

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA
INGRID DOMINGOS PELISOLI

**LINHAS-SATÉLITE NO ESPECTRO DE HIDROGÊNIO
PERTURBADO POR PRÓTONS**

Porto Alegre
2014

Ingrid Domingos Pelisoli

**LINHAS-SATÉLITE NO ESPECTRO DE HIDROGÊNIO
PERTURBADO POR PRÓTONS¹**

Dissertação de mestrado apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Kepler de Souza Oliveira Filho

Porto Alegre
2014

¹O presente trabalho foi realizado com financiamento do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul (FAPERGS).

Sumário

Agradecimentos

Resumo

Abstract

1	Introdução	p. 4
1.1	Espectroscopia e Mecanismos de Alargamento	p. 4
1.2	Anãs Brancas	p. 8
1.3	A Quase-molécula H_2^+	p. 15
2	Fundamentação teórica	p. 20
2.1	Teoria de Impacto	p. 20
2.2	Aproximação Quase-estática	p. 22
2.3	Método Quântico	p. 23
2.4	Teoria Unificada	p. 24
2.4.1	Abordagem Quântica do Modelo de Anderson-Talman	p. 28
3	Modelo Computacional	p. 37
4	Resultados	p. 44
4.1	Série de Lyman	p. 47
4.1.1	Lyman- α	p. 49
4.1.2	Lyman- β	p. 57
4.1.3	Lyman- γ	p. 60
4.1.4	Lyman- δ	p. 63
4.2	Série de Balmer	p. 66
4.2.1	Balmer- α	p. 69
4.2.2	Balmer- β	p. 71
4.2.3	Balmer- γ	p. 73

4.2.4	Balmer- δ	p. 76
4.2.5	Balmer- ϵ	p. 78
4.2.6	Balmer-8, Balmer-9 e Balmer-10	p. 80
5	Conclusões	p. 87
	Apêndice A – Regras de seleção	p. 90
	Apêndice B – Teorema de Wiener-Khinchin	p. 91
	Referências Bibliográficas	p. 92

Agradecimentos

Agradeço a todos os professores que tive ao longo dos anos, pois cada um deles foi importante à sua maneira, seja com seus ensinamentos ou com seus questionamentos. Minha gratidão em especial ao meu orientador, Prof. Dr. Kepler de Souza Oliveira Filho, que além de um grande mestre, exigente e paciente com seus orientandos, é também um excelente exemplo como pesquisador. Também ao Prof. Dr. Detlev Koester, por toda a sua atenção e pelo tempo que dedicou em auxiliar-me a deixar o meu trabalho o melhor possível, e ao Prof. Dr. Rene Rohrmann, que me ajudou a compreender muito da física necessária no desenvolvimento deste trabalho.

Quero agradecer também aos meus colegas de pesquisa: Márcio G. dos Santos, Alejandra D. Romero, Fabíola Campos e Elizandra Martinazzi, por todos os conselhos e tapinhas no ombro e por sempre proporcionarem as discussões e reuniões mais produtivas (e divertidas!).

Aos meus amigos, cujos nomes não cito para não correr o risco de esquecer alguém dessa lista que só cresce, agradeço o companheirismo, seja enfrentando a fila do RU, vencendo a lista de Teoria Eletromagnética ou escalando uma montanha de batata frita com queijo. Vale uma menção especial ao melhor amigo de todos, que suportou todos os percalços de um relacionamento com uma pós-graduanda em física — da “nerdice” à falta de tempo — com mais paciência e amor do que se pode descrever: meu namorado, Jonas.

À minha família, agradeço pelo apoio, por terem sempre entendido as minhas ausências e (quase) nunca terem questionado minha escolha profissional. Aqui a menção especial é ao meu irmão Pedro Lucas, que desde as primeiras palavras é o maior “perguntador de por quês” que eu conheço, de modo que sempre me fez querer entender melhor o mundo para poder satisfazer a curiosidade dele e despertou, assim, o meu eu cientista.

This is one corner... of one country, in one continent, on one planet that's a corner of a galaxy that's a corner of a universe that is forever growing and shrinking and creating and destroying and never remaining the same for a single millisecond. And there is so much, so much to see.

— *The Doctor*

Resumo

Quando um átomo colide com outras partículas durante um processo de emissão ou absorção de fótons, seu espectro é afetado por essa interação. Esse efeito é conhecido por alargamento colisional ou alargamento por pressão e é um dos diversos mecanismos de alargamento que pode afetar uma linha espectral. A diferença entre esse mecanismo e os demais é a possibilidade de formação de um estado ligado transiente entre partícula radiadora e perturbadores durante a colisão. Esse estado é chamado quase-molécula e tem um espectro de energia distinto daquele das partículas isoladas. Assim sendo, além do alargamento, há a possibilidade de formação de linhas em comprimentos de onda que não podem ser explicados se considerado o espectro das partículas isoladas. Essas linhas são chamadas satélites, e sua presença também induz assimetrias no perfil e mudança na opacidade do gás, o que, no caso de atmosferas estelares, altera a cor das estrelas.

Satélites já foram detectadas no espectro ultravioleta de estrelas anãs brancas com temperaturas próximas a 15000K. Apesar dessas identificações preliminares, ocorridas nos anos 1980, modelos de atmosfera que incluam consistentemente os efeitos quase-moleculares ainda não existem. Com o advento de grandes projetos de mapeamento do céu, como o *Sloan Digital Sky Survey* (SDSS), o número de anãs brancas conhecidas está crescendo significativamente. No *data release 7* do SDSS, encontramos 19712 (Kleinman *et al.*, 2013), duplicando o número de anãs brancas conhecidas. Com os *data releases 9* e *10*, descobrimos outras 8800 (Kepler *et al.*, 2014). A boa determinação da temperatura e da massa dessas estrelas, que é importante para o entendimento do histórico de formação estelar na nossa Galáxia, depende do conhecimento da forma das linhas de Balmer, que são as mais fortes em cerca de 80% das anãs brancas. Como elas são afetadas pelas colisões com os prótons livres da atmosfera parcialmente ionizada das anãs brancas, é importante que esse efeito seja considerado.

Por isso, desenvolvemos um código que permite o cálculo das contribuições quase-moleculares do H_2^+ ao espectro do átomo de hidrogênio. O método escolhido foi a teoria unificada em seu desenvolvimento quântico, conforme proposto por Allard *et al.* (1999), pois ela permite determinar a forma completa da linha. Utilizamos os dados disponibilizados por Santos & Kepler (2012) para calcular as contribuições do H_2^+ à série de Lyman até Lyman- δ e à série de Balmer até Balmer-10. Em seu trabalho, eles também obtiveram os perfis para todas essas linhas na aproximação quase-estática, mas tal método, devido à suposição de velocidade nula, não é válido para o centro da linha. Obtivemos os perfis em densidades de perturbadores e temperaturas que podem descrever bem a atmosfera de estrelas anãs brancas. Todos os satélites já observados foram identificados, juntamente com outros ainda não detectados. Além disso, o código foi escrito de forma que leia quaisquer potencial e momento de dipolo dados, de modo que ele pode ser utilizado para avaliar contribuições devido a outras partículas. Esperamos que os perfis obtidos possam ser incluídos em modelos de atmosfera para estrelas anãs brancas e que este estudo possa ser estendido para incluir as contribuições importantes de outros perturbadores.

Abstract

When an atom collides with particles during a process of emission or absorption of a photon, its spectrum is affected by this interaction. Such effect is known as collisional broadening or pressure broadening and it's one of many broadening mechanisms that can affect a spectral line. The difference between such mechanism and others is the possibility of formation of a transient bound state between radiating particle and perturbers during the collision. Such state is known as quasi-molecule, and it has an energy spectra different than the one by isolated particles. So, besides the broadening, there is also the possibility of lines forming at wavelengths that can not be explained in terms of the spectra of the isolated particles. Those lines are called satellites, and its presence also induces asymmetries in the profile and changes in the gas opacity, what, in the case of stellar atmospheres, alters the color of the stars.

Satellites were already detected in the ultraviolet spectra of white dwarf stars with temperatures around 15000K. In spite of those early identifications, done in the 1980s, atmosphere models that take quasi-molecular effects fully in account still do not exist. With the advent of large projects of sky mapping, such as *Sloan Digital Sky Survey* (SDSS), the number of known white dwarfs is significantly growing. In the data release 7 of SDSS, we found 19712 (Kleinman *et al.*, 2013), doubling the number of known white dwarfs. With data releases 9 and 10, we discovered another 8800 (Kepler *et al.*, 2014). The good determination of temperature and mass for those stars, which is important to the understanding of the history of star formation in our Galaxy, depends on the knowledge of the shape of the Balmer lines, that are the strongest ones in around 80% of white dwarfs. As they are affected by collisions with free protons of the partially ionized atmosphere of the white dwarfs, it is important that such effect be considered.

Thus, we developed a code that allows the calculation of quasi-molecular H_2^+ contributions to the spectrum of the hydrogen atom. The chosen approach was the unified theory in its quantum-mechanical development, as proposed by Allard *et al.* (1999), because it allows the determination of the shape of the whole line. We used data provided by Santos & Kepler (2012) to evaluate H_2^+ contributions to the Lyman series up to Lyman- δ and to the Balmer series up to Balmer-10. In their work, they also obtained the profiles for all those lines in the quasistatic approach, but that method, due to its assumption of zero velocity, is not valid for the line center. We obtained the profiles at perturber densities and temperatures that can describe well the atmosphere of white dwarfs stars. All the satellites already observed are identified, together with others not yet detected. Besides that, the code was written in a way that it reads any given potential energy and dipole moment data, so it can be used to evaluate contributions due to other particles. We hope that the obtained profiles can be included in atmosphere models for white dwarf stars and that this study can be extended to include contributions due to other important perturbers.

1 *Introdução*

1.1 Espectroscopia e Mecanismos de Alargamento

A composição química de um gás e algumas de suas propriedades físicas podem ser inferidas a partir de seu espectro, o qual apresenta uma medida da energia emitida por unidade de tempo, de área e de ângulo sólido por comprimento de onda ou, equivalentemente, por frequência. As contribuições ao espectro podem ser divididas em contínuo, que é a emissão térmica do gás como um todo, e linhas de absorção ou emissão, as quais decorrem da interação dos fótons diretamente com os átomos e as moléculas que compõem o gás.

O contínuo é explicado pela radiação eletromagnética emitida pela matéria aquecida do gás. Ele pode ser aproximado pela radiação de um corpo negro, se assumido equilíbrio termodinâmico e considerado que a densidade do gás é alta o suficiente para que ele seja opaco, o que permite uma estimativa da temperatura por meio do ajuste de uma lei de Planck,

$$I_\lambda = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1}, \quad (1.1)$$

onde λ é o comprimento de onda, h é a constante de Planck, c é a velocidade da luz, k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura do gás. Essa estimativa, em geral, não é satisfatória, pois — além de um corpo negro ser apenas uma idealização — o contínuo é afetado pela presença das linhas espectrais provenientes das camadas mais externas e de menor densidade do gás, na região ópticamente fina, as quais devem ser consideradas para que o modelo seja realista.

A existência das linhas espectrais é explicada pelos saltos quânticos realizados pelos elétrons entre os níveis de energia dos átomos ou moléculas e, ainda, pela ionização do gás. Como os comprimentos de onda associados a essas transições dependem do elemento químico, a observação das linhas espectrais permite determinar a composição do gás. Em primeira aproximação, a forma das linhas seria de delta de Dirac sobre o exato comprimento de onda correspondente à transição, dado por

$$\lambda = \frac{hc}{E_f - E_i}, \quad (1.2)$$

onde E_f é a energia do nível final do elétron, e E_i é a do nível inicial. Essa situação não é, todavia, observada experimentalmente, em razão dos diferentes mecanismos de alarga-

mento que afetam a linha espectral. A linha passa, então, a ter uma forma específica, chamada de perfil. A forma do perfil depende de parâmetros físicos do gás, como temperatura, densidade e campo eletromagnético, que determinam quais os mecanismos de alargamento atuantes. A linha espectral observada é uma convolução dos perfis resultantes de todos os mecanismos de alargamento presentes, já que os diferentes mecanismos podem afetar simultaneamente o comportamento do elétron em uma transição. Com um bom modelo para a linha pode-se, portanto, estimar os parâmetros físicos médios do gás por meio de ajuste de modelos aos dados observados.

Um efeito, em geral não dominante, mas bastante elementar e presente em qualquer gás, é o chamado alargamento natural. Ele é uma consequência direta do princípio de incerteza de Heisenberg entre tempo e energia,

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (1.3)$$

onde \hbar é a constante de Planck reduzida, $h/2\pi$. Esse princípio dita que a largura do nível de energia ΔE vezes o tempo de decaimento Δt de um elétron nesse nível possui um limite inferior. Assim sendo, essas quantias devem ser limitadas, de modo que a largura da linha em comprimento de onda, que se relaciona com a largura em energia por meio da equação 1.2, é finita.

Outra forma de interpretar esse mecanismo é lembrando que a população do nível inicial — não sendo ele o estado fundamental — decai exponencialmente com o tempo para estados de maior estabilidade, o que leva à redução da intensidade do pulso de luz devido a essa transição. Pode-se escrever a amplitude $a(t)$ da emissão de luz em função do tempo como

$$a(t) = \text{Re} \left\{ a_0 e^{-\gamma t} e^{i\omega_0 t} \right\} \quad (1.4)$$

$$= a_0 e^{-\gamma t} \cos(\omega_0 t), \quad (1.5)$$

onde γ é a taxa de decaimento e ω_0 é a frequência angular correspondente à diferença de energia entre os dois níveis da transição, $\omega_0 = (E_f - E_i)/\hbar$. A amplitude no espaço de frequências pode ser calculada pela transformada de Fourier de $a(t)$:

$$A(\omega) = \int_0^\infty a(t) e^{-i\omega t} dt \quad (1.6)$$

$$= a_0 \int_0^\infty e^{-\gamma t} \cos(\omega_0 t) e^{-i\omega t} dt \quad (1.7)$$

$$\approx \frac{a_0}{2[i(\omega - \omega_0) + \gamma]}, \quad (1.8)$$

onde apenas o termo ressonante, que é dominante, foi mantido. A potência emitida em cada frequência angular ω , que está associada à forma da linha, é proporcional ao módulo quadrado da amplitude, ou seja

$$P(\omega) = \frac{C}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2}, \quad (1.9)$$

onde C é constante de normalização. A expressão dada por 1.9 corresponde a uma linha de forma lorentziana centrada em ω_0 e de largura à meia altura γ , como a da figura 1.1.

Já o alargamento devido ao efeito Doppler é mais importante, sendo, em geral, dominante em gases à temperatura ambiente. Ele ocorre em razão do movimento dos átomos em relação ao observador, que é consequência de sua energia térmica. Para um gás em equilíbrio térmico, a velocidade v das partículas de massa m segue uma distribuição de Maxwell-Boltzmann, dada por:

$$P(v)dv = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} dv. \quad (1.10)$$

Pode-se expressá-la em termos da frequência angular ω , respeitando

$$P(\omega)d\omega = P(v)dv = P(v)\frac{dv}{d\omega}. \quad (1.11)$$

As quantidades v e ω são relacionadas pelo efeito Doppler, que, para velocidades não-relativísticas, implica:

$$\omega = \omega_0 \left(1 + \frac{v}{c}\right) \Rightarrow v = c \left(\frac{\omega}{\omega_0} - 1\right). \quad (1.12)$$

Substituindo a expressão de 1.12 em 1.11, obtém-se

$$P(\omega) = \sqrt{\frac{mc^2}{2\pi k_B T \omega_0^2}} e^{-\frac{mc^2(\omega - \omega_0)^2}{2k_B T \omega_0^2}}, \quad (1.13)$$

que pode ser reconhecida como uma gaussiana centrada em ω_0 e com largura à meia altura $\Delta\omega_{\text{FWHM}} = \sqrt{\frac{8k_B T \ln 2}{mc^2}} \omega_0$, exemplificada na figura 1.1.

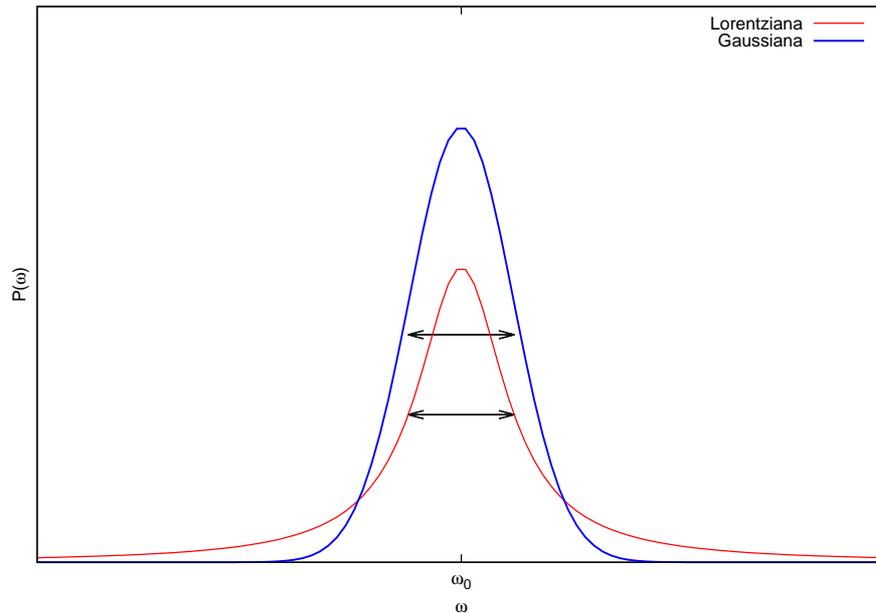


Figura 1.1: Comparação entre linhas lorentziana, resultado do alargamento natural, e gaussiana, causada pelo efeito Doppler, de mesma largura à meia altura.

Na presença de um campo elétrico, que pode ser causado pelos próprios elétrons e/ou íons livres no plasma, ocorre o efeito Stark, que também causa alargamento da

linha. Se o campo elétrico tem uma direção definida, a possível simetria de rotação do hamiltoniano da partícula radiadora é quebrada. No caso dessa partícula ser o hidrogênio, por exemplo, a degenerescência dos níveis atômicos no número quântico ℓ é levantada. Em razão disso, um maior número de transições, com frequências ligeiramente distintas, é acessível, alargando — ou mesmo separando em componentes — cada linha espectral.

Não existe solução exata para o caso do alargamento Stark, sendo necessário o uso de aproximações ou teorias de perturbação. Para campos fracos, em que a perturbação tem energia muito menor do que a energia original da partícula, pode-se utilizar teoria de perturbação de primeira ordem, e as correções na energia serão lineares na intensidade do campo elétrico (*efeito Stark linear*). No caso de campos um pouco mais fortes, torna-se necessário o uso de correções de segunda ordem, que são quadráticas na intensidade do campo (*efeito Stark quadrático*). Se a contribuição do campo elétrico for maior que a energia dos níveis eletrônicos, é necessário utilizar a teoria de Landau, na qual são quantizadas as órbitas de ciclotron dos elétrons.

Em geral, o perfil de linha devido ao alargamento Stark é calculado realizando-se a média ponderada sobre os perfis causados por configurações eletrônicas distintas, ou seja

$$I(\omega) = \int_0^\infty P(F)I(\lambda; F)dF, \quad (1.14)$$

onde $P(F)$ é a distribuição que descreve a probabilidade de que se tenha uma configuração eletrônica que resulte em um campo de intensidade F e $I(\lambda; F)$ é o perfil resultante dessa determinada configuração. Existem diferentes aproximações para determinar $I(\lambda; F)$, desde considerá-lo uma constante [1], até teorias quânticas mais complexas, como a de Vidal, Cooper & Smith (1970), que leva em conta efeitos não-ideais [2].

Além do campo elétrico, o gás pode estar sujeito também a um campo magnético, o que causa o efeito Zeeman. Tal campo pode, novamente, ser causado por partículas livres carregadas movendo-se no plasma e/ou por um efeito externo. Na maioria dos casos, a amplitude do campo magnético é muito menor que a do campo elétrico, de forma que esse efeito é desprezível. Contudo, quando há algum agente que cause um campo maior, esse efeito torna-se importante. Assim como no caso do efeito Stark, o que ocorre é a quebra da simetria de rotação, separando níveis de energia antes degenerados. Novamente, pode-se ter apenas alargamento ou desdobramento da linha em componentes, dependendo da intensidade do campo.

Outra forma de interpretar o alargamento Stark é assumindo que os elétrons livres colidem com as partículas do gás. Esse alargamento por colisões, também chamado alargamento por pressão, pode ocorrer devido a qualquer partícula perturbadora que se encontre no gás, ou mesmo devido às colisões entre partículas do próprio gás. Para um gás de hidrogênio parcialmente ionizado, por exemplo, calcula-se o efeito Stark nas linhas devido aos elétrons e, para contabilizar a contribuição dos prótons, é de hábito apenas multiplicar a densidade de perturbadores por dois, resultando simplesmente em um alargamento maior.

Já no caso das colisões entre as partículas neutras do próprio gás, existe a força de van der Waals, que se deve à interação entre os dipolos das partículas, sejam eles permanentes ou induzidos. O potencial para essa interação é, normalmente, aproximado por um potencial tipo Lennard-Jones ($\sim r^{-6}$). Esse efeito também está presente em qualquer gás,

como o alargamento natural, mas é mais significativo em gases não-ionizados. No caso de a partícula em um estado excitado interagir com uma partícula idêntica no estado fundamental, pode ocorrer também o alargamento ressonante, cuja interação é proporcional a r^{-3} . Esse efeito também só é significativo em gases não-ionizados.

Em nenhuma dessas abordagens é considerada, no entanto, a formação de estados ligados transientes entre a partícula radiadora e o perturbador, que pode ser importante sob condições de temperatura e pressão adequadas. Esses estados são chamados *quase-moléculas* e possuem níveis de energia distintos dos da partícula isolada original, o que leva à existência de transições cuja contribuição em fluxo difere do que seria esperado em uma situação ideal não-interagente. Assim, a linha não só é alargada devido ao processo de colisão, mas pode também apresentar linhas em comprimentos de onda inesperados, correspondentes ao estado ligado entre partícula radiadora e perturbador, chamadas *linhas-satélite*.

1.2 Anãs Brancas

Todos os mecanismos de alargamento citados podem ser observados no espectro de estrelas anãs brancas. Essas estrelas são o estágio evolutivo final de mais de 97% das estrelas, incluindo o Sol [3]. São o resultado da perda das camadas externas da estrela progenitora e são compostas por um núcleo de matéria parcialmente degenerada que corresponde a cerca de 99.9% da massa da estrela e uma fina atmosfera, com espessura de apenas 1% do raio da estrela, que tem raio total da ordem do raio da Terra. A massa média das anãs brancas é cerca de $0.6M_{\odot}$ [4], o que implica em densidades altíssimas, da ordem de 1 ton/cm^3 . Elas normalmente não realizam fusão nuclear e apenas esfriam muito lentamente.

A composição química da anã branca depende principalmente da massa da progenitora, que limita o tempo em que ela poderá realizar fusão de elementos no seu núcleo e ainda permanecer estável. A metalicidade da progenitora também é um fator importante, pois afeta a convecção e o processo de perda de massa. Basicamente, para progenitoras com massa até 7 a $8M_{\odot}$, o núcleo da anã branca resultante é composto de carbono e oxigênio. Se a progenitora tem massa entre $7M_{\odot}$ e 8 a $10M_{\odot}$, dependendo novamente da metalicidade, o núcleo da anã branca terá oxigênio, neônio e magnésio. No caso de anãs brancas provenientes de estrelas de baixa massa ou resultantes de sistemas binários, pode-se ter núcleo de hélio.

A classificação das anãs brancas dá-se a partir dos elementos que são observados em seu espectro, ou seja, presentes na camada mais externa de sua atmosfera. Em cerca de 80% dos casos, detecta-se somente hidrogênio e a estrela é classificada como DA (a letra “D” refere-se à degenerescência do núcleo da estrela, e a letra “A” refere-se à atmosfera de hidrogênio, de forma análoga à classificação de estrelas da sequência principal), mas em uma fração significativa (em torno de 10 – 15%), detecta-se hélio, caso em que a anã branca é classificada como DB, se o hélio é neutro, ou DO, se é ionizado. A detecção simultânea de hidrogênio e hélio também é comum (DABs, ou DBAs, dependendo do elemento que prevalece). Pode-se ainda observar carbono, trazido do núcleo por uma camada convectiva, e a anã branca é chamada de DQ. Quando há levitação radiativa ou acreção contínua de outros elementos (usualmente chamados pelos astrônomos de metais,

independente de seu grupo químico), de forma que eles possam ser observados antes de difundirem para o núcleo, a classificação é DZ. Atualmente acredita-se, inclusive, que parte significativa dos metais detectados em anãs brancas provém da acreção de planetesimais [5, 6].

O alargamento dominante nas anãs brancas é comumente o devido ao efeito Stark (figura 1.2). Em cerca de 5–10% das anãs brancas, tem-se campo magnético forte causando efeito Zeeman [7], o que permite a observação do desdobramento das linhas em componentes (figura 1.3). Por fim, para um intervalo restrito em temperatura efetiva (entre 8000K e 25000K, aproximadamente), a temperatura é alta o suficiente para que existam prótons livres na atmosfera, mas ainda é baixa o bastante para permitir a formação de quase-moléculas, que poderão ter uma contribuição importante no espectro. Na figura 1.4, por exemplo, nota-se a existência de duas linhas de menor intensidade além da linha central Lyman- α : uma em 1400Å e outra em 1600Å.

Essas duas linhas foram detectadas pela primeira vez no espectro de estrelas anãs brancas em dados obtidos com o *International Ultraviolet Explorer* (IUE) de estrelas com temperaturas da ordem de 15000K. A primeira a ser reportada foi a linha próxima a 1400Å, que foi observada por Jesse Greenstein, em 1980, no espectro de 40 Eri B [8], considerada uma DA típica. Dois anos mais tarde, Gary Wegner observou absorção semelhante no espectro da estrela LB 3303 [9].

Diferentes hipóteses foram levantadas por Greenstein para explicar a presença da linha. Primeiramente, ele notou que o comprimento de onda correspondia a uma transição do Si IV, mas que só ocorreria a temperaturas da ordem de 40000K, ou seja, significativamente superiores às das anãs brancas observadas. Greenstein sugeriu, então, que a linha formar-se-ia em camadas mais internas da estrela, o que exigiria uma alta razão Si/H e uma atmosfera extremamente transparente, o que ele próprio considerou improvável. Outra possibilidade pouco plausível seria um envelope circunstelar frio resultante de acreção. Por último, ele sugeriu que a linha seria uma banda molecular de H₂, apesar da fração de H₂ ser pequena a tais temperaturas, mas a falta de dados teóricos satisfatórios não permitiu que tal hipótese fosse testada.

Em 1985, ao analisarem o espectro de estrelas ZZ Ceti, Holm *et al.* (1985) identificaram, além da absorção em 1400Å, a absorção em 1600Å [10]. Essas estrelas são anãs brancas que estão passando por uma fase de pulsações devido ao surgimento de uma camada convectiva. Apesar da detecção desses satélites ser secundária no artigo, os autores observaram que a intensidade das linhas diminuía com o aumento da temperatura, o que é o contrário do que seria esperado se elas decorressem de uma absorção em algum átomo ionizado. Excluiu-se, então, a possibilidade de que a absorção em 1400Å fosse devida ao Si IV. Além disso, foi apontada a inexistência de outras absorções características do H₂, especialmente a que deveria ser observada em 1334Å, de modo que a hipótese de hidrogênio molecular como explicação também foi descartada. Quanto à absorção em 1600Å, notou-se que ela era coerente com os resultados de Sando & Wormhoudt [11], que calcularam o alargamento ressonante de Lyman- α e observaram a existência de linhas-satélite devido à formação de hidrogênio quase-molecular.

A explicação definitiva para essas absorções foi dada no mesmo ano, por Detlev Koester *et al.* (1985) [12]. Utilizando uma aproximação quântica considerando os primeiros vizinhos, conforme sugerido por Szudy & Baylis (1975) [13], eles calcularam não apenas

os perfis teóricos devido ao H_2 quase-molecular, confirmando a hipótese de Holm *et al.* de que isso explicaria a absorção em 1600\AA , mas também devido ao H_2^+ , a quase-molécula formada na interação do hidrogênio com prótons livres. Verificou-se que essa interação com prótons era a real causadora da absorção próxima a 1400\AA . Como o hidrogênio é o elemento dominante na atmosfera das DAs, devido à rápida difusão dos elementos mais pesados para o núcleo, essa explicação foi amplamente aceita.

Com cálculos precisos do efeito das colisões e da formação de quase-moléculas no espectro do átomo de hidrogênio, sua contribuição poderia ser incluída como fonte de opacidade em modelos de atmosfera estelar. Esses modelos essencialmente mapeiam a atmosfera da estrela, calculando pressão e temperatura ponto a ponto, o que permite determinar a opacidade em cada camada e estimar, a partir disso, o espectro observado de uma estrela. Com uma grade dos modelos calculados para diferentes temperaturas e pressões (essa normalmente expressa em termos do logaritmo da gravidade superficial em unidades *cgs*, $\log(g)$), pode-se ajustá-los aos espectros observados e, a partir do modelo com melhor ajuste, estimar a temperatura efetiva e a gravidade das estrelas — que permite, por sua vez, o cálculo da massa, já que, para anãs brancas, existe uma relação entre massa e raio, obtida facilmente considerando que os elétrons no núcleo da anã branca são degenerados. Esse é o método de maior sucesso na obtenção desses parâmetros [14].

Apesar da ampla aceitação, o método de obtenção de parâmetros físicos por meio de ajuste de modelos de atmosfera ainda é incompleto. Muitas aproximações e suposições são feitas nesses modelos, como, por exemplo, que o gás está em equilíbrio termodinâmico local. Modelos fora do equilíbrio termodinâmico (NLTE, da sigla em inglês *non-local thermodynamical equilibrium*) são importantes para estrelas quentes ($T > 40000\text{K}$). Além disso, as tabelas de opacidade não costumam levar em conta contribuições quase-moleculares, ou mesmo de colisões em geral (com exceção do efeito Stark). Em razão dessas limitações e, também, do aumento em número e melhoria em qualidade dos dados espectroscópicos, o desenvolvimento desses modelos e o aperfeiçoamento dos dados de opacidade são assunto ainda de bastante interesse aos astrônomos.

Um exemplo da importância da melhora dos modelos é a questão da massa média das anãs brancas. No trabalho de Kleinman *et al.* (2013) [4], por exemplo, do qual sou coautora, foram analisadas 12843 DAs do *data release 7* do *Sloan Digital Sky Survey Telescope* (SDSS), selecionadas após a inspeção visual de mais de 40000 espectros de possíveis anãs brancas — minha principal contribuição ao trabalho. Dessas, as 3577 com razão sinal-ruído superior a 15 foram utilizadas para estimativa da massa média, resultando em $\langle M \rangle = 0.623 \pm 0.002 M_\odot$. Kepler *et al.* (2006) [15] reportaram, no entanto, uma superestimativa sistemática, da ordem de $M \approx 0.13 M_\odot$, na massa de estrelas com temperatura efetiva inferior a 12000K , especialmente quando utilizados espectros do SDSS. Nesse faixa de temperatura, uma camada convectiva surge na atmosfera das anãs brancas, pois já não existe equilíbrio radiativo. Para evitar essa contaminação, é comum excluir essas estrelas das estimativas de massa. Fazendo isso, Kleinman *et al.* encontraram uma massa média mais baixa, de $\langle M \rangle = 0.593 \pm 0.002 M_\odot$, para as 2217 estrelas restantes.

Para comparação, o valor obtido por Falcon *et al.* (2010) em uma amostra de 449 DAs do *European Southern Observatory Supernova Ia Progenitor Survey* (SPY), pelo método de análise do avermelhamento gravitacional, foi $\langle M \rangle = 0.647^{+0.013}_{-0.014} M_\odot$ [16]. Já Romero *et al.* (2012), por meio da sismologia de 44 ZZ Ceti, encontraram uma massa média de $\langle M \rangle = 0.630 \pm 0.028 M_\odot$ [17]. Ambos valores concordam entre si e são distintos

do valor determinado via espectroscopia por Kleinman *et al.* . Já no recente trabalho de Kepler *et al.* (2014), do qual também participo, reportou-se a descoberta de novas 8800 anãs brancas ou sub-anãs no *data release* 10 do SDSS e, na análise das 5868 novas DAs, obteve-se uma massa média de $\langle M \rangle \approx 0.629 \pm 0.039 M_{\odot}$ [18], consistente com as determinações de Falcon *et al.* e Romero *et al.* . A diferença nesse trabalho é o emprego de uma correção na temperatura efetiva e no $\log(g)$ de estrelas com $T_{\text{ef}} < 15000K$ que leva em conta que a convecção é tridimensional, conforme descrito por Tremblay *et al.* (2013) [19]. A discrepância entre as determinações foi, portanto, resolvida com uma melhoria nos modelos de atmosfera.

