 15 μm obtained with the PAHFIT code in the components: total continuum, ionic lines, stellar lines, best-fit model, and PAH features. This spectral decomposition was similarly applied to the other eleven objects in our sample.

4.2 PAH spectra

The PAH spectra of our sample obtained using the PAHFIT were analyzed using version 3.2 of the NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database (PAHdb, Boersma et al. 2014; Bauschlicher et al. 2018), which contains 4 233 theoretically calculated PAH spectra. In order to perform the fit, we used the version online of the PAHdb, which is based on spectra of individual aromatic molecules with specific charge states, structures, compositions, and sizes. The Gaussian line profile with a full width at half maximum (FWHM) of 15 cm^{-1} and a uniform shift of 15 cm^{-1} for all bands was assumed to mimic some effects of anharmonicity. Fig. 5 illustrates the fitting obtained for the spectrum of NGC 4676, and it shows the main species that are

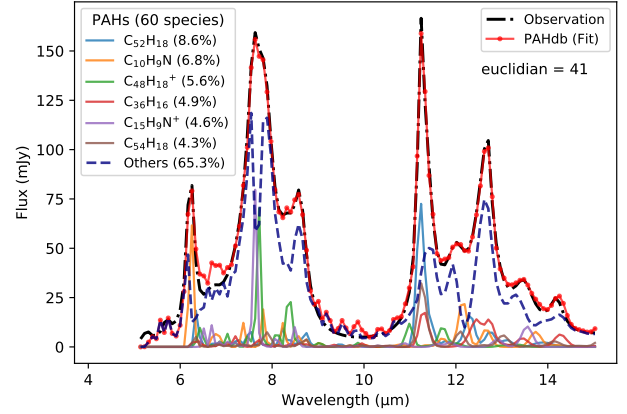


Figure 5. The PAHdb model fitting for the observed spectrum of NGC 4676. The quality of the fitting is quantified by the parameter euclidean. The fractional contribution to the flux from the species is shown.

contributing to the IR emission in NGC 4676. This fitting resulted in sixty species contributing to the galaxy’s flux. The contributions of the six species that contribute most to the galaxy’s flux are in parenthesis and their adjusts are shown in different colors. In blue, the contribution of all fifty-four other species. In Fig. 5, it is possible to see the quality of the fit measured by Euclidean norm³, whose results are displayed at the top right of the figure. The fitting obtained for the remaining objects is shown in Figs. B1 and B2 (see Appendix B).

5 RESULTS AND DISCUSSION

5.1 Oxygen abundance and the ionization parameter

The effects of the radiation field and metallicity on the intensity ratios and PAH equivalent widths have been reported by many authors in the literature. Due to the significant radiation field of AGNs as revealed by the presence of a significant hot dust continuum, the small PAHs could be destroyed, which tend to decrease the 6.2 and 11.3 μm intensities (e.g., Sturm et al. 2000; Desai et al. 2007; Diamond-Stanic & Rieke 2010). Smith et al. (2007) performed a study for a sample of Seyfert, LINER and star forming galaxies, and found a trend of the increase of the integrated luminosity of the PAH bands, relative to the total infrared, with the increasing of the oxygen abundance. Besides, these authors verified that the 7.7/11.3 PAH intensity ratio does not vary with the radiation hardness, measured as $[\text{Ne III}]/[\text{Ne II}]$ for star forming galaxies, but shows a dependence for AGNs, specially for $[\text{Ne III}]/[\text{Ne II}] > 0.1$. However, Maragkoudakis et al. (2018) verified a very weak dependence of the 7.7/6.2 on the hardness of the radiation field and the ionization index for the H I regions along the M 83 and M 33 galaxies (for a review, see for instance, Li 2020).

Fig. 6 presents the 6.2/11.3 μm emission ratio as a function of the oxygen abundance ($12 + \log(\text{O}/\text{H})$) and the logarithm of the ionization parameter of hydrogen ($\log U$) for our sample of galaxies and the SINGS sample by Smith et al. (2007). We notice that the 6.2/11.3 μm PAH intensity presents a linear correlation with the

³ Euclidean norm is one mathematical method that measures the distance between two points. In this case, the observed and the theoretical ones. Therefore, the lower the Euclidean norm, the better the quality of the fit.

Table 4. Integrated PAH fluxes (in units of 10^{-16} W/m²) obtained by the PAHFIT code.

Object	6.2 μ m	6.7 μ m	7.4 μ m	7.6 μ m	7.8 μ m	8.6 μ m	11.2 μ m	11.3 μ m	12.6 μ m	12.7 μ m
	7.7 μ m Complex					11.3 μ m Complex			12.6 μ m Complex	
Mrk 273	39.40	36.70	96.60	51.90	82.80	31.40	12.10	7.53	23.10	2.34
Mrk 471	3.79	0.49	0.06	5.60	5.80	3.28	1.42	5.79	3.54	0.26
Mrk 609	15.20	4.76	9.52	24.40	25.40	14.40	3.52	15.30	8.50	1.33
Mrk 622	3.74	1.45	3.59	5.19	5.52	2.95	2.31	4.76	3.81	0.00
Mrk 883	2.97	0.74	0.36	4.22	3.67	1.77	0.96	3.19	1.57	0.36
NGC 660	263.00	112.00	434.00	322.00	496.00	235.00	39.60	216.00	156.00	23.90
NGC 2622	0.59	0.43	0.00	1.57	1.53	0.56	0.58	1.53	0.23	0.22
NGC 2623	46.80	19.20	93.80	51.10	86.80	50.80	12.70	24.40	30.50	4.03
NGC 4676	21.60	7.49	28.30	27.50	31.50	15.40	6.51	14.80	12.30	1.59
NGC 4922	16.00	8.02	21.60	18.40	21.90	10.10	4.04	10.10	7.13	1.23
NGC 5256	32.10	11.10	54.30	41.30	49.10	23.00	7.18	18.50	19.50	0.54
NGC 5347	7.20	10.00	28.80	2.63	8.32	4.79	0.92	6.49	5.99	0.00

