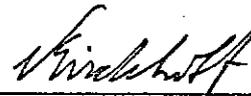


1. Publicação nº <i>INPE-2726-TDL/132</i>	2. Versão	3. Data <i>Maio, 1983</i>	5. Distribuição <input type="checkbox"/> Interna <input checked="" type="checkbox"/> Externa <input type="checkbox"/> Restrita
4. Origem <i>DRH-DAS</i>	Programa <i>FRH/CEA</i>		
6. Palavras chaves - selecionadas pelo(s) autor(es) <i>NUVEM MOLECULAR REGIÃO H II MOLECULA DE AMÔNIA</i>			
7. C.D.U.: <i>523.03</i>			
8. Título <i>INPE-2726-TDL/132</i>		10. Páginas: <i>113</i>	
<i>ESTUDO DA EMISSÃO DE AMÔNIA ORIGINÁRIA DAS REGIÕES HII GALÁTICAS: NGC 6334, ORION E G 328.2-0.5</i>		11. Última página: <i>A.6</i>	
		12. Revisada por <i>JA</i>	
9. Autoria <i>José Williams dos Santos Vilas Boas</i>		<i>Eugênio Scalise Júnior</i>	
		13. Autorizada por	
Assinatura responsável 		 <i>Nelson de Jesus Parada</i> Diretor	
14. Resumo/Notas <p><i>Realizou-se uma pesquisa de NH₃ nas regiões HII NGC 6334, Órion e G 328.2-0.5. As observações foram realizadas nas frequências das Transições por inversão rotacional (J,K) = (1,1), (2,2) e (3,3). Os parâmetros observacionais (temperatura de antena, largura de linha, etc) foram utilizados para obter parâmetros físicos das regiões HII, tais como densidade colunar de NH₃, densidade de hidrogênio molecular, etc. Tendo em vista estes resultados, realizou-se uma discussão no sentido de estimar as temperaturas cinéticas dessas regiões, bem como a massa da nuvem molecular contida no feixe da antena. Este trabalho apresenta os resultados da primeira detecção de NH₃ na direção da fonte G 328.2-0.5.</i></p>			
15. Observações <i>Dissertação de Mestrado em Ciência Espacial, aprovado em 14 de outubro de 1982.</i>			

Aprovada pela Banca Examinadora
em cumprimento a requisito exigido
para a obtenção do Título de Mestre
em Ciência Espacial

Dr. Volker W.J.H. Kirchhoff



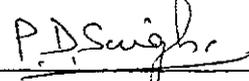
Presidente

Dr. Eugênio Scalise Jr.



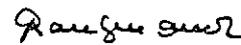
Orientador

Dr. Patan Deen Singh



Membro da Banca
-convidado-

Prof. Pierre Kaufmann



Membro da Banca

Dra. Zulema Abraham



Membro da Banca

Candidato: José Williams Vilas Boas

São José dos Campos, 14 de outubro de 1982

"Não se deve deixar que o aparente excesso de força de que se disponha seja capaz de impedir a participação de um simples operário na edificação de uma obra pequena. Isto, porque a força que se sente reflete muito mais a vontade de edificar do que a capacidade de concretizá-la".

"Não subjulgues baseado na tua "pirâmide" porque as dimensões que ela assume nada mais são do que a dimensão do teu próprio *ego*.

A natureza a vê simples e pequena como tu és".

- Vilas Boas -

A Camilo Paranhos Vilas Boas, Ma
ria Aparecida Vilas Boas, meus pais, e
ao velho amigo JÚlio Braga.

AGRADECIMENTOS

Ao Dr. Eugênio Scalise Jr., pela orientação e liberdade concedida na elaboração deste trabalho.

A Dra. Zulema Abraham, pela discussão de algumas equações.

A todos aqueles que, direta ou indiretamente contribuíram na elaboração deste trabalho.

Ao CNPq e à FAPESP (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo) que através de amparo financeiro, permitiram a elaboração de grande parte deste trabalho.

Ao acordo bilateral CNPq/NSF, convênio Itapetinga/Haystack propiciando uso do amplificador maser no Itapetinga - utilizando em observações necessárias para esta tese.

ABSTRACT

Search for NH₃ emission towards galactic HII regions NGC 6334, Orion and G 328.2-0.5 have been undertaken. All observations were made at frequencies which correspond to the rotational transitions (J,K) = (1,1), (2,2) and (3,3). The observational parameters (antenna temperature, line width, etc.) were utilized to derive the physical parameters of the HII regions such as ammonia column density, molecular hydrogen density, etc. Based on these results we discussed the estimated kinetic temperature of these regions as well as the mass of the molecular cloud viewed by the antenna beam. This work also presents the results of first detection NH₃ in the direction of the source G 328.2-0.5.

SUMÁRIO

	<u>Pág.</u>
LISTA DE FIGURAS	xv
LISTA DE TABELAS	xvii
LISTA DE SÍMBOLOS	xix
<u>CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO</u>	1
<u>CAPÍTULO 2 - A MOLECULA DE AMÔNIA</u>	5
2.1 - Análise Semiclássica	5
2.2 - Comportamento quântico rotacional	7
2.3 - Comportamento quântico vibracional	11
2.4 - Comportamento rotacional vibracional	17
2.5 - Estrutura fina	21
2.6 - Estrutura hiperfina	22
<u>CAPÍTULO 3 - DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS FÍSICOS DAS REGIÕES OBSERVADAS</u>	25
3.1 - Profundidade óptica	25
3.2 - Temperatura de rotação $T(J', K': J, K)$	29
3.3 - Temperatura de excitação e "filling factor"	32
3.4 - Densidade colunar	33
3.5 - Tempo de vida da amônia	34
<u>CAPÍTULO 4 - RADIÔMETRO E ATMOSFERA</u>	37
4.1 - Equipamento e técnica de observação	37
4.2 - Comportamento atmosférico	39
<u>CAPÍTULO 5 - RESULTADOS E DISCUSSÕES</u>	41
5.1 - Fontes individuais	49
5.1.1 - NGC 6334	49
5.1.2 - G 208.8-19.2 (OMC2) e G 208.9-19.4 (OMC1)	56
5.1.3 - G 328.2-0.5	61
5.2 - Excitação e relaxação dos níveis	66
5.3 - Conversão orto-para	74
5.4 - Efeitos geométricos	75

Pág.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 79

APÊNDICE A - AJUSTE GAUSSIANO POR MÍNIMOS QUADRADOS

LISTA DE FIGURAS

	<u>Pág.</u>
2.1 - Representação espacial da molécula de amônia	5
2.2 - Representação de NH ₃ numa situação mais geral possível	6
2.3 - Sistema de coordenadas de Euler	7
2.4 - Potencial versus distância ao plano de hidrogênio	12
2.5 - Possíveis configurações de NH ₃ que satisfazem as condições 1 e 2 anteriores	13
2.6 - Níveis de energia de um rotor simétrico oblato	18
2.7 - Níveis de energia de um rotor simétrico (NH ₃), levando-se em consideração a simetria de ψ_R com $V = 0$	19
2.8 - Níveis de energia de NH ₃ para os estados com $J = K = 1, 2, \dots$	19
2.9 - Sentido de giro da molécula	20
2.10 - Transições finas e hiperfinas no estado metaestável $(J, K) = (1, 1)$	24
3.1 - Representação da situação física considerada	25
5.1 - Espectro observacional de NGC 6334	45
5.2 - Espectro observacional de G 208.8-19.2	46
5.3 - Espectro observacional de G 208.9-19.4	47
5.4 - Distribuição de CO em NGC 6334	48
5.5 - Espectro observacional de G 328.2-0.5	50
5.6 - Distribuição de hidrogênio neutro galático	63
5.7 - Algumas transições da molécula de amônia	69
5.8 - Temperatura de rotação contra temperatura cinética	70
5.9 - Temperatura de excitação contra o logaritmo neperiano da densidade de partículas (n)	71
5.10 - Representação do efeito geométrico	76

LISTA DE TABELAS

	<u>Pág.</u>
5.1 - Resultados observacionais	42
5.2 - Velocidades radiais de outras raia _s moleculares	53
5.3 - Parâmetros físicos obtidos dos espectros observacionais ...	54
5.4 - Tabela comparativa de parâmetros físicos das regiões	55
5.5 - Massa e extensão das regiões observadas	58
5.6 - Transições expontâneas de NH ₃ a partir dos estados <u>metaes</u> <u>táveis</u>	67

LISTA DE SÍMBOLOS

$A_{J,K}$	- Coeficiente de Einstein para transição espontânea, s^{-1}
$B(T)$	- Função de Planck, $J Hz^{-1} m^{-2} Sr^{-1} s^{-1}$
f	- "Filling factor", definido pela Equação 3.13
$g(J, K)$	- Peso estatístico do estado (J, K), adimensional
h	- Constante de Planck, $6,6262 \times 10^{-34} Js$
\hbar	- $h/2\pi$
I_X, I_Y, I_Z	- Momentos de inércia relativos ao eixo X, Y e Z do eplipsóide de inércia.
I_ν	- Intensidade de radiação de frequência ν , $J Hz^{-1} m^{-2} Sr^{-1} s^{-1}$
J_ν	- Momento angular total da molécula
j	- Coeficiente de emissão de radiação na frequência ν $J Hz^{-1} m^{-3} Sr^{-1} s^{-1}$
k	- Constante de Boltzmann, $1,38066 \times 10^{-23} J K^{-1}$
M_\odot	- Massa solar, $1,989 \times 10^{30} Kg$
$N'(1,1)$	- Densidade colunar de NH_3 no estado (J,K) = (1,1), m^{-2}
$N(J, K)$	- População de moléculas no estado (J, K), m^{-3}
$n(H_2)$	- Densidade de moléculas de hidrogênio, m^{-3}
X, Y, Z	- Sistema de coordenadas cartesianas
W	- Energia total do sistema, J
ψ	- Função de onda definida pela equação de Schrödinger

$\psi_e \psi_v \psi_R \psi_I$	- Função de onda eletrônica, vibracional, rotacional e "spin"
ϕ, θ, χ	- Sistema de coordenadas esféricas de Euler
η_a	- Eficiência de antena, adimensional
κ	- Coeficiente de absorção, m^{-1}
μ	- Momento de dipolo, $4,90 \times 10^{-30} \text{ C m}$
μ'	- Massa reduzida, kg
ν	- Frequência, Hz
Γ	- Tempo de vida da molécula da amônia, s
$\theta(\theta), \psi(\theta), \chi(\chi)$	- Funções de onda segundo as dimensões definidas pelos ângulos de Euler
σ	- Seção de choque, m^2
τ	- Profundidade óptica
τ^0	- Profundidade óptica da transição hiperfina principal
τ^1	- Profundidade óptica da transição hiperfinas laterais
T	- Temperatura, K
T_{ai}	- Temperatura de antena medida em cada canal, K
T_{BC}	- Temperatura de "Background", 2,8 K
T_{ex}	- Temperatura de excitação, K
T_K	- Temperatura cinética, K
T_a^x	- Temperatura de antena observada na transição hiperfina x , K

T_a^0	- Temperatura de antena de transição hiperfina principal, K
T_a^1	- Temperatura de antena das transições hiperfinas laterais, K
$T(J'K':J K)$	- Temperatura de rotação determinada a partir das transições (J, K) e (J', K'), K
T_a	- Temperatura de antena, K
$T_a(J, K)$	- Temperatura de antena correspondente ao estado (J,K), K
\bar{T}_a	- Temperatura média de antena, K
u, a	- Unidade astronômica, $9,461 \times 10^{15}$ m
V	- Velocidade radial relativa ao padrão local de repouso km s^{-1}
v	- Especifica o estado vibracional, admisional
δ, α	- Coordenadas equatoriais
$\Delta\nu(J, K)$	- Largura de linha da transição (J, K), s^{-1}
$\Delta V(J, K)$	- Largura de linha da transição (J, K), km s^{-1}
$\Delta T_a(J, K)$	- Temperatura de antena correspondente à raia metaestável (J, K) descontado o contínuo da fonte, K

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A primeira molécula a ser observada no meio interestelar foi o radical metilideno (CH), cuja detecção ocorreu em 1937. Cerca de quatro anos após esta detecção, foi observado o cátion metilideno (CH⁺) e uma nova molécula denominada radical cianogênico (CN). Após estas descobertas obtidas, transcorreu longo tempo sem que novas moléculas fossem detectadas. Somente com o desenvolvimento e aperfeiçoamento dos radiotelescópios é que começaram a ocorrer novas detecções, tendo ocorrido em 1951 uma das mais importantes descobertas que foi a detecção de hidrogênio neutro no meio interestelar. A observação dessa substância foi realizada por Ewen e Purcel (1951). Com a progressiva melhoria dos radiotelescópios, em 1963 houve a detecção do radical hidroxila (OH), no comprimento da onda de 18 cm, e em 1965 foi verificado que a emissão em algumas fontes era devido à radiação estimulada (efeito "maser").

Apesar das moléculas observadas até 1967 serem diatômicas, Shklovski (1952) já havia sugerido que moléculas poliatômicas deveriam ocorrer no meio interestelar. O mais importante trabalho teórico neste sentido foi realizado por Townes e Schawlow (1975), pois além de sugerirem a existência de moléculas poliatômicas, realizaram um estudo detalhado da molécula de amônia calculando o espectro desta molécula em microondas. Em seus cálculos, utilizaram a expressão:

$$\begin{aligned} \nu = & 23.785,88 \exp \{-6,35996 \times 10^{-3} J(J + 1)\} + 8,88986 \times 10^{-3} K^2 + \\ & + 8,6222 \times 10^{-7} J^2 (J + 1)^2 - 1,7845 \times 10^{-6} J(J + 1)K^2 + 5,3075 \times \\ & \times 10^{-7} K^4, \end{aligned}$$

onde:

J é o momento angular total da molécula e

K é o momento angular total projetado no eixo de simetria da molécula.

Esta expansão baseou-se em considerações de Costain (1951) sobre o potencial da molécula de amônia. Desta foram, obtiveram as raias espectrais na faixa de rádio, com um desvio médio da ordem de 1,3 MHz. A partir desses resultados, Cheung et alii (1968) realizaram as primeiras buscas de moléculas poliatômicas no meio interestelar, tendo usado para tal um das frequências de inversão rotacional da molécula de amônia. Os resultados foram positivos, e a primeira detecção de moléculas poliatômicas ocorreu na direção do centro galático (Cheung et alii, 1968). A partir de então, um grande número de fontes foram pesquisadas e resultados positivos foram obtidos na direção de várias dessas fontes. Cheung (1976) classificou as fontes de amônia em três tipos:

- 1) Fontes do Centro Galático.
- 2) Fontes associadas a regiões HII.
- 3) Nuvens escuras de poeira.

Esta classificação usou como critério básico a largura a meia altura das raias observadas, uma vez que a molécula de amônia nessas regiões apresenta os seguintes valores de largura de linha: 50 kms^{-1} , $2-5 \text{ kms}^{-1}$ e $< 1 \text{ kms}^{-1}$.

Com o desenvolvimento de radiômetros refrigerados, as pesquisas de amônia novamente intensificaram-se tendo sido descobertos um grande número de fontes galáticas e emissões provenientes de uma fonte extragalática (IC342) (Martin e Ho, 1979). A escolha deste trabalho foi devida ao fato de existir no observatório de Itapetinga um receptor que, com ligeiras modificações, tornou-se apropriado às observações da molécula de NH_3 . O estudo desta molécula resulta extremamente importante pelo fato de que a molécula de NH_3 apresenta várias raias detectáveis entre 22 e 44 GHz. Estas raias, de origem térmica, são separadas por pe

quenos intervalos de frequências. Estes pequenos intervalos de frequências implicam um conjunto de observações bastante homogêneas, o que não é possível quando se observa raias situadas em regiões espectrais distantes entre si (22 e 44 GHz).

O número de raias detectáveis, aliado à natureza térmica dessas emissões, permitiram um estudo detalhado das condições físicas das regiões onde se originaram. Também, a molécula de amônia aparece amplamente distribuída na galáxia.

Esta é a primeira vez que se realiza a pesquisa de NH_3 no Itapetinga. As fontes escolhidas foram primeiramente, NGC6334 e Órion, já observadas por outros autores, e utilizadas para verificar a consistência dos dados que se obteve. Da lista de fontes detectadas por Scalise et alii (1981a e b), escolheu-se a região HII G328.2 - 0.5 para uma observação mais detalhada das transições (1,1) e (2,2), com a finalidade de obter os parâmetros físicos que descrevem esta fonte.

No Capítulo 2, fez-se uma revisão do estudo da molécula de amônia, visando entender seu comportamento rotacional, vibracional, e a sua estrutura hiperfina, bem como alguns comentários a respeito do comportamento da molécula sob as condições do campo de radiação do meio interestelar. No Capítulo 3, realizou-se um estudo do transporte radiativo e, em seguida, algumas equações foram derivadas para obter os parâmetros físicos das regiões observadas. No Capítulo 4, discutiu-se o equipamento utilizado nas observações, bem como o efeito da atmosfera sobre as frequências de observação. No Capítulo 5, discutiu-se cada fonte isoladamente e derivaram-se seus respectivos parâmetros físicos. Visando entender a natureza da informação contida em alguns dos parâmetros que se derivou, realizou-se um estudo dos modelos de excitação e relaxação da molécula de NH_3 . Finalmente, foram apresentados alguns comentários sobre a conversão orto - para amônia e discutiu-se a influência dos efeitos da geometria das fontes nos resultados.

CAPÍTULO 2

A MOLÉCULA DE AMÔNIA

2.1 - ANÁLISE SEMICLÁSSICA

Uma molécula será denominada um rotor simétrico se possuir ao menos um eixo de simetria tripla ("three fold"). Com base nesta definição, a molécula de amônia é classificada com um rotor simétrico, cujo eixo principal passa perpendicularmente por um plano que contém os hidrogênios e intercepta o átomo de nitrogênio (Figura 2.1).

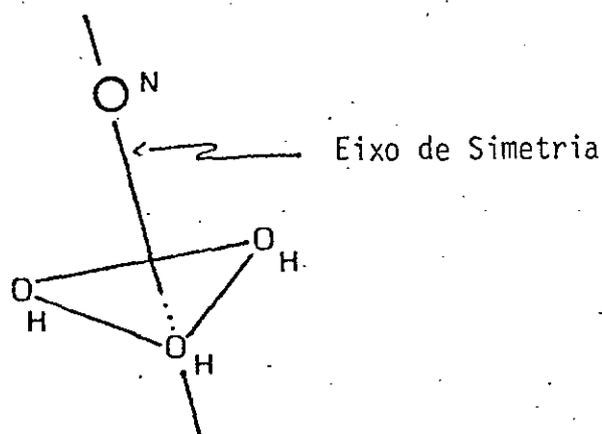


Fig. 2.1 - Representação espacial da molécula de amônia.

Pode-se verificar que girando os átomos de hidrogênio 120° em torno do eixo de simetria, encontra-se uma configuração espacial idêntica à anterior. O mesmo ocorrerá realizando-se duas rotações consecutivas.

A molécula de amônia será considerada como um rotor rígido, cujo eixo de simetria descreve o movimento de precessão em torno do eixo do momento angular total (Figura 2.2).

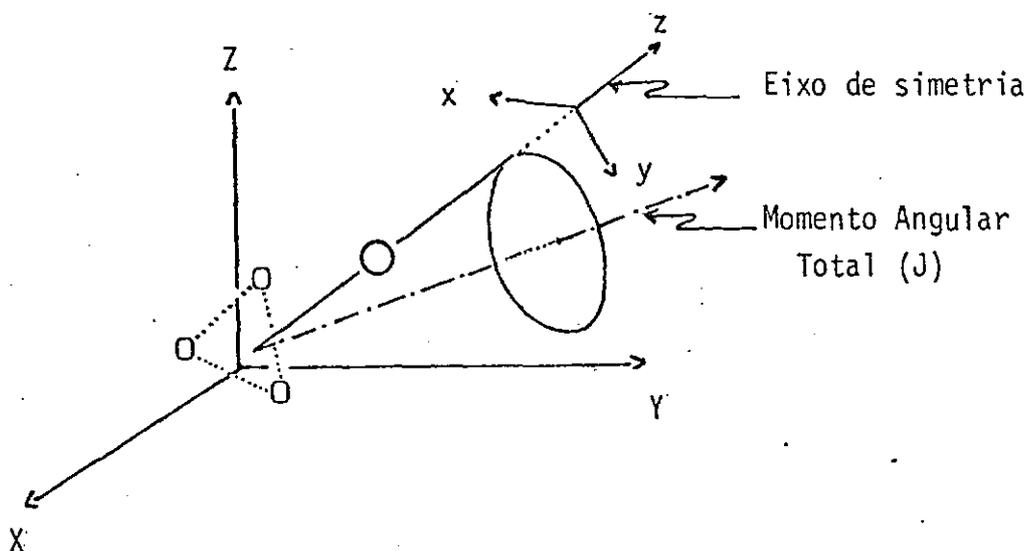


Fig. 2.2 - Representação da NH₃ num situação mais geral possível.

A partir desta suposição e levando em consideração que os valores I_x e I_y do elipsóide dos momentos de inércia são iguais, obtém-se a seguinte expressão para a energia total W da molécula no estado (J, K) :

$$W = hBJ(J + 1) + (C - B)hK^2 \quad (2.1)$$

onde:

h é a constante de planck,

J o momento angular total,

K a projeção do momento angular total no eixo de simetria, e

A , B e C são definidos como se segue:

$$A = \frac{h}{4\pi I_x}; \quad B = \frac{h}{4\pi I_y} \quad e \quad C = \frac{h}{4\pi I_z} \quad (2.2)$$

onde I_x , I_y e I_z são os momentos de inércia do elipsóide de inércia.

A Equação 2.1 fornece com boa aproximação os níveis de energia de uma molécula que possa ser classificada como um rotor simétrico, independentemente de ser oblato ($I_z > I_x, I_y$) ou prolato ($I_z < I_x, I_y$). A molécula de amônia, por ser um rotor simétrico oblato, deve possuir seus níveis de energia crescentes quando crescem os valores de J e/ou K.

2.2 - COMPORTAMENTO QUÂNTICO ROTACIONAL

Para a construção da hamiltoniana, usar-se-ão os ângulos de Euler, uma vez que formam um sistema de coordenadas conveniente para o tratamento do problema. Suas coordenadas são definidas com três ângulos obtidos por rotações sucessivas de um corpo rígido (Figura 2.3).