A significativa diferença entre as massas espectroscópicas médias para temperaturas acima ou abaixo de 12000K para DAs e 16000K para DBs (conforme reportado por Kepler *et al.* (2014) [18]), no entanto, continua sem explicação. Ela parece ser de fato exclusiva ao método espectroscópico, pois Falcon *et al.* , por exemplo, não encontram diferença significativa quando utilizado o método de avermelhamento gravitacional. No caso das DAs, inicialmente se acreditava que isso poderia ser explicado por uma correlação existente entre temperatura efetiva (T_{ef}) e $\log(g)$ nessa faixa de temperatura: um pequeno aumento em T_{ef} pode ser compensado por uma pequena diminuição em $\log(g)$, considerando o espectro no visível, como é o caso dos obtidos pelo SDSS. Isso resulta, devido à escala logarítmica, em uma diminuição significativa da massa. Assim, se os modelos espectroscópicos convergissem para temperaturas ligeiramente maiores, massas menores seriam encontradas. Kleinman *et al.* (2013) propõem que o fato dessa diferença ser encontrada apenas nos modelos espectroscópicos é um indício de que ela seja, na verdade, uma consequência de efeitos físicos não considerados nesses modelos [4].

Um desses efeitos é a opacidade em razão da formação de quase-moléculas, detectada mais facilmente na região do ultravioleta, conforme a já citada figura 1.4. Assim sendo, é de suma importância que essas opacidades sejam bem determinadas para que elas possam ser, definitivamente, incluídas nos modelos. Além da melhoria nos modelos para a parte visível do espectro, a possibilidade de ajustar os satélites detectados na região do ultravioleta é também importante, pois levaria a uma determinação de pressão e temperatura independente da obtida na região do visível. Isso poderia reduzir significativamente as discrepâncias encontradas na determinação de massas médias e, além disso, melhorar as determinações de temperatura — que, por meio do estudo da taxa de esfriamento, permitem obter a idade das anãs brancas. Essa última possibilidade é de interesse até mesmo para a cosmologia, pois a idade das anãs brancas mais frias, que são objetos extremamente velhos, pode ser utilizada como limite inferior para as idades da Galáxia e do Universo.

Considerados esses fatos, o objetivo deste trabalho é calcular perfis de alargamento colisional devido a colisões entre hidrogênio e prótons livres para futura aplicação em modelos de atmosfera de estrelas anãs brancas. Esses cálculos existem na literatura para um número extremamente reduzido de linhas, pois os dados teóricos para os potenciais de interação e momentos de dipolo entre essas partículas eram limitados, permitindo o cálculo dos perfis apenas até Lyman- γ , para a série de Lyman, e, para a série de Balmer, apenas H α . Essas linhas de baixa ordem (decorrentes de transições com número quântico n pequeno), já calculadas, dependem mais fortemente da temperatura, enquanto linhas de alta ordem são mais afetadas pela pressão. A deficiência em dados começou a ser resolvida apenas em 2012, no artigo de Santos & Kepler [20]. Os dados desse artigo serão, então, utilizados para o cálculo computacional dos perfis teóricos do H $_2^+$ para as principais

linhas das séries de Balmer e de Lyman.

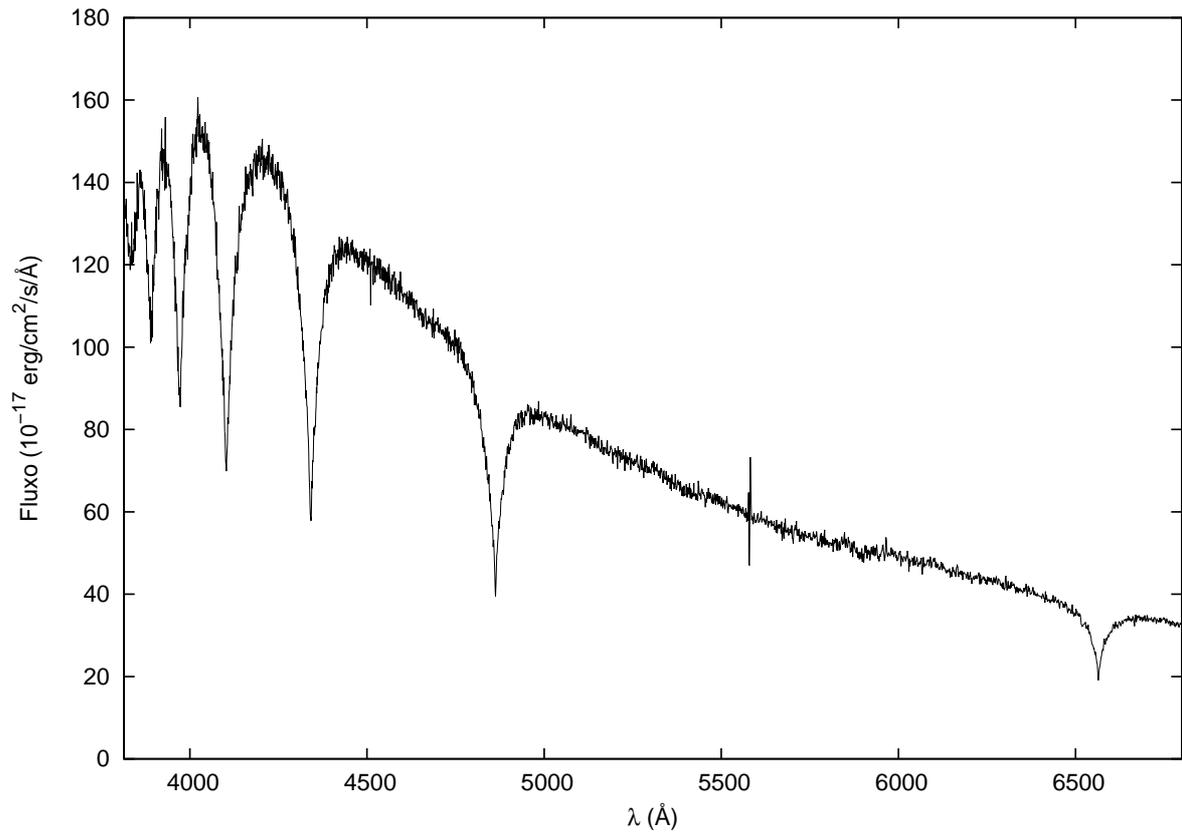


Figura 1.2: Espectro de uma anã branca do tipo DA — que exhibe apenas linhas de hidrogênio —, obtido pelo *Sloan Digital Sky Survey Telescope*, com temperatura efetiva $19500 \pm 100\text{K}$ e massa $0.522 \pm 0.009M_{\odot}$ [4]. Notam-se as linhas da série de Balmer (transições com $n_f = 2$), de H9 ($\lambda=3835\text{Å}$, à esquerda) até H α ($\lambda=6563\text{Å}$, à direita), em absorção. Nessas condições, tem-se tanto alargamentos natural e de van der Waals quanto Doppler, mas o alargamento devido ao efeito Stark é dominante.

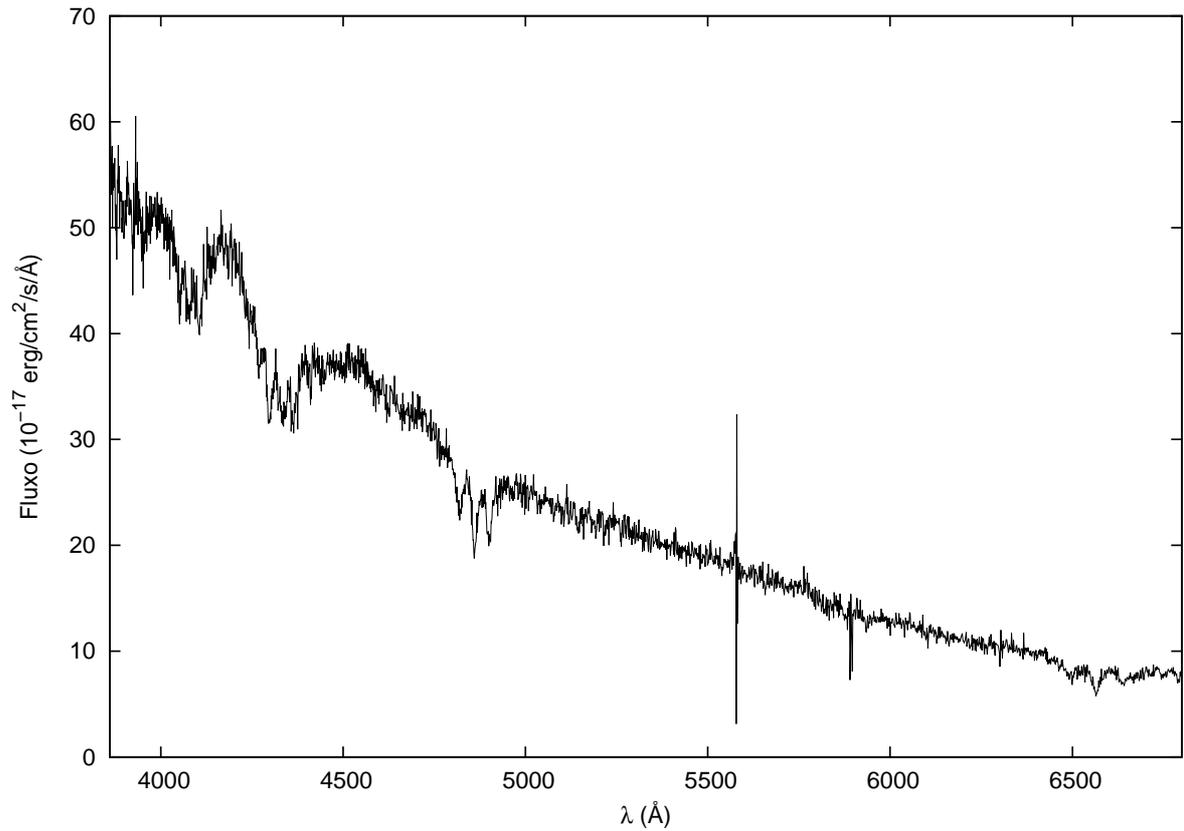


Figura 1.3: Outra anã branca DA obtida com o *Sloan Digital Sky Survey Telescope*, com temperatura efetiva $35800 \pm 280\text{K}$. Aqui percebe-se o desdobramento das linhas da série de Balmer devido à existência de um campo magnético forte, estimado em 6.2MG [7]. Esse efeito dificulta a determinação da massa da estrela via ajuste de modelos ao espectro, pois é necessário também modelar o efeito do campo magnético na estrutura da atmosfera da estrela.

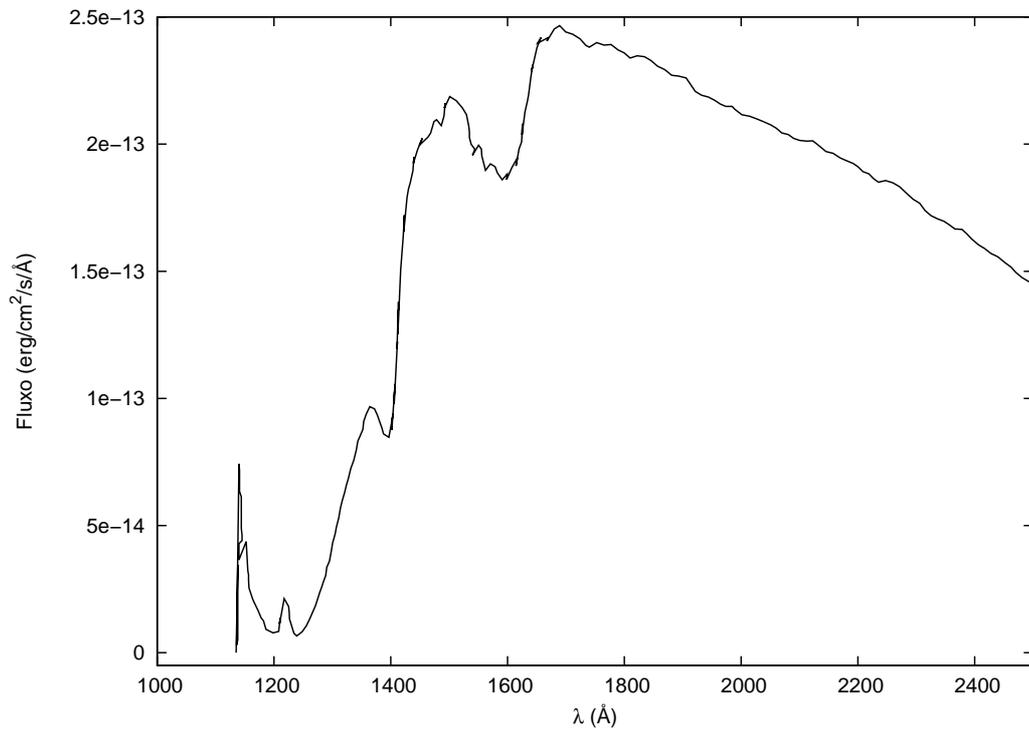


Figura 1.4: Espectro obtido pelo *Hubble Space Telescope* da estrela G226-29, uma DA com temperatura efetiva $11\,750 \pm 20\text{K}$ e massa $0.70 \pm 0.03M_{\odot}$ [21]. Próximo a 1216\AA , observa-se a linha Lyman- α do hidrogênio em absorção (transição de $n = 2$ para $n = 1$), com uma emissão geocoronal em seu centro. Além do evidente alargamento, nota-se também a existência de linhas de absorção próximo aos comprimentos de onda 1400\AA e 1600\AA , as quais não podem ser explicadas por transições do hidrogênio puro, pois originam-se de quase-moléculas [12].

1.3 A Quase-molécula H_2^+

O estado ligado entre um átomo de hidrogênio e um próton, representado por H_2^+ e denominado *cátion dihidrogênio*, é o íon molecular mais simples. Sua formação pode dar-se tanto pela ionização da molécula de H_2 quanto pela colisão entre um hidrogênio e um próton. Em estrelas anãs brancas, nas quais a temperatura é demasiado alta para que a molécula H_2 seja estável, o segundo caso é o relevante. Além disso, o estado será apenas transiente, já a energia de dissociação de seu estado fundamental, que é aproximadamente 2.8eV, equivale a uma temperatura de 32500K, que é da mesma ordem das temperaturas na atmosfera de uma anã branca.

O H_2^+ é composto por dois núcleos, cada qual com um próton, e um elétron. Por conter só um elétron, não há nenhum termo de repulsão eletrônica em seu hamiltoniano, que, considerando as partículas massas pontuais e desprezando interação spin-órbita e efeitos relativísticos, pode ser escrito como:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} (\nabla_{R_A}^2 + \nabla_{R_B}^2) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_e}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_A} + \frac{1}{r_B} - \frac{1}{R} \right), \quad (1.15)$$

onde M é a massa do próton, m é a massa do elétron, ϵ_0 é a constante de permissividade elétrica do vácuo, r_e , R_A e R_B são as distâncias do elétron e de cada um dos prótons ao centro de massa entre os dois núcleos e r_A e r_B são as distâncias do elétron aos núcleos A e B, respectivamente. A equação de Schrödinger para esse hamiltoniano não pode ser resolvida analiticamente, exceto para o caso em que a distância R entre os dois núcleos é fixa [22], quando a equação se reduz a:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_e}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_A} + \frac{1}{r_B} - \frac{1}{R} \right) \right] \Phi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; R) = E(R) \Phi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; R) \quad (1.16)$$

A energia $E(R)$ do elétron nessa configuração, apesar de comumente referida apenas como energia potencial, inclui a atração coulombiana entre o elétron e os núcleos e a energia cinética média do elétron.

A suposição de núcleo fixos está de acordo com a chamada de aproximação de Bohr-Oppenheimer e baseia-se no fato de que os prótons são muito mais massivos do que os elétrons ($m_p \approx 1840m_e$), de modo que suas velocidades são muito menores e, por isso, os elétrons ajustam-se rapidamente a qualquer mudança de configuração dos prótons. A equação é usualmente resolvida por separação de variáveis em coordenadas cilíndricas, e o estado do elétron fica definido por três números quânticos: n , ℓ e λ . O número n identifica os estados eletrônicos em ordem crescente de energia (analogamente ao número quântico principal nos átomos), ℓ é associado ao momento angular $\vec{\ell}$ (que, na verdade, é bem definido apenas para grandes distâncias) e λ é o módulo da projeção do momento angular no eixo definido pelos dois núcleos.

Os possíveis estados do elétron, caracterizados por $n\ell\lambda$, constituem orbitais moleculares. Para o H_2^+ e outras moléculas em geral, eles podem ser aproximados por uma combinação linear de orbitais atômicos (método conhecido por LCAO, da sigla em inglês *linear combination of atomic orbitals*). Os orbitais atômicos são simplesmente os do átomo de hidrogênio e sua combinação segue lógica exemplificada na figura 1.5.

A nomenclatura dos orbitais substitui o valor de ℓ por uma letra latina: s para $\ell = 0$, p para $\ell = 1$, d para $\ell = 2$, f para $\ell = 3$ e, daí por diante, segue-se o alfabeto, pulando a letra j . O λ , por sua vez, é substituído seguindo σ para $\lambda = 0$, π para $\lambda = 1$ e, assim por diante, simplesmente substituindo a letra latina que se teria para o ℓ pela letra grega correspondente. Acrescenta-se ainda um subscrito para indicar a paridade: g para os orbitais cuja função de onda é par ($\ell = 0, 2, 4, \dots$) e u quando ela é ímpar ($\ell = 1, 3, 5, \dots$), que remetem às palavras no alemão *gerade*, par, e *ungerade*, ímpar.

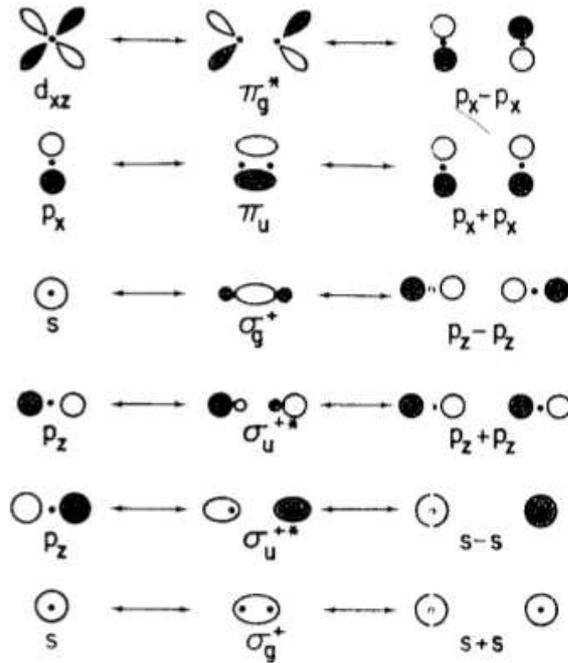


Figura 1.5: Mudança esquemática nos orbitais quando se vai do limite em que as duas partículas formam um átomo unido (*à esquerda*), para orbitais moleculares (*centro*) e daí para o limite em que os átomos podem ser considerados separados (*à direita*). Adaptado de Harris, Daniel C. & Bertolucci, Michael D. [23].

Sendo conhecidos os orbitais da molécula, pode-se construir o diagrama de correlação. Nesse tipo de diagrama, exemplificado na figura 1.6, os estados são ordenados por sua energia em dois limites: de átomos separados e de átomos unidos (ambos prótons formando um só núcleo). Cada um desses níveis tem uma curva de energia potencial característica $E(R)$ (exemplos na figura 1.7), como mencionado anteriormente. Transições entre esses níveis podem ocorrer respeitando, como usualmente, certas regras de seleção (Apêndice A). A probabilidade de que elas ocorram depende do momento de dipolo da transição, que se relaciona à probabilidade de que os dois prótons estejam a uma dada distância R (alguns comportamentos encontram-se na figura 1.8). No limite assintótico, as energias da molécula de H_2^+ vão, simplesmente, para as energias dos diferentes níveis do átomo de hidrogênio, e isso indica a qual linha do átomo a transição da quase-molécula contribui. São essas contribuições que serão estudadas neste trabalho.

Atomo unido		Molecula esferoidal		Efeito Stark	Atomos separados	
n_u	n, l, m	n_ξ, n_η, m	Designação	n_1, n_2, m	n_s	
4	430	4f ₀	030	4fσ _u		
3	300	3s	200	3sσ _g		
	310	3p ₀	110	3pσ _u		
	320	3d ₀	020	3dσ _g		
	311	3p ₁	101	3pπ _u		
	321	3d ₁	011	3dπ _g		
	322	3d ₂	002	3dδ _g		
2	200	2s	100	2sσ _g	100	2s, p
	211	2p ₁	001	2pπ _u	001	
	210	2p ₀	010	2pσ _u	010	
1	100	1s	000	1sσ _g	000	1s

Figura 1.6: Diagrama de correlação para a quase-molécula H_2^+ representando todos os níveis de energia que contribuem para a linha de Lyman- α . Adaptado de Allard *et al.* (1994) [24].

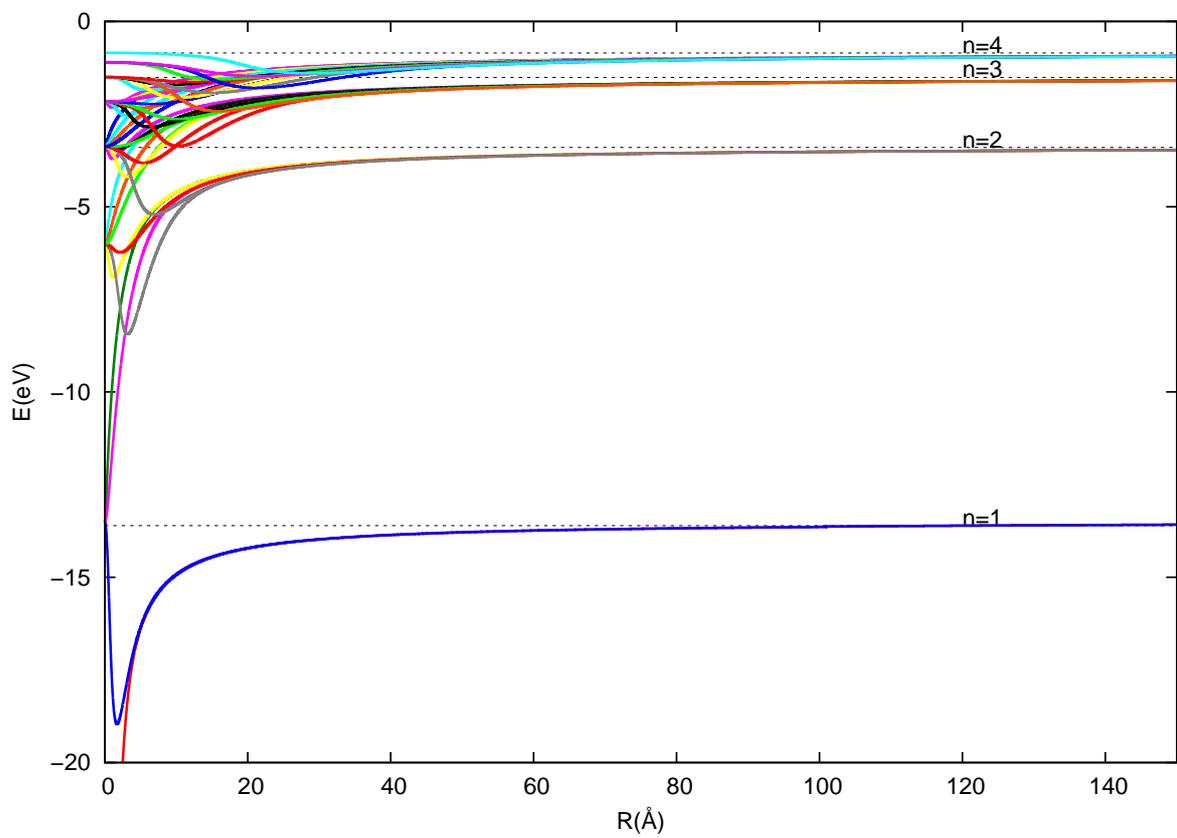


Figura 1.7: Níveis de energia da molécula de H_2^+ que convergem para os níveis de $n=1$ a $n=4$ do átomo de hidrogênio (dados de Santos & Kepler, 2012 [20]).

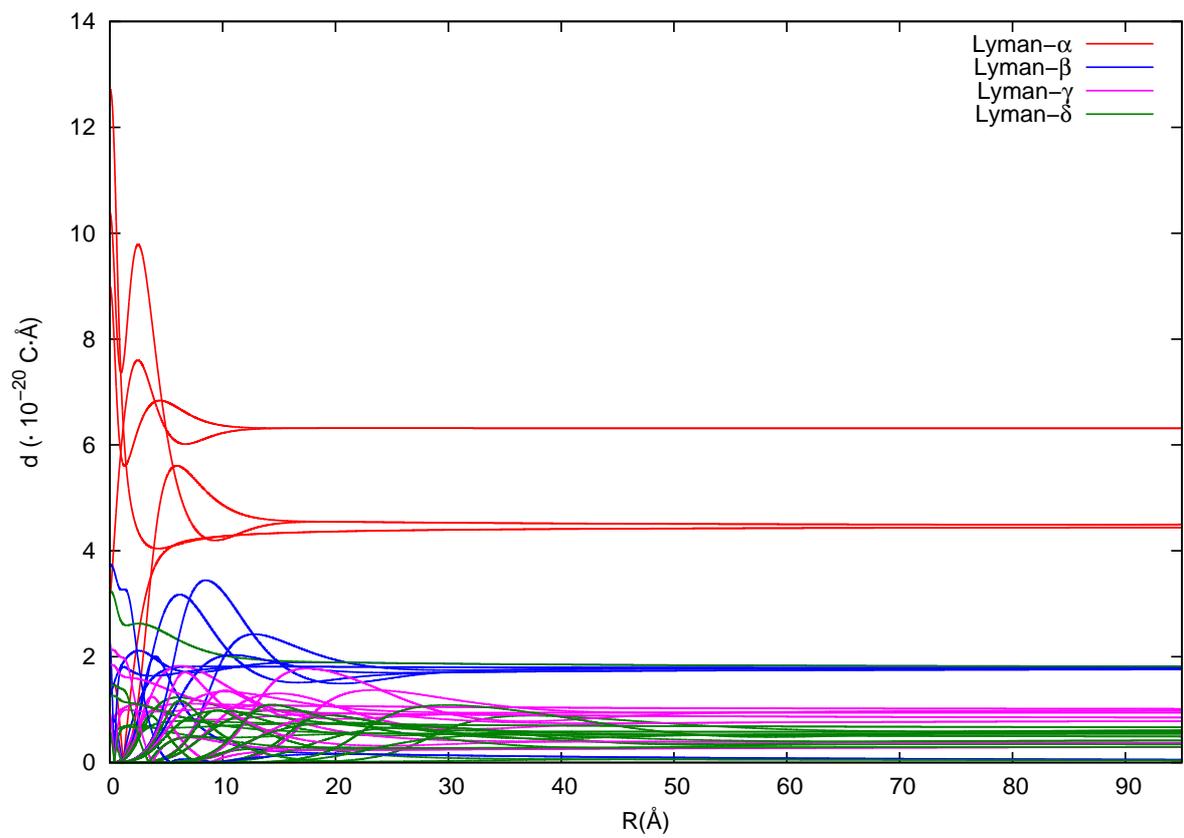


Figura 1.8: Momentos de dipolo da molécula de H_2^+ para as transições que contribuem para Lyman- α , Lyman- β , Lyman- δ e Lyman- γ (dados de Santos & Kepler, 2012 [20]).

2 *Fundamentação teórica*

2.1 Teoria de Impacto

O primeiro a sugerir colisões como um mecanismo de alargamento foi Michelson, em 1895 [25]. Em seu modelo simplificado, ele considera um trem de ondas colidindo sobre um prisma e representa-o por sua transformada de Fourier:

$$\phi(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dk [C \cos(kx) + S \text{sen}(kx)], \quad (2.1)$$

com coeficientes dados por:

$$C = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(u) \cos(ku) du; \quad (2.2a)$$

$$S = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(u) \text{sen}(ku) du. \quad (2.2b)$$

Assim, a intensidade do espectro é, simplesmente, a soma quadrática das amplitudes de cada componente: $\psi(k) = C^2 + S^2$. O efeito da colisão, conforme a suposição de Michelson, seria de interromper o trem de ondas, de forma que ele teria um comprimento limitado, dado por r , o que altera os limites das integrais em 2.2 para o intervalo $[-r/2, r/2]$. Para um trem de ondas monocromático $\phi(x) = a \cos(\kappa x) + b \text{sen}(\kappa x)$, por exemplo, ele obteve

$$\psi^2 = \frac{a^2 + b^2}{4} \frac{\text{sen}^2(\pi nr)}{\pi^2 n^2}, \quad (2.3)$$

onde foi feita a substituição $k - \kappa = 2\pi n$. A largura da linha pode ser estimada pelo primeiro zero dessa função, de onde se obtém que ela é inversamente proporcional ao tamanho r do trem de ondas ou, equivalentemente, ao tempo entre colisões. Diferentes formas e assimetrias seriam explicadas por diferentes frequências e intensidades compondo o trem de ondas.

Tal modelo foi a base para o trabalho de Lorentz, em 1906, em que ele obteve o perfil lorentziano [26]. As principais modificações foram tratar a emissão em termos do seu tempo de duração, em vez do comprimento do trem de ondas, e a adição de uma distribuição de probabilidades descrevendo tal duração. Lorentz considerou que o átomo emitia radiação em uma frequência ω_0 no intervalo de tempo de 0 a T , e que a probabilidade de que o átomo iria irradiar por esse tempo T seria poissônica: $\tau^{-1} e^{-T/\tau}$, onde τ é o tempo médio de duração da emissão. A amplitude da emissão correspondente

a um átomo seria:

$$A(\omega, T) \propto \int_0^T e^{i(\omega - \omega_0)t} dt = \frac{e^{i(\omega - \omega_0)T} - 1}{i(\omega - \omega_0)} \quad (2.4)$$

A intensidade total é simplesmente a média ponderada sobre a emissão de cada átomo, que é proporcional ao módulo quadrado da amplitude emitida, ou seja

$$I(\omega) = \tau^{-1} \int_0^\infty |A(\omega, T)|^2 e^{-T/\tau} dT \propto \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \nu_c^2}, \quad (2.5)$$

onde $\nu_c = 1/\tau$ é a frequência central da emissão, igual à frequência das colisões. Aqui a largura à meia altura é dada por $2\nu_c$, de modo que, novamente, a largura da linha é inversamente proporcional ao tempo entre colisões. Em termos da densidade de perturbadores n , da seção de choque de colisão q e da velocidade v , pode-se escrever $\nu_c = nqv$, de modo que a largura da linha é proporcional à pressão a temperatura constante. Por isso, o alargamento por colisões também é chamado alargamento por pressão.

Uma modificação importante na teoria de impacto foi feita por Lenz (1924, 1933) [27, 28] e por Weisskopf (1932) [29, 30]. Em vez de considerar que a colisão interrompia abruptamente o processo de emissão, como nas teorias anteriores, eles assumiram que os perturbadores teriam efeito a longa distância, devido à existência de um potencial de interação com a partícula radiadora. Assim, a frequência emitida seria gradualmente alterada conforme os perturbadores fossem aproximando-se do radiador, mas a emissão não seria necessariamente interrompida. Para descrever essa alteração, foi introduzido um desvio de fase η , cuja taxa de variação corresponderia à mudança na frequência emitida em relação à frequência original ω_0 :

$$\omega(t) = \omega_0 + \frac{d\eta}{dt}. \quad (2.6)$$

Segundo Weisskopf, uma colisão começaria efetivamente quando o desvio de fase excedesse um radiano — diz-se então que a colisão é ótica, ou seja, seus efeitos podem ser observados. O perfil obtido nessa situação é também lorentziano, mas agora com a largura proporcional a $1/\tau_c$, onde τ_c é o tempo médio entre as colisões óticas.

Lindholm (1945) desenvolveu ainda mais essa teoria assumindo que os desvios de fase dependiam linearmente do tempo de interação entre radiador e perturbador, isto é $\eta = Ct$, com C constante complexa [31]. Com isso, efeitos de colisões a curta distância foram incluídos, o que — assumindo ainda que não há correlação entre as fases antes e depois da colisão — produz um deslocamento do comprimento de onda central da linha, além do alargamento. O perfil encontrado por Lindholm foi da forma

$$I(\omega) = \frac{\gamma/\pi}{(\omega - \omega_0 - \sigma)^2 + \gamma^2}, \quad (2.7)$$

onde a largura à meia altura γ e o deslocamento σ são determinados a partir dos desvios de fase.

