

ESTUDO DA EMISSÃO DO BENZENO EM GALÁXIAS USANDO A TEORIA DO FUNCIONAL DE DENSIDADE *STUDY OF BENZENE EMISSION IN GALAXIES USING FUNCTIONAL DENSITY THEORY*

Brenda Matoso Abreu Miranda¹
Dinalva Aires de Sales²
João Thiago de Santana Amaral³
Cristiano Brenner Mariotti⁴
Juliano Rosa de Menezes Vicenti⁵

Resumo: Uma das perguntas fundamentais da astroquímica é entender como o material pré-biótico, DNA, RNA e PNA (ácidos nucleicos encontrados nas células humanas), foi formado ao longo da evolução do universo e por consequência, como chegou até a Terra para formar a vida. Neste sentido, é crucial observar o material orgânico em galáxias, pois assim temos a oportunidade de olhar para o passado e tentar compreender as reações químicas primordiais. O Benzeno, identificado pelo cientista Michael Faraday no ano de 1825, possui em sua estrutura molecular 6 carbonos e 6 hidrogênios e é a molécula base dos compostos orgânicos mais abundantes na poeira em galáxias, os hidrocarbonetos aromáticos policíclicos - PAHs. Sabe-se também que uma parte significativa, cerca de 20%, do carbono presente no meio interestelar se encontra na forma de PAHs. Devido ao grande interesse nessa classe de moléculas, neste artigo são estudadas as assinaturas no espectro eletromagnético da molécula de Benzeno através da plataforma denominada Gabedit, que utiliza uma aproximação quântica, a Teoria do Funcional da Densidade. O uso da modelagem computacional da molécula de Benzeno aliada a aproximações derivadas da mecânica quântica, possibilita a identificação de bandas de emissão nas galáxias N7682, N5728 e N3786 que podem estar relacionadas a presença da molécula de Benzeno.

Palavras-chave: Benzeno, Teoria do Funcional da Densidade, B3LYP, Modelagem Computacional.

¹ Mestranda, Universidade Federal do Rio Grande, brendamatoso@live.com

² Doutora, Universidade Federal do Rio Grande, dinalvaires@gmail.com

³ Doutor, Universidade Federal do Rio Grande, jtamaral@gmail.com

⁴ Doutor, Universidade Federal do Rio Grande, cristianomariotto@furg.br

⁵ Doutor, Universidade Federal do Rio Grande, julianovicenti@gmail.com

Abstract: One of the fundamental questions of astrochemistry is to understand how the prebiotic material, DNA, RNA and PNA (nucleic acids found in human cells) was formed throughout the evolution of the universe and consequently how it came to Earth to form life. In this sense, it is crucial to observe the organic material in galaxies, so that we have the opportunity to look back and try to understand the primordial chemical reactions. The Benzene, identified by the scientist Michael Faraday in 1825, has in its molecular structure 6 carbons and 6 hydrogens and is the base molecule of the most abundant organic compounds in galaxies, the polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). It is also known that a significant part, 20%, of the carbon present in the interstellar medium is in the form of PAHs. Due to the great interest in this class of molecules, in this article we study the signatures in the electromagnetic spectrum of the Benzene molecule through the platform Gabedit, which uses a quantum approximation, Density Functional Theory. The use of the computational modeling of the Benzene molecule, coupled with quantum mechanics approaches, allows the identification of emission bands in galaxies N7682, N5728 and N3786 that may be related to the presence of the Benzene molecule.

Keywords: Benzene. Density Functional Theory. B3LYP. Computational modeling.

1 INTRODUÇÃO

A espectroscopia é uma área da ciência que se preocupa em estudar a interação da luz com a matéria e é uma ferramenta fundamental para o estudo na Astronomia. Ela é capaz de revelar as propriedades mais inerentes de uma galáxia, conectando a Astronomia à Física em seus níveis atômicos e moleculares. (PRADHAN, 2011, p.1)

Vários compostos químicos, orgânicos e inorgânicos, que possuam ligações covalentes emitem ou absorvem radiação eletromagnética com frequências na região do infravermelho. Existem algumas formas de uma molécula emitir em comprimento de onda no infravermelho. Neste artigo nos deteremos à modelagem computacional do espectro gerado pelos modos vibracionais da molécula de benzeno e suas comparações ao espectro observado pelo telescópio espacial Spitzer de 3 galáxias com surto de formação estelar.

