

---

# Astroquímica

Paulo Ribeiro Claro  
CICECO/ Universidade de Aveiro  
prc@ua.pt

## CITAÇÃO

Ribeiro Claro, P (2017)  
Astroquímica,  
*Rev. Ciência Elem.*, V5(03):031.  
[doi.org/10.24927/rce2017.031](https://doi.org/10.24927/rce2017.031)

## EDITOR

José Ferreira Gomes,  
Universidade do Porto

## RECEBIDO EM

9 de agosto de 2017

## ACEITE EM

10 de setembro de 2017

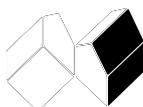
## PUBLICADO EM

30 de setembro de 2017

## COPYRIGHT

© Casa das Ciências 2017.  
Este artigo é de acesso livre,  
distribuído sob licença Creative  
Commons com a designação  
[CC-BY-NC-SA 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/), que permite  
a utilização e a partilha para fins  
não comerciais, desde que citado  
o autor e a fonte original do artigo.

[rce.casadasciencias.org](http://rce.casadasciencias.org)



**A Astroquímica é a ciência que estuda os átomos, as moléculas e as reacções químicas no espaço sideral. Através da Astroquímica sabemos hoje que o espaço está repleto de moléculas e que muitas moléculas do planeta Terra foram formadas no espaço sideral. Vamos discutir onde e como se formam as moléculas no espaço e, sobretudo, como é que sabemos que elas lá estão?\***

### 1 – As moléculas são feitas de átomos e os átomos nascem nas estrelas

As moléculas formam-se por associação de átomos, através da chamada “ligação química”. De uma forma simplificada, a ligação química resulta da partilha de electrões entre os átomos que estabelecem essa ligação, segundo regras definidas pela teoria quântica e que não vou desenvolver aqui. Interessa apenas recordar que a formação de uma ligação química liberta energia, e só pode ser quebrada se fornecermos essa mesma energia de volta. E que as regras acima referidas permitem compreender que há associações de átomos que são mais estáveis que outras. No contexto deste texto sobre astroquímica, a expressão “molécula” designa qualquer “associação de átomos”, o que inclui também espécies moleculares iónicas e radicalares, algumas das quais não são estáveis em atmosferas densas como a atmosfera da Terra. Por exemplo, o  $\text{CH}_4$  é uma molécula bastante estável, quando comparada com as formas radical  $\text{CH}$  ou ião  $\text{CH}_3^+$ , que são muito reativas. É possível ter um frasco de  $\text{CH}_4$ , mas não será possível ter um frasco com moléculas de  $\text{CH}$  sem que estas reajam entre si ou com o próprio frasco. Claro que no espaço interestelar, como se verá à frente, a baixa densidade impede as reacções e permite a existência de moléculas “exóticas”.

Os modelos actuais da origem do Universo, assumem que durante o “Big Bang” se formaram átomos de hidrogénio ( ${}_1\text{H}$ ) e de hélio ( ${}_2\text{He}$ ) e quantidades residuais de elementos mais pesados, como o lítio ( ${}_3\text{Li}$ ). Os restantes elementos foram sintetizados durante a evolução das estrelas. A energia das estrelas resulta de processos de fusão nuclear: no centro da estrela, a pressão elevada leva a que os núcleos de hidrogénio se fundam para formar hélio, com enorme libertação de energia. O hélio formado é combustível para novas reacções de fusão nuclear, que formam elementos cada vez mais pesados.

Nas estrelas de menor dimensão, a pressão é suficiente para que no seu interior se for-

---

\* Este tema foi objecto de uma palestra de divulgação e de promoção do estudo da química, oferecida às escolas no âmbito das comemorações do Ano Internacional da Química em 2015: Paulo Ribeiro Claro. a) Projecto “Haja Luz nas Escolas”, [ail2015.org/index.php/haja-luz/](http://ail2015.org/index.php/haja-luz/); b) Fundação Calouste Gulbenkian “Diálogos à volta da Luz”, conferência satélite, Agrupamento de Escolas Almodóvar, 14/12/2015.

mem núcleos até ao oxigénio ( ${}_{8}\text{O}$ ). Estrelas de maior dimensão podem continuar a consumir núcleos de oxigénio e formar núcleos mais pesados até ao ferro ( ${}_{26}\text{Fe}$ ). Em ambos os casos, quando as estrelas já não têm possibilidade de continuar a fusão nuclear no seu interior, iniciam o processo de fim de vida. Eventualmente, algumas estrelas explodem e nessa explosão a enorme energia libertada permite a formação dos restantes elementos da tabela periódica. Essa explosão serve também para espalhar pelo espaço todos os elementos formados.

