



**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO  
UNIDADE ACADÊMICA SEDE**

**ANDREZA GOMES DA FONSECA**

**ESTUDO TEÓRICO DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS E TRIATÔMICAS  
EM MANCHAS SOLARES**

**Recife  
2022**

**ANDREZA GOMES DA FONSECA**

**ESTUDO TEÓRICO DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS E TRIATÔMICAS  
EM MANCHAS SOLARES**

Monografia apresentada à coordenação do curso de Licenciatura em Química da Universidade Federal Rural de Pernambuco, como parte dos requisitos para obtenção do título de Licenciado (a) em Química.

Orientador: Prof.Dr. Cristiano Costa Bastos

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Sistema Integrado de Bibliotecas  
Gerada automaticamente, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

- F676e FONSECA, ANDREZA  
ESTUDO TEÓRICO DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS E TRIATÔMICAS EM MANCHAS SOLARES /  
ANDREZA FONSECA. - 2022.  
48 f.
- Orientador: Prof. Dr. Cristiano Costa Bastos.  
Inclui referências.
- Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Universidade Federal Rural de Pernambuco,  
Licenciatura em Química, Recife, 2022.
1. Moléculas lineares. 2. Espectroscopia. 3. Manchas solares. I. Bastos, Prof. Dr. Cristiano Costa, orient.  
II. Título

CDD 540

---

**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA  
CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA**

**FOLHA DE APROVAÇÃO  
ANDREZA GOMES DA FONSECA**

**ESTUDO TEÓRICO DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS E TRIATÔMICAS  
EM MANCHAS SOLARES**

Aprovado em: 02 de junho de 2022.

**Banca Examinadora**

---

Prof. Dr. Cristiano Costa Bastos  
UFRPE

---

Prof. Dr. Gerson Silva Paiva – 1º avaliador (a)  
UFPE

---

Prof. Dr. Bruno Silva Leite – 2º avaliador (a)  
UFRPE

*Dedico este trabalho em memória a  
minha avó Anita Gomes da Fonseca,  
minha principal inspiração.*

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço primeiramente ao meu orientador, o Prof. Cristiano Costa Bastos por sua amizade, inspiração e sem dúvidas pelos seus ensinamentos motivadores, dos quais sem eles não teria chegado até este momento.

Ao apoio financeiro por meio do pagamento de bolsa oferecido pelo Conselho nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)

Eduardo Anjos, meu amigo e parceiro de pesquisa que compartilhei todos os momentos bons e ruins dessa jornada.

Ao apoio da minha família e amigos da UFRPE que contribuíram direta e indiretamente para a construção deste trabalho.

Aos professores e servidores da UFRPE, em especial à Altamira por grandes conversas estimulantes, que contribuíram para minha formação como pessoa e como graduanda.

*“Péssimo destino teve Ícaro ao voar próximo ao sol, seguindo seu sonho e o alcançado para enfim ser queimado e jogado ao chão, me questiono se é um destino cruel ou o débito de sonhar de forma tão extraordinária.”*

*Bartolomeu Assis Souza*

## RESUMO

Neste trabalho estudamos a existência de moléculas diatômicas e triatômicas em manchas solares. A partir de dados experimentais do espectro solar na região do infravermelho (IR) de  $473\text{ cm}^{-1}$  –  $925\text{ cm}^{-1}$ , foi possível identificar linhas devido a transições rotovibracionais das moléculas: BH, CH, HF, C<sub>2</sub>, CN, MgH, CO, AlH, NO, SiH, HCl, NP, TiO, CO<sub>2</sub>, HCN, NO<sub>2</sub>, BeCl<sub>2</sub>, OCS, N<sub>2</sub>O. A finalidade desta descrição é identificar a presença destas moléculas nas manchas solares, baseada na quantidade de bandas calculadas para cada caso, incluindo a molécula de NP que ainda não havia sido relatada na literatura. Estudar o magnetismo destas moléculas e assim podendo prever quais moléculas podem estar influenciando no campo magnético das manchas solares e as consequências disto.

**Palavras-chave:** *Moléculas lineares, Espectroscopia, Manchas solares.*



## ABSTRACT

In this work we study the existence of diatomic and triatomic molecules in sunspots. From experimental data of the solar spectrum in the infrared (IR) region of  $473\text{ cm}^{-1}$  -  $925\text{ cm}^{-1}$ , it was possible to identify lines due to rotovibrational transitions of the molecules: BH, CH, HF, C<sub>2</sub>, CN, MgH, CO, AlH, NO, SiH, HCl, NP, TiO, CO<sub>2</sub>, HCN, NO<sub>2</sub>, BeCl<sub>2</sub>, OCS, NNO. The purpose of this description is to identify the presence of these molecules in sunspots, based on the amount of bands calculated for each case, including the NP molecule that has not yet been reported in the literature. Study the magnetism of these molecules and thus being able to predict which molecules may be influencing the magnetic field of sunspots and the consequences of this.

**Keywords:** *Linear molecules, Spectroscopy, Sunspots.*

## SUMÁRIO

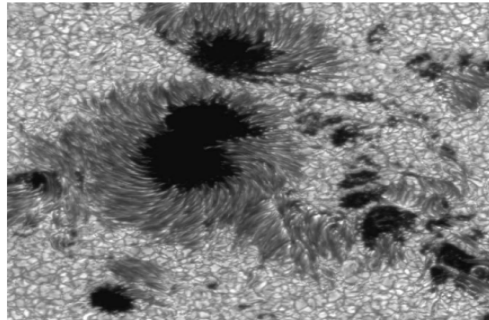
<b>1. INTRODUÇÃO</b>	<b>11</b>
<b>OBJETIVOS</b>	<b>18</b>
<b>2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b>	<b>19</b>
2.1 <i>Sol</i>	19
2.2 <i>Manchas Solares</i>	21
2.3 <i>Estrutura molecular</i>	23
2.4 <i>Teoria do Orbital Molecular (TOM)</i>	25
2.5 <i>Espectro Rotovibracional</i>	31
<b>3. METODOLOGIA</b>	<b>34</b>
<b>4. RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	<b>37</b>
<b>5. CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>	<b>43</b>
<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>44</b>

# 1. INTRODUÇÃO

Desde os primórdios o Sol é objeto de interesse das civilizações mais antigas, existindo relatos nas pinturas rupestres (AS OBSERVAÇÕES ASTRONÔMICAS NA PRÉ-HISTÓRIA EM MINAS GERAIS, 2022). Ele é uma estrela da sequência principal tipo G2V, o G2 por conta da sua temperatura e o V, pela forma que ele gera energia, frequentemente chamada de anã amarela, sendo considerada pequena em relação a outras conhecidas. Seu nome, Helios, vem do grego *Helios*, também servindo para dar nome ao elemento químico abundante em sua heliosfera. Sua composição é predominantemente de gás hidrogênio, a altíssima temperatura e pressão. A distância da Terra ao Sol é cerca de 150 milhões de quilômetros ou 1 unidade astronômica (UA). A temperatura média do Sol varia entre 3000K e 7000K de acordo com a região e sua pressão 340 bilhões de vezes a pressão atmosférica da Terra ao nível do mar. Nessas condições, o gás encontra-se no estado ionizado (plasma), onde ocorrem as reações de fusão de núcleos dos elementos leves dando origem aos elementos mais pesados (Zeilik e Gregory, 1998).

Um dos fenômenos do Sol são as manchas solares, que são regiões mais frias ( $T = 3.000\text{K}$ ) em relação à fotosfera solar, apresentam um campo magnético mais intenso que as demais regiões. As manchas solares têm uma ampla variedade de tamanhos, as maiores possuem diâmetros de 60.000 km ou mais e são visíveis a olho nu. No outro extremo estão os poros, que têm diâmetros tipicamente na faixa de 1.500 a 3.500 km (Thomas e Weiss, 2008). Cada mancha solar caracteriza-se por um centro escuro, a umbra, e uma auréola menos escura, a penumbra, como mostra a figura 1. As manchas solares maiores e mais escuras, por vezes, são cercadas total ou parcialmente pela penumbra.

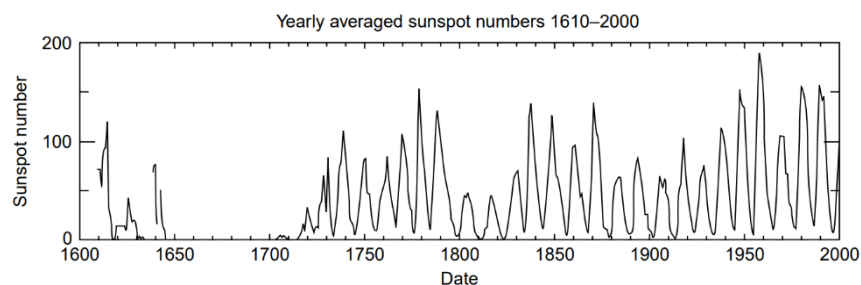
Figura 1: Manchas solares observadas na superfície do Sol. Em destaque a umbra (centro escuro) e a penumbra (auréola menos escura)



Fonte: Thomas e Weiss (2008)

Além disso, a força do campo magnético no centro de uma mancha solar equivale a cerca de 3.200 G (ou 0,28 T) e pode chegar a 3.900 G ou mais. Essa força exercida do campo magnético sobre o plasma solar, como consequência, deve se expandir com a altura acima da superfície solar, reduzindo assim sua pressão magnética para estar em equilíbrio com a pressão da atmosfera externa, diminuindo rapidamente (quase exponencialmente) com a altura (Thomas e Weiss, 2008). As manchas solares também apresentam um comportamento dinâmico e mudam tanto a posição quanto quantidade em função do tempo, mostrado na figura 2.

Figura 2: Gráfico de número de Manchas X Tempo



Fonte: Thomas e Weiss (2008)

Aqui se pode observar uma variação cíclica dos anos de 1610 – 2000, com picos máximos no intervalo de 1950 e 2000. Essa variação um tanto irregular no

número de manchas solares têm um período médio cerca de 11 anos, contudo o arranjo da polaridade magnética das manchas se inverte a cada ciclo, indicando um ciclo magnético com um período de cerca de 22 anos.

Em 1934, Russell previu que uma quantidade considerável de vapor de água estaria presente nas atmosferas de estrelas frias (isto é, estrelas de tipo espectral posteriores a K) assumindo abundâncias solares. A partir de cálculos aproximados, ele descobriu que a molécula de H<sub>2</sub>O deveria ser a partícula mais abundante além de H<sub>2</sub> a uma temperatura de 2800K. A primeira detecção de H<sub>2</sub>O foi feita por Kuiper (1963) no espectro de Mira, o qual se encontra entre 14.000 a 19.000 Å. Durante os últimos anos, o vapor de água foi detectado em muitas estrelas M, e.g. por Spinrad e Newburn, Jr. (1964).

Para detectar linhas solares de H<sub>2</sub>O, WOHL (1969) escaneou fotoeletricamente em vários dias de março de 1969 linhas de absorção de H<sub>2</sub>O nos espectros de manchas solares e na fotosfera circundante em 5760 e 5880 Å. As observações foram feitas com o telescópio Locarno do observatório G.Sttingen.