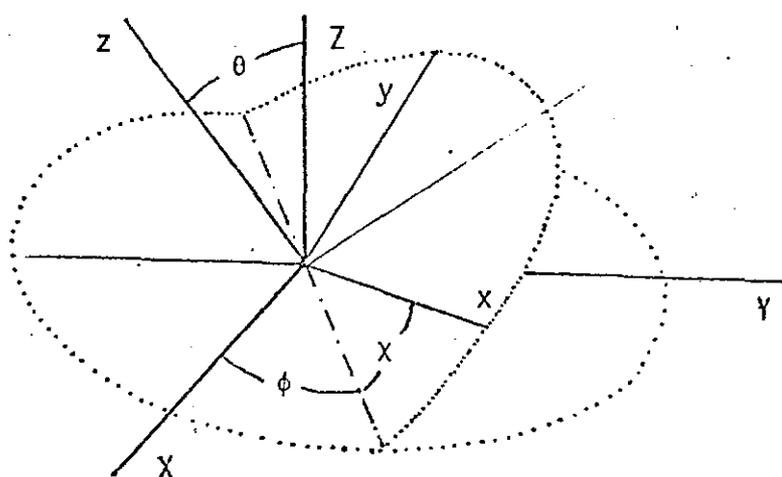


Fig. 2.3 - Sistema de coordenadas de Euler.

Utilizando esse sistema, pode-se escrever uma equação diferencial para a função de onda (ψ) em termos dos ângulos θ , ϕ e χ . Esta equação foi construída por Kembel (1937) e escreve-se da seguinte forma:

$$\frac{1}{\text{sen } \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\text{sen } \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{\text{sen}^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \left[\frac{\cos^2 \theta}{\text{sen}^2 \theta} + \frac{C}{B} \right] \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2 \cos \theta}{\text{sen}^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial \phi} + \frac{W}{hB} \psi = 0, \quad (2.3)$$

onde A, B e C são as constantes rotacionais definidas na Equação 2.2.

Fazendo-se uso da separação de variáveis $\psi(\theta, \phi, x) = \theta(\theta) \phi(\phi) X(x)$, obtêm-se:

$$\frac{1}{\theta} \frac{1}{\text{sen } \theta} \frac{d}{d\theta} \left[\text{sen } \theta \frac{d}{d\theta} \theta \right] + \frac{1}{\text{sen}^2 \theta} \left[\frac{d^2 \phi}{d\phi^2} \right] \frac{1}{\phi} + \left[\frac{\cos^2 \theta}{\text{sen}^2 \theta} + \frac{C}{B} \frac{d^2}{dx^2} \right] \frac{1}{X} + \frac{2 \cos \theta}{\text{sen}^2 \theta} \left[\frac{d\phi}{d\phi} \frac{dX}{dx} \right] \frac{1}{X\phi} + \frac{W}{hB} = 0. \quad (2.4)$$

Desta equação pode-se escrever:

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = -K^2; \quad \frac{1}{\phi} \frac{d^2 \phi}{d\phi^2} = -M^2, \quad (2.5)$$

onde M e K são inteiros positivos.

Substituindo a solução dessas Equações na Equação 2.4, obtem-se:

$$\frac{1}{\text{sen } \theta} \left[\frac{d}{d\theta} \left(\text{sen } \theta \frac{d\theta}{d\theta} \right) \right] \frac{1}{\theta} - \left[\frac{M^2}{\text{sen}^2 \theta} + \left(\frac{\cos^2 \theta}{\text{sen}^2 \theta} + \frac{C}{B} \right) K^2 - \frac{2 \cos \theta}{\text{sen}^2 \theta} MK - \frac{W}{hB} \right] = 0 \quad (2.6)$$

Desta forma, a solução geral da Equação 2.4 será do tipo:

$$\psi(\theta, \chi, \phi) = \text{EXP} [M\phi + K\chi] \theta(\theta). \quad (2.7)$$

Esta equação requer modificações em consequência da existência de pontos singulares em $\theta = 0$ e π . Utilizando a mudança de variável $x = 1/2 (1 - \cos \theta) \dots$ (Equação 2.8), pode-se escrever:

$$\frac{d}{dx} \left[x(1-x) \frac{d}{dx} T(x) \right] + \left[\lambda - \frac{[M+K(2x-1)^2]}{4x(1-x)} \right] T(x) = 0, \quad (2.9)$$

onde:

$$\lambda = \frac{AW}{\hbar} - \frac{A}{C} K^2 \quad \text{e} \quad \theta(\theta) = T(x).$$

Com esta substituição, os pontos singulares regulares são deslocados. Usando as transformações:

$$T(x) = x^s G(x), \quad \text{e} \quad T(x) = (1-x)^{s'} H(1-x),$$

obtêm-se

$$s = \frac{1}{2} | (K - M) | \quad \text{e} \quad s' = \frac{1}{2} | (K + M) |.$$

Tendo em vista estes resultados, de acordo com Pauling e Wilson (1935), deve-se fazer a substituição:

$$\theta(\theta) = x^{\frac{1}{2} | (K + M) |} (1-x)^{\frac{1}{2} | (K - M) |} F(x),$$

que levarã à equaçãõ:

$$X(1 - x) \frac{d^2}{dx^2} F(x) + (\alpha - \beta x) \frac{d}{dx} F(x) + \gamma F(x) = 0, \quad (2.10)$$

onde:

$F(x)$ = função hipergeométrica,

$$\alpha = |(K - M)| + 1,$$

$$\beta = |(K + M)| + |(K - M)| + 2,$$

$$\gamma = \lambda + K^2 - \left(\frac{1}{2} |K + M| + \frac{1}{2} |K - M| \right) \times \left(\frac{1}{2} |K + M| + \frac{1}{2} |K - M| + 1 \right).$$

Esta é uma equaçãõ hipergeométrica na qual se pode utilizar as sêries de potência $F(x) = a_j x^j$ e chegar à seguinte fórmula de recorrência:

$$a_{j+1} = \frac{j(j - 1) + \beta j - \gamma}{(j + 1)j + \alpha(j + 1)} a_j. \quad (2.11)$$

Para que a soluçãõ exista e seja uma função de onda, o numerador da Equaçãõ 2.11 deve anular-se em algum ponto. Esta imposiçãõ leva à equaçãõ para os níveis de energia:

$$W_{JK} = \frac{\hbar^2}{8\pi^2} \left\{ \frac{J(J + 1)}{I_B} + K^2 \left[\frac{1}{I_C} - \frac{1}{I_B} \right] \right\} \text{ ou} \quad (2.12)$$

$$W_{JK} = B J(J + 1) + (C - B) K^2 \quad (2.13)$$

onde:

$$J = j + \frac{1}{2} |K + M| + \frac{1}{2} |K - M|$$

e j corresponde à ordem do mais alto termo da Equação 2.11 que não se anula.

Deve-se observar que a Equação 2.12 é exatamente igual à Equação 2.1, apesar daquela haver sido obtida por um formalismo semiclássico.

Analisando a Equação 2.6, verificou-se que ϕ e χ são coordenadas cíclicas, de modo que a análise das funções ϕ e χ leva a concluir que K e M pertencem ao conjunto dos inteiros.

De posse dessas considerações e da Equação 2.13, obtêm-se:

$$J = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$$

$$K = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$$

$$M = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$$

2.3 - COMPORTAMENTO QUÂNTICO VIBRACIONAL

Na molécula da amônia, o nitrogênio oscila através do plano que contém os hidrogênios. Esta configuração de hidrogênios cria uma barreira de potencial, tal que o nitrogênio com baixa energia não deveria oscilar através da "barreira", se o problema fosse encarado do ponto de vista clássico. Todavia este efeito não ocorre, e o nitrogênio oscila através da barreira de potencial como consequência do "efeito tunel". A Figura 2.4 fornece um esquema deste potencial.

Quando o estado vibracional do N é tal que possui energia suficiente para vibrar classicamente, os níveis de energia não aparecem aos pares e, conseqüentemente, não há emissão em microondas.

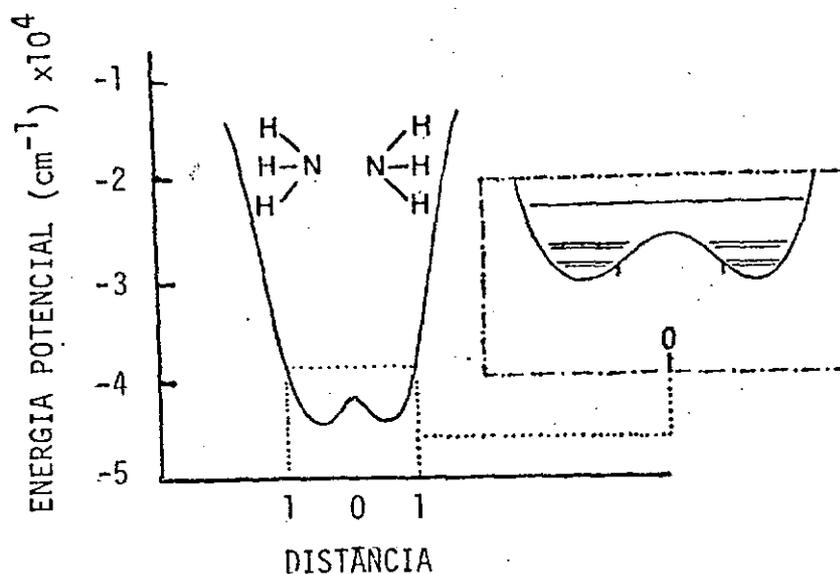


Fig. 2.4 - Potencial versus distância ao plano dos hidrogênios por K.R. Lang (1980).

FONTE: Lang (1980), p. 153.

Imponha-se as seguintes condições a essa molécula, de modo que se possa analisar seu comportamento vibracional.

- 1) A molécula gira apenas em torno de seu eixo de simetria.
- 2) O momento translacional é nulo.
- 3) Os átomos de hidrogênio não vibram.

Com estas condições, resta apenas o movimento vibracional do nitrogênio. Sejam os vetores de estado definidos na Figura (2.5) à semelhança do tratamento desenvolvido por Feynmann et alii (1971).

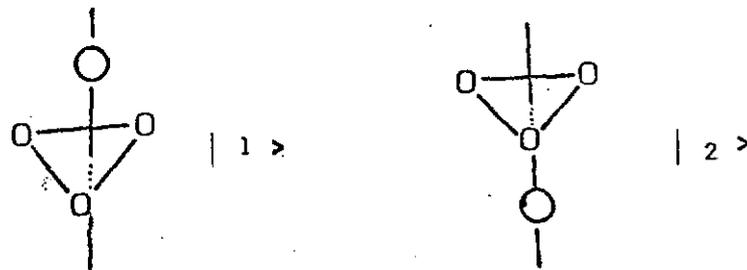


Fig. 2.5 - Possíveis configurações de NH_3 que satisfazem as condições 1 e 2 anteriores.

Os vetores de estado $|1\rangle$ e $|2\rangle$ definem uma base para o estudo do movimento vibracional. Assim, qualquer estado do sistema poderá ser descrito por:

$$|\psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2 \dots$$

Visando estabelecer o comportamento temporal do sistema, pode-se utilizar o operador de evolução temporal e obter a equação:

$$i \hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H (|1\rangle C_1 + |2\rangle C_2), \quad (2.14)$$

onde:

$$C_1 = \langle 1 | \psi \rangle \quad C_2 = \langle 2 | \psi \rangle$$

Pode-se ainda escrever a Equação 2.14 como:

$$\begin{aligned} i \hbar \left\{ \langle 1 | 1 \rangle \frac{d}{dt} \langle 1 | \psi \rangle + \langle 1 | 2 \rangle \frac{d}{dt} \langle 2 | \psi \rangle \right\} = \\ = H_{11} \langle 1 | \psi \rangle + H_{12} \langle 2 | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (2.15)$$

onde

$$H_{ij} = \langle i | H | j \rangle, \quad \text{com } j = i = 1, 2.$$

Supondo, em primeira aproximação, $H_{12} = 0$, obtêm-se os valores de C_1 e C_2 dados por:

$$C_1 \propto \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_{11} t\right),$$

$$C_2 \propto \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_{22} t\right),$$

onde

$$H_{1,1} = H_{2,2} = E_0$$

sendo E_0 a energia dos estados.

Em segunda aproximação, pode-se concluir que os termos $H_{1,2}$ e $H_{2,1}$ devem ser tomados diferentes de zero, visto que a vibração do N tem lugar através da barreira de potencial inacessível classicamente. Definindo $H_{1,2} = H_{2,1} = A$, resulta:

$$C_1(t) = \frac{1}{2} (\text{cte}) e^{-\frac{i}{\hbar} [E_0 - A] t} + \frac{1}{2} (\text{cte}') e^{-\frac{i}{\hbar} [E_0 + A] t}$$

$$C_2(t) = \frac{1}{2} (\text{cte}) e^{-\frac{i}{\hbar} [E_0 - A] t} - \frac{1}{2} (\text{cte}') e^{-\frac{i}{\hbar} [E_0 + A] t},$$

o que pode ser escrito como:

$$C_1(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \cos \left(\frac{At}{\hbar} \right),$$

$$C_2(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \operatorname{sen} \left(\frac{At}{\hbar} \right).$$

Dessa forma, pode-se ver claramente que as amplitudes variam harmonicamente no tempo, e as probabilidades de encontrar o nitrogênio em qualquer um dos estados, num determinado instante, são funções senoidais ao quadrado.

Realizando combinações lineares entre C_1 e C_2 , pode-se escrever:

$$|\psi\rangle = |I\rangle C_I + |II\rangle C_{II}$$

onde:

$$C_I = \frac{1}{2} [C_1 - C_2], \quad C_{II} = \frac{1}{2} [C_1 + C_2],$$

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle - |2\rangle] \text{ e } |II\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle + |2\rangle].$$

Utilizando estas transformações, obtêm-se as seguintes equações:

$$|\psi\rangle = |I\rangle \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (E_0 + A) t \right] \text{ se } |\psi_{II}\rangle = 0,$$

$$|\psi\rangle = |II\rangle \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (E_0 - A) t \right] \text{ se } |\psi_I\rangle = 0,$$

onde:

$$|\psi\rangle = |\psi_I\rangle + |\psi_{II}\rangle.$$

Finalmente, pode-se concluir que há uma diferença de energia entre os estados $|I\rangle$ e $|II\rangle$, o que implica que o nitrogênio deverá emitir ou absorver energia ao passar de um estado para outro.

O nitrogênio, em um dos lados da barreira de potencial, pode possuir pequenas oscilações e, provavelmente, após um grande número delas conseguirá passar através da barreira. As vibrações rápidas emitem na região do infravermelho, enquanto as vibrações "lentas", através da barreira, emitem radiação em microondas. A frequência de inversão foi calculada pela primeira vez por Dennison e Uhlenbeck (1932), que fizeram uso do método WKB (Schiff, 1968) obtendo o seguinte resultado:

$$\nu = \frac{\nu_0'}{\pi A^2},$$

em que:

$$A = \text{EXP} \left[\frac{1}{h} \int_0^{S_0} \left[2\mu' \{V(S) - W\} \right]^{1/2} ds \right],$$

onde:

S_0 = posição do N quando sua energia cinética é igual a energia potencial,

S = distância do N ao plano dos hidrogênios,

ν_0 = frequência da vibração em um dos mínimos do potencial,

μ' = massa reduzida para o movimento vibracional,

W = energia total,

$V(S)$ = forma do potencial criado pelos hidrogênios.

Estudo semelhante foi desenvolvido por Townes e Shawlow (1975), obtendo o mesmo resultado.

2.4 - COMPORTAMENTO ROTACIONAL - VIBRACIONAL

A molécula de NH_3 possui várias configurações espaciais semelhantes. Em tais situações o operador hamiltoniano deve ser o mesmo, podendo diferir entre uma configuração e outra apenas quanto à função de onda. Deve-se observar que duas inversões sucessivas levam à mesma configuração inicial do sistema. Como consequência dessas inversões em torno da origem, pode-se ter uma função de onda invariante sob inversão (simétrica em relação à operação) e uma função de onda que muda de sinal (anti-simétrica em relação à operação). Como consequência, a intensidade das transições ficam determinadas em função da simetria das funções de onda dos estados envolvidos. A partir dos elementos da matriz de dipolo, pode-se concluir que ocorrem transições apenas entre estados de simetrias diferentes.

Da Equação 2.7 obtém-se que a função de onda rotacional é $\psi = e^{i(M\phi + K\chi)} \Theta(\theta)$.

Uma inversão sob a origem produz variações apenas em χ , ou seja:

$$\theta \rightarrow \theta' = \theta,$$

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi,$$

$$\chi \rightarrow \chi' = \chi + \Pi.$$

Impondo essa transformação à equação de onda rotacional, obtém-se:

$$\psi' = \exp i(K\phi + M\chi') \Theta(\theta), \quad \text{ou}$$

$$\psi' = (-1)^K \psi.$$

Observe que o valor de K determina se a função de onda $\bar{\psi}$ é simétrica em relação à operação.

De acordo com Born e Oppenheimer (Pauling and Wilson, 1935), a função de onda total da molécula é dada por:

$$\psi_{\text{total}} = \psi_e \psi_v \psi_R \psi_I,$$

onde se tem, respectivamente, funções de onda eletrônica, vibracional, rotacional e "Spin". Desta forma a simetria de ψ_{total} depende da simetria de cada função de onda. Todavia, em primeira aproximação, será considerado ψ_R na análise de simetria de ψ_{total} (Townes and Shawlow, 1975), desde que a molécula se encontre nos níveis vibracionais mais baixos. No caso de estados vibracionais excitados, as propriedades de simetria da função de onda vibracional são dadas por:

$$\psi'_v = (-1)^v \psi_v,$$

onde v é um inteiro positivo.

Os níveis de energia de um rotor simétrico oblato são mostrados na Figura 2.6. Da mesma forma, são mostrados na Figura 2.7 os níveis de energia de um rotor simétrico (NH_3), levando-se em consideração a simetria da função de onda.

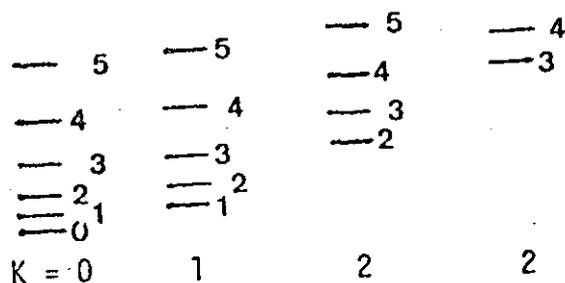


Fig. 2.6 - Níveis de energia de um rotor simétrico oblato.

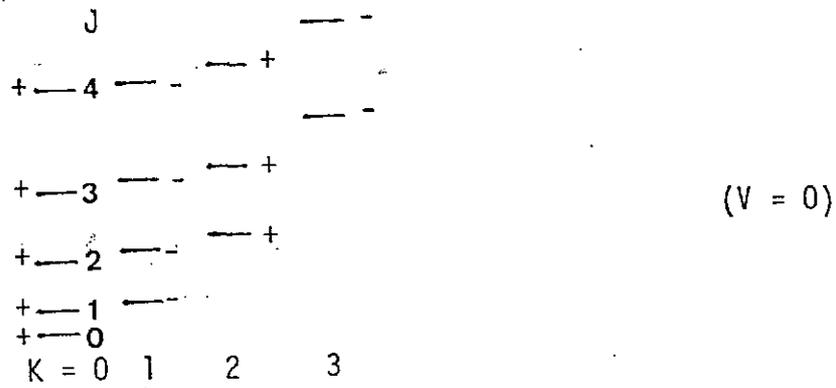


Fig. 2.7 - Níveis de energia de um rotor simétrico (NH_3), levando-se em consideração a simetria de ψ_R com $v = 0$.

De posse das regras de seleção e conhecendo-se os níveis rotacionais da molécula de amônia, pode-se concluir que transições são permitidas. Algumas dessas transições são mostradas na Figura 2.8. As transições entre níveis rotacionais emitem na região infravermelha do espectro eletromagnético, enquanto as transições com $\Delta K = \Delta J = 0$ emitem em microondas.

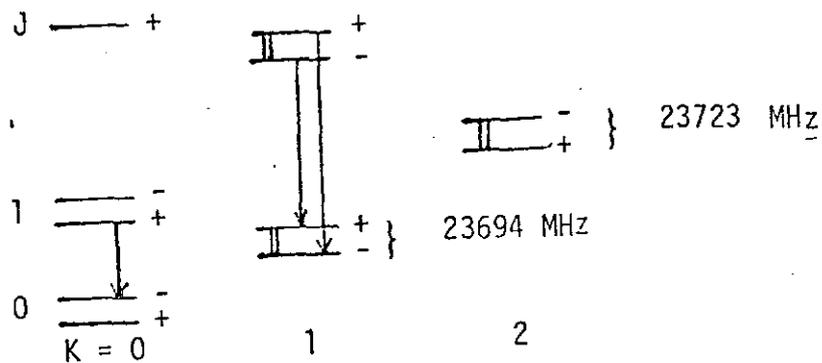


Fig. 2.8 - Níveis de energia NH_3 para os estados com $J = K = 1, 2$.

Além da simetria em relação à inversão, a molécula de NH_3 possui outras configurações simétricas decorrentes de giros em torno do eixo principal. Girando os hidrogênios em torno do eixo de simetria (Figura 2.9), obtêm-se configurações semelhantes à anterior. Esta operação pode levar a uma função de onda final igual à inicial, ou a uma outra que difere apenas em fase (suponha-se estados não-degenerados).

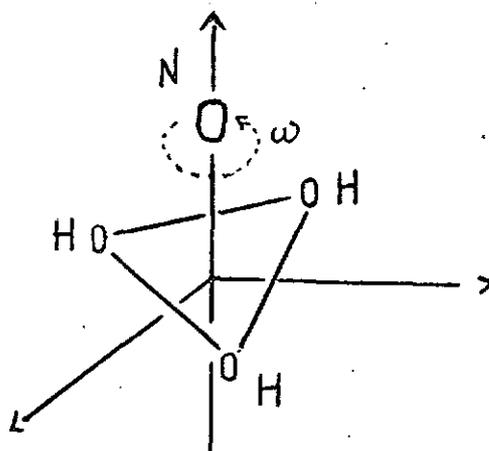


Fig. 2.9 - Sentido de giro da molécula.