Cerca de 20% do carbono do meio interestelar está na forma de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (da sigla em inglês PAHs), moléculas que dominam a emissão nas bandas do infravermelho médio (CANELO, 2016, p.25). De acordo com Berné et al. (2015), estima-se que moléculas compostas por carbonos, como os PAHs, possuem um papel de extrema importância no meio interestelar. O Benzeno é o composto orgânico que forma a família de hidrocarbonetos aromáticos (CHANG, 2010, p. 356). De acordo com registros históricos, o primeiro cientista a identificar o Benzeno foi Michael Faraday, no ano de 1825, enquanto estudava um resíduo oleoso procedente de um gás de iluminação. Antes disso, era sabido que apenas o Benzeno era formado por seis átomos de carbono e seis de hidrogênio (C₆H₆), porém a estrutura do benzeno ainda era uma incógnita. Então surge o cientista Friedrich August Kekulé, no ano de 1865, que foi o primeiro a identificar e propor uma estrutura para o Benzeno que explicasse efetivamente todas as suas características. Em Astronomia a primeira observação realizada de moléculas formadas por Benzeno, hidrocarbonetos aromáticos policíclicos - PAHs, foi realizada por Gillette em 1975 (GILLETTE et al., 1975, p.64). Os PAHs são moléculas

orgânicas que possuem uma rede hexagonal planar aromática formada por átomos de carbono e hidrogênio (SALES, 2012, p.24).

1.1 A Estrutura da Molécula de Benzeno

A molécula de Benzeno pertence à classe dos hidrocarbonetos, ou seja, possui apenas carbonos e hidrogênios em sua composição. A estrutura molecular do Benzeno é composta por seis átomos de carbono e seis de hidrogênio.

É explicado pela química que o átomo de carbono pode fazer quatro ligações classificadas em três tipos: simples, dupla e tripla. Aqui nos concentraremos nas duas primeiras. A ligação simples denominamos de ligação sigma, σ . Este tipo de ligação é responsável pela interação frontal dos orbitais moleculares, como exemplificado na Figura 1.a, onde é possível ver dois átomos de carbono em ligação simples.

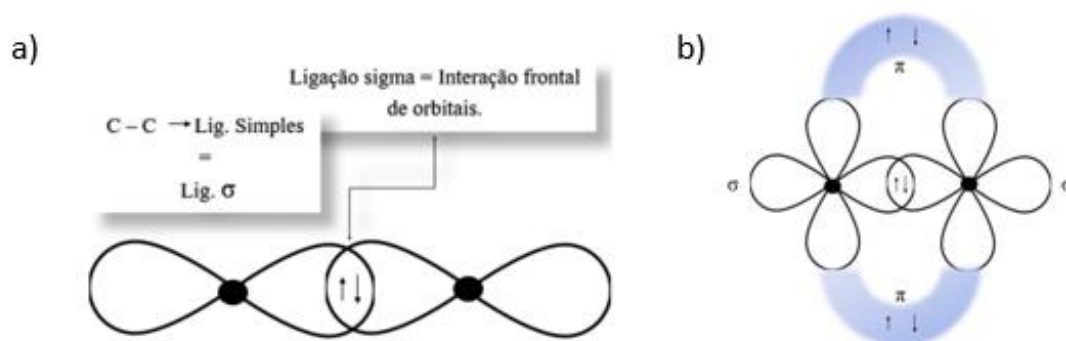


Figura 1 – a) Orbitais Sigma; b) Orbitais π

A ligação dupla denomina-se de ligação pi, π . A ligação π é dependente direta da ligação σ , pois quando se tem uma ligação dupla a primeira será sempre sigma (σ) e a segunda será pi (π). Na Figura 1.b pode-se observar a interação paralela entre orbitais ocasionada pela ligação dupla entre dois carbonos.

Por enquanto vamos nos deter apenas à estrutura formada pelos carbonos. No Benzeno os carbonos formam o que chamamos de geometria trigonal plana, com ligações simples (σ) e duplas (π) distribuídas alternadamente pela molécula, conforme figura 2.

