

Análise computacional do hidrocarboneto aromático policíclico antraceno e sua aplicação na astroquímica

Rosiane C. da Rosa¹, Dinalva A. Sales¹, Carla M. Canelo² e Brenda M. A. Miranda¹

¹Universidade Federal do Rio Grande - FURG

²Universidade de São Paulo

Resumo

Este trabalho objetiva analisar o espectro de emissão na região entre 5 e 15 μ m do antraceno, uma espécie química de relevância astroquímica, obtido por modelagem computacional. E também comparar resultados obtidos com conjuntos de bases diferentes. A classe molecular escolhida possui características que permitem sua presença abundante em ambientes hostis do espaço, despertando interesse acerca de suas propriedades físico-químicas. A estrutura molecular foi desenhada na plataforma Gabedit e os cálculos da abordagem quântica realizados pelo software ORCA. Foram utilizadas duas funções de base, 6-31G* e 6-31G**, para comparação entre resultados. Para a análise dos métodos e inferências de semelhanças e diferenças, foi utilizado o NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database (PAHdb), como banco de dados de referência. Os resultados obtidos apresentam um avermelhamento nas bandas vibracionais, mesmo utilizando a função descrita pelos autores do PAHdb, expondo a direta relação entre complexidade e eficácia dos métodos comparados. Ainda assim, os resultados obtidos foram satisfatórios. Uma vez que as bandas de emissão desta molécula, em comparação com dados espectroscópicos, permitem inferir a presença da mesma em galáxias ativas, como Seyfert 1, Seyfert 2 e Starburst.

Abstract

This work aims to analyze the emission spectrum in the region between 5 and 15 μ m of anthracene, a chemical species of astrochemical relevance, obtained by computational modeling. And also to compare the results obtained with different sets of bases. The chosen molecular class has characteristics that allow its abundant presence in hostile space environments, arousing interest in its physicochemical properties. The molecular structure was designed on the Gabedit platform and the calculations of the quantum approach were performed by the ORCA software. Two base functions, 6-31G* and 6-31G**, were used to compare the results. For the analysis of methods and inferences of similarities and differences, the NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database (PAHdb) was used as a reference database. The obtained results show a reddening in the vibrational bands, even using the function described by the authors of the PAHdb, exposing the direct relationship between complexity and effectiveness of the compared methods. Nevertheless, the obtained results were satisfactory. Since the emission bands of this molecule, in comparison with spectroscopic data, allow us to infer its presence in active galaxies, such as Seyfert 1, Seyfert 2 and Starburst.

Palavras-chave: astroquímica, PAH, modelagem computacional, DFT.

Keywords: astrochemistry, PAH, computational modeling, DFT.

DOI: [10.47456/Cad.Astro.v2n2.35751](https://doi.org/10.47456/Cad.Astro.v2n2.35751)

1 Introdução

As últimas décadas apresentaram pesquisas promissoras sobre a física e a química em ambientes astrofísicos. Isso se deve à grande quantidade de dados observacionais disponíveis, além do avanço nas técnicas computacionais. Decor-

rido mais de 80 anos que as primeiras moléculas simples com dois átomos foram identificadas no espaço, outros espécimes complexos também foram descobertos [1].

Todos esses exemplares contribuem para o ciclo de vida no meio interestelar (ISM), onde explo-

ções de supernova ou estrelas no ramo assintótico das gigantes (AGB) liberam elementos sintetizados em seu núcleo, que mais tarde evoluíram para estruturas como galáxias, estrelas e planetas [2]. Dentre as diversas classes moleculares, verificou-se que vários objetos emitiam bandas espectrais até então não identificadas e que mais tarde foram atribuídas aos hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs) [1].

Aproximadamente 20% ou mais do carbono existente no meio interestelar encontra-se na forma de PAHs, e grande parte da emissão no infravermelho médio (MIR), conhecida por AIBs (do inglês *Aromatic Infrared Bands*), deriva dessa classe molecular [3]. Além disso, PAHs podem ter alguns de seus átomos de carbono substituídos por nitrogênio ou oxigênio, dando origem a compostos complexos que desempenham importante participação na origem da vida.

Neste artigo será analisado o espectro de emissão no infravermelho (IR) do PAH antraceno, composto por três anéis aromáticos. Esta espécie foi escolhida por representar um PAH simples, o que facilita a análise de sua estrutura e processos numéricos posteriores. Além disso, pesquisas recentes inferem à presença de sua versão catiônica na Nuvem Molecular Perseus [4].

O espectro foi simulado utilizando o Gabedit¹, uma interface gráfica utilizada em pacotes de química computacional, e ORCA², um software disponível para acadêmicos e que apresenta métodos modernos de estrutura eletrônica. Dentre nossos objetivos estão entender algumas das propriedades que permitem a existência dessas moléculas em ambientes tão inóspitos, mas que podem dar origem aos tijolos da vida no Universo.

Uma vez que a região do IR fornece informações fundamentais a respeito de ambientes astrofísicos como a temperatura e a taxa de formação estelar [5], a compreensão da química desses compostos pode colaborar com o desenvolvimento de tecnologias voltadas para o meio ambiente, visto que em ambientes terrestres os PAHs são altamente poluentes.

