

COMETAS: I - POPULAÇÕES E INTENSIDADES DE NOVE BANDAS VIBRACIONAIS DO MONOSSULFETO DE CARBONO ($^{12}\text{C}^{32}\text{S}$)

MARCUS VINÍCIUS CANAVES ¹
GILBERTO CARLOS SANZOVO ²

CANAVES, M. V; SANZOVO, G. C. Cometas: I - Populações e Intensidades de Nove Bandas Vibracionais do Monossulfeto de Carbono ($^{12}\text{C}^{32}\text{S}$). *Semina: Ci. Exatas/Tecnol.*, Londrina, v. 17, n. 4, p. 369-375, dez. 1996.

RESUMO: Neste trabalho nós realizamos um estudo teórico do mecanismo de excitação por fluorescência ressonante, para a espécie molecular monossulfeto de carbono $\text{C}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$, nas comas dos Cometas West (1976VI) e P/Bradfield (1979X), através do campo de radiação solar o que nos permitiu deduzir as populações relativas e as intensidades de 9 bandas vibracionais da molécula.

PALAVRAS-CHAVE: Cometas; fluorescência ressonante; CS: populações vibracionais; CS: intensidades de bandas vibracionais.

1. INTRODUÇÃO

Parece haver consenso, por parte dos Astrônomos, que os cometas conservaram intacta a maior parte das características físicas e químicas reinantes no material primitivo da nuvem interestelar que formou o Sol e os Planetas. No reservatório de Oort, os núcleos cometários encontram-se fracamente ligados ao Sol por forças gravitacionais. Desse modo, em decorrência de flutuações do campo gravitacional no qual nosso sistema solar se encontra imerso, alguns desses núcleos cometários eventualmente podem ser capturados pela influência massiva de Júpiter (Lüsi, 1981). Já no interior do Sistema Solar, quando a distância heliocêntrica for inferior a 3,0 UA, o campo de radiação do Sol atuará no sentido de sublimar, em parte, o material contido no núcleo formando a coma, na qual as espécies cometárias serão sintetizadas através de reações químicas como a fotoionização e a fotodissociação.

O espectro eletromagnético produzido pelo Sol é bem conhecido (Labs e Neckel, 1968; Arvesen et al., 1969; Broadfoot, 1972). Neste trabalho, nós realizamos um estudo teórico com a aplicação do mecanismo de fluorescência ressonante à espécie

molecular monossulfeto de carbono ($^{12}\text{C}^{32}\text{S}$) para as comas dos Cometas West (1976VI) e P/Bradfield (1979X), através da ação do campo de radiação solar. O mecanismo de excitação por fluorescência ressonante é muito mais eficiente para a excitação das emissões cometárias do que o processo de excitação por colisões da radiação com átomos, íons ou moléculas (Krishna Swamy, 1981). As emissões com $\lambda = 2576, 2663$ e 2507 Ang. foram inicialmente observadas nos espectros ultravioletas (UV) do Cometa West por Smith et al (1980) e identificadas como pertencentes ao CS, a primeira molécula cometária detectada que contém o enxofre. Na seção 2 nós descrevemos, inicialmente, o mecanismo de fluorescência ressonante, responsável direto pelas emissões das espécies cometárias (Krishna Swamy, 1981) e, em seqüência, verificamos a estrutura vibracional do CS e revemos a teoria que nos permitiu deduzir as populações fracionais e as intensidades das bandas vibracionais. Na seção 3 nós comparamos nossos resultados teóricos com os dados observacionais e teóricos, disponíveis na Literatura. Finalmente, na seção 4, nós apresentamos a discussão dos resultados obtidos.

1 -Aluno de Graduação em Física e de Iniciação Científica

2- Docente do Departamento de Física da Universidade Estadual de Londrina - Caixa Postal 6001, Londrina, PR, CEP 86051 -990 —
Endereço Eletrônico: gsanzovo@uel.br