Geralmente, o centro de uma linha real alargada por colisões é bem descrito pela teoria de impacto, mas as asas não o são. A razão para isso é que tal teoria considera mudanças súbitas de fase, o que significa dizer que elas estão limitadas a um intervalo

de tempo Δt pequeno. Considerando todas as frequências angulares possíveis ω que se obtêm ao realizar a transformada de Fourier, isso significa que

$$\Delta t \ll \frac{2\pi}{\Delta\omega}, \quad (2.8)$$

onde $\Delta\omega$ é a frequência angular medida a partir do centro da linha. Analogamente, pode-se exigir que a duração Δt da colisão seja pequena comparada com o tempo entre colisões ($\sim 2\pi/\Delta\omega$). Essa desigualdade é mais facilmente satisfeita para valores pequenos de $\Delta\omega$, ou seja, próximo ao centro da linha.

2.2 Aproximação Quase-estática

Ao analisar o limite de validade da aproximação de impacto, é natural questionar o que ocorre no outro extremo, quando a duração da colisão é muito maior que o tempo entre colisões. Esse é o limite da aproximação quase-estática, que foi desenvolvida por Kuhn (1934, 1937) [32–34] e Kuhn & London (1934) [35]. Tal aproximação é válida para o comportamento longe do centro da linha, nas asas, em que a inequação complementar à dada por 2.8 é satisfeita. Outra importante simplificação é feita comumente nessa aproximação. Como a asa da linha é dada por frequências distantes da original, é razoável deduzir que ela deve-se majoritariamente a colisões a distâncias curtas, de modo que a frequência emitida é de fato alterada significativamente. Nesse caso, interações com apenas um perturbador tornam-se predominantes, e o efeito de múltiplos perturbadores pode ser desprezado.

Considera-se que um perturbador a uma distância R produz uma alteração $\Delta\omega = \omega_0 - \omega$ sobre a frequência original ω_0 . A intensidade em cada $\Delta\omega$ será, portanto, proporcional à probabilidade de um dos perturbadores encontrar-se entre R e $R + dR$. Sendo n a densidade de perturbadores, tem-se:

$$I(\Delta\omega)d\omega \propto n4\pi R^2 dR \Rightarrow I(\Delta\omega) \propto 4\pi n R^2 \left| \frac{d\omega}{dR} \right|^{-1}. \quad (2.9)$$

A intensidade pode, por conseguinte, ser calculada se $\omega(R)$ for conhecido. Sabe-se, contudo, que ele é relacionado com a diferença de potencial $\Delta V(R)$ entre os estados final e inicial das partículas por meio de $\hbar\omega = \Delta V(R)$, de onde se obtêm a expressão fundamental da aproximação quase-estática:

$$I(\Delta\omega) = C 4\pi n \hbar R^2 \left| \frac{d\Delta V}{dR} \right|^{-1}, \quad (2.10)$$

onde C é a constante de normalização. Dessa expressão, fica claro que existirão divergências na intensidade nos pontos em que existem extremos na diferença de potencial $\Delta V(R)$, ou seja, onde há a formação de um estado ligado quase-estático. As linhas satélites encontram-se justamente nesses pontos; sua forma, contudo, não pode ser bem determinada unicamente por esse método devido à ocorrência da divergência.

Essa aproximação, com uma abordagem mais rigorosa, foi utilizada com sucesso por Kowalski & Saumon (2006) [36] e Rohrmann *et al.* (2011) [37] para modelar a opacidade

de anãs brancas DAs frias ($T_{\text{ef}} < 5000K$) na região do máximo de emissão, $\lambda \leq 5000\text{\AA}$. Antes, o fluxo nessa região era sistematicamente superestimado, pois o efeito de colisões com prótons e átomos de hidrogênio na asa distante de Lyman- α era desprezado, embora, como foi provado, fosse importante. Em seu artigo, Rohrmann *et al.* enfatizam ainda algumas outras aproximações feitas nesse método.

Uma delas é a aproximação de Bohr-Oppenheimer, que permite a separação da função de onda em seus componentes nucleares e eletrônicos. Com isso, considera-se que os núcleos movem-se em uma única superfície de energia potencial, de modo que suas posições são parâmetros constantes na determinação dessa superfície, gerada pelos elétrons. As transições se dão entre essas superfícies, e a energia do fóton associado é a diferença entre os potenciais final e inicial no ponto em que ocorre a transição, como dita o princípio de Franck-Condon, segundo o qual uma transição ocorre com maior probabilidade se não ocorre mudança na posição dos núcleos (“transição vertical”). Além disso, assume-se que as colisões são adiabáticas: a curva de energia não é alterada durante a colisão. As duas primeiras suposições são, geralmente, comuns a todos os métodos. A adiabaticidade não é, contudo, exigida no método quântico, que será sumarizado a seguir.

2.3 Método Quântico

A base do método quântico é a chamada aproximação molecular, desenvolvida por Jabłoński em uma série de artigos [38–45]. Nessa aproximação, o radiador e os N perturbadores são tratados como uma única quase-molécula, e a equação de Schrödinger para o sistema é resolvida assumindo que a aproximação de Bohr-Oppenheimer é válida.

Considera-se que uma mudança ε na energia translacional total do sistema (radiador e N perturbadores) pode ser descrita por meio da distribuição de probabilidades $\int_{\Delta\varepsilon} P(\varepsilon)d\varepsilon$. A quantidade ε relaciona-se diretamente com a frequência emitida ω por meio de

$$\omega = \omega_0 + \varepsilon/\hbar, \quad (2.11)$$

onde ω_0 é a frequência da linha não perturbada.

A obtenção de $P(\varepsilon)d\varepsilon$ parte do princípio de que a mudança total ε na energia pode ser descrita em termos das mudanças ε_i de cada uma das i partículas,

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i, \quad (2.12)$$

de modo que a distribuição de probabilidades $P(\varepsilon)$ relaciona-se com o produto entre as distribuições individuais $P(\varepsilon_i)$, as quais são dadas por

$$\int_{\Delta\varepsilon_i} P(\varepsilon_i)d\varepsilon_i = \int_{\Delta\varepsilon_i} [(1 - \epsilon)\delta(\varepsilon_i) + W(\varepsilon_i)]d\varepsilon_i \quad (2.13)$$

onde $\Delta\varepsilon_i$ pode ser arbitrariamente pequeno. O termo $\epsilon = \int_{\Delta\varepsilon_i} W(\varepsilon)d\varepsilon_i$ denota a probabilidade da energia da partícula i ser alterada por uma quantia ε_i , correspondendo à contribuição das colisões. Já o outro termo, $(1 - \epsilon)\delta(\varepsilon_i)$, onde $\delta(\varepsilon_i)$ é uma delta de Dirac, representa a probabilidade da energia permanecer inalterada, dando a contribuição na

posição original ω_0 à intensidade da linha perturbada.

Conforme mostrado por [43], obtém-se que

$$\int_{\Delta\varepsilon} P(\varepsilon)d\varepsilon = \int_{\Delta\varepsilon} \left[\delta(\varepsilon)e^{\varepsilon N} + \sum_{i=1}^N \binom{N}{i} W^{(i)}(\varepsilon)e^{-\varepsilon(N-i)} \right] d\varepsilon, \quad (2.14)$$

sendo $W^{(i)}(\varepsilon)$ calculado a partir de

$$W^{(i)}(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} W^{(i-1)}(\varepsilon - \varepsilon_i) W^{(i)}(\varepsilon_i) d\varepsilon_i, \quad (2.15)$$

com a probabilidade correspondente a um perturbador no volume de interação dada por:

$$W^{(1)}(\varepsilon) \approx \int_0^{\ell_{\text{máx}}} Q(\ell) A_{n'n''\ell}^2 \frac{dn''}{dE_{n''}} d\ell, \quad (2.16)$$

onde ℓ é o número quântico angular, n é o número quântico radial, $Q(\ell)$ representa a probabilidade de ocorrência de um dado ℓ e $A_{n'n''\ell}^2$ é a probabilidade de mudança no estado vibracional acompanhando a transição eletrônica, que é a integral de sobreposição entre as funções dos estados envolvidos. O perfil de linha normalizado pode ser obtido a partir disso, considerando que

$$I(\omega)d\omega = P(\varepsilon)d\varepsilon. \quad (2.17)$$

Contrário ao que sugeriu Jabłoński, que acreditava que seu método era mais completo e não relacionado com as teorias existentes, Foley (1946) mostrou que os resultados obtidos pelo método quântico eram os mesmos dados pelas teorias baseadas no tratamento via transformada de Fourier [46], sendo apenas necessário supor, no desenvolvimento do método quântico, que as colisões sejam adiabáticas e atentar para a necessidade de realizar a média entre possíveis transições simultâneas.

2.4 Teoria Unificada

A aparente independência, ou mesmo complementaridade, entre a teoria de impacto e a aproximação quase-estática, que permitiam o cálculo do centro e das asas da linha, respectivamente, foi resolvida por P. W. Anderson, em 1952 [47]. Ele obteve uma expressão para o perfil de linha em termos da transformada de Fourier de uma função dependente dos desvios de fase, sem a necessidade de suposições sobre o comportamento dos mesmos e, a partir dessa expressão, tomando os limites corretos, o resultado de ambos tratamentos pode ser obtido. Em razão disso, seu método tornou-se conhecido como teoria unificada.

As suposições feitas no desenvolvimento da teoria resumem-se a:

- interações entre perturbadores e radiador são escalares e aditivas;
- perturbadores descrevem trajetórias clássicas e retilíneas;
- perturbadores são independentes;

- radiador é apenas adiabaticamente perturbado.

A primeira dessas suposições consiste, basicamente, em admitir que potenciais devidos a diferentes perturbadores podem ser diretamente somados. Isso é válido se eles apresentam a mesma simetria, pois nenhuma transformação de coordenadas faz-se necessária. Usualmente, os potenciais são assumidos funções da distância R entre perturbador e radiador, ou seja, assume-se que as forças atuantes são centrais. Tal suposição é verdadeira apenas para estados s isolados, mas Sando, Erickson & Binning (1979), por exemplo, mostram que a aditividade é satisfatória mesmo quando a simetria não é esférica [48]. Além disso, o problema será adiante reduzido à interação entre apenas dois corpos, de modo que, de fato, não se deve ter erros significativos devido à soma de interações.

A segunda suposição consiste em assumir que a distância R entre perturbador e radiador pode ser representada simplesmente como

$$R(t) = \sqrt{b^2 + v^2 t^2}, \quad (2.18)$$

onde b é o parâmetro de impacto, v é a velocidade do perturbador e t o tempo decorrido. Isso exige a especificação simultânea e exata de posição e velocidade a cada instante de tempo, o que não é coerente com o princípio de incerteza. Para que tal suposição seja válida, é necessário que as incertezas em posição e velocidade sejam muito menores que a amplitude dessas quantidades [49], de forma que possam ser desprezadas, o que é plausível. Além disso, para que a trajetória possa ser considerada retilínea, a condição $k_b T \gg V(R)$ deve ser obedecida. Rigorosamente, isso não é válido para a situação real, exceto para temperaturas altas ($T \gtrsim 100\,000\text{K}$), mas o erro causado só é considerável na asa distante da linha, fora das regiões calculadas neste trabalho, quando o deslocamento em frequência é da ordem de kT/\hbar [50].

A independência entre os perturbadores, hipótese comum aos diferentes métodos, é coerente quando a distância média entre perturbadores é maior que o volume de interação entre perturbador e radiador, o que se verifica para densidades não muito altas ($n \lesssim 10^{19}\text{cm}^{-3}$). Já a última suposição é coerente com a hipótese de que a força entre radiador e perturbador é pequena, implicando que o estado do sistema permanece o mesmo durante a colisão, exceto por sua alteração durante o processo de radiação.

O desenvolvimento completo da teoria foi feito por Anderson em conjunto com J. D. Talman [51], culminando no chamado modelo de Anderson-Talman. Nesse modelo, assume-se que a radiação da partícula perturbada pode ser descrita como um trem de ondas:

$$f(t) = f_0 e^{-i\omega_0 t} e^{-i\eta(t)}, \quad (2.19)$$

onde ω_0 é a frequência original do radiador e $\eta(t)$ é a fase adquirida durante a colisão. O perfil de linha normalizado, por sua vez, é obtido considerando o teorema de Wiener-Khinchin (apêndice B), segundo o qual $I(\omega)$ é a transformada de Fourier da função de autocorrelação de $f(t)$, denotada por $\Phi(s)$:

$$\begin{aligned} I(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(s) e^{i\omega s} ds \\ &= \frac{1}{\pi} \text{Re} \left\{ \int_0^{\infty} \Phi(s) e^{i\omega s} ds \right\}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Com s denotando o tempo de acompanhamento da colisão, $\Phi(s)$, calculada partir de um tempo inicial t , pode ser escrita como:

$$\Phi(s) = \langle f^*(t)f(t+s) \rangle_t, \quad (2.21)$$

de modo que

$$\Phi(s) \propto e^{-i\omega_0 s} \langle e^{-i[\eta(t+s)-\eta(t)]} \rangle_t. \quad (2.22)$$

É usual medir as frequências a partir da frequência central da linha, ω_0 , o que simplifica a equação 2.22, restando:

$$\Phi(s) = \langle e^{-i[\eta(t+s)-\eta(t)]} \rangle_t. \quad (2.23)$$

Já que se assume que as interações podem ser somadas escalarmente, isto é,

$$V(t) = \sum_{k=1}^N V_k[R_k(t)], \quad (2.24)$$

sendo R_k a distância do k -ésimo perturbador ao radiador e V_k o potencial que descreve a interação entre eles, pode-se calcular os desvios de fase considerando o efeito simultâneo de todos os perturbadores. A diferença de fase fica, portanto, expressa na forma:

$$\eta(t+s) - \eta(s) = \int_t^{t+s} \sum_{k=1}^N \hbar^{-1} V_k[R_k(t')] dt'. \quad (2.25)$$

Assim sendo, a função de autocorrelação fica:

$$\begin{aligned} \Phi(s) &= \left\langle \exp \left[-i \left(\int_t^{t+s} \sum_{k=1}^N \hbar^{-1} V_k[R_k(t')] dt' \right) \right] \right\rangle_t \\ &= \left\langle \exp \left[-i \left(\sum_{k=1}^N \int_t^{t+s} \hbar^{-1} V_k[R_k(t')] dt' \right) \right] \right\rangle_t \\ &= \left\langle \prod_{k=1}^N \exp \left[-i \left(\int_t^{t+s} \hbar^{-1} V_k[R_k(t')] dt' \right) \right] \right\rangle_t. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Assumindo que o sistema é ergódico, a média temporal da equação 2.26 pode ser substituída pela média sobre todas as geometrias de colisão possíveis a partir de um mesmo tempo inicial, que pode ser tomado como $t = 0$. Assim:

$$\Phi(s) = \left\langle \prod_{k=1}^N \exp \left[-i \left(\int_0^s \hbar^{-1} V_k[R_k(t')] dt' \right) \right] \right\rangle_{\text{colisões}}. \quad (2.27)$$

Utilizando a já citada hipótese de que os perturbadores são independentes, a média entre o produto de colisões pode ser substituída pelo produto das médias, de modo que

se obtém:

$$\Phi(s) = [\phi(s)]^N, \quad (2.28)$$

com

$$\phi(s) = \left\langle \exp \left(-i \int_0^s \hbar^{-1} V [R(t')] dt' \right) \right\rangle_{\text{colisões}}, \quad (2.29)$$

onde se utilizou ainda que todos os perturbadores são idênticos, de sorte que $V_k(R_k) = V(R)$ é a mesma para todos

Para realizar essa média, deve-se assumir uma geometria para a colisão. Denotando por x_0 a posição do perturbador no tempo inicial e por \bar{v} sua velocidade, a qual se assume que permanece constante durante a interação, a geometria comumente utilizada é esquematizada na figura 2.1.

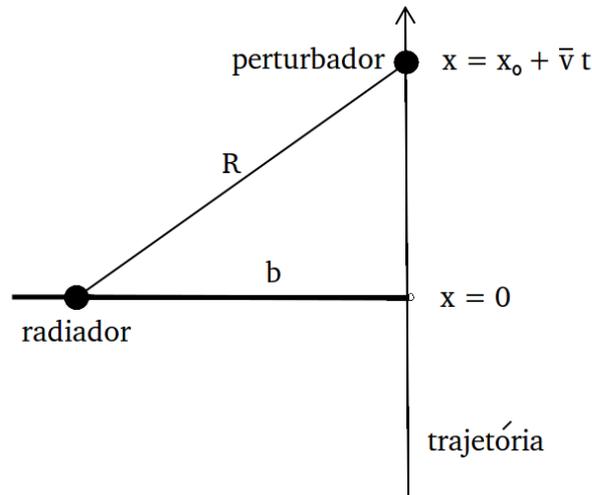


Figura 2.1: Geometria para o cálculo da média sobre colisões.

Sendo assim, a média da equação 2.29 é realizada integrando-se sobre todos os parâmetros de impacto b e posições iniciais x_0 do perturbador no interior do volume de interação \mathcal{V} , limitado pelo alcance do potencial, e sobre todas as velocidades v , considerando sua distribuição para a temperatura T considerada, ou seja:

$$\phi(s) = \frac{1}{\mathcal{V}} \iiint_{\mathcal{V}} 2\pi b f(v) dv db dx_0 \exp \left(-i \int_0^s \hbar^{-1} V [(b^2 + x^2)^{1/2}] dt \right), \quad (2.30)$$

onde $f(v)$ é a distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann,

$$f(v) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{k_B T} \right)^3 v^2 e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}}, \quad (2.31)$$

sendo m a massa dos perturbadores e k_B a constante de Boltzmann. Conforme a figura 2.1, tem-se ainda, $R = \sqrt{b^2 + x^2}$ e $x = x_0 + vt$.

A expressão para $\Phi(s)$ pode então ser reescrita como

$$\begin{aligned}\Phi(s) &= \frac{1}{\mathcal{V}} \iiint_{\mathcal{V}} 2\pi f(v) dv b db dx_0 \exp\left(-i \int_0^s \hbar^{-1} V[(b^2 + x^2)^{1/2}] dt\right) \\ &= \left\{1 - \frac{1}{\mathcal{V}} \iiint_{\mathcal{V}} 2\pi b db dx_0 \times \right. \\ &\quad \left. \times \left[1 - \exp\left(-i \int_0^s \hbar^{-1} V[(b^2 + x^2)^{1/2}] dt\right)\right]\right\}^N\end{aligned}\quad (2.32)$$

Assumindo um volume de interação suficientemente grande, pode-se utilizar a aproximação $(1 - \alpha)^N \simeq e^{-N\alpha}$, válida para $\alpha \ll 1$ e $N \gg 1$ e escrever $\Phi(s)$ na forma:

$$\Phi(s) = e^{-ng(s)}, \quad (2.33)$$

onde n é densidade de perturbadores N/\mathcal{V} e

$$g(s) = 2\pi \int_0^\infty f(v) dv \int_{-\infty}^\infty dx_0 \int_0^\infty b db \left[1 - \exp\left(-i \int_0^s \hbar^{-1} V[R(t)] dt\right)\right]. \quad (2.34)$$

A partir dessa equação, o caráter unificado da teoria pode ser verificado fazendo os limites de $v \rightarrow 0$ e de $s \rightarrow \infty$. No primeiro caso, é como se a partícula estivesse parada na posição R no interior do volume de interação durante todo o tempo de interação s , o que simplifica a integral do desvio de fase, que fica igual a $\hbar^{-1} V(R)s$, e reduz a integração apenas à variável R . Conforme Allard & Kielkopf (1982), o que se obtém são os perfis dados pela aproximação quase-estática [50]. Fazendo o outro limite, $s \rightarrow \infty$, Anderson (1952) demonstrou que se obtinha um perfil lorentziano deslocado, compatível com aproximação de impacto [47].

2.4.1 Abordagem Quântica do Modelo de Anderson-Talman

Devido ao sucesso da teoria unificada de Anderson e Talman em representar a linha como um todo para diferentes pressões e temperaturas, ela continua sendo aplicada e aprimorada. Allard, Sahal-Brechot & Biraud (1974), por exemplo, utilizaram-na para o estudo das linhas D do céσιο perturbado por xenônio [52]. Allard & Kielkopf (1991) realizaram cálculos da contribuição das quase-moléculas H_2^+ , H_2 , H_3^+ e H_3 à asa da linha Lyman- α [53]. Todas essas abordagens desconsideravam, no entanto, a variação do momento de dipolo das transições com a distância entre perturbador e radiador. Essa variação foi incluída apenas na abordagem quântica da teoria, sugerida primeiramente por Allard *et al.* (1999) [54], cuja formulação, em mais detalhes, é reproduzida aqui.

Seguindo o tratamento proposto, a função de autocorrelação é calculada em termos do momento de dipolo da transição:

$$\Phi(s) = \langle \mathbf{D}^\dagger(0) \mathbf{D}(s) \rangle \quad (2.35)$$

$$= \text{Tr} \{ \boldsymbol{\rho} \mathbf{D}^\dagger e^{is\mathbf{H}/\hbar} \mathbf{D} e^{-is\mathbf{H}/\hbar} \}, \quad (2.36)$$

onde \mathbf{D} é o momento de dipolo da transição na representação de Heisenberg, $\boldsymbol{\rho}$ é a matriz

densidade,

$$\rho \equiv \frac{e^{-\beta \mathbf{H}}}{\text{Tr} e^{-\beta \mathbf{H}}}, \quad (2.37)$$

e \mathbf{H} é o hamiltoniano do sistema, dado por:

$$\mathbf{H} = \mathbf{T}_{nucl} + \mathbf{T}_{elec} + V(\mathbf{x}, \mathbf{R}), \quad (2.38)$$

sendo que \mathbf{T}_{nucl} é a energia cinética dos núcleos, \mathbf{T}_{elec} é a dos elétrons e $V(\mathbf{x}, \mathbf{R})$ é a energia potencial entre essas partículas, onde \mathbf{x} representa as coordenadas eletrônicas (spin e posição) e os spins nucleares e \mathbf{R} representa a posição dos núcleos ¹.

A função de onda total do sistema $\Psi(x, R)$, considerando o princípio de Bohr-Oppenheimer, pode ser expandida em termos de estados adiabáticos,

$$\Psi(x, R) = \sum_e \psi_e(R) \chi_e(x; R). \quad (2.39)$$

Tais estados são ditos adiabáticos porque os estados eletrônicos, representados por $\chi_e(x; R)$, seguem adiabaticamente o movimento nuclear dado pelo parâmetro R . $\psi_e(R)$ é a função de onda dos núcleos.

Considerando um único radiador imerso em um gás de perturbadores opticamente inativos, tem-se que, para uma transição $\alpha = (i, f)$, a frequência emitida irá depender de R ,

$$\omega_{ee'}(R) = \frac{E_{e'}(R) - E_e(R)}{\hbar}, \quad (2.40)$$

onde e e e' correspondem aos subespaços de estados eletrônicos com valor assintótico de energia E_e e $E_{e'}$, respectivamente. Podem-se definir projetores \mathbf{P}_e que selecionem a e -ésima componente adiabática da função de onda,

$$\mathbf{P}_e \Psi(x, R) = \psi_e(R) \chi_e(x; R). \quad (2.41)$$

Para selecionar todos os estados cuja energia assintótica é E_j^∞ (pertencentes a um subespaço ϵ_j), basta fazer $P_j = \sum_{e \in \epsilon_j} P_e$.

Assim, o dipolo para uma dada transição fica:

$$\mathbf{D}_\alpha = \sum_{ee'}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{e'} \mathbf{D} \mathbf{P}_e, \quad (2.42)$$

onde $\sum_{ee'}^{(\alpha)}$ é a soma sobre todos os pares (e, e') tais que $\omega_{ee'}(R)$ tende à frequência do radiador isolado, ω_α , quando $R \rightarrow \infty$. O dipolo total é $\mathbf{D} = \sum_\alpha \mathbf{D}_\alpha$.

¹Utiliza-se a convenção de que quantidades em negrito são operadores.

Com isso, a função de autocorrelação fica

$$\Phi(s) = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \langle \mathbf{D}_{\alpha}^{\dagger}(0) \mathbf{D}_{\beta}(s) \rangle \quad (2.43)$$

$$= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \text{Tr} \boldsymbol{\rho} \mathbf{D}_{\alpha}^{\dagger} e^{is\mathbf{H}/\hbar} \mathbf{D}_{\beta} e^{-is\mathbf{H}/\hbar} \quad (2.44)$$

$$\equiv \sum_{\alpha\beta} \Phi_{\alpha\beta}(s), \quad (2.45)$$

o que permite escrever também o perfil de linha como uma soma: $I(\omega) = \sum_{\alpha\beta} I_{\alpha\beta}(\omega)$.

Desconsiderando a interferência entre diferentes linhas espectrais ($\alpha \neq \beta$), restam apenas os termos diagonais:

$$I(\omega) = \sum_{\alpha} I_{\alpha}(\omega) \quad (2.46)$$

$$\Phi(s) = \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha}(s) = \sum_{\alpha} \langle \mathbf{D}_{\alpha}^{\dagger}(0) \mathbf{D}_{\alpha}(s) \rangle. \quad (2.47)$$

É útil introduzir uma representação de interação para a função de autocorrelação em que se divida $\Phi_{\alpha}(s)$ pelo comportamento na ausência de perturbadores, $\Phi_{\alpha}^{(0)}(s)$:

$$\Psi_{\alpha}(s) \equiv \frac{\Phi_{\alpha}(s)}{\Phi_{\alpha}^{(0)}(s)}, \quad (2.48)$$

onde $\Phi_{\alpha}^{(0)}(s)$ é dada por:

$$\Phi_{\alpha}^{(0)}(s) = \Phi_{\alpha}^{(0)}(s=0) e^{i\omega_{\alpha}s} \quad (2.49)$$

$$= \phi_{\alpha}^{(0)} e^{i\omega_{\alpha}s}, \quad (2.50)$$

com $\phi_{\alpha}^{(0)} = \langle \mathbf{D}_{\alpha}^{\dagger} \mathbf{D}_{\alpha} \rangle^{(0)} = \sum_{ee'}^{(\alpha)} \boldsymbol{\rho}_e |\mathbf{D}_{ee'}^{(0)}|^2$. Na ausência de perturbadores, $\Psi_{\alpha}(s) = 1$.

Considerando perturbadores não correlacionados, como é característico do modelo, pode-se escrever:

$$\Psi_{\alpha}^{(N)}(s) = \left[\Psi_{\alpha}^{(1)}(s) \right]^N, \quad (2.51)$$

onde N é o número de perturbadores no interior do volume de interação \mathcal{V} . A função para um único perturbador $\Psi_{\alpha}^{(1)}(s)$ irá diferir de 1 apenas se ocorrer interação entre radiador e perturbador. A probabilidade de que isso ocorra é proporcional à densidade de perturbadores no volume de interação, portanto a $1/\mathcal{V}$. Aproximando até primeira ordem, podemos escrever:

$$\Psi_{\alpha}^{(1)}(s) = 1 + \frac{1}{\mathcal{V}} f_{\alpha}(s) \Rightarrow \Psi_{\alpha}^{(N)} = \left[1 + \frac{1}{N} \frac{N}{\mathcal{V}} f_{\alpha}(s) \right]^N. \quad (2.52)$$

Tomando o limite $N \rightarrow \infty$ e denotando a densidade de perturbadores N/\mathcal{V} por n , pode-se

escrever $\Psi_\alpha^{(N)}(s)$ na forma exponencial:

$$\Psi_\alpha^{(N)}(s) = e^{nf_\alpha(s)}. \quad (2.53)$$

A função $f_\alpha(s)$ é obtida a partir de

$$\begin{aligned} f_\alpha &= \mathcal{V} \left[\Psi_\alpha^{(1)}(s) - 1 \right] \\ &= \mathcal{V} \left[\frac{\Phi_\alpha^{(1)}(s)}{\Phi_\alpha^{(0)}(s)} - 1 \right] \\ &= \mathcal{V} \left[\frac{\langle \mathbf{D}_\alpha^{(1)\dagger}(0) \mathbf{D}_\alpha^{(1)}(s) \rangle}{\phi_\alpha^{(0)} e^{i\omega_\alpha s}} - 1 \right]. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Definindo $\mathbf{d}_\alpha(s) \equiv \mathbf{D}_\alpha(s)e^{-i\omega_\alpha s}$, tem-se:

$$f_\alpha = \mathcal{V} \left[\frac{\langle \mathbf{d}_\alpha^{(1)\dagger}(0) \mathbf{d}_\alpha^{(1)}(s) e^{i\omega_\alpha s} \rangle}{\phi_\alpha^{(0)} e^{i\omega_\alpha s}} - 1 \right] \quad (2.55)$$

$$= \mathcal{V} \left[\frac{\langle \mathbf{d}_\alpha^{(1)\dagger}(0) \mathbf{d}_\alpha^{(1)}(s) - \mathbf{d}_\alpha^{(0)\dagger}(0) \mathbf{d}_\alpha^{(0)}(0) \rangle}{\phi_\alpha^{(0)}} \right] \quad (2.56)$$

Fazendo $g_\alpha(s) = f_\alpha(s) - f_\alpha(0)$, resulta:

$$g_\alpha(s) = \frac{\langle \mathbf{d}_\alpha^{(1)\dagger}(0) [\mathbf{d}_\alpha^{(1)}(s) - \mathbf{d}_\alpha^{(1)}(0)] \rangle}{\langle \mathbf{d}_\alpha^{(0)2}(0) \rangle}. \quad (2.57)$$

O perfil de linha normalizado, com as frequências medidas a partir da frequência central, pode ser calculado como:

$$I_\alpha(\Delta\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \left\{ \int_0^\infty e^{ng_\alpha(s)} e^{i\omega s} ds \right\}. \quad (2.58)$$

Para calcular os traços implícitos na equação 2.57, é preciso escolher uma base — como, por exemplo, a dada pelos estados adiabáticos $\psi_e(R)\chi_e(x; R)$ — e verificar o efeito dos operadores de interesse sobre ela. Considerando primeiro a parte eletrônica da função de onda, representada em posição, tem-se;

$$\begin{aligned} [\mathbf{T}_{elec} + V(\mathbf{x}, \vec{r})] \chi_e(x; \vec{r}) &= E_e(\vec{r}) \chi_e(x; \vec{r}) \\ [\mathbf{H} - \mathbf{T}_{nucl}] \chi_e(x; \vec{r}) &= E_e(\vec{r}) \chi_e(x; \vec{r}). \end{aligned} \quad (2.59)$$

Lembrando que $\mathbf{T}_{nucl} = \vec{\mathbf{p}}^2/2\mu$, onde μ é a massa reduzida do sistema, resulta:

$$\mathbf{H} \chi_e(x; \vec{r}) = E_e(\vec{r}) \chi_e(x; \vec{r}) + \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2\mu} \chi_e(x; \vec{r}). \quad (2.60)$$

Então:

$$\langle \chi_{e'}(\vec{r}) | \mathbf{H} | \chi_e(\vec{r}) \rangle = E_e(\vec{r}) \delta_{ee'} + \left\langle \chi_{e'}(\vec{r}) \left| \frac{\vec{p}^2}{2\mu} \right| \chi_e(\vec{r}) \right\rangle. \quad (2.61)$$

Para calcular o segundo termo do lado direito da equação, utiliza-se:

$$\begin{aligned} \vec{p} \chi_e(\vec{r}) &= [\vec{p}, \chi_e(\vec{r})] + \chi_e(\vec{r}) \vec{p} \\ &= -i\hbar \vec{\nabla} \chi_e(\vec{r}) + \chi_e(\vec{r}) \vec{p}, \end{aligned} \quad (2.62)$$

que implica

$$\begin{aligned} \langle \chi_{e''}(\vec{r}) | \vec{p} | \chi_e(\vec{r}) \rangle &= \delta_{ee''} \vec{p} - i\hbar \langle \chi_{e''}(\vec{r}) | \vec{\nabla} \chi_e(\vec{r}) \rangle \\ &\equiv \delta_{ee''} \vec{p} + \vec{\pi}_{ee''}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (2.63)$$

Com isso:

$$\begin{aligned} \langle \chi_{e'}(\vec{r}) | \vec{p}^2 | \chi_e(\vec{r}) \rangle &= \sum_{e''} \langle \chi_{e'}(\vec{r}) | \vec{p} | \chi_{e''}(\vec{r}) \rangle \langle \chi_{e''}(\vec{r}) | \vec{p} | \chi_e(\vec{r}) \rangle \\ &= \sum_{e''} [\delta_{e'e''} \vec{p} + \vec{\pi}_{e'e''}(\vec{r})] [\delta_{ee''} \vec{p} + \vec{\pi}_{ee''}(\vec{r})] \\ &= \left\{ [\vec{p} + \vec{\pi}(\vec{r})]^2 \right\}_{ee'}. \end{aligned} \quad (2.64)$$

O termo $\vec{\pi}(\vec{r})$ pode ser desconsiderado dentro da aproximação adiabática, pois está associado às transições induzidas pela energia cinética dos núcleos, que não são consideradas quando o princípio de Franck-Condon é utilizado. Resta, no limite assintótico:

$$(\mathbf{H} - E_e^\infty) | \chi_e(\vec{r}) \rangle = | \chi_e(\vec{r}) \rangle \frac{\vec{p}^2}{2\mu}. \quad (2.65)$$

Com essa equação de autovalores, os traços na parte eletrônica podem ser calculados.