oxygen abundance, and the ionization parameter U . We find the best fit line of $12+\log(O/H) = -0.24 \times \log(6.2/11.3) + 8.69$, with $R = -0.58$, and $\log(U) = -3.51 \times \log(6.2/11.3) - 2.32$, with a Pearson correlation coefficient of $R = -0.99$. It is important to emphasize, that for the first time we found that the photoionization models can reproduce most of the observational data in the $\log(6.2/11.3)$ versus $\log([N\text{ II}]\lambda 6584/H\alpha)$ diagram.

5.2 Species Identification and Degeneracy

The knowledge on the physico-chemical conditions of the environments where PAHs and PANHs exist is of great importance to understanding the molecular formation and destruction, with the possibility of new compounds being formed. Many issues have been raised about which aromatic species can be found in space environments, while theoretical studies have been conducted out to determine vibration frequencies of potential candidates (Ricca et al. 2019; Mattioda et al. 2020). Also, understanding the link between the evolutionary stage of environments and the aromatic species in them is an enigma that must be studied. In this work, we will call PANH any aromatic molecule composed of carbon, hydrogen and nitrogen, whether nitrogen is inside or outside the ring.

The PAH abundances (PAH %) for each species, i.e., the percentage of the contribution on the flux of each species to the total flux in the spectral range between 5–15 μ m, were obtained by dividing the flux contribution of each species by the total flux, which includes the contributions of all species. The total number of species that contribute to IR emission to each galaxy varies from 49 to 77. These species are presented in Appendix C for the twelve studied objects. The most relevant identified species in the sample contain 10 – 82 carbon atoms, while the overall species can be composed of 9 – 170 carbon atoms.

Among the pure hydrocarbons, we highlight the $C_{52}H_{18}$ (UID 3173), which is present in 75 per cent of the sample and contributes from about 4 per cent to 13 per cent in the galaxy’s fluxes. Among nitrogenous polycyclic aromatic hydrocarbons, $C_{10}H_9N$ (UID 473) is present in 92 per cent of the sample, with fluxes contributions ranging from about 3 to 8 per cent. The molecular ion $C_{10}H_9N^+$ is also present in several galaxies analyzed in this work. Similar species such as benzonitrile, also called cyanobenzene (C_6H_5CN), and cyanonaphthalenes ($C_{10}H_7N$) have already

been detected in the dark molecular cloud TMC-1 (McGuire et al. 2018, 2021; McCarthy & McGuire 2021). Confirmation of hydrocarbons with CN, such as cyanobenzene in TMC-1 and other sources, improves our understanding of chemical processes. Reactions between unsaturated hydrocarbons with CN are usually exothermic and without barrier activation. Furthermore, CN is an abundant radical in most molecular clouds. Since cyan derivatives have significant dipole moments, they are easy targets to detect in radio and, therefore, will have bright rotation spectra (McCarthy & McGuire 2021).

It is known that there is degeneracy in the fitting of the spectra using the PAHdb database, and it is not possible to guarantee that these three species are always present in the spectra of the galaxies studied here. If $C_{52}H_{18}$, $C_{10}H_9N$, and $C_{14}H_{11}N$ are excluded from the database, the PAH spectra can still be reproduced, but the quality of the fitting decreases and the Euclidean have a slightly worse result. In this context, it is worthwhile to know that the species $C_{14}H_{11}N$, is simply $C_{10}H_9N$ with the addition of one more aromatic ring. This molecule is present in 60 per cent of the sample, and contributes of 2 to 6 per cent of the total flux. For example, the fitting of the spectrum of the galaxy Mrk 273 performed using all database resulted in the contribution of 56 species (see the fitting in Fig. B1), with an Euclidean close to 95. When the species $C_{52}H_{18}$, $C_{10}H_9N$, $C_{14}H_{11}N$ and their isomers (15 species) were removed, the PAHdb resulted in 53 species contributing to the galaxy’s flux and the Euclidean value was 108. In this case, some new species were introduced, as well as the relative quantity of the species was slightly modified, when compared with the first fitting (considering all database). However, these new species have the same characteristics of the excluded species, being, majority, small pure PAHs or small PAHs with heteroatom (N or O), with two or three fused aromatic rings. Therefore, although excluded molecules are more appropriate, molecules of the same family also reproduce the spectra of the galaxies, and the presence and (relative) quantity of the PAH species is not uniquely determined.

Then, a coarse, but robust description of the contribution of the types of PAHs of a galaxy may be obtained by grouping their different types. We grouped these types adapted according to Andrews et al. (2015), as dehydrogenated, pure, PANHs, and heteroatom. The table 5 lists the results of flux contribution according to these components.

