

Investigação de Modelos de Formação de Glicolaldeído no Meio Interestelar (ISM).

Hemilly O. Souza (PG)*¹, Neubi Francisco Xavier Junior (PQ)², Glauco F. Bauerfeldt (PQ)¹

hemillyoliveirasouza@gmail.com

1: Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Brasil; 2: University of Surrey, England.

Palavras Chave: glicolaldeído, ISM, astroquímica, cinética química

Introdução

Cerca de um terço do meio interestelar (ISM) é constituído por moléculas compostas por seis ou mais átomos, sendo estas constituídas de pelo menos um átomo de carbono, chamadas de Moléculas Orgânicas Complexas (COMs). Apesar da presença das COMs serem conhecidas há décadas, o processo que leva a síntese delas é ainda amplamente debatido.¹ A descoberta do açúcar mais simples, glicolaldeído (HCOCH₂OH), detectado em diversas regiões do ISM, entre elas em direção ao complexo de nuvens moleculares gigantes SgrB2,² chama atenção da comunidade científica por conta do seu potencial prebiótico.

O objetivo deste trabalho é analisar as possíveis rotas de formação do glicolaldeído a partir da investigação e determinação de propriedades termodinâmicas e cinéticas das reações elementares em fase gasosa. Para tal, o estudo teórico foi realizado com procedimentos de otimização de geometria e análise de frequência de pontos estacionários em nível M06-2X/aug-cc-pVTZ e cálculos de ponto único em nível CCSD(T)/aug-cc-pVTZ para todos os pontos estacionários, de forma a atingir melhores resultados para as energias eletrônicas. Os coeficientes de velocidade foram calculados com o programa KCVT, adotando o método de estado de transição variacional canônico,³ em uma faixa de temperatura entre 100 e 400 K.

Resultados e Discussão

No primeiro momento, as possibilidades conformacionais do glicolaldeído foram investigadas, sendo determinada a conformação cis como a de menor energia. Partiu-se então para a localização de pontos de sela e propostas de possíveis canais que levam à formação de glicolaldeído.

Os resultados são sintetizados na Tabela 1 e sugerem que R3, R4 e R5 são os canais mais prováveis para a formação do glicolaldeído, tanto do ponto de vista cinético quanto termodinâmico (uma vez que as reações são altamente exotérmicas e sem barreiras ou com barreiras muito pequenas). Todos os valores são corrigidos por energia vibracional de ponto zero e relativos ao conformero CC.

A Figura 1 apresenta os coeficientes de velocidade obtidos pelo método variacional canônico. No

gráfico é possível observar a menor inclinação de R5 quando comparada com R1 e R2, o que demonstra uma baixa energia de ativação e conseqüentemente, uma maior velocidade de reação, o que pode ser visualizado pela barreira.

Tabela 1. Diferenças de energia (ΔE° , kcal/mol) e barreiras (V^\ddagger , kcal/mol) de reação obtidas em nível CCSD(T)/aug-cc-pVTZ//M06-2X/aug-cc-pVTZ.

	Reação	ΔE°	V^\ddagger
R1	$\text{CO} + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{HOCH}_2\text{CHO}$	0,75	86,1
R2	$\text{H}_2\text{O} + \text{CH}_2\text{CO} \rightarrow \text{HOCH}_2\text{CHO}$	-5,25	77,1
R3	$\text{HCO} + \text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{HOCH}_2\text{CHO}$	-78,9	-
R4	$\text{OH} + \text{CH}_2\text{CHO} \rightarrow \text{HOCH}_2\text{CHO}$	-85,3	-
R5	$\text{H}_2\text{CO} + \text{HCOH} \rightarrow \text{HOCH}_2\text{CHO}$	-73,2	10,1

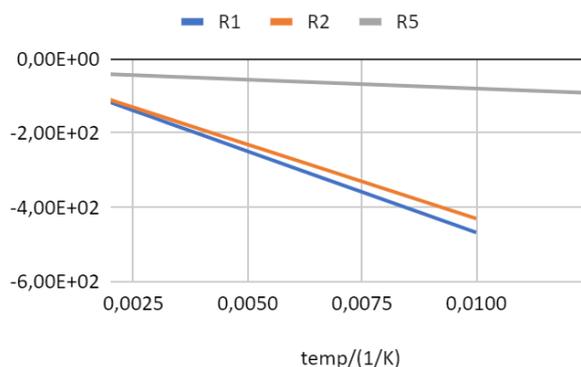


Figura 1. Coeficientes de velocidade obtidos para as reações R1, R2 e R5, na faixa de 100 a 400 K.

Conclusões

As reações R3, R4 e R5 são as rotas mais prováveis de formação de glicolaldeído no ISM, sendo R5 a que apresenta maiores coeficientes de velocidade. Esse estudo se mostra importante para encorajar novas pesquisas referentes à formação de açúcar no ISM com potencial prebiótico.

Agradecimentos

À FAPERJ e CAPES.

1. SKOUTERIS, et. al. *ApJ* **2018**, *854*, 135.

2. HOLLIS, et.al *ApJ* **2000**, *540*, L107.

3. VIEIRA, G. S. et al. Assessment of Uni and Bimolecular Reaction Kinetics of Dimethoxymethane with the KINPRO Package. In: 10th European Combustion Meeting, 2021, Virtual Edition. Proceedings of the European Combustion Meeting 2021, 2021.