De acordo com Townes e Schawlow (1975), funções que são simétricas ou anti-simétricas com relação à troca de qualquer núcleo podem ser obtidas por combinações das variações de χ e do "Spin". Então, se K não é múltiplo de 3, obtêm-se:

$$\psi_{JKM} \left[|2\rangle + e^{i\frac{2\pi}{3}K} |3\rangle + e^{i\frac{4\pi}{3}K} |4\rangle \right] \pm \psi_{J-KM} \left[|2\rangle + e^{-i\frac{2\pi}{3}K} |3\rangle + e^{-i\frac{4\pi}{3}K} |4\rangle \right] \quad (2.16)$$

$$\psi_{JKM} \left[|5\rangle + e^{i\frac{2\pi}{3}K} |6\rangle + e^{i\frac{4\pi}{3}K} |7\rangle \right] \pm \psi_{J-KM} \left[|5\rangle + e^{-i\frac{2\pi}{3}K} |6\rangle + e^{-i\frac{4\pi}{3}K} |7\rangle \right] \quad (2.17)$$

onde $|i\rangle$ ($i = 2, \dots, 7$) diz respeito às possíveis configurações dos "spins" dos hidrogênios na amônia. Impondo as condições de simetria e realizando uma análise mais detalhada, conclui-se que os estados para os quais $K = 0$ possuem funções de onda dadas pela soma dos termos da Equação 2.16 ou 2.17. Observe que para $K = 0$, a função de onda anula-se quando se toma o sinal negativo das funções que possuem simetria correta (Equação 2.18).

$$\left[\psi_{JKM} \pm \psi_{J-KM} \right] |j\rangle \quad (2.18)$$

onde

$$j = 1 \text{ e } 8.$$

Isto justifica o fato de não se obterem inversões rotacionais nos estados em que $K = 0$.

2.5 - ESTRUTURA FINA

As frequências de transições por inversão rotacional apresentam uma forte dependência em relação à massa e ao potencial do sistema. No espaço, uma molécula de amônia pode descrever uma série de movimento dentre as quais, o movimento de rotação em torno do eixo de simetria da molécula é o principal responsável por variações sensíveis na forma de seu potencial.

Para calcular a frequência da inversão rotacional, Newton e Thomas (1948) sugeriram formas analíticas, contudo os resultados não foram satisfatórios, apresentando erros relativos da ordem de 10%. Ajustes melhores foram obtidos através de expansões desenvolvidas por Costain (1951).

2.6 - ESTRUTURA HIPERFINA

Na molécula da amônia, a estrutura hiperfina magnética é extremamente pequena, enquanto a estrutura hiperfina resultante da interação de quadrupolo elétrico é mais proeminente, tornando-se mais relevantes nas observações.

A energia das estruturas hiperfinas da molécula de amônia pode ser obtida por:

$$W_Q = \frac{e q Q \left(\frac{3K^2}{J(J+1)} - 1 \right)}{2I(2I-1)(2J+3)} \cdot \left(\frac{3}{4} C(C+1) - I(I+1)J(J+1) \right) \times \\ \times (2J-1)^{-1} \quad (2.19)$$

onde:

$$C = F(F+1) - I(I+1) - J(J+1),$$

q = segunda derivada do potencial ao longo do eixo molecular, de acordo com Coles e Good (1946),

Q = constante nuclear,

eqQ é denominada constante de acoplamento de quadrupolo,

$$F = I + J; I + (J - 1), \dots (I - J),$$

I = spin nuclear,

W_Q apresenta-se esquematicamente na Figura 2.10.

A Equação 2.19 foi obtida supondo-se que a função de onda rotacional da molécula não é afetada pela interação de quadrupolo nuclear. Na molécula de amônia, a interação de quadrupolo elétrico afeta a função de onda rotacional, o que sugere a inclusão de termos de segunda ordem na perturbação.

De acordo com a teoria formal desenvolvida por Kukolich (1967), deve-se considerar a hamiltoniana de Gordon, para avaliar o quanto é modificado o valor da energia das transições hiperfinas, quando se consideram termos de ordem superior de um, na perturbação.

A partir da expressão da energia para a estrutura hiperfina, Barden e Townes (1948) obtiveram os elementos permitidos da matriz de perturbação, considerando os termos de segunda ordem na energia. A partir desses elementos, pode-se concluir que a interação da segunda ordem é grande o suficiente para ser considerada. Esta interação produz a "quebra" das raias de inversão - rotacional, fazendo surgir raias satélites associadas com a estrutura fina da molécula (Figura 2.10). Efeitos análogos, em menor escala, são produzidos por interações magnéticas, dando origem às estruturas hiperfinas magnéticas.

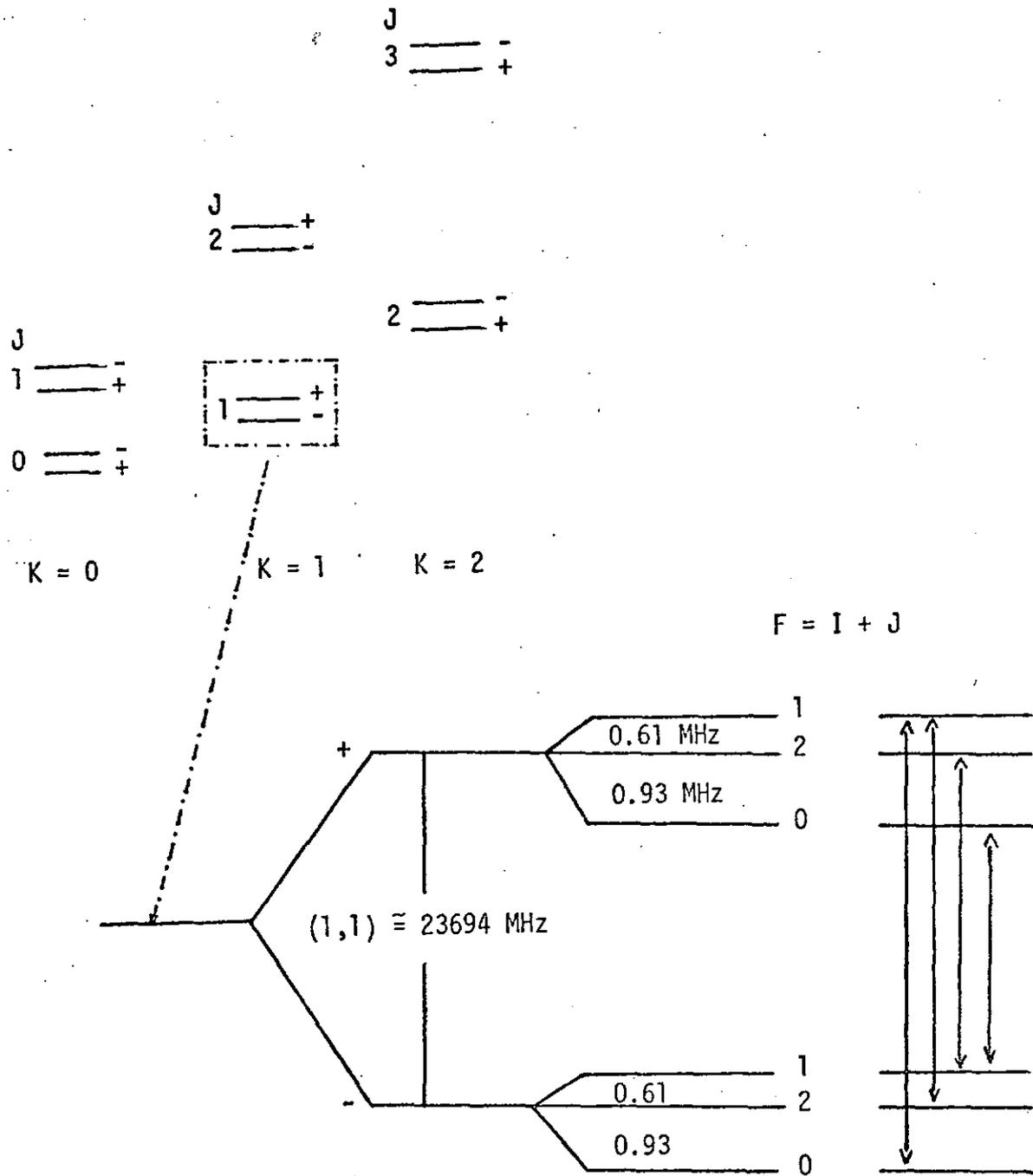


Fig. 2.10 - Transições finas e hiperfinas no estado metaestável $(J, K) = (1, 1)$.

CAPÍTULO 3

DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS FÍSICOS DAS REGIÕES OBSERVADAS

3.1 - PROFUNDIDADE ÓPTICA

Considere a situação em que a radiação eletromagnética proveniente de uma fonte no espaço interestelar seja o resultado de um conjunto de absorções e emissões ao longo de sua trajetória (Figura 3.1).

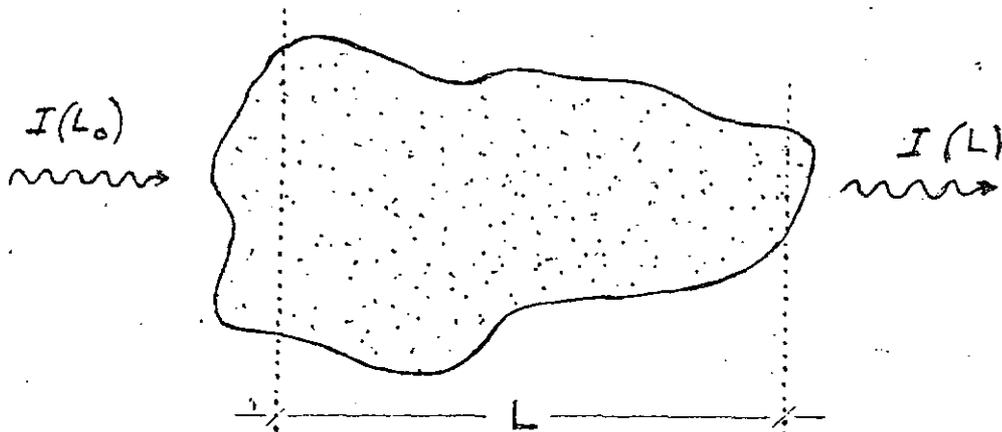


Fig. 3.1 - Representação da situação física considerada.

Pode-se montar a seguinte equação de transferência radiativa, para a situação física proposta:

$$\frac{d}{d\tau_\nu} I_\nu = \frac{j_\nu}{\kappa_\nu} - I_\nu,$$

onde:

j_ν = coeficiente de emissão,

I_ν = intensidade da radiação com frequência ν ,

τ_ν = profundidade óptica na frequência ν ,

κ_ν = coeficiente de absorção.

Considerando-se o meio homogêneo e isotrópico, obtêm-se a seguinte equação para solução da equação de transferência:

$$I_{\nu}(L) = I_{\nu}(L_0) e^{-\tau_{\nu}} + \frac{j_{\nu}}{\kappa_{\nu}} (1 - e^{-\tau_{\nu}}),$$

onde:

$I(L_0)$ = radiação proveniente de fontes posteriores,

$I(L)$ = radiação resultante das absorções e emissões.

No problema físico proposto, a radiação analisada é proveniente da nuvem de gás, de forma que se pode considerar nula a radiação de mesma natureza que incide sobre a nuvem. Consequentemente:

$$I_{\nu}(L_0) = 0 \Rightarrow I_{\nu}(L) = \frac{j_{\nu}}{\kappa_{\nu}} (1 - e^{-\tau_{\nu}}).$$

De agora em diante, a solução da equação de transferência será escrita simplesmente:

$$I = \frac{j_{\nu}}{\kappa_{\nu}} (1 - e^{-\tau}).$$

A partir das equações de balanço de energia, pode-se chegar à seguinte relação para a razão entre coeficientes de emissão e absorção:

$$\frac{j_{\nu}}{\kappa_{\nu}} = B_{\nu}(T),$$

onde:

$B_{\nu}(T)$ é a função de Planck.

Finalmente, a equação de transferência radiativa toma a seguinte forma:

$$I_{\nu} = B_{\nu}(T) (1 - e^{-\tau}). \quad (3.1)$$

Para comprimentos de onda na faixa de frequências observadas, a desigualdade $h \nu \ll kT$ é satisfeita e permite expandir a parte exponencial da função de Planck em série de Taylor.

Considerando-se que o meio através do qual a radiação se propaga não modifica as características da informação relativa ao mecanismo de emissão, pode-se expressar a intensidade medida por uma função de Planck. Fazendo uso da expansão de Taylor em primeira ordem, obtêm-se:

$$I(\text{fonte}) = \frac{2\nu^2}{c^2} kT_K, \quad (3.2)$$

$$I(\text{recebida}) = \frac{2\nu^2}{c^2} kT_a,$$

onde T_K e T_a são temperaturas de fonte e antena, respectivamente, e k é a constante de Boltzmann.

Usando as Equações 3.1 e 3.2 obtêm-se uma relação entre a temperatura de antena (T_a) e a temperatura da fonte (T_K), ou seja:

$$T_a = T_K (1 - e^{-\tau}). \quad (3.3)$$

Uma vez que se está observando raios moleculares, a expressão para a temperatura de antena será escrita de modo que se possa distinguir a que raia espectral ela está associada. Dessa forma, a Equação 3.3 será reescrita como se segue:

$$T_a^X(J, K) = T_K (1 - e^{-\tau^X(J, K)}),$$

onde (J, K) diz respeito ao estado rotacional da molécula em observação, e x especifica a estrutura hiperfina associada com o estado rotacional mencionado. Para a transição metaestável (J, K) = (1, 1), pode-se escrever:

$$T_a^0(1, 1) = T_K (1 - e^{-\tau^0(1, 1)}), \quad (3.4)$$

onde x = 0 diz respeito à raia principal, e $T_a^0(J, K)$ é a temperatura de antena do estado metaestável (J, K), em J = K = 1. Uma equação semelhante também pode ser obtida para as transições hiperfinas laterais:

$$T_a^1(1, 1) = T_K [1 - e^{-\tau^1(1, 1)}], \quad (3.5)$$

onde x = 1 especifica estas transições.

Tomando a razão entre as Equações 3.1 e 3.5 obtém-se:

$$\frac{T_a^0(1, 1)}{T_a^1(1, 1)} = \frac{1 - e^{-\tau^0(1, 1)}}{1 - e^{-\tau^1(1, 1)}}, \quad (3.6)$$

onde τ^0 e τ^1 são as profundidades ópticas da raia principal e lateral, respectivamente. Ao tomar a razão dessas equações, elimina-se a incógnita T_K . Contudo, não se pode determinar $\tau^0(1, 1)$ a partir da Equação 3.6, visto que ainda há outro parâmetro desconhecido $\tau^1(1, 1)$. De acordo com Rydbeck et alii (1977), $\tau^1(1, 1) \approx 0,28 \tau^0(1, 1)$.

Pode-se então reescrever a Equação 3.6 como se segue:

$$\frac{T_a^0(1, 1)}{T_a^1(1, 1)} = \frac{1 - e^{-\tau^0(1, 1)}}{1 - e^{-0,28\tau^0(1, 1)}}. \quad (3.7)$$

Desta relação, determina-se a profundidade óptica das transições $(J, K) = (1, 1)$. Para efeito de simplificações, as temperaturas e profundidades ópticas escritas de agora em diante dizem respeito às transições principais. Caso contrário, será explicitada a transição hiperfina envolvida.

Relações análogas à Equação 3.7 podem ser obtidas entre diferentes estados rotacionais da molécula. Assim, para as transições finas $(J, K) = (1, 1)$ e $(2, 2)$ pode-se escrever:

$$\frac{T_a(1, 1)}{T_a(2, 2)} = \frac{1 - e^{-\tau(1, 1)}}{1 - e^{-\tau(2, 2)}} .$$

Dessa relação obtém-se uma expressão para a profundidade óptica da transição $(J, K) = (2, 2)$ do seguinte modo:

$$\tau(2, 2) = - \ln \left\{ 1 - \frac{T_a(2, 2)}{T_a(1, 1)} \left(1 - e^{-\tau(1, 1)} \right) \right\} \quad (3.8)$$

De maneira perfeitamente análoga à Equação 3.8, deriva-se uma expressão para a profundidade óptica da transição $(J, K) = (3, 3)$, tal como:

$$\tau(3, 3) = - \ln \left\{ 1 - \frac{T_a(3, 3)}{T_a(1, 1)} \left(1 - e^{-\tau(1, 1)} \right) \right\} .$$

3.2 - TEMPERATURA DE ROTAÇÃO $T(J', K'; J, K)$

O coeficiente de absorção de uma radiação monocromática $(\nu \pm \Delta\nu)$ pode ser escrito como (Lang, 1980).

$$K_\nu = \frac{c^2 N(J, K)}{8\pi \nu^2 (J, K) \Delta\nu (J, K)} \left[e^{\frac{h\nu(J, K)}{kT}} - 1 \right] A(J, K) , \quad (3.9)$$

onde:

$N(J, K)$ = população de moléculas no estado (J, K) , cm^{-3} ,

$A(J, K)$ = coeficiente de Einstein para transições espontâneas,

$\nu(J, K)$ = frequência da transição metaestável (J, K) ,

$\Delta\nu(J, K)$ = largura de linha da transição metaestável (J, K) ,

desde que condições de equilíbrio termodinâmico sejam satisfeitas. Da relação acima, pode-se obter uma expressão para a profundidade óptica do meio, na frequência considerada; supondo-se N e T constantes,

$$\tau(J, K) = \kappa_{\nu} \cdot L ,$$

onde L é a dimensão da fonte na direção da linha de visada (Figura 3.1).

Reescrevendo-se a Equação 3.9 em função do momento de dipolo da molécula e definindo as profundidades ópticas $\tau(1, 1)$ e $\tau(2, 2)$, é possível obter uma relação para a razão das profundidades ópticas, dada por:

$$\frac{\tau(2, 2)}{\tau(1, 1)} = \frac{N'(2, 2) \nu(2, 2) |\mu(2, 2)|^2 \Delta\nu(1, 1)}{N'(1, 1) \nu(1, 1) |\mu(1, 1)|^2 \Delta\nu(2, 2)} \cdot \left[\frac{e^{\frac{h\nu(1, 1)}{kT}} - 1}{e^{\frac{h\nu(2, 2)}{kT}} - 1} \right] \quad (3.10)$$

onde:

$N'(J, K)$ é a população de moléculas no estado (J, K) por cm^2 ,

$\mu(J, K)$ é o momento de dipolo do estado (J, K) .

De acordo como Ho et alii (1979), pode-se considerar que as larguras de linha e as temperaturas de excitação sejam iguais para as transições $(1, 1)$, $(2, 2)$ e que a distribuição de amônia nos estados rotacionais (J, K) sejam bem correlacionadas espacialmente nas nuvens

moleculares. Baseando-se nessas aproximações, a Equação (3.10) é simplificada assumindo a seguinte forma:

$$\frac{\tau(2, 2)}{\tau(1, 1)} = \frac{N'(2, 2) v^2(2, 2) |\mu(2, 2)|^2}{N'(1, 1) v^2(1, 1) |\mu(1, 1)|^2} \quad (3.11)$$

As aproximações realizadas para obter a Equação 3.11 são lineares e basearam-se essencialmente no fato de que $h\nu k^{-1} \ll T_{ex}$. Os erros resultantes dessas aproximações possuem ordem de grandeza inferior aos menores erros aleatórios envolvidos nas observações. $N'(J, K)$ é a densidade colunar de moléculas de amônia no estado (J, K) e $|\mu(J, K)|^2$ são os elementos da matriz de dipolo.

Tomando-se como base as considerações de Ho et alii (1979), pode-se supor que a razão das densidades colunares das moléculas é independente do estado vibracional.

A partir das Equações 3.11 e 3.8 e da equação de Boltzmann para a população dos níveis $(1, 1)$ e $(2, 2)$, obtêm-se:

$$T(2,2; 1,1) = \frac{41,5}{1,2 - \ln \left\{ \frac{-\ln \left[1 - \frac{T_a(2, 2)}{T_a(1, 1)} \left(1 - e^{-\tau(1, 1)} \right) \right]}{\tau(1, 1)} \right\}}$$

Através desta equação, determinou-se a temperatura de rotação a partir dos estados $(J, K) = (1, 1)$ e $(2, 2)$. De maneira análoga, derivou-se uma equação para obter a temperatura de rotação a partir dos estados $(J, K) = (1, 1)$ e $(3, 3)$.

3.3 - TEMPERATURA DE EXCITAÇÃO E "FILLING FACTOR"

Ao observar uma determinada nuvem molecular na esfera ce leste, a temperatura medida na direção desta fonte envolve, numa situa_{ção} geral, temperaturas decorrentes da existência de fontes discretas posteriores à região observada. Desprezando os efeitos das fontes discretas (Rydbeck et alii, 1977; Wilson et alii, 1979; Ho et alii, 1979) pode-se estabelecer uma relação funcional entre estas temperaturas:

$$\Delta T_a(J, K) = \eta_a [T_{ex} - T_{BC}] (1 - e^{-\tau(J, K)}),$$

onde:

η_a = eficiência de antena,

T_{BC} = temperatura de "background",

$\Delta T_a(J, K)$ = temperatura de raia corrigida da temperatura de contínuo da fonte.

$\tau(J, K)$ = profundidade óptica na frequência de transição (J, K),

T_{ex} = temperatura de excitação do estado (J, K).

Dessa forma a temperatura de excitação será dada pela relação:

$$T_{ex} = \frac{\Delta T_a(1, 1)}{\eta_a [1 - e^{-\tau(1,1)}]} + T_{BC} \quad (3.12)$$

De posse deste resultado, pode-se determinar o fator de preenchimento de feixe ("filling factor", f), que é dado pela equação:

$$f = \frac{T_{ex} - T_{BC}}{T_{(2,2; 1,1)} - T_{BC}} \quad (3.13)$$

de acordo com Schwartz et alii (1977). Este fator informa o quanto o feixe de antena é ocupado pela nuvem molecular observada.

