

## ESTUDO DAS PROPRIEDADES VIBRACIONAIS DO NAFTALENO USANDO MODELAGEM DA TEORIA DO FUNCIONAL DE DENSIDADE E SUAS APLICAÇÕES EM GALÁXIAS

DOUGLAS A. DA SILVA<sup>1</sup>; WILLIAM DA SILVA CHAVES<sup>2</sup>; DINALVA A. SALES<sup>3</sup>

<sup>1</sup>FURG – *douglas.as1999@gmail.com*

<sup>2</sup>FURG) – *william.chaves.rs@gmail.com*

<sup>3</sup>FURG – *dinalvaires@gmail.com*

### 1. INTRODUÇÃO

Desde o seu nascimento, o Universo criou estruturas complexas a partir de unidades simples, segundo estudos atuais em astrofísica cerca de 20%, do carbono presente no meio interestelar se encontra na forma de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (sigla em inglês, PAHs), esta família de moléculas é muito abundante no Universo, e a emissão do espectro eletromagnético dessas moléculas se encontram no infravermelho médio, P. M., MILLAR, T. J., HERBST (2003). Neste presente trabalho nos deteremos ao uso da modelagem computacional da molécula do naftaleno aliada as aproximações derivadas da mecânica quântica, através da plataforma Gabedit que é um software livre que inclui o seguinte: Interface gráfica para processamento dinâmico de pacotes de programas comuns da dinâmica molecular que utiliza uma aproximação quântica, a Teoria do Funcional da Densidade, que por sua vez permite estudar sistemas cada vez mais complexos, contribuindo para a compreensão e previsão das propriedades dos átomos, moléculas e sólidos.

Do ponto de vista teórico, o estudo de propriedades moleculares vem se tornando um forte instrumento na análise de vários tipos de processos físicos e químicos. Neste trabalho foi realizado a comparação entre os espectros de galáxias Starburts com o espectro da molécula de Naftaleno. A mecânica quântica é essencial para que possamos entender quase todas as forças naturais e atualmente o estudo de propriedades moleculares vem se tornando uma forte ferramenta na pesquisa de diversos tipos de processos químicos e físicos do ponto de vista teórico, o percurso mais promissor tem sido via equações da Mecânica Quântica.

A mecânica quântica tem como foco principal de estudo o mundo microscópico, e teve suas bases estabelecidas por descobertas científicas no final do século XIX e início do século XX, que foram essenciais para a Física Moderna. Deste modo, o suporte de estudo foi se definindo ao longo do século XX, recebendo assim contribuições importante de diversos cientistas. Desta forma, a mecânica quântica se tornou o suporte teórico e experimental de diversos campos da Química e da Física, JOBLIN, C., & TIELENS (2011).

Neste presente trabalho nos deteremos a ao espectro gerado pelos modos vibracionais da molécula do naftaleno e comparar com a modelagem feita pelo projeto AMES NASA Database. Além disso, será investigado a presença dessa molécula nos espectros de galáxias Starburst no infravermelho médio (MIR).

## 2. METODOLOGIA

Com os avanços da Física Quântica no século XX tornou-se intenso o estudo de moléculas dos mais variados tipos, como bem sabe-se as propriedades físico-químicas das moléculas muitas vezes são bem complexas de serem estudadas analiticamente usando mecânica quântica de Schrödinger, então se faz necessário o uso de métodos aproximativos para conseguir resolver vários dos problemas. A mecânica quântica não relativística pode ser apresentada por seis postulados básicos, tendo como base esses postulados consegue-se descrever quase todos os fenômenos quânticos não relativísticos, dentre eles as moléculas e suas respectivas propriedades.

Portanto pelo grau de complexidade de alguns sistemas se faz necessário usar simulações computacionais para conseguir entender os processos moleculares, uma das técnicas mais amplamente usada para estudar estruturas complexas é a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) (do inglês *density functional theory*). Na DFT a grandeza fundamental é a Densidade eletrônica.

Na Mecânica Quântica, o produto  $|\Psi(r)|^2$  é interpretado como a probabilidade de encontrar um elétron cujo estado físico, num certo instante é descrito pela Função de Onda  $\Psi(r)$ , a densidade eletrônica é então interpretada como sendo a carga do elétron vezes a densidade de probabilidade  $\rho(r) = e\Psi(r)$ . fazendo algumas aproximações consegue-se descrever o comportamento de sistemas com muitos elétrons como átomos e moléculas, para isso partimos da equação de Schrödinger independente do tempo.