Deste modo, todos os átomos existentes no universo para além do hidrogénio e hélio, foram formados no interior de estrelas. Isto aplica-se, naturalmente, aos átomos do nosso corpo: o nitrogénio das proteínas, o cálcio dos ossos, o ferro da hemoglobina... Todos foram sintetizados no interior de uma estrela e posteriormente espalhados pelo espaço. Nós somos, literalmente, feitos de "pó de estrelas"!

## 2 – Abundância relativa dos átomos e moléculas mais prováveis no universo

A FIGURA 1 ilustra a abundância relativa dos átomos no universo, em número de átomos<sup>4</sup>. A escala é logarítmica, pelo que o domínio dos átomos de hidrogénio e hélio é evidente. Juntos contabilizam cerca de 99% dos átomos no universo. Seguem-se com maior abundância os átomos de carbono, nitrogénio e oxigénio, mas numa escala mais reduzida: por cada átomo de oxigénio há mil átomos de hidrogénio. De entre os restantes destacam-se ainda, pela sua abundância relativa, o ferro e o silício.

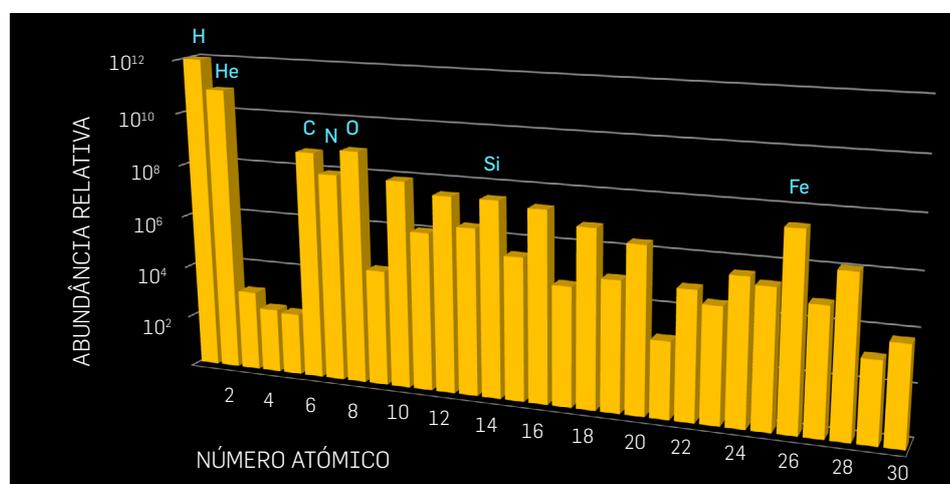


FIGURA 1. Abundância relativa dos elementos no universo em função do número atômico.

A partir desta abundância relativa dos elementos, e sabendo um pouco da forma como os átomos se ligam entre si, é fácil calcular quais as moléculas estáveis que mais provavelmente se formam. Naturalmente, a molécula de  $\text{H}_2$  e todas as moléculas em que o hidrogénio se combina com átomos de carbono e oxigénio. E também as moléculas de carbono e oxigénio apenas. Assim, deixa de ser surpresa que o planeta Júpiter seja largamente constituído por hidrogénio molecular ( $\text{H}_2$ ), que a molécula de água ( $\text{H}_2\text{O}$ ) seja abundante na Terra, que haja mares de metano ( $\text{CH}_4$ ) no planeta Titã, ou que a atmosfera de Vénus seja rica em dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), e o amoníaco ( $\text{NH}_3$ ) possa ser encontrado em todos estes planetas. Dada a abundância dos átomos que as constituem, estas são as moléculas estáveis mais prováveis do universo!

No entanto, o número e a variedade de moléculas que já foram encontradas em planetas, cometas e no espaço sideral está muito para além deste conjunto simples!

De acordo com os dados atualizados em Julho de 2017<sup>5, 6</sup>, são quase duas centenas as moléculas identificadas no espaço. A FIGURA 2 apresenta a distribuição do número de moléculas conhecidas de acordo com o número de átomos. Os exemplos vão das moléculas mais simples às mais complexas. Entre as espécies diatómicas podemos encontrar o ião  $CN^-$ , já conhecido antes de 1950, e o ião  $ArH^+$  (FIGURA 2), descoberto em 2013. Nas moléculas ainda pequenas, vale a pena salientar o glicaldeído, uma molécula análoga aos açúcares; a etanimina, um precursor dos ácidos nucleicos; e ainda o 2-metil-propionitrilo, por apresentar uma cadeia de carbono ramificada. No extremo oposto, o das moléculas com mais de 12 átomos, estão os hidrocarbonetos poliaromáticos (anéis de benzeno fundidos) e o fulereno, ou  $C_{60}$ . E estas moléculas têm sido detetadas em regiões definidas do espaço, designadas por Nuvens Moleculares Gigantes (NMG).