2 Materiais e métodos

Neste trabalho foram utilizados dados obtidos por meio da modelagem computacional. A es-

¹<http://gabedit.sourceforge.net/>

²<https://orcaforum.kofo.mpg.de/app.php/dlext/>

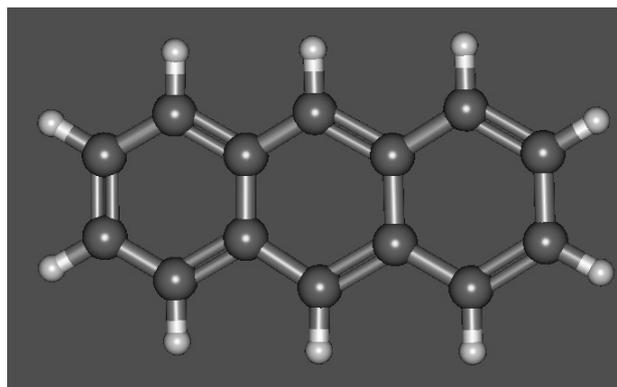


Figura 1: Molécula de Antraceno simulada na interface gráfica do software Gabedit. Fonte: Gabedit

colha deste método se deu pela necessidade de se detalhar comportamentos moleculares específicos e, tendo em vista que a resolução de métodos analíticos para um sistema multi-eletrônico seria inviável, os softwares de química computacional permitem que cálculos mais complexos sejam realizados.

A estrutura inicial da molécula foi desenhada no Gabedit. Este programa é uma interface gráfica de usuário para pacotes de química computacional. Exibe diversos resultados de cálculos e suporta grande parte dos formatos de arquivos moleculares. Também gera arquivos de entrada e permite desenhar e visualizar estruturas em três dimensões, bem como os espectros após a realização dos cálculos.

A realização dos cálculos e aproximações quânticas foi através do programa ORCA. Com fácil e eficiente uso, esta ferramenta permite aplicar códigos de química computacional, especificamente voltados para propriedades espectroscópicas de sistemas. Apresenta diversos métodos quânticos, dentre semi-empíricos e *ab initio*, bem como métodos híbridos que combinam parcelas dos métodos anteriores e que será o foco deste trabalho.

Ambos os programas são gratuitos, disponíveis para uso não-comercial. Finalizada a estrutura como mostra a Figura 1, é possível que ligações e ângulos estejam diferentes dos valores de equilíbrio, sendo necessário o uso de um campo de força para ajustar a geometria molecular, de acordo com a energia potencial estabelecida para os mesmos.

A Tabela 1 fornece os comandos utilizados para este estudo. A opção frequência é apresentada como tipo de trabalho, uma vez que o modo de vibração molecular corresponde ao espectro IR da

substância.

O cálculo de energia foi feito no estado neutro, uma vez que grande parte da contribuição da emissão em galáxias se dá por espécies neutras e também devido a otimização do tempo computacional. A escolha de uma função de base permite maior precisão no cálculo da estrutura eletrônica. As funções tipo Gaussianas (GTFs) do conjunto de bases de Pople foram escolhidas, uma vez que a literatura aponta vantagens em relação a outros conjuntos [6].

Ainda, é um dos conjuntos de bases utilizado pelo NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database (PAHdb) [7–9], que será usado para fins de comparação com os resultados obtidos. Como método de trabalho foi escolhido um dos mais utilizados em química quântica, a Teoria do Funcional da Densidade, mais especificamente o funcional híbrido B3LYP. Este funcional combina dois ou mais funcionais, permitindo uma sensível melhora nas soluções apresentadas. Determinados os procedimentos de entrada para a modelagem, a ferramenta iniciará o processo.

2.1 Teoria do funcional da densidade

A mecânica quântica facilitou uma compreensão mais profunda da estrutura da matéria. Por meio da equação que descreve a função de onda do elétron é possível obter toda a informação necessária para determinar o estado de um sistema, seja átomo, molécula ou sólido. Porém, poucos sistemas físicos possuem solução analítica, e mesmo a solução numérica aproximada pode ser computacionalmente inviável, sendo necessárias aproximações que possibilitem o uso em sistemas moleculares.

Uma vez que a função de onda depende de 3N coordenadas (x, y e z de cada elétron), só é possível a resolução para o átomo de hidrogênio, que possui um único elétron. Para contornar esse problema, é necessário o uso de aproximações baseadas na densidade eletrônica ρ , já que essa variável não depende do número de elétrons e sim das coordenadas x, y e z .

O uso da densidade eletrônica foi proposto em 1927 por Thomas e Fermi. E, apesar deste modelo possuir limitações nas previsões de sistemas reais, precedeu o surgimento da moderna teoria usada até hoje. Por considerar uma distribuição homogênea de elétrons e negligenciar o termo de troca na interação entre elétrons, o método foi

aprimorado por Paul Dirac em 1930, ao adicionar um termo de troca [10].

