



# PAHs COMO POSSÍVEIS CATALIZADORES NA FORMAÇÃO DE MOLÉCULAS PREBIÓTICAS NA NEBULOSA CABEÇA DE CAVALO

Luciene da Silva Coelho<sup>1</sup>, Amâncio Friaça<sup>2</sup> e Edgar Mendoza<sup>3</sup>

1. Planetário, Instituto de Estudos Socioambientais – Universidade Federal de Goiás;
2. Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas – Universidade de São Paulo;
3. Observatório do Valongo- Universidade Federal do Rio de Janeiro

*Astrobiologia; Astroquímica - ISM; Abundâncias – ISM; Nuvens Moleculares – ISM; Moléculas Orgânicas Prebióticas - ISM*

## Resumo

Este trabalho apresenta o resultado de um estudo teórico sobre moléculas interestelares que são úteis para a contabilidade do conteúdo orgânico do universo e para fornecer um vislumbre das condições pré-bióticas na Terra e em outros ambientes do além do nosso planeta. Utilizando o código PDR Meudon, nós exploramos rotas de formação de moléculas heterocíclicas nitrogenadas, como o pirrol e a piridina, as quais possuem potencial astrobiológico. As simulações demonstraram como a exploração de poucas rotas possíveis de produção de moléculas heterocíclicas nitrogenados resulta em abundâncias significantes destas espécies. Rotas particularmente efetivas para a produção de heterocíclicos nitrogenados envolvem os hidrocarbonetos policíclicos aromáticos como catalisadores. Assim, uma varredura por diversas rotas de produção deve revelar mais espécies a serem alvo de observações astrofísicas.

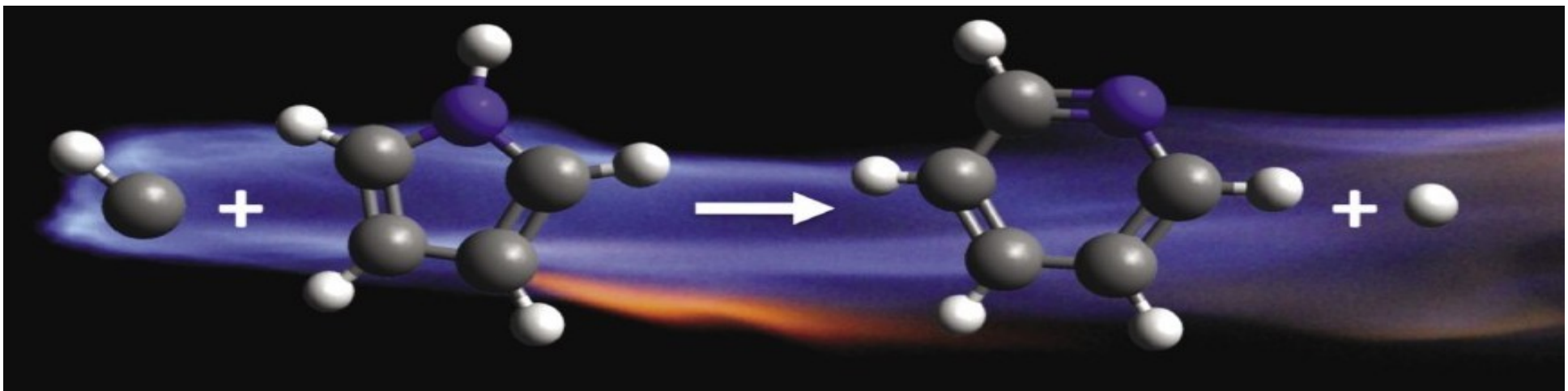
## Introdução

### Nitrogênio

- presente na composição das moléculas informacionais; seu número de valência permite assimetrias.
- bases nitrogenadas; DNA & RNA

### PAHs & PANHs

- amplamente encontrados no ISM e são resistentes à radiação presente nas regiões de formação estelar.
- PANHs podem constituir precursores de sistemas informacionais biológicos
- Em um cenário prebiótico como o “RNA World” materiais como PAHs e PANHs poderiam realizar a transição de matéria não-viva para matéria viva



Sorkia (2010b)

## Simulações

**The PDR Meudon code** – amplamente usado por simular regiões PDRs com acurácia

**Nebulosa Cabeça de Cavalo** – arquétipo de nuvem molecular;  
Parâmetros bem conhecidos

A rede química completa contém 5238 reações; 318 espécies e 14 elementos

## O Papel dos PAHs

Formação da piridina a partir do pirrol (Fig. 1);  
Inserção dos PAHs, usando o Circuncoroneno, conforme reações da Tab. 1 (Fig. 2)  
Formação da piridina e do pirrol com a inclusão dos PAHs (Fig. 3)

