

Estudo teórico da molécula de água no Sol

Bruno Silva Leite^a (PG), Cristiano Costa Bastos^a (PQ), Antonio Carlos Pavão^b (PQ)

^a Universidade Federal Rural de Pernambuco

^b Universidade Federal de Pernambuco

bruno.leite@uast.ufrpe.br

Palavras-chave: Cálculos DFT, Espectro rotacional, água no Sol

INTRODUÇÃO

Em 1969, Wöhl¹, observando manchas solares, reportou a existência de água no Sol. Estudos dos espectros das manchas solares buscam relacionar certas bandas com modos roto-vibracionais da água². Não é uma tarefa simples calcular o espectro roto-vibracional da água nas condições do Sol. Considerando que o campo magnético, temperatura, pressão e outras condições existentes no ambiente solar podem ter influência na geometria dessa molécula, apresentamos neste trabalho os resultados de cálculos de Química Quântica para a geometria e o espectro rotacional da água.

MÉTODO

Na perspectiva de mimetizar a geometria da molécula de H₂O nas condições do Sol, realizamos cálculos DFT WB97XD/6-311++G** para o estado singlete ¹B₁ variando o ângulo de ligação e otimizando distâncias. Também analisamos o estado tripleto A₁B₁, no qual incluímos a otimização completa. Consideramos ainda as geometrias dos estados ³B₁ e ¹A₂ que são citadas na literatura^{3,4}. A partir da energia rotacional

$$E = \frac{J_a(J_a+1)h^2}{2I_a} + \frac{J_b(J_b+1)h^2}{2I_b} + \frac{J_c(J_c+1)h^2}{2I_c} \quad (1)$$

obtivemos novos números quânticos que podem ser atribuídos para transições observadas no espectro de manchas solares².

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Tabela 1 apresenta alguns resultados para a molécula de H₂O em diferentes estados eletrônicos.

Tabela 1. Geometrias otimizadas para H₂O.

Estado	Ângulo (deg)	Distância (Å)
¹ A ₂	91,8	1,23
³ B ₁	108,5	1,10
A ₁ B ₁	117,7	1,12

Observando o espectro das manchas solares, Tennyson e Polyansk² atribuem os números quânticos 26_{10 17}, 25_{9 16} e 24_{14 10}, 23_{13 11} para as transições 774,2 cm⁻¹ e 842,9 cm⁻¹, respectivamente. Usando a eq. 1 e as geometrias da Tabela 1, a Tabela 2 mostra outros possíveis números quânticos obtidos para estas duas transições.

Tabela 2. Números quânticos rotacionais para duas transições observadas no espectro de manchas solares.

	$J_a J_b \rightarrow J_a' J_b'$	λ_1	$J_a J_b \rightarrow J_a' J_b'$	λ_2
¹ B ₁	26 _{17 5} → 25 _{16 4}	772	25 _{5 13} → 24 _{4 12}	843
¹ B ₁	30 _{10 17} → 29 _{9 16}	777	24 _{8 5} → 23 _{7 4}	846
A ₁ B ₁	26 _{2 3} → 25 _{1 2}	772	26 _{3 12} → 25 _{2 11}	843
³ B ₁	29 _{13 15} → 28 _{12 14}	776	24 _{18 6} → 23 _{17 5}	844
¹ A ₂	26 _{19 16} → 25 _{18 15}	774	26 _{17 10} → 25 _{16 9}	842
Exp.	26 _{10 17} → 25 _{9 16}	774,2	24 _{14 10} → 23 _{13 11}	842,9

Portanto, pode existir água no Sol em estados eletrônicos e geometrias diferentes daquelas usualmente observadas na Terra.

CONCLUSÃO

O cálculo de transições rotacionais da água em diferentes estados eletrônicos indica a possibilidade da ocorrência da molécula com geometria não usual no Sol. Esta metodologia pode ser aplicada para outras moléculas presentes no ambiente solar, contribuindo assim para uma melhor caracterização do seu espectro.

AGRADECIMENTOS

CNPq e LEUTEQ-UFRPE.

¹ H. Wöhl. Solar Phys. 9, 394–396, (1969).

² J. Tennyson and O. L. Polyansky. Contemporary Physics, 39, 4, 283–294, (1998).

³ J. Páleníková, et al. Molecular Physics, 106, 20, 2333-2344, (2008).

⁴ Z. Cai, et al. The Journal of Chemical Physics 113, 7084-7096, (2000).