2. ASPECTOS TEÓRICOS

2.1.0 Mecanismo de Excitação por Fluorescência Ressonante

Esse mecanismo será explicado aqui, de modo simples, considerando uma espécie molecular M e 3 níveis de energia. A absorção da radiação solar com energia $h\nu$ aumenta a população da molécula no nível excitado (não meta-estável), X_3 . Como o tempo de vida radiativo em X_3 é, normalmente, pequeno ($t_{X_3} \sim 10^{-9}$ s), a molécula poderá decair para os níveis inferiores X_2 , também excitado, e X_1 (fundamental), com as conseqüentes emissões de fótons com energias $h\nu_2$ e $h\nu_1$ gerando as linhas subordinada e de ressonância, respectivamente. Na Figura 1 nós esquematizamos a situação apresentada. Se a espécie molecular não encontrar outro fóton ou parceiro colisional no (limitado) intervalo de tempo correspondente ao tempo de vida de X_2 , ela poderá decair até o nível fundamental, com a conseqüente emissão de um fóton com energia $h\nu_3$. Os cometas absorvem, geralmente, fótons solares com energia $h\nu$ por fluorescência ressonante e reemitem radiação com energia $h\nu_1$.

O Sol emite um espectro eletromagnético que varia desde o ultravioleta (UV) até o infravermelho (IV) distante, com a superposição das linhas de Fraunhofer devido à presença de espécies atômicas e moleculares em sua fotosfera. Deste modo, ele representa um excelente campo de radiação estelar para a excitação, por fluorescência ressonante, de espécies cometárias atômicas e moleculares. Em um cometa, se a emissão da radiação solar com energia $h\nu$ for coincidente com aquela correspondente de uma linha da espécie molecular (ou atômica) com energia equivalente a $E_{X_3} - E_{X_1}$, a espécie será excitada até o nível molecular X_3 e, como t_{X_3} é pequeno, ela irá decair até X_1 , provocando a emissão da linha de ressonância com energia $h\nu_1$. Se a diferença de energia $DE(X_3 - X_1)$ for coincidente com uma linha de absorção de Fraunhofer, a linha de emissão com energia $h\nu$, não aparecerá no espectro do cometa. O efeito Doppler aparece como conseqüência da velocidade radial do cometa com relação ao Sol, o que complica o mecanismo de excitação. As conseqüências do desvio Doppler foram inicialmente averiguadas nas linhas rotacionais da banda vibracional (0,0) do radical CN por Swings (1941) e, por isso, seu efeito sobre as intensidades das linhas é, atualmente, conhecido por Efeito Swings.

2.2. A Estrutura Vibracional do Monossulfeto de Carbono

A estrutura vibracional do monossulfeto de carbono foi investigada de acordo com o modelo do oscilador anarmônico onde o potencial é representado pela função de Morse, dada por (Herzberg, 1950)

$$V = D_e \{1 - \exp[-\beta(r - r_e)]\}^2 \quad (1)$$

onde D_e é a energia de dissociação da molécula e b é a constante de Morse, que leva em consideração sua massa reduzida. O termo vibracional (Herzberg, 1950) é obtido substituindo-se (1) na equação de Schrödinger, o que resulta em

$$G(v) = w_e(v + \frac{1}{2}) - w_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 + w_e y_e(v + \frac{1}{2})^3 \dots \quad (2)$$

em que v é o número quântico vibracional, w_e é conhecido como freqüência de equilíbrio da molécula, x_e e y_e são as constantes de anharmonicidade.

De acordo com Herzberg (1950), a energia interna de uma molécula diatômica é a soma das energias eletrônica (E_e), vibracional (E_v) e rotacional (E_r). Deste modo, o número de ondas (em cm^{-1}) da radiação emitida (ou absorvida) em uma transição rotovibracional envolvendo os estados eletrônicos $A^1 \Pi$ e $X^1 \Sigma^+$, vale

$$\omega = (T_e - T_e') + [G(v') - G(v'')] + [F_r(J') - F_r(J'')] \quad (3)$$

ou

$$\omega = \omega_e + \omega_v + \omega_r \quad (4)$$

Em (3), o termo vibracional corresponde à equação (2) enquanto que o termo rotacional é pequeno quando comparado com ω_e e ω_v . Assim, se substituirmos (2) em (3) e, se nos limitarmos ao termo quadrático, nós teremos que

$$\omega = \omega_e + \frac{1}{2}(w_e' - w_e'') + \frac{1}{4}(w_e'' x_e'' - w_e' x_e') + (w_e' - w_e'')v' - (w_e' x_e')v'^2 - (w_e'' x_e'')v'' + (w_e' x_e')v'^2 + \dots \quad (5)$$

onde v' e v'' são os números quânticos dos estados eletrônicos $A^1 \Pi$ e $X^1 \Sigma^+$, respectivamente. Se nós definirmos

$$\omega_{00} = \omega(v'=0 \rightarrow v''=0) = \omega_e + \frac{1}{2}(w_e' - w_e'') + \frac{1}{4}(w_e'' x_e'' - w_e' x_e') \quad (6)$$

como sendo a freqüência (em cm^{-1}) da banda vibracional (0,0) para o sistema eletrônico considerado, a freqüência de uma banda vibracional genérica (v', v'') valerá

$$\omega(v',v'') = \omega_{00} + (w'_v - w''_v x'_v) v' - (w'_v - w''_v x''_v) v'' - (w'_v x'_v) v'^2 + (w''_v x''_v) v''^2. (7)$$