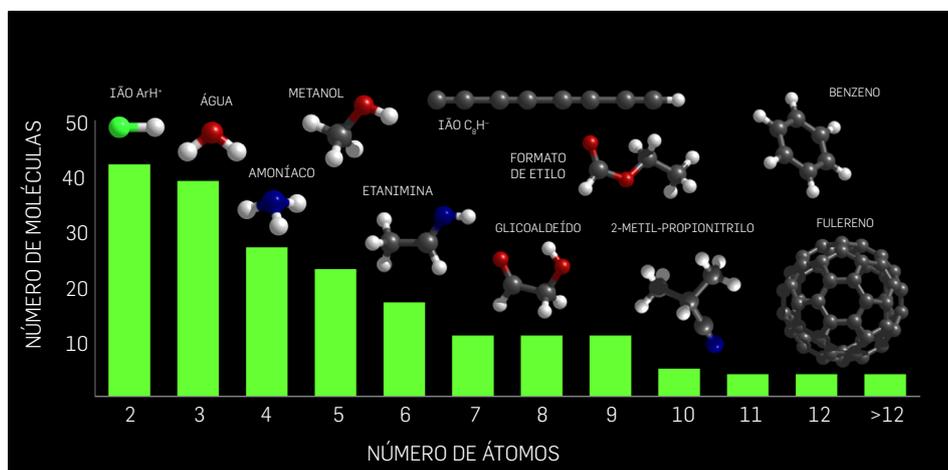


FIGURA 2. Distribuição de espécies moleculares detectadas no espaço, em função do número de átomos.

### 3 – No espaço há Nuvens Moleculares Gigantes (NMG).

O resultado da libertação de matéria pelos ventos estelares e pela explosão das estrelas é a formação de grandes nuvens de matéria dispersa, contendo poeiras (sobretudo de silício, oxigénio e carbono), átomos e moléculas diversas, designadas por Nuvens Moleculares Gigantes (NMG). A força gravitacional leva à aglomeração destes materiais, num processo que dá origem à formação de novas estrelas e planetas. A dimensão das NMG mede-se em dezenas ou centenas de anos-luz e a quantidade de matéria que albergam pode ser suficiente para produzir centenas ou milhares de novas estrelas.

Em 1995 tornaram-se icónicas as fotografias das NMG na Nebulosa da Águia, obtidas pelo satélite Hubble, baptizadas por “pilares da criação” dada a sua forma e o facto de se acreditar que estariam a ser o “berço” da formação de novas estrelas (FIGURA 3, esquerda).

Na verdade, não é indispensável ter acesso à tecnologia do Hubble para observar NMG. Estas nuvens são detetadas porque tapam a luz das estrelas que estão por trás delas e surgem assim como uma mancha escura no firmamento. Nas condições apropriadas, é possível observar as NMG da nossa própria galáxia apenas olhando para o céu. Sem NMG,

a Via Láctea deveria ser uma barra uniforme a atravessar o céu, mais brilhante no centro e desvanecendo-se para o exterior. As manchas escuras que se podem observar (Fig.3, direita) são devidas a NMG.



FIGURA 3. Os “pilares da criação” (esquerda, ESA) e a Via Láctea sobre o observatório ALMA (direita, Y. Beletsky (LCO)/ESO). As manchas escuras na Via Láctea devem-se a NMG.

#### 4 – Como se formam as moléculas no espaço?

A densidade de partículas (átomos ou núcleos de átomos) no espaço interestelar é de aproximadamente 1 partícula por  $\text{cm}^3$ . Um balão de fantasia vulgar, que enchemos para alegrar uma festa de aniversário, contém qualquer coisa como  $1,5 \times 10^{23}$  moléculas de gás – fazendo as contas para um balão com 22 cm de diâmetro, ao nível do mar. Espalhadas no espaço interestelar, estas mesmas moléculas ocupariam um volume correspondente a um balão com 700 km de diâmetro. Estima-se que nestas condições, uma dada partícula tenha uma colisão com outra a cada 10 milhões de anos. Deste modo, não há qualquer possibilidade de formação de moléculas – sobretudo, moléculas complexas – a partir dos átomos no espaço interestelar.