Verificou-se que as linhas de absorção de vapor de água, tendo em sua maioria cerca de metade da intensidade dada por Moore et al. (1966), foram aprimoradas no espectro spot. A Figura 3 mostra as linhas que foram utilizadas.

Figura 3: linhas observadas da H<sub>2</sub>O

TABLE I  
Table of observed lines of H<sub>2</sub>O

From second revised Rowland tables (Moore <i>et al.</i> (1966))				Measured equivalent widths from one or more scans	
Wavelength [mÅ]	Equivalent width [mÅ]	Vibr. band	Rotation line	Photosphere [mÅ]	Sunspot [mÅ]
5761.588	7	203	<i>P</i> 5	8	14
5763.246	1	203	<i>P</i> 6	2	3
5763.410	8.5	203	<i>P</i> 6	6	7
5879.606	12	302	<i>R</i> 3	8	9
		401	<i>R</i> 6		
5879.729	12	401	<i>R</i> 5	7	12
5880.734	7	401	<i>R</i> 4	4	8
5880.933	14	401	<i>R</i> 8	6	10
5881.871	12	401	<i>R</i> 7	5.5	7
5881.987	7	401	<i>R</i> 4	3.5	5.5
			<i>R</i> 7		
5882.373	3	401	<i>R</i> 5	2	3
5882.493	4	401	<i>R</i> 4	2	3
5882.808	12	401	<i>R</i> 4	7	9
5883.905	blended by Fe line	401	<i>R</i> 6	blended	blended, enhanced
5884.194	8	401	<i>R</i> 4	3	5

Fonte: Wohl (1969)

As linhas de absorção com números quânticos rotacionais próximos a  $J = 3$  devem ser as mais intensas na atmosfera terrestre, enquanto a 3000K aquelas com  $J$  de aproximadamente 10 devem ser as mais intensas. O fortalecimento relativo das linhas com maior número de  $J$  deve ser maior.

Polyansk (1997) propôs a presença de moléculas de água nas manchas solares através dos estados rotacionais e vibracionais mais elevados envolvendo níveis rotacionais, dentro das transições simétrica, assimétrica e flexão respectivamente (0,0,0), (0,1,0), (0,2,0), (1,0,0) e (0,0,1), os estados vibracionais de transições são (0,3,0), (0,4,0), (1,1,0), (0,1,1), (0,2,1), (1,1,1), (1,2,0) e (1,0,1) que também foram atribuídos, comparando-as com os espectros experimentais do infravermelho (IR) da água em altas temperaturas, os quais foram obtidos diretamente das manchas solares e disponibilizados pela NASA.

Tabela 1: Frequências de Linha Atribuídas (em  $\text{cm}^{-1}$ ) do Espectro de Água Quente Observadas em Manchas Solares (As Frequências Laboratoriais Também São Dadas Onde Observadas)

$\nu_{\text{sunspot}}$	$J''$	$K_a''$	$K_c''$	$J'$	$K_a'$	$K_c'$	$\nu_1 \nu_2 \nu_3$	$\nu_{\text{lab}}$	$\nu_{\text{sunspot}}$	$J''$	$K_a''$	$K_c''$	$J'$	$K_a'$	$K_c'$	$\nu_1 \nu_2 \nu_3$	$\nu_{\text{lab}}$
722.04394	19	14	5	18	13	6	100	722.04435	753.73939	18	13	6	17	12	5	020	753.73943
722.77418	18	12	6	17	11	7	021	722.77494	754.82949	21	10	12	20	9	11	020-100	754.83005
722.91650	17	17	0	16	16	1	010	722.91670	754.86501	15	5	11	14	2	12	010	754.86499
723.28241	20	11	9	19	10	10	000	723.28313	754.92332	19	19	0	18	18	1	000	754.92380
723.41320	15	12	3	14	11	4	040	723.41290	755.18342	30	10	21	29	9	20	000	755.18262
724.48467	18	15	3	17	14	4	011	724.48594	755.28189	21	13	8	20	12	9	100	755.28166
726.00063	21	8	13	20	7	14	000	726.00050	755.33968	15	10	5	14	9	6	030	755.34075
726.07282	28	9	20	27	8	19	010	726.07234	756.19919	22	9	14	21	8	13	020	756.19878
726.40111	21	10	11	20	9	12	000	726.39964	756.23351	20	17	3	19	16	4	001	756.23340
726.52430	23	10	14	22	9	13	001	726.52496	756.36571	19	17	2	18	16	3	110	756.36592
726.62891	18	16	2	17	15	3	000	726.62928	756.46259	16	12	5	16	9	8	000	
727.45275	20	8	12	19	7	13	020	727.45297	756.50331	23	9	14	22	8	15	001	756.50303
727.54456	18	15	4	17	14	3	110	727.54527	756.56086	12	7	5	11	4	8	100	
727.86596	21	10	12	20	9	11	011	727.86725	756.63965	21	10	11	20	9	12	020-100	756.63928
728.99355	19	11	8	18	10	9	010	728.99050	756.73725	20	20	0	19	19	1	001	756.73764
729.05279	19	15	4	18	14	5	100	729.05455	756.76800	14	3	11	13	2	12	020	756.76801
731.07133	17	11	6	16	10	7	030	731.07147	756.80364	22	12	11	21	11	10	001	756.80479
732.44631	20	10	11	19	9	10	010	732.44626	756.88768	19	18	1	18	17	2	110	756.88726
732.51988	19	17	3	18	16	2	001	732.52150	756.93469	20	16	5	19	15	4	100	756.93530
732.54897	18	17	2	17	16	1	110	732.54934	756.96059	18	4	15	17	9	8	030-020	756.96015
732.57487	18	18	1	17	17	0	110	732.57392	756.99596	22	12	10	21	11	11	001	756.99519
733.57548	16	14	3	15	13	2	030	733.57691	757.01309	22	9	14	21	14	7	020-010	757.01390
733.69532	27	9	19	26	8	18	010	733.69445	758.34765	20	18	2	19	17	3	001	758.34803
733.99940	17	10	7	17	7	10	010		758.47447	19	6	13	18	5	14	020	758.47437
734.29522	19	16	3	18	15	4	100	734.29504	758.61913	20	19	1	19	18	2	001	758.61822
735.87337	13	11	2	12	10	3	030-110	735.87369	758.90494	22	9	13	21	8	14	010	758.90567
738.45575	22	9	13	21	8	14	000	738.45629	759.29932	16	6	11	15	3	12	011	759.2998
738.52764	20	14	6	19	13	7	001	738.53003	759.51996	22	6	16	22	3	19	000	
738.54709	24	12	12	24	9	15	000	738.55265	759.53792	19	6	13	18	5	14	030	759.53683
738.78441	19	14	6	18	13	5	011	738.78398	759.68771	22	8	14	21	7	15	001	759.68663
738.87889	22	10	13	21	9	12	000	738.87926	759.88706	21	14	7	20	13	8	001	759.88585
740.12628	22	11	12	21	10	11	001	740.12682	759.91019	21	14	8	20	13	7	001	759.91124
740.21360	26	9	18	25	8	17	010	740.21165	760.01230	17	17	0	16	16	1	030	760.01046
743.12265	21	11	11	20	10	10	000	743.12339	760.11684	20	14	6	19	13	7	000	760.11674
743.34767	15	7	9	14	4	10	000	743.34735	760.18331	16	6	11	15	3	12	110	760.18640
744.58580	10	6	5	9	3	6	020	744.58153	760.41921	11	6	5	10	3	8	010	760.41834
746.38338	16	11	6	15	10	5	020-100	746.38438	760.59426	18	14	5	17	13	4	020	760.59492
746.40065	20	15	5	19	14	6	001	746.40038	760.82993	23	11	12	22	10	13	001	760.83306
746.58367	22	10	12	21	9	13	000	746.58395	760.91271	20	17	4	19	16	3	100	760.91264

Os dados obtidos por Polyansk (1997), trouxe resultados de novas linhas além das conhecidas, tornando os espectros rotacionais puro da água mais complexo em estados vibracionais excitados mais altos. Cerca de 3.000 das 4.700 transições observadas no espectro de laboratório são atribuídas, bem como 1.687 transições analisadas no espectro de manchas solares.

Na literatura diversos trabalhos buscaram comprovar a presença de diferentes moléculas no Sol. Em um desses estudos, Pande (1975) calculou as linhas das moléculas de HCN e CO<sub>2</sub> para verificar se as mesmas podem estar presentes no espectro das manchas solares. Os valores de  $J_{\text{máx}}$  selecionados correspondente foram próximos de 10 para a população esperada no Equilíbrio Termodinâmico Local (LTE) das manchas. Ele encontra duas linhas R (56) de CO<sub>2</sub> nos números de onda 3.478,93 cm<sup>-1</sup> e 2.384,49 cm<sup>-1</sup>, pertencentes respectivamente às bandas nas transições de (10°1-00°0) e (00°1-00°0) sugerindo assim que a bandas R (25) de HCN em 3.380,84 cm<sup>-1</sup> podem não aparecer na região do infravermelho do espectro de manchas solares.

As demais contribuições de Pande, Bagare (2008) através do Espectrômetro de Transformada de Fourier (ETF), de alta resolução, detectou um total de 15 bandas de moléculas LaO, ScO e VO, a identificação experimental comprovou mais de 1052 linhas de LaO, 371 linhas de ScO e 355 linhas de VO no espectro umbral. Esses dados confirmam que estes óxidos metálicos que respondem pela maioria das linhas nas umbras de manchas solares na faixa espectral de 11 775 a 20 600 cm<sup>-1</sup>. A faixa de temperatura desses óxidos metálicos sugere que as camadas absorventes provavelmente estão presentes em diferentes alturas na atmosfera umbral. Um estudo dessas linhas moleculares seria um diagnóstico muito útil das oscilações umbrais. A tabela 2 mostra as linhas para o LaO, em que P,Q e R são classificações para a largura das bandas.