Como não há qualquer regra de seleção para o número quântico vibracional v , a equação (7) fornecerá, para a molécula CS, todas as possíveis transições entre os diferentes níveis vibracionais, nos estados eletrônicos $A^1 \Pi$ e $X^1 \Sigma^+$.

2.3. As Intensidades das Bandas Vibracionais do CS em Cometas

Para calcular as intensidades das bandas vibracionais do monossulfeto de carbono em cometas através do mecanismo de fluorescência ressonante, nós procedemos de forma semelhante a Krishna Swamy (1981). Desta maneira, as populações relativas a cada nível vibracional foram obtidas a partir de um sistema de equações simultâneas, dado por

$$n_i \sum_{k=0}^{11} [B_{ik} \rho v_{ik}] = \sum_{k=6}^{11} n_k [B_{ki} \rho v_{ki} + A_{ki}] \quad (8)$$

com $i = 0, 1, \dots, 5$, para os níveis vibracionais do estado eletrônico fundamental $X^1 \Sigma^+$, e

$$n_j \sum_{l=0}^5 [B_{jl} \rho v_{jl} + A_{jl}] = \sum_{l=6}^{11} [n_l B_{lj} \rho v_{lj}] \quad (9)$$

com $j = 6, 7, \dots, 11$, para os níveis vibracionais do estado eletrônico superior. Nestas equações, n representa a fração de moléculas em cada nível enquanto que ρv (em erg.cm^{-2}) é a densidade da radiação solar na frequência da transição considerada. Os coeficientes de Einstein A e B relacionam-se com as probabilidades de emissão espontânea e de absorção, respectivamente. Nós utilizamos a condição de normalização

$$\sum_{i=0}^{11} n_i = 1 \quad (10)$$

visto ser o sistema constituído por $(n-1)$ equações linearmente independentes. As equações (8) e (9) representam o resultado do balanço radiativo entre as transições que povoam e aquelas que despovoam cada um dos 12 níveis vibracionais considerados.

As probabilidades de emissão espontânea foram obtidas da expressão de Larsson (1983)

$$A_{v,v'} = \{ [64\pi^4 (ea_0)^2 / 3h] [(2 - \delta_{0,v} \nu_{1,v} \nu_{2,v}) / (2 - \delta_{0,v} \nu_{1,v})] q_{v,v'} (\bar{\omega}_{v,v'})^3 (Re_{v,v'})^2 \} \quad (11)$$

onde $[64\pi^4 (ea_0)^2 / 3h] = 2,026 \times 10^{-6}$, $[(2 - \delta_{0,v} \nu_{1,v} \nu_{2,v}) / (2 - \delta_{0,v} \nu_{1,v})] = 2$ para a transição eletrônica considerada e, $q_{v,v'}$ são os fatores de Franck-Condon para as bandas do sistema eletrônico (A-X) da molécula, vinculados à regra da soma vibracional

$$\sum_v q_{v,v'} = \sum_{v'} q_{v,v'} = 1. \quad (12)$$

Em (11), $\bar{\omega}_{v,v'}$ representam as frequências (em cm^{-1}) das bandas vibracionais do Sistema (A-X), e $Re_{v,v'}$ é o momento da transição eletrônica (em unidades de ea_0) para o referido sistema.