Mesmo as nuvens moleculares gigantes têm uma densidade reduzida. Nas chamadas NMG difusas o nosso balão teria 150 km de diâmetro, reduzindo-se a 7 km nas NMG densas, que já podem reunir cerca de 1 milhão de partículas por  $\text{cm}^3$ . Com esta densidade já é possível a formação de moléculas simples, como a molécula de água<sup>7</sup>, de dióxido de carbono<sup>8</sup> e até cadeias lineares de átomos de carbono ( $\text{HC}_n$ ). Ainda assim, esta densidade de átomos é insuficiente para explicar a formação das moléculas mais complexas referidas na FIGURA 2.

A resposta parece estar no facto de cerca de 1% das partículas nestas nuvens serem minúsculos grãos de poeira, constituídos sobretudo por silício, carbono e oxigénio, e com diâmetros entre 0,1-1  $\mu\text{m}$ .

Considera-se actualmente que estas pequenas partículas são os “balões de reacção” para a síntese química no espaço. Tal como esquematizado na FIGURA 4, estas poeiras permitem fixar átomos por adsorção à superfície e funcionam como catalisadores da formação de ligações químicas. Moléculas de pequena dimensão, como o dióxido de carbono e a água, podem também depositar-se à superfície, dando origem à formação de um manto de “gelos” (mistura sólida de água, dióxido de carbono e outras moléculas pequenas). A deposição e fixação de outros átomos sobre este manto de gelo fornece matéria-prima adicional para a síntese química.

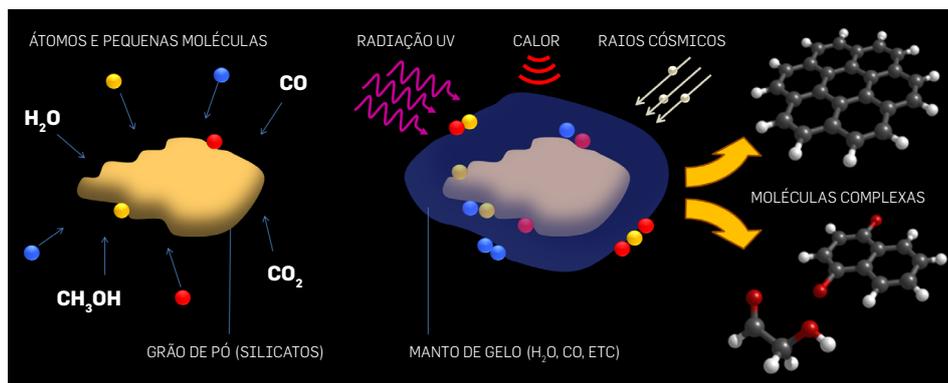


FIGURA 4. Representação esquemática da síntese de moléculas complexas nos grãos de pó.

O grão assim formado, viajando da vizinhança de uma estrela em formação, é exposto a diferentes condições ambientais, que podem variar de temperaturas extremamente baixas a temperaturas extremamente altas, e exposição a radiação ultravioleta e a raios cósmicos. É este conjunto que permite a formação de uma grande variedade de moléculas mais complexas. Os cientistas acreditam que ao longo do processo de nascimento das estrelas, desde a fase inicial de condensação do gás, passando pela formação do disco protoplanetário, e posterior estabilização do sistema planetário, se vão formando moléculas progressivamente mais complexas, muitas das quais serão capturadas pelos planetas.

A este propósito, a descoberta no espaço interestelar das chamadas moléculas pré-bióticas – tais como precursoras de ácidos nucleicos<sup>9</sup> e aminoácidos<sup>10</sup> – tem alimentado a possibilidade de a vida na Terra ter justamente origem nas moléculas formadas no espaço, à superfície dos grãos de pó.

## 5 – Espectroscopia e Astroquímica

A identificação de moléculas no espaço não pode ser feita da mesma forma que é feita a identificação de um poluente num rio, ou do colesterol no sangue. Trata-se de nuvens moleculares longínquas, algumas mesmo a muitos anos-luz de distância, onde não é possível ir recolher uma amostra para analisar em laboratório!

Nas imagens dos comunicados de imprensa que noticiam a descoberta de novas espécies moleculares no espaço são frequentemente incluídos registos gráficos de linhas quebradas – tal como ilustrado na FIGURA 5 – e que são referidos como “impressões digitais” das moléculas.