Tabela 2: Valores de largura equivalentes estimados para o LaO

Linhas	$\tilde{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	W (mÅ)
P1d(45.5)	15 130,01	07,154

P1d(62.5)	15 130,01	07,154
P1d(43.5)	15 130,28	08,049
P1d(64.5)	15 130,28	08,049
P1c(28.5)	15 137,49	10,334
P1c(63.5)	15 137,49	10,334
P1d(20.5)	15 137,49	10,334
P1c(25.5)	15 138,30	06,558
P1c(66.5)	15 138,30	06,558
Q1d(31.5)	15 155,07	16,132
Q1c(27.5)	15 157,01	16,620
Q1d(39.5)	15 158,52	07,626
Q1c(45.5)	15 167,14	08,212
Q1c(47.5)	15 168,54	15,643
R1d(22.5)	15 168,54	15,643

---

Fonte: Adaptado de Bagare (2008)

Tennyson, Polyansky *et al*(2008) através do espectrômetro de transformada de Fourier fez atribuições de linha no espectro de laboratório para a água quente foi registrado na faixa de 500-13.000  $\text{cm}^{-1}$  intervalo de número de onda e relatamos a análise do 4750–13.000  $\text{cm}^{-1}$ (0,769–2,1  $\mu\text{m}$ ), bem como em um espectro de absorção de uma umbra de manchas solares. Utilizando-se dos espectros de Tennyson, Leite, Bastos e Pavão (2016) usaram o fato da molécula de água, em seu primeiro estado eletrônico excitado, ter geometria linear para obter seu espectro rotovibracional analítico, com isto comparou com o espectro experimental de IR das manchas solares, encontrando 67 transições na região de 537  $\text{cm}^{-1}$ – 925  $\text{cm}^{-1}$ . Este estado da molécula de água é magnético, logo pode ajudar a explicar o fato das manchas solares possuírem um campo magnético mais intenso. A figura 4 mostra as linhas contínuas em azul, que são atribuições de novas bandas de transição da molécula de água, as linhas tracejadas em azul





## OBJETIVOS

### Geral

- ✓ Estudo da existência de moléculas em manchas solares e suas consequências

### Específicos

- ✓ Constituir banco de dados de frequências experimentais provenientes das manchas solares na região do infravermelho;
- ✓ Obter o espectro rotovibracional teórico de moléculas diatômicas e triatômicas lineares;
- ✓ Identificar linhas de transição do espectro teórico no espectro experimental;
- ✓ Calcular o momento magnético das moléculas possivelmente existentes nas manchas solares e prevê influências no campo magnético;

## 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1 Sol

O Sol detém em sua composição química do meio interestelar ao qual foi formado: o hidrogênio e o hélio que foram produzidos por nucleossíntese do big bang, enquanto os metais foram produzidos por nucleossíntese de gerações estelares, sua cor originária é branca, apesar de ser visto como amarelo, alaranjado ou avermelhado no céu terrestre quando está próximo ao horizonte (o que se deve à dispersão dos raios na atmosfera). Sendo uma esfera de plasma encontrada em equilíbrio hidrostático, o sol em sua maior composição é de hidrogênio ( 74% de sua massa ou 92% de seu volume) e hélio ( 24% de massa, 7% de volume), com traços de outros elementos como: Ferro, Níquel, Oxigênio, Silício, Enxofre, Magnésio, Néon, Cálcio e Crômio (Eddy,1979)( tabela 3).

Tabela 3: Composição fotosférica por massa(%)

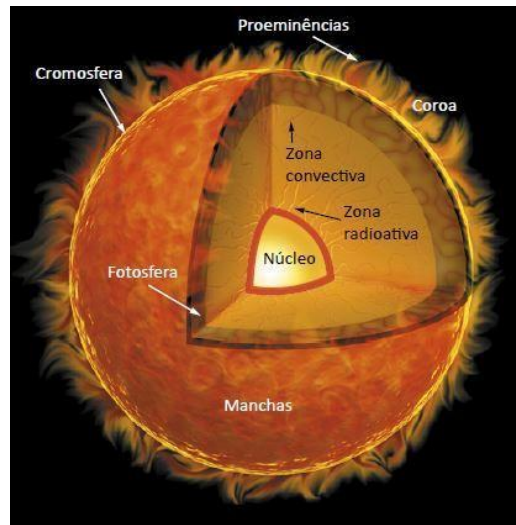
<i>Elemento</i>	<i>%</i>
Hidrogênio	73,46
Hélio	24,85
Oxigênio	0,77
Carbono	0,29
Ferro	0,16
Enxofre	0,12
Néon	0,12
Nitrogênio	0,09
Silício	0,07
Magnésio	0,05

Fonte: *Adaptado de Eddy (1979)*

Sendo composto, principalmente, pelo núcleo, zona radiativa, zona convectiva, fotosfera, cromosfera, uma fina camada avermelhada logo acima da fotosfera, coroa

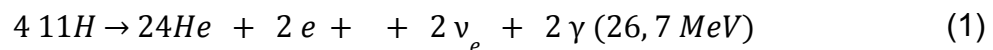
solar, parte mais externa é extensa e as manchas solares(figura 5).

Figura5 : *Estrutura do Sol*



Fonte: <https://www.coladaweb.com/astronomia/sol>

O núcleo, onde se produzem as reações nucleares chamada de cadeia próton-próton (1) que transformam a massa em energia através da fusão nuclear, esta reação converte 0,7% da massa fundida em energia. O interior do Sol não é diretamente observável, já que a radiação é completamente absorvida (e reemitida) pelo plasma do interior solar, o Sol em si é opaco à radiação eletromagnética.



A equação 1 mostra o hidrogênio (H) ao passar por uma reação de fusão nuclear resultando na formação de um átomo de hélio (He), na liberação de elétrons ( $e^-$ ), neutrinos ( $\nu_e$ ) e partículas gama ( $\gamma$ ), essas últimas ( $\nu_e, \gamma$ ) liberando uma energia igual a 26,7 MeV.

A zona convectiva tem temperaturas próximas a 1 milhão e meio de graus. Ocupando assim a região entre 0,7 raios solares do centro (200.000 km abaixo da superfície solar). Nesta região, o plasma solar de modo algum é denso ou quente o bastante para transferir o calor do interior do Sol para fora via radiação — em outras palavras, não é opaco o suficiente. Como resultado a convecção térmica ocorre na medida em que colunas térmicas carregam material quente para a superfície solar. Quando a temperatura deste material cai na superfície, baixa na direção da base da

zona de convecção, onde recebe calor do topo da zona de radiação, recomeçando o ciclo novamente (THE SOLAR INTERIOR, 2022).

Verificou-se que na cromosfera a temperatura solar eleva-se com o aumento da altura na própria cromosfera. A temperatura no topo da fotosfera é cerca de 5.800 K, enquanto no topo da cromosfera, cerca de 2.000 km superior, atingindo 25.000 K. Tal situação é o oposto do que é possível encontrar na fotosfera, onde a temperatura cai com o aumento da altura. Ainda não é totalmente compreendido qual fenômeno faz com que a temperatura da cromosfera aumente paradoxalmente a partir do interior do Sol. No entanto, parece ser provável que seja explicado, parcial ou totalmente, por reconexão magnética (LEITE, PAVÃO E BASTOS, 2016).

A zona de radiação é a parte quente e densa o suficiente do sol que permite transferência de calor do centro para fora via radiação térmica. Entre a zona de radiação e a zona de convecção existe uma camada de transição no ponto em que ocorre uma mudança súbita de condições entre a rotação uniforme da zona radiativa e a rotação diferencial da zona de convecção, adquirindo as mesmas características da zona de radiação. Acredita-se que um dínamo magnético dentro desta camada gera o campo magnético solar (THE SOLAR INTERIOR, 2022).

## **2.2 Manchas Solares**

Manchas solares são regiões da fotosfera solar, as quais possuem temperatura superficial reduzida (~ 3000K), causadas por concentrações do fluxo de campo magnético que inibem a convecção. O seu número varia conforme o ciclo solar de aproximadamente 11 anos. É composta por um centro escuro, chamado umbra e outro menos escuro que se localiza ao redor da umbra chamada penumbra ( figura 1). É na umbra em que se concentra seu intenso campo magnético que é uma das principais características das manchas solares, como o campo muda com o tempo, as propriedades intrínsecas das manchas solares também podem mudar. A figura 6 demonstra algumas propriedades das manchas.

Figura 6 : Propriedades das manchas

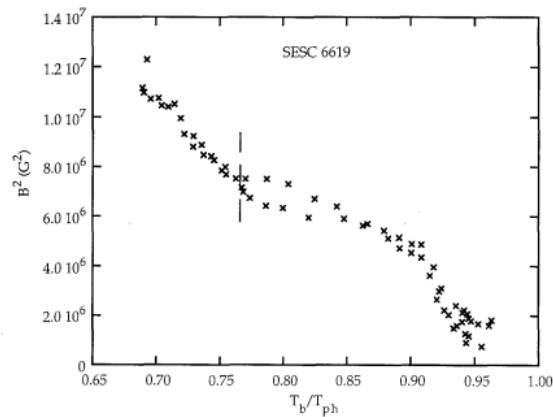
Propriedade	Valor
Diâmetro médio das manchas	D = 1.500 ~ 50.000 km
T <sup>o</sup> média na mancha solar	T = 3300 K
T <sup>o</sup> na penumbra (mancha solar)	T = 1100 ~2000 K
T <sup>o</sup> na umbra (mancha solar)	T = 3200~3900 K
Campo Magnético nas manchas	B = 3200~3900 G
Campo Magnético nos poros	B = 1100~2000 G
Tempo de vida típico das manchas	Dias a meses
Média anual do número total de manchas <sup>88</sup>	69.70 (ano de 2015) 113.30 (ano de 2014) 94 (ano de 2013)

Fonte: Leite, Bastos, Pavão (2016)

Os dados apontam que o seu campo magnético varia de 3.200 ~ 3.900 G. Existe uma relação local entre a temperatura e o campo magnético na umbra das manchas solares, determinam que as umbras escuras e mais frias contêm campos magnéticos com maior intensidade. A diferença de intensidade das manchas solares pode representar uma variação de 300-600K nas temperaturas médias da umbra (LEITE, BASTOS, PAVÃO, 2016).

Nessa perspectiva, é possível promover uma discussão acerca da relação entre o campo magnético a temperatura nas manchas solares. Kopp e Rabin (1992) conseguem através da divisão de manchas solares Stokes I Zeeman que há uma relação aproximadamente linear entre  $B^2$  (intensidade do campo) e  $T_b$  ( temperatura) na umbra, consistente como equilíbrio magneto hidrostático em um campo quase vertical ( figura 7).

Figura 7 :Quadrado da intensidade do campo magnético versus temperatura de brilho. A linha tracejada delinea a região umbral à esquerda da qual os dados são quase lineares.



Fonte: Kopp e Rabin (1992)

Na figura 7 é possível observar que parte do rápido aumento de  $T_b$  na transição umbra/penumbra seja devido a uma rápida diminuição em  $B_z$  (campo na direção z). Assim, não se espera uma relação puramente linear entre  $T$  e  $B$  ou  $B^2$ .

### 2.3 Estrutura molecular

A estrutura molecular é formada pelo agrupamento de moléculas fortemente ligadas entre si por ligações químicas, sejam elas de natureza iônica ou covalente. Para calcular energias, estrutura molecular, espectros, magnetismo, é necessário utilizar a descrição quântica da matéria. A primeira abordagem pode ser feita partindo da equação de Schrödinger estacionária (independente do tempo) (2):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (2)$$

Onde  $\Psi(x)$  é a função de onda independente do tempo em função da coordenada  $x$ ,  $\hbar$  é a constante de Planck  $h$  dividida por  $2\pi$ ;  $m$  é a massa da partícula;  $V(x)$  é a função energia potencial e  $E$  é a energia do sistema. Embora seja usada na física e na maior parte da química para tratar sobre a estrutura atômica da matéria, a equação de Schrödinger resolve apenas sistemas hidrogenóides. Para tornar o sistema possível para sistemas moleculares é necessário recorrer a aproximações e simplificações. A aproximação de Born- Oppenheimer é uma divisão do hamiltoniano no sistema, separando o movimento nuclear do eletrônico.