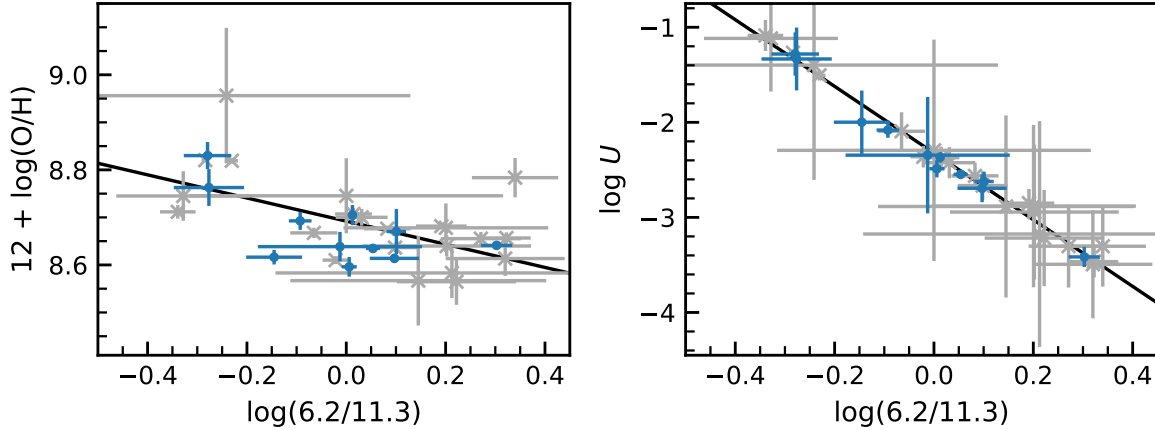


Figure 6. 6.2/11.3 emission ratio as a function of the oxygen abundance ($12 + \log(\text{O}/\text{H})$) and the logarithm of the ionization parameter of hydrogen ($\log U$). Blue points represent the galaxies of our sample and gray points the SINGS sample of galaxies from [Smith et al. \(2007\)](#). The black solid line is the linear fit to the data.

Table 5. Flux contribution grouped by type of PAHs.

Object	Dehydrogenated (%)	Pure PAHs (%)	PANHs (%)	Heteroatom (%)
Mrk 273	42.1	25.1	32.5	0.3
Mrk 471	31.5	53.3	11.9	3.4
Mrk 609	32.2	55.3	10.4	2.0
Mrk 622	36.2	48.9	10.8	4.2
Mrk 883	28.6	60.0	8.3	3.1
NGC 660	33.8	44.3	19.0	3.0
NGC 2622	37.3	51.1	10.8	0.8
NGC 2623	35.2	41.4	23.4	0.0
NGC 4676	30.2	48.9	19.9	1.1
NGC 4992	32.0	49.9	15.9	2.2
NGC 5256	31.6	48.6	19.4	0.4
NGC 5347	47.8	36.2	15.1	1.3

5.3 PANHs and the Peeter Classification

[Hudgins et al. \(2005\)](#) demonstrated that only the nitrogen incorporated into the aromatic rings is capable of reproducing the interstellar observations of the $6.2 \mu\text{m}$ PAH band at shorter wavelengths through experimental process. The blueshift of the $6.2 \mu\text{m}$ band was also observed in 67 per cent of 155 starburst-dominated galaxies ([Canelo et al. 2018](#)). Moreover, [Boersma et al. \(2013\)](#) proposed that the PANH cations dominate both the 6.2 and $11.0 \mu\text{m}$ emissions in slightly dense regions of the Photodissociation Region (PDR) known as NGC 7023, and they are also significantly responsible for the emissions of the 7.7 , 8.6 , 12.0 , and $12.7 \mu\text{m}$ features.

PANHs, both neutral and cation, generate up to 55 per cent of emission at $6.2 \mu\text{m}$ in our sample of galaxies. PANHs also contribute, on average, about 5.7 per cent of the band flux in $11.3 \mu\text{m}$, reaching the value of 37 per cent in the MRK 883.

The importance of N-containing PAHs in the total emission of our sample is also in agreement with the results obtained by [Canelo et al. \(2018\)](#) and [Canelo et al. \(2021\)](#), as can be seen in Table 6. This table shows the Peeters' classification of the 6.2 , 7.7 , and $8.6 \mu\text{m}$ bands ([Peeters et al. 2002](#)), previously obtained by [Canelo \(2020\)](#) to most of our galaxies together with our current classifica-

tion for NGC 2622, NGC 4922 and NGC 5347. The procedure for this analysis, as well as the new results from those three sources, are described in Appendix D. The $6.2 \mu\text{m}$ band, in particular, was mainly distributed into the A class objects, implying a predominance of blue shifted profiles, which are typical of PANH emission and thus confirms the presence of such molecules in these sources.

Besides, we found that the majority of the PAH population is composed of up to 95 per cent of small species⁴ (81 per cent being the average) and 79 per cent of neutral PAHs (68 per cent the average) in our sample of galaxies. These values are consistent with those provided by [Martins-Franco & Menéndez-Delmestre \(2021\)](#), who found that the predictions by the code PAHdb species of a sample based on Spitzer/IRS mid-infrared spectra of 700 dusty galaxies from the GOALS and ATLAS surveys shown themselves to be predominantly small and neutral PAHs.