3. RESULTADOS OBTIDOS

Na Tabela 1 nós apresentamos os parâmetros relativos a 36 bandas vibracionais da molécula monossulfeto de carbono. Os valores de $q_{v,v'}$ e $Re_{v,v'}$ foram obtidos de Coxon et al (1976). As probabilidades de emissão espontânea (em s^{-1}) foram deduzidas a partir de (11) enquanto que os coeficientes de absorção foram determinados a partir da expressão (I,52) de Herzberg (1950). Dessa maneira, nós obtivemos as populações relativas a 12 níveis vibracionais envolvendo os estados eletrônicos do Sistema (A-X). Como a molécula é heteronuclear nós consideramos, também, as transições puramente vibracionais para o estado eletrônico fundamental $X^1 \Sigma^+$. Essas transições se situam no infravermelho, e os resultados que obtivemos aparecem mostrados na Tabela 2. As probabilidades de emissão espontânea foram deduzidas a partir da equação (7-95) de Penner (1959), onde consideramos $|\mu| = 1,025913 \text{ D/Ang.}$ como sendo o coeficiente do termo linear da expressão do momento dipolar da molécula. Os fluxos solares, no ultravioleta, para os comprimentos de onda entre 2100 e 3200 Ang., foram obtidos de Broadfoot (1972) e, para as transições no infravermelho, entre 2 e 8 μ , de Allen (1973).

TABELA 1. Origens das bandas vibracionais da molécula $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$

BANDA VIBRAC. [v',v'']	COMPRIM. DE ONDA λ [Å]	NÚMERO DE ONDA $\bar{\nu}$ [cm ⁻¹]	$q_{v',v''}$	$(Re_{v',v''})^2$	TAXA EMIS. ESPONT. $A_{v',v''}$ [s ⁻¹]	COEFIC. DE ABSORÇÃO $B_{v',v''}$ [cm ² erg ⁻¹ s ⁻¹]
(0,0)	2575,952	38,821x10 ³	0,83x10 ⁰	0,101	1,987x10 ⁷	6,803x10 ⁷
(0,1)	2662,697	37,556x10 ³	0,151x10 ⁰	0,080	2,593x10 ⁶	9,805x10 ⁶
(0,2)	2755,326	36,293x10 ³	0,160x10 ⁻¹	0,067	2,076x10 ⁵	8,698x10 ⁵
(0,3)	2852,749	35,053x10 ³	0,153x10 ⁻²	0,058	1,549x10 ⁴	7,203x10 ⁴
(0,4)	2955,742	33,832x10 ³	0,200x10 ⁻³	0,060	1,883x10 ³	9,740x10 ³
(0,5)	3064,582	32,631x10 ³	0,460x10 ⁻⁵	0,023	1,489x10 ¹	8,584x10 ¹
(1,0)	2508,148	39,870x10 ³	0,152x10 ⁰	0,120	4,684x10 ⁶	1,480x10 ⁷
(1,1)	2589,966	38,610x10 ³	0,513x10 ⁰	0,099	1,187x10 ⁷	4,131x10 ⁷
(1,2)	2677,716	37,345x10 ³	0,268 x10 ⁰	0,079	4,468x10 ⁶	1,718x10 ⁷
(1,3)	2769,357	36,109x10 ³	0,574x10 ⁻¹	0,067	7,337x10 ⁵	3,137x10 ⁶
(1,4)	2866,799	34,882x10 ³	0,740x10 ⁻²	0,056	7,127x10 ¹	3,363x10 ⁵
(1,5)	2970,831	33,661x10 ³	0,983x10 ⁻³	0,053	8,052x10 ³	4,229x10 ⁴
(2,0)	2444,293	40,912x10 ³	0,159x10 ⁻¹	0,145	6,397x10 ⁵	1,871x10 ⁶
(2,1)	2523,158	39,633x10 ³	2,283x10 ⁰	0,115	8,210x10 ⁶	2,641x10 ⁷
(2,2)	2605,979	38,373x10 ³	0,261x10 ⁰	0,098	5,856x10 ⁶	2,076x10 ⁷
(2,3)	2692,736	37,137x10 ³	0,306x10 ⁰	0,077	4,890x10 ⁶	1,912x10 ⁷
(2,4)	2785,384	35,902x10 ³	0,109x10 ⁰	0,066	1,349x10 ⁶	5,839x10 ⁶
(2,5)	2882,844	34,688x10 ³	0,212x10 ⁻¹	0,056	2,008x10 ⁵	9,636x10 ⁵
(3,0)	2385,403	41,922x10 ³	0,111x10 ⁻²	0,179	5,932x10 ⁴	1,613x10 ⁵
(3,1)	2460,300	40,645x10 ³	0,481x10 ⁻¹	0,139	1,819x10 ⁶	5,426x10 ⁶
(3,2)	2538,168	39,398x10 ³	0,350x10 ⁰	0,112	9,714x10 ⁶	3,182x10 ⁷
(3,3)	2661,961	37,566x10 ³	0,978x10 ⁻¹	0,099	2,080x10 ⁶	7,859x10 ⁶
(3,4)	2708,754	36,917x10 ³	0,292x10 ⁰	0,075	4,465x10 ⁵	1,777x10 ⁷
(3,5)	2801,412	35,696x10 ³	0,157x10 ⁰	0,064	1,852x10 ⁶	8,156x10 ⁶
(4,0)	2330,489	42,909x10 ³	0,284x10 ⁻⁴	0,266	2,418x10 ³	6,130x10 ³
(4,1)	2401,408	41,642x10 ³	0,361x10 ⁻²	0,182	1,922x10 ⁵	5,331x10 ⁵
(4,2)	2476,306	40,383x10 ³	0,926x10 ⁻¹	0,133	3,286x10 ⁶	9,994x10 ⁶
(4,3)	2555,176	39,136x10 ³	0,352x10 ⁰	0,108	9,233x10 ⁶	3,085x10 ⁷
(4,4)	2638,005	37,907x10 ³	0,126x10 ⁻¹	0,112	3,115x10 ⁵	1,145x10 ⁶
(4,5)	2725,771	36,687x10 ³	0,242x10 ⁰	0,073	3,535x10 ⁶	1,434x10 ⁷
(5,0)	2278,558	43,887x10 ³	0,552x10 ⁻⁵	0,053	1,010x10 ²	2,385x10 ²
(5,1)	2346,493	42,617x10 ³	0,814x10 ⁻⁴	0,348	8,881x10 ³	2,298x10 ⁴
(5,2)	2418,413	41,349x10 ³	0,111x10 ⁻¹	0,169	5,383x10 ⁵	1,525x10 ⁶
(5,3)	2493,313	40,107x10 ³	0,152x10 ⁰	0,127	5,041x10 ⁶	1,565x10 ⁷
(5,4)	2572,184	38,878x10 ³	0,293x10 ⁰	0,105	7,340x10 ⁶	2,502x10 ⁷
(5,5)	2656,016	37,650x10 ³	0,633x10 ⁻²	0,057	7,839x10 ⁴	2,942x10 ⁵

