

ESTUDO DAS PROPRIEDADES VIBRACIONAIS DO NAFTALENO USANDO MODELAGEM DA TEORIA DO FUNCIONAL DE DENSIDADE E SUAS APLICA- ÇÕES EM GALÁXIAS

DOUGLAS A. SILVA¹; WILLIAM CHAVES²; CARLOS FRA-
JUCA³; DINALVA A. SALES⁴

¹Universidade Federal do Rio Grande - douglasastrofisica@gmail.com

²Universidade Federal do Rio Grande - william.chaves.rs@gmail.com

³Universidade Federal do Rio Grande - frajuca@gmail.com

⁴ Universidade Federal do Rio Grande - 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, BECKER et al. (2013). 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, JOBLIN et al. 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 a mecânica quântica de Schrödinger, então se faz necessário o uso de métodos aproximativos para conseguir resolver vários dos problemas. 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), KING et al. (1990). 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. 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 desta molécula nos espectros de galáxias Starburst no infravermelho médio (MIR).

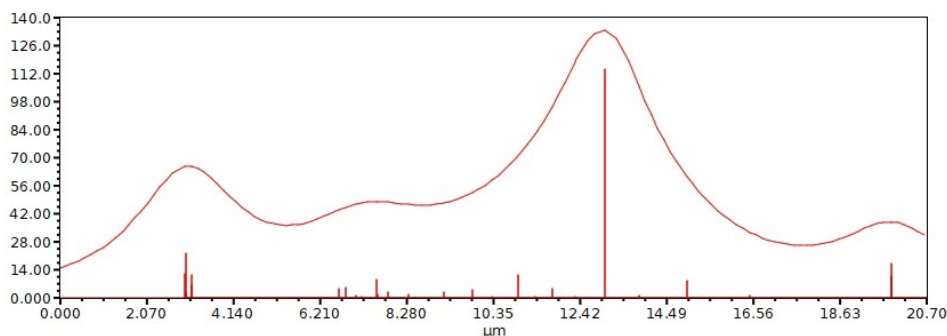
2. METODOLOGIA

Para construir a molécula Naftaleno foi utilizada a plataforma Gabedit, que é uma interface gráfica de usuário para pacotes de química computacional como Gamess-US, Gaussian, Molcass, Molpro, MPQC, OpenMopac, Orca, PCGamess e Q-Chem. Essa plataforma nos permite construir moléculas e visualizá-las em um ambiente 3D. Ele pode exibir uma ampla variedade de resultados de cálculos, incluindo suporte para a maioria dos principais formatos de arquivos moleculares, e os gráficos podem ser exportados para vários formatos. Os cálculos e aproximações quânticas foram realizados usando o programa ORCA que é um pacote de programa de química quântica ab initio que contém métodos modernos de estrutura eletrônica, incluindo teoria do funcional da densidade, perturbação de muitos corpos, agrupamento acoplado, métodos multirreferência e métodos semi-empíricos, CANELO (2016). Os principais parâmetros utilizados para realizar o cálculo em ORCA são: tipo de trabalho a opção de frequência e o cálculo foi realizado no estado não excitado utilizando o método Funcional Híbrido – B3LYP e função de base 6-31G* e foi feito a comparação com a modelagem feita pelo projeto AMES NASA Database. Além disso, foi inferido a presença desta molécula nos espectros de galáxias Seyfert e Starburst no infravermelho médio (MIR) observadas pelo telescópio SPITZER.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após os cálculos realizados, é possível visualizar na figura 1 os modos vibracionais característicos da molécula de Naftaleno e seu espectro eletromagnético, o espectro é normalizado pelo pico de maior intensidade e lembrando que na região de 3,15 μm a molécula tem um pico de emissão relacionado ao modo vibracional de deformação angular simétrica, WOODS (2003). A região (3,15 μm) corresponde ao infravermelho médio (MIR), característica das vibrações moleculares, os espectros estão disponíveis desde a década de 1940, podendo ser subdivididos em três regiões de energia distintas: O infravermelho próximo (NIR), na faixa de 14.000 a 4.000 cm^{-1} , o infravermelho médio (MIR), com números de onda entre 4000 e 400 cm^{-1} , o infravermelho distante (FIR) que absorve na região abaixo de 400 cm^{-1} .

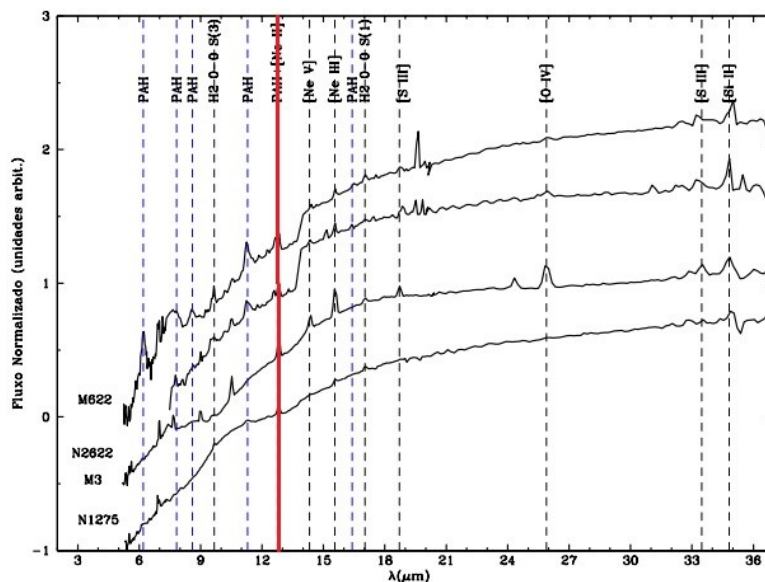
Figura 1



Fonte: Modelagem feita no Software Gabedit.

Na Figura 2 é possível identificar a existência de bandas de emissão na região correspondente a $12,445\ \mu\text{m}$, destacadas pela linha vermelha contínua e que podem estar relacionadas à presença de naftaleno.

Figura - 2



Espectros calibrados das galáxias Seyfert 2. Fonte: Tese de Doutorado Dinalva A. de Sales, SALES (2010).

4. CONCLUSÕES

Os resultados obtidos com o uso da DFT, com um conjunto de base, mostraram-se satisfatórios. Uma vez que a modelagem computacional da molécula de Naftaleno identificou contribuições em comprimentos de onda na faixa média, elas são observadas nas galáxias Seyfert e Starburst. Nesse sentido podemos concluir que esta molécula pode estar presente nestes objetos extragalácticos.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- M. D. Becker, **Astrochemistry: the issue of molecular complexity in astrophysical environments**, Bulletin de la Société Royale des Sciences de Liège 82, 33 (2013). ArXiv:1305.6243.
- Sales, D. A., Pastoriza, M. G., Riffel, R. (2010). **Polycyclic Aromatic Hydrocarbon and Emission Line Ratios in Active Galactic Nuclei and Starburst Galaxies**. The Astrophysical Journal, 725(1), 605.
- King, J.M.H.; Digrazia, P.M.; Applegate, 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.
- 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.

Canelo, C. M. (2016). **O Mundo Aromático dos PAHs no meio interestelar às condições bióticas** (Doctoral dissertation, Universidade de São Paulo).