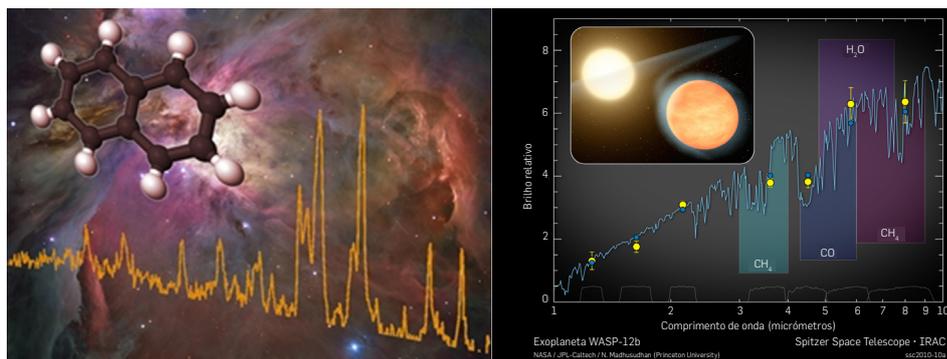


FIGURA 5. Imagens de comunicados de imprensa que anunciam a descoberta de novas moléculas no espaço: naftaleno interestelar (esquerda, Univ. Radbaud, 2015, [www.ru.nl/english/news-agenda/news/vm/imm/solid-state-physics/2015/pah-molecules/](http://www.ru.nl/english/news-agenda/news/vm/imm/solid-state-physics/2015/pah-molecules/)) e atmosfera de um exoplaneta (direita, NASA, 2010, NASA/JPL-Caltech/CFHT/MIT/Princeton/UCF).

Nas moléculas, trata-se de registos designados por “espetros” e correspondem efetivamente a “impressões identificadoras” de moléculas, obtidos por técnicas de espectroscopia.

O programa de Química do 10<sup>o</sup> ano refere o espectro de absorção do átomo de hidrogénio, que resulta da absorção de radiação luminosa que acompanha a transição do eletrão para níveis de energia superiores. O mesmo fenómeno é responsável pela cor de algumas moléculas, como o caroteno (das cenouras) ou a clorofila (das plantas verdes), que absorvem fortemente a luz visível e por isso têm cor. Para obter um “espectro de absorção” é necessário colocar a amostra entre uma fonte de radiação e um detector capaz de discriminar as diferentes componentes da radiação que atravessou a amostra (FIGURA 6A). O espectro de absorção é a representação gráfica da quantidade de luz absorvida a cada frequência.

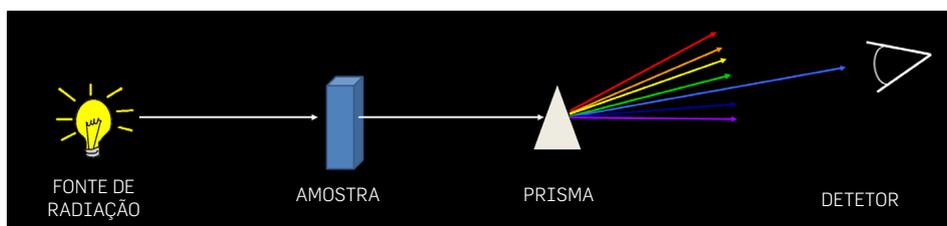


FIGURA 6A. Esquema simplificado de um espectrómetro de absorção: fonte de radiação, amostra, prisma (ou rede de difração) para dispersão da luz e detector.

Nas moléculas, além dos níveis de energia electrónica que se observam nos átomos, existem também os níveis de energia vibracional, correspondentes às vibrações das ligações químicas. Em fase gasosa, há também níveis discretos de energia rotacional, já que as moléculas não podem rodar a qualquer frequência. Todos estes níveis funcionam como “degraus de energia” que a molécula ocupa (nunca pode estar entre degraus), e uma molécula pode ser “empurrada” para um degrau acima absorvendo luz com a energia exata da altura entre degraus. Depois de empurradas para “degraus de energia” superiores, as moléculas acabam sempre por regressar ao seu nível de energia inferior, libertando a energia em excesso. Quando a libertação de energia ocorre sob a forma de emissão de luz, é possível observar um “espectro de emissão” – que é um registo da quantidade de luz emitida para cada frequência (FIGURA 6B). A absorção e a libertação de energia ocorre entre os mesmos degraus, pelo que os espectros de emissão e de absorção fornecem exactamente

a mesma informação: a altura dos degraus de energia. E como a altura dos degraus é específica de cada molécula, o registo do espectro de absorção da luz por uma amostra permite identificar as moléculas presentes na amostra.