Com a finalidade de efetuar essa aproximação é necessário que os elétrons

possuem massa muito menor que o núcleo se adaptam quase que instantaneamente a qualquer disposição nuclear. Desse modo, ao invés de resolver a equação de Schrödinger para todas as partículas simultaneamente, primeiramente resolve-se a parte eletrônica para cada disposição fixa, depois lidamos com o movimento nuclear. Contudo, a aproximação de Born-Oppenheimer ainda possui críticas, diversos problemas podem surgir dependendo das características do sistema, mas de modo geral funciona perfeitamente bem (BRAGA, 2007).

Partindo da equação Schrödinger (Eq.2), pode-se demonstrar a aproximação de Born- Oppenheimer da seguinte forma:

$$H = T_e + T_N + T_{Ne} + V_{NN} + V_{ee} \quad (3)$$

O Hamiltoniano,  $H$ , contém os termos de energia cinética dos núcleos, elétrons e as interações eletrostáticas entre eles,  $N$  e  $e$  diz respeito ao núcleo e ao elétron, respectivamente. Cada termo da equação 3 corresponde às interações do sistema:

- Energia cinética nuclear:

$$T_N = \sum_A \frac{1}{M_A} \nabla_A^2 \quad (3.1)$$

- Energia potencial entre os núcleos:

$$V_{NN} = \sum_A \sum_{A>B} \frac{Z_A Z_B}{|R_A - R_B|} \quad (3.2)$$

- Energia cinética eletrônica:

$$T_e = - \sum_i \frac{1}{2} \nabla_i^2 \quad (3.3)$$

- Energia potencial entre os elétrons:

$$V_{ee} = \sum_i \sum_{j>i} \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad (3.4)$$

- Energia potencial elétron-núcleo:



$$V_{Ne} = \sum_i \sum_{A>i} \frac{Z_A}{|R_A - r_i|} \quad (3.5)$$

Separando as funções de onda  $\Psi(r, R)$  obtemos:

$$\Psi(r, R) = \Psi_e(r, R)\Psi_N(R) \quad (4)$$

Utilizando a aproximação adiabática a energia cinética do núcleo não influencia na função de onda eletrônica, com isso, a desprezamos no cálculo eletrônico. Assim, chegamos a duas equações distintas, uma para a parte nuclear (Eq.5) e outra para a eletrônica (Eq. 6).

$$\left[ T_n + E(R) \right] \Psi_N(R) = H_N \Psi_N(R) = E \Psi_N(R) \quad (5)$$

$$\left( T_e + V_{Ne} + V_{NN} + V_{ee} \right) \Psi_e(r, R) = H_e \Psi_e(r, R) = E(R) \Psi_e(r, R) \quad (6)$$

O resultado da (Equação 5) fornece aspectos dos modos vibracionais e rotacionais das moléculas.

## 2.4 Teoria do Orbital Molecular (TOM)

A teoria do orbital molecular (TOM) constitui uma alternativa para explicar as ligações químicas. Além disso, a teoria MO considera que os orbitais atômicos, AOs, do nível de valência, deixam de existir quando a molécula se forma, sendo substituídos por um novo conjunto de níveis energéticos que correspondem a novas distribuições de nuvem eletrônica (densidade de probabilidade). Esses novos níveis energéticos constituem uma propriedade da molécula como um todo e são chamados, conseqüentemente, de orbitais moleculares. A TOM consegue esclarecer as propriedades magnéticas apresentadas por determinadas moléculas (ATKINS, 2003).

Assim como as aproximações concebidas por Oppenheimer, o modelo da OM's também necessita de aproximações e simplificações. Uma das aproximações comumente feita nessa teoria é que somente as funções de onda relativas aos elétrons de valência de cada átomo são consideradas na definição dos orbitais de uma dada molécula composta por estes átomos, ou seja, os dois orbitais atômicos dão origem a um novo orbital (molecular), cuja função de onda é decorrente da

combinação das duas funções de onda originais (Equação 7).

$$\Psi = C_A \phi_A + C_B \phi_B \quad (7)$$

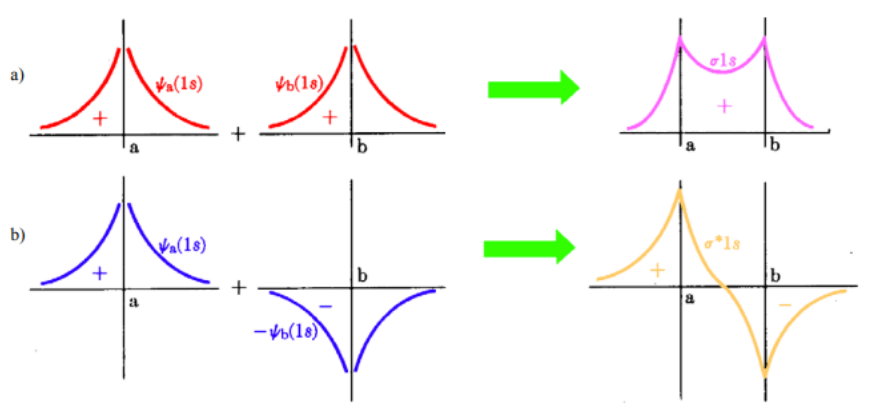
Onde C é a contribuição ponderada de cada orbital atômico,  $\phi_A$  e  $\phi_B$  são as funções de onda dos orbitais atômicos, portanto:

$$\psi = \phi_A + \phi_B \quad (8)$$

$$\psi = \phi_A - \phi_B$$

A equação 8 demonstra que haverá uma adição ou uma subtração das funções de onda dos AO's, logo haverá uma sobreposição das funções de onda dos fragmentos separados de uma molécula, formando um novo orbital MO, resultando em informações sobre a densidade de probabilidade para um elétron ocupando aquele MO e, a partir dessas informações, as superfícies limites correspondentes (e também os níveis energéticos) podem ser encontradas (ATKINS, 2003).

Figura 8: formação de orbitais moleculares ligantes e anti-ligantes através da soma e subtração dos orbitais atômicos

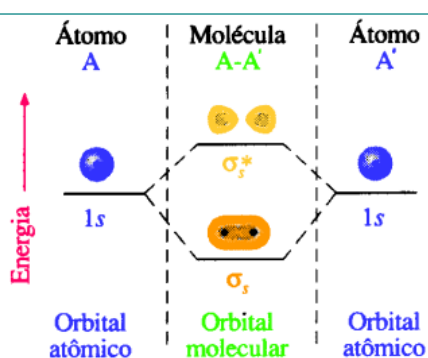


Quando duas funções são adicionadas há uma redistribuição de densidade eletrônica entre os núcleos, abaixando a energia, como resultado este orbital possui características ligantes ( figura 8.a). No caso subtração dos orbitais ( figura 8.b) ocorre o cancelamento exatamente entre si em um plano que está situado a meio caminho entre os núcleos, a densidade de probabilidade é positiva em todos os lugares, exceto no plano, que é zero, ocasionando uma energia cinética e potencial dos elétrons muito alto, logo a molécula não está ligada e o orbital possui características antiligante.

#### 2.4.1 Teoria do Orbital Molecular para Moléculas Diatômicas Homonucleares e Heteronucleares.

Compreendendo-se a diferença na formação dos orbitais moleculares, ligante e antiligante, podemos então utilizá-lo para descrever as moléculas diatômicas homonucleares. Consideremos, como exemplo, a formação da molécula de  $H_2$ , inicialmente, seus orbitais não se sobrepõem e a energia potencial do sistema é considerada igual a zero. À medida que eles se aproximam, ocorrem interações entre seus orbitais, formando-se um MO Ligante e um MO antiligante( Figura 9). Os elétrons ocupam o orbital molecular Ligante, em que a densidade eletrônica é maior. Dessa forma, será favorecida a atração núcleo-elétron e minimizar a repulsão núcleo-núcleo, isto significa que, quanto mais próximos do núcleo, mais os orbitais se sobrepõem, conseqüentemente menor será a energia potencial (TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR, 2022).

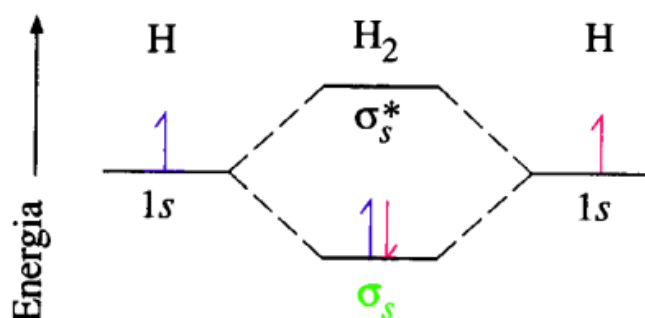
Figura 9: Energias relativas dos orbitais  $\sigma_s$  em moléculas diatômicas homonucleares



Fonte: Disponível em <<https://qui.ufmg.br/~ayala/matdidatico/tom.pdf>>

Usando como base o diagrama acima é possível realizar o preenchimento dos níveis energéticos do diagrama de MO para o H<sub>2</sub>( Figura 10).

Figura 10: Diagrama de preenchimento de MO para a molécula de H<sub>2</sub>



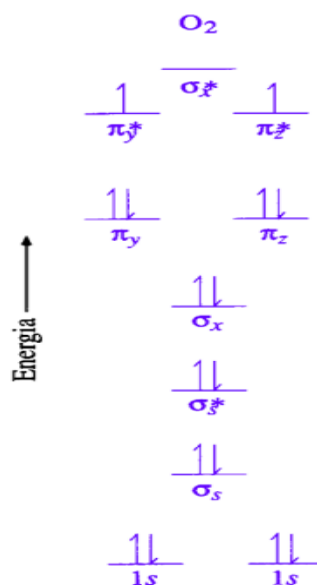
Fonte: Disponível em <<https://qui.ufmg.br/~ayala/matdidatico/tom.pdf>>

A Figura 10 mostra os elétrons colocados em dois átomos de H não-ligados e, no meio do diagrama, a molécula de H<sub>2</sub> no estado fundamental. Os dois elétrons 1s vão constituir um par (spins opostos) no orbital  $\sigma_s$  (ligante) da molécula. Este par constitui uma ligação simples. A configuração eletrônica da molécula de hidrogênio pode ser escrita como: H<sub>2</sub>: ( $\sigma_s$ )<sup>2</sup>.

Dentro da TOM teremos uma consequência direta da distribuição dos elétrons no orbital molecular, o chamado momento magnético. As moléculas podem ser divididas em dois tipos em relação ao magnetismo: Paramagnética e Diamagnética. Esta divisão está baseada na configuração dos elétrons do nível dos OM mais energéticos, onde caso estejam desemparelhados temos uma molécula Para e se emparelhados diamagnética (Huheey, 1993). O H<sub>2</sub>, por exemplo, seria Diamagnético, pois os elétrons em seu único OM estão emparelhados.