In this sense, we can attribute a young object profile to our studied sources with ISM-type environments and a PAH population dominated by small species ([Shannon & Boersma 2019](#)). Therefore, the spectra of our sample are consistent with Peeters' A class object, which corresponds to H II regions and the general material illuminated by a star in the ISM. On the other hand, large PAHs are normally more connected with B class spectra of evolved objects, such as circumstellar material, planetary nebula, and a variety of post-AGB (asymptotic giant branch) stars (e.g. [Tielens 2008](#); [Andrews et al. 2015](#); [Peeters et al. 2017](#)). Moreover, the B class profiles could also be a mixture of PANH, small and large PAH emissions ([Peeters et al. 2002](#)). It is important to note that [Yang et al. \(2017\)](#) suggested that neither PAHs with a large side chain nor PAHs with unsaturated alkyl chains are expected to be present in the ISM in a large abundance. From Table 6, both A and B classes are present in our sample, which emphasizes the importance of spatially-resolved observations in the determinations of which locations in the galaxies where those different PAH populations are more relevant.

Furthermore, [Boersma et al. \(2013\)](#) and [Andrews et al. \(2015\)](#) showed that the dominance of the emissions of small molecules increases with the proximity of the ionizing source. [Draine & Li](#)

⁴ In the present work, small PAHs are considered to have a number of carbon atoms lower than 50 ($N_C < 50$), while large PAHs contain $N_C \geq 50$ atoms.

Table 6. Peeters’ classification of the 6.2, 7.7 and 8.6 μm PAH bands of the studied galaxies.

Source	6.2 μm Class	7.7 μm Class	8.6 μm Class	Reference
Mrk 273	A	B	A	[1,2]
MrK 471	B	A	B	[1,2]
Mrk 609	A	B	B	[1,2]
MrK 622	A	A	A	[1,2]
Mrk 883	B	A	A	[1,2]
NGC 660	A	A	A	[1,2]
NGC 2622	B	A	A	This work
NGC 2623	A	B	B	[1,2]
NGC 4676	A	B	A	[1,2]
NGC 4922	A	A	B	This work
NGC 5256	A	A	B	[1,2]
NGC 5347	B	C	...	This work

References: [1] Canelo et al. (2018); [2] (Canelo et al. 2021).

(2001) also demonstrated this behaviour when they proposed that small PAHs emit mainly at 6.2 and 7.7 μm bands, while large PAHs emit at longer wavelengths (Allamandola et al. 1999). Concerning the neutral species, their predominance is also expected in photodissociation regions where the species can be shielded due to high density/low temperature environments. In fact, Allamandola et al. (1999) demonstrated that the absorption spectrum produced by the neutral PAHs, compared to the spectrum produced by the same PAHs in the cationic form, segregate separately in different regions of the IR when these PAHs are small. According to Bauschlicher et al. (2008), small PAHs emit at 5–9 μm region while the emissions at shorter wavelengths of the 11.3 μm profile would be produced by neutral PAH molecules.

5.4 Small and ionized PAHS, PANHS and the ionization parameter

It is widely known that the size of PAH species and their ionization states can directly be related to the physical conditions of the local environment (Tielens 2005; Sidhu et al. 2021), in specially of the ionizing field, and a factor of its characterization is the ionization parameter $\log U$.

In this section, we investigate the relation among the contribution of small PAHs, PANHs and ionized PAHs and $\log U$. In Fig. 7, we plot these PAH populations as a function of ionization parameter. We can see that the contribution of the small PAHs and PANHs drops as the hydrogen ionization parameter increases (left panel). The correlation is very strong in both cases; with a Pearson coefficient of $R = -0.71$ (P-value= 0.012) for the PAHs, while the PANHs has a $R = -0.86$ (P-value= 0.0006). The best linear fit for the former molecules is $\text{Flux}_{(\text{SmallPAHs})} = -4.9 \log(U) + 68.76$, whereas for the latter ones is $\text{Flux}(\text{PANHS}) = -9.9 \log U - 5$. The main reason for a decrease of the fraction of smaller PAHs and PANHs with increasing ionization factor is due to the fact that the latter factor is directly correlated with the rising of the fragmentation rate of the smaller PAHs and PANHs⁵, since they have lower energy of dissociation than larger PAHs (e.g., Peeters et al. 2005). For example the dissociation energy for the formation of the cation

C_3H_3 from the smaller PAH Naphthalene (C_{10}H_8) and aromatic hydrocarbon Benzene (C_6H_6) is 19 eV and 14 eV, respectively (NIST webbook⁶). In addition, the dissociation energy is lower for PANHs than for smaller PAHs (e.g., for dissociation of aromatic hydrocarbon 2-Methylpyridine, $\text{C}_6\text{H}_7\text{N}$, in the cation C_5H_6 the energy is 12.87 eV), and as most of PANHs in our sample are amides (an amide group outside the ring) the dissociation energy is even lower (e.g., for dissociation of aromatic hydrocarbon Aniline, $\text{C}_6\text{H}_7\text{N}$, in the cation C_5H_6 the mean energy is 11.96 eV); this explains why the fraction of the smaller PANHs fall ($\sim 35\%$ to $\sim 5\%$) faster than the PAHs ($\sim 90\%$ to $\sim 75\%$). Likewise, the lower percentage of PANHs (mean value of 17%) with respect to small PAHs (81%) could be explained by their higher rates of dissociation reducing their half-life time (Peeters et al. 2005). Therefore the fraction of small PAHs and PANHs fall as the U factor increases.