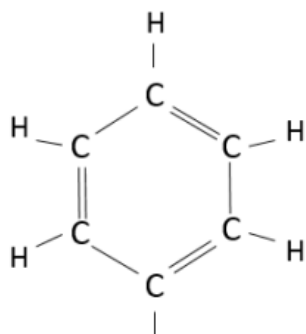


Figura 2 - Estrutura do Benzeno

O que acontece no Benzeno é que todos os seus carbonos participam de uma das ligações duplas, logo não podemos afirmar que a figura 2 está totalmente correta, pois as ligações duplas poderiam estar distribuídas de outra maneira, como na figura 3-a ou 3-b. Em consequência disso, assume-se que a melhor representação da mesma é um híbrido de todas as possibilidades de configurações da molécula. Desta forma o Benzeno é representado pela figura 3-c.

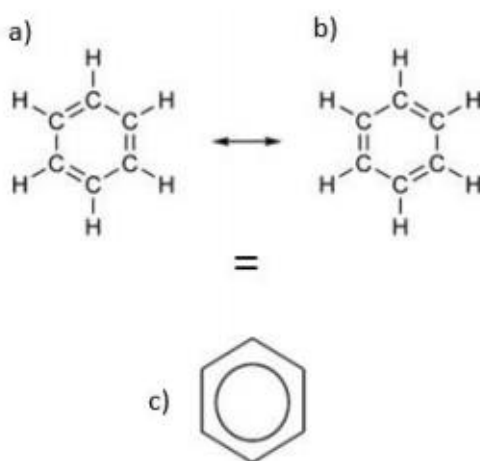


Figura 3 - Híbrido de todas as configurações possíveis da molécula de Benzeno

Outra consequência, proveniente das ligações duplas em todos os carbonos do Benzeno, é a sua deslocalização eletrônica, já que os carbonos participam de ligações π e todos eles formam orbitais paralelos. No Benzeno existem 42 elétrons distribuídos par a par em cada orbital. 24 elétrons estão nos orbitais de interação frontal, ou seja, nas ligações sigma, e são distribuídos localizadamente. Porém os carbonos com ligações π formam três orbitais paralelos de interação dos pares de elétrons. Nesse tipo de interação os elétrons circulam livremente entre os orbitais, formando uma nuvem acima e abaixo do plano do anel benzênico, que é a região de maior probabilidade de encontrarmos esses elétrons. A essa distribuição deslocalizada de elétrons no Benzeno dá-se o nome de **Ressonância**.

1.2 Modos Vibracionais

No decorrer da década de 1860, James C. Maxwell conseguiu mostrar a possibilidade de se encontrar uma equação de onda que pudesse descrever a propagação de um campo magnético, bem como uma equação para descrever a propagação do campo elétrico. Isto o levou a relacionar a luz a uma onda eletromagnética.

Entre as regiões do espectro eletromagnético existe a do infravermelho, que por sua vez é dividida em infravermelho próximo – NIR (do inglês Near Infrared), infravermelho médio – MIR (do inglês Middle Infrared) e infravermelho distante – FIR (do inglês Far Infrared) (HILZETTE, p.360, 2008). Na química, a principal região de interesse é a que se encontra no intervalo de comprimentos de onda entre 2,5 μm e 25 μm , por ser característica das emissões por vibrações moleculares.

Os principais modos vibracionais são os de estiramento e de deformação angular, representados na Fig. 4. nos modos de Deformações Axiais ocorre a variação da distância entre os átomos e nos modos de Deformações Angulares ocorre a variação dos ângulos formados pelas

ligações entre os átomos, conforme a figura pode-se notar que essas deformações podem ocorrer no plano ou fora do plano da ligação química.