O desenvolvimento formal da teoria do funcional da densidade (DFT) por Pierre Hohenberg e Walter Kohn ocorreu em 1964, utilizando a densidade eletrônica ρ como variável básica para calcular a equação de Schrödinger e propondo soluções para o impasse no modelo Thomas-Fermi por meio de dois teoremas [11].

O primeiro teorema afirma que o hamiltoniano e todas as propriedades resultantes podem ser obtidas a partir da densidade eletrônica. O segundo teorema mostra que o funcional da densidade também pode ser obtido pelo método variacional. Neste processo, o hamiltoniano correspondente pode ser determinado de acordo com a densidade aproximada eletrônica, enquanto a energia pode ser obtida através da equação de Schrödinger. As funções da densidade eletrônica que resultam no menor valor de energia serão as mais corretas.

No ano seguinte, Walter Kohn e Lu Jeu Sham demonstraram um conjunto de equações nas quais o sistema de partículas interagentes é substituído por um de partículas não-interagentes, submetidas a um potencial e reproduzindo as condições do sistema interagente. Essa mudança considera o fato de que em ambos, a densidade eletrônica será sempre a mesma. A equação geral de Kohn-Sham para a energia eletrônica do estado fundamental se torna

$$E[\rho] = \int V_{ext}(r)\rho(r)dr + F[\rho], \quad (1)$$

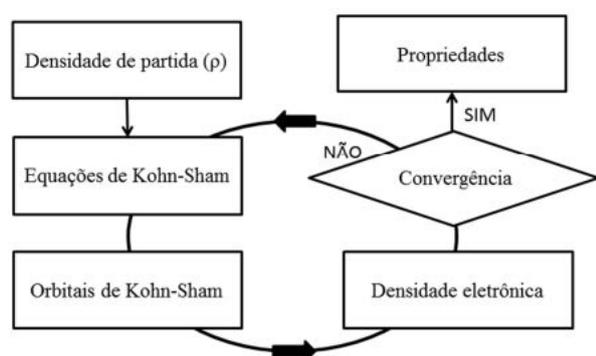
sendo V_{ext} o potencial externo e $F[\rho]$ o funcional da densidade independente do potencial externo. Conhecer a densidade permite o cálculo do potencial externo, do hamiltoniano e da função de onda, mas ainda é necessária uma função de onda para que ρ obtenha bons resultados. E para chegar na energia eletrônica de diversas contribuições, surge a proposta de utilizar funcionais aproximados,

$$E[\rho] = T[\rho] + V_{Ne}[\rho] + V_{ee}[\rho] + E^{XC}[\rho], \quad (2)$$

onde $T[\rho]$ é a energia cinética dos elétrons não-interagente, $V_{Ne}[\rho]$ o potencial externo, $V_{ee}[\rho]$ o potencial de interação elétron-elétron e $E^{XC}[\rho]$ a energia de troca e correlação. O último termo pode ser separado em um termo de troca $E^X[\rho]$ e um termo de correlação $E^C[\rho]$. O segundo

Tabela 1: Parâmetros de entrada para o cálculo realizado pelo ORCA.

ORCA input	
	Especificação de Trabalho
Tipo de Trabalho	Frequências
Tipo de Método	Funcionais Híbridos
Método	B3LYP
Estado excitado	Não
Bases	6-31G* / 6-31G**

**Figura 2:** Modelo do ciclo de cálculos do DFT. Fonte: [12]

teorema de Hohenberg-Kohn permite o cálculo de um conjunto de orbitais ϕ^{KS} , que minimizam $E[\rho]$, utilizando o operador de um elétron de Kohn-Sham \hat{h}_i^{KS} , equacionado como

$$\hat{h}_i^{KS} = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \sum_k^{\text{núcleos}} v_i \frac{Z_k}{|r_i - r_k|} + \int \frac{\rho(r')}{|r_j - r'|} dr' + V^{XC}, \quad (3)$$

em que $V^{XC} = \delta E^{XC} / \delta \rho$ é o potencial de troca e correlação, acessível caso se tenha valores da energia de troca e correlação E^{XC} . Após a resolução das equações de Kohn-Sham, os orbitais são calculados e tem-se uma nova densidade eletrônica [12], em um ciclo que é refeito tantas vezes for necessário até que os critérios iniciais sejam satisfeitos, como mostra a Figura 2.

2.2 Aproximações dos potenciais e funcionais híbridos

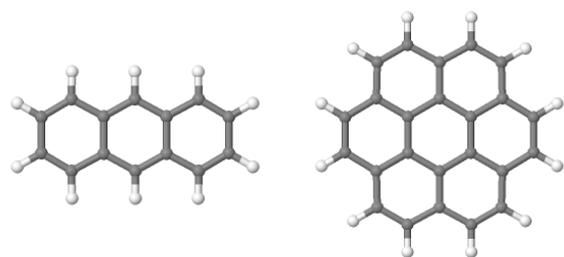
O potencial de troca e correlação E^{XC} não possui solução analítica e a utilização de aproximações é necessária. Dentre as mais conhecidas, estão a Aproximação da Densidade Local (LDA -

Local Density Approximation) e a Aproximação do Gradiente Generalizado (GGA - Generalized Gradient Approximation). Ambas as aproximações têm alta eficácia e baixo custo computacional, porém podem não ser adequadas em outras utilizações mais complexas. Neste caso, a literatura aponta para os *funcionais híbridos*, desenvolvidos a partir da combinação de funcionais para a energia de troca com um funcional para a energia de correlação de diferentes métodos.