Em 1916, Lewis sugeriu que para ficarem estáveis, atingindo o octeto ou o dueto, os elementos que compõem as substâncias moleculares realizam um compartilhamento de pares de elétrons, sua principal característica é que ela mostra os elétrons na camada de valência de cada átomo e a formação dos pares eletrônicos. De acordo com Lewis o  $O_2$  possui seis elétrons na sua camada eletrônica, assim cada um precisa receber mais dois elétrons para ficar estável (ter seus orbitais preenchidos, portanto sendo singlete sua forma mais estável), contudo, experimentos da época já evidenciaram uma resposta desta molécula a um campo magnético. Anos depois a TOM comprovou que o  $O_2$  é mais abundante como triplete, logo é Paramagnético, uma vez que seus elétrons se encontram desemparelhados nos seus últimos orbitais ocupados, mostrados na figura 11.

Figura 11: Diagrama de preenchimento de MO para a molécula de  $O_2$



Fonte: Disponível em <https://qui.ufmg.br/~ayala/matdidatico/tom.pdf>

A configuração eletrônica do  $O_2$  é  $(\sigma_s)^2 (\sigma_s^*)^2 (\sigma_x)^2 (\pi_y)^2 (\pi_z)^2 (\pi_y^*)^1 (\pi_z^*)^1$ . Note que nos  $(\pi_y^*)^1 (\pi_z^*)^1$  (Figura 10) os elétrons estão desemparelhados, logo, podemos afirmar que o  $O_2$  é Paramagnético.

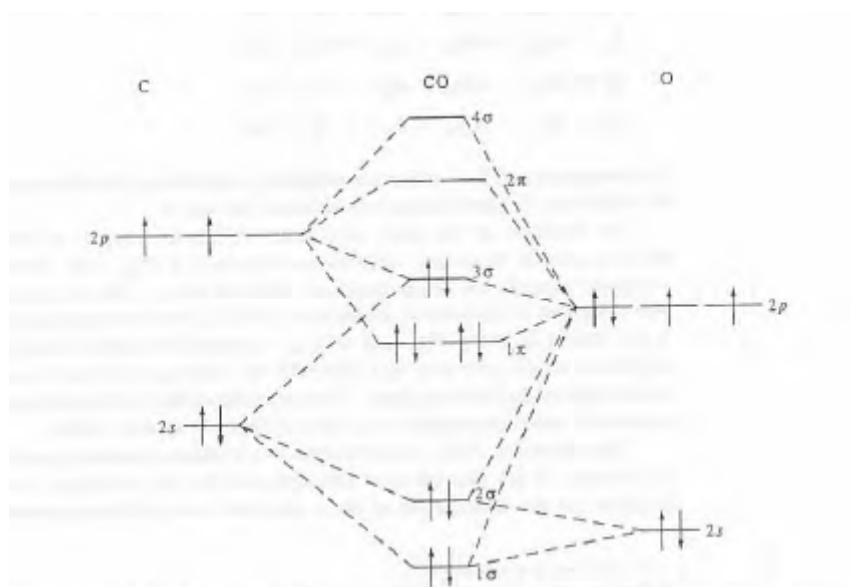
Essa classificação implica em efeitos diretos no campo magnético aplicado a estas moléculas, as moléculas paramagnéticas tem a capacidade de provocar um leve aumento na intensidade do campo magnético, por conta dos seus elétrons

desemparelhados, conseqüentemente nas diamagnéticas isso não ocorre, pois os orbitais encontram-se emparelhados.

Para mais a TOM, apresenta moléculas diatômicas heteronucleares com aspectos diferentes das moléculas diatômicas homonucleares. Ligações heteronucleares são formadas por orbitais de diferentes energias, quando isso ocorre o conceito de ligação gira em torno da eletronegatividade, os elétrons ligantes serão mais estáveis na presença do núcleo do átomo de maior atração (maior eletronegatividade), do átomo menos eletronegativo normalmente contribui mais para formação do orbital molecular antiligante. A nuvem eletrônica será distorcida em direção ao núcleo do átomo mais eletronegativo (HUHEEY, 1993).

Tomemos como exemplo o CO (Figura 12).

Figura 12: Diagrama de preenchimento de MO para a molécula de CO



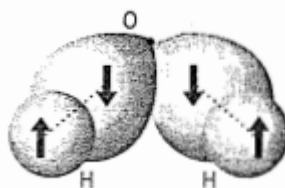
Fonte: Huheey (1993)

A configuração eletrônica do estado fundamental do CO é:  $(1\sigma)^2 (2\sigma)^2 (1\pi)^4 (3\sigma)^2$ , observa-se que os orbitais moleculares ligantes se assemelham mais aos orbitais atômicos do oxigênio que os do carbono, os orbitais anti-ligantes se assemelham ao elemento menos eletronegativo, neste caso o carbono (figura 12). Podemos concluir a partir das disposições dos elétrons nos orbitais que a molécula de CO é Diamagnética.

#### 2.4.2 Teoria do Orbital Molecular para Moléculas Poliatômicas

Em uma molécula poliatômica, cada ligação  $\sigma$  é formada pelo emparelhamento do spin dos elétrons em quaisquer orbitais atômicos vizinhos de simetria apropriada. Usando como exemplo  $\text{H}_2\text{O}$  temos que a configuração eletrônica de um átomo de O é  $2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$ , os dois elétrons desemparelhados do O 2p podem cada um se emparelhar com um elétron no orbital do H 1s, e cada combinação resulta em uma ligação  $\sigma$  (respectivo eixo internuclear O-H) (figura 13). Devido ao fato dos orbitais  $2p_y$  e  $2p_z$  encontrarem-se a uma distância de  $90^\circ$ , as duas ligações  $\sigma$  também encontram-se em um ângulo de  $90^\circ$ , dessa forma predizem que a molécula de  $\text{H}_2\text{O}$  é angular, embora seu ângulo de ligação real seja de  $104,5^\circ$  (ATKINS, 2003).

Figura 13: Descrição da ligação de valência de uma molécula de  $\text{H}_2\text{O}$



Fonte: ATKINS (2003)

Devido ao emparelhamento dos elétrons do orbital 2p do O e do H 1s pode-se afirmar que a molécula de água é Diamagnética. Isso terá importância pois a estrutura eletrônica de cada molécula revela espectros característicos e podem servir para identificação no Sol e ou para ajudar a elucidar o comportamento das manchas.

## 2.5 Espectro Rotovibracional

Os métodos espectroscópicos oferecem conhecimentos acerca da estrutura da matéria atômica e molecular. Informações sobre a estrutura molecular e a interação de moléculas com seus vizinhos podem ser derivadas de diversos modos a partir dos espectros de emissão e/ou absorção gerados quando a radiação interage com os átomos e/ou moléculas da matéria. Medidas do comprimento de onda de linhas espectrais permitem a determinação de níveis de energia de

sistemas atômicos e moleculares. A intensidade da linha é proporcional à probabilidade de transição que mede quão fortemente dois níveis de uma transição estão acoplados. Uma vez que, a probabilidade de transição depende das funções de onda de ambos os níveis de energia, medidas de intensidade são úteis para verificar a distribuição espacial de cargas dos elétrons excitados, a qual pode ser estimada a partir de soluções aproximadas da equação de Schrödinger ( equação 5) (ALCÂNTARA, 2002).

A mais simples abordagem para espectroscopia rotacional é chamada de aproximação do rotor rígido. O modelo de rotor rígido linear pode ser usado em mecânica quântica para prever a energia rotacional de uma molécula diatômica (Equação 9)

$$\bar{B} = \frac{B}{hc} = \frac{h}{8\pi^2 cI} = \frac{\hbar}{4c\mu R_e^2} \quad (9)$$

Onde  $c$  é a velocidade da luz,  $\hbar$  ( $h/2\pi$ ) é a constante de Planck,  $I$  é o momento de inércia,  $\mu$  é a massa reduzida e  $R_e$  é o raio, expresso em números de onda ( $\text{cm}^{-1}$ ). A constante de rotação depende da distância.

O movimento vibracional de uma molécula pode ser descrito por um oscilador harmônico. As soluções físicas da equação de Schrödinger para o oscilador harmônico são obtidas se a energia é restrita a valores discretos, dados por:

$$E_v = hc\tilde{\nu}\left(v + \frac{1}{2}\right) \quad (1)$$

Onde  $v = 0, 1, 2, \dots$ ,  $\tilde{\nu}$  é a frequência vibracional fundamental. Na equação de Schrödinger para o oscilador harmônico, obtêm-se os seguintes autovalores ( $\text{cm}^{-1}$ ):

$$E_{vib} = \tilde{\nu}_2\left(\frac{1}{2} + n_1 + \frac{1}{2} + n_2\right) + \tilde{\nu}_1\left(\frac{1}{2} + n_3\right) + \tilde{\nu}_3\left(\frac{1}{2} + n_4\right) \quad (1)$$



1)

Em que  $\tilde{\nu}_1$ ,  $\tilde{\nu}_2$  e  $\tilde{\nu}_3$  são respectivamente as frequências simétrica, flexão (tesoura) e antissimétrica,  $n_1$  e  $n_2$  são os números quânticos de tesoura e  $n_3$  e  $n_4$  pertencem aos números quânticos simétrico e assimétrico, respectivamente.

Os movimentos vibracionais e rotacionais não ocorrem separadamente, dando origem a uma estrutura fina nas bandas vibracionais, considerando que estes movimentos estão acoplados, a maneira mais simples para estudar o espectro roto vibracional seria utilizar o modelo do oscilador harmônico (Eq.10) com o modelo do rotor rígido (Eq. 9) (LEITE, BASTOS E PAVÃO, 2016). Outras correções podem ser consideradas para a energia rotovibracional, como a correção anarmônica (H), dada por:

$$E_H = -\alpha X \left( \frac{1}{2} + n_3 \right) \quad (12)$$

Onde  $\alpha = \frac{3h^2\tilde{\nu}}{16\mu r^2 D_d} \left( \frac{1}{ar} - \frac{1}{a^2 r^2} \right)$ ,  $a = \frac{2c\tilde{\nu}\sqrt{\mu}}{\sqrt{2D_d}}$ ,  $X = \frac{hc\tilde{\nu}}{4D_d}$ ,  $D_d$  é a energia de dissociação da molécula e  $r$  é a distância entre as ligações. Essa contribuição diminuiu a diferença de energia entre os estados vibracionais.

Espectros roto-vibracionais consistem de transições dos níveis rotacionais de um certo estado vibracional para os níveis rotacionais de um outro estado vibracional no mesmo termo eletrônico. O estado de excitação eletrônica, assim, permanece inalterado. Mudam os números quânticos  $J$  e  $v$ , onde  $v$  caracteriza os níveis vibracionais quantizados. Estes espectros se encontram na região do infravermelho. Eles consistem de um número de bandas, que são grupos de linhas estreitamente espaçadas, denominadas de linhas de banda. Eles podem ser observados com espectroscopia Raman, assim como espectroscopia infravermelha (AICÂNTARA, 2002).

### 3. METODOLOGIA

Utilizando -se espectroscopia rotovibracional para buscar indícios da presença de certas moléculas nas manchas solares. Foi possível estabelecer três tipos de espectros para moléculas: eletrônico, vibracional e rotacional. Com estes a identificação de moléculas passou a ser cada vez mais precisa. Usando-se dos métodos analíticos e computacionais para obter tais espectros.