Os números de onda vibracionais foram obtidos das constantes $w'_e=1073,4 \text{ cm}^{-1}$ e $w'_e x'_e=10,1 \text{ cm}^{-1}$, para o estado eletrônico $A^1\Pi$, e $w''_e=1285,08 \text{ cm}^{-1}$ e $w''_e x''_e=6,46 \text{ cm}^{-1}$, para o estado eletrônico fundamental $X^1\Sigma^-$ (Huber e Herzberg, 1950).

TABELA 2. Transições puramente vibracionais do $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$

BANDA VIBRAC. [v',v'']	COMPRIM. DE ONDA λ [Å]	FREQÜÊNCIA ν [Hz]	TAXA EMIS. ESPONT. $A_{v',v''}$ [s ⁻¹]	COEFIC. DE ABSORÇÃO $B_{v',v''}$ [cm ² erg ⁻¹ s ⁻¹]
(1,0)	7,861	38,138x10 ¹²	6,600x10 ⁰	6,420x10 ⁵
(2,1)	7,941	37,751x10 ¹²	1,280x10 ¹	1,284x10 ⁶
(3,2)	8,024	37,364x10 ¹²	1,862x10 ¹	1,926x10 ⁶
(4,3)	8,108	36,976x10 ¹²	2,406x10 ¹	2,568x10 ⁶
(5,4)	8,193	36,589x10 ¹²	2,914x10 ¹	3,210x10 ⁶
(5,3)	4,074	73,565x10 ¹²	1,190x10 ⁰	1,614x10 ⁴
(4,2)	4,033	74,340x10 ¹²	7,371x10 ⁻¹	9,682x10 ³
(5,2)	2,703	110,929x10 ¹²	2,736x10 ⁻²	1,082x10 ²
(2,0)	3,950	75,889x10 ¹²	1,307x10 ⁻¹	1,614x10 ³
(3,0)	2,647	113,253x10 ¹²	2,911x10 ⁻³	1,082x10 ¹
(4,0)	1,996	150,230x10 ¹²	7,686x10 ⁻⁵	1,223x10 ⁻¹
(5,0)	1,605	186,819x10 ¹²	2,378x10 ⁻⁶	1,968x10 ⁻³
(3,1)	3,991	75,115x10 ¹²	3,802x10 ⁻¹	4,841x10 ³
(4,1)	2,674	112,091x10 ¹²	1,129x10 ⁻²	4,326x10 ¹
(5,1)	2,016	148,680x10 ¹²	3,725x10 ⁻⁴	6,117x10 ⁻¹