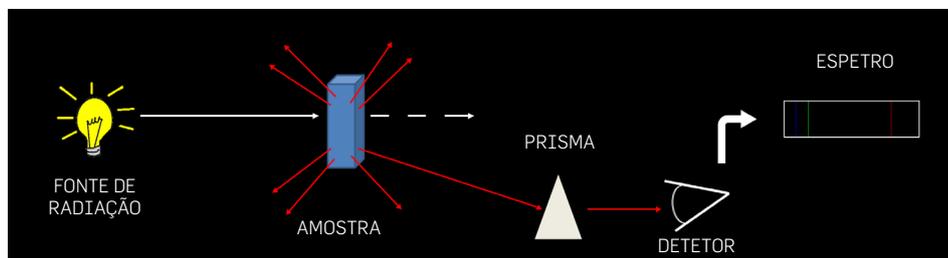


FIGURA 6B. Esquema simplificado de um espectrómetro de emissão: fonte de radiação, amostra, prisma (ou rede de difração) para dispersão da luz e detetor.

Isso é feito naturalmente nos laboratórios, utilizando os espectrómetros de absorção ou de emissão – alguns dos quais são aparelhos compactos, que se podem colocar em cima de uma bancada de laboratório.

Para obter espectros das moléculas no espaço - já que não é possível recolher um frasco com a amostra e trazê-lo ao laboratório – os cientistas idealizaram o “espectrómetro cósmico”: um espectrómetro que utiliza as estrelas distantes como fonte de radiação, as NMG como amostra e um detetor no planeta Terra (FIGURA 7). Quando uma nuvem molecular passa entre o planeta Terra e uma estrela, a luz que nos chega dessa estrela é alterada pela interação com as moléculas da nuvem. E a análise do espectro de absorção permite identificar quais as moléculas presentes na nuvem. Temos assim a observação das moléculas no espaço através da luz das estrelas!

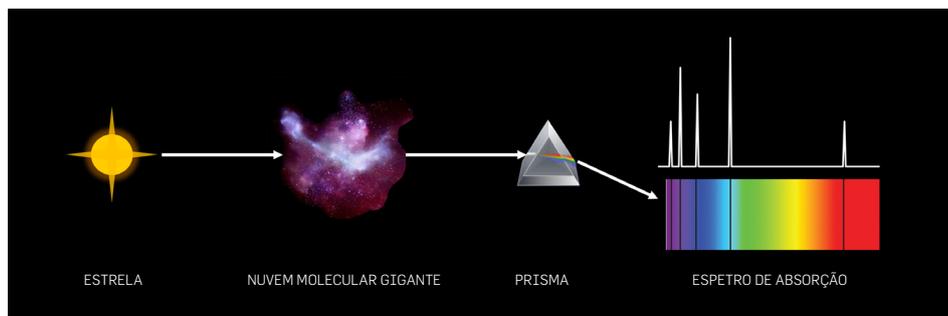


FIGURA 7. "Espectroscopia cósmica", que reproduz o esquema da Figura 6A, utilizando as estrelas como fonte de radiação.

Isto funciona também com a atmosfera de planetas: quando um planeta passa em frente a uma estrela, parte da luz da estrela chega até nós depois de ter atravessado a atmosfera do planeta – o que permite o registo do espectro de absorção das espécies moleculares presentes nessa atmosfera (FIGURA 8).

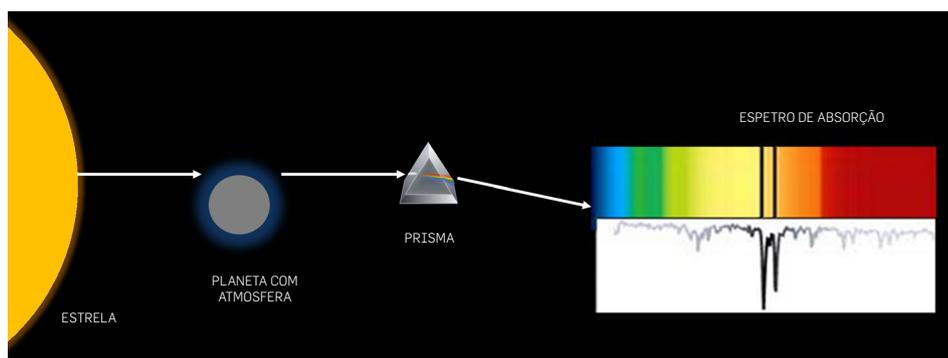


FIGURA 8. Análise da composição da atmosfera de um planeta por espectroscopia de absorção.

Naturalmente, a deteção de moléculas também pode ser efetuada através de espectroscopia de emissão, segundo um esquema semelhante ao representado na FIGURA 6B. Nesse caso, o que se analisa é a luz emitida por um conjunto de moléculas no espaço que receberam energia de estrelas próximas e a libertam em todas as direcções.