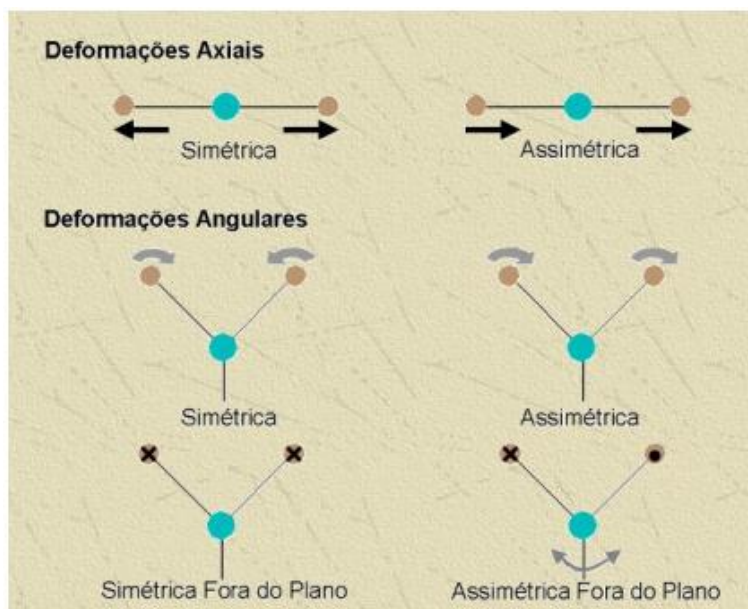


Figura 4 - Modos vibracionais de estiramento (deformações axiais) e de deformação angular (Fonte: Unesp - Campus Experimental de Sorocaba – Grupo de Plasmas e Materiais: <http://www2.sorocaba.unesp.br/gpm/ftir.htm>)

O Benzeno é a base da classe de moléculas de PAHs. No estudo de astroquímica extragaláctica as principais bandas de emissão do espectro eletromagnético se encontram no infravermelho médio, região característica de emissão por vibração molecular.

Sabe-se também que uma parte significativa, cerca de 20% (Li, 2004), da poeira presente no meio interestelar se encontra na forma de PAHs. Devido ao grande interesse nessa classe de moléculas, este artigo tem como objetivo, estudar o espectro eletromagnético da molécula de Benzeno através da plataforma denominada Gabedit, e o programa computacional ORCA, que utiliza a Teoria do Funcional da Densidade como método de aproximação para encontrar a frequência dos modos de vibração das moléculas.

2 DESENVOLVIMENTO

Para realizar a construção da molécula de Benzeno, foi utilizada a plataforma Gabedit. O Gabedit é um software livre que consiste em uma interface gráfica utilizada para trabalhar pacotes comuns na dinâmica molecular, como o Gamess-US, Gaussian, Orca, entre outros. Essa plataforma possibilita a construção de moléculas, a sua visualização em 3 dimensões, bem como uma grande variedade de opções de cálculos computacionais e aproximações.

Para obter o espectro eletromagnético da molécula de Benzeno, primeiro é necessário utilizar a opção *Draw Geometry*. Nela existe uma sessão com um banco de fragmentos moleculares (Figura 5.a), que evita a necessidade de ter que desenhar cada átomo das moléculas. Selecionando a opção *rings* é possível encontrar o fragmento da molécula de Benzeno.

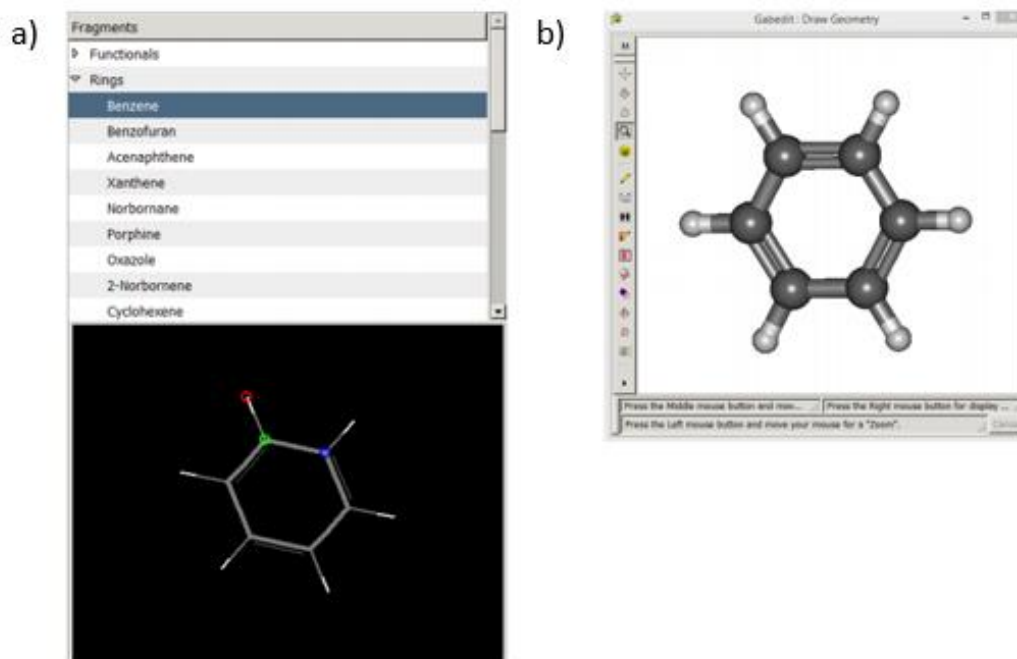


Figura 5 – a) Banco de fragmentos moleculares do Gabedit; b) Molécula de Benzeno modelada no Gabedit

Selecionando a opção “Benzene” e clicando no espaço em branco na janela Draw Geometry (Figura 4.b), temos a molécula de Benzeno pronta para ser trabalhada.