O numerador da equação 2.57, que define $g_\alpha(s)$, é escrito como:

$$\langle \mathbf{d}_\alpha^{(1)\dagger}(0) [\mathbf{d}_\alpha^{(1)}(s) - \mathbf{d}_\alpha^{(1)}(0)] \rangle = \left\{ \frac{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta \mathbf{H}} \mathbf{d}_\alpha^\dagger(0) [\mathbf{d}_\alpha(s) - \mathbf{d}_\alpha(0)] \right\}}{\text{Tr} e^{-\beta \mathbf{H}}} \right\}^{(1)}. \quad (2.66)$$

Pode-se calcular primeiro:

$$(\text{Tr} e^{-\beta \mathbf{H}})^{(1)} = \sum_e \text{Tr}_r \langle \chi_e(\vec{r}) | e^{-\beta \mathbf{H}} | \chi_e(\vec{r}) \rangle, \quad (2.67)$$

onde Tr_r denota o traço sobre a parte nuclear. Definindo $E_e = E_e^\infty = E_i$ e utilizando o

resultado obtido na equação 2.65, obtém-se:

$$\begin{aligned}
(\text{Tr} e^{-\beta \mathbf{H}})^{(1)} &= \sum_e e^{-\beta E_e^\infty} \text{Tr}_r \langle \chi_e(\vec{r}) | e^{-\beta(\mathbf{H} - E_e^\infty)} | \chi_e(\vec{r}) \rangle \\
&= \sum_e e^{-\beta E_e^\infty} \text{Tr}_r e^{-\beta \vec{p}^2 / 2\mu} \\
&= \sum_e e^{-\beta E_e^\infty} \int d\vec{p} e^{-\beta \vec{p}^2 / 2\mu} \langle \vec{p} | \vec{p} \rangle \\
&= \frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3} \left(\int d\vec{p} e^{-\beta \vec{p}^2 / 2\mu} \right) \sum_e e^{-\beta E_e^\infty}, \tag{2.68}
\end{aligned}$$

onde foi utilizado que

$$\langle \vec{p} | \vec{p} \rangle = \int d\vec{r} \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \int d\vec{r} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3}. \tag{2.69}$$

Além disso, pode-se também obter facilmente:

$$(\text{Tr} e^{-\beta \mathbf{H}})^{(0)} = \sum_e e^{-\beta E_e} \tag{2.70}$$

$$(\text{Tr} e^{-\beta \mathbf{H}} \mathbf{d}_\alpha^\dagger \mathbf{d}_\alpha)^{(0)} = \sum_{ee'}^{(\alpha)} e^{-\beta E_e} |d_{ee'}^{(0)}|^2. \tag{2.71}$$

Substituindo os resultados de 2.68, 2.70 e 2.71 em 2.57;

$$\begin{aligned}
g_\alpha(s) &= \frac{\mathcal{V}}{\phi_\alpha^{(0)}} \left\{ \frac{\text{Tr} e^{-\beta \mathbf{H}} \mathbf{d}_\alpha^\dagger(0) [\mathbf{d}_\alpha(s) - \mathbf{d}_\alpha(0)]}{\text{Tr} e^{-\beta \mathbf{H}}} \right\}^{(1)} \\
&= \frac{\mathcal{V}}{\phi_\alpha^{(0)}} \frac{\left\{ \text{Tr} e^{-\beta \mathbf{H}} \mathbf{d}_\alpha^\dagger(0) [\mathbf{d}_\alpha(s) - \mathbf{d}_\alpha(0)] \right\}^{(1)}}{\frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3} \left(\int d\vec{p} e^{-\beta \vec{p}^2 / 2\mu} \right) \sum_e e^{-\beta E_e^\infty}} \\
&= \frac{(2\pi\hbar)^3}{\left(\int d\vec{p} e^{-\beta \vec{p}^2 / 2\mu} \right)} \frac{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta(\mathbf{H} - E_i)} \mathbf{d}_\alpha^{(1)\dagger}(0) \left[\mathbf{d}_\alpha^{(1)}(s) - \mathbf{d}_\alpha^{(1)}(0) \right] \right\}}{\sum_{ee'}^{(\alpha)} |d_{ee'}^{(0)}|^2}. \tag{2.72}
\end{aligned}$$

Por simplicidade, o índice ⁽¹⁾ é suprimido daqui pra frente, ficando subentendido que as quantidades serão calculadas assumindo a presença de um único perturbador, exceto

se expresso de outra forma. Com essa convenção, o numerador de 2.72 fica:

$$\begin{aligned}
\text{Tr} e^{-\beta(\mathbf{H}-E_i)} \mathbf{d}_\alpha^\dagger(0) \mathbf{d}_\alpha(s) &= \text{Tr} e^{-\beta(\mathbf{H}-E_i)} \mathbf{P}_i \mathbf{d} \mathbf{P}_f e^{is\mathbf{H}/\hbar} \mathbf{P}_f \mathbf{d} \mathbf{P}_i e^{-is\mathbf{H}/\hbar} e^{-is\omega_f i} \\
&= \sum_{e, e''' \in \epsilon_i} \sum_{e', e'' \in \epsilon_f} \text{Tr} e^{-\beta(\mathbf{H}-E_i)} |\chi_e(\vec{\mathbf{r}})\rangle \langle \chi_e(\vec{\mathbf{r}})| \mathbf{d} |\chi_{e'}(\vec{\mathbf{r}})\rangle \times \\
&\quad \langle \chi_{e'}(\vec{\mathbf{r}})| e^{is(\mathbf{H}-E_f)/\hbar} |\chi_{e''}(\vec{\mathbf{r}})\rangle \langle \chi_{e''}(\vec{\mathbf{r}})| \mathbf{d} |\chi_{e'''}(\vec{\mathbf{r}})\rangle \langle \chi_{e'''}(\vec{\mathbf{r}})| e^{-is(\mathbf{H}-E_i)/\hbar} \\
&= \sum_{e, e''' \in \epsilon_i} \sum_{e', e'' \in \epsilon_f} \text{Tr}_r d_{ee'}(\vec{\mathbf{r}}) \langle \chi_{e'}(\vec{\mathbf{r}})| e^{is(\mathbf{H}-E_f)/\hbar} |\chi_{e''}(\vec{\mathbf{r}})\rangle d_{e''e'''}(\vec{\mathbf{r}}) \times \\
&\quad \langle \chi_{e'''}(\vec{\mathbf{r}})| e^{-is(\mathbf{H}-E_i)/\hbar} e^{-\beta(\mathbf{H}-E_i)} |\chi_e(\vec{\mathbf{r}})\rangle, \tag{2.73}
\end{aligned}$$

onde se denotou $d_{ee'}(\vec{\mathbf{r}}) = \langle \chi_e(\vec{\mathbf{r}})| \mathbf{d} |\chi_{e'}(\vec{\mathbf{r}})\rangle = d_{e'e}^*(\vec{\mathbf{r}})$.

Novamente negligenciando as transições induzidas por \mathbf{T}_{nucl} , tem-se que:

$$\begin{aligned}
\mathbf{H} |\chi_e(\vec{\mathbf{r}})\rangle &= (\mathbf{T}_{nucl} + \mathbf{H}_{elec}) |\chi_e(\vec{\mathbf{r}})\rangle \\
&\approx (\mathbf{T}_{nucl} + E_e(\vec{\mathbf{r}})) |\chi_e(\vec{\mathbf{r}})\rangle. \tag{2.74}
\end{aligned}$$

Definindo

$$V_e(\vec{\mathbf{r}}) = E_e(\vec{\mathbf{r}}) - E_e^\infty \tag{2.75}$$

$$\mathbf{H}_e = \mathbf{T}_{nucl} + V_e(\vec{\mathbf{r}}), \tag{2.76}$$

tem-se:

$$(\mathbf{H} - E_e^\infty) |\chi_e(\vec{\mathbf{r}})\rangle = \mathbf{H}_e |\chi_e(\vec{\mathbf{r}})\rangle, \tag{2.77}$$

o que permite escrever

$$\langle \chi_{e'}(\vec{\mathbf{r}})| e^{is(\mathbf{H}-E_e^\infty)/\hbar} |\chi_{e''}(\vec{\mathbf{r}})\rangle = \delta_{e'e''} e^{is\mathbf{H}_{e'}/\hbar}. \tag{2.78}$$

Com isso, a equação 2.73 fica:

$$\begin{aligned}
\text{Tr} e^{-\beta(\mathbf{H}-E_i)} \mathbf{d}_\alpha^\dagger(0) \mathbf{d}_\alpha(s) &= \sum_{e \in \epsilon_i} \sum_{e' \in \epsilon_f} \text{Tr}_r d_{ee'}(\vec{\mathbf{r}}) e^{is\mathbf{H}_{e'}/\hbar} d_{e'e}(\vec{\mathbf{r}}) e^{-is\mathbf{H}_e/\hbar} e^{-\beta H_e} \\
&= \sum_{e \in \epsilon_i} \sum_{e' \in \epsilon_f} K_{ee'}(s), \tag{2.79}
\end{aligned}$$

onde

$$K_{ee'} \equiv \text{Tr}_r e^{-\beta H_e} d_{ee'}(\vec{\mathbf{r}}) e^{is\mathbf{H}_{e'}/\hbar} d_{e'e}(\vec{\mathbf{r}}) e^{-is\mathbf{H}_e/\hbar}. \tag{2.80}$$

Expandindo 2.80, com $\mathbf{H}_0 \equiv \mathbf{T}_{nucl} = \mathbf{p}^2/2\mu$, obtém-se:

$$\begin{aligned}
K_{ee'} &= \text{Tr}_r e^{-\beta H_e/2} d_{ee'}(\vec{r}) e^{is\mathbf{H}_{e'}/\hbar} d_{e'e}(\vec{r}) e^{-\beta H_e/2} e^{-is\mathbf{H}_e/\hbar} \\
&= \text{Tr}_r e^{-\beta H_e/2} d_{ee'}(\vec{r}) e^{is\mathbf{H}_{e'}} e^{-is\mathbf{H}_0} e^{-is\mathbf{H}_0} d_{e'e}(\vec{r}) e^{-\beta H_e/2} e^{-is\mathbf{H}_0} e^{is\mathbf{H}_0} e^{-is\mathbf{H}_e} \\
&= \text{Tr}_r e^{-\beta H_e/2} d_{ee'}(\vec{r}) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^s V_{e'}(\vec{r}_0(t)) dt} d_{e'e}(\vec{r}_0(s)) e^{-\beta(\mathbf{H}_0 + V_e(\vec{r}_0(s)))/2} \times \\
&\quad e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^s V_e(\vec{r}_0(t)) dt}, \tag{2.81}
\end{aligned}$$

onde $\vec{r}_0(t) = e^{it\mathbf{H}_0} \vec{r} e^{-it\mathbf{H}_0}$.

O traço Tr_r pode ser calculado com uma base formada por pacotes de onda centrados em (\vec{r}, \vec{p}) tais que:

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = 1 \tag{2.82}$$

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{r} d\vec{p} |\vec{r}\vec{p}\rangle \langle \vec{r}\vec{p}| = 1 \tag{2.83}$$

$$e^{-it\mathbf{H}_0/\hbar} |\vec{r}\vec{p}\rangle = \left| \vec{r} + \frac{\vec{p}t}{\mu}, \vec{p} \right\rangle \text{ (trajetória retilínea)}. \tag{2.84}$$

A equação 2.81 fica então:

$$\begin{aligned}
K_{ee'} &= \langle \vec{r}\vec{p} | e^{-\beta \mathbf{H}_e/2} d_{ee'}(\vec{r}) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^s V_{e'}(\vec{r}_0(t)) dt} d_{e'e}(\vec{r}_0(s)) e^{-\beta(\mathbf{H}_0 + V_e(\vec{r}_0(s)))/2} \times \\
&\quad e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^s V_e(\vec{r}_0(t)) dt} | \vec{r}\vec{p} \rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{r} d\vec{p} \langle \vec{r}\vec{p} | e^{-\frac{\beta}{2} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + V_e(\vec{r}) \right)} d_{ee'}(\vec{r}) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^s V_{e'}(\vec{r}_0(t)) dt} \times \\
&\quad d_{e'e}(\vec{r}_0(s)) e^{-\frac{\beta}{2} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + V_e[\vec{r}_0(s)] \right)} | \vec{r}\vec{p} \rangle \langle \vec{r}\vec{p} | e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^s V_e(\vec{r}_0(t)) dt} | \vec{r}\vec{p} \rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{r} d\vec{p} e^{-\beta \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} \right)} \left(d_{ee'} e^{-\frac{\beta}{2} V_e(\vec{r})} \right) \left(d_{e'e} e^{-\frac{\beta}{2} V_e[\vec{r}_0(s)]} \right) \times \\
&\quad e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^s (V_{e'}(\vec{r} + \vec{p}t/\mu) - V_e(\vec{r} + \vec{p}t/\mu)) dt}. \tag{2.85}
\end{aligned}$$

Definindo:

$$V_{ee'}(\vec{r}) = V_{e'}(\vec{r}) - V_e(\vec{r}) \tag{2.86}$$

$$\tilde{d}_{ee'}(\vec{r}) = d_{ee'}(\vec{r}) e^{-\frac{\beta}{2} V_e(\vec{r})} \tag{2.87}$$

$$\eta(s) = \frac{1}{\hbar} \int_0^s (V_{e'}(\vec{r} + \vec{p}t/\mu) - V_e(\vec{r} + \vec{p}t/\mu)) dt, \tag{2.88}$$

$$\tag{2.89}$$

resulta:

$$K_{ee'}(s) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{r} d\vec{p} e^{-\beta \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} \right)} \tilde{d}_{ee'}(\vec{r}) e^{i\eta(s)} \tilde{d}_{ee'}^* \left(\vec{r} + \frac{\vec{p}t}{\mu} \right). \tag{2.90}$$

Substituindo essa expressão em 2.72, obtém-se, enfim:

$$g_{\alpha}(s) = \frac{\sum_{ee'}^{(\alpha)} \int d\vec{r} d\vec{p} e^{-\beta\left(\frac{p^2}{2}\right)} \tilde{d}_{ee'}(\vec{r}) \left[e^{i\eta(s)} \tilde{d}_{ee'}^* \left(\vec{r} + \frac{\vec{p}s}{\mu} \right) - \tilde{d}_{ee'}(\vec{r}) \right]}{\left(\int d\vec{p} e^{-\beta p^2/2\mu} \right) \sum_{ee'}^{(\alpha)} |d_{ee'}^{(0)}|^2} \quad (2.91)$$

Assumindo que a velocidade dos perturbadores é única além de constante ao longo da trajetória, os termos dependentes do momentum no numerador e no denominador cancelam-se, restando a expressão mais comumente encontrada na literatura:

$$g_{\alpha}(s) = \frac{\sum_{ee'}^{(\alpha)} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_0^{\infty} 2\pi b db \tilde{d}_{ee'}[r(0)] \left\{ e^{i\eta(s)} \tilde{d}_{ee'}^*[r(s)] - \tilde{d}_{ee'}[r(0)] \right\}}{\sum_{ee'}^{(\alpha)} |d_{ee'}^{(0)}|^2}, \quad (2.92)$$

a qual é a adotada neste trabalho.

3 Modelo Computacional

Mesmo com todas as aproximações introduzidas no Modelo de Anderson-Talman, a função de autocorrelação não pode, em geral, ser determinada analiticamente [24]. Para a obtenção dos perfis de linha é preciso, portanto, calculá-la numericamente. Neste trabalho, desenvolvi códigos em linguagem Fortran 90 para realização dessa tarefa. O algoritmo que escrevi é esquematizado na figura 3.1.

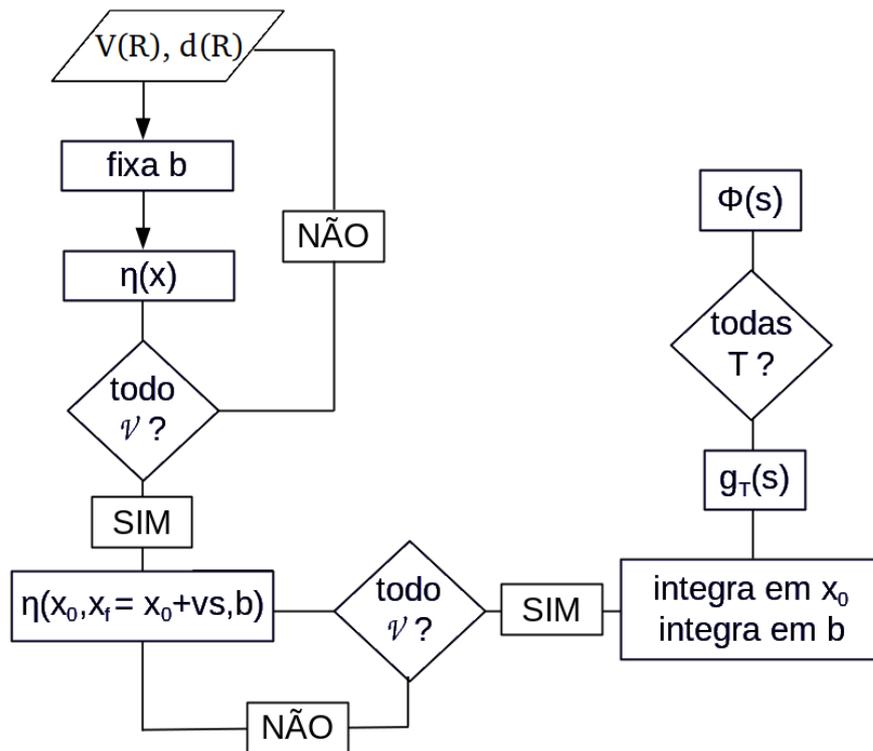


Figura 3.1: Algoritmo escrito para implementação computacional do modelo de Anderson-Talman em sua abordagem quântica.

Fornecidos, além da temperatura e da densidade de perturbadores, as energias potenciais para os níveis envolvidos na transição e o momento de dipolo para ela, o primeiro passo é computar as integrais em 2.92, que permitirão o cálculo da função de autocorrelação. Para isso, devem-se avaliar os desvios de fase em cada uma das trajetórias consideradas. Como tais trajetórias são assumidas retilíneas, o desvio de fase para um dado parâmetro de impacto depende apenas das posições inicial, dada pelo parâmetro x_0 , e final, que vale $x_0 + \bar{v}s$, onde \bar{v} é a velocidade da partícula perturbadora, aqui considerada como a

velocidade média maxwelliana para a dada temperatura:

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}. \quad (3.1)$$

Pode-se então determinar, para todos os parâmetros de impacto, o desvio de fase acumulado desde a separação máxima até cada uma das posições x no interior do volume de interação (figura 3.2). O desvio de fase para uma trajetória específica, determinada pela posição inicial x_0 , pelo parâmetro de impacto b e pelo tempo de correlação s , fica simplesmente a diferença entre o valor acumulado até a posição final e o que se teria na posição inicial, sendo que tais posições podem assumir qualquer valor x no interior do volume de interação.

A próxima integração a ser feita é sobre distintas posições iniciais. Ela envolve funções trigonométricas da fase, a qual atinge, em módulo, valores altos (como exemplificado na figura 3.3), de sorte que as funções apresentam oscilações com altíssima frequência (figura 3.4). É importante, portanto, que a integração seja realizada com passo pequeno, para minimizar os erros. Diferentes valores foram testados (0.05Å-0.5Å) até se notar que a solução encontrada era estável. Um leve aumento no passo afeta apenas a forma do satélite, mas não sua detecção. A função integrada em posição inicial também apresenta oscilações, mas a frequência não é tão alta (figura 3.5), de forma que a integração em parâmetro de impacto não apresenta dificuldade e pode ser realizada com passo ligeiramente maior (0.1Å-0.5Å).

Feita essa integração, tem-se a função $g(s)$ para cada transição. Na figura 3.6, tem-se suas partes real e imaginária para as seis transições que contribuem para a linha de Lyman- α . Para obter-se a função $g(s)$ total, devem-se somar as contribuições decorrentes de cada transição, com pesos adequados que levem em conta a degenerescência dos níveis envolvidos, e dividir pela soma dos momentos de dipolo assintóticos, também pesados, conforme a equação 2.92. Com isso, o perfil obtido é matematicamente equivalente à convolução dos perfis individuais de cada transição, pois a função de autocorrelação total fica igual ao produto entre as funções individuais. Isso é consistente com o fato de que podem ocorrer contribuições simultâneas devido a transições distintas, já que os tempos de decaimento para as linhas do átomo de hidrogênio ($\simeq 10^{-8}$ s) são maiores do que o tempo médio de duração das colisões na atmosfera de anãs brancas ($\simeq 10^{-13}$ s).

É importante notar que as oscilações que dão origem aos satélites (como as que aparecem na figura 3.6) têm, em geral, baixíssima amplitude (da ordem de 10^{-21} cm³) e ocorrem para valores pequenos de s . O passo utilizado no cálculo da função de autocorrelação deve, portanto, ser pequeno, para bem determinar o comportamento dessas oscilações. Isso limita o valor máximo de s a ser calculado em tempo computacional hábil, de sorte que, especialmente para baixas densidades, a função de autocorrelação não é avaliada até atingir valor nulo. Isso equivale a dizer que ela está multiplicada por uma função retangular, não nula apenas no intervalo calculado.

Assim sendo, se o perfil for computado diretamente, ele estará convoluído com a transformada de Fourier da função retangular, que é tipo $\text{sinc}(x)$ e apresenta fortes oscilações, as quais poderiam mascarar os verdadeiros satélites. É necessário, por isso, multiplicar a função de autocorrelação por uma janela distinta, que minimize as oscilações. É importante ressaltar que o efeito da função janela não pode ser completamente eliminado:

o perfil de linha está sempre convoluído com a transformada de Fourier de tal função. Alguns exemplos dessas funções podem ser vistos na figura 3.7. Neste trabalho, utilizei a janela de Blackman-Harris [55] com sete termos, cuja transformada é mais suave e não apresenta oscilações nessa escala, conforme a figura 3.8, de modo que seu único efeito sobre os perfis deve ser um alargamento da linha central, proporcional à largura do pico de sua transformada.

Outro ponto a considerar-se é que o centro da linha depende principalmente do comportamento assintótico da função de autocorrelação, enquanto as asas e — principalmente — os satélites dependem do comportamento para s pequeno. Para determinar bem ambos comportamentos, em alguns casos é aconselhável utilizar intervalos distintos para o cálculo de cada região. Para a série de Lyman, isso foi feito, já que se sabe que as asas das linhas, em especial Lyman- α , têm contribuições relevantes mesmo no visível [36]. O centro da linha foi então computado com a função de autocorrelação extrapolada até o limite assintótico (onde o comportamento é linear [50]), enquanto as asas foram avaliadas apenas com os primeiros pontos, onde as oscilações que geram os satélites são bem evidentes. Os perfis foram ligados nos pontos em que ocorresse interseção.

Além disso, pode-se notar que os perfis apresentam pelo menos 10 ordens de magnitude de diferença entre seu valor mínimo e seu máximo. Por isso, é importante que a função de autocorrelação seja avaliada com a máxima precisão possível. Ainda assim, o perfil acaba dominado por ruído em alguma ordem de grandeza (como pode ser visto na figura 3.9, para duas precisões distintas). A partir desse ponto, não se pode mais obter informação a partir da transformada de Fourier. Os perfis foram, portanto, extrapolados linearmente a partir do último ponto em que não se note ruído, com coeficientes obtidos em região que ainda tenha sido calculada com precisão e cujo comportamento seja aproximadamente linear (o que é definido por inspeção visual em cada linha).

É importante lembrar, ainda, que os perfis calculados via teoria unificada têm como abscissa a frequência angular medida a partir do centro da linha, ou seja, $\Delta\omega$, e são, por construção, normalizados a um nessas unidades. Para a conversão para comprimento de onda, a frequência angular da linha central é somada à abscissa, e a ordenada é convertida considerando que $I(\omega)d\omega = I(\lambda)d\lambda$, com $\omega = 2\pi c/\lambda$, de sorte que os perfis permanecem normalizados a um (em unidades *cgs*, portanto a 10^{-8} quando o comprimento de onda é em \AA) e são, por isso, exibidos em unidades arbitrárias (u. a.). Além disso, rigorosamente falando, os perfis calculados são perfis em emissão. Os perfis em absorção devem, contudo, ter a mesma forma, devido à conservação de energia. Para conversão para opacidade, basta multiplicar o perfil por

$$\frac{\pi e^2}{mc} f_{ij},$$

onde f_{ij} é a força de oscilador da transição, ou, equivalentemente, por

$$\frac{h\nu_{ij}}{4\pi} B_{ij},$$

onde ν_{ij} é a frequência da transição e B_{ij} é seu coeficiente de Einstein para absorção.

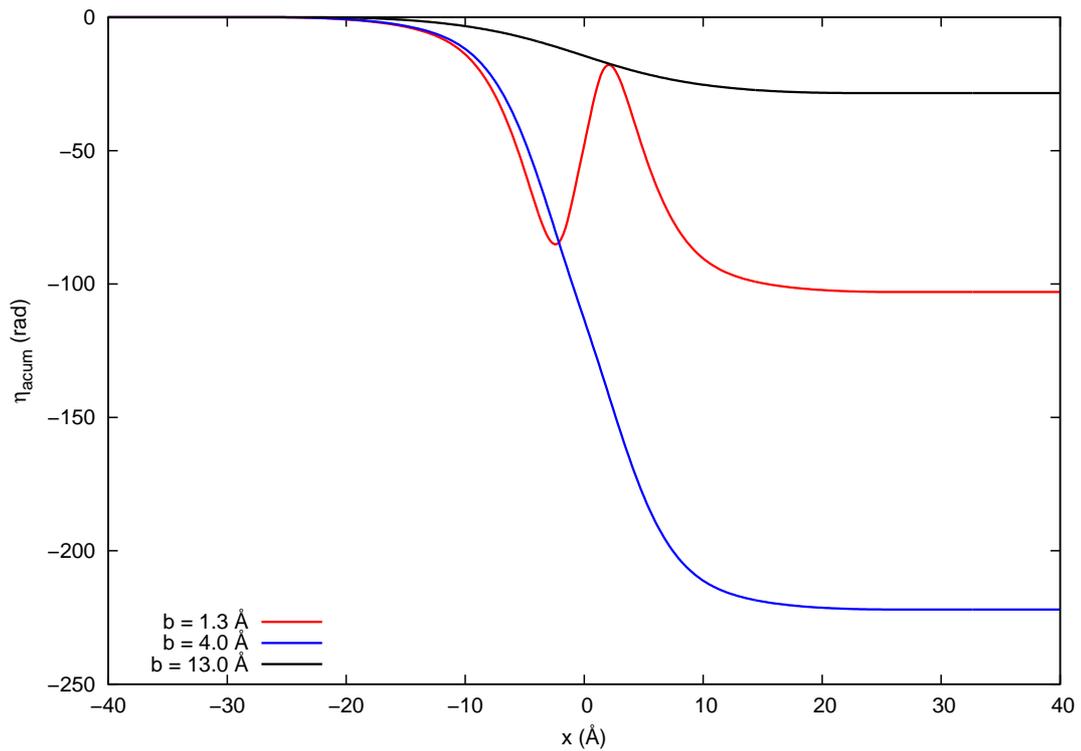


Figura 3.2: Comportamento do desvio de fase acumulado ao longo de três trajetórias retilíneas para parâmetros de impacto distintos.

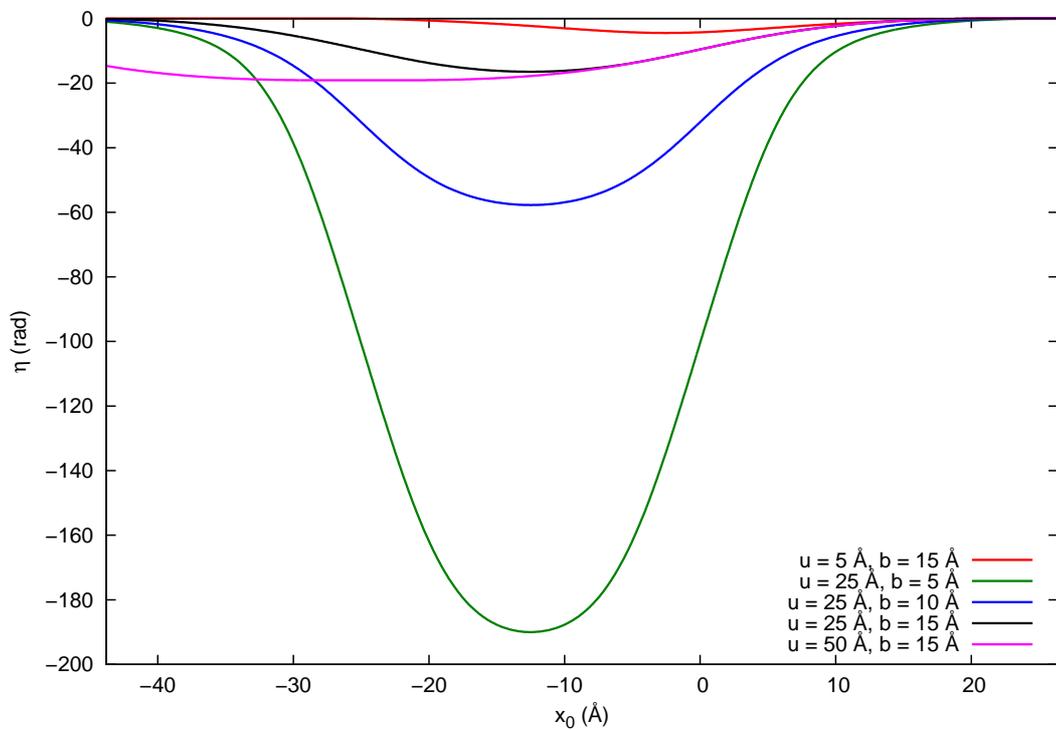


Figura 3.3: Valores do desvio de fase em função da posição inicial para integração ao longo de um caminho com comprimento $u = \bar{v}s$ e parâmetro de impacto b .

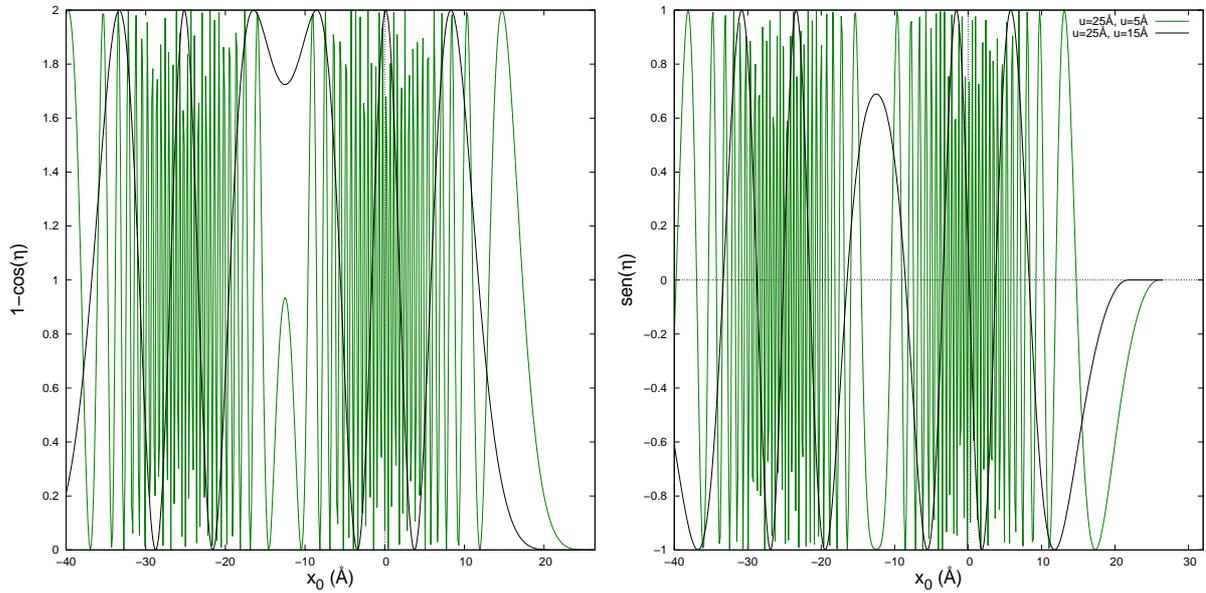


Figura 3.4: Funções trigonométricas a serem integradas para obtenção da função de autocorrelação. Nota-se que oscilações de alta frequência ocorrem quando valores altos de η são alcançados.