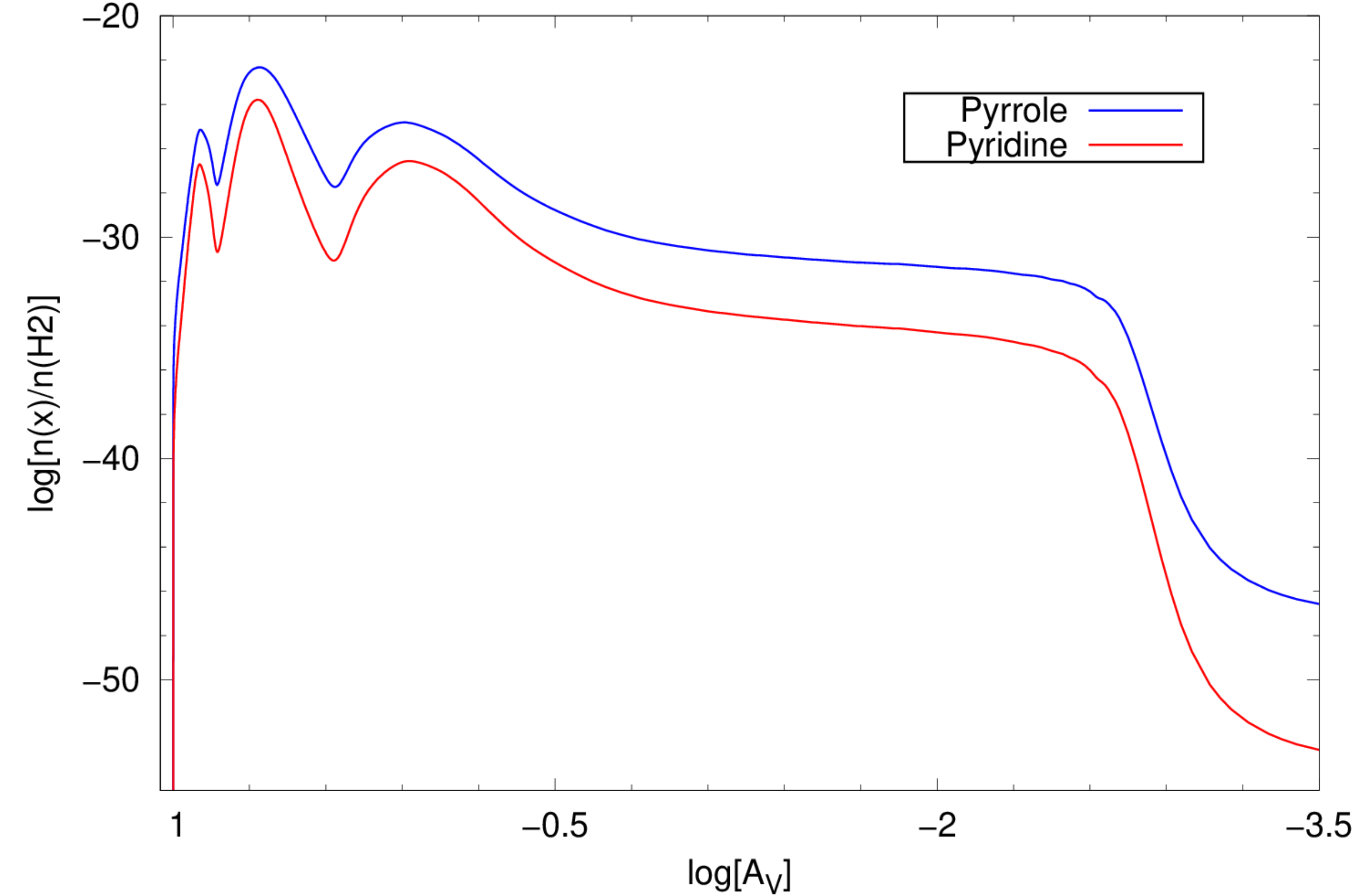


Figura 1: Abundância relativa ao H2 para a produção do pirrol e da piridina.