According to O’Dowd et al. (2009), an AGN source preferentially destroys small PAH species with its strong radiation field, favouring the predominance of large species. As a consequence, the environment is more metallicity enriched due to the high destruction of small PAHs. The studies by Sales et al. (2010) suggested that Seyferts tend to present an IR emission dominated by PAH molecules with more than 180 carbon atoms, while other objects such as Starbursts normally form molecules with less than 180 carbons. Indeed, the torus can also explain the dominance of the smaller PAHs in our sample, once it can protect the ISM-type environments of galaxies of our sample of the harder radiation field of the central engine. As can be noted, despite of the presence of the AGN these galaxies were classified as starburst-dominated sources, in which class A and B profiles and, consequently, smaller PAHs seem to be presented (e.g. Canelo et al. 2021; Sales et al. 2010, 2013).

The right panel of Fig. 7 also shows that the fraction of ionization of the PAHs decreases as the ionization factor increases. The correlation coefficient is $R = -0.84$ (P-value = 0.001), and the best liner fit is given by $\text{Flux}(\text{ionized PAHs}) = -11.4 \log U + 7.2$. This result could be explained whether the PAH fragmentation rate is greater than the ionization rate, then, in this case, the percentage of ionized small PAHs diminishes as the U factor increases. Moreover, Jochims et al. (1994) showed that PAHs containing less than 30–40 carbon atoms, when photoexcited, tend to dissociate rather than relax by infrared emission. In the case of larger PAHs, the main relaxation way will occur via infrared emission (see also Sales et al. 2010, 2013).

In order to verify whether our results agrees with the classical models from Draine & Li (2001), we verified the relation between the percentage of ionization of PAHs determined from the PAHdb with the 11.3/7.7 PAH band strength (observational) and the ionization parameter determined from the photoionization models. It is showed in Fig. 8, and as expected, we see that the ionization degree of PAH species increases with the decreasing of the 11.3/7.7 ratio and the ionization parameter. We found that the Ionized species (%) = $-28.11 \log(11.3/7.7) + 16.22$, with $R = -0.90$ (P-value=0.0002).

⁵ Most of PANHs found in our sample have $N_C < 50$, except for NGC 5347, MRK 622 and NGC 4676 have the isomers $\text{C}_{52}\text{H}_{18}\text{N}_2^+$ (ID=258), and $\text{C}_{52}\text{H}_{18}\text{N}_2^{2+}$ (ID=257), but all them have contributions $\lesssim 1\%$.

⁶ <https://webbook.nist.gov/chemistry/>

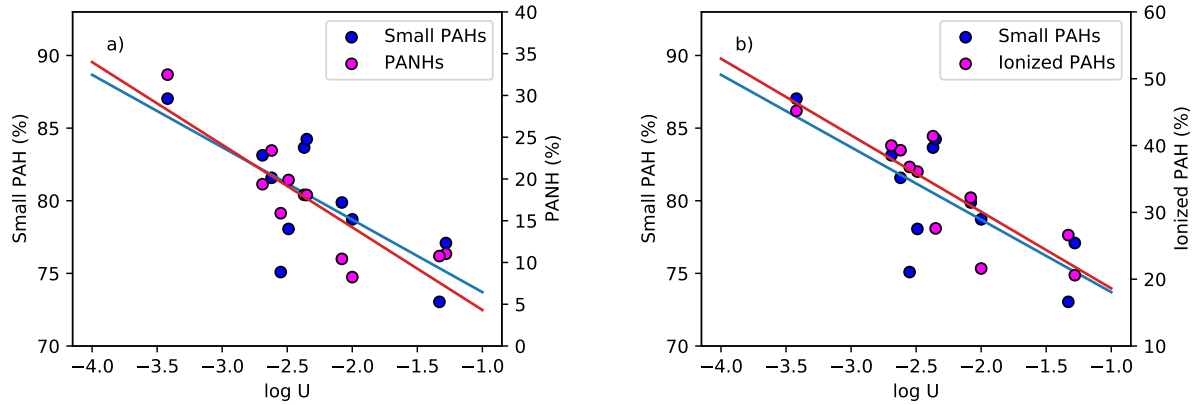


Figure 7. Small PAHs and PANHs versus $\log U$ (right) and small PAHs versus $\log U$ (left). The red and blue solid lines represent the best fits between the percentage total flux of the species (small, ionized PAHs and PANHs) and $\log U$.

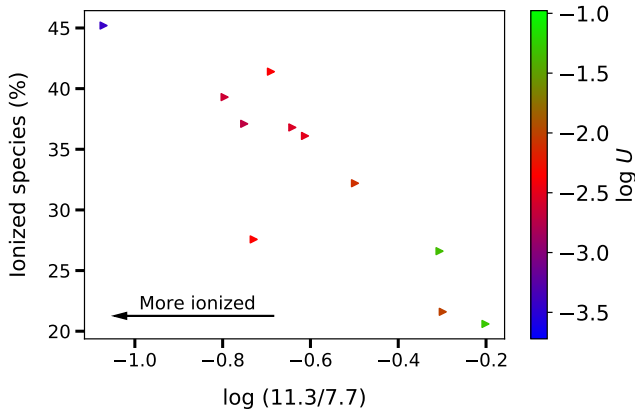


Figure 8. The 11.3/7.7 emission ratios versus ionized species in percentage and $\log U$.