O sistema de equações que descrevemos em (8) e (9) foi solucionado com o auxílio de um Programa FORTRAN IV de inversão de matrizes em que substituímos, de modo adequado, uma de suas equações por aquela que normaliza todo o sistema. Com o objetivo de comparar nossos resultados com os da Literatura, nós deduzimos as populações para 3 distâncias heliocêntricas: 0,5, 0,71 e 1,0 UA. Os resultados aparecem mostrados na Tabela 3.

Com o auxílio da expressão (Herzberg, 1950)

$$I_{v'v''} = n_{v'} h \nu_{v'v''} A_{v'v''} \quad (13)$$

na qual $n_{v'}$ é a fração da população vibracional no nível superior v' , e $\nu_{v'v''}$ é a frequência (em Hz) da transição considerada, nós obtivemos as intensidades de 9 bandas vibracionais do Sistema (A-X) da molécula CS. Os resultados foram normalizados pelo valor relativo à banda (0,0) e aparecem mostrados na Tabela 4.

TABELA 3. Populações vibracionais do $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$

$r = 0,50 \text{ UA}$	$r = 0,71 \text{ UA}$	$r = 1,00 \text{ UA}$
$X^1\Sigma^+$		
$n''_0 = 9,9 \times 10^{-1}$	$n''_0 = 9,9 \times 10^{-1}$	$n''_0 = 9,9 \times 10^{-1}$
$n''_1 = 3,7 \times 10^{-4}$	$n''_1 = 1,8 \times 10^{-4}$	$n''_1 = 9,3 \times 10^{-5}$
$n''_2 = 1,9 \times 10^{-6}$	$n''_2 = 8,5 \times 10^{-6}$	$n''_2 = 4,1 \times 10^{-6}$
$n''_3 = 1,9 \times 10^{-6}$	$n''_3 = 9,6 \times 10^{-7}$	$n''_3 = 4,8 \times 10^{-7}$
$n''_4 = 2,5 \times 10^{-7}$	$n''_4 = 1,2 \times 10^{-7}$	$n''_4 = 6,2 \times 10^{-8}$
$n''_5 = 6,8 \times 10^{-7}$	$n''_5 = 3,4 \times 10^{-7}$	$n''_5 = 1,7 \times 10^{-7}$
$A^1\Pi$		
$n'_6 = 2,9 \times 10^{-10}$	$n'_6 = 1,4 \times 10^{-10}$	$n'_6 = 7,3 \times 10^{-11}$
$n'_7 = 3,6 \times 10^{-11}$	$n'_7 = 1,8 \times 10^{-11}$	$n'_7 = 9,1 \times 10^{-12}$
$n'_8 = 5,4 \times 10^{-12}$	$n'_8 = 2,7 \times 10^{-12}$	$n'_8 = 1,3 \times 10^{-12}$
$n'_9 = 3,3 \times 10^{-13}$	$n'_9 = 1,6 \times 10^{-13}$	$n'_9 = 8,2 \times 10^{-14}$
$n'_{10} = 1,8 \times 10^{-14}$	$n'_{10} = 8,4 \times 10^{-15}$	$n'_{10} = 4,1 \times 10^{-15}$
$n'_{11} = 1,1 \times 10^{-15}$	$n'_{11} = 4,4 \times 10^{-16}$	$n'_{11} = 2,0 \times 10^{-16}$

TABELA 4. Intensidades das bandas vibracionais do $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$