Este trabalho utiliza o funcional híbrido B3LYP, também utilizado pelo NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database (PAHdb) na modelagem do antraceno disponível na biblioteca [13, 14]. Além disso, entre 2015-2020 o B3LYP aparece em aproximadamente 4.697 ocorrências dos 5.926 funcionais híbridos da categoria Físico-Química do Science Citation Index Expanded - SCIE, aproximadamente 80% [15]. O aspecto híbrido desse funcional é comprovado na energia de troca e correlação E_{xc} , descrito pela seguinte equação,

$$E_{xc} = (1 - a_0)E_x^{LDA} + a_0E_x^{HF} + a_xE_x^{B88x} + a_cE_c^{LYP88} + (1 - a_c)E_c^{VWN80}, \quad (4)$$

onde os três primeiros termos são as aproximações LDA, HF e Becke 1988 (B88) para interação de troca, os dois últimos termos são aproximações Lee-Yang-Parr 1988 (LYP88) e Vosko-Wilks-Nusair 1980 (VWN80) para correlação eletrônica, e os coeficientes $a_0 = 0,2$, $a_x = 0,72$ e $a_c = 0,81$ são parâmetros definidos experimentalmente. Devido à combinação de diferentes parâmetros diferentes de cálculo, o método B3LYP permite a obtenção de resultados satisfatórios e que dependem das propriedades desejadas do objeto de estudo. Também existe uma variação desse funcional, o CAM-B3LYP, que possui resultados superiores aos do funcional B3LYP, porém



(a) Catacondensado.

(b) Pericondensado.

Figura 3: Exemplos de estruturas moleculares. Fonte: NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database (PAHdb).

com um alto custo computacional. Por isso, não será abordado aqui, mas deixado como possibilidade de um novo estudo utilizando este método.

2.3 Hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs)

Os PAHs são compostos orgânicos arranjados em anéis aromáticos, apresentam estruturas hexagonais ligadas à sua estabilidade e são classificados em pericondensados, catacondensados e aqueles com uma ligação simples entre carbonos. Como visto na Figura 3, enquanto os catacondensados são lineares, os pericondensados são núcleos compactos de carbono, o que garante mais estabilidade a molécula.

Vários objetos astronômicos como regiões HII e estrelas ricas em carbono possuem bandas de emissão atribuídas aos PAHs, bem como nebulosas planetárias e galáxias de núcleo ativo (AGNs). Isso infere que são materiais resistentes e abundantes no ISM [2]. A intensa radiação ultravioleta (UV) dessas regiões atinge essas moléculas, que ficam altamente excitadas, vibram e emitem no IR, durante o processo de desexcitação [16]. A Figura 4 apresenta espectros de pequenos PAHs, em que é possível perceber a semelhança nas posições de banda, uma vez que são construídos de uma mesma unidade básica.

Perto de 50% da luminosidade no MIR pode ser associada às bandas de emissão mais intensa dessas moléculas. Estas variam de acordo com o tamanho, a geometria molecular e são características dos modos de excitação vibracional, *bending* (dobramento) e *stretching* (estiramento) [17]. As características da emissão dos PAHs são bem conhecidas na literatura [16], no entanto este trabalho se dedica ao intervalo entre 5-15 μm , apre-

Tabela 2: Características de emissão IR interestelar e PAHs. Fonte: Adaptado de [16].

Bandas de emissão e modo de excitação	
5.2 μm	C-H flexão e C-C alongamento
5.65 μm	C-H flexão e C-C alongamento
6.2 μm	C-C alongamento
7.6 μm	C-C alongamento e C-H flexão
7.8 μm	C-C alongamento e C-H flexão
8.6 μm	C-H flexão
11.0 μm	C-H flexão
11.2 μm	C-H flexão
12.7 μm	C-H flexão
13.6 μm	C-H flexão
14.2 μm	C-H flexão

sentado na Tabela 2.

2.4 Base de dados do NASA Ames PAH IR

O PAHdb reúne espectros de simulações experimentais e computacionais de PAHs, na faixa espectral de 2,5 - 4000 μm . Contém dados de PAHs puros (carbono e hidrogênio) e espécies com nitrogênio, oxigênio ou magnésio, bem como em seus estados neutros e ionizados. Disponibiliza estruturas, fórmulas químicas, conversão de vibração, referências da literatura e outros atributos, quando disponíveis. Todas essas informações podem ser baixadas no módulo de tabela XML ou ASCII de uma única molécula ou um *cluster* molecular.