Embora seja possível efectuar algumas destas observações a partir do solo na Terra, a atmosfera da Terra é sempre uma fonte de interferência, ou até de bloqueio, da luz que nos chega de estrelas distantes. De facto, a atmosfera terrestre só é razoavelmente transparente para a radiação nas regiões do visível e das ondas de rádio, sendo bastante opaca para a radiação de raios gama, raios-x, ultravioleta e ondas de rádio de baixa frequência<sup>11</sup>. Essa é a razão pela qual a ESA e a NASA enviam satélites de observação para o espaço. O exemplo mais famoso é talvez o satélite Hubble, mas há diversos outros satélites de observação da radiação que nos chega do espaço (a ESA tem actualmente cerca de duas dezenas de satélites para detecção de radiação vinda do espaço<sup>12</sup>).

Vale a pena referir aqui um dos comunicados de imprensa da ESA referentes a observações do satélite Hubble, por ilustrar a complexidade e a interdisciplinaridade deste tema. Trata-se da identificação da presença da molécula de monóxido de carbono (CO) em três nuvens moleculares distintas, através da observação de duas bandas de absorção características desta molécula diatómica. A questão que a FIGURA 9 ilustra resulta do facto de as NMG estarem em movimento em relação à Terra (e ao Hubble) e o sinal registado ser afectado pelo efeito Doppler. Assim, o sinal devido à NMG que se afasta da Terra aparece desviado para maiores comprimentos de onda, enquanto o sinal da nuvem que se desloca com mais velocidade em direcção à Terra aparece desviado para menores comprimentos de onda. O espectro final observado pelo Hubble é a soma de três espectros com diferentes desvios de Doppler, e a sua interpretação tornou-se um enorme quebra-cabeças. Um quebra-cabeças que os cientistas da ESA se orgulham de ter resolvido, tal como se vê pela imagem de divulgação (FIGURA 9).

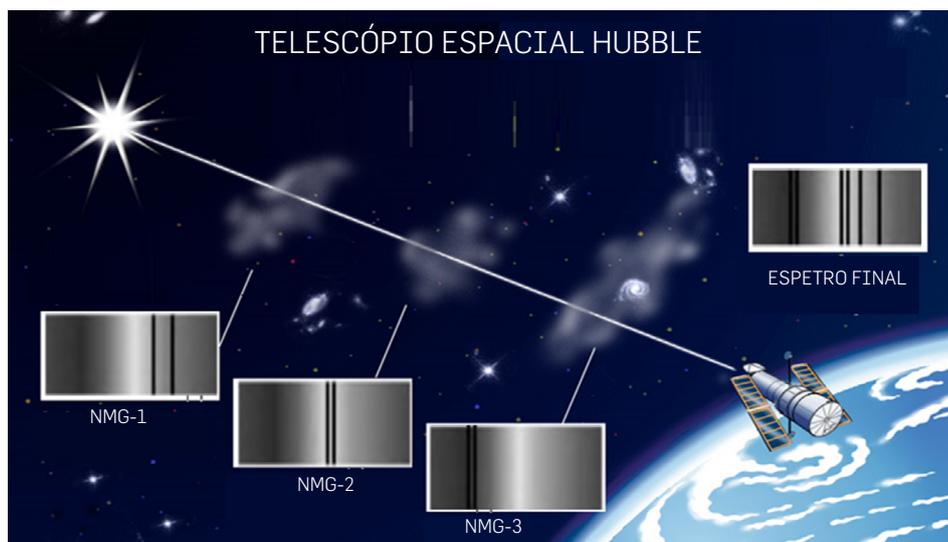


FIGURA 9. Imagem de divulgação de registro do satélite Hubble (adaptada de [www.spacetelescope.org/images/opo9841r/](http://www.spacetelescope.org/images/opo9841r/), NASA/ESA)

A propósito de quebra-cabeças científicos e para fecho deste texto, é importante salientar que a identificação de uma molécula por “espectroscopia cósmica” exige que seja conhecido o espectro de absorção dessa molécula. Tal espectro é fácil de obter quando se trata de moléculas estáveis, como a água, o dióxido de carbono ou o benzeno, mas torna-se difícil, se não impossível, com formas moleculares muito reativas (a baixa densidade das NMG permite a existências de espécies muito reativas, porque estas não encontram outros átomos ou moléculas para reagir).