Fechando a janela Draw Geometry, inicia-se a escolha dos parâmetros de entrada para se obter o espectro eletromagnético do Benzeno. Para isso foi utilizado o código Orca, selecionando essa opção tem-se acesso a uma área com uma série de opções, onde é possível selecionar os parâmetros para configurar o que o código executará, nessas opções pode-se optar por realizar o cálculo no estado neutro ou excitado da molécula, escolher qual o tipo de cálculo, como por exemplo frequência ou orbitais moleculares, bem como, escolher entre os métodos de cálculo e aproximação como DFT, Hartree Fock, entre outras.

Na tabela 1 estão os principais parâmetros utilizados para o cálculo, onde consta como tipo de trabalho a opção frequências, que foi selecionada pelo fato de estar-se trabalhando com espectros eletromagnéticos. O cálculo foi realizado no estado não excitado utilizando o método dos Funcionais Híbridos – B3LYP.

Tabela 1 - Parâmetros de entrada selecionados para executar o cálculo no ORCA

Parâmetros de Entrada Para o Cálculo no ORCA	
Tipo de Trabalho:	Frequências
Tipo de Método:	Funcionais Híbridos
Método:	B3LYP
Estado excitado:	Não

Após a escolha dos parâmetros de entrada para o código Orca a ferramenta inicia o processo de cálculo numérico.

2.1 Teoria Do Funcional Da Densidade

A Teoria do Funcional de Densidade – DFT (do inglês Density Functional Theory), consiste em uma forma de tratamento de estruturas eletrônicas comumente utilizada em mecânica molecular e que advém da mecânica quântica. A equação formulada pelo físico Erwin Schrödinger (1926) descreve a evolução da função de onda de um sistema que contém toda a informação necessária para se compreender um sistema, seja ele um átomo, molécula ou sólido (SILVA, 2010, p.19).

A equação de Schrödinger independente do tempo pode ser descrita como,

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (1)$$

\hat{H} representa o hamiltoniano do sistema a ser estudado e que, aplicado na função de onda, ψ , devolve como resultado o produto da função de onda pela energia, E , do sistema.

O Hamiltoniano do sistema pode ser escrito da seguinte forma,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_{\alpha} \sum_{\beta > \alpha} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta} e^2}{R_{\alpha\beta}} - \sum_{\alpha} \sum_i \frac{Z_{\alpha} e^2}{|R_{\alpha} - r_i|} + \sum_i \sum_{i > j} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (2)$$

Onde \hbar é a constante de Planck, m_e a massa dos elétrons, Z_{α}, Z_{β} correspondem aos números atômicos dos núcleos, $R_{\alpha\beta}$ a distância entre os núcleos, e a carga do elétron, r_{ij} a distância entre os elétrons.

O primeiro termo representa a energia cinética do núcleo, \hat{T}_N , sendo este definido como,

$$\hat{T}_N = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 \quad (3)$$

onde m_{α} representa a massa dos núcleos e o operador ∇_{α}^2 é dado por

$$\nabla_{\alpha}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_{\alpha}^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_{\alpha}^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_{\alpha}^2}$$

O segundo termo representa a energia cinética dos elétrons em torno do núcleo, \hat{T}_e , que pode ser definido como,

$$\hat{T}_e = \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 \quad (4)$$

em que m_e representa a massa dos elétrons e \hbar a constante reduzida de Planck, dada por $\frac{h}{2\pi}$.