Além disso, fornece várias interfaces de programação de aplicativos (API, *Interface de Programação de Aplicativos*, em inglês), como AmesPAHdbIDLSuite, AmesPAHdbPythonSuite e uma versão simplificada do conjunto de ferramentas pyPAHdb [18]. Atualmente, contém 4.233 espécies teóricas na versão 3.20 e 84 espécies experimentais na versão 3.00. Além disso, será de grande importância nas futuras observações do James Webb Space Telescope (JWST).

Esta biblioteca online e de livre acesso será utilizada para compararmos os resultados obtidos com espectros disponíveis da mesma molécula. Também será possível inferir qual função de base melhor se adéqua ao encontrado na literatura. Os

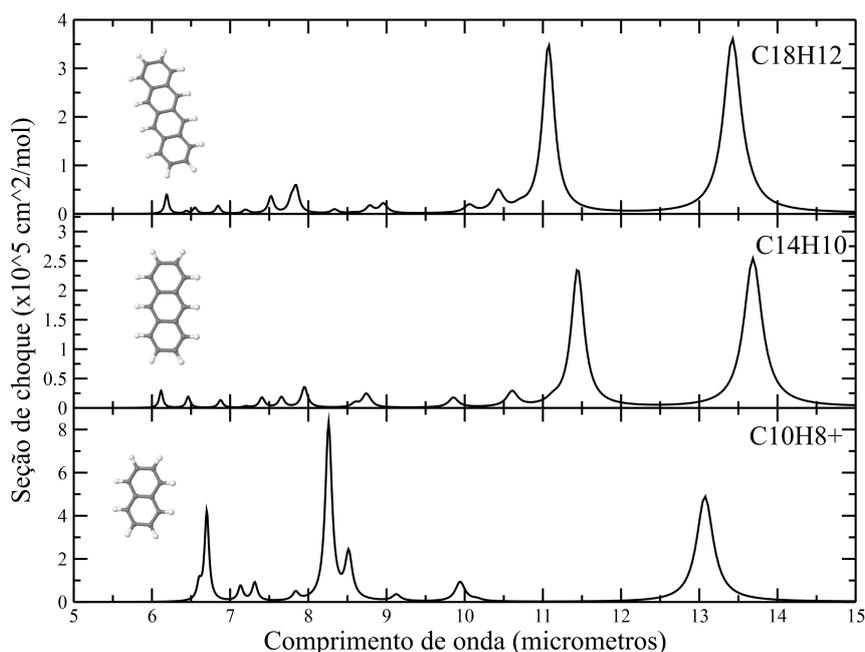


Figura 4: Espectro IR de PAHs. Fonte: NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database (PAHdb).

resultados também serão comparados com dados espectroscópicos de galáxias, a fim de verificar a presença do PAH antraceno nessas regiões. Uma vez que encontra-se na literatura o uso desse tipo de modelagem para tal fim [19].

3 Resultados e discussões

A Figura 5 apresenta os espectros no IR do PAH antraceno, obtidos com as diferentes funções de base. É possível perceber os picos de emissão em regiões próximas às bandas de emissão associadas aos PAHs interestelares. Notamos leve diferença entre as posições e também na intensidade de bandas. A comparação entre os dados disponíveis na biblioteca de referência permite notar um avermelhamento nas bandas vibracionais, mesmo utilizando a função de base 6-31G*, descrita pelos autores do PAHdb [7–9].

A Figura 6 mostra os resultados obtidos pela nossa modelagem do antraceno e da modelagem realizada pelo PAHdb da mesma molécula. Podemos perceber que a modelagem realizada neste trabalho possui um desvio para o vermelho nas bandas de emissão, especialmente nos comprimentos de onda de 11,9 e 14,1 μm .

Uma possibilidade para essa ocorrência é o fato de existirem estados de excitação muito baixos na molécula em questão, o que em nosso trabalho foi

desconsiderado. Ainda, a aproximação realizada pelo B3LYP desconsidera a anarmonicidade, ou seja, reduz um sistema de 24 átomos, o antraceno em questão, a um oscilador harmônico.

A Figura 7 mostra o espectro PAHdb contrastado ao resultado obtido com a função de base 6-31G**. É possível perceber uma maior semelhança entre ambos, com bandas de emissão mais próximas, em 11,7 μm e 13,9 μm . Utilizar uma função mais complexa contribuiu para um melhor resultado.

Os métodos de cálculos numéricos realizam aproximações que permitem a resolução para sistemas complexos, como moléculas de PAH. Embora a espécie escolhida seja pequena e simples, comparada à complexidade das emissões interestelares, é necessária a inclusão de funções que descrevam propriedades moleculares e mantenham semelhança com dados experimentais já conhecidos.

Para isso, constatou-se a necessidade da inclusão de funções que permitam maior aproximação dos resultados [6]. Essas funções são classificadas em dois tipos principais: funções de polarização e funções difusas. As funções de polarização descrevem distorções na nuvem eletrônica. Já as funções difusas são indicadas para sistemas iônicos, pois descrevem a expansão da nuvem eletrônica desses sistemas.

