

ESTUDO DA ENERGIA E TEMPERATURA: A ASTROQUÍMICA COMO FERRAMENTA DE ENSINO

ROSIANE CARNEIRO DA ROSA¹; FABRICIO FERRARI²; DINALVA AIRES DE SALES³

¹*Universidade Federal do Rio Grande – rosy.carneiro93@gmail.com*

²*Universidade Federal do Rio Grande – fabricio.ferrari@gmail.com*

³*Universidade Federal do Rio Grande – dinalvaires@gmail.com*

1. INTRODUÇÃO

A astroquímica estuda os processos e a evolução química em ambientes astrofísicos, como o meio interestelar (ISM), regiões circunstelares e circumplanetárias. A espectroscopia molecular permitiu a identificação tanto de moléculas simples como as mais complexas, especialmente os hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs) (DE BECKER, 2013). Estas espécies possuem grande interesse astronômico, uma vez que estão presentes em vários objetos astronômicos e podem capturar átomos de oxigênio ou nitrogênio para formar compostos fundamentais à vida no Universo (EHRENFREUND et al., 2006). Ainda, as bandas de emissão na região do infravermelho (IR) predominam as desta classe molecular.

Tendo em vista o caráter multi e interdisciplinar da astroquímica, é coerente seu uso como ferramenta facilitadora de ensino para disciplinas nos cursos de física, em especial a mecânica estatística. A mecânica estatística fornece informações sobre as propriedades físico-químicas da matéria, a partir da análise dos componentes microscópicos do sistema (SALINAS, 2008). Nesse sentido este trabalho busca investigar se o comportamento de PAHs em ambientes estelares pode ser descrito em termos do formalismo de ensemble canônico. Uma vez que nos limites do Gás Ideal Clássico a temperatura se conecta a energia média do sistema, é possível analisar a energia de emissão no IR por uma molécula de PAH e demonstrar a relação existente entre Energia e Temperatura.

2. METODOLOGIA

Este estudo apresentou características físico-químicas dos PAHs e utilizou a espécie antraceno, que possui 24 átomos (ver Figura 1). Posteriormente descreveu o formalismo canônico e a função de partição Z , expressão que estabelece vínculo com a termodinâmica e fornece informações essenciais do sistema como, por exemplo, os valores médios de energia e probabilidades associadas aos estados acessíveis (ATKINS, 2014). Também chamadas de grandezas macroscópicas, são determinadas pelo comportamento médio de um grande número de partículas, como a energia interna U .

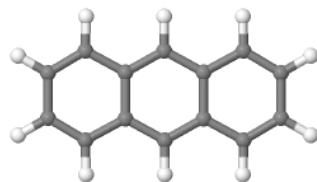


Figura 1 - Antraceno

No caso de uma substância com N átomos, U é expressa pelo produto entre energia média \bar{E} e N (SALINAS, 2008). Nos limites do gás ideal clássico, \bar{E} se conecta a temperatura pela expressão $U = \frac{3}{2} N k_B T$, onde N representa o número de átomos, k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura. Dessa forma é possível inferir a energia do PAH durante a emissão em IR e traçar um gráfico demonstrando essa relação.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Selecionados os valores de temperatura alcançados pelos PAHs, o software RStudio foi utilizado para elaboração dos gráficos. A Figura 2 apresenta o script utilizado, uma vez que a energia medida em Joules não é adequada para propriedades microscópicas, faz-se necessário a conversão de unidades para eV , que pode ser incluído diretamente na expressão.

```
f <- 3/2 * 24 * (1.380649 * 10^-23) * x * (6.242 * 10^18)
x <- c(10, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900, 1000)
plot(x, f,
      xlab = "Temperatura (K)", ylab = "Energia Interna (eV)",
      main = "Relação E-T",
      las = 1,
      pch = 19,
      col = "deeppink",
      cex.axis = 0.9)
legend(x="topleft",
       legend = "U=3/2 N kB T",
       lty=4,
       bty = "n",
       lwd=1)
lines(x, f,
      lty = 4,
      lwd = 1)
```

Figura 2 - Script para elaboração do gráfico

O resultado obtido é um gráfico de regressão linear, evidenciando a relação entre as duas propriedades físicas, como mostra a Figura 3.

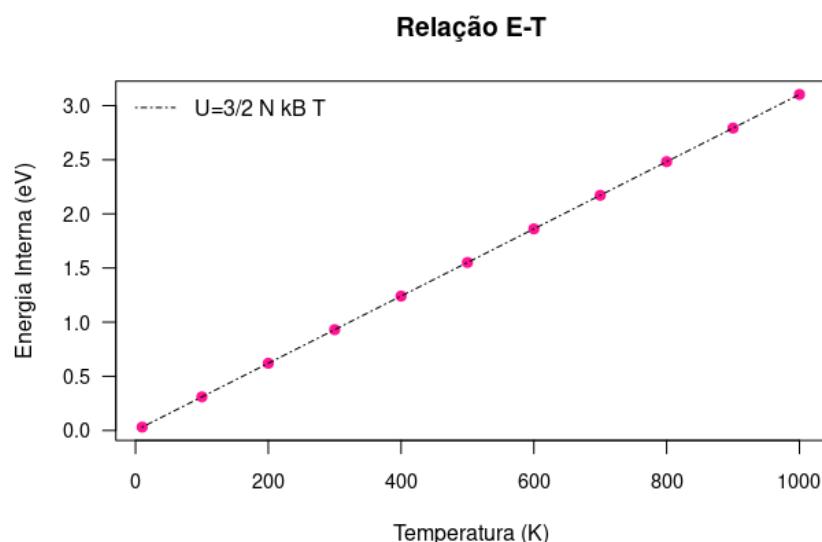


Figura 3 - Gráfico de Temperatura e Energia

4. CONCLUSÕES

Este trabalho apresentou deduções do formalismo canônico para apresentar a temática da energia média e como ela se relaciona com a temperatura, bem como uma das aplicações deste formalismo, o gás ideal clássico. Além disso, permitiu inferir que apesar de possuírem propriedades físicas distintas dos gases ideais, a expressão da energia interna pode descrever a relação direta entre a energia e a temperatura de emissão de um PAH no ISM.

Portanto, ao estabelecer uma relação entre objetos de pesquisa em astroquímica e a ementa curricular, além da utilização de ferramentas tecnológicas, mostra a possibilidade de utilizar meios interdisciplinares para despertar a atenção e a motivação dos alunos.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- DE BECKER, M. Astrochemistry: the issue of molecular complexity in astrophysical environments. **Bulletin de la Société Royale des Sciences de Liège**, Liège, v.82, p.33-94, 2013.
- EHRENFREUND, P.; CLEAVES, J. ; CHEN, L. Experimentally Tracing the Key Steps in the Origin of Life: The Aromatic World, **Astrobiology**, New York, v.6, n.3, p.490-520, 2006.
- TIELENS, A. G. G. M. **Physics and chemistry of the interestellar medium**. Cambridge University Press, New York, 2008.
- SALINAS, S. R. A. **Introdução à Física Estatística**. EdUSP, São Paulo, 2008.
- ATKINS, P.; PAULA, J. **Physical Chemistry: Thermodynamics, Structure, and Change**. W. H. Freeman, New York, 2014.