6 CONCLUSIONS

In this study, we combined optical and infrared data of a sample of Seyfert (Sy) and Starburst (SB) galaxies to characterize the main type of PAH molecules present in these objects and the local physical conditions of their irradiating sources, as well as the characteristics of the residing ionised gas. The infrared data were selected from ATLAS Spitzer/IRS with low-resolution spectra in the 5-15 μm wavelength range and local redshift, and the optical spectra from the Sloan Digital Sky Survey, DR16, in the wavelength range of 3600-10400 \AA . Photoionization model grids were built using the CLOUDY code version 17.02 in order to compare the observational emission-line intensity ratios for the galaxies in our sample with the photoionization model predictions for similar emission-line intensity ratios. The main findings are summarised in the following bulletin:

(i) Species containing 10 – 82 carbon atoms are the most abundant in the sample, while the overall species can be composed of 9 – 170 carbons;

(ii) Depending on the galaxy in our sample, the PAH population can contain up to 95 per cent of small species (the average being 81 per cent) and 79 per cent of neutral PAHs (the average being 68

per cent);

(iii) Among the pure hydrocarbons, $\text{C}_{52}\text{H}_{18}$ deserves the most attention, since it is found in 75 per cent of the sample, contributing from about 5 per cent to 13 per cent in the galaxy's fluxes;

(iv) Concerning PANHs, these species contribute about 8 – 32 per cent of the total emission in all the studied objects (17 per cent on average). Aromatic amides, such as $\text{C}_{10}\text{H}_9\text{N}$, $\text{C}_{10}\text{H}_9\text{N}^+$, $\text{C}_{14}\text{H}_{11}\text{N}$ and $\text{C}_{15}\text{H}_9\text{N}^+$ are among the most relevant species contributing to the IR emitting flux. $\text{C}_{10}\text{H}_9\text{N}$ is an important species, which is present in 92 per cent of our sample.

(v) Although it is not possible to guarantee that the aromatic amides mentioned above and $\text{C}_{52}\text{H}_{18}$ are always present in the spectra of the galaxies studied here, due to degeneracy, the removal of these molecules showed a worsening in the fit and the addition of molecules from the same family (small PAHs and aromatic amides, plus a small addition of Oxy-PAHs), suggesting that small PANHs are responsible for a large part of the emission of the galaxies in the sample. Thus, we suggest that aromatic amides, as well as their cations should be considered in future experimental/theoretical studies and observations, intending to search for their interstellar detection at radio wavelengths;

(vi) For the first time, we show the AGN photoionization models with $\alpha_{\text{ox}} = -1.4$, reproducing very well the observed data points in the diagram $\log(6.2/11.3)$ versus $\log([\text{N II}]\lambda 6584/\text{H}\alpha)$;

(vii) The 6.2/11.3 PAH intensity ratio presents a linear anti correlation between the oxygen abundance and $\log U$, in the sense that the 6.2/11.3 ratio decreases as the oxygen abundance and $\log U$ increases;

(viii) In our sample, the small PAH flux, as well as the ionized PAH and PANH fluxes, exhibit a decrease trend as hydrogen ionization parameter increases. Notice a linear anti correlation between these parameter. We suggest that this behavior is directly correlated with the rising of the fragmentation rate of the smaller PAHs and PANHs at high U , since they have lower energy of dissociation than larger PAHs. In addition, the dissociation energy is lower for PANHs than for smaller PAHs, according to the observed behaviour, where the fraction of the smaller PANHs fall (35% to 5%) faster than

the PAHs (90% to 75%) at the considered log(*U*) range. On the other hand, the decreasing of ionized PAHs with the increasing of *U* factor could be explained whether the PAH fragmentation rate is greater than the ionization rate.

(ix) We found that the ionization degree of PAH species increases with the decreasing of the 11.3/7.7 ratio and the ionization parameter (log *U*), in agreement with the models proposed by [Draine & Li \(2001\)](#).

ACKNOWLEDGEMENTS

A.Silva-Ribeiro acknowledges support from Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES). A.C.K acknowledges support from Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) and Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), process number 2020/16416-5. CMC acknowledges the support of CNPq, process number 141714/2016-6, and CAPES - Finance Code 001. D. P. P. Andrade acknowledges support from CNPq and Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ). D. A. Sales acknowledges support from CNPq and Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul (FAPERGS). J.A.H.J. acknowledges support from FAPESP, process number 2021/08920-8.

7 DATA AVAILABILITY

The data underlying this article will be shared on reasonable request to the corresponding author.