O terceiro e quarto termos representam, respectivamente, o potencial de interação núcleo-núcleo, \hat{V}_{NN} , e o potencial de interação núcleo-elétron, \hat{V}_{Ne} .

$$\hat{V}_{NN} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta > \alpha} \frac{z_{\alpha} z_{\beta} e^2}{R_{\alpha\beta}} \quad (5)$$

$$\hat{V}_{Ne} = - \sum_{\alpha} \sum_i \frac{z_{\alpha} e^2}{|R_{\alpha} - r_i|} \quad (6)$$

O último termo é o principal problema quando se utiliza a função de onda. Este termo representa a interação elétron-elétron, \hat{V}_{ee} .

$$\hat{V}_{ee} = \sum_i \sum_{i > j} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (7)$$

Podemos então escrever o Hamiltoniano do sistema como,

$$\hat{H} = \hat{T}_N + \hat{T}_e + \hat{V}_{NN} + \hat{V}_{Ne} + \hat{V}_{ee} \quad (8)$$

É possível trabalhar esse Hamiltoniano levando em consideração que a energia cinética do núcleo é muito inferior à dos elétrons e, dessa forma, sua contribuição energética para o sistema pode ser desprezada. Assim, eliminamos os termos envolvendo interações entre os núcleos e suas energias cinéticas, ficando apenas com os termos envolvendo as interações eletrônicas. O Hamiltoniano fica

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{V}_{Ne} + \hat{V}_{ee} \quad (9)$$

O último termo, \hat{V}_{ee} , traz algumas limitações quando precisamos trabalhar com sistemas que possuam muitos elétrons, pois cada elétron no sistema vai possuir as suas respectivas coordenadas cartesianas x, y, z. Desta forma, só é possível chegarmos a uma resolução analítica exata para o átomo de hidrogênio. No caso do Benzeno, que possui 42 elétrons na sua distribuição, torna-se inviável utilizarmos a função de onda, o que nos leva a buscar por alternativas de resoluções.

Dentre os métodos mais utilizados para resolver o problema do Hamiltoniano eletrônico está a Teoria do Funcional da Densidade (DFT). O modelo Thomas-Fermi, proposto por Llewlyn Thomas e Enrico Fermi no ano de 1927, é considerado o precursor da DFT e serviu de base para o seu desenvolvimento. O modelo sugere uma aproximação que leva em conta a densidade eletrônica ρ , e não a função de onda.

Através da Teoria do Funcional de Densidade foi possível reduzir a quantidade de coordenadas para apenas x, y e z, independente da quantidade de elétrons no sistema, pois agora a principal grandeza passa a ser a densidade eletrônica ρ (TRZESNIAK, 2002, p.19). A partir da DFT surgiram vários funcionais que são utilizados de forma combinada para se obter resultados mais relevantes. O Funcional Híbrido, escolhido para trabalhar a molécula de Benzeno neste artigo, consiste em uma mescla entre a Teoria do Funcional da Densidade e o método de Hartree-Fock. O funcional mais conhecido e utilizado dos Híbridos é o B3LYP (MUSSO et al., 2011; NAZARPARVAR et al., 2012).

B3LYP (Sigla para Beck3parâmetros-Lee-Yang-Parr), atualmente é um dos métodos mais utilizados no estudo de propriedades de macromoléculas, isso porque consegue descrever satisfatoriamente várias medidas experimentais e possuir baixo custo computacional. Este funcional é representado de acordo com a seguinte expressão:

$$E^{\text{B3LYP}}[\rho] = (1 - a)E_x^{\text{LDA}}[\rho] + aE_x^{\text{Exato}}[\rho] + bE_x^{\text{B88}}[\rho] + cE_c^{\text{LYP}}[\rho] + (1 - c)E_c^{\text{LDA}}[\rho] \quad (10)$$

$a = 0,20$, $b = 0,72$ e $c = 0,81$ são constantes numéricas definidas experimentalmente. Os três primeiros termos são as energias de troca e os dois últimos as energias de correlação. O método B3LYP utilizado deve obter resultados mais próximos do real justamente por fazer a mescla entre parâmetros que proporcionam um resultado exato com os parâmetros ajustados. Isso facilita a obtenção de um resultado mais próximo do obtido experimentalmente.

3 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Após a execução do cálculo pelo Orca, o software Gabedit foi novamente utilizado para realizar a leitura e visualização dos resultados. O software apresentou diversas informações, como os orbitais moleculares, espectro eletrônico, os modos vibracionais e o espectro eletromagnético do Benzeno.

Após os cálculos executados pelo Gabedit, pode-se visualizar os modos vibracionais característicos da molécula de Benzeno e seu espectro eletromagnético. O espectro obtido está representado na Fig. 7. Observa-se, através da análise dos resultados, que na região $3,15 \mu\text{m}$ a molécula apresenta um pico de emissão relacionado ao modo vibracional de deformação angular simétrica dentro do plano do anel benzênico e na região $15,225 \mu\text{m}$ o Benzeno apresenta um pico de emissão advindo do modo vibracional de deformação angular simétrica para fora do plano do anel benzênico.