3.4 - DENSIDADE COLUNAR

Da Equação 3.9 pode-se escrever o seguinte coeficiente de absorção para uma raia espectral:

$$\kappa = \frac{c^2 N(J, K) g(J', K') A_{J',K'; J,K}}{8\pi \nu^2(J,K) g(J,K) \epsilon_v^2} \left[1 - \frac{g(J, K) N(J', K')}{g(J', K') N(J, K)} \right] \Delta V(J, K),$$

onde:

$\Delta V(J, K)$ é a largura de linha,

$N(J, K)$ é a densidade de moléculas no estado (J, K) , cm^{-3} ,

$A_{J',K'; J,K}$ é o coeficiente de Einstein de emissão espontânea entre os níveis (J', K') e (J, K) ,

ϵ_v é o índice de refração do meio,

$g(J, K)$ é o peso estatístico do estado (J, K) .

Considerando o índice de refração do meio aproximadamente igual a 1 e a região de observação em equilíbrio termodinâmico, pode-se concluir que a densidade colunar de moléculas de NH_3 no estado $(1, 1)$ será:

$$N'(1, 1) = \frac{8\pi^{3/2} \nu_0 k T_{\text{ex}} \Delta V(1, 1) \tau(1, 1)}{2 [\ln 2]^{1/2} c^2 h A(1, 1)},$$

onde:

$\Delta V(1, 1)$

é a largura da linha observada.

Na obtenção desta equação, considerou-se a aproximação de Rayleigh é que o principal responsável pelo alargamento da linha espectral no meio interestelar é o efeito Doppler (Dyson and Williams, 1980). Finalmente, a densidade colunar da molécula de amônia no estado (1, 1) será obtida pela equação:

$$N'(1, 1) = 1,6 \times 10^{13} \sum_i \tau_{\text{ex}} \tau_i(1, 1) \Delta V_i(1, 1), \quad (3.14)$$

onde ΔV deve ser expresso em km s^{-1} .

Na obtenção desta equação consideraram-se os níveis vibracionais igualmente populados. A somatória na Equação (3.14) deve ser efetuada sobre a estrutura hiperfina.

3.5 - TEMPO DE VIDA DA AMÔNIA

Uma vez formada, a molécula de amônia estará sujeita à destruição por fótons ultravioleta. A seção de choque para fotodissociação de NH_3 é $3,7 \times 10^{-18} \text{ cm}^2/\text{fóton U.V.}$ (Dyson and Williams, 1980). Considerando o fluxo médio de fótons em $\lambda \sim 2000 \text{ \AA}$ como $10^8 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ (Cheung et alii, 1969), obtém-se:

$$\tau = \frac{1}{n(\text{H}_2) u \sigma} = \frac{1}{3,7} \cdot 10^{10} \text{ s},$$

onde:

$n(\text{H}_2)$ é a densidade de partículas do meio,

u é a velocidade relativa das partículas,

τ é o tempo de vida da molécula no meio interestelar,

σ é a seção de choque da molécula.

Considerando-se este resultado, a molécula de amônia teria pouca duração se não existisse um meio mais denso que funcionasse como "escudo", evitando que os fótons ultravioleta viessem a destruir essa molécula. Por esta razão, um tempo de vida bem superior a 84 anos deve ser característico da amônia em nuvens moleculares densas, considerando-se que este processo é o mais eficiente destruidor de NH_3 .

Nas observações realizadas, verificou-se que as transições metaestáveis apresentam intensidades de raia menor para as transições com maiores valores de J. A despeito do verificado, esta tendência não é regra geral, especialmente porque pesquisas dessa molécula em outras regiões da esfera celeste mostraram temperatura de linha em (3, 3) superiores a (1, 1) e (2, 2). Esse comportamento verificado para as temperaturas das raias metaestáveis pode estar associado com algumas causas que se mencionará posteriormente.

Considerando-se que a interação entre as partículas do meio interestelar seja nula e que exista apenas a radiação cósmica de fundo (2,8 K) preenchendo todo o espaço, as transições metaestáveis devem estar em equilíbrio com o meio de temperatura 2,8 K. Todavia, sob tais condições essas raias não seriam detectadas em emissão, tendo em vista que os valores de temperaturas das regiões observadas são superiores àquele da radiação cósmica. Dessa forma, necessário se faz questionar a existência de outros possíveis mecanismos de excitação responsáveis pelos valores de temperatura das observações.

CAPÍTULO 4

RADIÔMETRO E ATMOSFERA

4.1 - EQUIPAMENTO E TÉCNICA DE OBSERVAÇÃO

As observações foram realizadas com o radiotelescópio de 13,7 m de Itapetinga, Atibaia. O radiômetro foi equipado com um pré-amplificador "maser" na banda K, construído pelo Haystack Observatory¹, que forneceu temperaturas de sistema da ordem de 250 K. Na seção de "back-end" utilizou-se um multicanal composto de 47 canais espectrais com resolução de 100 KHz ($1,3 \text{ km s}^{-1}$).

Como o receptor convencional (Kaufmann et alii, 1974) foi projetado para operar na faixa de 21 a 23 GHz, foram necessárias modificações de unidades do "front-end" para poder operar na faixa de frequências das transições metaestáveis (23,6 - 24 GHz). As modificações foram as seguintes:

- a) Troca de oscilador "klystron" de bombeamento do "maser" por um outro, operando em frequências mais baixas.
- b) Troca de chave de "ferrite" para microondas por uma outra chave da banda de frequência mais larga.
- c) Troca do sistema de oscilador local (frequência máxima 23,5 GHz) do conversor de frequência por uma válvula "klystron", operando na faixa de 11 a 12 GHz, com dobrador de frequência. Desta forma obteve-se sinal na faixa de 22 a 24 GHz.

O comportamento do radiômetro foi verificado a partir das observações de algumas fontes de emissão "maser" de vapor d'água, tais como Orion A e W49. A temperatura do novo sistema foi ligeiramente superior àquelas obtidas com o radiômetro convencional.

¹ Operado pelo Five College Radio Observatory - FCRO.

A eficiência do radiotelescópio foi admitida como a mesma obtida por Kaufmann et alii (1978).

Na região de frequências situada entre 23 e 24 GHz, a antena utilizada possui um feixe aproximadamente circular com resolução angular de 3,7 minutos de arco, e a redoma fechada que envolve o concentrador parabólico possui transparência da ordem de 77%. As precisões de apontamento e rastreo são da ordem de 5 segundos de arco (Kaufmann et alii, 1978), tanto em elevação quanto em azimute.

Os espectros foram calibrados com relação a um tubo de ruído, cujo instabilidade é inferior a 1%.

Correções na temperatura de antena foram efetuadas em decorrência de efeitos de desfocalização e diferença de ganho entre as cornetas. Estas correções foram:

- 1) Efeito de desfocalização (as cornetas encontram-se a aproximadamente 10' de arco do eixo da antena): 2% (Baars, 1970).
- 2) O ganho das cornetas diferem de aproximadamente 10%, isto foi verificado usando "load" externo como calibrador e observando uma mesma fonte com o método ON-OFF, segundo o qual a fonte é observada com uma corneta e depois com a outra (Abraham, 1981).

No caso das observações realizadas utilizou-se o método ON-ON de observação (a fonte foi observada 1 minuto com uma corneta e o minuto seguinte com a outra, e assim por diante), e apenas uma corneta foi calibrada com o tubo de ruído. Por esta razão, os valores da temperatura obtidos foram incrementados em 7% (5% de diferença de ganho mais 2% de desfocalização).

Durante o período das observações de NH_3 , verificou-se a ocorrência de rastreo irregular da antena, devido a problemas no decodificador angular (Schaal, 1981). Com base no comportamento verificado

para a antena durante este período, concluiu-se que os dados deveriam ser corrigidos de um fator 1,14.

Com a utilização do amplificador "maser", efetuou-se a rejeição de imagem de conversão.

As observações foram realizadas sob boas condições climáticas, de forma que a atenuação atmosférica foi suposta 0,23.

4.2 - COMPORTAMENTO ATMOSFÉRICO

Na região de 23,7 GHz, o gás carbônico, o ozônio e o vapor d'água são os principais responsáveis pela absorção de radiação infravermelha emitida pela terra, vindo este processo a ser importante mecanismo de aquecimento atmosférico, implicando um alargamento pronunciado das linhas espectrais. Na vizinhança da região da frequência observada, existe uma forte absorção devida ao vapor d'água, cujo máximo coincide com a frequência de 22,2 GHz. Esta absorção produz uma opacidade zenital da ordem de 10^{-1} dB km⁻¹ na região correspondente ao seu máximo. Devido ao comportamento térmico, essa raia atmosférica aparece extremamente alargada, de modo a atingir a faixa de frequências pesquisadas, produzindo uma atenuação de aproximadamente 0,4 dB km⁻¹ (Waters, 1976). A água juntamente com outras substâncias (O₂; O₃) apresentam absorções muito fortes em outras regiões do espectro de microondas, não afetando, entretanto, a faixa de pesquisa. Muitas outras moléculas apresentam também absorção nessa região, todavia seus efeitos são inteiramente desprezíveis (Waters, 1976). Realizando um estudo mais específico da molécula de amônia, concluiu-se que ela apresenta cerca de 46 linhas espectrais na região situada entre 16 GHz e 40 GHz (Townes and Schamlow, 1975). Levando-se em consideração 10 linhas localizadas na vizinhança das frequências de observação e mais as transições (J, K) = (1, 1) (2, 2) e (3, 3), obteve-se a atenuação total da ordem de 10^{-5} dB km⁻¹. Este valor é desprezível se comparado ao valor da absorção decorrente do vapor d'água. Mesmo sob condições de chuvas moderadas, verificou-se que as atenuações nas frequências dos estados metaestáveis de NH₃ eram bem inferiores às verificadas em 22,2 GHz.

CAPÍTULO 5

RESULTADOS E DISCUSSÕES

As observações compreenderam dois períodos distintos: o primeiro foi de 12 a 17 de novembro de 1980 e o segundo de 14 a 28 de julho de 1981. O resultado do primeiro período de observações foi discutido por Scalise et alii (1981), onde apenas o primeiro nível metaestável $(J, K) = (1, 1)$ foi pesquisado. No segundo período, as fontes descobertas foram novamente observadas em $(J, K) = (1, 1)$ e procurou-se detectar sua emissão nos níveis $(2, 2)$ e $(3, 3)$. Consideraram-se em seguida todas as observações e selecionaram-se as fontes obtidas sob as melhores condições de receptor e climáticas.

Na Tabela 5.1 encontram-se os resultados observacionais obtidos na direção das fontes NGC 6334, G208.9-19.4, G208.8-19.2 e G328.2-0.5. Nas colunas um, dois, e três, contadas da esquerda para a direita, estão relacionadas, respectivamente os nomes e as coordenadas equatoriais das fontes para o ano de 1950. Na coluna quatro encontram-se as transições metaestáveis observadas; nas colunas cinco e seis, a temperatura de antena das transições metaestáveis $(J = K, K)$ e as temperaturas de antena determinadas a partir da média das temperaturas das transições hiperfinas laterais.

Os valores de temperatura estão corrigidos dos efeitos de opacidade atmosférica, transparência de redoma, desfocalização, diferença de ganho das cornetas e erro de apontamento.

TABELA 5.1

RESULTADOS OBSERVACIONAIS

F O N T E	α (h;m;s) 1950	δ (°;';"') 1950	(JK)	T ($\Delta F=0$) K	T ($\Delta F=1$) K	V Kms ⁻¹	ΔV Kms ⁻¹
N G C 6 3 3 4	17 17 32,0	-35 42 00,0	(11)	1,85 ± 0,17	0,84 ± 0,11	-3,2 ± 1,3	3,6
—	—	—	(22)	1,06 ± 0,14	0	-3,4 ± 1,3	4,8
—	—	—	(33)	0,70 ± 0,06	0	-3,6 ± 1,3	5,5
G 208.9 - 19.4	05 32 48,0	-05 24 21,0	(11)	0,60 ± 0,06	0,24 ± 0,09	8,5 ± 1,3	4,9
—	—	—	(22)	0,41 ± 0,06	0	8,5 ± 1,3	5,5
—	—	—	(33)	0,36 ± 0,09	0	8,5 ± 1,3	5,9
G 208.8 - 19.2	05 33 00,0	-05 12 34,0	(11)	0,60 ± 0,06	0,24 ± 0,06	10,4 ± 1,3	2,6
—	—	—	(22)	0,19 ± 0,05	0	9,0 ± 1,3	2,5
G 328.2 - 0.50	15 54 12,0	-53 52 42,0	(11)	0,43 ± 0,05	0,17 ± 0,04	-43,8 ± 1,3	2,7
—	—	—	(22)	0,28 ± 0,05	0	-42,5 ± 1,3	2,3

Em consequência das limitações de memória do sistema de aquisição de dados, os erros aleatórios associados com estes valores de temperatura foram determinados a partir do conjunto de observações de cada fonte, nas respectivas frequências. Consequentemente, o número de dados para estudo das barras de erro foi pequeno, a ponto de não se considerar confiável tratar a distribuição dos erros como normal. Dessa forma, os erros não correspondem ao desvio padrão das medidas e foram determinados pela relação:

$$T_a = \bar{T}_a \pm t_{1-\alpha}(f') \frac{S(T_a)}{\sqrt{n}} \quad (5.1)$$

onde:

T_{ai} - temperaturas de antena medidas,

n = número de observações,

$$\bar{T}_a = \frac{1}{n} \sum T_{ai}, \quad K,$$

$$S(T_a) = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum (T_{ai} - \bar{T}_a)^2}$$

f' = número de graus de liberdade,

α = probabilidade de que \bar{T}_a se encontre dentro do intervalo de confiança, definido como 0,50,

$t_{1-\alpha}(f')$ = número determinado a partir do conhecimento dos graus de liberdade, do intervalo de confiança e de distribuição dos erros; neste caso a distribuição de Student.

De acordo com Spiridinov e Lopatkin (1973), esta relação fornece erros mais confiáveis quando o espaço amostral formado pelo conjunto de medidas é pequeno.

Em média, foram realizados 150 minutos de integração por frequência de inversão rotacional ($J = K, K$), na direção de cada uma das fontes. Isto perfaz um total de 5 observações por fonte e por frequência, a partir do que foram determinados os erros das temperaturas. No caso das fontes NGC6334 e G208.9-19.4, que apresentam um contínuo bem definido, decontou-se de suas medidas a flutuação de temperatura do contínuo, que foi determinada a partir de regressões lineares realizadas sobre o conjunto de temperaturas fornecida pelo multicanal, excluindo-se previamente os valores correspondentes às temperaturas da raia.

As colunas 7 e 8 fornecem, respectivamente, as velocidades radiais das raias em relação ao sistema de referência local e suas respectivas larguras a meia intensidade. As incertezas nos valores de velocidade correspondem ao poder de resolução do multicanal. Os parâmetros que constam da Tabela 5.1 foram extraídos das observações a partir de um ajuste de gaussiana às raias espectrais, utilizando-se o método dos mínimos quadrados (Apêndice A).

Nas Figuras 5.1, 5.2, 5.3 e 5.4 estão plotados os valores de temperaturas de antena observados contra a velocidade relativa ao sistema de referência local. Cada gráfico mostra os resultados obtidos para as transições metaestáveis observadas, bem como são fornecidas as resoluções espectrais (lado superior direito). Sob os espectros de cada transição metaestável (J, K) = (1, 1) estão desenhadas as posições teóricas da raia central e das estruturas hiperfinas. As barras que definem essas transições foram traçadas de modo que suas dimensões satisfazem a condição de equilíbrio termodinâmico. Não se procedeu da mesma forma para as transições (J, K) = (2, 2) e (3, 3), porque a razão de intensidade entre a raia central de cada transição e a respectiva hiperfina é da ordem de 20. Dessa forma, a transição hiperfina é apenas 5% da intensidade da transição principal, o que não é possível detectar com a razão sinal/ruído do equipamento utilizado. Este fato deve-se à rápida diminuição da intensidade do sinal, a medida que J cresce.

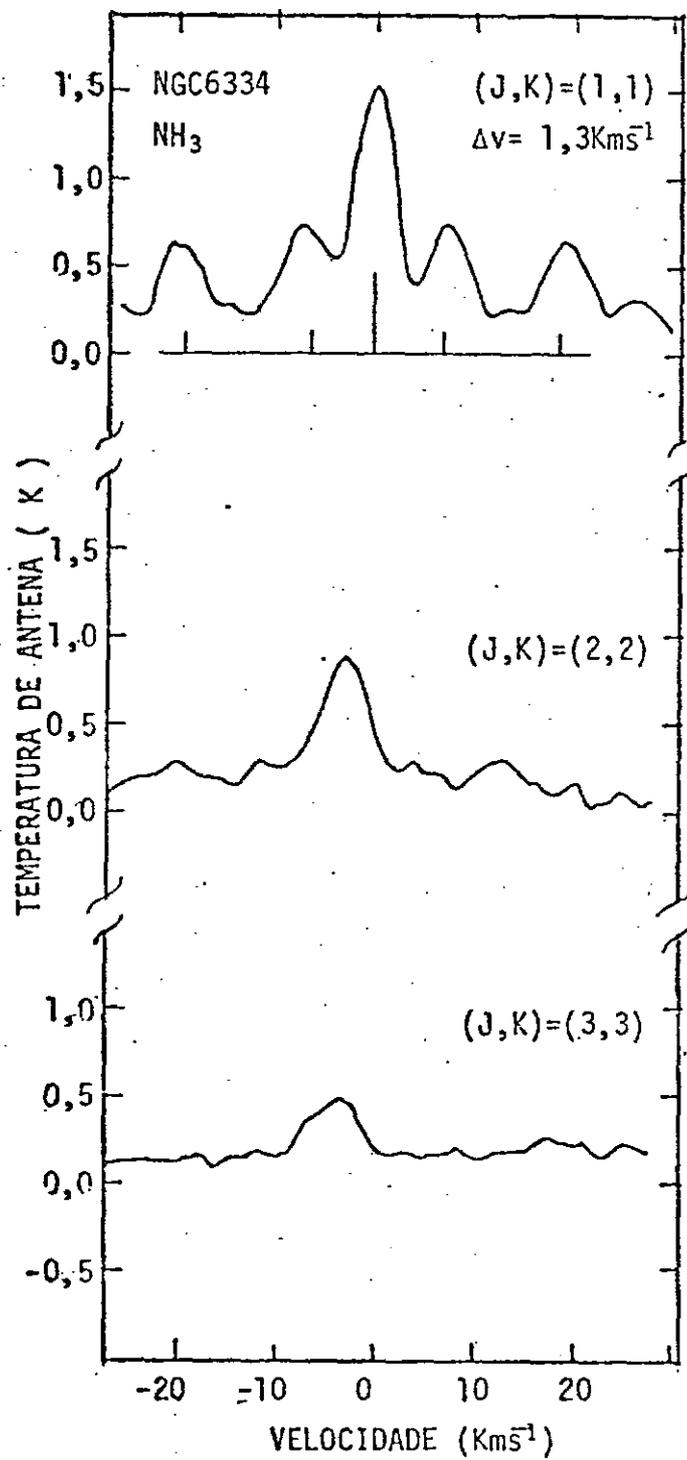


Fig. 5.1 - Espectro observacional de NGC 6334.

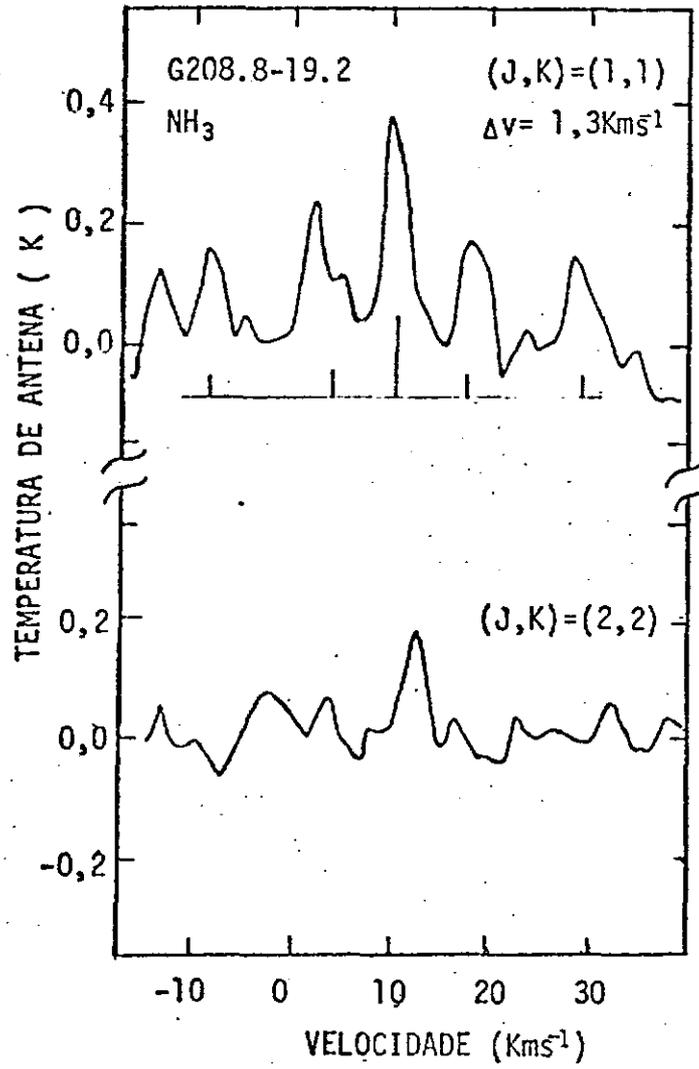


Fig. 5.2 - Espectro observacional de G 208.8-19.2.