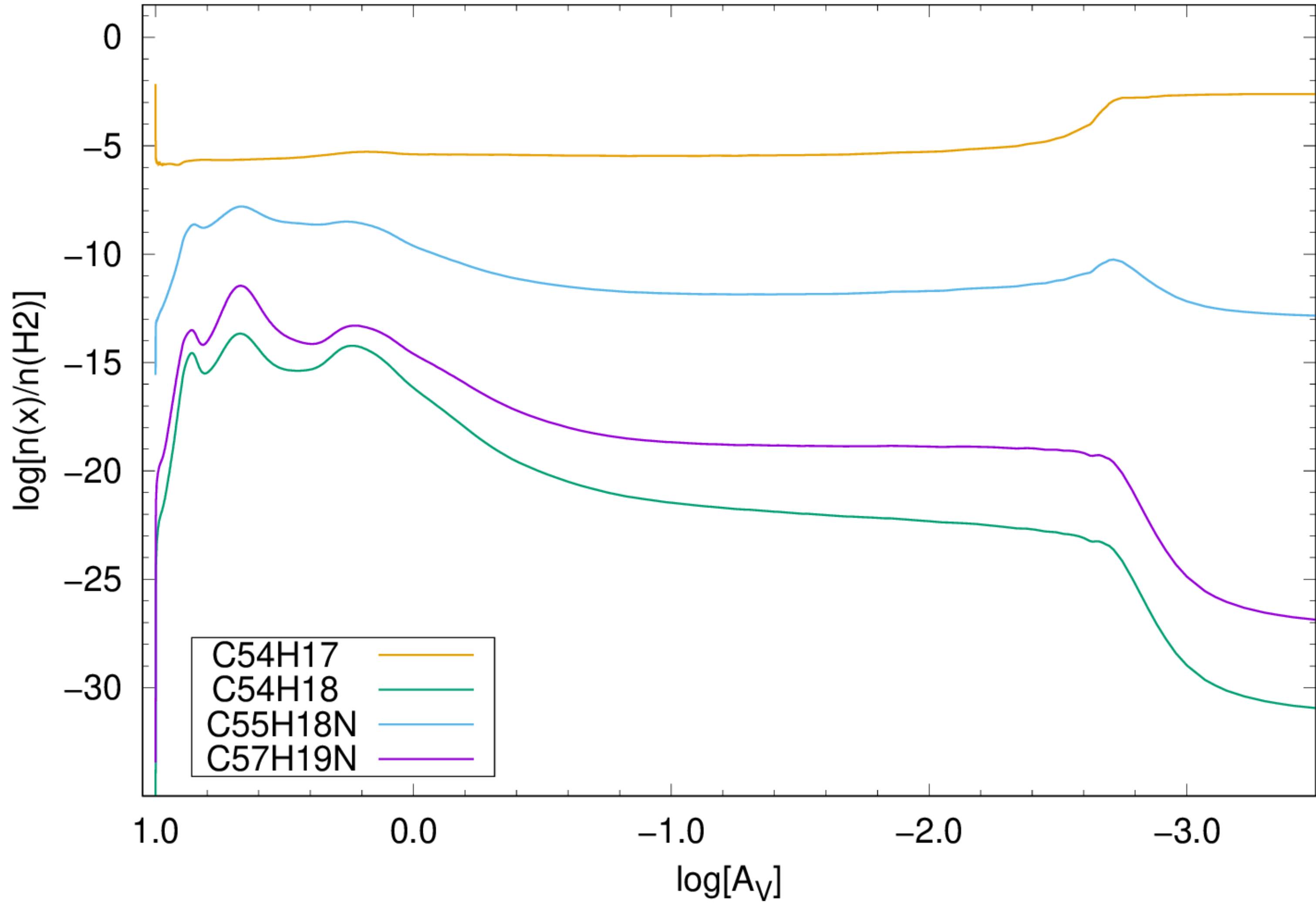


Figura 2: Abundância relativa ao H2 para as reações envolvendo o circuncoroneno e derivados.