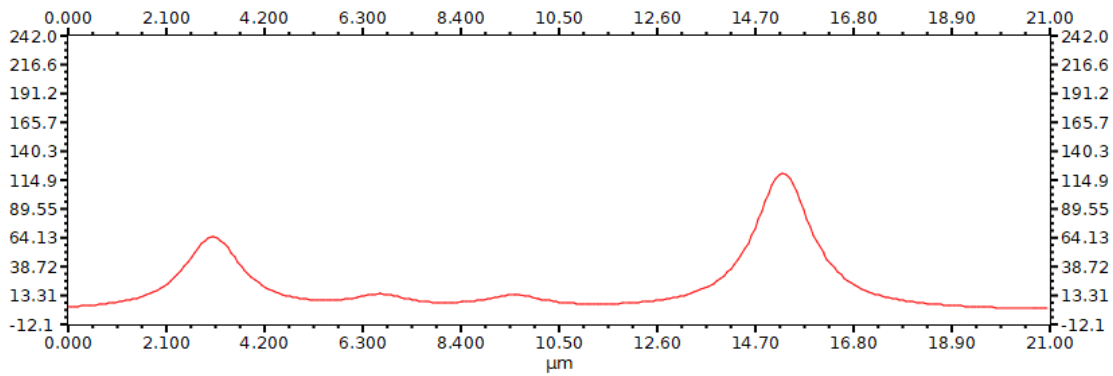


Figura 6 - Espectro no Infravermelho da molécula de Benzeno obtida através do software Gabedit

Esta região (3.15 μm e 15.225 μm) corresponde ao infravermelho médio, característico das vibrações moleculares. Os resultados obtidos através do uso da teoria do funcional da densidade demonstraram-se satisfatórios. Na Fig. 8 pode-se identificar a existência de bandas de emissão na região correspondente a 15.225 μm , destacado pela linha contínua azul e que pode estar relacionada a presença de Benzeno nas galáxias N7682, N5728 e N3786.

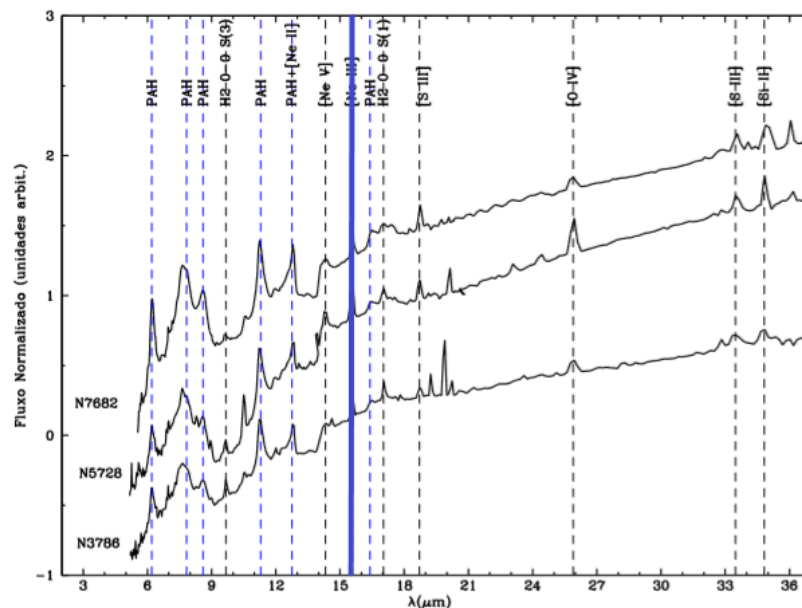


Figura 7 - espectros de galáxias seyfert 2. (Fonte: Tese de Doutorado Dinalva A. de Sales).

Os PAHs podem tornar-se PANHs (sigla do inglês que significa heterocíclicos policíclicos aromáticos nitrogenados) através da substituição de

um átomo de carbono por um átomo de nitrogênio. Estas moléculas podem estar relacionadas ao surgimento de moléculas heterocíclicas nitrogenadas (CANELO, 2015, p. 31) e que, conforme Ehrenfreund et al. (2006), podem ter um papel pré-biótico na origem da vida.