#### 3.1 Métodos Analíticos

Para moléculas lineares, é possível obter analiticamente seu espectro rotovibracional, desta forma comparar com os dados experimentais e prever sua existência nas manchas solares e possíveis consequências disso. Para moléculas diatômicas uma expressão para a energia rotovibracional é:

$$E(v, J) = \frac{E}{hc} = \omega_e \left( v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left( v + \frac{1}{2} \right)^2 + B_e J(J + 1) - D_e J^2(J + 1)^2 - \alpha_e \quad (13)$$

onde  $\omega_e$  é a constante vibracional da contribuição harmônica,  $v$  é o número quântico vibracional,  $\omega_e x_e$  é a constante da contribuição anarmônica,  $B_e$  é a constante do Rotor Rígido,  $J$  é o número quântico rotacional,  $D_e$  é a constante rotacional não rígida,  $\alpha_e$  é a contribuição de Coriolis.

Embora um pouco mais complexo, o espectro de moléculas triatômicas lineares também possui uma expressão analítica. Considerando um modelo rotovibracional sem contribuições anarmônica, rotor não-rígido e Coriolis, temos a seguinte equação:

$$E(v, J) = \frac{E}{hc} = v_2 \left( \frac{1}{2} + n_1 + \frac{1}{2} + n_2 \right) - v_1 \left( \frac{1}{2} + n_3 \right) + v_3 \left( \frac{1}{2} + n_4 \right) + BJ(J + 1) \quad (14)$$

Onde  $v_1$ ,  $v_2$  e  $v_3$  são respectivamente as frequências simétrica, flexão (tesoura) e assimétrica,  $n_1$  e  $n_2$  são os números quânticos de flexão e  $n_3$  e  $n_4$  pertencem aos números quânticos simétrico e assimétrico,  $B$  é a constante rotacional e  $J$  é o número quântico rotacional.

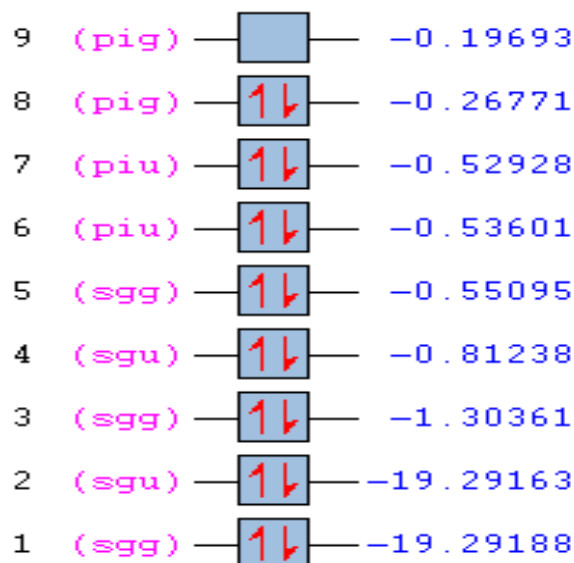
#### 3.2 Métodos Computacionais

Não foi possível obter dados experimentais de algumas distâncias de ligações e constantes vibracionais das moléculas triatômicas estudadas. Contudo podemos obter essas grandezas computacionalmente usando a Teoria do Funcional de Densidade (*DFT*). Usamos o funcional híbrido B3LYP, que é formado pelo funcional de troca (*exchange*) de Becke e o de correlação de Lee-Yang-Parr, definido por:  $B3LYP = 0.20Ex(HF) + 0.80Ex(Slater) + 0.72DEx(B88)^{GGA} + 0.19Ec(VWN)^{LDA} + 0.81DEc(LYP)^{GGA}$  (3), onde *Ex* é a energia de troca (*exchange*), *Ec* é a energia de correlação e *HF*, *B88*, *VWN*, *LYP* são, respectivamente, os termos de Hartree-Fock, Beck, Vosko-Wilk-Nusair, and the Lee-Yang-Parr. Como função de base, utilizamos a 6311-g, que é adequada para nossas moléculas de forma geral e está implementada no programa utilizado, o Gaussian03.

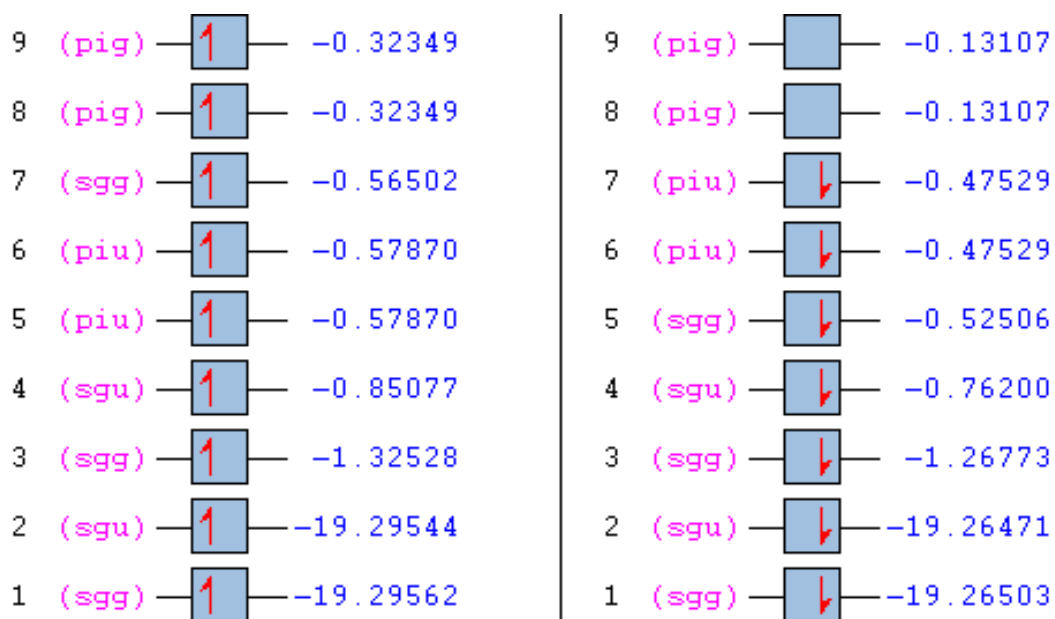
### 3.3 Magnetismo das moléculas

Para determinar se as moléculas estudadas são Diamagnéticas ou Paramagnéticas será feita a análise das energias de dois estados distintos de multiplicidade, singleto (camada fechada) e tripleto (camada aberta), como por exemplo o  $O_2$  (Figura 14). Esses estados foram calculados a partir do método DFT/B3LYP com função de base 6-311+g(d). Moléculas em que o singleto tenha menor energia que o tripleto temos um emparelhamento dos últimos elétrons, ou seja, iremos considerar como Diamagnética. Já nos casos de desemparelhamento, aqueles em que o tripleto tem menor energia que singleto, iremos considerar como Paramagnético.

Figura 14. Gráfico da energia singlete/triplete da molécula de O<sub>2</sub>



$E = -150,31(u.a)$



$E = -150,37 (u.a)$

## 4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O espectro rotovibracional foi corretamente analisado para as moléculas de: BH, CH, HF, C<sub>2</sub>, CN, MgH, CO, AlH, NO, SiH, HCl, NP, TiO, CO<sub>2</sub>, HCN, NO<sub>2</sub>, BeCl<sub>2</sub>, OCS, N<sub>2</sub>O. Inicialmente foi possível obter os parâmetros  $W_e$ ,  $W_e X_e$ ,  $B_e$ ,  $\alpha_e$  e  $v_1$ ,  $v_2 v_3$  da Equação(13) para moléculas diatômicas através de dados experimentais na literatura. Para moléculas triatômicas lineares( Equação 14), apenas o  $B_e$  foi obtido por métodos computacionais. A Tabela 4 mostra as constantes rotovibracionais para as moléculas diatômicas.

Tabela 4. Constantes Rotovibracionais das moléculas diatômicas

<i>Molécula</i>	<i><math>W_e(cm^{-1})</math></i>	<i><math>B_e (cm^{-1})</math></i>	<i><math>W_e X_e (cm^{-1})</math></i>	<i><math>\alpha_e (cm^{-1})</math></i>
BH	2366,700	12,0257500	49,33983	0,42156500
CH	2860,750	14,4598800	64,43870	0,53654000
HF	4138,385	20,9537100	89,94319	0,79337040
C <sub>2</sub>	1855,100	1,8200530	13,60070	0,017914300
CN	2068,600	1,8997830	13,09710	0,01737200
MgH	1492,800	5,8255230	29,84862	0,17729810
CO	2169,800	1,9316020	13,28803	0,01750513
AlH	1682,400	6,3937840	29,05098	0,18705270
NO	1904,140	1,7048880	14,08836	0,01754158
SiH	2042,500	7,50389800	36,05520	0,21814000
HCl	2990,900	10,5933000	52,79996	0,30699850
NP	1336,950	0,7864844	6,89580	0,00553370
TiO	1009,000	0,5354100	4,49800	0,00301000

Fonte: o autor

Este conjunto de moléculas mostra-se bastante representativo tendo em vista a variedade dos átomos e conseqüentemente suas diferentes massas atômicas. Foi escolhido também um universo variado de moléculas triatômicas lineares, permitindo perceber quais tipos devem existir nas manchas solares. A tabela 5 traz as constantes rotovibracionais para as moléculas triatômicas.

Tabela 5. Constantes rotovibracionais de moléculas triatômicas

Molécula	$\tilde{\nu}_1$ (cm <sup>-1</sup> )	$\tilde{\nu}_2$ (cm <sup>-1</sup> )	$\tilde{\nu}_3$ (cm <sup>-1</sup> )	$B_e$ (cm <sup>-1</sup> ) *
CO <sub>2</sub>	1333	2349	667	0,390210
HCN	3312	2089	712	1,478220
NNO	2224	1285	589	0,419010
BeCl <sub>2</sub>	0	1122	238	0,775100
OCS	2062	859	520	0,202860
NO <sub>2</sub>	1318	750	1618	0,344846

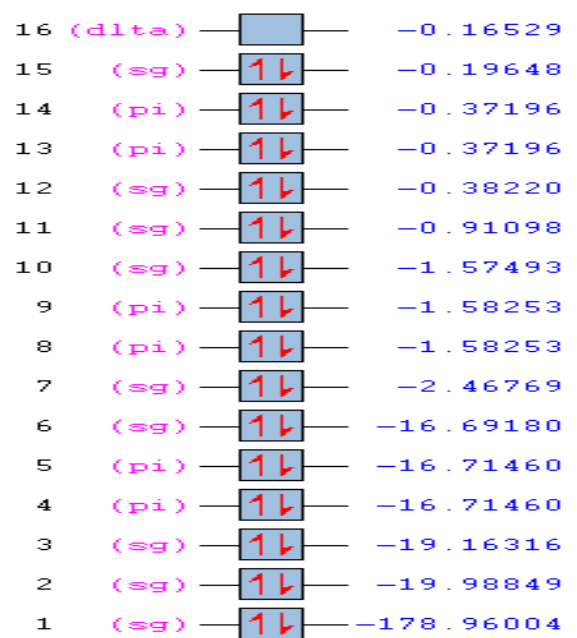
\*Dados obtidos computacionalmente.