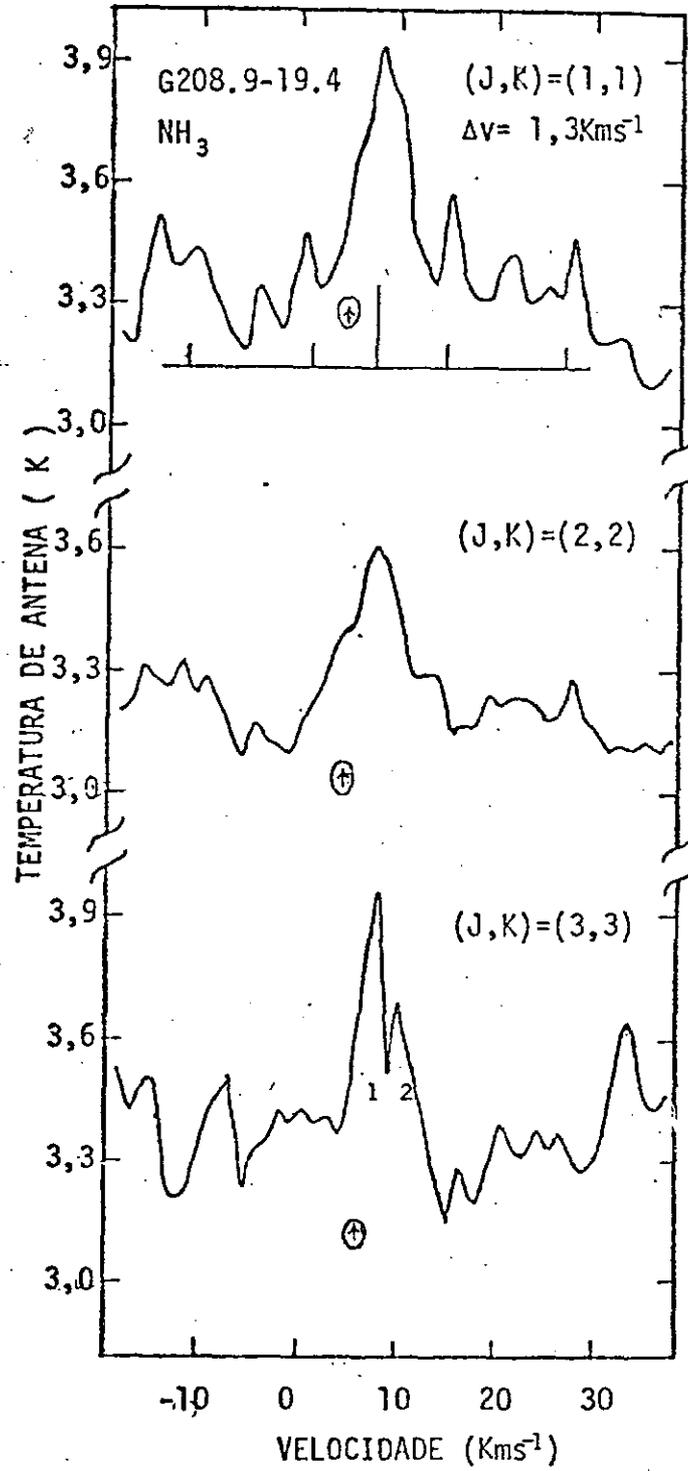


Fig. 5.3 - Espectro observacional de G 208.9-19.4

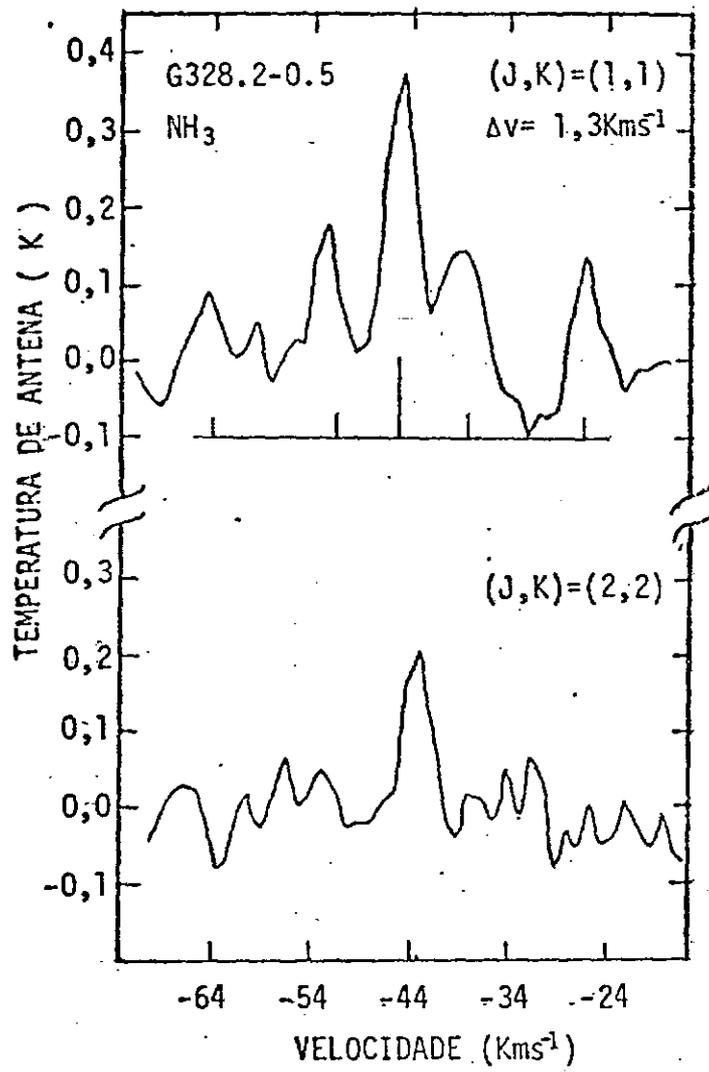


Fig. 5.4 - Espectro observacional de G 328.2-0.5.

As larguras das raias não foram corrigidas dos efeitos devidos ao poder de resolução do multicanal, e as barras de erro definidas pela Equação 5.1 possuem intervalo de confiança maior do que aqueles obtidos pelo desvio padrão.

5.1 - FONTES INDIVIDUAIS

5.1.1 - NGC 6334

Esta é uma nuvem molecular aproximadamente elíptica, alongada na direção NE-SO e aproximadamente paralela ao plano galáctico ($b = 0,65$), e apresenta-se como uma complexa região de formação de estrelas.

Mapas de emissão contínua em rádio, dessa região, foram realizados por Shaver e Goss (1970a), e estudos utilizando dados de UBV e H_{β} de estrelas da região foram realizados por Neckel (1978). As primeiras observações de amônia na direção desta fonte foram realizadas por Schwartz et alii (1977), que detectaram as transições $(J, K) = (1,1)$, $(2, 2)$ e $(3, 3)$. Um estudo sistemático desta região foi realizado através da transição $J:1-0$ do CO por Dickel et alii (1977). Neste estudo, concluiu-se que se pode definir 4 centros principais de excitação que se distribuem próximos ao eixo maior da nuvem (Figura 5.5). Estes pontos apresentam características distintas. Por exemplo:

- a) forte pico de infravermelho distante e absorções de $10 \mu\text{m}$ provenientes de silicatos;
- b) pico de infravermelho distante;
- c) pico de infravermelho distante e uma região HII compacta;
- d) "maser" de OH situado ao sul ($17^{\text{h}} 16^{\text{m}} 36^{\text{s}}$ e $35^{\circ} 55'$).

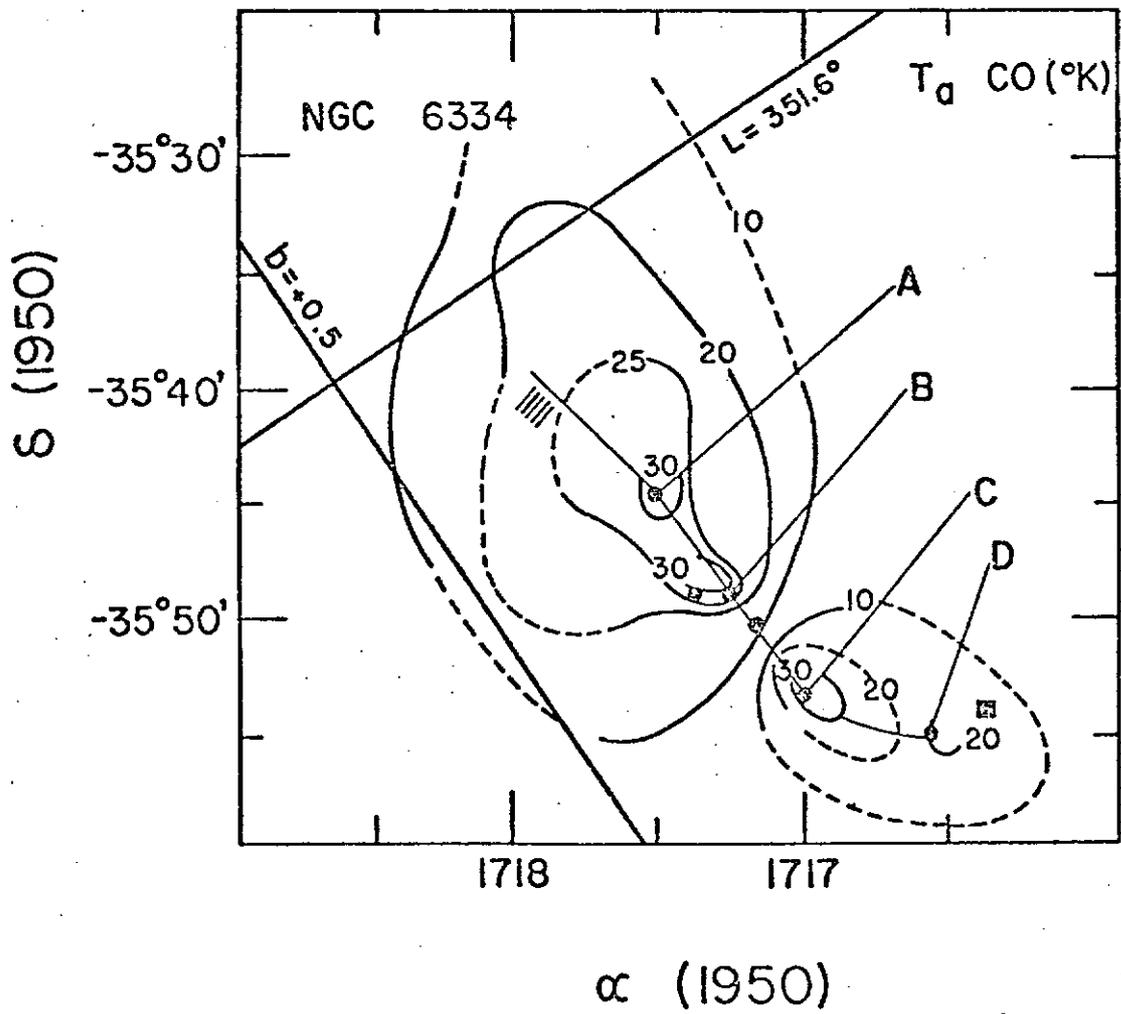


Fig. 5.5 - Distribuição de CO em NGC 6334.
FONTE: Dickel et alii (1977), p. 59.

A região de máxima absorção de H_2CO , hachurada na Figura 5.5, encontra-se afastada do pico de emissão NH_3 apenas alguns minutos de tempo em ascensão reta e alguns minutos de arco em declinação. A proximidade dessa região ao máximo de NH_3 evidencia a forte correlação entre a raia de absorção de H_2CO e a raia de emissão $(J, K) = (1, 1)$ de NH_3 . Esta correlação foi verificada no "survey" de amônia realizado no Hemisfério Sul por Scalise et alii (1981b).

As velocidades mais negativas do CO ocorrem na direção das fontes A e D e as mais positivas em B. Verificou-se que a largura das raiais observadas apresentava-se mais pronunciada na direção de A, diminuindo gradativamente quando se afastava da região. Levando-se em consideração a velocidade de diversos componentes, Dickel et alii (1977) sugeriram uma velocidade média de -3 km^{-1} para a nuvem como um todo.

Observando-se a Figura 5.1 vê-se que há um deslocamento na velocidade radial das raiais $(J, K) = (1, 1)$, $(2, 2)$ e $(3, 3)$. A transição metaestável $(J, K) = (3, 3)$ encontra-se deslocada para as velocidades mais negativas, enquanto $(1, 1)$, para velocidades mais positivas.

Observando-se que as energias de excitação dos estados metaestáveis crescem com o aumento de J, verifica-se que os processos físicos responsáveis pela população do estado $(J, K) = (3, 3)$ devem estar associados com regiões de mais alta temperatura. Desta forma, o deslocamento das raiais para velocidades menores pode refletir a concentração dos estados de energias mais altas em regiões com maiores temperaturas cinéticas.

Como comentado anteriormente, um comportamento perfeitamente análogo foi verificado nas observações de CO. A sugestão de uma região de maior energia cinética associada com a distribuição de $(J, K) = (3, 3)$ também está vinculada ao alargamento das raiais espectrais, que é mais pronunciado em $(3, 3)$ que em $(1, 1)$ e $(2, 2)$. Efeito análogo foi observado em CO. Esta estrutura de velocidade é similar aos resultados obtidos por Schwartz et alii (1978), que mapearam a região utilizando as raiais metaestáveis de amônia.

As transações de NH_3 observadas nessa nuvem molecular apresentaram suas raias principais simétricas, com exceção da transição $(J, K) = (2, 2)$ que apresentou uma ligeira assimetria $(0, 2)$. Esse efeito é pouco importante, tendo-se em vista os resultados obtidos para as outras raias espectrais e a resolução do multicanal.

Na Tabela 5.2 são fornecidos os valores das velocidades radiais para diferentes moléculas observadas na região.

A partir dos resultados observacionais mostrados na Figura 5.1, concluiu-se que a velocidade da transição $(J, K) = (1, 1)$ é compatível com a média das velocidades das estruturas componentes de NGC 6334. Todavia, com a presente resolução espectral não se pode assegurar tal correlação, visto que a incerteza em velocidade cobre quase que totalmente a variação deste parâmetro sobre a região observada ($\Delta V = 2 \text{ km s}^{-1}$) (Schwartz et alii, 1978). Desta forma, faz-se necessário uma melhor resolução espectral para estabelecer com maior precisão os valores das velocidades radiais.

Os resultados obtidos para a profundidade óptica $\tau(J, K)$, temperatura de rotação $T(J', K': J, K)$, temperatura de excitação (T_{ex}), densidade colunar e "filling factor" são apresentados na Tabela 5.3. Nas colunas 8 e 9 aparecem, respectivamente, a densidade colunar $N(1, 1)$ de NH_3 e a densidade de hidrogênio molecular, uma vez que nas nuvens escuras densas esta substância é mais abundante que as outras espécies químicas (Herbst and Klemperer, 1973). As estimativas da densidade de H_2 para o meio foram obtidas através da equação:

$$n(\text{H}_2) \geq 5,7 \times 10^3 \sqrt{T_K} \text{ cm}^{-3},$$

onde:

T_K é a temperatura cinética do meio,

obtida por Morris et alii (1973). Os valores de T_K foram utilizados como iguais a $T(2, 2:1, 1)$. Uma vez que a temperatura de rotação estimada

para NGC 6334 foi 18 K, incorre-se em erros da ordem de 20% em temperatura quando se considera $T(2, 2:1, 1)$ igual a T_K (Cheung et alii, 1968; Morris et alii, 1973). Dessa forma, obteve-se $3,4 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ para a densidade de H_2 na região observada. Os resultados observacionais obtidos para essa região HII sugere um "filling factor" da ordem de 0,03. Considerando este "filling factor" e a distância da fonte como $1,7 \pm 0,31$ Kpc do sistema solar, obtiveram-se os parâmetros fornecidos na Tabela 5.4.

TABELA 5.2

VELOCIDADES RADIAIS DE OUTRAS RAIAS MOLECULARES

FONTE	V (CO) Kms ⁻¹	V (CS) Kms ⁻¹	V (H109) Kms ⁻¹	V (H ₂ CO) Kms ⁻¹	V (OH) Kms ⁻¹
NGC 6334	-3,0	-5,6	—	- (4 - 6)	-3,2
G 208.9 -19.4	+9,0	+9,7	—	+6,0	+6,0
G 208.8 -19.2	—	+11,6	—	—	—
G 328.2 - 0.5	—	-46,5	-42,9	-70,6	-41,2

TABELA 5.3

PARÂMETROS FÍSICOS OBTIDOS DOS ESPECTROS OBSERVACIONAIS

F O N T E	$\tau(11)$	$\tau(22)$	$\tau(33)$	T (22:11) K	T(33:11) K	Tex K	N(11) cm ⁻²	N(H ₂) cm ⁻³	f
NGC 6334	1,6 ± 0,45	0,50	0,40	18 ± 3,0	30	7,76	3,5 × 10 ¹⁵	3,7 × 10 ⁴	0,31
G 203.9 -19.4	1,13 ± 0,40	0,62	0,52	23 ± 6,8	38	4,65	5,8 × 10 ¹⁵	2,7 × 10 ⁴	0,09
G 203.3 -19.2	1,03 ± 0,66	0,28	0	17 ± 7,0	0	4,20	1,6 × 10 ¹⁵	2,4 × 10 ⁴	0,13
G 323.2 -0,50	1,12 ± 0,47	0,30	—	17 ± 9,0	—	4,62	2,0 × 10 ¹⁵	2,0 × 10 ⁴	0,08

TABELA 5.4

MASSA E EXTENSÃO DAS REGIÕES OBSERVADAS

FONTE	MASSA (M_{\odot})	EXTENSÃO (pc)
NGC 6334	70	1,2
G 208.8-19.2	0,1	0,07
G 208.9-19.4	0,08	0,05
G 328.2-0.5	2,8	0,25

5.1.2 - G 208.8-19.2 (OMC 2) E G 208.9-19.4 (OMC1)

As duas fontes fazem parte uma nuvem molecular complexa localizada na nebulosa do Órion. As primeiras pesquisas na direção dessa região tiveram início com as observações de Becklin e Neugebauer (1967) na faixa de frequência compreendida entre 2 e 2,4 micra e com as observações de Kleinmann e Low (1967). A partir de então, alguns modelos foram propostos para explicar a natureza de um objeto pontual (BN) detectado na região (Low et alii, 1970; Neugebauer et alii, 1971); até o presente momento tem-se elaborado modelos para explicar as absorções no infravermelho, observadas na direção de BN e da nebulosidade K-L detectada por Kleinmann e Low (1967). Dentre estes modelos, aquele de características mais singulares é o de Wrickramashinghe e Hoyle (1977), onde sugeriram polímetros de vários tipos para explicar as características espectrais que ocorrem em 2,5 e 16 micra.

A partir de 1974 intensificaram-se as pesquisas das emissões em microondas provenientes dessas regiões. Como resultado, pode-se citar as observações CO (Gatley et alii, 1974; Plambeck and Williams, 1979), HCN (Morris et alii, 1974); H₂CO (Kutner et alii, 1976), HCO⁺, HNC (Wooten et alii, 1978), CO⁺ (Erickson et alii, 1981), HC₃N e HCNO (Goldsmith et alii, 1981). Nesta região também foram realizadas observações em raios X com alta resolução (Ku et alii, 1982). As primeiras observações de amônia foram realizadas por Morris et alii (1973) e, posteriormente, por Schwartz et alii (1967) e muitos outros pesquisadores.

As observações de NH₃, realizadas no Radio Observatório do Itapetinga, foram na direção de um único ponto de G 208.8-19.2 e G 208.9-19.4 e cada um deles coincidiu exatamente com as coordenadas equatoriais da fonte. Uma vez que a resolução angular do radiotelescópio é 3,7 minutos de arco, concluiu-se que, para a antena rastrear OMC1, diversas estruturas estarão contidas no feixe. Este é o caso, por exemplo, da nebulosa K-L e do objeto BN. Em OMC2, as possíveis estruturas contidas no feixe correspondem a duas regiões de emissão de raios X moles (2 keV) observadas por Ku et alii (1982). O centro do feixe da antena,

nessa nuvem molecular, é correlacionado com uma região de emissão de vapor d'água e com a mais forte de suas fontes de raios X. As observações realizadas no Itapetinga compreenderam apenas as transições metaestáveis $(J,K) = (1,1)$ e $(2,2)$, não tendo sido pesquisada a transição $(J,K) = (3,3)$ em virtude das baixas temperaturas de antena observadas nas duas primeiras transições.

Na Figura 5.2 encontra-se o resultado observacional obtido para OMC2. As velocidades das transições metaestáveis são muito próximas e a diferença entre elas é da ordem da resolução do multicanal. Na Tabela 5.5 encontram-se alguns resultados obtidos por outros pesquisadores e aqueles do Itapetinga.

As larguras de linha estimadas para as transições metaestáveis $(J, K) = (1,1)$ e $(2,2)$ foram respectivamente, 2,6 e 2,5 km s^{-1} , e a diferença desses valores e aqueles obtidos por outros pesquisadores (Tabela 5.5) deve-se às diferentes resoluções espectrais utilizadas.

Utilizando os valores de temperaturas correspondentes às transições metaestáveis observadas, inferiu-se que a temperatura de rotação $T(2,2:1,1)$ da nuvem é da ordem de 17 K. Este resultado é compatível com o valor médio das temperaturas sobre uma região circular de aproximadamente 3 minutos de arco, centrada nas coordenadas da fonte (Ho et alii, 1979). O valor da profundidade óptica estimado também é compatível com os resultados de Little et alii (1980) e Ho et alii (1979) (Tabela 5.5).

Densidades de hidrogênio molecular da ordem de $3 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ foram estimadas para OMC2 a partir das observações de H_2CO , realizadas por Kutner et alii (1976). Posteriormente, novas observações das transições de H_2CO em 2 mm e 3 cm foram realizadas por Wooten et alii (1978), Lucas et alii (1978) e Lorem et alii (1979), e os resultados que eles obtiveram para a densidade foram da ordem de $1,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$ para a nuvem molecular. Devido às baixas energia de excitação de alguns estados rotacionais de ^{13}CO , Plambeck e Williams (1979) estimaram densidades de H_2 da ordem de $6,6 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ para OMC2.

TABELA 5.5

TABELA COMPARATIVA DE PARÂMETROS FÍSICOS DAS REGIÕES

FONTES	PARÂMETROS	Little et alii (1980)	Ho et alii (1979)	ITAPETINGA	Schwartz et alii (1977)
NGC 6334	$\tau(1,1)$	—	—	1,6	1,7
	$\tau(2,2)$	—	—	0,5	0,4
G 208.8-19.2	$\tau(1,1)$	0,8	1,0	1,03	—
	$V(1,1)$	11 km s^{-1}	11 km s^{-1}	10 km s^{-1}	—
	$V(2,2)$	11 km s^{-1}	11 km s^{-1}	9 km s^{-1}	—
	$\Delta V(1,1)$	$1,4 \text{ km s}^{-1}$	$1,4 \text{ km s}^{-1}$	$2,6 \text{ km s}^{-1}$	—
	$T(2,2;1,1)$	17 K	18 K	17 K	—
	$\tau(1,1)$	—	1,1	1,1	—
G 208.9-19.4	$T(2,2;1,1)$	—	26 K	23 K	—
	$T(3,3;1,1)$	—	>45 K	>38 K	—

Como resultado das observações de NH_3 que se realizaram na direção dessa nuvem molecular, estabeleceu-se que a densidade de H_2 deve ser maior ou igual a $2,4 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$. Este resultado é compatível com os valores de densidades estimados a partir das moléculas mencionadas anteriormente.