Através da modelagem computacional, foi possível identificar linhas de emissão de Benzeno no espectro das galáxias N7682, N5728 e N3786. Além disso, essa ferramenta ainda dá acesso a outras informações sobre a molécula como orbitais moleculares, espectro eletrônico e simulações dos modos vibracionais, que colaboraram para este estudo.

Como perspectivas de continuação deste trabalho pretende-se utilizar o espectro da molécula de Benzeno disponibilizada pelo banco de dados do National Institute of Standards and Technology para comparar com os resultados obtidos utilizando o Gabedit, a fim de confirmar nossa modelagem computacional. Além disso, pretende-se utilizar o mesmo método para simular moléculas maiores para modelar linhas espectrais de uma amostra com aproximadamente 200 galáxias *starbursts* observadas com o telescópio espacial Spitzer.

REFERÊNCIAS

BERNÉ O., MONTILLAUD J., JOBLIN C., Top-down formation of fullerenes in the interstellar medium., *A&A*, 2015, vol. 577, p. A113

CANELO, C. M. (2016). O Mundo Aromático - dos PAHs no Meio Interestelar as Condições Bióticas. Dissertação, Dissertação apresentada ao departamento de astronomia do Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas da USP, São Paulo.

CHANG, R.. Química geral: Conceitos Essenciais; tradução: Maria José Ferreira Rebelo [et al.]. 4. Ed. – Porto Alegre: AMG, 2010.

GILLET, F. C.; KLEINMANN, D. E.; WRIGHT, E. L.; CAPPS, R. W. Observations of M82 and NGC 253 at 8-13 microns. *Astrophysical Journal*, vol. 198, June 1, 1975, pt. 2, p. L65-L68.

EHRENFREUND P., RASMUSSEN S., CLEAVES J., CHEN L., Experimentally tracing the key steps in the origin of life: The aromatic world., *Astrobiology*, 2006, vol. 6, p. 490

HILZETTE P. C. ANDRADE, M. F.; DINIZ, M. F. P; AZEVEDO, S. N. C. Comportamento de Cura de Adesivo Epoxídico Contendo Grupo Mercaptana Avaliado por Espectroscopia no Infravermelho (MIR/NIR) e Calorimetria Exploratória Diferencial (DSC). *Polímeros: Ciência e Tecnologia*, vol. 18, nº 4, p. 359-365, 2008.

LI, A. Interaction of Nanoparticless with Radiation. In: *ASTROPHYSICS OF DUST*, A. N. Witt, G. C. Clayton, & B. T. Draine, editor, v.309 of *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, p.417. 2004.

MUSSO, F.; UGLIENGO, P.; SODUPE, M. Do. H-bond features of silica surfaces affect the H₂O and NH₃ adsorption? Insights from periodic B3LYP calculations. *The journal of physical chemistry. A*, v. 115, n. 41, p. 11221–8, 2011. Disponível em:< <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/21895017>>

NAZARPARVAR, E.; ZAHEDI, M.; KLEIN, E. Density Functional Theory (B3LYP) Study of Substituent Effects on O–H Bond Dissociation Enthalpies of trans-Resveratrol Derivatives and the Role of Intramolecular. *The Journal of Organic Chemistry*, v. 77, p. 10093–10104, 2012.

SALES D. A., PASTORIZA M. G., *Propriedades Físicas Dos Silicatos E Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos Presentes Na Região Nuclear De Galáxias Seyferst E Starbursts*. 2012. Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre.

SILVA, C. P da. *Computação de alto desempenho com placas gráficas para acelerar o processamento da teoria do funcional da densidade*. Dissertação (mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-RJ), Departamento de Engenharia Elétrica. 2010.

TRZESNIAK, D. R. F. *Modelagem quântica de inibidores enzimáticos*. Dissertação (mestrado) – Instituto de Física da Universidade de São Paulo. 2002.

Edição especial - 8º MCSul - Conferência Sul em Modelagem Computacional e VIII SEMENGO - Seminário e Workshop em Engenharia Oceânica.

Enviado em: 25 jan. 2019

Aceito em: 30 mar. 2019

Editores responsáveis: João Paulo Silva Lima / Liércio André Isoldi / Mateus das Neves Gomes

Revista Mundi Engenharia, Tecnologia e Gestão. Paranaguá, PR, v.4, n.2, abril de 2019.