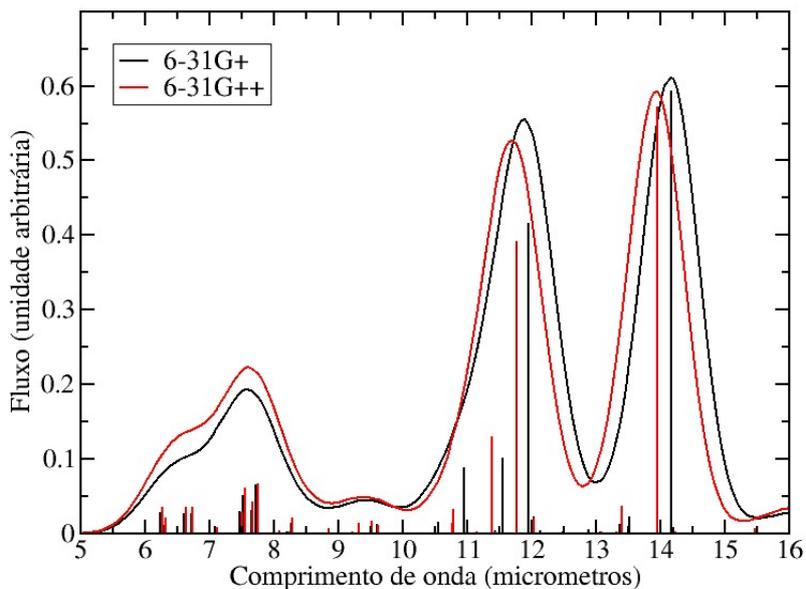


Figura 5: Espectros obtidos com as função de base 6-31G* e 6-31G**, utilizando FWHM = 5. Fonte: Gabedit

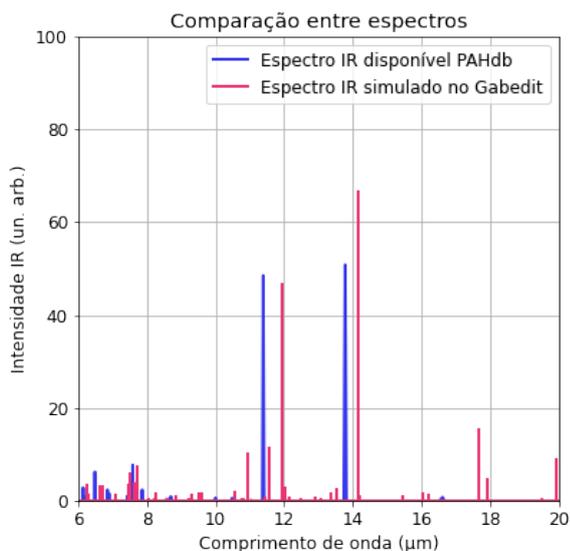


Figura 6: Comparação entre espectro PAHdb e simulado com a função de base 6-31G*.

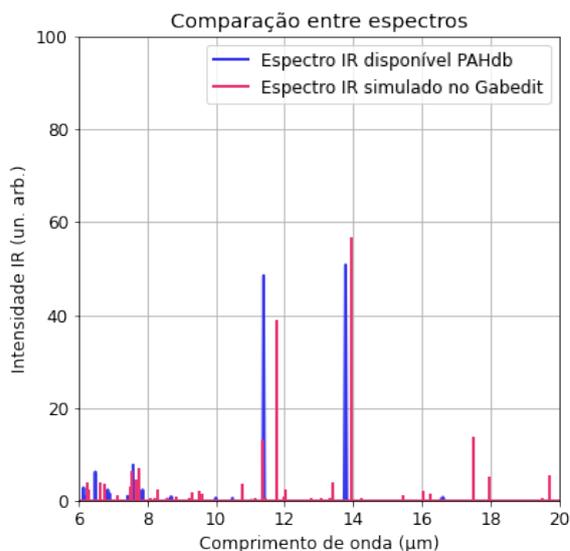


Figura 7: Comparação entre espectro PAHdb e simulado com a função de base 6-31G**.

Os dois conjuntos de base utilizados neste trabalho foram sugeridos por Pople e colaboradores [6], e os símbolos (* e **) indicam a inclusão de funções de polarização somente para átomos diferentes de hidrogênio ou a inclusão em todos os átomos do sistema, respectivamente. Esse fato justifica os resultados obtidos, uma vez que a espécie escolhida possui 10 átomos de hidrogênio que foram desconsiderados na primeira simula-

ção. Já o segundo conjunto, 6-31G**, aplica funções de polarização em todos os átomos do sistema, contribuindo para um melhor resultado.