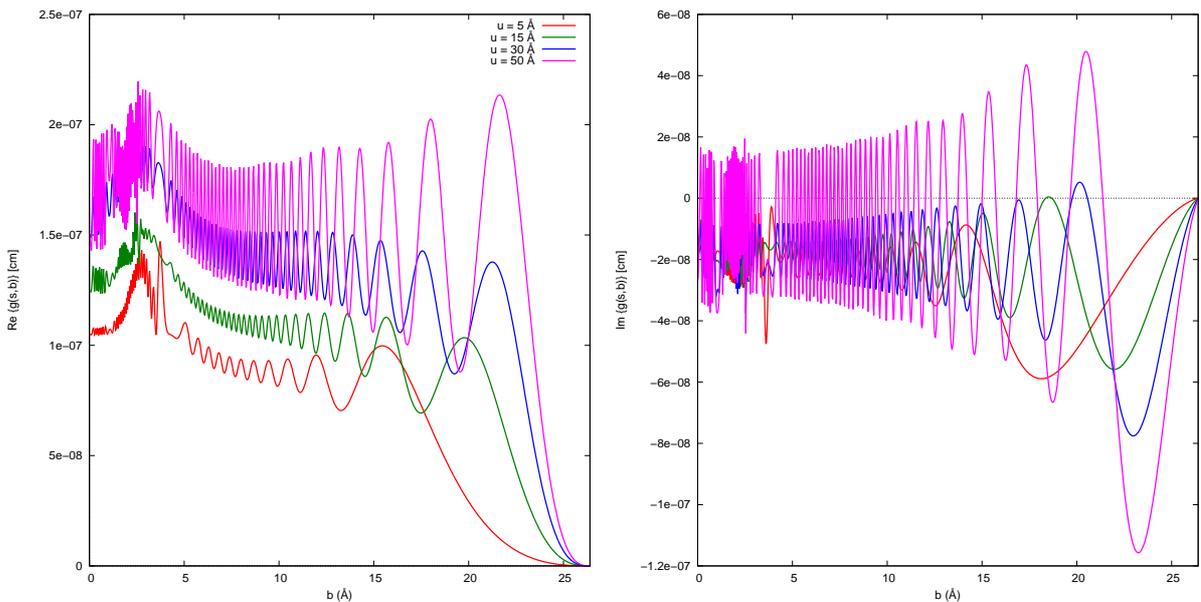


Figura 3.5: Partes real e imaginária da função $g(s)$, ainda não integrada em parâmetro de impacto.

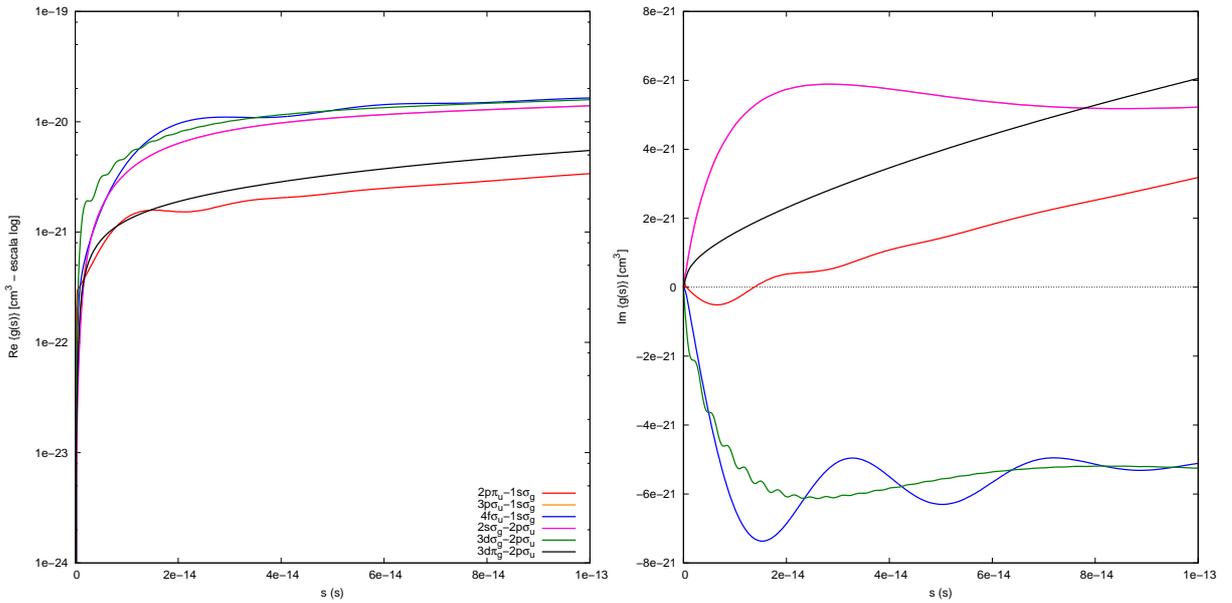


Figura 3.6: Partes real e imaginária da função $g(s)$ para as seis transições que contribuem para a linha de Lyman- α .

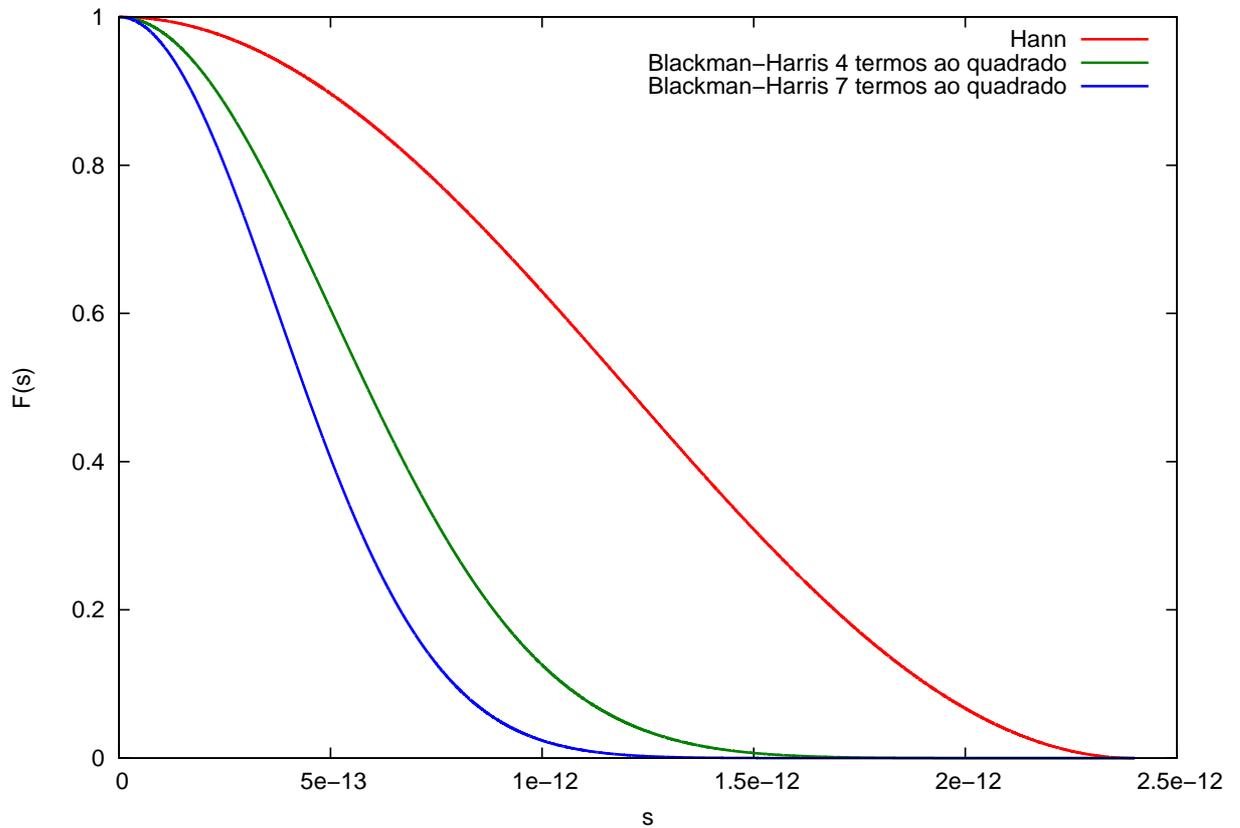


Figura 3.7: Alguns exemplos de função-janela testados para o cálculo da função de auto-correlação.

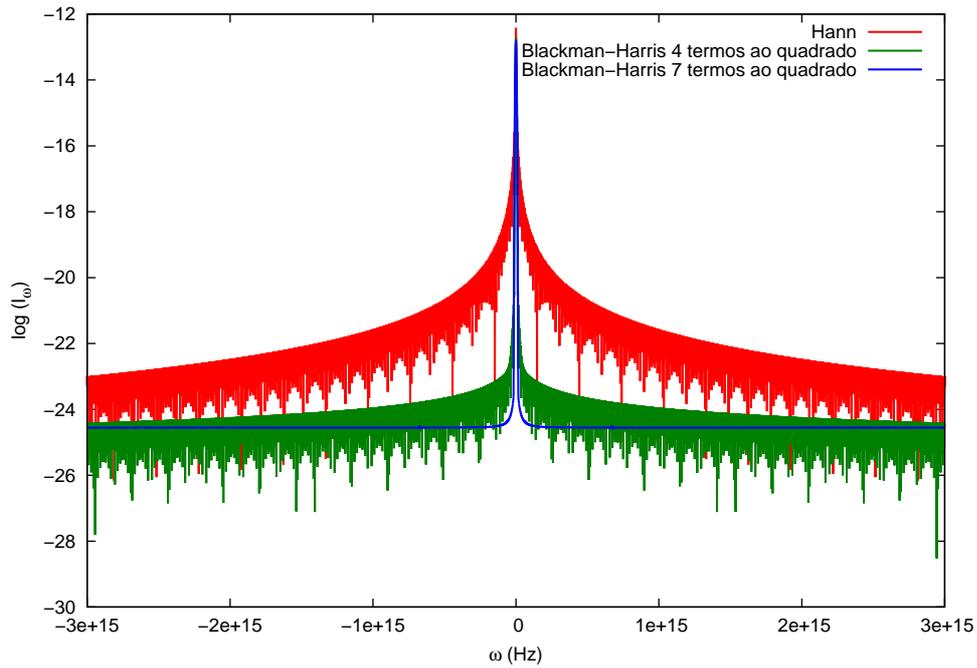


Figura 3.8: Transformada de Fourier das funções-janela mostradas na figura 3.7. Nota-se que a transformada de Fourier da função de Blackman-Harris com sete termos é mais suave, não apresentando oscilações que prejudicariam o perfil obtido.

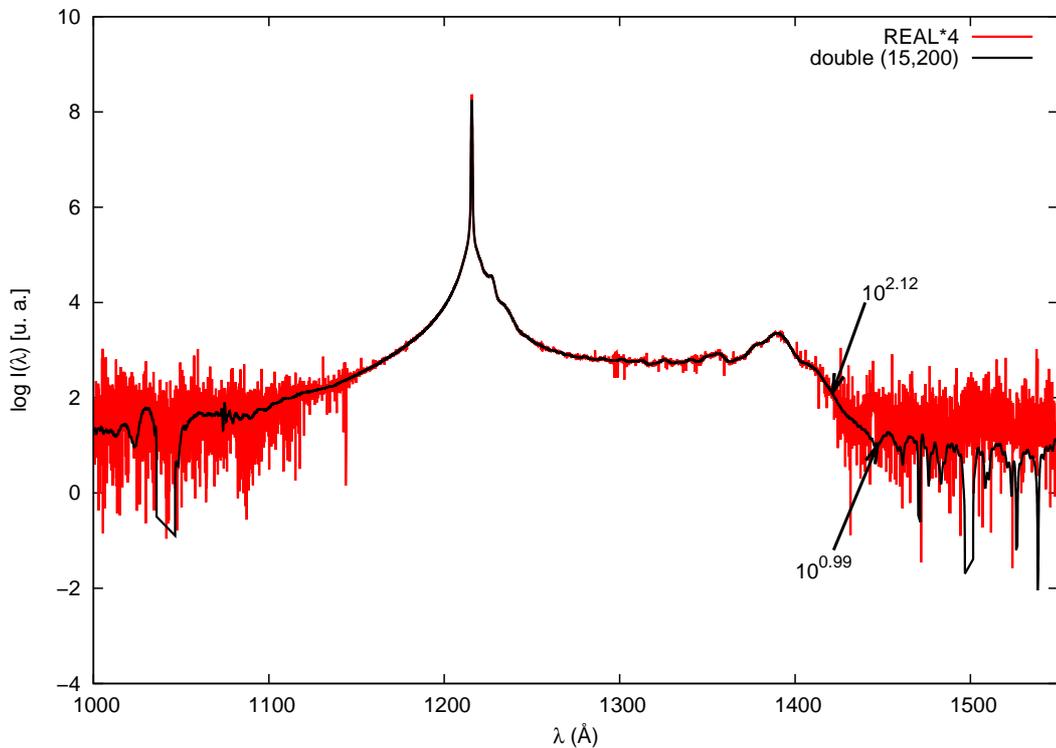


Figura 3.9: Exemplo da linha de Lyman- α calculada com duas precisões distintas. Mais de uma ordem de grandeza é ganha com o aumento da precisão, mas, mesmo com alta precisão, ruído domina o perfil para, nesse caso, $\log(I_\lambda) < 1$. A partir desse ponto, então, o perfil é extrapolado.

4 *Resultados*

Para calcular perfis realistas que possam ser utilizados em modelos de atmosferas de anãs brancas, deve-se considerar quais os intervalos relevantes em temperatura e densidade de perturbadores. O perfil de um modelo de atmosfera, que simula uma observação, é uma soma de perfis devidos às diversas camadas da atmosfera da estrela, com temperaturas e densidades distintas. É através do ajuste desse modelo, que depende das opacidades previamente determinadas, que se calcula a temperatura efetiva T_{ef} , a gravidade superficial g e as densidades n de cada espécie química na atmosfera da estrela. Um modelo mostrando temperaturas e densidades em camadas com profundidades óticas¹ distintas para uma anã branca DA com $T_{\text{ef}}=10\,000\text{K}$ e $\log(g)=8$ encontra-se na figura 4.1. O comportamento específico da região de formação das linhas espectrais ($0.01 \lesssim \tau \lesssim 2/3$), por sua vez, encontra-se na figura 4.2.

São calculados aqui apenas os perfis monotemperatura e monodensidade, ou seja, representativos de apenas uma camada da atmosfera. Nota-se na figura 4.2 que, na região de formação de linhas, a temperatura pode variar de $8\,000\text{K}$ até próximo de $11\,000\text{K}$, e que a densidade de perturbadores varia de 10^{15}cm^{-3} até pouco mais de 10^{16}cm^{-3} . Como a temperatura efetiva para esse modelo é de apenas $10\,000\text{K}$, ou seja, no limite inferior em que as contribuições moleculares são importantes, esses são os limites inferiores para esses parâmetros. De fato, para anãs brancas em que satélites são observados, as densidades de perturbadores estão entre 10^{15-16}cm^{-3} e 10^{18}cm^{-3} , já a temperatura pode variar de mais de $50\,000\text{K}$ (na base da atmosfera) até valores entre $8\,000\text{K}$ e $20\,000$ na camada superficial. As temperaturas efetivas para essas estrelas estão no intervalo $10\,000\text{K}-25\,000\text{K}$.

¹a profundidade ótica é uma quantia adimensional definida como $d\tau=-\chi dz$, onde χ é o coeficiente de absorção médio e z é a altura da camada, medida a partir do núcleo da estrela. É uma medida de de transparência, e pode ser associada à profundidade da camada na atmosfera da estrela.

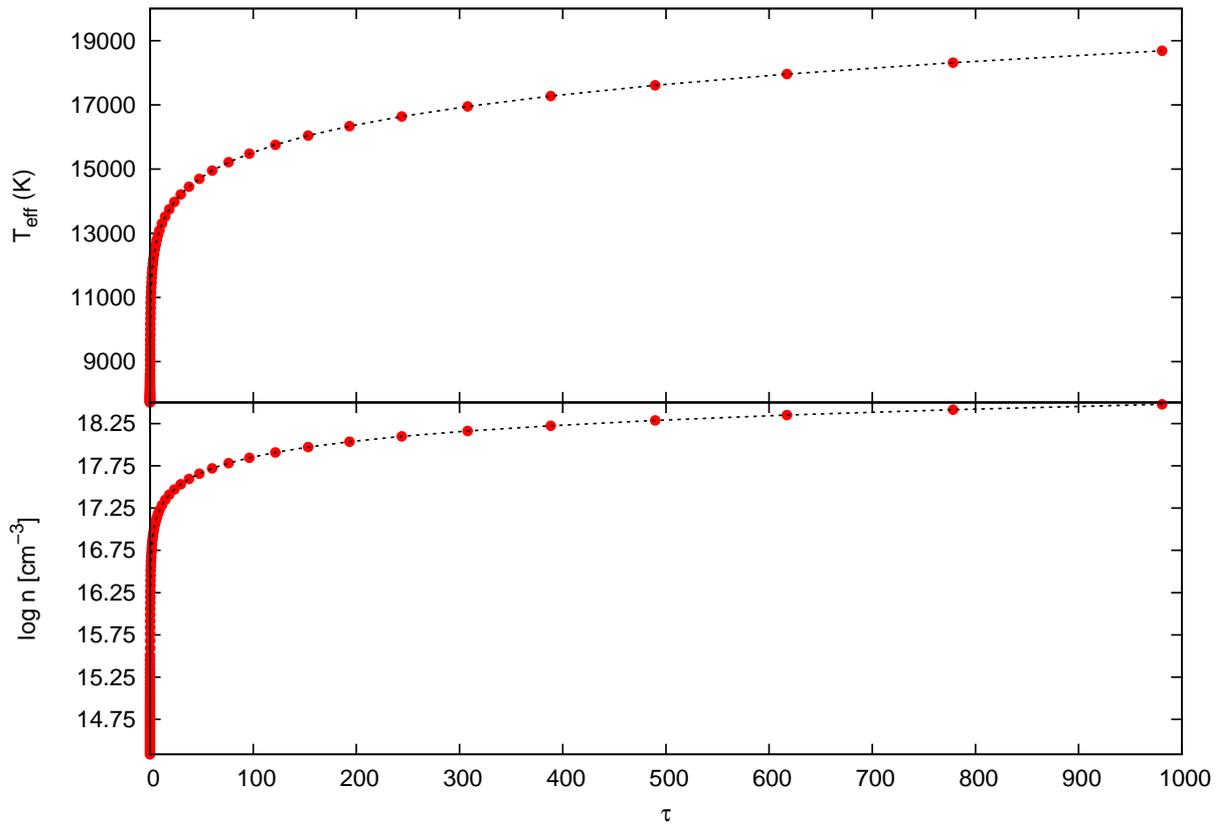


Figura 4.1: Estrutura da atmosfera de uma anã branca DA com $T_{\text{ef}}=10\,000\text{K}$ e $\log(g)=8$, mostrando a variação da temperatura e da densidade de prótons livres com a profundidade ótica (modelo calculado por D. Koester).

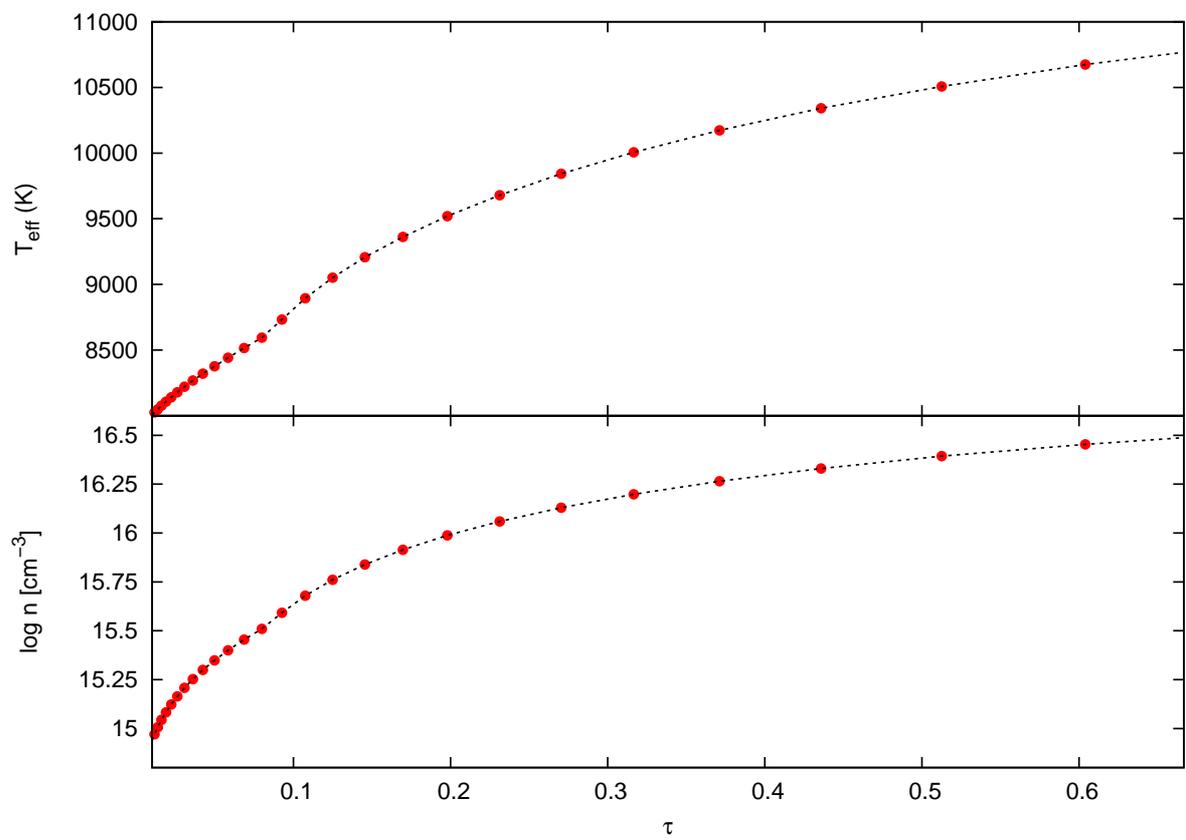


Figura 4.2: Comportamento da temperatura e da densidade de perturbadores na região de formação das linhas espectrais, para DA com $T_{\text{ef}}=10000\text{K}$ e $\log(g)=8$.

4.1 Série de Lyman

A série de Lyman é composta pelas transições cujo nível inicial, no caso de absorção, é $n = 1$. Analogamente, a série de Lyman em emissão tem $n = 1$ como nível final. Ela é localizada no ultravioleta, aproximadamente entre os comprimentos de onda 912\AA ($\text{Ly}\infty$) e 1216\AA ($\text{Ly}\alpha$), de modo que a detecção dessas linhas em objetos astronômicos é dificultada devido à atmosfera terrestre, que absorve fortemente nessa região do espectro. Por essa razão, observações no ultravioleta são realizadas com telescópios espaciais como o *International Ultraviolet Explorer* (1978-1996) e o *Hubble Space Telescope* (1990-presente).

Com essas observações, já foram identificados satélites nas linhas $\text{Ly}\alpha$ [8, 10, 56], $\text{Ly}\beta$ [57, 58] e $\text{Ly}\gamma$ [59–61]. Existem também detecções de satélites no espectro de plasmas produzidos por laser em laboratório [62]. Na figura 4.3, veem-se os perfis para todas as linhas da série de Lyman calculadas neste trabalho, com os picos normalizados para a população aproximada de quase-moléculas H_2^+ no nível superior na atmosfera de uma anã branca com temperatura de 10000K e densidade de perturbadores 10^{17}cm^{-3} . Diversos satélites podem ser identificados. A linha tracejada vermelha é uma lei de Planck para mesma temperatura, que pode ser considerada uma estimativa para o contínuo no dado intervalo de comprimentos de onda. Para comparação, tem-se os perfis quase-estáticos apresentados na tese de Márcio Santos [63] na figura 4.4, sendo a soma dos perfis normalizada no intervalo de comprimentos de onda exibido. Nota-se que a posição dos satélites é essencialmente a mesma, mas sua forma varia, sendo mais suave nos perfis por mim calculados com a teoria unificada, já que, na teoria quase-estática, os satélites são divergências. Nas seções a seguir, apresentam-se em detalhes os resultados para cada um dos perfis que calculei, em que se podem identificar todos os satélites observados, além de outros não detectados até o presente momento.

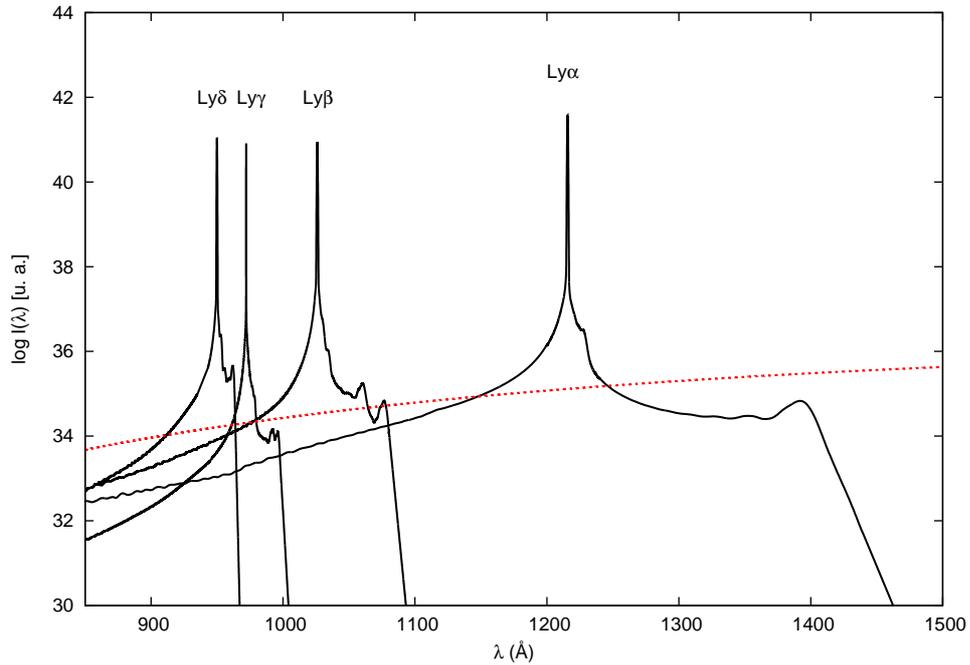


Figura 4.3: perfis para todas as linhas computadas da série de Lyman, com os picos normalizados para a população aproximada de H_2^+ no nível superior na atmosfera de uma anã branca com temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17} cm^{-3} , juntamente com uma lei de Planck (linha tracejada vermelha) para a mesma temperatura.

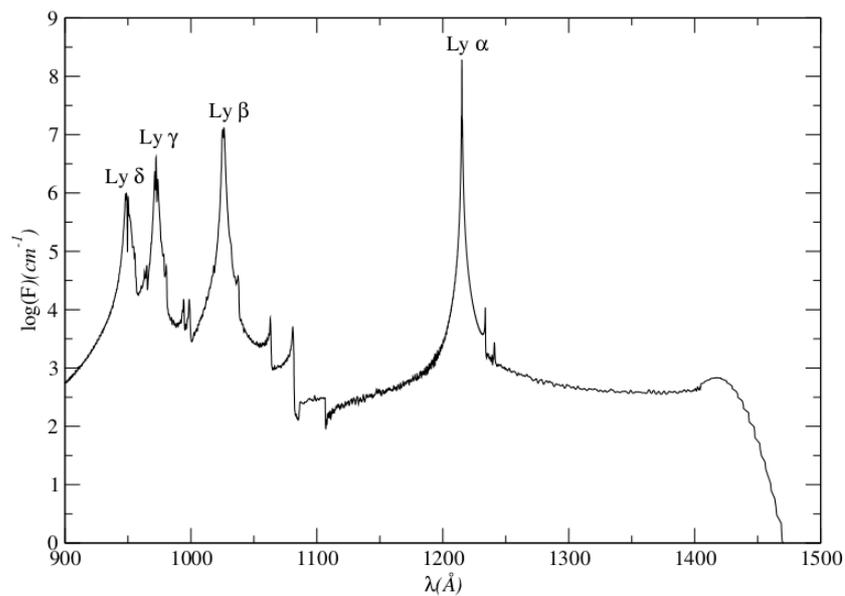


Figura 4.4: Contribuição do H_2^+ para a série de Lyman conforme calculado por Márcio Santos para temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17} cm^{-3} . A soma dos perfis é normalizada no intervalo. Adaptado da tese de Márcio Santos (2012) [63].

4.1.1 Lyman- α

A linha de Lyman- α tem contribuições devido a seis transições da quase-molécula H_2^+ . Na tabela 4.1, veem-se os níveis inicial e final e o peso estatístico para elas, bem como o comprimento de onda do satélite no perfil obtido para uma temperatura de 10000K e densidade de 10^{17}cm^{-3} . Quatro das transições apresentam satélites proeminentes, dos quais pelo menos dois já foram observados. O satélite próximo a 1400Å foi, como já mencionado, o primeiro identificado em anãs brancas. Outro satélite, com comprimento de onda em torno de 1230Å foi identificado em perfis de plasmas [62].

n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)
$1s\sigma_g$	$2p\pi_u$	2	1235.21
$1s\sigma_g$	$3p\sigma_u$	1	-
$1s\sigma_g$	$4f\sigma_u$	1	1227.38
$2p\sigma_u$	$2s\sigma_g$	1	1118.42
$2p\sigma_u$	$3d\sigma_g$	1	1392.05
$2p\sigma_u$	$3d\pi_g$	2	-

Tabela 4.1: níveis inicial e final, peso estatístico e o comprimento de onda dos satélites das seis transições que contribuem para Lyman- α para uma temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17}cm^{-3} .

Os perfis parciais das seis transições para uma temperatura de 15000K e densidade de perturbadores 10^{17}cm^{-3} encontram-se na figura 4.5. O satélite em 1400Å é o mais forte, mas podem-se também notar satélites em outras três transições. Dois deles têm comprimentos de onda em torno de 1230Å, de modo que, no perfil total, eles acabam se misturando. Além disso, como estão muito próximos da linha central, que tem comprimento de onda 1215.67Å (no vácuo), eles não são detectados em objetos astronômicos, já que a linha observada é alargada e, ainda, apresenta uma emissão geocoronal² em seu centro nas observações feitas com satélites de baixa altitude. Kielkopf & Allard (1995) observaram um satélite nesse comprimento de onda em experimentos com plasma e atribuíram-no à transição $1s\sigma_g-4f\sigma_u$ [62]. É provável, no entanto, que ele seja, na verdade, a combinação dos satélites dessa transição e da $1s\sigma_g-2p\pi_u$.

O comportamento dos perfis com a densidade de perturbadores pode ser visto na figura 4.6. Nota-se que a largura da linha central aumenta com a densidade de perturbadores, como já era previsto na teoria de impacto. Além disso, o fluxo aumenta com a densidade de perturbadores, o que simplesmente indica que a contribuição das colisões é maior quanto maior for a quantidade de perturbadores no volume de interação. Na figura 4.7, são plotados os perfis totais para uma densidade de perturbadores igual a 10^{17}cm^{-3} e temperaturas entre 8000K e 50000K, com passo de 1000K. O fluxo é extrapolado linearmente após 1440Å. Nota-se que o comportamento da linha central não parece afetado, bem como a forma dos satélites, mas sua amplitude varia. O satélite próximo a 1000Å

²Emissão devida aos átomos na camada mais externa da atmosfera da Terra, a exosfera.

não é detectado para temperaturas mais baixas, passando a destacar-se apenas para temperaturas mais altas. Já o satélite em 1400Å desloca-se ligeiramente, além de mudar de amplitude. Como esse satélite é importante no estudo de estrelas anãs brancas, pois ele é frequentemente observado, seu comportamento com temperatura e densidade é estudado em mais detalhes.