Fonte: o autor

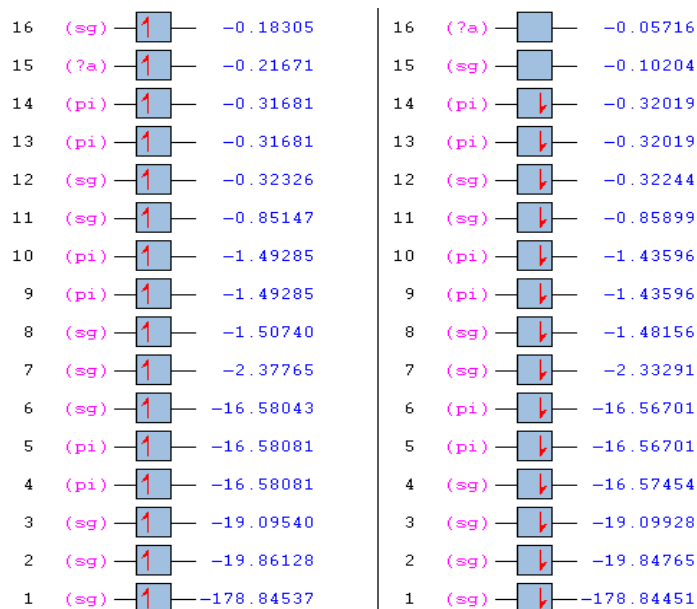
As diferenças entre as constantes indicam que estas moléculas devem apresentar transições em regiões distintas e razoavelmente afastadas no espectro.

A partir do cálculo da energia eletrônica total para as moléculas usando camada aberta (triplete) e camada fechada (singleto), foi possível identificar os sistemas mais estáveis para as moléculas estudadas, os gráficos de energia abaixo demonstram as moléculas de TiO e NP.

Figura 15. Calculos singlete/triplete na base DFT - B3LYP -6-311+g(d) para o TiO



$$E = -924,65(u.a)$$



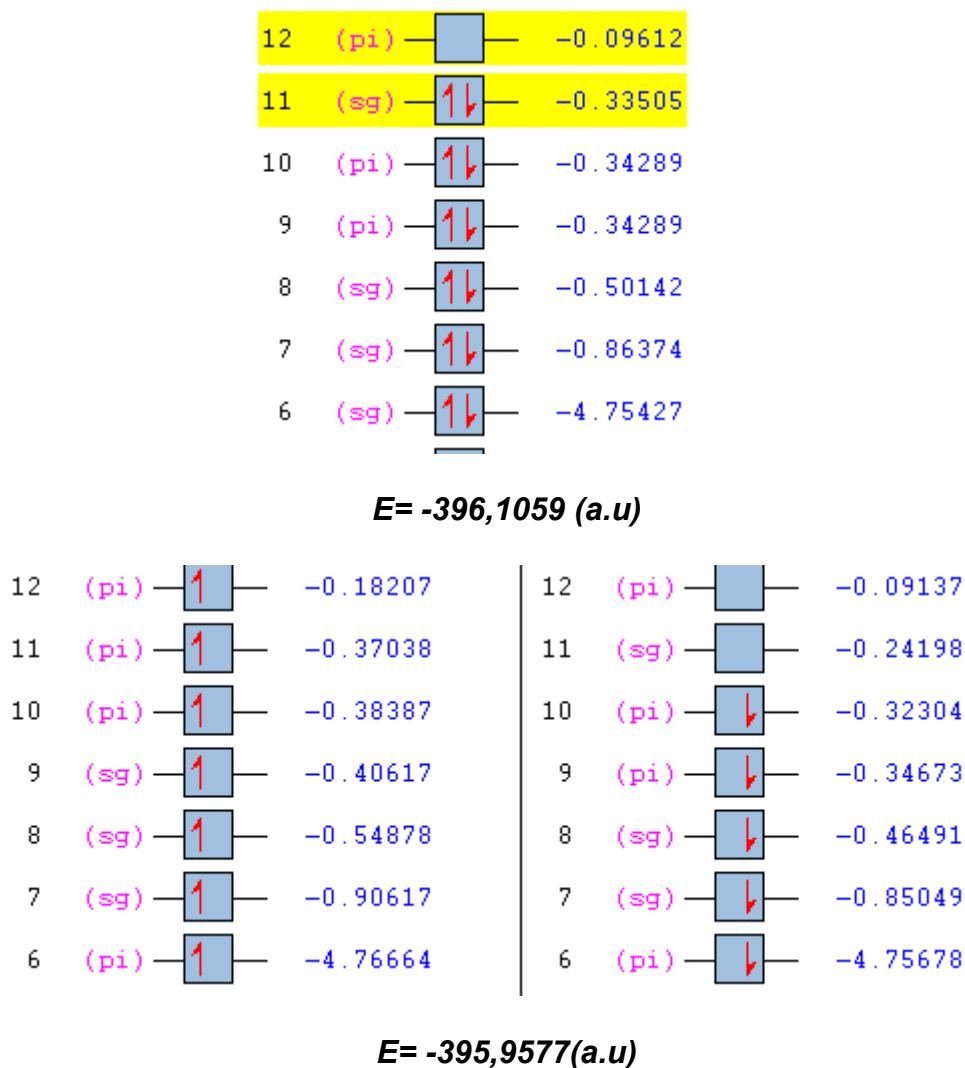
$$E = -924,70 (u.a)$$

Fonte: Gaussian03

Note que, na figura 15 a energia do tripleto(camada aberta) é menor, mais

estável, para a molécula de TiO, portanto os pares de elétrons estão desemparelhados e podemos afirmar que a molécula é Paramagnética.

Figura 16. Calculos singlete/triplete na base DFT - B3LYP -6-311+g(d) para o NP



Fonte: Gaussian

A figura 16 mostra que a energia singlete (camada fechada) é menor, consequentemente mais estável que a energia tripleto (camada aberta), os elétrons encontram-se emparelhados, logo NP é Diamagnético.

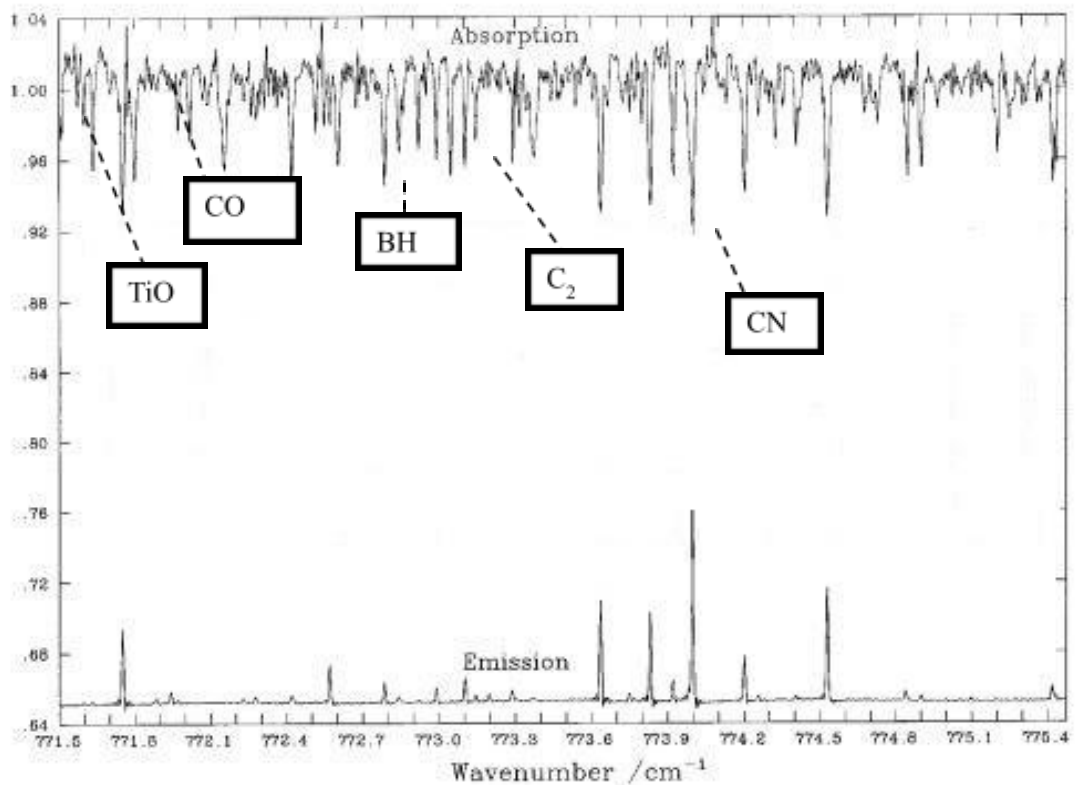
Como as energias das moléculas CH, CN, MgH, NO, SiH e TiO mais baixas foram as dos estados tripleto, indica o Paramagnetismo, respondendo então a um campo magnético com o abaixamento da energia (estabilização), as moléculas de BH, HF, C<sub>2</sub>, CO, AIH, HCl, NP, HCN, NO<sub>2</sub>, BeCl<sub>2</sub>, OCS, N<sub>2</sub>O suas energias mais