A Figura 8 apresenta os resultados obtidos em paralelo com dados espectroscópicos de galáxias do tipo Starburst, Seyfert 1 e Seyfert 2, disponíveis na amostra do Projeto Spitzer/ATLAS [5]. Percebe-se que as emissões dos espectros simulados podem prever as bandas de PAH presentes

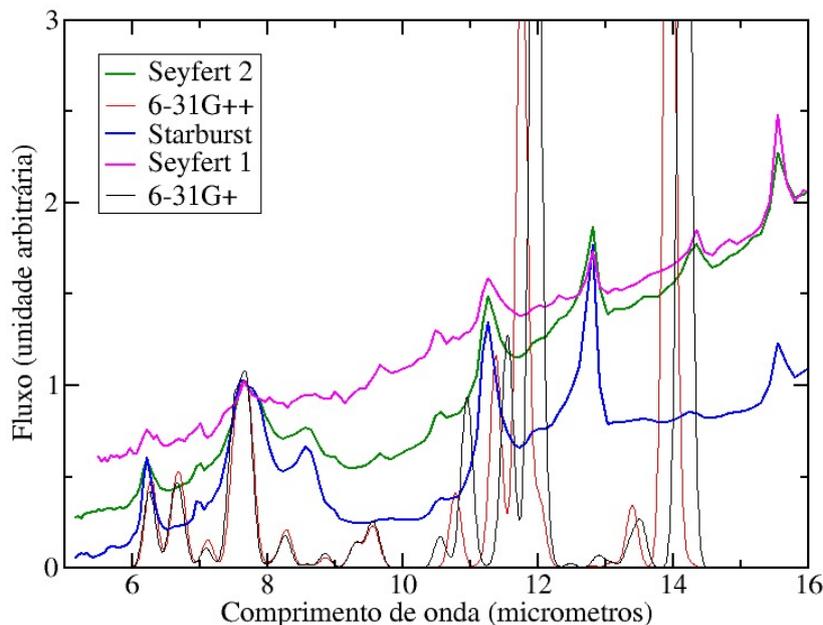


Figura 8: Análise dos resultados com dados espectroscópicos de galáxias Seyfert 1, Seyfert 2 e Starburst.

nessas galáxias, em comprimentos de onda mais azuis entre 6 e 10 μm . Essa característica em galáxias ativas permite estimar, ainda que indiretamente, a taxa de formação estelar [5].

É necessário citar que o funcional híbrido utilizado combina dois métodos de cálculo – uma parcela mais adequada para moléculas grandes (DFT), mas com resultados pouco confiáveis; e uma parcela complementar, indicada para moléculas pequenas (*ab initio*), mas que fornece mais precisão. Isso garante um resultado mais próximo ao experimental. O uso de diferentes funções de base altera importantes propriedades moleculares, o que possibilita analisar qual é mais adequada ao sistema proposto, sendo, neste caso, o PAH antraceno.

Os resultados obtidos através do uso da DFT, com dois conjuntos de base demonstraram-se satisfatórios. Uma vez que a modelagem computacional da molécula antraceno identificou contribuições em comprimentos de onda mais azuis no intervalo de 6 a 10 microns, as mesmas observadas em galáxias ativas. Nesse sentido podemos concluir que essa molécula pode estar presente em objetos extragalácticos. Além disso mudanças nos parâmetros de cálculo mostrou que ferramentas computacionais possibilitam a resolução de sistemas complexos como os PAHs.

4 Conclusões

A astroquímica vem se expandido nas últimas décadas devido à grande quantidade de dados disponíveis e ao avanço nos métodos de cálculo. Dentre as diversas classes moleculares existentes no ISM, os PAHs possuem grande importância para se entender a química de ambientes astrofísicos. Os PAHs são responsáveis por grande parte da luminosidade no MIR, pois eles aquecem ao absorver um fóton de radiação UV e, durante o processo de desexcitação, emitem em IR. Devido a sua resistência, compõem o material orgânico predominante do espaço e podem combinar-se com nitrogênio, tornando-se PANHs (heterocíclicos policíclicos aromáticos nitrogenados), que podem exercer importante papel na origem da vida no Universo.

A simulação realizada permitiu identificar as bandas de emissão predominantes do antraceno, bem como inferir as características nas frequências vibracionais encontradas ao se utilizar funções de base distintas, o que mostra a relação existente entre a complexidade e a eficiência do método. Nossos resultados foram bastante satisfatórios, uma vez que foi possível obter informações semelhantes ao espectro de referência. Além da identificação de bandas de emissão em intervalos observados em galáxias ativas.

Ainda, métodos computacionais permitem

aproximar os estudantes de processos complexos, como o espectro do PAH antraceno, sem a necessidade de supercomputadores. Como perspectiva de continuação para este trabalho, pretendemos simular moléculas maiores do que o disponível na literatura, uma vez que em galáxias ativas podemos encontrar espécies de até 1000 átomos de carbono [17], enquanto o maior PAH na amostra do PAHdb possui em torno de 300 átomos de carbono.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001. D. A. Sales agradece ao CNPq e FAPERGS.

Sobre as autoras

Rosiane Carneiro da Rosa (rosianecarneiroda-rosa@outlook.com) é Graduada em Física pelo Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Farroupilha - Campus São Borja (2019). Mestranda em Física na Universidade Federal do Rio Grande e possui foco de suas pesquisas na área de astroquímica, atuando principalmente nas pesquisas em moléculas complexas e simulações computacionais.