Considerando o "filling factor" determinado e supondo uma única nuvem contida no feixe da antena, obteve-se a massa e a dimensão linear da região observada (Tabela 5.4).

Na Figura 5.3, encontra-se o resultado observacional obtido para a fonte G 208.9-19.4, onde se pode observar as transições metaestáveis $(J,K) = (1,1)$, $(2,2)$ e $(3,3)$. Todas as observações foram realizadas com velocidade central igual a $8,5 \text{ km s}^{-1}$, e a escolha dessa velocidade baseou-se nas observações de Batchelor et alii (1977). Analizando a raia central da transição metaestável $(J,K) = (1,1)$, pode-se verificar que ela se apresenta extremamente alargada em relação às transições hiperfinas laterais. Este efeito ocorre como consequência da superposição de raias espectrais localizadas em velocidades radiais diferentes. Este efeito de superposição apareceu de forma não muito acentuada nas primeiras observações de NH_3 , realizadas por Morris et alii (1973), e foi confirmada definitivamente por Barret et alii (1977). De acordo com estes pesquisadores e Wilson et alii (1979), as raias centrais resultam da superposição de 3 raias principais. Dentre estas, uma apresenta-se mais proeminente, com largura de linha de aproximadamente $3,5 \text{ km s}^{-1}$ e com velocidade radial da ordem de 9 km s^{-1} . Uma segunda raia apresenta largura de linha aproximadamente igual a 5 km s^{-1} e está centrada em 3 km s^{-1} . A proximidade dessas raias, a largura de linha e resolução espectral utilizada devem ter sido as possíveis responsáveis pelo alargamento excessivo das raias principais de amônia. Este efeito não se tornou evidente nas raias hiperfinas laterais devido ao fato de que a temperatura de antena dessas raias devem ser apenas 28 centímetros da temperatura de pico da raia principal. Um terceiro componente de velocidade associado com os dois anteriores foi observado por Wilson et alii (1979), tendo determinado que sua velocidade central é 9 km s^{-1} , com largura de linha da ordem de 50 km s^{-1} . Este componente não se tornou visível nas observações realizadas, devido à largura de banda do multica

nal ser de aproximadamente 58 km s^{-1} e a temperatura de antena dessa transição ser muito baixa (aproximadamente 53% da temperatura de antena do componente de 3 km s^{-1}). Este conjunto de velocidades sobrepostas representou fator de peso no ajuste gaussiano que se realizou, vindo a ser, entretanto, o principal responsável pelo alargamento das raias centrais de $(J, K) = (1, 1)$ e $(2, 2)$. No espectro dessa fonte (Figura 5.3) destaca-se, por um traço vertical circunscrito, a posição do componente de 3 km s^{-1} . Este componente de velocidade também foi observado em outras raias metaestáveis.

Das observações realizadas na direção de OMC2, a transição metaestável $(J, K) = (3, 3)$ apresentou duas estruturas com velocidades distintas, sob as quais estão escritas os número 1 e 2. Dentre estas, a estrutura 2 foi considerada ruído.

A temperatura de rotação $T(2,2:1,1)$ e a profundidade óptica $\tau(1, 1)$ obtidas das observações são compatíveis com os resultados de Ho et alii (1979). Apenas a temperatura de rotação $T(3,3:1,1)$ apresentou maior diferença em relação aos dados destes autores, a despeito de parte dessa discrepância resultar da estrutura 2 associada com $(J, K) = (3, 3)$. Uma vez que as raias espectrais cobrem um número pequeno de canais, a inclusão ou exclusão de um deles afeta sensivelmente os parâmetros fornecidos pelo ajuste gaussiano. Assim, o valor de $T(3,3:1,1)$ mostrado na Tabela 5.3 representa o limite inferior para este parâmetro na nuvem molecular observada.

Supondo-se que haja apenas um nuvem molecular no feixe da antena e que a fonte encontra-se a 500 pc do sistema solar, estimaram-se os parâmetros fornecidos na Tabela 5.4. A estimativa da dimensão linear da fonte concorda com os resultados de Barret et alii (1977), Wilson et alii (1979) e Ho et alii (1979) e deve refletir o diâmetro da região mais fria e tênue que envolve o núcleo aquecido (modelo de Ho et alii, 1979).

5.1.3 - G 328.2-0.5

Esta fonte está muito próxima dos máximos nos contínuos de 408 MHz (Shaver and Goss, 1970a), 1700 MHz (Day et alii, 1969), e 5 GHz (Goss and Shaver, 1970; Hynes et alii, 1978). Dessas emissões em contínuo, o máximo de 5 GHz é o mais correlacionado com G 328.2-0.5.

De acordo com Whiteoak e Gardner (1974), foram detectados na direção dessa nuvem molecular a raia de recombinação H 109 α com velocidade radial -42 km s^{-1} e a emissão anômala de OH (1644 MHz) com velocidade radial $-41,2 \text{ km s}^{-1}$. Whiteoak e Gardner (1974) também detectaram a raia de absorção em 4830 MHz, proveniente do formaldeído. Esta raia foi detectada em duas velocidades e com temperatura de linha diferentes. A raia cuja temperatura é 0,08 K foi detectada com velocidade radial $-70,6 \text{ km s}^{-1}$, enquanto a raia com temperatura 0,5 k ocorreu em $-42,4 \text{ km s}^{-1}$.

Analisando o espectro da fonte fornecido na Figura 5.4 pode-se verificar a ocorrência das raias da molécula de amônia, através das transições metaestáveis (J,K) = (1,1) e (2,2). As raias centrais dessas transições apresentam velocidades radiais, respectivamente iguais a $-44,1 \text{ km s}^{-1}$ e -43 km s^{-1} e estão muito bem correlacionadas com as velocidades radiais de outras raias (Tabela 5.2). Apesar da coincidência entre as velocidades de NH₃ e H 109 α , as regiões de emissão dessas raias não são correlacionadas espacialmente, pois o pico de H 109 α encontra-se deslocado do pico de NH₃ de 17 segundos de tempo em ascensão reta e -2 minutos de arco em declinação. Por outro lado, as posições de NH₃, H₂CO e OH são muito bem correlacionadas.

Visando entender melhor as velocidades observadas, considerou-se a distribuição de hidrogênio neutro da galáxia e a distribuição de velocidades desse gás seguindo o modelo de rotação circular (Kellermann and Verschuur, 1974). Pode-se verificar na Figura 5.6 que duas nuvens de hidrogênio proeminentes estão contidas no feixe da antena e situadas a diferentes distâncias do centro galáctico. De acordo com o mo

delo de rotação circular, a primeira dessas nuvens possui velocidade entre -60 km s^{-1} e -100 km s^{-1} e a segunda, entre -20 km s^{-1} e -60 km s^{-1} . Da Figura 5.6 pode-se estimar suas distâncias cinemáticas, donde se obteve, respectivamente, 3 e 6,6 kpc do sistema solar. Nessas estimativas considerou-se que o sol está situado a 10 kpc do centro galáctico. Calculando os valores médios de velocidades para cada nuvem, nota-se que esses valores são compatíveis com aqueles determinados por Whiteoak e Gardner (1974) para as raia de absorção de H_2CO e a velocidade média da segunda nuvem (-40 km s^{-1}) é compatível com os valores das velocidades radiais inferidas das observações de OH (Robinson et alii, 1971), $\text{H}109\alpha$ (Caswell, 1972) e NH_3 (Scalise et alii, 1981a e b). Nas observações de NH_3 realizadas na direção desta fonte, pesquisou-se um intervalo de velocidade da ordem de 58 km s^{-1} centrado em -42 km s^{-1} , de forma que se houvesse emissão de amônia em -71 km s^{-1} , tão intensa quanto a observada, a estrutura hiperfina da transição $(J, K) = (1, 1)$ deveria ser detectada. Como se pode observar na Figura 5.4 não há estruturas nos espectros de NH_3 que sugerem a presença de uma transição deslocada para outras velocidades. Todavia, uma conclusão mais precisa quanto a ocorrências dessas transições em velocidades diferentes só será possível após investigações em intervalos de velocidades mais amplos.

Levando em consideração as observações da raia de 21 cm, o modelo de rotação circular e as velocidades radiais das substâncias observadas nessa nuvem, acredita-se que o componente de velocidade do H_2CO centrado em -71 km s^{-1} seja correlacionado com a primeira nuvem de hidrogênio neutro, cuja velocidade média é aproximadamente -80 km s^{-1} .

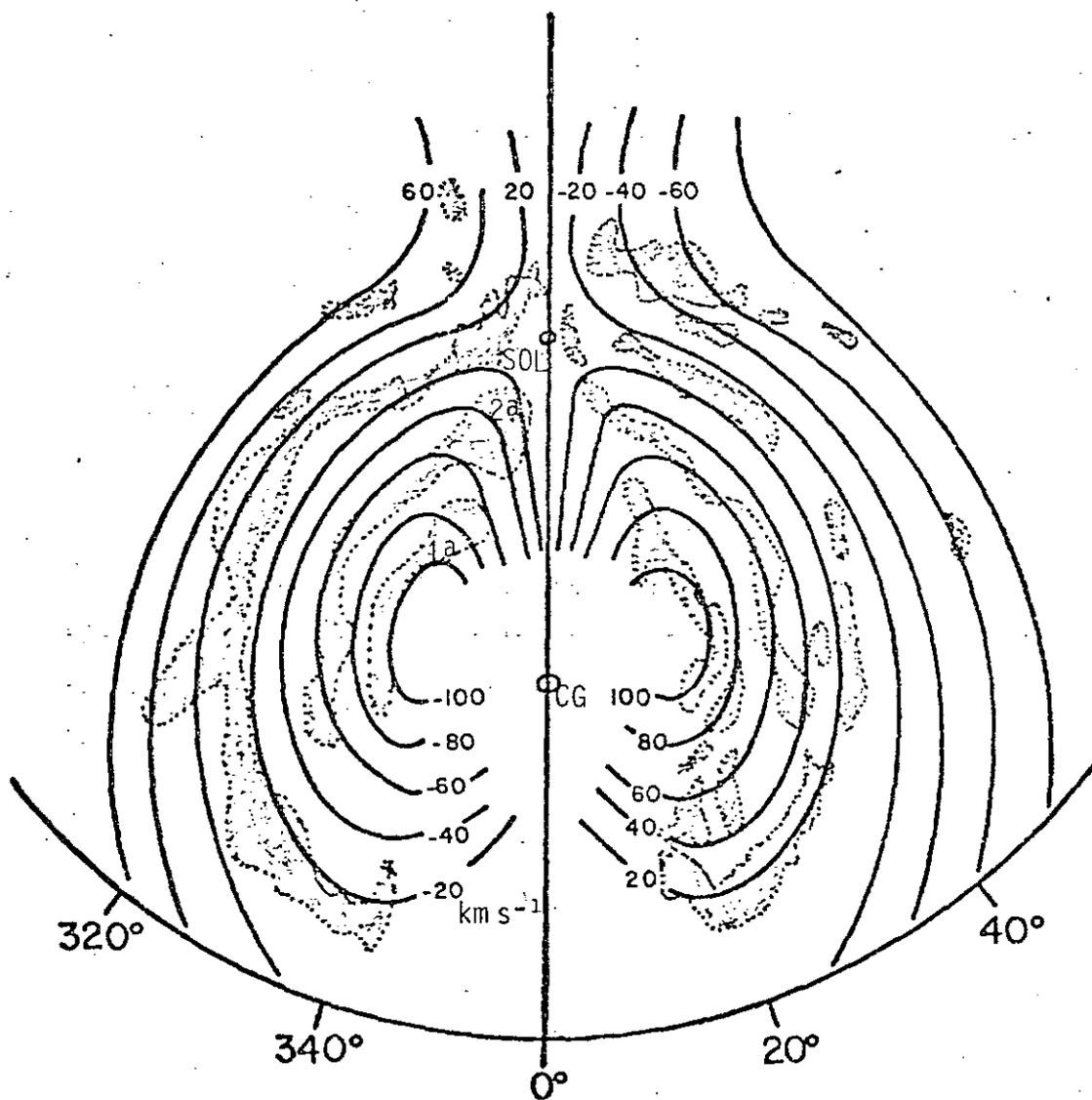


Fig. 5.6 - Distribuição de hidrogênio neutro galático.
FONTE: Kellermann and Verschuur (1974), p.96.

Nota-se que as moléculas detectadas nessa fonte possuem velocidades radiais compatíveis com a velocidade média da nuvem de hidrogênio. De acordo com a Figura 5.6, a segunda nuvem encontra-se mais próxima do sistema solar de modo que, se ambas as regiões de absorção de formaldeído fossem iguais, a temperatura de linha proveniente da primeira nuvem seria atenuada devido à distância. Levando em consideração as distâncias cinemáticas dessas nuvens, conclui-se que a temperatura de linha da raia menos intensa seria aproximadamente 0,4 K quando colocada na mesma distância que a segunda nuvem. Desta forma, as temperaturas inferidas acima sugerem duas regiões aproximadamente iguais a diferentes distâncias.

Tendo em vista essas considerações, admite-se que as moléculas de H_2CO , NH_3 e a raia de $H\ 109\ \alpha$ estão correlacionadas com a segunda nuvem de hidrogênio neutro, da qual deve fazer parte a linha de formaldeído em $-41\ km\ s^{-1}$.

De acordo com Cheung (1976), as características gerais de uma região HII, estimadas das observações de NH_3 , são:

- 1) Largura de linha entre 3 e 5 $km\ s^{-1}$, o que implica que as estruturas hiperfinas são resolvidas.
- 2) A profundidade óptica da transição $(J, K) = (1, 1)$ está situada entre 0,5 e 5.
- 3) As fontes podem ser extensas cobrindo vários minutos de arco.
- 4) A temperatura máxima de antena é da ordem de 2 K.
- 5) A temperatura de rotação $T(2,2:1,1)$ situa-se entre 15 e 70 K.

Analisando os resultados observacionais fornecidos nas Tabelas 5.1 e 5.3, verifica-se que os parâmetros da fonte enquadram-se nas características gerais enumeradas. Logo, com base nos resultados obser

vacionais pode-se sugerir que a região observada é uma nuvem molecular associada a uma região HII. No caso de uma nuvem molecular escura, $T(2,2:1,1)$ deveria ser inferior a 15 K e $\Delta V(1,1) < 1 \text{ km s}^{-1}$. No caso de uma fonte do centro galáctico, $\Delta V(1,1)$ deveria estar situado entre 25 e 50 km s^{-1} .

A partir de observações no contínuo em 5 GHz, Haynes et alii (1979) sugeriram a existência de uma região HII associada a G 328.2-0.6 ($\alpha = 15^{\text{h}} 54^{\text{m}} 2^{\text{s}},3$ $\delta = -53^{\circ} 55',4$). As observações de NH_3 vêm confirmar os comentários de Haynes et alii (1979).

Como resultado das observações das transições metaestáveis $(J, K) = (1, 1)$ e $(2, 2)$, pode-se sugerir que as regiões de emissão dessas raias estejam sob as mesmas condições físicas, tendo-se em vista que suas larguras de linha e velocidades radiais são bem correlacionadas. Admitindo que a nuvem encontra-se a 3 kpc do sistema solar, como sugerido pela distribuição de H e o modelo de rotação circular, e considerando o "filling factor" determinado para a região de emissão de NH_3 , determinou-se a massa e a dimensão linear da nuvem molecular, contida no feixe (Tabela 5.4).

Acredita-se que o CO possa ser detectado nesta nuvem, tendo-se em vista que ele é amplamente distribuído na galáxia e encontra-se correlacionado com NH_3 em um grande número de fontes. Por outro lado, a densidade de H_2 estimada é superior àquela necessária para que os níveis de CO com baixas energias (10^3 cm^{-3}) tenham uma população relevante. Baseando na ocorrência conjunta dessas moléculas, Little et alii (1980) estabeleceram a seguinte relação empírica entre $T(^{12}\text{CO})$ e $T(2,2:1,1)$:

$$T(2,2:1,1) = [0,4 - 0,7] T_K(^{12}\text{CO}),$$

onde T_K é a temperatura cinética.

Fazendo uso desta relação funcional, calculou-se que se o CO ocorrer em G 328.2-0,5, sua temperatura de rotação deverá estar entre 42.5 e 24 K. Apesar da validade desta equação para grande número das fontes de ^{12}CO , há casos em que T(2,2:1,1) localiza-se fora do intervalo definido (Mc Donald et alii, 1981).

5.2 - EXCITAÇÃO E RELAXAÇÃO DOS NÍVEIS

Os níveis de inversão rotacional possuem tempo de vida da ordem de 10^7 s. Este fato requer que o mecanismo de excitação aumente a população destes níveis numa escala de tempo inferior a 10^7 s, a fim de que essas transições sejam detectadas com temperatura superior a 2,8 K (Cheung, 1976).

Levando em consideração as possíveis condições físicas das nuvens moleculares, acredita-se que as colisões possam ser de importância fundamental como mecanismo de excitação (Cheung et alii, 1969), vindo a ser o principal responsável pela população de grande número de níveis de inversão rotacional, bem como pelo equilíbrio entre eles.

Os níveis metaestáveis da molécula de amônia possuem tempo de vida da ordem de 10^9 s (Oka et alii, 1971) e somente após transcorrido este tempo é que uma transição quântica pode ter lugar. Dependendo do estado inicial, as transições ocorrem para determinados níveis e nunca para outros. Este comportamento define duas espécies distintas de amônia que podem ser encaradas como moléculas diferentes. Estas espécies denominam-se para-amônia, definida por $K = 3n \pm 1$, e orto-amônia definida por $K = 3n$, com n inteiro e positivo. Estas espécies caracterizam-se pelo fato de que se a molécula encontra-se num estado metaestável inicial, ela só realizará uma transição deste estado para um outro da mesma natureza. Este comportamento isola as duas espécies não estabelecendo vínculos entre ambas. Este é o caso das transições mostradas na Tabela 5.6.

TABELA 5.6

TRANSIÇÕES ESPONTÂNEAS DE NH₃ A PARTIR DE ESTADOS METAESTÁVEIS

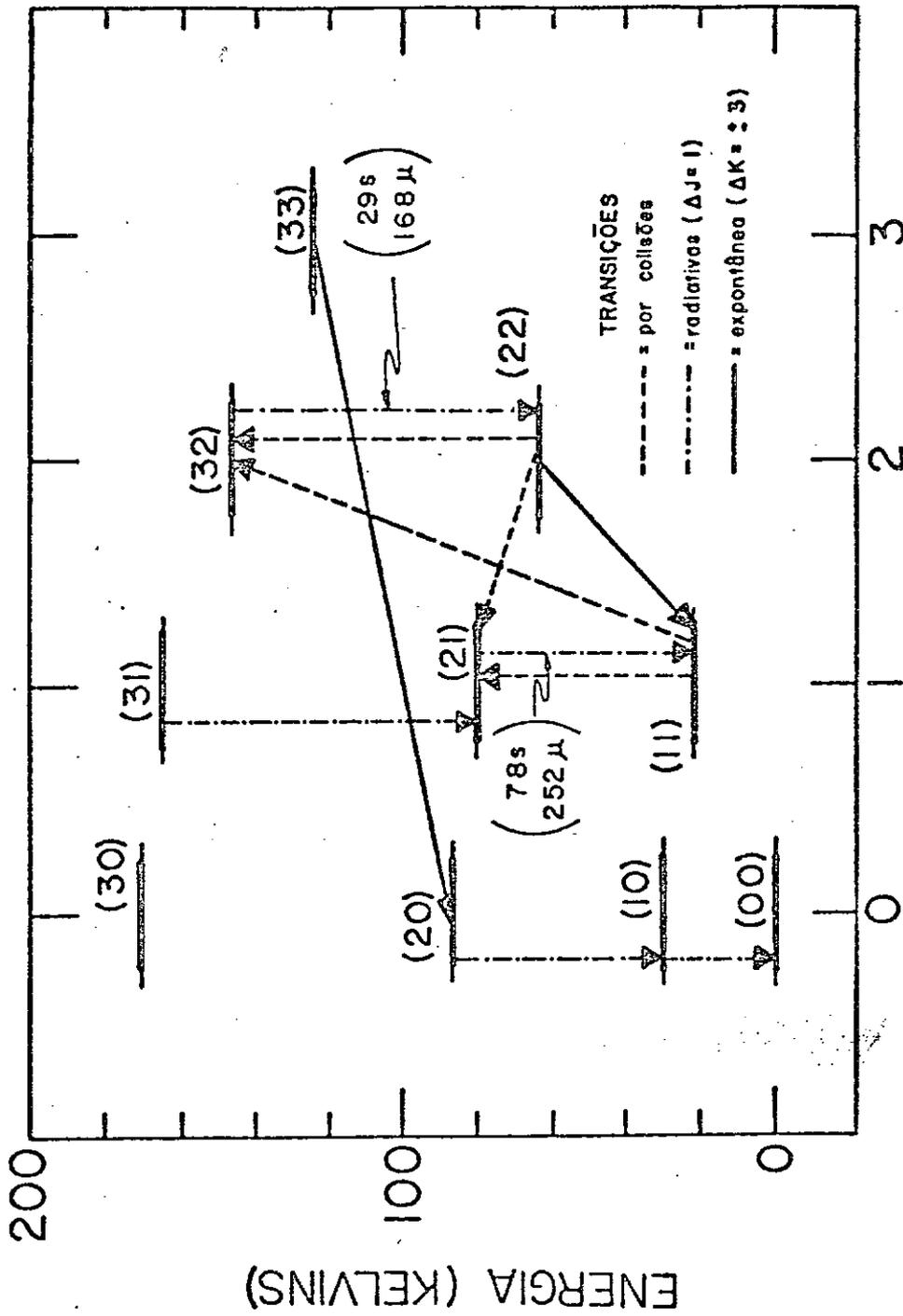
TRANSIÇÃO	TEMPO DE VIDA DO ESTADO
(2,2) → (1,1)	$7,32 \times 10^9$ s
(3,3) → (2,0)	$1,37 \times 10^9$ s
(4,4) → (3,1)	$0,69 \times 10^9$ s

As transições espontâneas são desprezíveis se comparadas a transições induzidas por colisões, razão pela qual estas últimas merecem uma análise mais detalhada.