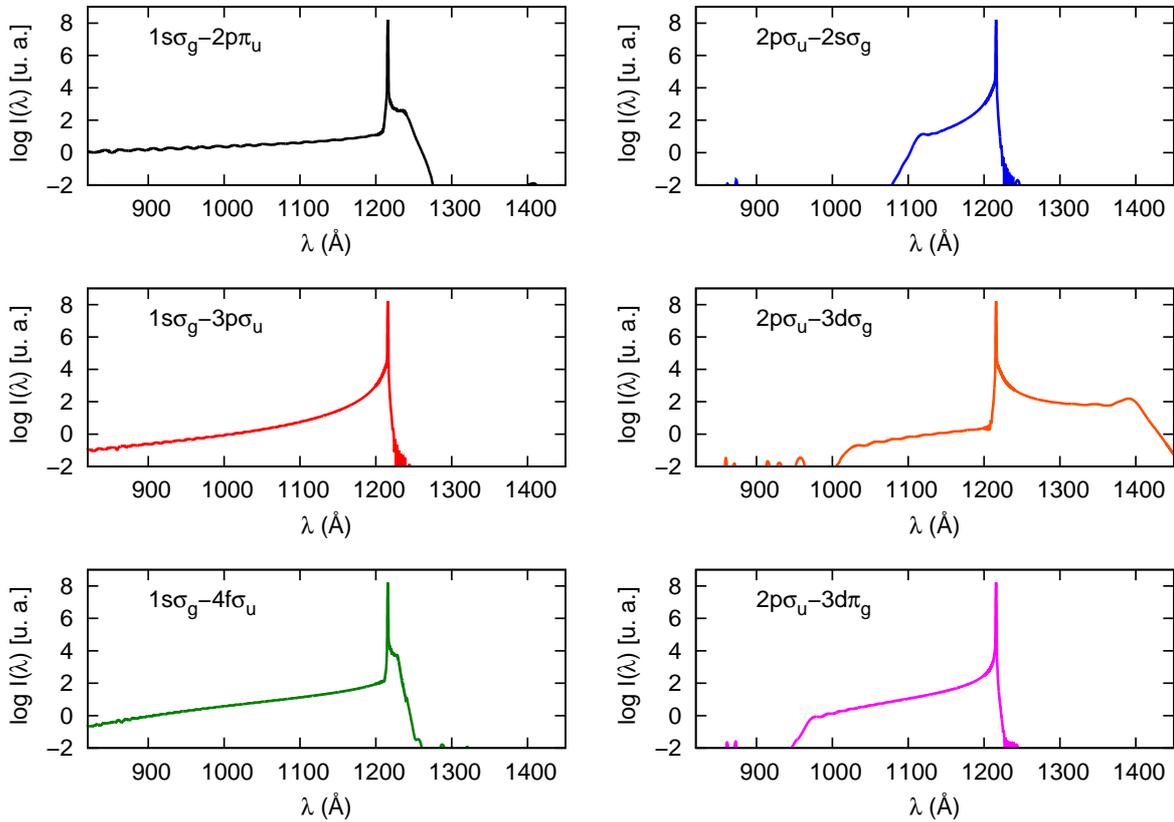


Figura 4.5: perfis individuais das seis transições que contribuem para Lyman- α para temperatura de 15000K e densidade de perturbadores de 10^{17} cm^{-3} .

Na figuras 4.8 a 4.11 vemos o comportamento com temperatura. O comprimento de onda da linha central, cujo comportamento é dado na figura 4.8, não tem variação detectável na resolução dos perfis ($\sim 0.04\text{\AA}$), porém, vale lembrar, o deslocamento da linha é subestimado na teoria unificada em razão da suposição de adiabaticidade. Já a amplitude da linha central (figura 4.9) cai muito lentamente, variando de apenas cerca de 0.3% no intervalo de 8000K a 50000K. Na figura 4.10, vemos o deslocamento do pico do satélite para menores comprimentos de onda com o aumento da temperatura, sendo a variação próxima de 0.5%. Para alguns intervalos de temperatura, especialmente acima de 30000K, não se nota mudança na posição, apenas na forma da linha. As rápidas oscilações que se notam são provavelmente efeito de imprecisão numérica. Já a amplitude do satélite (figura 4.11) tem comportamento bastante interessante: ela cresce rapidamente até próximo de 20000K, variando mais de 15%, passa a oscilar e, aparentemente, começa a diminuir lentamente, ainda oscilando, para temperaturas acima de 30000K. Essa oscilação deve estar associada a uma compensação entre a taxa de alargamento e a mudança na amplitude da linha: a amplitude aumenta até que a largura da linha tenha aumentado significativamente, e então passa a cair, até que a taxa de alargamento não é suficiente para manter o fluxo (já que a linha é normalizada) e a amplitude volta a aumentar.

Essa variação notável do comportamento do satélite com a temperatura é de grande interesse no estudo de anãs brancas. Como mencionado na introdução, a determinação da temperatura para anãs brancas com $T_{\text{ef}} \sim 12000\text{K}$ via espectroscopia no visível é problemática, pois a profundidade das linhas da série de Balmer chega a um máximo, permitindo a compensação de uma diminuição na temperatura com um aumento na gravidade e vice-versa. Obtém-se, em geral, uma solução com alta temperatura e baixa gravidade e outra com baixa temperatura, mas maior gravidade, para as estrelas estudadas. Como os satélites são observados precisamente nessa faixa de temperatura, é possível que a análise de espectros UV permita selecionar a solução correta, o que já é feito para estrelas que possuem espectro nessa região.

O comportamento com a densidade de perturbadores encontra-se nas figuras 4.12 a 4.15. Vê-se, na figura 4.12, que a linha central desloca-se ligeiramente ($\sim 0.03\%$) para maiores densidades, pois um número maior de perturbadores afeta mais a emissão original. A amplitude da linha (figura 4.14) diminui significativamente com o aumento da densidade, caindo a apenas 12.5% de seu valor inicial, já que a linha alarga, e o fluxo distribui-se para as asas. A localização do satélite (figura 4.14) varia apenas cerca de 0.15% para alta densidade, quando há um deslocamento devido ao maior alargamento. Já sua intensidade, exibida na figura 4.15, aumenta de forma aproximadamente exponencial com a densidade de perturbadores.

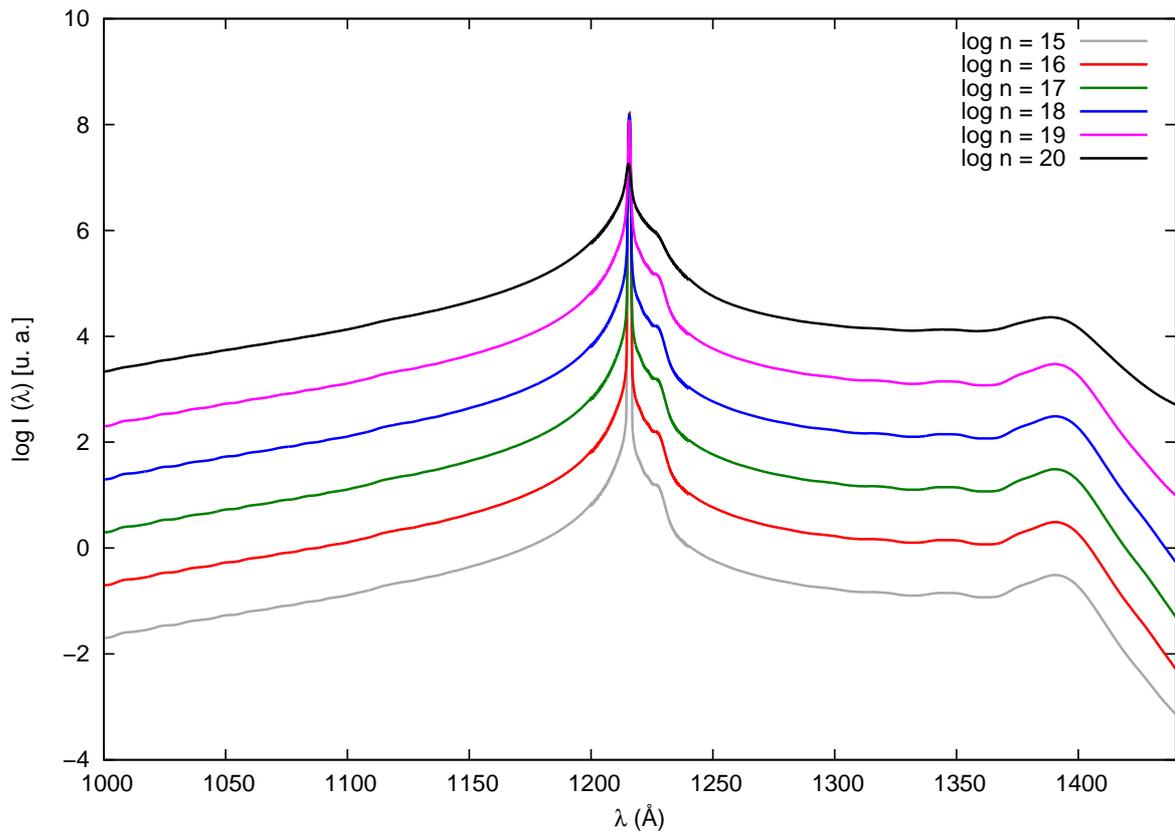


Figura 4.6: perfis de Lyman- α para diferentes densidades de perturbadores, entre 10^{15}cm^{-3} e 10^{20}cm^{-3} , para uma temperatura de 15000K.

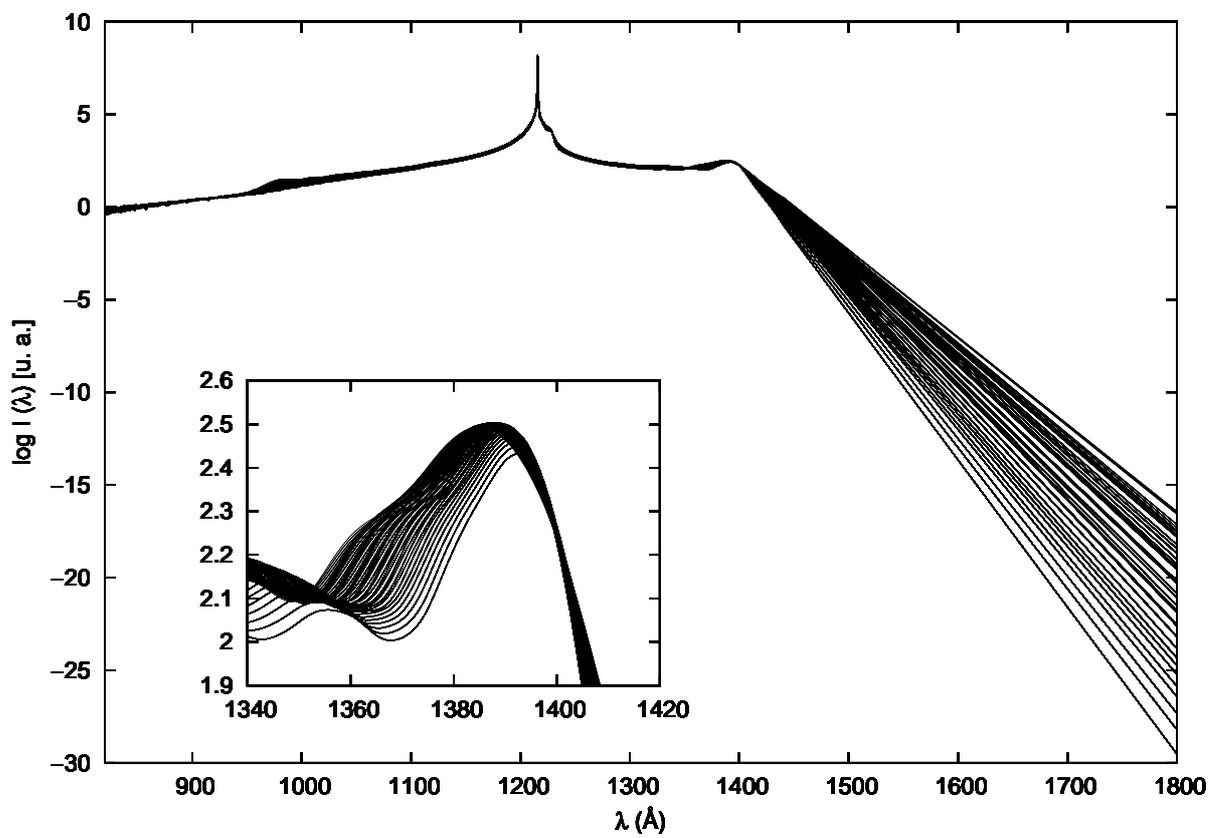


Figura 4.7: perfis de Lyman- α para diferentes temperaturas, entre 8000K e 50000K, com passo de 1000K, e densidade de perturbadores de 10^{18}cm^{-3} .

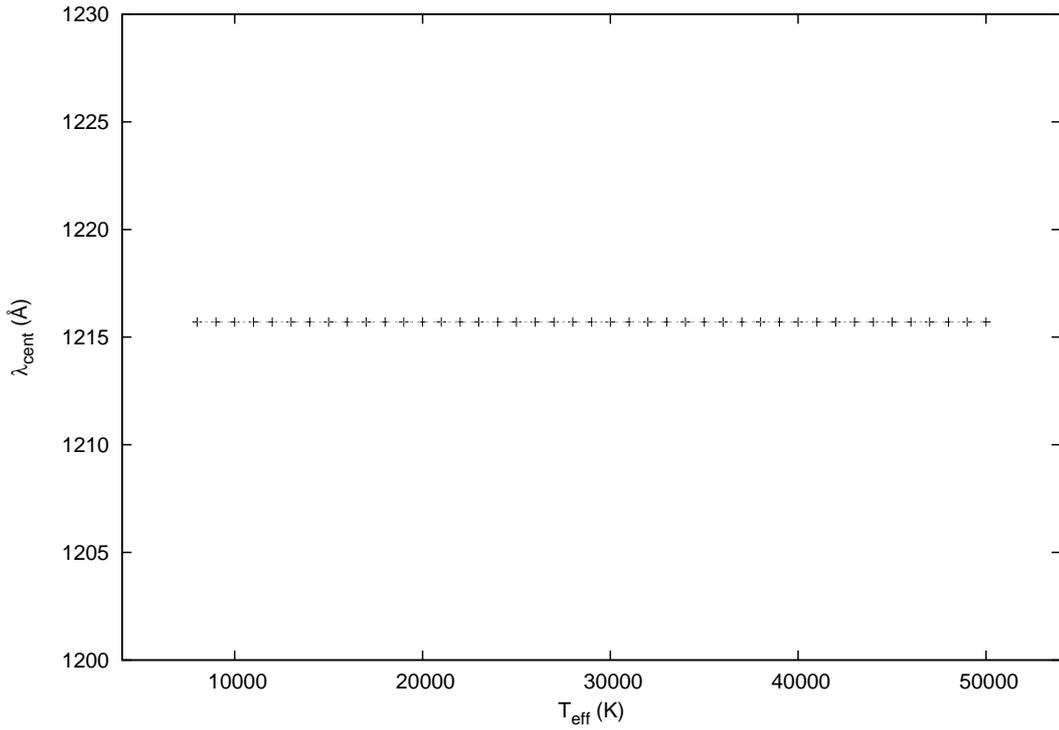


Figura 4.8: comportamento da posição da linha central de Ly α com temperatura. Na resolução dos perfis, não se nota nenhuma variação.

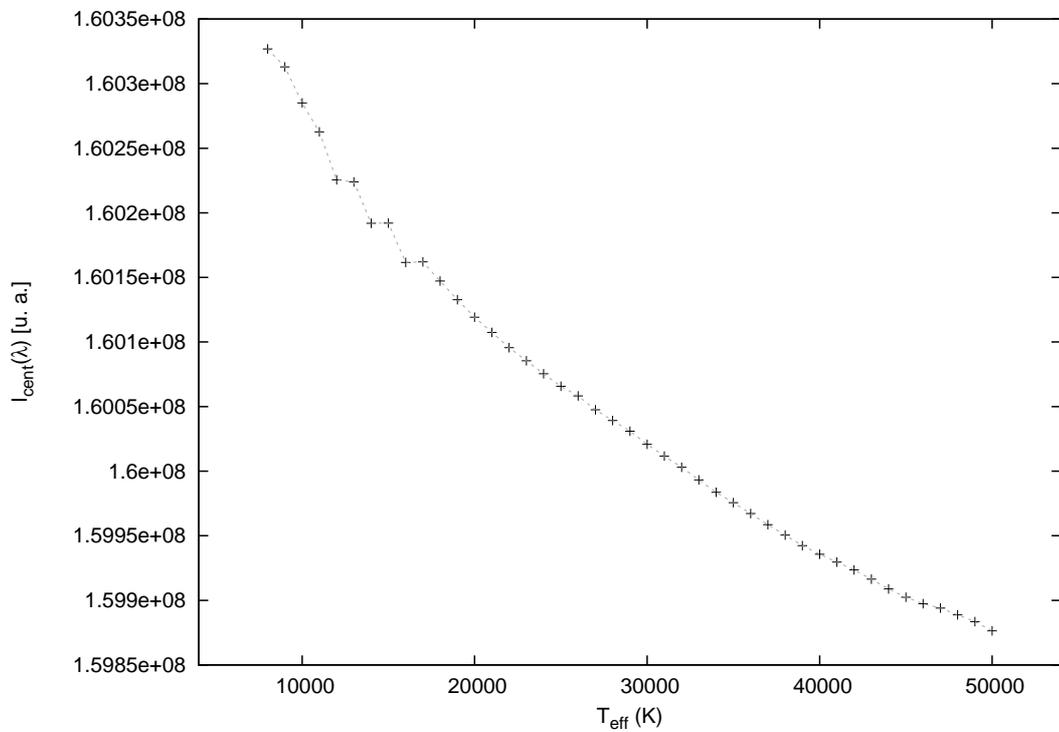


Figura 4.9: variação da amplitude da linha central de Ly α com temperatura. Nota-se uma mudança de apenas cerca de 0.3% neste intervalo de temperaturas.

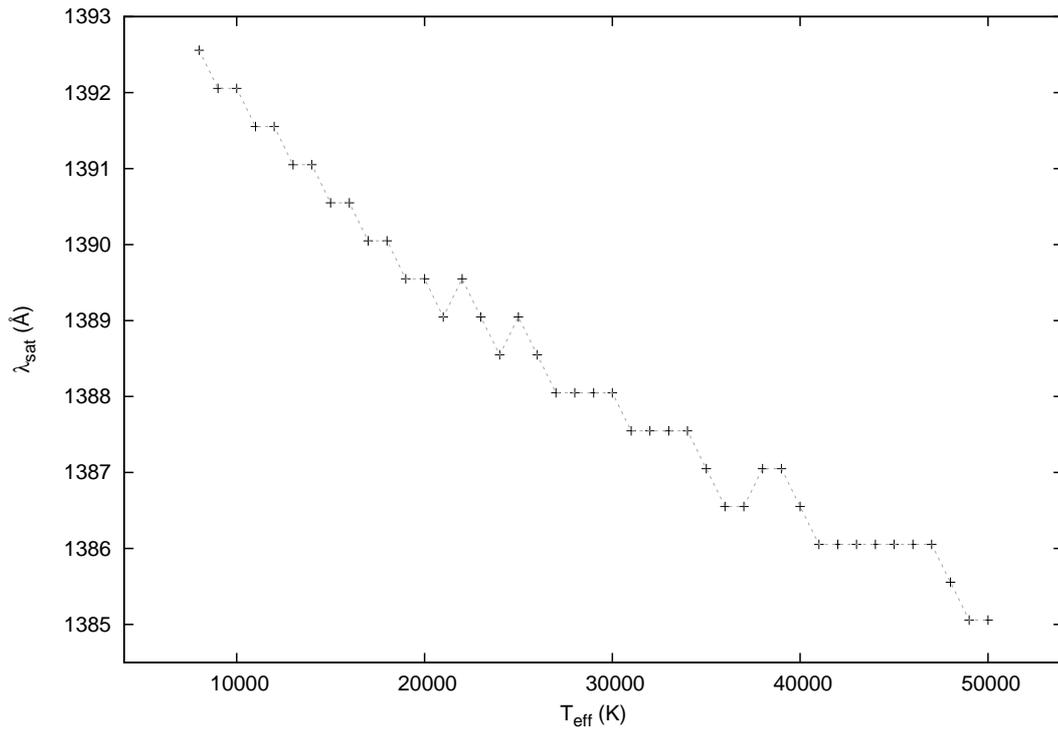


Figura 4.10: variação da posição do satélite de $\text{Ly}\alpha$ em $\sim 1400\text{\AA}$ com temperatura. Ela varia cerca de 0.5% no intervalo, de maneira irregular.

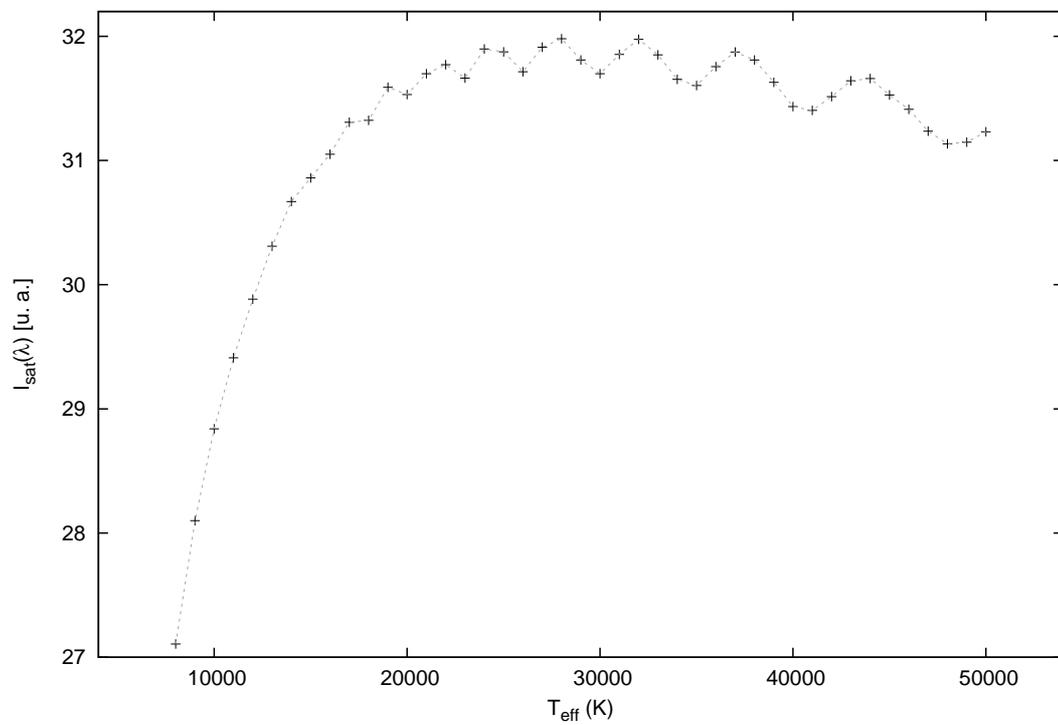


Figura 4.11: variação da amplitude do satélite de $\text{Ly}\alpha$ em $\sim 1400\text{\AA}$ com temperatura. Ela varia significativamente, apresentando oscilações provavelmente associadas à compensação entre taxa de alargamento e mudança na amplitude da linha, conforme descrito no texto.

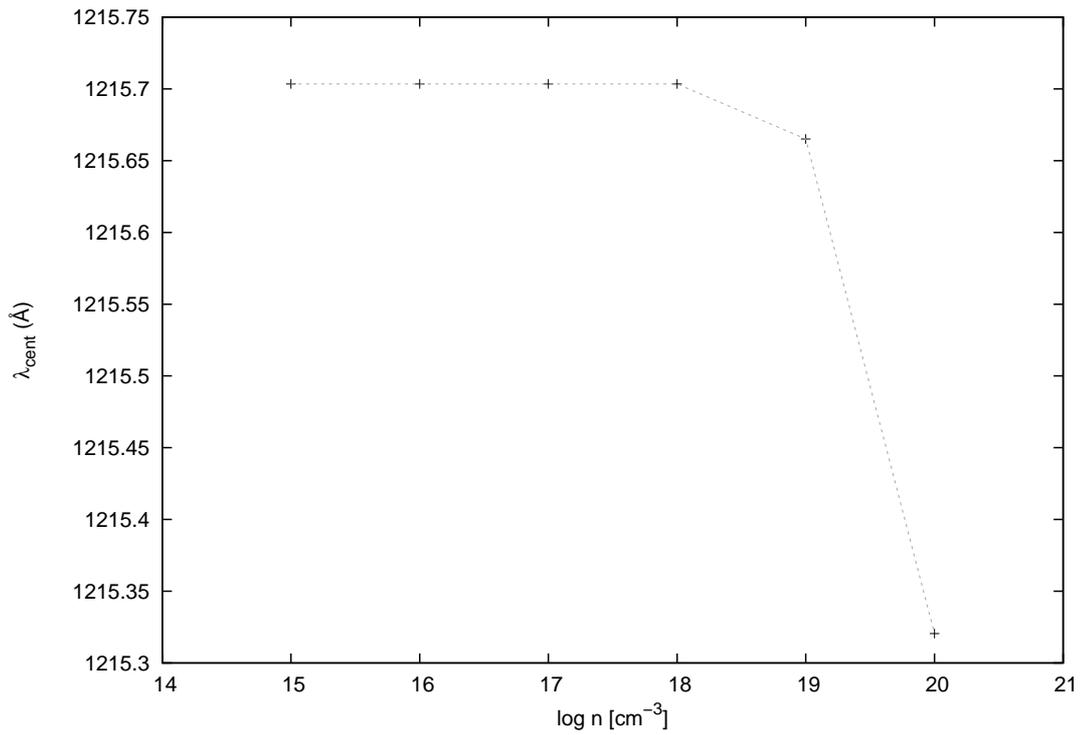


Figura 4.12: variação da posição da linha central de $\text{Ly}\alpha$ com densidade de perturbadores. Há um deslocamento de apenas $\sim 0.03\%$ para densidades mais altas.

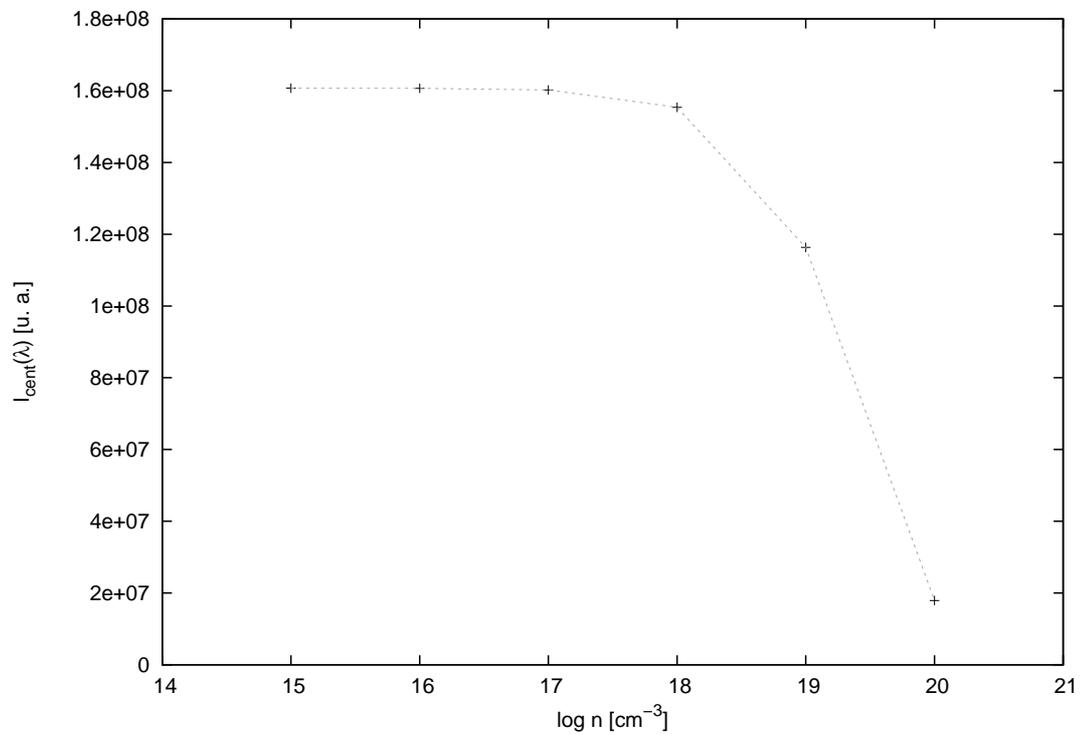


Figura 4.13: variação da amplitude da linha central de $\text{Ly}\alpha$ com densidade de perturbadores. Ela cai bastante com o aumento da densidade, em razão do alargamento da linha.

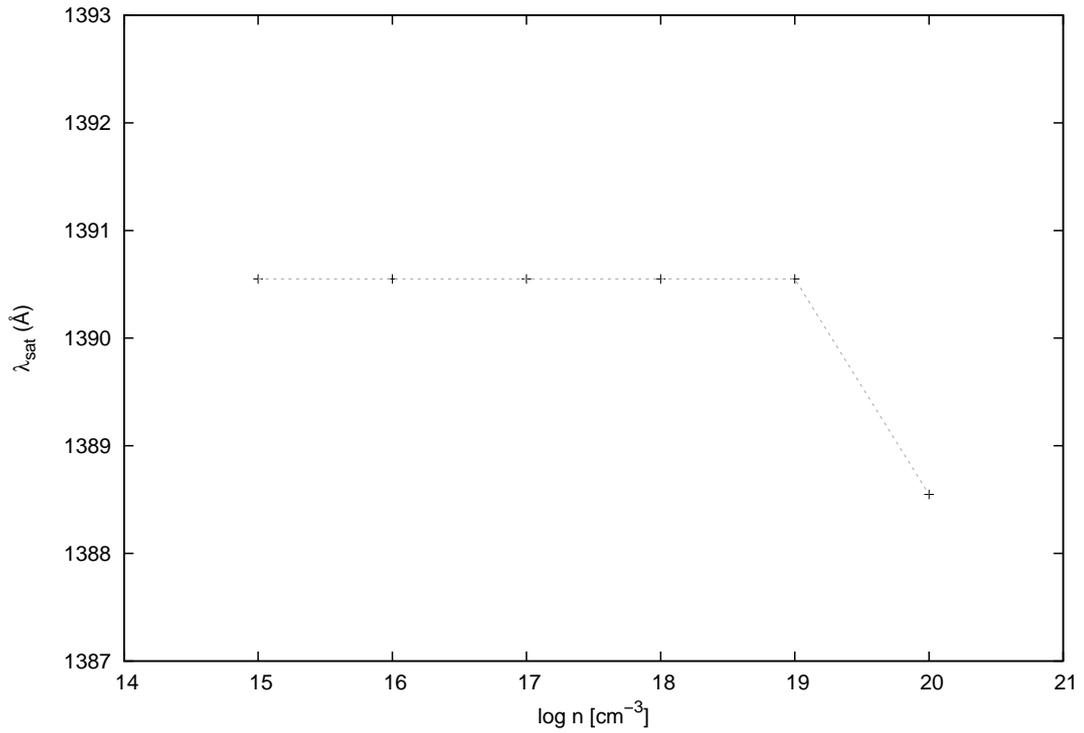


Figura 4.14: variação da posição do satélite de $\text{Ly}\alpha$ em $\sim 1400\text{\AA}$ com densidade de perturbadores. Ocorre mudança notável apenas para alta densidade.

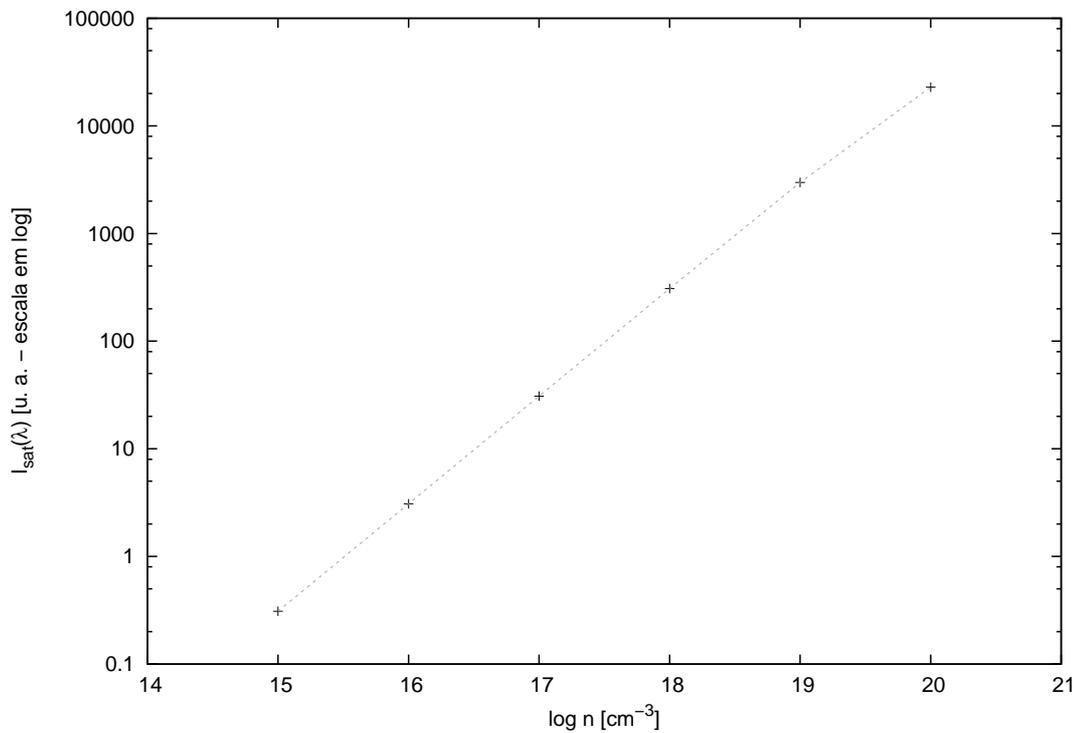


Figura 4.15: variação da amplitude do satélite de $\text{Ly}\alpha$ em $\sim 1400\text{\AA}$ com densidade de perturbadores. Há um aumento exponencial com a densidade.