REFERENCES

- Abel N. P., van Hoof P. A. M., Shaw G., Ferland G. J., Elwert T., 2008, *ApJ*, **686**, 1125
- Ahumada R., et al., 2020, *ApJS*, **249**, 3
- Allamandola L. J., Hudgins D. M., Sandford S. A., 1999, *ApJ*, **511**, L115
- Allende Prieto C., Lambert D. L., Asplund M., 2001, *ApJ*, **556**, L63
- Alonso-Herrero A., et al., 2014, *MNRAS*, **443**, 2766
- Andrews H., Boersma C., Werner M. W., Livingston J., Allamandola L. J., Tielens A. G. G. M., 2015, *ApJ*, **807**, 99
- Asari N. V., Cid Fernandes R., Stasińska G., Torres-Papaqui J. P., Mateus A., Sodré L., Schoenell W., Gomes J. M., 2007, *MNRAS*, **381**, 263
- Asplund M., Grevesse N., Sauval A. J., Scott P., 2009, *ARA&A*, **47**, 481
- Baldwin J. A., Phillips M. M., Terlevich R., 1981, *PASP*, **93**, 5
- Balmaverde B., Capetti A., Moisió D., Baldi R. D., Marconi A., 2016, *A&A*, **586**, A48
- Bauschlicher Charles W. J., Peeters E., Allamandola L. J., 2008, *ApJ*, **678**, 316
- Bauschlicher Charles W. J., Ricca A., Boersma C., Allamandola L. J., 2018, *ApJS*, **234**, 32
- Boersma C., Bregman J. D., Allamandola L. J., 2013, *ApJ*, **769**, 117
- Boersma C., et al., 2014, *ApJS*, **211**, 8
- Brandl B. R., et al., 2006, *ApJ*, **653**, 1129
- Bresolin F., Kennicutt Robert C. J., Garnett D. R., 1999, *ApJ*, **510**, 104
- Bruzual G., Charlot S., 2003, *MNRAS*, **344**, 1000
- Buchanan C. L., Gallimore J. F., O'Dea C. P., Baum S. A., Axon D. J., Robinson A., Elitzur M., Elvis M., 2006, *AJ*, **132**, 401
- Campbell E. K., Holz M., Gerlich D., Maier J. P., 2015, *Nature*, **523**, 322
- Candian A., Zhen J., Tielens A. G. G. M., 2018, *Physics Today*, **71**, 38
- Canelo C. M., 2020, PhD thesis, IAG-USP, Brasil, doi:<https://doi.org/10.11606/T.14.2020.tde-03022021-131439>

- Canelo C. M., Friaça A. C. S., Sales D. A., Pastoriza M. G., Ruschel-Dutra D., 2018, *MNRAS*, **475**, 3746
- Canelo C. M., Sales D. A., Friaça A. C. S., Pastoriza M., Menéndez-Delmestre K., 2021, *MNRAS*, **507**, 6177
- Carvalho S. P., et al., 2020, *MNRAS*, **492**, 5675
- Chen T., 2018, *ApJ*, **866**, 113
- Cid Fernandes R., Mateus A., Sodré L., Stasińska G., Gomes J. M., 2005, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **358**, 363
- Deo R. P., Crenshaw D. M., Kraemer S. B., Dietrich M., Elitzur M., Teplitz H., Turner T. J., 2007, *ApJ*, **671**, 124
- Desai V., et al., 2007, *ApJ*, **669**, 810
- Diamond-Stanic A. M., Rieke G. H., 2010, in American Astronomical Society Meeting Abstracts #215. p. 353.05
- Dors O. L., Cardaci M. V., Hägele G. F., Rodrigues I., Grebel E. K., Pilyugin L. S., Freitas-Lemes P., Krabbe A. C., 2015, *MNRAS*, **453**, 4102
- Dors O. L. J., Arellano-Córdova K. Z., Cardaci M. V., Hägele G. F., 2017, *MNRAS*, **468**, L113
- Dors O. L., Monteiro A. F., Cardaci M. V., Hägele G. F., Krabbe A. C., 2019, *MNRAS*, **486**, 5853
- Dors O. L., Maiolino R., Cardaci M. V., Hägele G. F., Krabbe A. C., Pérez-Montero E., Armah M., 2020, *MNRAS*, **496**, 3209
- Draine B. T., Li A., 2001, *ApJ*, **551**, 807
- Ehrenfreund P., Rasmussen S., Cleaves J., Chen L., 2006, *Astrobiology*, **6**, 490
- Feltre A., Charlot S., Gutkin J., 2016, *MNRAS*, **456**, 3354
- Ferland G. J., et al., 2017, *Rev. Mex. Astron. Astrofis.*, **53**, 385
- Galliano F., Madden S. C., Tielens A. G. G. M., Peeters E., Jones A. P., 2008, *ApJ*, **679**, 310
- Hägele G. F., Díaz Á. I., Terlevich E., Terlevich R., Pérez-Montero E., Cardaci M. V., 2008, *MNRAS*, **383**, 209
- Hanine M., Meng Z., Lu S., Xie P., Picaud S., Devel M., Wang Z., 2020, *ApJ*, **900**, 188
- Hernán-Caballero A., Hatziminaoglou E., 2011, *MNRAS*, **414**, 500
- Hernandez-Jimenez J. A., Pastoriza M. G., Rodrigues I., Krabbe A. C., Winge C., Bonatto C., 2013, *MNRAS*, **435**, 3342
- Hernandez-Jimenez J. A., Pastoriza M. G., Bonatto C., Rodrigues I., Krabbe A. C., Winge C., 2015, *MNRAS*, **451**, 2278
- Houck J. R., et al., 2004, *ApJS*, **154**, 18
- Hudgins D. M., Bauschlicher Charles W. J., Allamandola L. J., 2005, *ApJ*, **632**, 316
- Hummer D. G., Storey P. J., 1987, *MNRAS*, **224**, 801
- Jochims H. W., Ruhl E., Baumgartel H., Tobita S., Leach S., 1994, *ApJ*, **420**, 307
- Kammoun E. S., et al., 2019, *ApJ*, **877**, 102
- Kauffmann G., et al., 2003, *MNRAS*, **346**, 1055
- Keel W. C., 1984, *ApJ*, **282**, 75
- Kennicutt Robert C. J., Bresolin F., Garnett D. R., 2003, *ApJ*, **591**, 801
- Kewley L. J., Dopita M. A., Sutherland R. S., Heisler C. A., Trevena J., 2001, *ApJ*, **556**, 121
- Kewley L. J., Nicholls D. C., Sutherland R. S., 2019, *ARA&A*, **57**, 511
- Li A., 2020, *Nature Astronomy*, **4**, 339
- Liu C. T., Kennicutt Robert C. J., 1995, *ApJ*, **450**, 547
- Madden S. C., Galliano F., Jones A. P., Sauvage M., 2006, *A&A*, **446**, 877
- Maragkoudakis A., Ivkovich N., Peeters E., Stock D. J., Hemachandra D., Tielens A. G. G. M., 2018, *MNRAS*, **481**, 5370
- Martins-Franco Y., Menéndez-Delmestre K., 2021, *Astronomische Nachrichten*, **342**, 186
- Mateus A., Sodré L., Cid Fernandes R., Stasińska G., Schoenell W., Gomes J. M., 2006, *MNRAS*, **370**, 721
- Mattioda A. L., et al., 2020, *ApJS*, **251**, 22
- McCarthy M. C., McGuire B. A., 2021, *Journal of Physical Chemistry A*, **125**, 3231
- McGuire B. A., Burkhardt A. M., Kalenskii S., Shingledecker C. N., Remijan A. J., Herbst E., McCarthy M. C., 2018, *Science*, **359**, 202
- McGuire B. A., et al., 2021, *Science*, **371**, 1265
- Miller B. P., Brandt W. N., Schneider D. P., Gibson R. R., Steffen A. T., Wu J., 2011, *ApJ*, **726**, 20