Uma das soluções é reproduzir em laboratório as condições de pressão e temperatura do espaço interestelar, tentando assim obter (e observar) novas espécies moleculares<sup>13, 14</sup>. Mas a resposta mais abrangente tem sido dada pela química computacional. A química computacional permite simular em computador qualquer molécula ou qualquer arranjo de átomos – por mais instável, efêmero ou até perigoso – e prever o seu espectro de absorção rotacional, vibracional e electrónico. Como não sabemos antecipadamente que espécies moleculares existem no espaço, a solução é construir bases de dados de formas moleculares possíveis<sup>15, 16</sup>. Estas bases de dados irão contribuir para a resolução dos “quebra-cabeças astroquímicos” do futuro.

## REFERÊNCIAS

- <sup>1</sup> Comunicado de imprensa da ESO (Southern European Observatory) eso1513, 8/4/2015, [www.eso.org/public/news/eso1513/](http://www.eso.org/public/news/eso1513/), acessado a 1-08-2017.
- <sup>2</sup> *When Did the Universe Flood With Water?*, Seeker (empresa de comunicação digital, EUA), [www.seeker.com/when-did-the-universe-flood-with-water-1769781622.html](http://www.seeker.com/when-did-the-universe-flood-with-water-1769781622.html), acessado a 1-08-2017.
- <sup>3</sup> *Why there is so little breathable oxygen in space*, Science Magazine, 2015. DOI: 10.1126/science.aac4556
- <sup>4</sup> [www.periodictable.com/Properties/A/UniverseAbundance.html](http://www.periodictable.com/Properties/A/UniverseAbundance.html), acessado a 1-08-2017.
- <sup>5</sup> *Molecules in Space*, Universidade de Colónia, [www.astro.uni-koeln.de/cdms/molecules](http://www.astro.uni-koeln.de/cdms/molecules), acessado a 1-08-2017.
- <sup>6</sup> NASA Astrochemical Laboratory, *Interstellar Molecules*, [science.gsfc.nasa.gov/691/cosmicice/interstellar.html](http://science.gsfc.nasa.gov/691/cosmicice/interstellar.html), acessado a 1-08-2017.

<sup>7</sup> Water Could Have Been Abundant in the First Billion Years, [www.cfa.harvard.edu/news/2015-14](http://www.cfa.harvard.edu/news/2015-14), acessado a 1-08-2017.

<sup>8</sup> *CO<sub>2</sub> formation in quiescent clouds*, [iopscience.iop.org/article/10.1088/0004-637X/735/2/121/meta](http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0004-637X/735/2/121/meta), acessado a 1-08-2017.

<sup>9</sup> BELLOCHE, A, *et al.*, *Detection of a branched alkyl molecule in the interstellar medium: isopropyl cyanide*, *Science*, 354 (2014) 1584-1587. DOI: 10.1126/science.1256678.

<sup>10</sup> CALLAHAN, MP, *et al.*, *Carbonaceous meteorites contain a wide range of extraterrestrial nucleobases*, *PNAS*, 108 (2011) 13995-13998. DOI: 10.1073/pnas.1106493108

<sup>11</sup> *NASA Drawing - Atmospheric Distortion Explained*, [www.awesomestories.com/asset/view/NASA-Drawing-Atmospheric-Distortion-Explained](http://www.awesomestories.com/asset/view/NASA-Drawing-Atmospheric-Distortion-Explained), acessado a 1-08-2017.

<sup>12</sup> *Our missions*, [www.esa.int/ESA/Our\\_Missions](http://www.esa.int/ESA/Our_Missions), acessado a 1-08-2017.

<sup>13</sup> *NASA Ames Reproduces the Building Blocks of Life in Laboratory*, [www.nasa.gov/content/nasa-ames-reproduces-the-building-blocks-of-life-in-laboratory](http://www.nasa.gov/content/nasa-ames-reproduces-the-building-blocks-of-life-in-laboratory), acessado a 1-08-2017.

<sup>14</sup> MERINO, P, *et al.*, *Graphene etching on SiC grains as a path to interstellar polycyclic aromatic hydrocarbons formation*, *Nature Communications*, 5 (2014) 3054. DOI: 10.1038/ncomms4054

<sup>15</sup> WOON, DE, HERBST, E, *Quantum Chemical Predictions of the Properties of Known and Postulated Neutral Interstellar Molecules*, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 185 (2009) 273. DOI: 10.1088/0067-0049/185/2/273

<sup>16</sup> *PAH IR spectral database*, [www.astrochemistry.org/pahdb/theoretical/2.00/help/tour](http://www.astrochemistry.org/pahdb/theoretical/2.00/help/tour), acessado a 1-08-2017.