Sob as condições físicas das nuvens observadas, as transições induzidas por colisões são as principais responsáveis por processos de excitação e relaxação. Nessas mesmas condições os estados (1, 1) e (2,2) são conectados por transições em que $\Delta\bar{K} = \pm 3$ (Oka et alii, 1971), onde o $\bar{K} = |K|$. No cálculo da relaxação dos estados, estas transições devem ser levadas em consideração; no entanto, dependendo das condições físicas do meio elas podem ser negligenciadas. A transição (2,2) → (1,1) ocorre em regiões em que a temperatura cinética é inferior a 20 K, enquanto (1,1) → (3,2) requer 120 K (Morris et alii, 1973).

De acordo com Oka et alii (1971), o tempo necessário para ocorrer uma transição em que $\Delta\bar{K} = \pm 3$ é dado por $2 \times 10^{11}/n(\text{H}_2)$ s, onde $n(\text{H}_2)$ é a densidade de hidrogênio molecular. Impondo a condição de que as transições induzidas por colisões sejam mais rápidas que as transições radiativas, pode-se estimar que a densidade mínima de H₂ necessária para excitar os níveis de energia a ponto de emitirem radiação acima de 2,8 K é da ordem de $2 \times 10^2 \text{ cm}^{-3}$. Este limite inferior é menor que aquele estabelecimento por Cheung et alii (1969) a partir do estudo das transições radiativas e induzidas por colisões, para as quais $\Delta J = \Delta K = 0$. Em suas análises, Cheung et alii (1969) obtiveram $n(\text{H}_2) \geq 10^3 \text{ cm}^{-3}$.

Os estados não-metaestáveis possuem um tempo de vida curto, e a molécula de NH_3 permanece nesses estados de energia durante alguns segundos. Em consequência, densidades bem superiores às estimadas anteriormente são necessárias para que as transições induzidas por colisões ocorram em número maior ou igual às transições radiativas. Por esta razão, Cheung (1976) sugeriu que em regiões onde $n(\text{H}_2)$ é menor que 10^5 , estes estados estão pouco "populados", podendo ser desprezadas suas contribuições. Na Figura 5.7 encontram-se algumas transições induzidas por colisões, bem como as transições radiativas a partir de estados com $J \neq K$. Ao lado de algumas transições rotacionais estão as respectivas frequências e tempo de vida dos estados. Apesar de algumas transições induzidas por colisão requererem altas temperaturas cinéticas, a transição $(2,2) \rightarrow (2,1)$ ocorre sob temperaturas cinéticas maiores ou iguais a 20 K, de tal forma que estas transições devem ser responsáveis por uma diminuição na população do nível $(2,2)$ aumentando a população do nível $(1,1)$. Nas nuvens moleculares, onde a temperatura cinética seja inferior a 20 K, a transição mencionada acima torna-se menos signifi cativa, sendo desprezível sua contribuição. Desta forma, os níveis $(1,1)$ e $(2,2)$ atingem o equilíbrio, de tal modo que a razão de suas populações guardem relação apenas com a temperatura cinética da nuvem. Na Figura 5.8 encontra-se plotada a temperatura de rotação $T(2,2:1,1)$ contra a temperatura cinética do meio, para diferentes valores de $n(\text{H}_2)$. Pode-se verificar que no intervalo de temperatura entre 10 e 30 K há uma correspondência, razoavelmente satisfatória, entre esses valores e a temperatura cinética. A discrepância torna-se maior a medida que temperaturas de rotação maiores são tomadas juntamente com valores cada vez menores da densidade de hidrogênio molecular. Estes resultados foram retirados do modelo de Morris et alii (1973) e concordam muito bem com o modelo de Cheung (1976). Na Figura 5.9 encontra-se o resultado da inclusão de um campo infravermelho e verifica-se que os níveis metaestáveis comportam-se indiferentemente à presença deste campo, fato este não verificado para o nível $(2,1)$ que sofre forte influência.



K (MOMENTO ANGULAR)

Fig. 5.7 - Algumas transições da molécula de amônia.

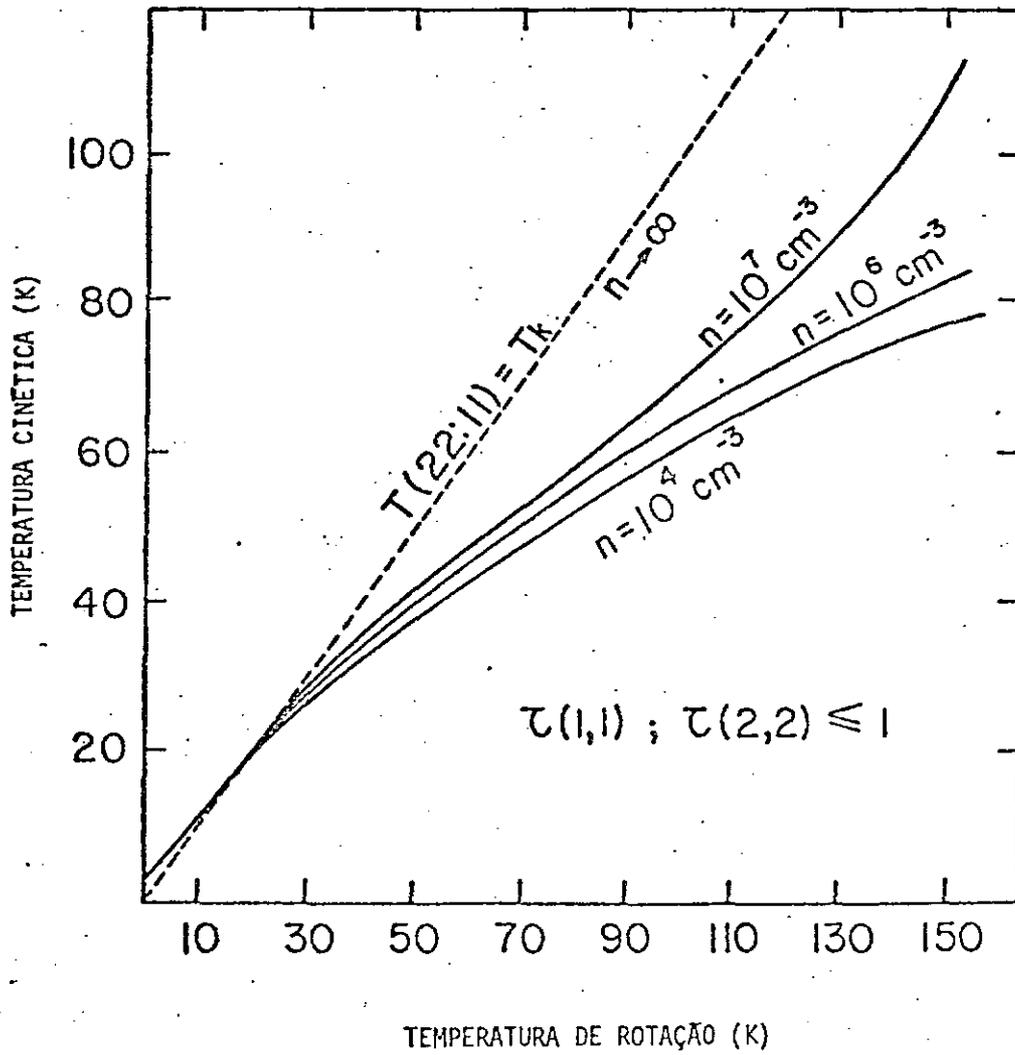


Fig. 5.8 - Temperatura de rotação contra temperatura cinética.
FONTE: Morris et alii (1973), p. 520.

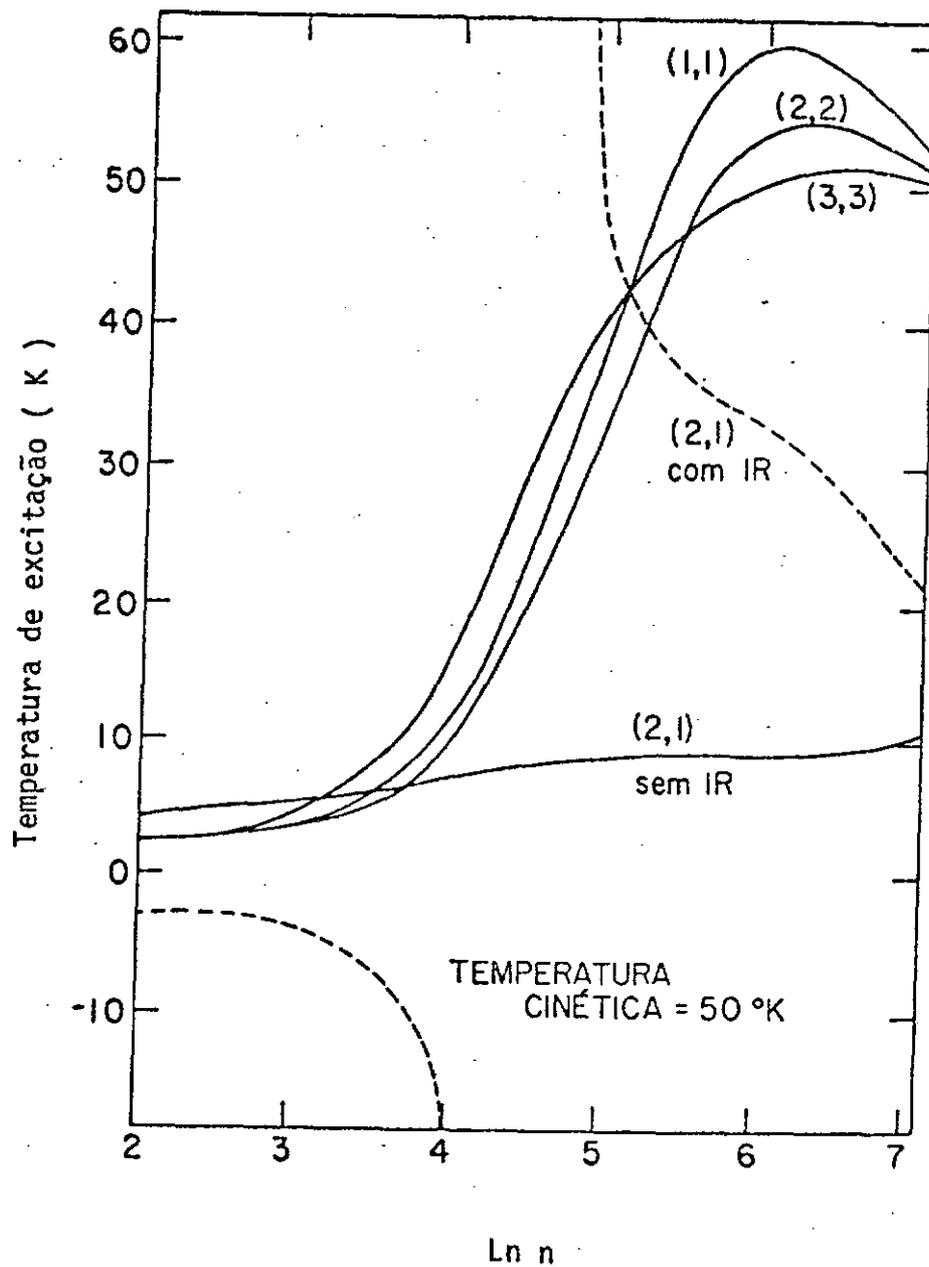


Fig. 5.9 - Temperatura de excitação contra o logaritmo neperiano da densidade de partículas (n).

FONTE: Morris et alii (1973, p. 522).

De acordo com o modelo de não-equilíbrio termodinâmico desenvolvido por Sweitzer (1978), para a nebulosa K-L, os níveis metaestáveis são excitados principalmente por colisões e ligeiramente perturbados pelo campo infravermelho distante. Desta forma, a temperatura de rotação $T(2,2:1,1)$ deve fornecer uma boa estimativa da temperatura cinética da nuvem. Ainda de acordo com este pesquisador, o nível não-metaestável $(2,1)$ é excitado, basicamente, pelo aprisionamento de fótons com comprimento de onda de 252 micra, enquanto os níveis $(3,2)$ e $(4,3)$ são excitados pelo campo infravermelho distante.

Analisando os parâmetros apresentados na Tabela 5.2, verifica-se que três das quatro fontes observadas apresentam $T(2,2:1,1)$ menor que 20 K e densidades de H_2 da ordem de 10^4 por cm^{-3} . Considerando esses parâmetros, vê-se que as transições $(2,2) \rightarrow (2,1)$ são as mais prováveis, apesar de seus efeitos serem desprezíveis, uma vez que sob as condições determinadas a temperatura cinética e a temperatura de rotação são inteiramente concordantes. As transições $(1,1) \rightarrow (2,1)$, $(2,2) \rightarrow (3,2)$, $(3,3) \rightarrow (4,3)$ são as menos prováveis, dado que requerem densidades com duas ordens de grandeza acima dos valores determinados. Desta forma, o equilíbrio dos estados $(2,2) \rightarrow (1,1)$ faz-se de tal modo que a temperatura de rotação determinada para a nuvem molecular seja uma boa estimativa para a temperatura cinética do meio. A fonte G 208.9-19.4 apresentou temperatura superior a 20 K, o que torna mais relevante o efeito das transições $(2,2) \rightarrow (1,1)$ diminuído a população do nível $(2,2)$ e diminuindo a população do nível $(1,1)$ através da transição radiativa $(2,1) \rightarrow (1,1)$. De forma mais rigorosa, a população dos níveis $(1,1)$ e $(2,2)$ guarda uma relação entre si, dada por:

$$N(1,1) P_{1,1 \rightarrow 2,2} = N(2,2) \left\{ \frac{3}{5} e^{\frac{\Delta W}{KT}} P_{1,1 \rightarrow 2,2} + P_{2,2 \rightarrow 1,1} \right\},$$

onde:

$P_{1,1 \rightarrow 2,2}$ é a probabilidade de que ocorra uma transição induzida por colisão, entre $(1,1)$ e $(2,2)$,

ΔW é a diferença de energia entre (1,1) e (2,2),

$N(J,K)$ é a população no nível de energia (J,K),

de acordo com Cheung et alii (1969).

Considerando desprezível a contribuição do segundo termo do segundo membro, obtêm-se:

$$T(2,2:1,1) = \frac{W(2,2) - W(1,1)}{k \ln \left[\frac{g(2,2) N(1,1)}{g(1,1) N(2,2)} \right]}, \quad (5.2)$$

onde:

k é a constante de Boltzmann,

$W(J,K)$ é a energia do estado (J,K),

$N(J,K)$ é a população de moléculas no estado (J,K), cm^{-3} .

Analisando as duas equações anteriores, pode-se concluir que a temperatura de rotação inferida da Equação 5.2 é um limite inferior para a temperatura cinética. De acordo com Schwartz et alii (1977), para valores de $T(2,2:1,1)$ entre 30 e 40 K, o desvio verificado entre este parâmetro e a temperatura cinética é inferior a 30%.

Apesar de apenas uma fonte apresentar temperatura de rotação superior a 20 K, o efeito da transição (2,2) \rightarrow (1,1) deve ser levado em consideração em todas as fontes, tendo-se em vista a incerteza das medidas.

5.3 - CONVERSÃO ORTO-PARA

As transições entre orto e para-amônia são lentas e envolvem variações na função de onda do "spin" de um hidrogênio. Os processos que vinculam essas espécies de NH_3 são de importância relevante, apesar de pouco conhecidos, na análise do equilíbrio entre ambas. Analisando os valores de $T(3,3:1,1)$ determinados, pode-se verificar que as temperaturas inferidas não sugerem equilíbrio, visto que estes valores diferem daqueles obtidos para $T(2,2:1,1)$. Uma das razões físicas pela qual poder-se-ia entender tal discrepância seria que, na região observada, houvesse um excesso de para-amônia relativo a orto-amônia, o que poderia ser o resultado de diversos processos que envolvem a formação de NH_3 , ou processos relativos à transição entre essas espécies. De acordo com Cheung et alii (1969), os seguintes mecanismos devem ser considerados para que haja variação na função de onda do "spin" do hidrogênio:

- 1) Excitação dos níveis eletrônicos de NH_3 , seguida de radiação para produzir NH_3 no estado "vibrônico" fundamental.
- 2) Excitação de níveis "vibrônicos" degenerados, seguidos pela re-irradiação indo para o nível fundamental.
- 3) Produção de reações químicas por colisões de NH_3 , com uma molécula ou íon e subsequente dissociação.
- 4) Troca de H por colisões.
- 5) Absorção de moléculas de NH_3 por grãos e subsequente liberação dessa molécula.

A estimativa de tempo baseada nesses processos sugere 10^6 anos como escala de tempo necessária para que as duas espécies de amônia atinjam o equilíbrio (Cheung, 1976; Morris et alii, 1973). A princípio, não se pode atribuir veracidade total a esta aproximação, uma vez que processos mais eficientes para a formação de uma dada espécie de

amônia não são de todo impossíveis. Oka et alii (1971) argumentaram que se a amônia, em uma nuvem molecular, forma-se na superfície de grãos de poeira a baixas temperaturas e são vaporizadas rapidamente, esse processo poderia favorecer a formação de uma espécie de amônia, e daí a diferença de abundância entre ambas. No entanto, Cheung (1976) mostrou que experimentos de laboratório não consubstanciaram o argumento anterior. Assim esta questão requer estudos mais aprimorados.

Levando em consideração a escala de tempo que seria necessária para as espécies de amônia atingir o equilíbrio, pode-se questionar a natureza da informação contida no parâmetro $T(3,3:1,1)$. Uma vez que o tempo necessário para as espécies orto e para da amônia atingirem o equilíbrio é da ordem de milhões de anos, a temperatura de rotação $T(3,3:1,1)$ deve refletir alguma situação ocorrida há pelo menos 10^6 anos atrás. Considerando que o equilíbrio entre essas espécies de amônia ocorra na escala de tempo mencionada anteriormente, que é a hipótese mais difundida, considerações a respeito das condições físicas da nuvem em seus primórdios podem ser extrapolados. De acordo com Turner (1973), o fato da temperatura $T(3,3:1,1)$ ser superior a $T(2,2:1,1)$ sugere que, a medida que a nuvem colapsa, diminui sua temperatura cinética, o que implica que outrora foi mais quente que hoje. Por outro lado, Cheung (1976) argumenta que $T(3,3:1,1)$ poderia ser indicativa de uma temperatura associada a ondas de choque.

5.4 - EFEITOS GEOMÉTRICOS

Mapeamentos realizados sobre várias nuvens (Matsakis et alii, 1980; Schwartz et alii, 1978; Ho et alii, 1979; Little et alii, 1980), nas frequências das transições metaestáveis $(J,K) = (1,1), (2,2)$ e $(3,3)$ de amônia, mostraram diferentes distribuições espaciais. Estas diferentes distribuições podem dar origem a diferentes valores de temperatura de antena, tendo-se em vista que este parâmetro está relacionado com o "filling factor". Dessa forma, subestimar-se-ia a temperatura de brilhância de uma dada transição, se o feixe de antena englobasse parte de sua distribuição (Figura 5.10).

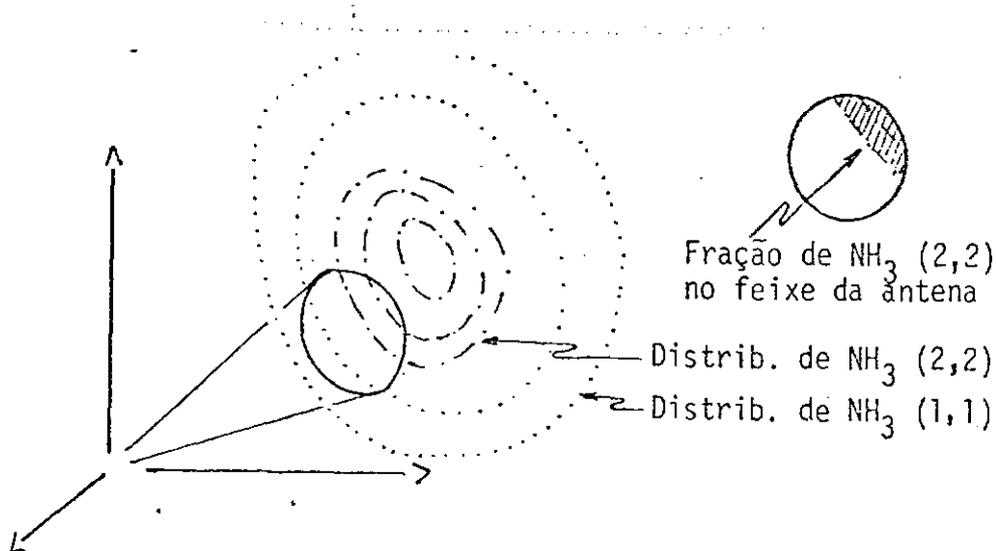


Fig. 5.10 - Representação do efeito geométrico.

Este tipo de efeito deve ser mencionado sempre que se disponha de observações na direção de apenas um ponto de uma nuvem interestelar, como é o caso da fonte G 328.2-0.5, cuja pesquisa foi realizada recentemente por Scalise et alii (1981b).

Um segundo efeito geométrico estaria associado à geometria da própria região observada. Um caso típico seria aquele em que a nuvem apresentasse um núcleo aquecido, envolvido por um halo extenso e frio. Neste modelo núcleo-halo, a região mais extensa e fria emitiria basicamente (1,1), enquanto (2,2) e (3,3) seriam originárias basicamente do núcleo mais aquecido. Efeitos desta natureza tornam-se claramente visíveis comparando observações de NH_3 em Órion, e que tenham sido realizadas com telescópios de diferentes resoluções angulares.

Estes efeitos geométricos, mencionados anteriormente, poderiam dar origem a estimativas erradas da abundância das espécies orto e para da amônia. Assim, as análises mais rigorosas devem incluir, se possível, os efeitos geométricos.