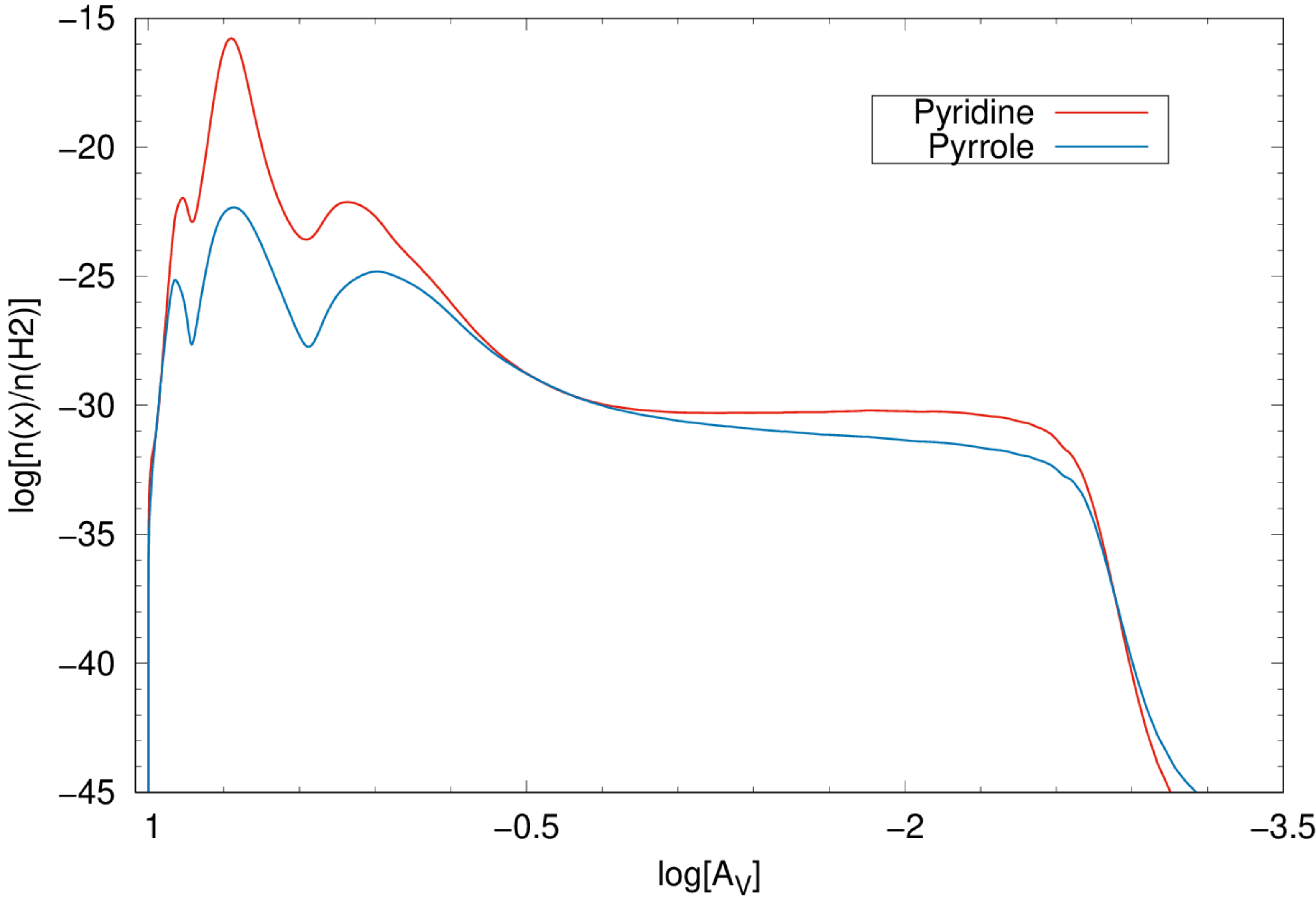


Figura 3: Abundância relativa ao H2 da comparação da produção do pirrol e da piridina após a inserção dos PAHs.

## Conclusões

Este estudo verificou que, após a validação do modelo com dados observacionais relatados por Goicochea et al. 2009 e Tessyer et al. 2003 que mostrou grnade concordância com o modelo para a região, as presentes simulações demonstram como a exploração de apenas algumas rota possíveis para a produção de heterocíclicos nitrogenados resultam em abundâncias significativas para estas espécies. Rotas particularmente eficientes para a formação de moléculas prebióticas nitrogenadas é a utilização de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (PAHs) como catalisador. Assim, a exploração de uma variedade de caminhos de produção deverá revelar mais espécies que podem se tornar alvo para futuras observações astrofísicas.

## Referências

- [1] Coelho et al., Sod. 16, 185 (2021);
- [2] Le Petit et al., ApJS.164 (2006);
- [3] Goicochea et al. A&A (2009)
- [4] Teyssier et al., SFChem (2003)

Trabalho recentemente publicado na revista Sodebrás  
DOI: <https://doi.org/10.29367/issn.1809-3957.16.2021.185.27>

| REAGENTS |      | PRODUCTS |        | γ         | α   | β |
|----------|------|----------|--------|-----------|-----|---|
| C54H18   | H    | C54H17   | H2     | 5.00E-008 | 0.5 | 0 |
| C54H18   | C2H  | C54H17   | C2H2   | 5.00E-008 | 0.5 | 0 |
| C54H17   | HCN  | C55H18N  | photon | 5.00E-007 | 0.5 | 0 |
| C55H18N  | C2H2 | C57H19N  | H      | 5.00E-007 | 0.5 | 0 |
| C57H19N  | C2H4 | C54H18   | C5H5N  | 5.00E-007 | 0.5 | 0 |

Tabela 1: Taxas de reação para a química envolvendo o PAH Circuncoroneno e espécies derivadas.