BANDA VIBRACIONAL (v', v'')	DISTÂNCIA HELIOCÊNTRICA r (UA)			INTENSIDADES (Dados Observacionais)		INTENSIDADES (Literatura)
	0,50	0,71	1,00			
(0,0)	$1,0 \times 10^0$	$1,0 \times 10^0$	$1,0 \times 10^0$	$1,0 \times 10^{0(a)}$	$1,0 \times 10^{0(b)}$	$1,0 \times 10^{0(c)}$
(1,0)	$3,0 \times 10^{-2}$	$3,0 \times 10^{-2}$	$3,0 \times 10^{-2}$	$5,0 \times 10^{-2}$		$4,0 \times 10^{-2(c)}$
(0,1)	$1,3 \times 10^{-1}$	$1,3 \times 10^{-1}$	$1,3 \times 10^{-1}$	$1,2 \times 10^{-1(a)}$	$1,1 \times 10^{-1(b)}$	$1,7 \times 10^{-1(c)}$
(1,1)	$7,0 \times 10^{-2}$	$8,0 \times 10^{-2}$	$7,0 \times 10^{-2}$	$8,0 \times 10^{-2(a)}$		$6,0 \times 10^{-2(c)}$
(0,2)	$1,0 \times 10^{-2}$	$1,0 \times 10^{-2}$	$1,0 \times 10^{-2}$	$1,0 \times 10^{-2(a)}$		$2,0 \times 10^{-2(c)}$
(1,2)	$3,0 \times 10^{-2}$	$3,0 \times 10^{-2}$	$3,0 \times 10^{-2}$	$1,2 \times 10^{-2(a)}$		$3,0 \times 10^{-2(c)}$
(2,1)	$1,0 \times 10^{-2}$	$1,0 \times 10^{-2}$	$1,0 \times 10^{-2}$			
(2,2)	$5,0 \times 10^{-3}$	$6,0 \times 10^{-3}$	$5,0 \times 10^{-3}$			
(2,3)	$4,0 \times 10^{-3}$	$5,0 \times 10^{-3}$	$4,0 \times 10^{-3}$			

(a) Observações realizadas por Smith et al (1980), para $r = 0,52 \text{ UA}$.

(b) Observações realizadas por Feldman et al (1980), para $r = 0,71 \text{ UA}$.

(c) Resultados teóricos de Krishna Swamy (1981)

4. COMENTÁRIOS E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

O monossulfeto de carbono ($^{12}\text{C}^{32}\text{S}$) é uma espécie molecular que aparece em diversos meios astrofísicos. No Meio Interestelar ele faz a função de um importante traçador das condições físicas nas nuvens moleculares densas que são regiões de formação de estrelas. Em Cometas, sua emissão no ultravioleta foi inicialmente observada por Smith et al. (1980), na coma do Cometa West enquanto que sua taxa de produção em 15 cometas, para a distância heliocêntrica de 1,0 UA, varia entre 10^{24} - 10^{25} moléculas/s (Sanzovo et al., 1993). Como a escala de tempo característica de colisões entre átomos neutros ou íons nas comas cometárias ($\sim 10^7$ s) é muito superior àquela relativa ao processo de absorção da radiação solar na região visível, para espécies como C_2 e CN (~ 10 -100 s) quando o cometa se encontra a 1,0 UA de distância do Sol, conclui-se que a absorção da radiação solar é o principal mecanismo de excitação. Neste trabalho nós

aplicamos o mecanismo de excitação por fluorescência ressonante solar para a espécie molecular $^{12}\text{C}^{32}\text{S}$ nos Cometas West (1976VI) e P/Bradfield (1979X) e obtivemos as populações fracionais e as intensidades das linhas de emissão da molécula. Além de permitir a determinação das populações relativas a 12 bandas vibracionais da molécula para o sistema eletrônico $\text{A}^1\Pi-\text{X}^1\Sigma^+$, o mecanismo de fluorescência ressonante solar mostrou-se, também, eficaz para explicar as fortes emissões do monossulfeto de carbono nestes cometas. As intensidades de 9 bandas vibracionais foram deduzidas e os resultados, apresentados na Tabela 4, parecem reproduzir melhor os dados observacionais que aqueles obtidos teoricamente por Krishna Swamy (1981). A diferença entre seus valores e aqueles obtidos neste trabalho pode ser explicada, muito provavelmente, nos valores mais precisos das origens de bandas vibracionais, aqui utilizados, para a referida molécula.