Em suas observações, Cheung (1976) sugeriu que $T(3,3:1,1)$ e $T(2,2:1,1)$ deveriam estar em equilíbrio nas fontes W3, NGC 6334(s), NGC 6334(n), W3, M17, DR21 e W75(n), e as diferenças verificadas entre as temperaturas de rotação, obtidas a partir de diferentes níveis meta estáveis, poderiam ser originárias dos efeitos de suas não-homogeneidades.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABRAHAM, Z. *Radiômetro*, São Paulo, 1981. Comunicação pessoal a W. Vi-
las Boas.
- BAARS, J.W.N. *Dual-beam parabolic antennae in radio observatory*.
Groningen, Walters Noordhoff, 1970.
- BARDEEN, J.; TOWNES, C.H. Second-order corrections to quadrupole
effects in molecules. *Physical Review*, 73(6):627-629, May 1948.
- BARRET, A.H.; HO, P.T.; MYERS, P.C. Ammonia in the Kleinmann - Low
nebula, *Astrophysical Journal*, 211(1):L39-L43, Jan. 1977.
- BATCHELOR, R.A.; GARDNER, F.F.; KNOWLES, S.H. Observations of NH₃ in
southern sources. *Astronomical Society of Australia*, 3(2):152-154,
Sept. 1977.
- BATCHELOR, R.A.; McCULLOCH, M.G.; WHITEOAK, J.B. Observations of the
J = 1 - 0 transitions of HCO⁺ in southern molecular clouds. *Monthly
Notices of the Royal Astronomical Society*, 194:911-917, Mar. 1981.
- BECKLIN, E.E.; NEUGEBAUER, G. Observations of infrared stars in the
orion nebula. *Astrophysical Journal*, 147(2):799-802, Feb. 1967.
- CASWEL, J.L. Hydrogen recombination line and continuum observations at
5000 MHz of 13 southern HII regions. *Australian Journal of Physics*,
25:443-450, Feb. 1972.
- CHEUNG, A.C.; RANK, D.M.; TOWNES, C.H.; THARNTON, D.; WELCH, W.J.
Detection of NH₃ in the interstellar medium by their microwave
emission. *Physical Review Letters*, 21(5):1701-1705, Dec. 1968.
- CHEUNG, A.C.; RANK, D.M.; TOWNES, C.H.; KNOWLES, S.H.; SULIVANIII, W.T.
Distribution of ammonia density, velocity and rotational excitation
in the region of Sagittarius B2, *Physical Review Letters*, 157, L13-
-L20, July 1969.
- CHEUNG, A.C. *Discovery of interstellar ammonia and its use as a
probe of interstellar clouds*. PhD. Thesis in Physics. Berkeley,
University of California, July 1976.

- COLES, D.K.; GOOD, W.E. Stark and Zeeman effects in the inversion spectrum of ammonia. *Physical Review*, 70(3):979L. Aug. 1946.
- COSTAIN, C.C. An empirical formulae for the microwave spectrum of ammonia. *Physical Review*, 82(11):108, Apr. 1951.
- DAY, G.A.; THOMAS, M.B.; GOSS, W.M. A low latitude survey from $l = 307$ to 330 at 2700 MHz. *Australian Journal of Physics, Astrophysical Supplement serie*, 11: 11-13, Oct. 1969.
- DENNISON, D.M.; UHLENBECK. The two - minima problem and the ammonia molecule. *Physical Review*, 41(1):313-321, Aug. 1932.
- DICKEL, H.R.; DICKEL, J.R.; WILSON, W.J. The detailed structure of CO in molecular cloud complexes NGC 6334. *Astrophysical Journal*, 217, 56-67, Oct. 1977.
- DYSON, J.E.; WILLIAMS, D.A. *The physics of the interstellar medium*. New York, John Wiley, 1980.
- ERICKSON, N.R.; SNEL, R.L.; LOREN, R.B.; MUNDY, L.; PLAMBECK, L.R. *Detection of interstellar CO⁺ toward OMC-1*. Massachusetts, College Radio Astronomy Observatory, 1981. Reports.
- EWEN, H.I.; PURCEL, E.M. Radiation from hyperfine levels of interstellar hydrogen. *Physical Review*, 83: 88L Aug. 1951.
- FEYNMANN, R.P.; SANDS, M.; LEIGTON, R.B. *Feynmann lectures on Physics*, Mexico, Fondo Interamericano S.A., 1971. V.3. Bilingue.
- GATLEY, I.; BECKLIN, E.E.; MATTEWS, K.; NEUGEBAUER, G.; PENSTON, M.; SCOVILLE, N. A new infrared complex and molecular cloud in orion. *Astrophysical Journal*, 191: L121-L125, Aug. 1974.
- GOLDSMITH, P.F.; SNEL, R.L.; DEGUCHI, S.; KRATKOV, R.; LINKE, R.A. *Vibrationally excited cianoacetyleno in the orion molecular cloud*. Massachusetts, College Radio Astronomy Observatory, 1981. Reports.
- GOSS, W.M.; SHAVER, P.A. Galactic radio source I. High resolution 5000 MHz observations. *Austrarilia Journal of Physics, Astrophysical Supplement serie*, 14:1-35, Jul. 1970.

- HERBST, E.; KLEMPERER, W. The formation and depletion of interstellar clouds. *Astrophysical Journal*, 185(1):505-533, Oct. 1973
- HO, P.T.P.; BARRET, AH.; MYERS, P.C.; MATSAKIS, D.N.; CHEUNG, A.C.; CHUI, M.F.; TOWNES, C.H.; YNGVESSONS, K.S. Ammonia observations of orion molecular cloud. *Astrophysical Journal*, 234(3):912-921 Dec. 1979.
- HAYNES, R.F.; CASWELL, J.L.; SIMONS, L.W.J. A southern hemisphere survey of the galactic plane at 5 GHz. *Australian Journal of Physics, Astrophysical Supplement serie*, 45:1-87, Aug. 1978.
- A catalog of 5 GHz galactic plane sources. *Australian Journal of Physics, Astrophysical supplement serie*, 48:1-30, Sep. 1979.
- KAUFMANN, P.; FORGARTY, W.G.; SCALISE, E.J.; SCHAAL, R.E. First celestial water vapor source observed at Itapetinga radio observatory, Brazil. *Astronomical Journal*, 79(9):933-937. Nov. 1974.
- KAUFMANN, P.; SCHAAL, R.E.; RAFAELLI, J.C. The effects of slowly varying surface errors in large millimeter wave antenna: a practical verification in Itapetinga 45 ft reflector. *IEEE Transactions on Antenna and Propagation*, 26(6):854-857, Nov. 1978.
- KELLERMANN, K.I.; VERSCHUUR, G.L. *Galactic and extra-galactic radio Astronomy*, New York, Spring-Verlag, 1974.
- KEMBLE, E.C. *The fundamentals of quantum mechanics*. 5. ed. New York, McGraw-Hill, 1937.
- KLEINMANN, D.E.; LOW, F.J. Discovery of an infrared nebula in orion. *Astrophysical Journal*, 149(2):L1-L4, Jul, 1967.
- KU, W.H.M.; RIGHINI-COHEN, G.; SIMONI, M. High-resolution X-ray observations of the orion nebula. *Science*, 215(4528):61.64, Jan. 1982.
- KUKOLICH, S.G. Measurement of ammonia hyperfine structure with a two cavity maser. *Physical Review*, 156(1):83-92, Apr. 1967.

- KUTNER, M.L.; EVANS, N.J.; TUCKER, K.D. A dense molecular cloud in OMC1/OMC2 region. *Astrophysical Journal*, 209(2):452-461, Oct. 1976.
- LANG, K.R. *Astrophysical formulae*. 2 ed. New York, Spring-Verlag, 1980.
- LITTLE, L.T.; BROWN, A.T.; MCDONALD, G.H.; RILEY, P.W. Ammonia observations of the molecular cloud near S68, S140, OMC2, and S106. *Monthly Notices of the Royal astronomical Society*, 193:115-118, Feb. 1980.
- LOREN, R.B.; EVANS, N.J. II; KNAP, G.R. Properties of molecular clouds containing Herbig-Haro objects. *Astrophysical Journal*, 234(3):932-948, Dec. 1979.
- LOW, F.J.; JOHNSON, H.L.; KLEINMANN, D.E.; LATHAAN, A.C.; GEISEL, S.L. Photometric and spectroscopic observations of infrared stars. *Astrophysical Journal*, 160(2):531-543, May 1970.
- LUCAS, R.; LE SQUEREN, A. M.; RAZÈS, I.; ENCRENAZ, P.J. Molecular observations of sharpless 106. *Astronomy and Astrophysics*, 66:155-160, Mar. 1978.
- MARTIN, R.N.; HO, P.T.P. Detection of extra-galactic ammonia. *Astronomy and Astrophysics*, 74(1):L7-L9, Apr. 1979.
- MATSAKIS, D.N.; BOLOGONA, J.M.; SCHWARTZ, P.R. Ammonia observations of Dr. 21, W51, NGC 1333, and other sources. *Astrophysical Journal*, 241(2):655-675, Oct. 1980.
- MCDONALD, G.H.; LITTLE, L.T.; BROWN, A.T.; RILEY, P.W.; WATHESON, D.N.; FELLI, M. Detections of new ammonia source. *Monthly Notices of Royal astronomical Society*, 195:387-397, May 1981.
- MORRIS, M.; ZUCKERMANN, B.; PALMER, P.; TURNER, B.E. The new molecular cloud in orion. *Astrophysical Journal*, 192(1):L27-L30, Aug. 1974.
- Interstellar ammonia, *Astrophysical Journal*, 186(2):501-528, Dec. 1973.

- NECKEL, T. UBV, VRI and H β observations of stars in the HII regions NGC 6334, and NGC 6357. *Astronomy and Astrophysics*, 69:51-56, 1978.
- NEUGEBAUER, G.; BECKLIN, E.E.; HYLAND, A.R. Infrared sources of radiation. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 9:67-102, 1971.
- NEWTON, R.R.; THOMAS, L.H. Internal molecular motion of large amplitude illustrated by summetrical vibration of ammonia. *Journal of Chemical Physics*, 16(4):310-313, Apr. 1948.
- OKA, T.; SHIMIZU, F.O.; SHIMIZU, T. Possible rotational equilibration of interstellar ammonia by radiative $\Delta k = \pm 3$ transitions. *Astrophysical Journal*, 165(3):L15-L19, Apr. 1971.
- PARADINE, C.G. RIVETT, B.H.P. Distribuição de frequências. In: ——— *Métodos estatísticos para tecnologistas*. São Paulo, Poligono, 1974, cap. 1, p. 7-33.
- PAULING, L.; WILSON, E.B. *Introduction to quantum mechanics with application to chemistry*. London, McGraw-Hill, 1935.
- PLAMBECK, R.L.; WILLIAMS, D.R.W. Hydrogen densities in molecular clouds inferred from CO observations. *Astrophysical Journal*, 227(1):L43-L47, Jan. 1979.
- ROBINSON, B.J.; CASWELL, B.J.; GOSS, W.M. A 1665 MHz OH survey of southern milk way. *Astrophysical Letters*, 9:5-8, Aug. 1971.
- RYBECK, O.E.H.; SUNE, A.; HJALMARSON, A.; ELLDER, J.; ROMMANG, B.O.; KOLLBERG, E. *Hiperfine structure of interstellar ammonia in dark clouds*. Gothenburg, Chalmers University of Technology, Jan. 1977. 24 p. Research Report, 128.
- SCALISE, E.J.; SCHAAL, R.E.; BAKOR, Y.; VILAS BOAS, J.W.S. MYERS, P.C. Survey of NH $_3$ in the southern hemisphere. *Astronomical Society of Australia*, 4(2):250-251, 1981a.

- SCALISE, E.J.; SCHAAL, R.E.; BAKOR, Y.; VILAS BOAS, J.W.S.; MYERS, P.C.
High-sensitivity survey of NH₃ in the southern hemisphere.
Astronomical Journal, 86(12):1939-1943, Dec. 1981b.
- SCHAAL, R.E. *Radiômetro*. São Paulo, 1982. Comunicação pessoal a
W. Vilas Boas.
- SCHWARTZ, P.R.; CHEUNG, A.C.; BOLOGNA, J.M.; CHUI, M.F.; WAAK, J.A.;
MATSAKIS, D. Observations of ammonia in selected galactic regions.
Astrophysical Journal, 218(3):671-676, Dec. 1977.
- SCHWARTZ, P.R.; BOLOGONA, J.M.; WAAK, J.A. Observations of ammonia
in selected galactic regions II. NGC 6334, NGC 1333 and Dr. 21.
Astrophysical Journal, 226(2):469-476, Dec. 1978.
- SHKLOVSKI, I.S. *Astronomical Zh.*, 29(2):144-196, Jul, 1952.
- SCHIFF, L.A. *Quantum mechanics*, 3. ed. Tokyo, McGraw-Hill, 1968.
- SHAVER, P.A.; GOSS, W.M. High resolution 408 observations. *Australian
Journal of Physics, Astrophysical supplement serie*, 14:77-131.
Jul. 1970a.
- SHAVER, P.A.; GOSS, W.M. Galactic radio sources III spectral and
physical characteristics. *Australian Journal of Physics,
Astrophysical supplement serie*, 14:133-196, Jul. 1970b.
- SPIRIDINOV, V.P.; LOPATKIN, A.A. *Tratamento matemático de dados fisi-
co-químicos*. Moscou, Mir, 1973.
- SWEITZER, J.S. On the excitation of interstellar ammonia in the
Kleinmann-Low nebula. *Astrophysical Journal*, 225(1):116-129, Oct.
1978.
- TOWNES, C.H.; SCHAWLOW, A.L. *Microwave spectroscopy*. 2. ed. New York.
Dover, 1975.
- TURNER, B.E. Interstellar molecules. In: W.H. FREEMAN, *New frontiers
in astronomy*, San Francisco, *Readings from Scientific American*.
1973. cap. 4. p. 171-185.

- WATERS, J.W. Absorption and emission by atmospheric gases. In: M.L. Meeks. *Methods of Experimental Physics*. New York, 1976. 12B, 1, cap. 2, 142-172.
- WHITEOAK, J.B.; GARDNER, F.F. The 4830 MHz formaldehyde absorption in the direction of galactic radio sources. *Astronomy and Astrophysics*, 37:389-404, Jul, 1974.
- WILSON, T.L.; DOWNES, D.; DIEGING, J. Ammonia in Orion. *Astronomy and Astrophysics*, 71:275-282, Jan. 1979.
- WOOTEN, A.; EVANS, N.J.II.; SNELL, R.; BOUT, P.V. Molecular abundance variations in interstellar clouds. *Astrophysical Journal*, 225(3):L143-L148, Nov. 1978.
- WRICKRAMASHINGHE, N.C.; HOYLE, F. Prebiotic Polymers and infrared spectra of galactic sources. *Nature*, 269(5629):674-676, Oct, 1977.

APÊNDICE A

AJUSTE GAUSSIANO POR MÍNIMOS QUADRADOS

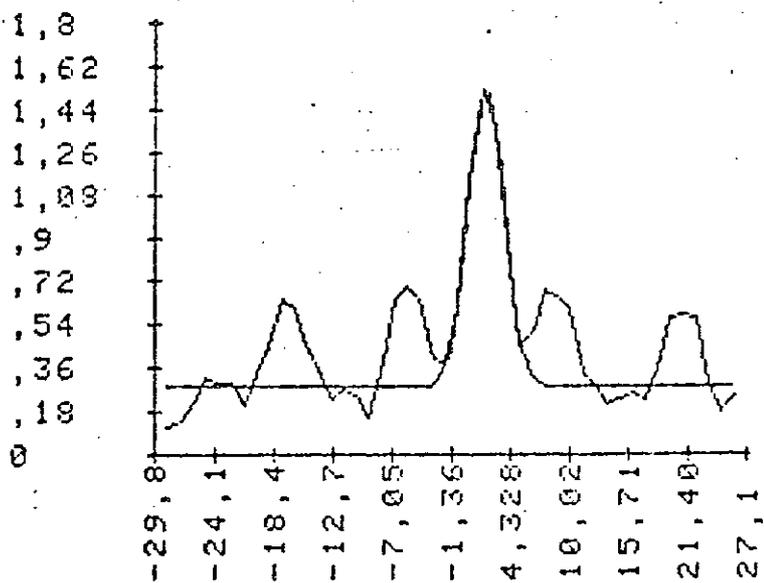
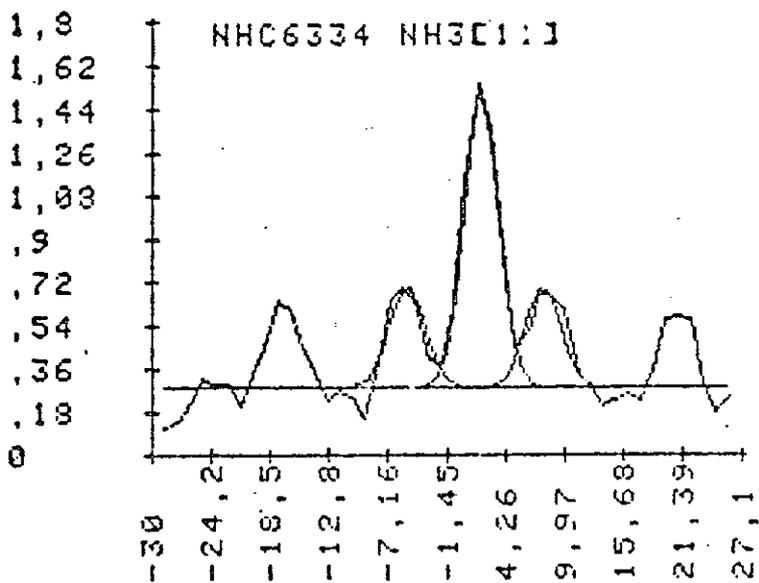
Na elaboração do programa, para ajustar gaussianas às raias espectrais, foi utilizado o método dos mínimos quadrados. Este programa encontra-se listado nas duas páginas seguintes e foi desenvolvido para a calculadora HP 9830.

À seguir, apresenta-se o resultado observacional obtido na direção da fonte NGC 6334 e, sobreposto a este resultado, encontra-se o ajuste de algumas transições hiperfinas, particularmente aquelas utilizadas para a redução dos dados. Em seguida, fazem-se algumas considerações a respeito do método.

```
2 DISP " SE N.DE CANAIS>10 E NECESSARIO"
3 WAIT 3000
4 DISP " DIMENSIONAR AS VARIAVEIS"
5 WAIT 3000
10 DISP "NUMERO DE CANAIS";
20 INPUT N
30 FOR I=1 TO N
40 X(I)=I
50 DISP "Y"(I);
60 INPUT Y(I)
70 NEXT I
80 S(6)=Y(1)
90 FOR I=1 TO N-1
100 S(6)=Y(I+1)+S(6)
102 NEXT I
105 FOR I=1 TO N
110 J(I)=X(I)-X(N/2)
120 NEXT I
130 FOR I=1 TO N
140 A(I)=J(I)*Y(I)
150 B(I)=J(I)+2*Y(I)
160 C(I)=J(I)+3*Y(I)
170 D(I)=J(I)+4*Y(I)
180 NEXT I
190 S(1)=A(1)
200 S(2)=B(1)
210 S(3)=C(1)
220 S(4)=D(1)
230 FOR I=1 TO N-1
240 S(1)=A(I+1)+S(1)
250 S(2)=B(I+1)+S(2)
260 S(3)=C(I+1)+S(3)
270 S(4)=D(I+1)+S(4)
280 NEXT I
290 FOR I=1 TO 4
300 M(I)=S(I)/S(6)
310 NEXT I
320 M(2)=M(2)-M(1)+2
330 M(4)=M(4)-4*M(3)+M(1)+6*M(1)+2*M(2)-3*M(1)+4
340 M(3)=M(3)-3*M(1)+M(2)+2*M(1)+3
350 P(3)=M(3)
360 P(4)=M(4)-M(2)/2+7/240
370 A0=X(N/2)+M(1)
375 FOR I=1 TO N
380 Q(I)=X(I)-A0
390 E(I)=Y(I)+2*LOGY(I)
400 F(I)=(Q(I)*Y(I))+2*LOGY(I)
410 G(I)=Y(I)+2
```

```
420 HC I ]=(OC I ]*YC I ])+2
430 LC I ]=(OC I ]+2*YC I ])+2
435 NEXT I
440 O1=EC I ]
450 O2=FC I ]
460 O3=GC I ]
470 O4=HC I ]
480 O5=LC I ]
490 FOR I=1 TO N-1
500 O1=EC I+1 ]+O1
510 O2=FC I+1 ]+O2
520 O3=GC I+1 ]+O3
530 O4=HC I+1 ]+O4
540 O5=LC I+1 ]+O5
550 NEXT I
560 C=(O2*O3-O4*O1)/(O4+2-O5*O3)
570 R1=EXP((O1+C*O4)/O3)
580 R2=SQR(1/(2*C))
590 R3=FC 3 ]/(R2+3)
600 R4=FC 4 ]/(R2+4)
605 R5=2*R2
610 FORMAT "MEDIR",4X,"T.MAX",9X,"LL.MR",
        4X,"ASSIM",/,F5.2,4X,F5.2,5X,2F9.2
620 WRITE (15,610)R0,R1,R5,R3
625 PRINT
630 END
```

TEMPERATURA DE ANTENA (K)



VELOCIDADE (km s⁻¹)

Seja $f(x)$ a função a ser ajustada:

$$f(x) = T_0 \text{ EXP } \left[- \frac{(x - \bar{x})}{2\sigma^2} \right], \quad (\text{A.1})$$

onde:

x é o número do canal,

T_0 é a temperatura máxima a determinar.

O parâmetro \bar{x} é obtido pela equação:

$$\bar{x} = x_0 + \frac{\sum a_i T_i}{\sum T_i},$$

onde:

$$a_i = (x_i - x_0), \quad e$$

x_0 é o canal fixado arbitrariamente.

Aplicando o logaritmo neperiano na Equação A.1, obtêm-se:

$$Y = \ln T_0 + C\xi^2,$$

onde:

$$Y = \ln f(x),$$

$$C = -1/2\sigma^2,$$

$$\xi = (x - \bar{x}).$$

Esta equação pode ser escrita como:

$$Y = a + C\xi^2.$$

Sobre esta curva foi aplicado o método dos mínimos quadrados.

A assimetria dos pontos a serem ajustados foi calculada através da relação:

$$q = \frac{[m_3 - 3m_1 m_2 + 2m_1^3]}{\Delta v^3},$$

onde:

Δv é a largura a meia altura da gaussiana ajustada,

$$m_j = \sum_i a_i^j T_i / \sum_i T_i,$$

de acordo com Paradine e Rivett (1974).

Os índices superiores são potências.