4.1.2 Lyman- β

Lyman- β tem comprimento de onda central 1026Å e possui contribuições devido a dez transições do H_2^+ , das quais cinco geram satélites (tabela 4.2). Dois desses satélites, próximos a 1060Å e 1078Å, foram identificados por Koester *et al.* (1996) no espectro UV da anã branca DA Wolf 1346 obtido com o *Hopkins Ultraviolet Telescope* (HUT) [57]. Nesse mesmo artigo, a contribuição quase-molecular, calculada com a teoria unificada, mas assumindo dipolos constantes, já é incluída no modelo de atmosfera. Posteriormente, Allard, Kielkopf & Feautrier (1998) abordaram novamente o problema considerando os momentos de dipolo [58].

Esses dois satélites aparecem claramente nos perfis aqui calculados, podendo ser associados às transições $1s\sigma_g-4f\pi_u$ e $2p\sigma_u-5g\sigma_g$, respectivamente. Além disso, outro satélite em torno de 1033Å também pode ser notado, conseqüente do efeito combinado das transições $1s\sigma_g-6h\sigma_u$, $2p\sigma_u-4d\sigma_g$ e $2p\sigma_u-5g\pi_g$, mas ele está muito próximo ao centro da linha para ser observado em estrelas anãs brancas, que têm as linhas bastante alargadas devido à alta densidade.

n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)
$1s\sigma_g$	$3p\pi_u$	2	-
$1s\sigma_g$	$4p\sigma_u$	1	-
$1s\sigma_g$	$4f\pi_u$	2	1061.13
$1s\sigma_g$	$5f\sigma_u$	1	-
$1s\sigma_g$	$6h\sigma_u$	1	1035.90
$2p\sigma_u$	$3s\sigma_g$	1	-
$2p\sigma_u$	$4d\sigma_g$	1	1033.59
$2p\sigma_u$	$4d\pi_g$	2	-
$2p\sigma_u$	$5g\sigma_g$	1	1078.41
$2p\sigma_u$	$5g\pi_g$	2	1031.24

Tabela 4.2: níveis inicial e final, peso estatístico e o comprimento de onda dos satélites das dez transições que contribuem para Lyman- β para uma temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17}cm^{-3} .

Na figura 4.16, vê-se o comportamento dos perfis para diferentes densidades. Da mesma forma que para Ly α , a variação é pouca: o fluxo e a largura da linha central aumentam com a densidade. Como o efeito de colisões não é, especialmente em anãs brancas, o mecanismo dominante de alargamento, essa variação é pouco importante. O comportamento com a temperatura encontra-se na figura 4.17, para uma densidade de perturbadores de 10^{18}cm^{-3} e temperaturas entre 10000K e 20000K, representativas do intervalo em que os satélites são observados. Nota-se que, exceto pela asa da linha, que é extrapolada linearmente a partir de 1080Å, os perfis tanto da linha central quanto do satélite pouco variam com temperatura.

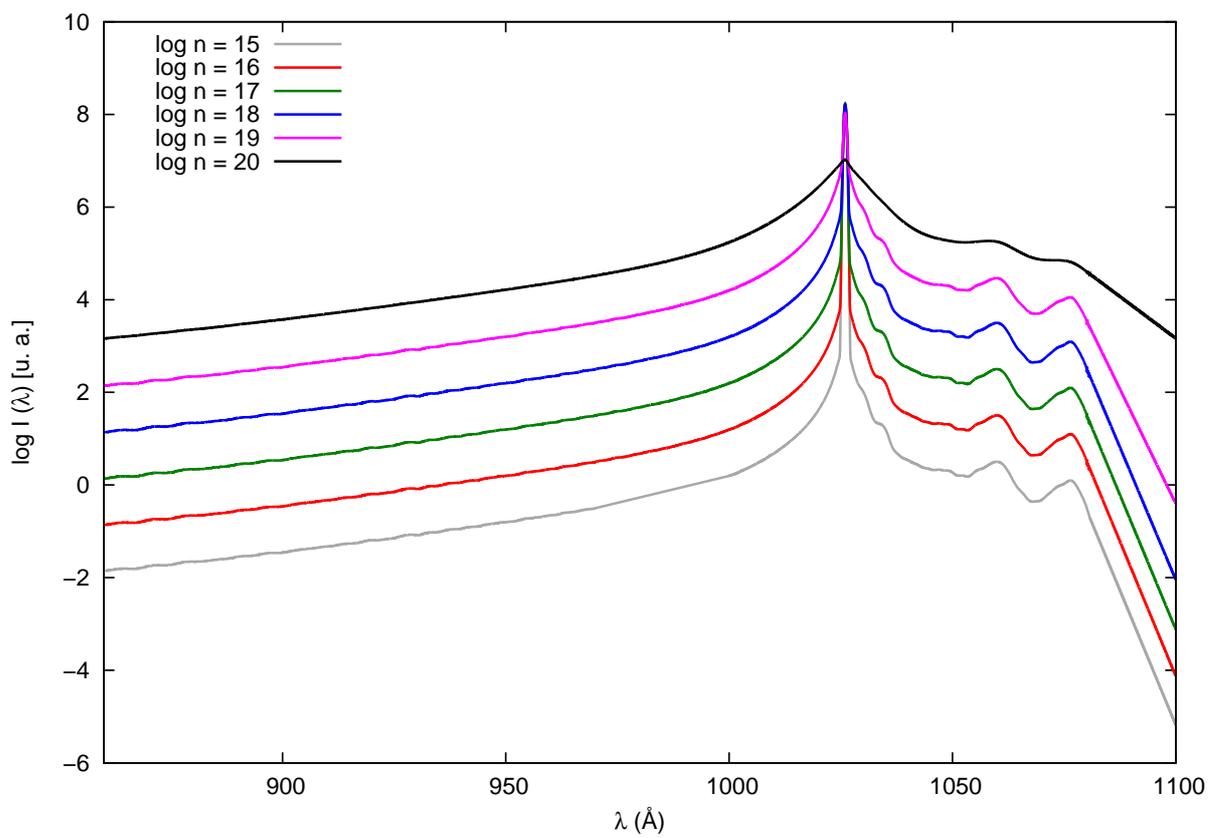


Figura 4.16: perfis de Lyman- β para diferentes densidades de perturbadores, entre 10^{15}cm^{-3} e 10^{20}cm^{-3} , para uma temperatura de 15000K.

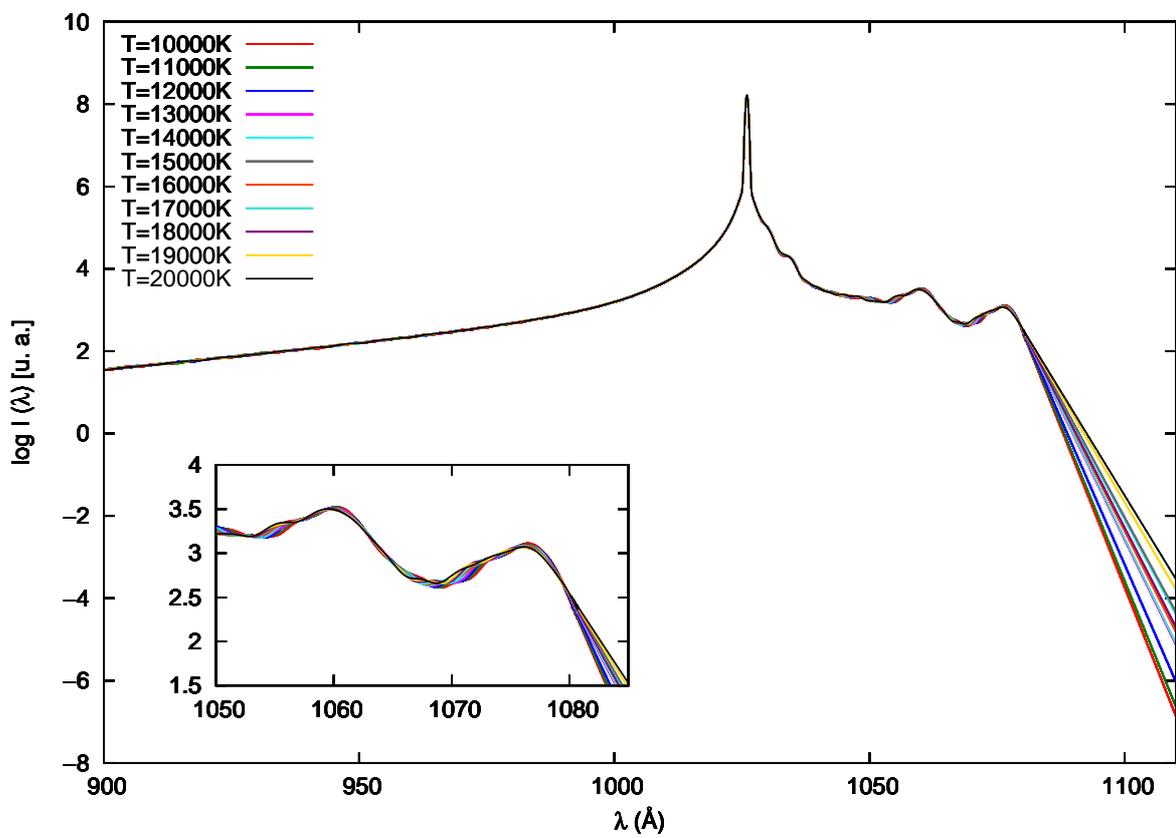


Figura 4.17: perfis de Lyman- β para diferentes temperaturas, entre 10000K e 20000K, para uma densidade de perturbadores de 10^{18}cm^{-3} .

4.1.3 Lyman- γ

Lyman- γ tem comprimento de onda central de aproximadamente 972Å. Quatorze transições da quase-molécula H_2^+ contribuem diretamente para essa linha; dessas, sete apresentam satélites, conforme tabela 4.3. Um satélite próximo a 990Å foi identificado por Wolff *et al.* (2001) [59] como satélite de Lyman- γ . Wolff *et al.* também apontam que tal característica está presente no espectro da Wolf 1346 obtido com o HUT [57] e em alguns espectros obtidos com o *Orbiting Retrievable Far and Extreme Ultraviolet Spectrograph* (ORFEUS) [64], apesar de não identificada.

Modelos foram calculados por Allard *et al.* (2004), assumindo dipolo constante [61], e Allard, Noselidze & Kruk (2009), considerando a variação do dipolo [65]. Eles identificam esse satélite como uma combinação dos satélites devidos a duas transições: $1s\sigma_g-6h\pi_u$ e $2p\sigma_u-7i\sigma_g$, resultado também obtido no presente trabalho. Nesses artigos, também é previsto outro satélite próximo a 974Å, muito próximo ao centro da linha para ser detectado em estrelas anãs brancas. Ele é identificado como efeito combinado de outras duas transições, $2p\sigma_u-7i\pi_g$ e $1s\sigma_g-8k\sigma_u^3$, o que também concorda com o encontrado aqui. Possivelmente as transições $1s\sigma_g-5f\pi_u$ e $1s\sigma_g-7h\sigma_u$ também contribuem para esse satélite, o que não foi apontado nos artigos citados. O satélite próximo a 984Å, que aparece com baixíssima amplitude no nosso perfil total, também não é mencionado nesses artigos, mas é listado por Santos & Kepler (2012) [20].

n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)
$1s\sigma_g$	$4p\pi_u$	2	-
$1s\sigma_g$	$5p\sigma_u$	1	-
$1s\sigma_g$	$5f\pi_u$	2	973.61
$1s\sigma_g$	$6f\sigma_u$	1	-
$1s\sigma_g$	$6h\pi_u$	2	992.19
$1s\sigma_g$	$7h\sigma_u$	1	974.01
$1s\sigma_g$	$8k\sigma_u$	1	978.40
$2p\sigma_u$	$4s\sigma_g$	1	-
$2p\sigma_u$	$5d\sigma_g$	1	-
$2p\sigma_u$	$5d\pi_g$	2	-
$2p\sigma_u$	$6g\sigma_g$	1	984.77
$2p\sigma_u$	$6g\pi_g$	2	-
$2p\sigma_u$	$7i\sigma_g$	1	996.06
$2p\sigma_u$	$7i\pi_g$	2	976.79

Tabela 4.3: níveis inicial e final, peso estatístico e o comprimento de onda dos satélites das 14 transições que contribuem para Lyman- γ para uma temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17}cm^{-3} .

³O nível $8k\sigma_u$ é denotado erroneamente nos artigos de Allard *et al.* (2004) [61] e Allard, Noselidze & Kruk [65] como $8j\sigma_u$. A letra j não é utilizada para representação de orbitais, como descrito na introdução deste trabalho.

A variação do perfil de Lyman- γ com a densidade de perturbadores encontra-se na figura 4.18. O comportamento é o mesmo que para as demais linhas, isto é, um alargamento da linha e aumento do fluxo com a densidade. Já o comportamento com mudança de temperatura vê-se na figura 4.19, com uma densidade de perturbadores fixa em 10^{18}cm^{-3} . As temperaturas em que calculei o perfil são de 10000K, 15000K e 20000K, que correspondem a temperaturas efetivas em que o satélite pode ser observado nas anãs brancas. Novamente não há grande variação na forma e fluxo da linha ou do satélite. O comportamento é extrapolado linearmente para comprimentos de onda acima de 995\AA .

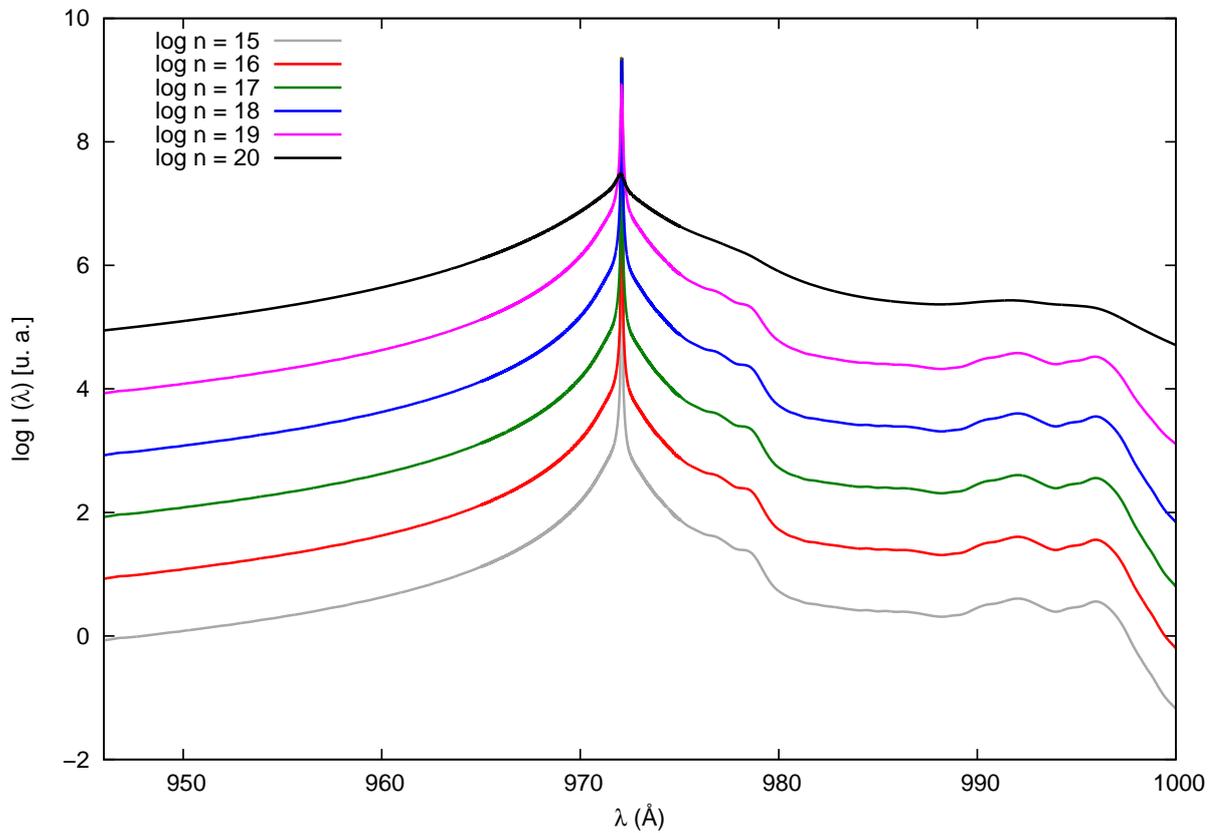


Figura 4.18: perfis de Lyman- γ para densidades de perturbadores de 10^{15}cm^{-3} , 10^{16}cm^{-3} , 10^{17}cm^{-3} , 10^{18}cm^{-3} , 10^{19}cm^{-3} e 10^{20}cm^{-3} , para uma temperatura de 15000K.

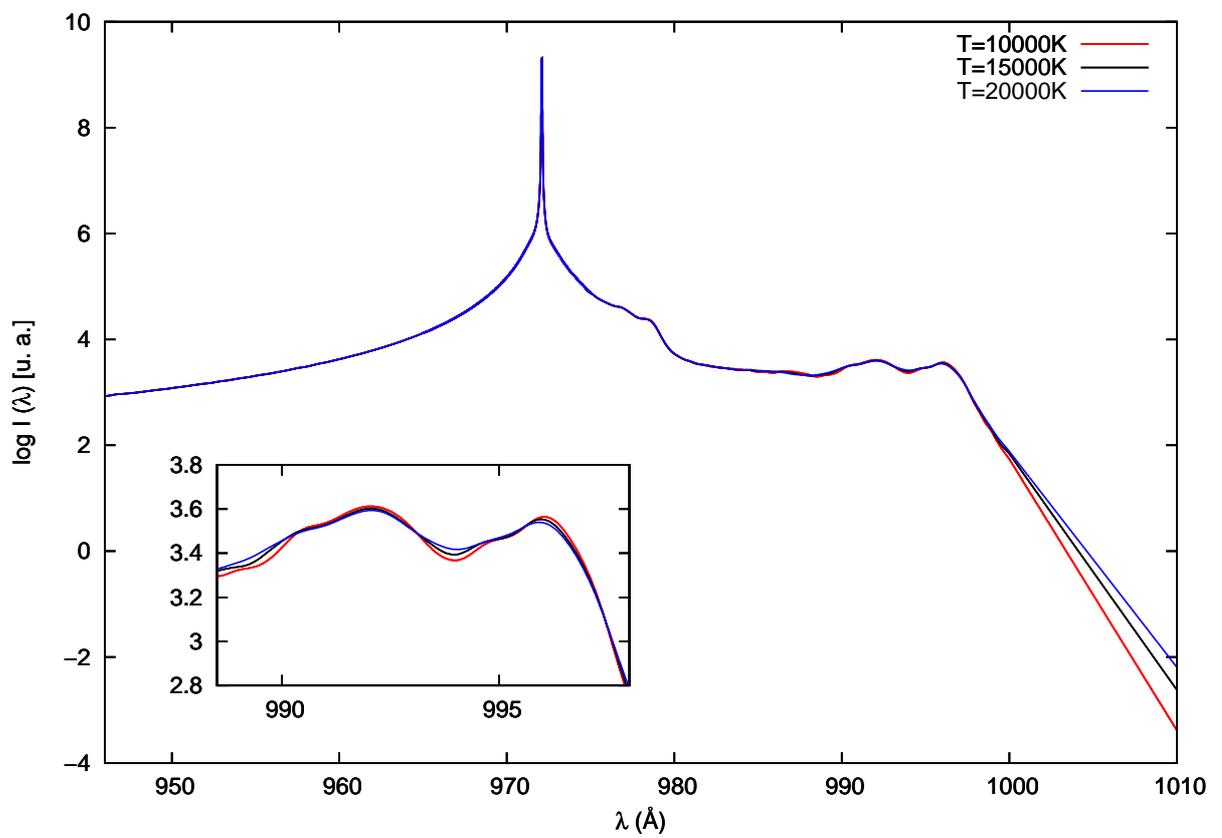


Figura 4.19: perfis de Lyman- γ para temperaturas de 10000K, 15000K e 20000K, com densidade de perturbadores igual a 10^{18}cm^{-3} .

4.1.4 Lyman- δ

A linha de Lyman- δ tem comprimento de onda aproximada de 950Å. O comprimento de onda de 18 transições do H_2^+ converge para esse valor no limite em que as partículas podem ser considerados isoladas, de modo que elas contribuem para o fluxo em Ly δ . Nove das transições apresentam satélites (tabela 4.4), mas nenhum deles foi identificado em experimentos ou observações astronômicas até o momento. No perfil total, resulta um satélite bastante proeminente próximo a 962Å, resultante do efeito combinado das transições $1s\sigma_g-8k\pi_u$ e $2p\sigma_u-9l\sigma_g$, o qual possivelmente possa ser detectado em espectros de DAs brilhantes em alta resolução e com alta razão sinal-ruído. Outras quatro transições, $1s\sigma_g-9k\sigma_u$, $2p\sigma_u-7g\sigma_g$, $2p\sigma_u-8i\pi_g$ e $2p\sigma_u-9l\pi_g$, combinam-se formando um satélite em 952Å, bem próximo ao centro da linha — portanto, provavelmente não-observável em espectros reais de anãs brancas. O satélite em 955Å, combinação das contribuições de $1s\sigma_g-7h\pi_u$ e $1s\sigma_g-10m\sigma_u$, pode também ser visto no perfil total, mas com baixíssima amplitude. Os resultados obtidos, que consistem na primeira determinação via teoria unificada do perfil de Ly δ , concordam com os perfis quase-estáticos obtidos na tese de Márcio Santos [63].

n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)
$1s\sigma_g$	$5p\pi_u$	2	-
$1s\sigma_g$	$6p\sigma_u$	1	-
$1s\sigma_g$	$6f\pi_u$	2	-
$1s\sigma_g$	$7f\sigma_u$	1	-
$1s\sigma_g$	$7h\pi_u$	2	955.70
$1s\sigma_g$	$8h\sigma_u$	1	-
$1s\sigma_g$	$8k\pi_u$	2	961.35
$1s\sigma_g$	$9k\sigma_u$	1	951.83
$1s\sigma_g$	$10m\sigma_u$	1	954.90
$2p\sigma_u$	$5s\sigma_g$	1	-
$2p\sigma_u$	$6d\sigma_g$	1	-
$2p\sigma_u$	$6d\pi_g$	2	-
$2p\sigma_u$	$7g\sigma_g$	1	951.27
$2p\sigma_u$	$7g\pi_g$	2	-
$2p\sigma_u$	$8i\sigma_g$	1	959.22
$2p\sigma_u$	$8i\pi_g$	2	951.13
$2p\sigma_u$	$9l\sigma_g$	1	962.26
$2p\sigma_u$	$9l\pi_g$	2	952.80

Tabela 4.4: níveis inicial e final, peso estatístico e o comprimento de onda dos satélites das 18 transições que contribuem para Lyman- δ para uma temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17}cm^{-3} .

O comportamento do perfil de Lyman- δ com a densidade de perturbadores pode ser visto na figura 4.20. Nota-se, como anteriormente, apenas que, com o aumento da den-

sidade, a linha é alargada e seu fluxo aumenta. A variação do perfil com a temperatura, por sua vez, encontra-se na figura 4.21. As temperaturas consideradas foram 10000K, 15000K e 20000K, com uma densidade de perturbadores fixa em 10^{18}cm^{-3} . A linha central não mostra variação significativa, mas o satélite em 962\AA parece deslocar-se ligeiramente para menores comprimentos de onda com o aumento da temperatura, de forma semelhante ao que ocorre para o satélite mais forte de $\text{Ly}\alpha$. A extrapolação ocorre aqui para comprimentos de onda maiores que 964\AA .

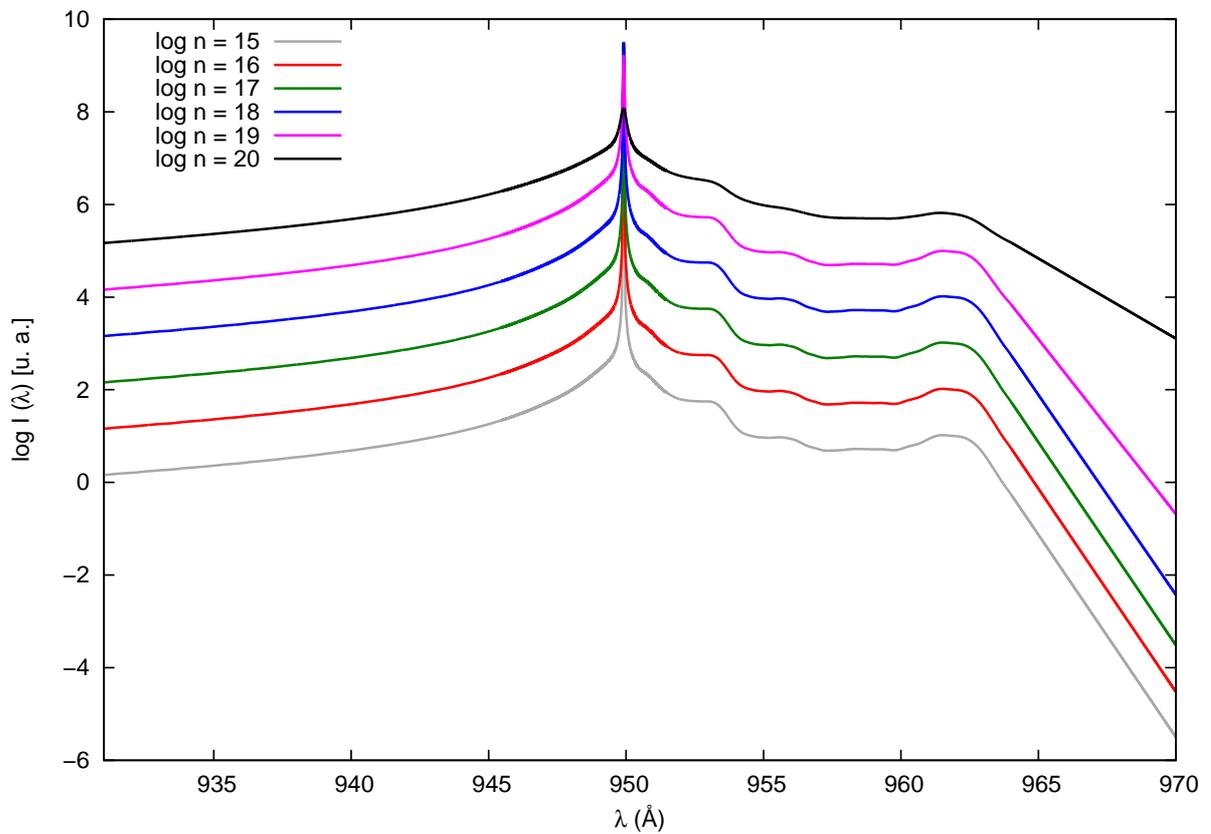


Figura 4.20: perfis de Lyman- δ para densidades de perturbadores de 10^{15}cm^{-3} , 10^{16}cm^{-3} , 10^{17}cm^{-3} , 10^{18}cm^{-3} , 10^{19}cm^{-3} e 10^{20}cm^{-3} , para uma temperatura de 15000K.

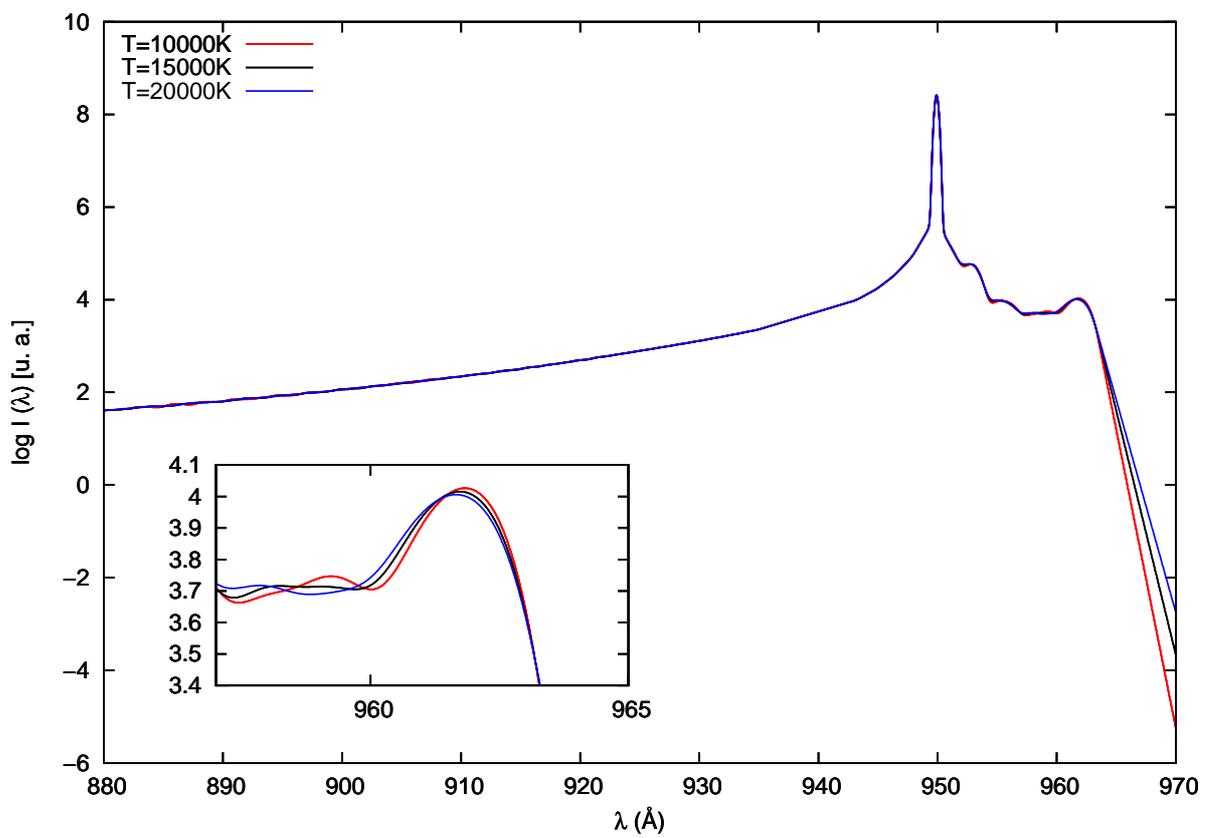


Figura 4.21: perfis de Lyman- δ para temperaturas de 10000K, 15000K e 20000K, com densidade de perturbadores de igual a 10^{18}cm^{-3} .

4.2 Série de Balmer

A série de Balmer consiste nas linhas decorrentes de transições que possuem o nível $n = 2$ como final (emissão) ou inicial (absorção). Ela é observada na banda visível, entre os comprimentos de onda de 3646\AA ($H\infty$) e 6563\AA ($H\alpha$). São as linhas mais fortes em estrelas da sequência principal do tipo A e, além disso, as únicas a serem observadas na banda visível em anãs brancas DAs.

Até o momento, não foram detectados satélites nas linhas de Balmer de objetos astronômicos. A única detecção relatada é de Kielkopf, Allard & Decrette (2002) [66], que observaram um satélite de Balmer- α próximo a 8500\AA em um plasma produzido por laser. Outros experimentos com plasmas gerados por descarga de raio-X estão sendo realizados no *Z Pulsed Power Facility*, no *Sandia National Laboratories*, com o objetivo de gerar perfis para a série de Balmer que sirvam, justamente, como referência para o aprimoramento dos perfis teóricos e modelos de atmosfera, mas poucos dados foram publicados até o momento, sendo o único perfil apresentado o de Balmer- β em torno da linha central [16,67].