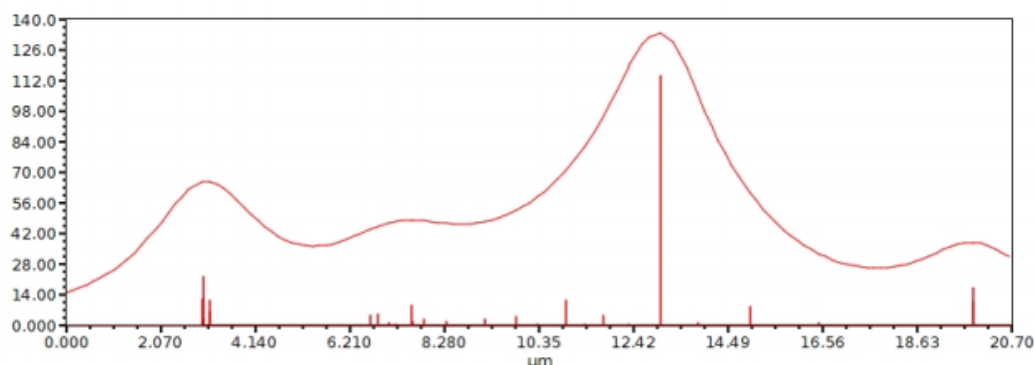
Um ponto de partida para o estudo de um sistema molecular é usar as aproximações de Born-Oppenheimer, que consiste em uma divisão do hamiltoniano do sistema, separando o movimento nuclear do movimento eletrônico ANTÔNIO CHAER (2008). Essa separação é possível porque os elétrons tem massa muito menor que o núcleo, logo, qualquer mudança que houver no núcleo os elétrons vão se adaptar em um novo tipo de organização, isso possibilita resolvermos a equação de Schrödinger primeiro para um sistema e depois para o outro.

A teoria do funcional da densidade tem se tornado cada vez mais comum para explicar a estrutura eletrônica de átomos e moléculas, conseguindo explicar fenômenos mais complexos onde seria inviável utilizar diretamente a equação de Schrödinger, Essa teoria surgiu na década de 60, com trabalhos dos Físicos Hohenberg e Kohn que demonstraram que a energia é um funcional da densidade, e foi melhor desenvolvida por Kohn e Sham em 1965, os trabalhos sobre DFT partem de trabalhos desenvolvidos por Thomas-Fermi na Década de 30, onde se tinha uma ideia de representar a energia como um funcional da densidade eletrônica. A DFT surgiu no ano de 1964, com a publicação de dois teoremas por Hohenberg e Kohn (HK) VIANNA, JOSE DAVID M. (2004).

## 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após os cálculos executados pelo software Gabedit, pode-se visualizar na figura 4 os modos vibracionais característicos da molécula do Naftaleno e seu espectro eletromagnético, o espectro está normalizado pelo pico de maior intensidade e lembrando que na região 3,15  $\mu\text{m}$  a molécula apresenta um pico de emissão relacionado ao modo vibracional de deformação angular simétrica.

Figura 1: Espectro no Infravermelho da molécula do Naftaleno.



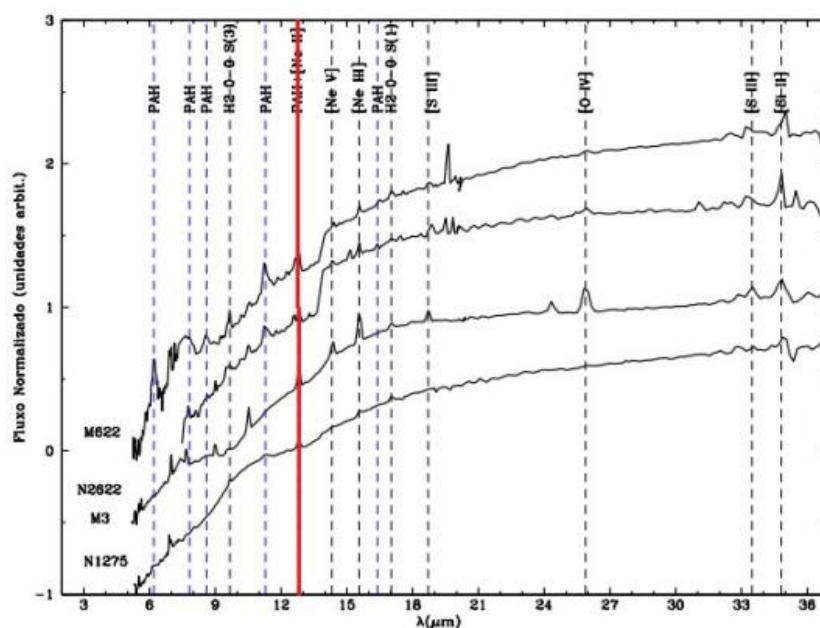
Fonte: obtido através do software Gabedit.