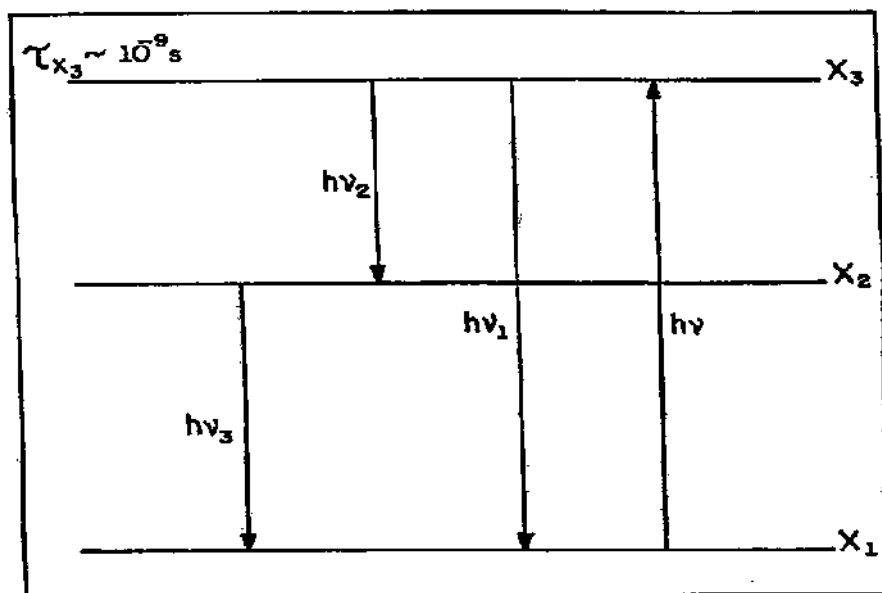


Figura 1 — O Mecanismo de Fluorescência Ressonante

CANAVES, M. V.; SANZOVO, G. C. Comets: Populations and Intensities of Nine Vibrational Bands of Carbon Monosulfide ($^{12}\text{C}^{32}\text{S}$). *Semina:Ci. Exatas/Tecnol.*, v. 17, n. 4, p. 369-376, Dec. 1996.

ABSTRACT: A theoretical study of resonance fluorescence mechanism for carbon monosulfide ($^{12}\text{C}^{32}\text{S}$) in the comae of Comets West (1976VI) and P/Bradfield (1979X) using the solar radiation field is presented. We obtained the relative populations in several different vibrational levels, and the intensities of 9 vibrational bands of CS molecule.

KEY WORDS: Comets; resonance fluorescence process; CS: vibrational populations; CS: intensities of vibrational bands.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALLEN, C. W. *Astrophysical Quantities*. 3rd ed. London : Athlone Press, 1973.

AVERSEN, J. C., GRIFFIN, R. N., PEARSON JR, B. D. Determination of extraterrestrial solar spectral irradiance from a research aircraft. *Appl. Optics (USA)*, v. 8, n. 11, p. 2215-32, 1969.

BROADFOOT, A. L. Solar spectrum 2100-3200Å. *Astrophys J*, v. 173, n. 3, p. 681-8, 1972.

COXON, J. A., MARCOUX, P. J., SETSER, D. W. Intensity and wavelength measurements for CS⁺(A2PI-X2SIGMA) and CS(A1PI-X1SIGMA+) band systems excited by reaction of metastable He (2S-3) with CS₂. *Chem Phys*, v. 17, n. 4, p. 403-415, 1976.

HERZBERG, G. *Spectra of diatomic molecules*. New York : van Nostrand Reinhold, 1950.

HUBER, R. P., HERZBERG, G. *Molecular spectra and molecular structure. IV. Constants of diatomic molecules*. New York : van Nostrand Reinhold, 1979.

KRISHNA SWAMY, K. S. *Astron Astrophys*, v. 97, p. 110, 1981.

LABS, D., NECKEL, H. The radiation of the solar photosphere from 2000Å to 100µ. *Z. Astrophys (Germany)*, v. 69, n. 1, p. 1-73, 1968.

LARSSON, M. Birth and infancy of stars. In: LUCAS, R., OMONT, A., STORA, R. (Ed.). *Les houches 1982, Session XLI*. New York : North-Holland, 1983.

LÜST, R. Chemistry in comets. *Top Curr Chem*, v. 99, p. 73-98, 1981.

PENNER, S. S. *Quantitative molecular spectroscopy and gas emissivities*. London : Addison-Wesley, 1959.

SANZOVO, G. C., SINGH, P. D., HUEBNER, W. F. CS band intensity and column densities and production-rates of 15 comets. *Astron J*, v. 106, n. 3, p. 1237-1240, 1993.

SMITH, A. M., STECHER, T. P., CASSWELL, L. Production of carbon, sulfur and CS in comet west. *Astrophys J*, v. 242, n. 1, p. 402-8, 1980.

SWINGS, P. *Lick Obs Bull*, v. 19, p. 131, 1941.