Dinalva Aires de Sales (dinalvaires@gmail.com) é Graduada em Matemática pela Universidade do Vale do Paraíba (2005), Mestre em Física e Astronomia pela Universidade do Vale do Paraíba (2007) e Doutora em Física pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul (2012). Foi NASA Postdoctoral Fellow no Rochester Institute of Technology (2012/2013) e pós-doutoranda da DOCFIX-FAPERGS/CAPES na Universidade Federal do Rio Grande do Sul (2013/2016). Tem experiência na área de Astrofísica, atuando principalmente nos seguintes temas: núcleo ativo de galáxia, galáxias em interação, moléculas complexas, espectroscopia e imageamento. Atualmente é professora adjunta do Instituto de Matemática, Estatística e Física (IMEF) da Universidade Federal do Rio Grande (IMEF-FURG) e Coordenadora do Programa de Pós-Graduação em Física (PPG-Física) do IMEF-FURG.

Carla Martinez Canelo (camcanelo@gmail.com) é Graduada em Física pela Universidade de São Paulo (2013). Também é Mestra (2016) e Doutora (2020) em Astronomia pela mesma instituição. Possui experiência na área de Astronomia, com ênfase em Astrobiologia e Astroquímica, e em divulgação científica.

Brenda Matoso Abreu Miranda (brendamatoso@live.com) é Graduada em Física pelo Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Farroupilha - Campus São Borja (2017). Especialista em Docência do Ensino Superior pela Universidade Anhanguera (2019) e Mestra em Física pela Universidade Federal do Rio Grande - FURG (2020).

Referências

- [1] 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](https://arxiv.org/abs/1305.6243).
- [2] A. G. G. M. Tielens, *The molecular universe*, *Rev. Mod. Phys.* **85**, 1021 (2013).
- [3] C. M. Canelo, *O mundo aromático – dos PAHs no meio interestelar às condições bióticas*, Dissertação de Mestrado, IAG - Universidade de São Paulo, São Paulo (2016). Disponível em <https://www.iag.usp.br/pos/>, acesso em jul. 2021.
- [4] S. Iglesias-Groth, A. Manchado et al., *A search for interstellar anthracene towards the Perseus anomalous microwave emission region*, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **407**(4), 2157 (2010).
- [5] A. Hernan-Caballero e E. Hatziminaoglou, *An atlas of mid-infrared spectra of star-forming and active galaxies*, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **414**, 500 (2011). [ArXiv: 1101.4794](https://arxiv.org/abs/1101.4794).
- [6] N. H. Morgon e R. Custódio, *Funções de base: o ajuste variacional*, *Revista Chemkeys* (2), 1 (2018).
- [7] J. Bauschlicher, Charles W., A. Ricca et al., *The NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database: Computational version 3.00 with up-*

- dated content and the introduction of multiple scaling factors*, *The Astrophysical Journal Supplement Series* **234**(2), 32 (2018).
- [8] C. Boersma, C. W. Bauschlicher 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 Series* **211**(1), 8 (2014).
- [9] A. L. Mattioda, D. M. Hudgins et al., *The NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database: The laboratory spectra*, *The Astrophysical Journal Supplement Series* **251**(2), 22 (2020).
- [10] P. A. M. Dirac e R. H. Fowler, *Quantum mechanics of many-electron systems*, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **123**(792), 714 (1929).
- [11] P. Hohenberg e W. Kohn, *Inhomogeneous Electron Gas*, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
- [12] R. T. Santiago, *Novas parametrizações de funcionais híbridos para uso em cálculos relativísticos*, Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo, São Paulo (2014). Disponível em <https://doi.org/10.11606/D.75.2014.tde-27012015-093530>, acesso em jul. 2021.
- [13] A. Mattioda, C. Bauschlicher et al., *Infrared spectroscopy of matrix-isolated neutral polycyclic aromatic nitrogen heterocycles: The acridine series*, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* **181**, 286 (2017).
- [14] S. Langhoff, *Theoretical infrared spectra for polycyclic aromatic hydrocarbon neutrals, cations and anions*, *The Journal of Physical Chemistry* **100**(8), 2819 (1996).
- [15] *Science citation index expanded - scie*. Disponível em <https://www.webofscience.com>, acesso em jul. 2021.
- [16] A. G. G. M. Tielens, *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium* (Cambridge University Press, 2005).
- [17] D. A. Sales, M. G. Pastoriza et al., *Polycyclic aromatic hydrocarbon in the central region of the Seyfert 2 galaxy NGC1808*, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **429**(3), 2634 (2013). [ArXiv:1212.1357](https://arxiv.org/abs/1212.1357).
- [18] Matthew J. Shannon e Christiaan Boersma, *Organic molecules in space: Insights from the NASA Ames Molecular Database in the era of the James Webb Space Telescope*, in *Proceedings of the 17th Python in Science Conference*, editado por Fatih Akici, David Lippa et al. (2018), 99 – 105.
- [19] B. M. A. Miranda, D. A. Sales et al., *Estudo da emissão do benzeno em galáxias usando a teoria do funcional de densidade*, *Rev. Mundi Eng. Tecnol. Gest.* **4**, 136 (2019).