A região (3.15  $\mu\text{m}$ ) corresponde ao infravermelho médio (MIR), característico das vibrações moleculares, os espectros estão disponíveis desde a década de 1940, ele pode ser subdividido em três regiões energéticas distintas.

- O infravermelho próximo (NIR), na faixa de 14000 a 4000  $\text{cm}^{-1}$ ;
- O infravermelho médio (MIR), com números de onda entre 4000 e 400  $\text{cm}^{-1}$ ;
- O infravermelho distante (FIR) que absorve na região abaixo de 400  $\text{cm}^{-1}$ .

Na Figura 5 pode-se identificar a existência de bandas de emissão na região correspondente a 12,445  $\mu\text{m}$ , destacado pela linha contínua vermelha e que pode estar relacionada a presença do naftaleno.

Figura 2: Espectros calibrados das galáxias Seyfert 2.



Fonte: Tese de Doutorado Dinalva A. de Sales

#### 4. CONCLUSÕES

A investigação das propriedades moleculares tornou-se um forte instrumento de na análise de diferentes tipos de processos físicos e químicos, para a análise dessas propriedades, do ponto de vista teórico, o caminho mais propício é usando as equações da Mecânica Quântica. Em pesquisa, as principais bandas de emissão do espectro eletromagnético está na região do infravermelho médio, região característica de Emissão por vibração molecular.

Este trabalho visou estudar o espectro eletromagnético da molécula de Naftaleno, e inferir sua presença em galáxias Seyfert. Os resultados obtidos através do uso da DFT, com dois conjuntos de base demonstraram-se satisfatórios. Uma vez que a modelagem computacional da molécula Naftaleno identificou contribuições em comprimentos de onda no intervalo médio, os mesmos observados em galáxias Seyfert. Nesse sentido podemos concluir que essa molécula pode estar presente em objetos extragalácticos.

#### 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

KING, J.M.H.; DIGRAZIA, P.M.; APPLGATE, B.; BURLAGE, R.; SANSEVERINO, J.; DUNBAR, P.; LARIMER, F. E.; SAYLER, G.S. **Rapid Sensitive bioluminescent reporter technology for naphthalene exposure and biodegradation**. Science. 1990.

Nascimento, Marco Antonio Chaer (2008). **The nature of the chemical bond**. **Journal of the Brazilian Chemical Society**. ISSN 0103-5053. doi:10.1590/S0103-50532008000200007

Vianna, Jose David M. (2004). **Teoria quântica de moléculas e sólidos : simulação computacional**. São Paulo: Livraria da Física. OCLC 57521639

KOHN, W.. Nobel **Lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals**. Reviews Of Modern Physics, [s.l.], v. 71, n. 5, p.1253-1266, 1 out. 1999. American Physical Society (APS). <http://dx.doi.org/10.1103/revmodphys.71.1253>.

Hohenberg, P.; Kohn, W. (9 de novembro de 1964). **Inhomogeneous Electron Gas**. **Physical Review** (em inglês) (3B): B864–B871. ISSN 0031-899X. doi:10.1103/PhysRev.136.B864

JOBLIN, C.; TIELENS, A. G. G. M. **PAHs and the Universe: A Symposium to Celebrate the 25th Anniversary of the PAH Hypothesis**, EAS Pub.

WOODS, Peter M. et al. **The chemistry of protoplanetary nebulae**. **Astronomy Astrophysics**, v. 402, n. 1, p. 189-199, 2003.

ANDREWS, H. et al. **PAH emission at the bright locations of PDRs: the grandpah hypothesis**. The Astrophysical Journal, v. 807, n. 1, p. 99, 2015.