- Moustakas J., Kennicutt Robert C. J., Tremonti C. A., Dale D. A., Smith J.-D. T., Calzetti D., 2010, *ApJS*, **190**, 233
- O’Dowd M. J., et al., 2009, *ApJ*, **705**, 885
- Peeters E., Hony S., Van Kerckhoven C., Tielens A. G. G. M., Allamandola L. J., Hudgins D. M., Bauschlicher C. W., 2002, *A&A*, **390**, 1089
- Peeters Z., Botta O., Charnley S. B., Kisiel Z., Kuan Y. J., Ehrenfreund P., 2005, *A&A*, **433**, 583
- Peeters E., Bauschlicher Charles W. J., Allamandola L. J., Tielens A. G. G. M., Ricca A., Wolfire M. G., 2017, *ApJ*, **836**, 198
- Ricca A., Bauschlicher C. W., Roser J. E., Peeters E., 2018, *ApJ*, **854**, 115
- Ricca A., Roser J. E., Peeters E., Boersma C., 2019, *ApJ*, **882**, 56
- Ruschel-Dutra D., Pastoriza M., Riffel R., Sales D. A., Winge C., 2014, *MNRAS*, **438**, 3434
- Rush B., Malkan M. A., Spinoglio L., 1993, *ApJS*, **89**, 1
- Sales D. A., Pastoriza M. G., Riffel R., 2010, *ApJ*, **725**, 605
- Sales D. A., Pastoriza M. G., Riffel R., Winge C., 2013, *MNRAS*, **429**, 2634
- Schkenner S., 2015, *Laboratory astrochemistry: From molecules through nanoparticles to grains*. Wiley-VCH Verlag
- Schrum J. P., Zhu T. F., Szostak J. W., 2010, *Cold Spring Harbor Perspectives in Biology*, 2
- Seok J. Y., Hirashita H., Asano R. S., 2014, *MNRAS*, **439**, 2186
- Shannon M. J., Boersma C., 2019, *ApJ*, **871**, 124
- Shipley H. V., Papovich C., Rieke G. H., Brown M. J. I., Moustakas J., 2016, *ApJ*, **818**, 60
- Sidhu A., Peeters E., Cami J., Knight C., 2021, *MNRAS*, **500**, 177
- Smith J. D. T., et al., 2007, *ApJ*, **656**, 770
- Sturm E., Lutz D., Tran D., Feuchtgruber H., Genzel R., Kunze D., Moorwood A. F. M., Thornley M. D., 2000, *A&A*, **358**, 481
- Tananbaum H., et al., 1979, *ApJ*, **234**, L9
- Tielens A. G. G. M., 2005, *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium*
- Tielens A. G. G. M., 2008, *ARA&A*, **46**, 289
- Tielens A. G. G. M., 2013, *Reviews of Modern Physics*, **85**, 1021
- Véron-Cetty M. P., Véron P., 2003, *A&A*, **412**, 399
- Werner M. W., et al., 2004, *ApJS*, **154**, 1
- Wu Y., Charmandaris V., Huang J., Spinoglio L., Tommasin S., 2009, *ApJ*, **701**, 658
- Xie Y., Li A., Hao L., 2017, *ApJS*, **228**, 6
- Yang X. J., Glaser R., Li A., Zhong J. X., 2017, *New Astron. Rev.*, **77**, 1
- Zhu S. F., Brandt W. N., Wu J., Garmire G. P., Miller B. P., 2019, *MNRAS*, **482**, 2016

APPENDIX A: PAHFIT SPECTRA DECOMPOSITION