

VIAGEM AO CENTRO DE GALÁXIAS: MODELAGEM DE MOLÉCULAS ORGÂNICAS EM CONDIÇÕES EXTREMAS

WALAS DA SILVA OLIVEIRA¹; ELIZANE EFIGENIA DE MORAES², DINALVA AIRES DE SALES³, JOSE RAFAEL BORDIN¹

¹Universidade Federal de Pelotas– silva.walas@gmail.com; jrbordin@ufpel.edu.br

²Universidade Federal da Bahia – elizane.fisica@gmail.com

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

1. INTRODUÇÃO

Do ponto de vista energético, as galáxias no Universo dividem-se em “normais”, como a nossa própria Galáxia, e ativas. Nas galáxias normais, a maior parte da energia vem das estrelas, sendo dominada por radiação em comprimentos de onda da faixa visível do espectro eletromagnético. As galáxias ativas ou com núcleos ativos (AGNs, do inglês Active Galactic Nuclei), por sua vez, estão entre os objetos mais energéticos do Universo e podem emitir, em comprimento de onda visíveis, cerca de \sim 1048 erg/s (\sim 100 a 1000 vezes o brilho total da nossa própria galáxia, a Via Láctea).

Sales et al. 2021 (in prep.) observou que no centro da galáxia NGC4303 as moléculas de PAHs estão associadas a região de formação estelar e as moléculas de H₂ estão relacionadas com região de choques devido a presença de um SMBH no centro dessa galáxia. Com o advento dos novos instrumentos, experimentos e modelagem uma nova era para o avanço do conhecimento sobre moléculas orgânicas no espaço começou. Para isso, utilizaremos a técnica de Dinâmica Molecular com campos de forças reacionais.

Utilizando termostatos e barostatos já bem conhecidos na literatura podemos simular as condições extremas de pressão e temperaturas observadas nas galáxias. Ao mesmo tempo, campos de forças reacionais permitem observar a formação e quebra de ligações químicas.

2. METODOLOGIA

O estudo se dará de duas forma, uma utilizando dados astronômicos observacionais e outra utilizando métodos de simulação computacional. Para o método de observacional utilizaremos dados de galáxias obtidas pelo telescópio espacial Spitzer. Os espectros observados com o IRS serão extraídos dos arquivos BCDS usando o software SMART (Higdon et al. 2006) seguindo a metodologia descrita em Buchanan et al. (2006). Os processos pós-pipeline das imagens observadas com IRAC e MIPS serão realizados usando o código MOPEX que consiste em refinamento do apontamento, "muxbleed", correções por flatfield, mascaramento de pixels ruins e raios cósmicos, montagem de múltiplos DCEs por observações e extrações de fontes que incluem ruído, background e estimativa da PRF (Point Response Functions). Finalmente, a fotometria será feita usando as imagens finais resultantes desses processos. Para os dados fotométricos

observados com o MIPS, também utilizaremos o software MOPEX (Buchanan et al. 2006).

Para analisar os espectros, utilizaremos o software PAHFit que foi desenvolvido por Gallimore et al. (2010).

O estudo teórico será conduzido através da Modelagem Molecular utilizando a técnica de Dinâmica Molecular (MD) (Allen e Tildesley 2017, Frenkel e Smit 2001). De forma resumida, a MD consiste na resolução das equações clássicas de movimento para cada partícula que constitui o sistema. Dado as características das perguntas que este projeto se propõe a responder, o detalhamento deve ser a nível atomístico. Para este tratamento, existem inúmeros campos de força, cada qual projetado para problemas específicos - de materiais a sistemas biológicos. Contudo, para este projeto precisamos de um potencial de forças clássico que seja capaz de simular a ligação química se formando e se rompendo, como ocorre na separação do H do PAH e a posterior formação do H₂. Para isso, empregaremos o campo de força Reaxff (Senftle 2016).

O Reaxff é um campo de força reativo desenvolvido por pesquisadores da CalTech, inicialmente para hidrocarbonetos (van Duin 2001), que visa permitir a formação e quebra de ligações utilizando campos de força clássicos. Para isso, é utilizada a ideia de parâmetro de ordem de ligação. Estes parâmetros dependem da separação entre os átomos, dos ângulos entre três átomos vizinhos, do número de ligações em um único átomo e também do tipo de ligação que dois átomos formam. Apesar da complexidade do campo de força, com o número de parâmetros necessários para a correta descrição do sistema, o mesmo ainda permite simulações de sistemas com milhares a dezenas de milhares de átomos utilizando o ferramental computacional existente no grupo de pesquisa.

Desta forma, as simulações de PAHs e H serão realizadas no cluster do grupo de Teoria e Simulação em Sistemas Complexos utilizando o pacote LAMMPS, anacrônico para Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (Plimpton 1995), onde o Reaxff é um dos campos de força disponíveis para simulação. Termostatos e barostatos já implementados no

LAMMPS permitirão realizar a simulação nas mesmas condições de pressão e temperatura dos dados observacionais, permitindo observar a formação ou quebra dos PAHs e das moléculas de H₂ em condições extremas.

3. PESPECTIVAS FUTURAS

É esperado que com a ajuda das novas tecnologias de simulação de dinâmica molecular consigamos compreender como se dá a sobrevivência de moléculas orgânicas no meio interestelar e o surgimento de material probiótico.

Até o momento os autores trabalharam no modelo de molécula de benzeno donde tiveram alguns dados de simulações, das quais, até o presente momento, estão sendo feitas de repetições destas simulações feitas no LAMMPS, diferindo a seed inicial para obter uma média estatística válida para essa primeira parte do projeto, parte esta que consiste em estudar o benzeno em um ambiente controlado, ou seja, ambiente atmosférico para compreender melhor o modelo de molécula e campo de força utilizado.



4. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Michael P Allen and Dominic J Tildesley. Computer simulation of liquids, USA, Oxford university press, 2017.
- Buchanan, Catherine L., et al., A Spitzer Space Telescope Infrared Spectrograph Spectral Atlas of Luminous 8 μm Sources in the Large Magellanic Cloud, AJ, 132, 5, 2006, 1890-1909.
- Gallimore, J. F. et al., Infrared Spectral Energy Distributions of Seyfert Galaxies: Spitzer Space Telescope Observations of the 12 μm Sample of Active Galaxies, APJ, 187, 1, 2010, 172-211.
- DAAN FRENKEL and BEREND SMIT. Understanding molecular simulation: from algorithms to applications, 1, londres, Academic Press, 2001.
- T'HOOMAS P SENFTLE; et al., The ReaxFF reactive force-field: development, applications and future directions, npj Comp. Mat, 2016, 15011.
- S. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, J Comp Phys, 1995, 117, 1-19.