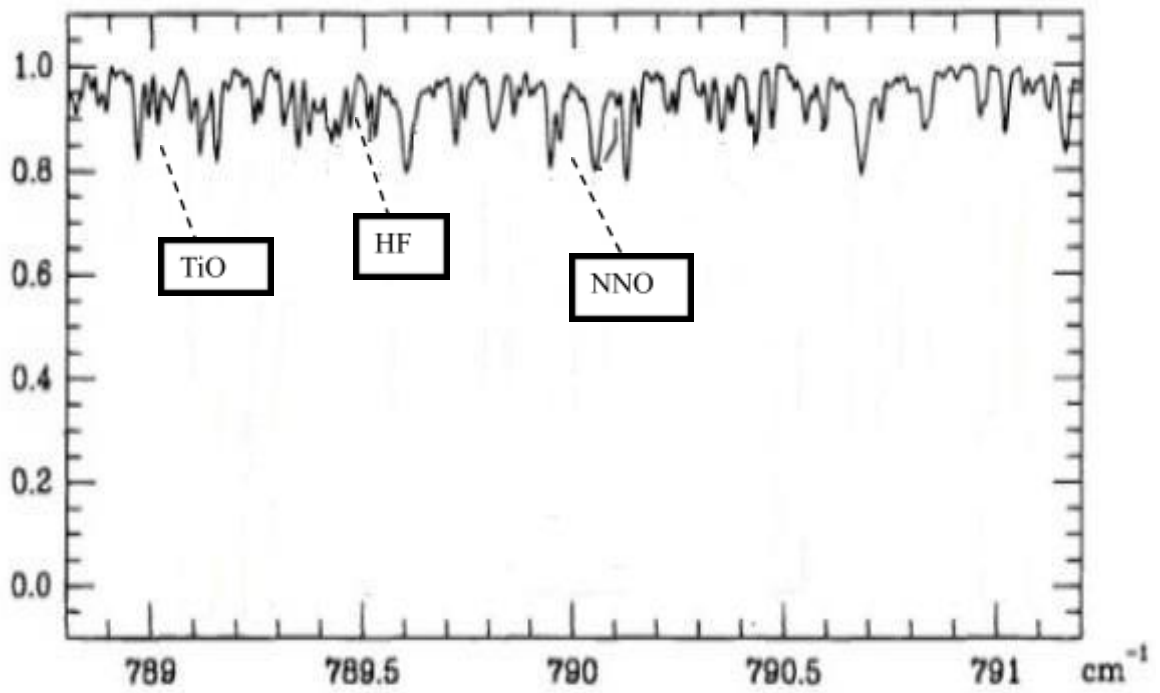
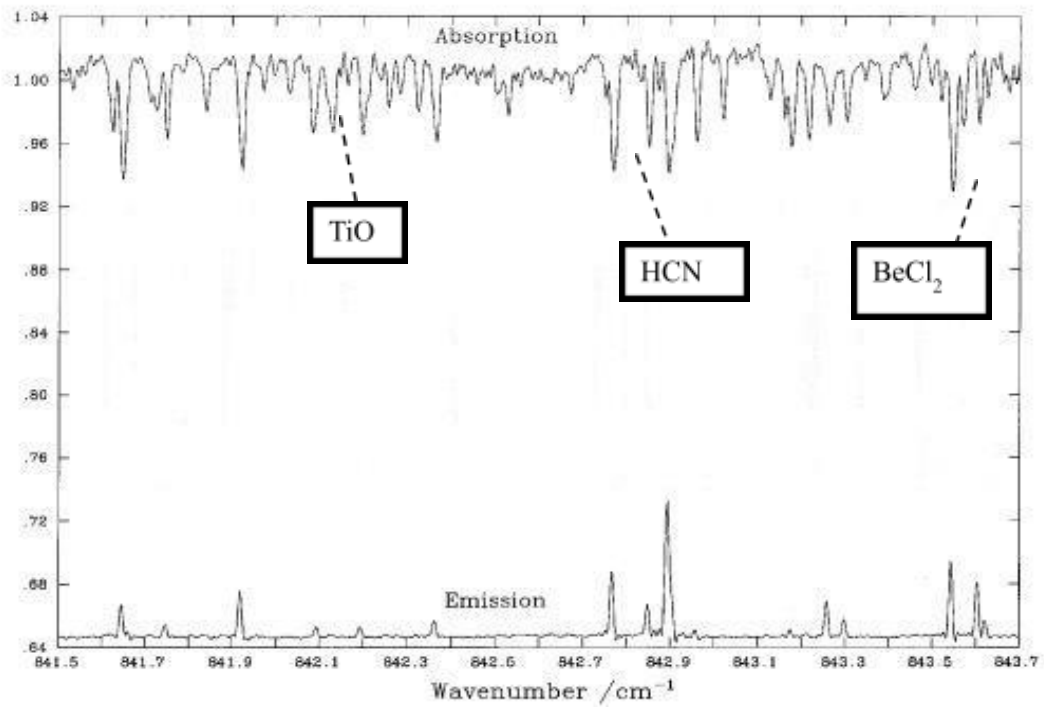


baixas foram do singlete indicando que estas moléculas são Diamagnéticas. As moléculas paramagnéticas têm orbitais de fronteira de menor energia.

A figura abaixo( Fig. 17) mostram as bandas identificadas pela comparação do espectro teórico com o espectro experimental para as moléculas de: CH, CN, MgH, NO, SiH, TiO, BH, HF, C<sub>2</sub>, CO, AlH, HCl, NP, HCN, NO<sub>2</sub>, BeCl<sub>2</sub>, OCS, N<sub>2</sub>O na faixa de 771,6 cm<sup>-1</sup> – 843,7 cm<sup>-1</sup>.

Figura 17: Bandas identificadas das moléculas de CH, CN, MgH, NO, SiH, TiO, BH, HF, C<sub>2</sub>, CO, AlH, HCl, NP, HCN, NO<sub>2</sub>, BeCl<sub>2</sub>, OCS, N<sub>2</sub>O na faixa de 771,6 cm<sup>-1</sup> – 843,7 cm<sup>-1</sup>





Fonte: Wallace *et al* (1994)

A tabela 8 mostra a quantidade de bandas encontrada para as moléculas.

Tabela 8. Quantidade de bandas encontradas, Diamagnética/Paramagnética

Molécula	Qe.Bandas
BH	19
CH	14
HF	18
C <sub>2</sub>	37
CN	40
MgH	14
CO	50
AlH	21
NO	36
SiH	18
HCl	16
NP	62
TiO	63
CO <sub>2</sub>	0
HCN	40
NNO	35
BeCl <sub>2</sub>	18
OCS	29
NO <sub>2</sub>	27

Fonte: O autor

Este resultado indica, segundo a quantidade de bandas rotovibracionais identificadas no espectro das manchas solares, principalmente a presença no Sol

das moléculas de CO, CN, HCN, NP e TiO. Apenas uma delas não contém carbono ou nitrogênio. Fica claro que os hidretos não devem existir nas manchas solares ou no mínimo em quantidades baixíssimas, possivelmente não influenciando em suas características. A molécula de CO<sub>2</sub> havia sido identificada, porém em regiões do espectro muito acima do qual foi estudado (2384,49 cm<sup>-1</sup> e 3478,93 cm<sup>-1</sup>) (PANDE,1975). Logo, é coerente que nenhuma banda tenha sido identificada para esta molécula. As demais moléculas com o número intermediário de bandas identificadas podem existir nas manchas solares, porém acredita-se que o resultado ainda não seja conclusivo.

Das cinco moléculas principais que pode-se confirmar sua existência nas manchas solares, duas delas são magnéticas. Este resultado junto aos resultados de Leite *et al*, amplia o conjunto de moléculas magnéticas que podem estar influenciando no maior campo magnético das manchas solares. É importante salientar que, diferentemente da molécula de água linear, as moléculas de CN e TiO foram calculadas no estado eletrônico fundamental, em princípio podem estar em maior quantidade em relação a estados eletrônicos excitados.

## 5. Conclusão

Os resultados indicam a existência das moléculas de CO, CN, HCN, NP e TiO nas manchas solares. Foi possível prever que as moléculas de CN e TiO são magnéticas a partir da comparação da energia total destes sistemas no estado tripleto e singleto. Com isto indicamos que estas moléculas podem influenciar a intensidade do campo magnético das manchas solares. Identificou –se bandas para a molécula de NP, que ainda não havia sido relatada na literatura, embora ela seja Diamagnética e não influencie no campo das manchas. As demais moléculas embora já tenham sido relatadas na literatura, reforça-se a presença destas em um novo modelo.

## REFERÊNCIAS

A. D. Becke, Phys. Rev. A, 38, 3098(1988); b) C. Lee *et al.*, Phys. Rev. B, 37, 785(1988).

Alcantara Jr, Petrus. Espectroscopia Molecular

APLICAÇÃO DA TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR. Disponível em: [https://cesad.ufs.br/ORBI/public/uploadCatalogo/11024317012017Quimica\\_Inorganica\\_I\\_aula\\_08.pdf](https://cesad.ufs.br/ORBI/public/uploadCatalogo/11024317012017Quimica_Inorganica_I_aula_08.pdf). Acesso em 17/05/2022.

AS OBSERVAÇÕES ASTRONÔMICAS NA PRÉ-HISTÓRIA EM MINAS GERAIS. Disponível em: <https://arqueoastronomia.com.br/noticias/as-observacoes-astronomicas-na-pre-historia-em-minas-gerais> Acesso em 6 de abr. de 2022.

B. Leite, C. Bastos, A. Pavão; *Journal of Molecular Modeling*, 22, 1 (2016).

Braga.P. Fundamentos de Química Quântica, ed. UFV: Minas Gerais; 2007.

Briickner, G., Schröter, E. H., and Voigt, H. H.: 1967, *SolarPhys.* 1,487

Claro, P.R. Espectroscopia Vibracional.Rev. Ciência Elem., V6(02):040.

Das, A. Bond-order and Magnetic Behavior of Diatomic Species without Molecular Orbital Theory.*World Journal of Chemical Education*, vol. 5, no. 4 (2017).

[doi.org/10.24927/rce2018.040](https://doi.org/10.24927/rce2018.040)(2018)

Eddy, J. (1979). A New Sun: The Solar Results From Skylab. [S.I.]: NASA. p. 37.

NASA SP-402<https://solarscience.msfc.nasa.gov/interior.shtml>

Experimental Diatomic Data.Disponível em <https://cccbdb.nist.gov/expdiatomics.asp>.

Experimental Triatomic Data. Disponível em <https://cccbdb.nist.gov/exptriatomics.asp>.

Gaussian 03, RevisionD.01, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery, Jr., T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo,

J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.

Huheey, J. E., Keiter, E. A. and Keiter, R. L. Inorganic Chemistry Principles of Structure and Reactivity, 4th ed. HarperCollins College Publishers: New York, 1993.

J. Tennyson, Molecules in Space, Volume 3, Part 3, Chapter 14, pp 356–369 in Handbook of Molecular Physics and Quantum Chemistry, John Wiley & Sons, Ltd, Chichester, 2003.

KOPP. G., RABIN. D.; A RELATION BETWEEN MAGNETIC FIELD STRENGTH AND TEMPERATURE IN SUNSPOTS. *Solar Physics*, 141, 253-265, 1992.

Kuiper, G. P.: 1963, *Comm. Lunar Planet Lab.* 1, 179.

L, Wallace. Livingston, W. Bernath, P. An Atlas of the Sunspot Spectrum from 470 to 1233 cm<sup>-1</sup> (8,1 to 21 mm) and the Photospheric Spectrum from 460 to 630 cm<sup>-1</sup> (16 to 22 mm). National Solar Observatory Technical Report, 1994.

M. Pande; V. Gaur; *Nature*, 253, 104 (1975).

O. Polyansky, N. Zobov, S. Viti, J. Tennyson, P. Bernath, L. Wallace; *Journal of Molecular Spectroscopy*, 186, 422 (1997).

P. Sriramachandran, S. Bagare, N. Rajamanickam, K. Balachandrakumar, *Solar Phys*, 252, 267 (2008).

Teoria do Orbital molecular. Disponível em: <<https://qui.ufmg.br/~ayala/matdidatico/tom.pdf>>, acessado em 17/05/2022. Vosko, S. H. *et al.*, *Can. J. Phys.* 58 ,1200(1980).

Zeilik, M.A.; Gregory, S.A. Introductory Astronomy & Astrophysics 4th ed. [S.I.]: Saunders College Publishing (1998).

Moore, C. E., Minnaert, M. G. J., and Houtgast, J.: 1966, 'The Solar Spectrum 2935 to 8770A. *Natl., Bur. Std. Monograph* 61.

Russell, H. N. : 1934, *Astrophys. J.* 79, 317.

Spinrad, H. and Newburn, R. L., Jr.: 1965, *Astrophys. J.* 141,965.

Schroter, E. H. and Wiehr, E. : 1968, *Mitteilungen der Astronomischen Gesellschaft* No. 25, 187.