O trabalho de Kielkopf, Allard & Decrette (2002) é o único envolvendo o cálculo via teoria unificada de perfis da série de Balmer de hidrogênio perturbado por prótons [66]. Ademais, existem os cálculos apresentados por Márcio Santos em sua tese de doutorado [63] para a série de Balmer até Balmer-10, seguindo a teoria quase-estática, e publicados em Santos & Kepler (2012) [20]. No meu trabalho, utilizo os mesmos dados de níveis de energia e dipolos para o cálculo unificado dos perfis de todas essas linhas. Na figura 4.22, podem-se ver todos os perfis para temperatura de $10\,000\text{K}$ e densidade de perturbadores de 10^{17} cm^{-3} , com os picos normalizados para a população aproximada de quase-moléculas H_2^+ no nível superior na atmosfera de uma anã branca nessas condições, bem como uma lei de Planck para mesma temperatura. O mesmo é mostrado na figura 4.23 na mesma escala de comprimento de onda dos perfis obtidos por Márcio Santos em sua tese, que são exibidos na figura 4.24 para comparação, mas com normalização calculada para a soma das transições. Nota-se que, para as linhas de maior comprimento de onda, a concordância é boa. Contudo, para as linhas a partir de $H\delta$, os perfis quase-estáticos são bastante diferentes dos unificados, em especial na região do centro da linha. Vale lembrar que essa é a região onde as suposições da teoria quase-estática não são satisfeitas. Além disso, os perfis quase-estáticos para as transições individuais foram somados para obter-se o perfil final, enquanto nos perfis unificados é feita a convolução dos perfis parciais, conforme descrito no capítulo Método Computacional. Nas seções a seguir, tem-se os resultados em detalhes para cada um dos perfis que calculei para a série de Balmer.

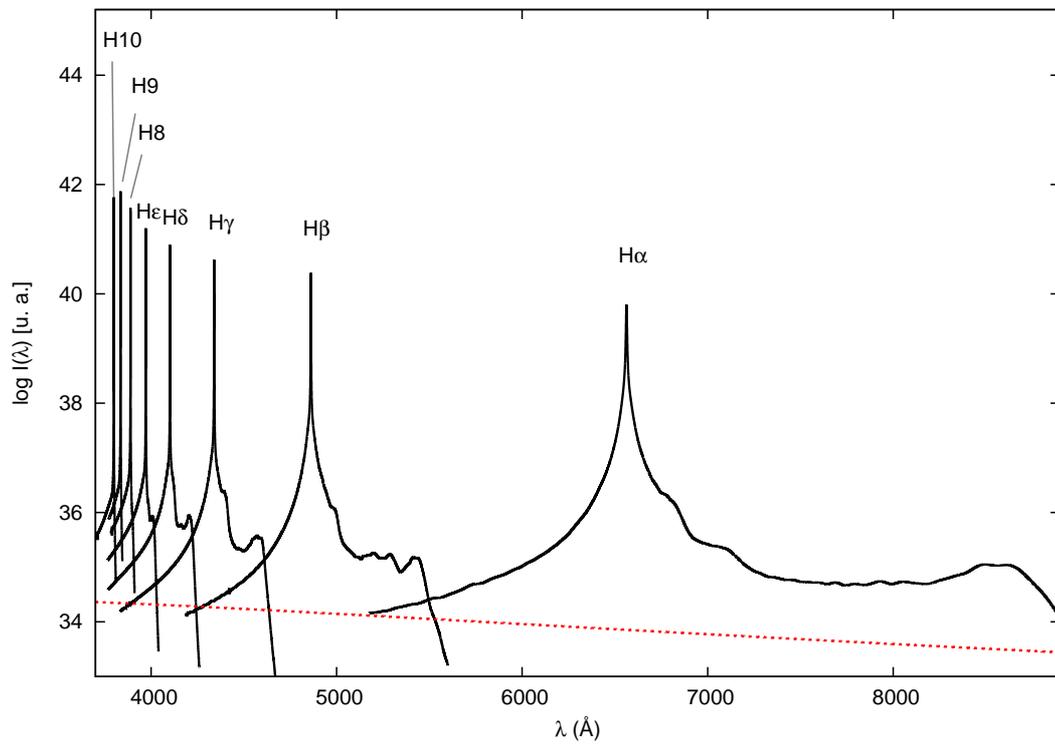


Figura 4.22: perfis para todas as linhas computadas da s rie de Balmer, com os picos normalizados para a popula o aproximada de quase-mol culas H_2^+ no n vel superior na atmosfera de uma an  branca a 10 000K e com densidade de perturbadores de 10^{17}cm^{-3} , juntamente com uma lei de Planck (linha pontilhada vermelha) para a mesma temperatura.

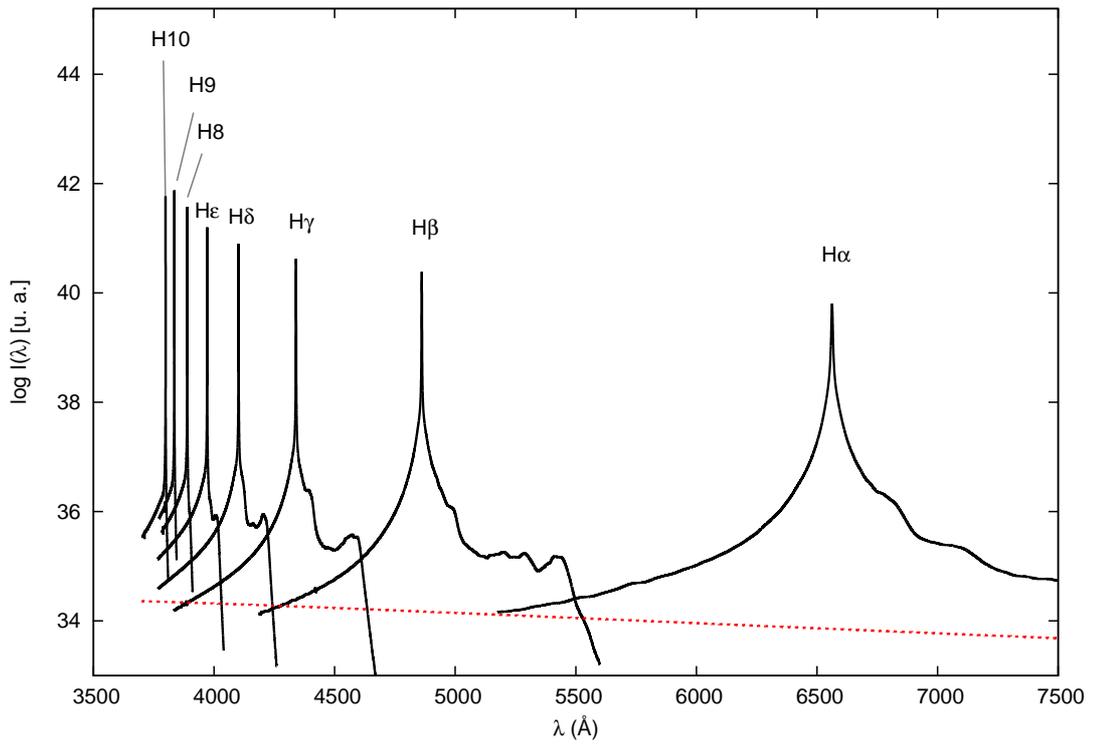


Figura 4.23: Mesmo que a figura 4.23, mas na mesma escala de comprimentos de onda da figura 4.24, que mostra os perfis quase-estáticos.

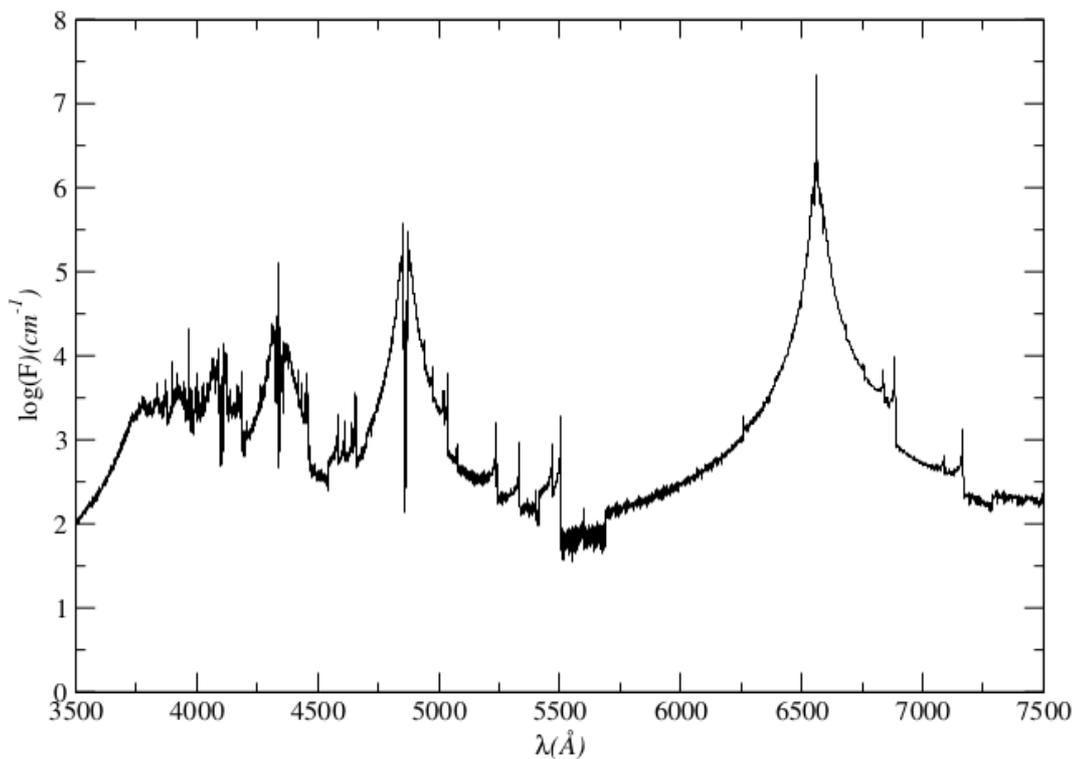


Figura 4.24: Contribuição do H_2^+ para a série de Balmer conforme calculado por Márcio Santos para temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17} cm^{-3} . A soma dos perfis é normalizada no intervalo. Adaptado da tese de Márcio Santos (2012) [63].

4.2.1 Balmer- α

A linha de Balmer- α (ou $H\alpha$), que tem comprimento de onda de aproximadamente 6563\AA , é de grande importância no estudo de anãs brancas, pois ela é a linha mais forte no visível para anãs brancas DAs, que representam cerca de 80% do total. Se a estrela é rica em hélio, a opacidade pode ser tal que apenas $H\alpha$ é visível [18], portanto é importante a determinação correta da opacidade nesse intervalo de comprimentos de onda. São 32 as transições do H_2^+ que contribuem para $H\alpha$ (tabela 4.5). Os satélites mais proeminentes estão em 7000\AA e 8500\AA , aproximadamente, como se pode ver na figura 4.25. O primeiro, devido às transições $3d\pi_g-6h\sigma_u$ e $3p\sigma_u-5g\pi_g$, provavelmente tem um fluxo apenas ligeiramente maior do que o do contínuo, o que dificultaria sua observação. Já o outro, efeito combinado das transições $3d\pi_g-4f\pi_u$ e $4f\sigma_u-5g\sigma_g$, apesar de mais intenso, está em uma região em que o sinal é baixo para anãs brancas na faixa de temperatura em que se poderiam observar satélites, pois elas emitem predominantemente no azul. Além disso, a série de Paschen (nível final ou inicial igual a 3) começa em 8200\AA , de modo que esse satélite poderia misturar-se às contribuições de Paschen, dificultando ainda mais sua detecção.

n_i	n_f	peso	λ_{sat} (\AA)	n_i	n_f	peso	λ_{sat} (\AA)
$2s\sigma_g$	$3p\pi_u$	2	-	$3d\pi_g$	$3p\pi_u$	2	-
$2s\sigma_g$	$4f\pi_u$	2	10016.16	$3d\pi_g$	$4f\delta_u$	2	5153.59
$2s\sigma_g$	$4p\sigma_u$	1	-	$3d\pi_g$	$4f\pi_u$	2	8642.75
$2s\sigma_g$	$5f\sigma_u$	1	6754.72	$3d\pi_g$	$4p\sigma_u$	1	5124.79
$2s\sigma_g$	$6h\sigma_u$	1	7284.10	$3d\pi_g$	$5f\sigma_u$	1	-
$2p\pi_u$	$3d\delta_g$	2	6680.34	$3d\pi_g$	$6h\sigma_u$	1	7086.13
$2p\pi_u$	$3s\sigma_g$	1	-	$3p\sigma_u$	$3s\sigma_g$	1	-
$2p\pi_u$	$4d\pi_g$	2	-	$3p\sigma_u$	$4d\pi_g$	2	-
$2p\pi_u$	$4d\sigma_g$	1	6851.91	$3p\sigma_u$	$4d\sigma_g$	1	8322.87
$2p\pi_u$	$5g\pi_g$	2	6836.39	$3p\sigma_u$	$5g\pi_g$	2	7093.02
$2p\pi_u$	$5g\sigma_g$	1	9772.65	$3p\sigma_u$	$5g\sigma_g$	1	10885.42
$3d\sigma_g$	$3p\pi_u$	2	-	$4f\sigma_u$	$3s\sigma_g$	1	-
$3d\sigma_g$	$4f\pi_u$	2	7164.34	$4f\sigma_u$	$4d\pi_g$	2	-
$3d\sigma_g$	$4p\sigma_u$	1	4912.44	$4f\sigma_u$	$4d\sigma_g$	1	-
$3d\sigma_g$	$5f\sigma_u$	1	-	$4f\sigma_u$	$5g\pi_g$	2	6618.89
$3d\sigma_g$	$6h\sigma_u$	1	6883.85	$4f\sigma_u$	$5g\sigma_g$	1	8783.44

Tabela 4.5: níveis inicial e final, peso estatístico e o comprimento de onda previsto dos satélites das 32 transições que contribuem para Balmer- α para uma temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17}cm^{-3} .

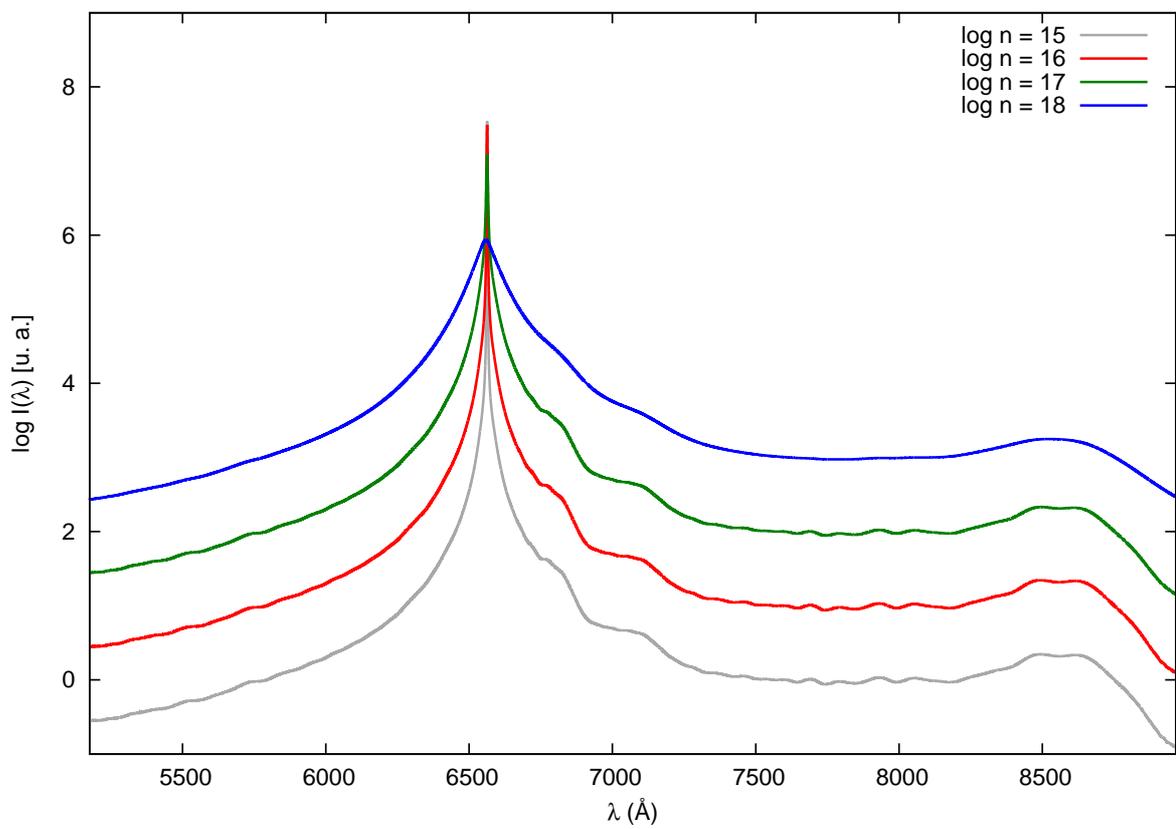


Figura 4.25: perfil da linha de Balmer- α para temperatura de 10000K e densidades de perturbadores entre 10^{15}cm^{-3} e 10^{20}cm^{-3} .

4.2.2 Balmer- β

Balmer- β , em aproximadamente 4861Å, tem contribuições devido a 46 transições da molécula de H_2^+ , conforme a tabela 4.6. Nenhum satélite é muito proeminente, sendo o mais forte deles em 5400Å, efeito combinado das transições $3d\sigma_g$ - $6h\pi_u$, $3d\pi_g$ - $6h\pi_u$ e $3p\sigma_u$ - $6g\sigma_g$. Um grande número de satélites menos intensos distribuídos pela asa vermelha torna a linha bastante assimétrica quando comparadas suas asas, como pode ser visto na figura 4.26. Esse efeito é importante, pois, se desconsiderada a possibilidade de formação da quase-molécula e tratada a interação do próton com o hidrogênio como idêntica a do elétron com o hidrogênio, tal assimetria inexistente, já que ela se deve às contribuições dos estados ligados.

n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)	n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)
$2s\sigma_g$	$4p\pi_u$	2	-	$3d\pi_g$	$4p\pi_u$	2	-
$2s\sigma_g$	$5f\pi_u$	2	5110.503	$3d\pi_g$	$5f\delta_u$	2	-
$2s\sigma_g$	$5p\sigma_u$	1	-	$3d\pi_g$	$5f\pi_u$	2	4932.407
$2s\sigma_g$	$6f\sigma_u$	1	-	$3d\pi_g$	$5p\sigma_u$	1	3263.855
$2s\sigma_g$	$6h\pi_u$	2	5591.150	$3d\pi_g$	$6f\sigma_u$	1	-
$2s\sigma_g$	$7h\sigma_u$	1	4989.356	$3d\pi_g$	$6h\delta_u$	2	4938.117
$2s\sigma_g$	$8k\sigma_u$	1	5110.102	$3d\pi_g$	$6h\pi_u$	2	5467.601
$2p\pi_u$	$4d\delta_g$	2	-	$3d\pi_g$	$7h\sigma_u$	1	4936.639
$2p\pi_u$	$4s\sigma_g$	1	-	$3d\pi_g$	$8k\sigma_u$	1	5074.635
$2p\pi_u$	$5d\pi_g$	2	-	$3p\sigma_u$	$4s\sigma_g$	1	-
$2p\pi_u$	$5d\sigma_g$	1	-	$3p\sigma_u$	$5d\pi_g$	2	-
$2p\pi_u$	$5g\delta_g$	2	5237.501	$3p\sigma_u$	$5d\sigma_g$	1	-
$2p\pi_u$	$6g\pi_g$	2	-	$3p\sigma_u$	$6g\pi_g$	2	4892.262
$2p\pi_u$	$6g\sigma_g$	1	5242.085	$3p\sigma_u$	$6g\sigma_g$	1	5399.923
$2p\pi_u$	$7i\pi_g$	2	5019.322	$3p\sigma_u$	$7i\pi_g$	2	5065.180
$2p\pi_u$	$7i\sigma_g$	1	5599.990	$3p\sigma_u$	$7i\sigma_g$	1	5687.524
$3d\sigma_g$	$4p\pi_u$	2	-	$4f\sigma_u$	$4s\sigma_g$	1	-
$3d\sigma_g$	$5f\pi_u$	2	-	$4f\sigma_u$	$5d\pi_g$	2	-
$3d\sigma_g$	$5p\sigma_u$	1	3217.035	$4f\sigma_u$	$5d\sigma_g$	1	11177.08
$3d\sigma_g$	$6f\sigma_u$	1	-	$4f\sigma_u$	$6g\pi_g$	2	-
$3d\sigma_g$	$6h\pi_u$	2	5334.030	$4f\sigma_u$	$6g\sigma_g$	1	5082.083
$3d\sigma_g$	$7h\sigma_u$	1	4888.410	$4f\sigma_u$	$7i\pi_g$	2	4972.617
$3d\sigma_g$	$8k\sigma_u$	1	5037.230	$4f\sigma_u$	$7i\sigma_g$	1	5503.447

Tabela 4.6: níveis inicial e final, peso estatístico e o comprimento de onda previsto dos satélites das 46 transições que contribuem para Balmer- β para uma temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17}cm^{-3} .

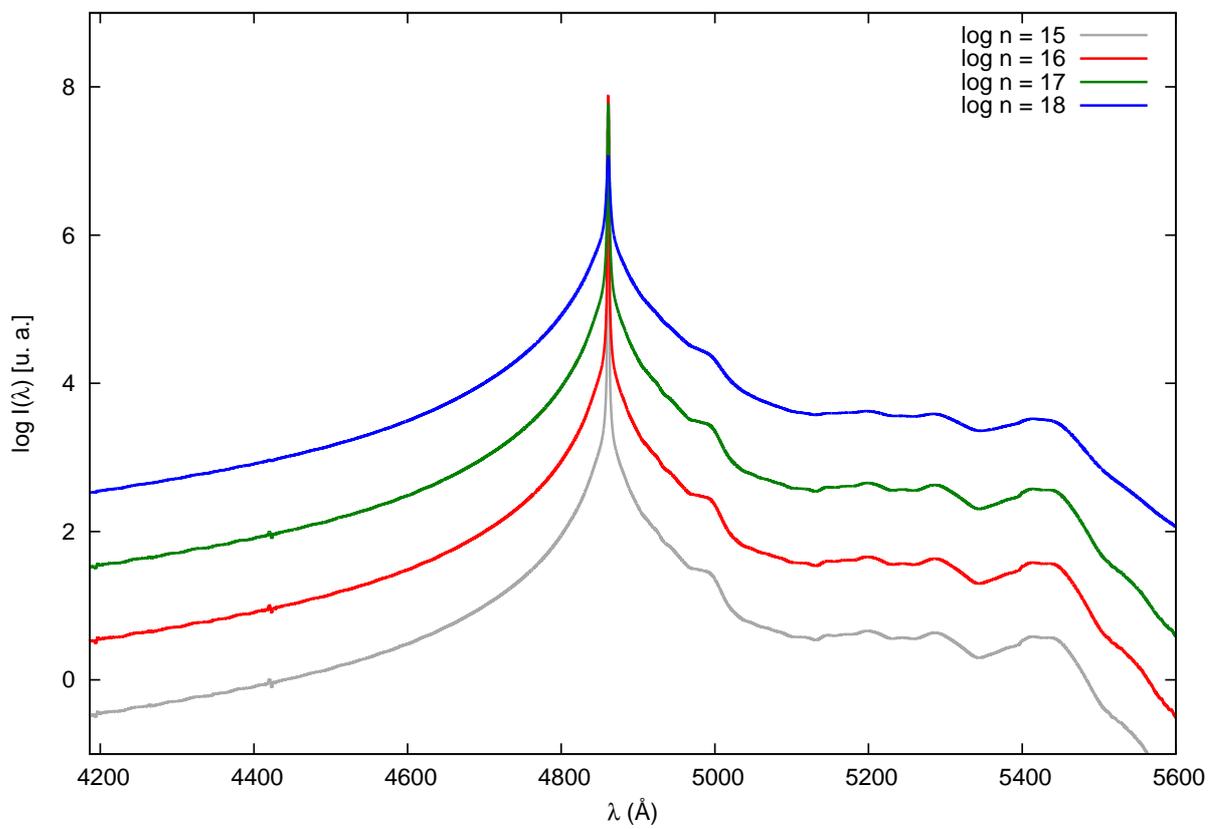


Figura 4.26: perfil da linha de Balmer- β para temperatura de 10000K e densidades de perturbadores entre 10^{15}cm^{-3} e 10^{20}cm^{-3} .

Apesar da não-detecção de satélites, experimentos com plasmas gerados por descarga elétrica parecem indicar a existência de dois picos assimétricos no centro da linha [16, 68]. Perfis calculados considerando o efeito Stark indicam a existência de uma depressão central exatamente no centro da linha, que tem, portanto, dois picos simétricos separados de alguns ângströms. Todavia, nos experimentos, tais picos aparecem consistentemente com uma leve assimetria. Santos & Kepler [20] encontram essa assimetria em seus perfis realizando um cálculo quase-estático. Contudo, os picos mencionados apresentam $\Delta f \approx 6.3 \cdot 10^{11}$ Hz, o que indica que o tempo médio entre colisões T é da ordem de $1.6 \cdot 10^{-12}$ s. Já a duração de uma colisão para uma temperatura de ordem de 13500K, que pode ser estimada como $t = 2a/\bar{v}$, sendo a o alcance do potencial e \bar{v} a velocidade média maxwelliana na dada temperatura, é da ordem de $4.8 \cdot 10^{-13}$ s. Ou seja: o tempo de duração da colisão é *menor* do que o tempo entre colisões, que é o contrário do que se assume na teoria quase-estática, que, portanto, não deve ser válida nessa região.

Nesse caso, $T \simeq 5t$, de modo que mesmo a teoria de impacto, que assume $T \gg t$, é apenas marginalmente válida para o cálculo do comportamento nos intervalos em que tal efeito é observado. Por consequência, a teoria unificada pode também não ser adequada nessa região, já que no centro da linha ela fornece os mesmos resultados que a teoria de impacto. De fato, nenhuma assimetria ou depressão central é encontrada nos perfis aqui obtidos. Além disso, todas essas três teorias assumem que uma aproximação adiabática é válida, o que implica desprezar a possibilidade de interferência entre níveis de energia. O centro da linha é formado quando as partículas estão distantes, onde a interação é fraca e a radiação pouco se afasta daquela do átomo isolado, e nessa região os potenciais têm energias muito próximas, de sorte que efeitos não-adiabáticos tornam-se importantes. Tais efeitos são relevantes principalmente no deslocamento do comprimento de onda central para os perfis de cada uma das transições [54], efeito que pouco aparece na teoria unificada, que é mais preocupada com a determinação da *forma* da linha em todo o intervalo. Deslocamentos consideráveis e em direções distintas para cada uma das 48 transições é uma possível causa da assimetria, de modo que o tratamento adequado para estudo desse efeito seria o por meio do Método Quântico, único em que a adiabaticidade não é assumida, conforme discutido na introdução. Entretanto, segundo análises de Elton & Griem (1964), que encontraram comportamento semelhante para as linhas de $Ly\alpha$ e $Ly\beta$, experimentos com plasmas não são confiáveis para determinação do centro devido à absorção do próprio plasma nessa região [69]. Essa auto-absorção, combinada com um deslocamento do perfil em emissão devido às colisões, poderia ser a responsável pelo comportamento assimétrico, em vez do efeito das quase-moléculas.

4.2.3 Balmer- γ

Balmer- γ , cujo comprimento de onda central é de aproximadamente 4340Å, tem contribuição de 60 transições do H_2^+ , conforme descrito na tabela 4.7. No perfil total (figura 4.27), destacam-se dois satélites: um próximo a 4400Å e outro pouco antes de 4600Å. O primeiro é predominantemente um efeito combinado das transições $3d\sigma_g-9k\sigma_u$ e $3p\sigma_u-8i\pi_g$, e o segundo deve-se às transições $2p\pi_u-7i\delta_g$, $2p\pi_u-8i\sigma_g$, $3d\sigma_g-8k\pi_u$ e $3p\sigma_u-8i\sigma_g$. Nenhum desses satélites foi observado, mas eles podem ser identificados nos perfis quase-estáticos calculados por Santos & Kepler [20].

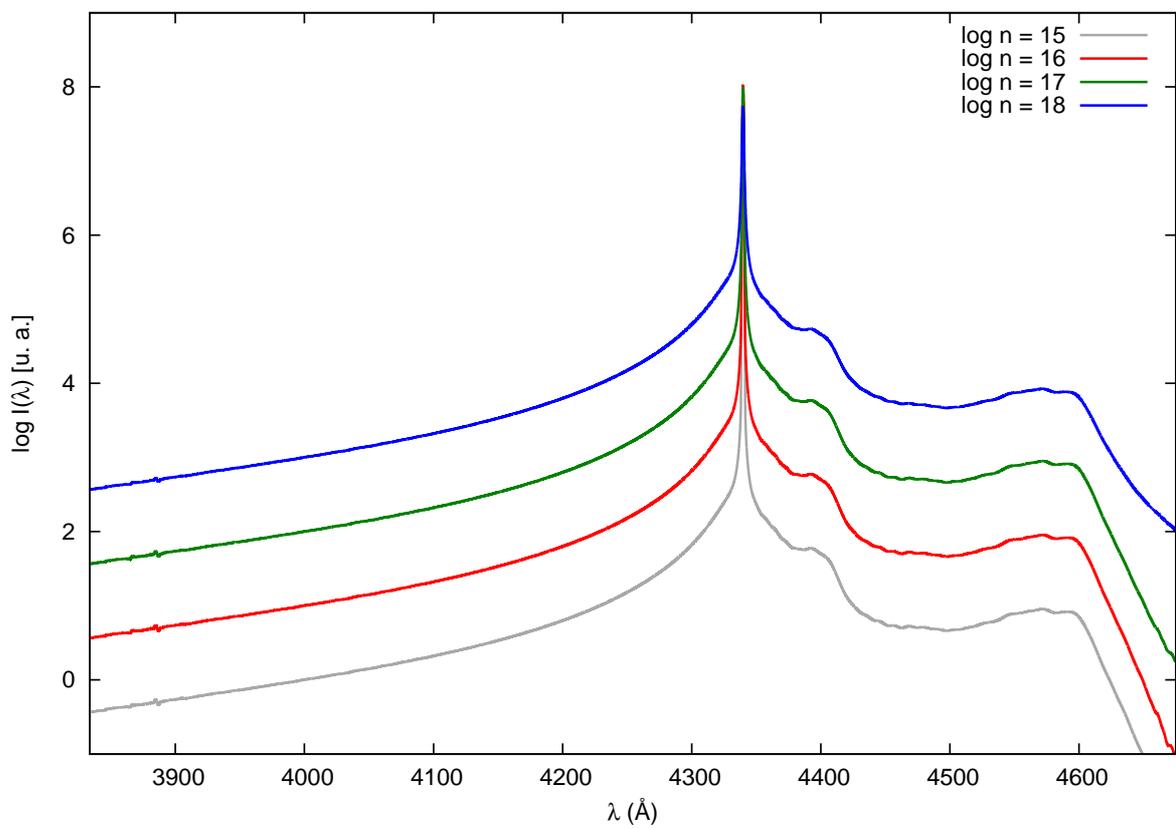


Figura 4.27: perfil da linha de Balmer- γ para temperatura de 10000K e densidades de perturbadores entre 10^{15}cm^{-3} e 10^{20}cm^{-3} .

n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)	n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)
2s σ_g	10m σ_u	1	4480.83	3d π_g	10m σ_u	1	4468.94
2s σ_g	5p π_u	2	-	3d π_g	5p π_u	2	-
2s σ_g	6f π_u	2	-	3d π_g	6f δ_u	2	-
2s σ_g	6p σ_u	1	-	3d π_g	6f π_u	2	-
2s σ_g	7f σ_u	1	-	3d π_g	6p σ_u	1	2744.59
2s σ_g	7h π_u	2	4537.71	3d π_g	7f σ_u	1	-
2s σ_g	8h σ_u	1	4348.31	3d π_g	7h δ_u	2	-
2s σ_g	8k π_u	2	4671.08	3d π_g	7h π_u	2	4489.49
2s σ_g	9k σ_u	1	4433.58	3d π_g	8h σ_u	1	-
2p π_u	5d δ_g	2	-	3d π_g	8k δ_u	2	4417.37
2p π_u	5s σ_g	1	-	3d π_g	8k π_u	2	4641.75
2p π_u	6d π_g	2	-	3d π_g	9k σ_u	1	4415.76
2p π_u	6d σ_g	1	-	3p σ_u	5s σ_g	1	-
2p π_u	6g δ_g	2	4361.60	3p σ_u	6d π_g	2	-
2p π_u	7g π_g	2	-	3p σ_u	6d σ_g	1	-
2p π_u	7g σ_g	1	4371.52	3p σ_u	7g π_g	2	-
2p π_u	7i δ_g	2	4582.12	3p σ_u	7g σ_g	1	4425.03
2p π_u	8i π_g	2	4374.73	3p σ_u	8i π_g	2	4394.91
2p π_u	8i σ_g	1	4579.55	3p σ_u	8i σ_g	1	4617.13
2p π_u	9l π_g	2	4447.67	3p σ_u	9l π_g	2	4462.57
2p π_u	9l σ_g	1	4679.69	3p σ_u	9l σ_g	1	4701.85
3d σ_g	10m σ_u	1	4456.50	4f σ_u	5s σ_g	1	-
3d σ_g	5p π_u	2	-	4f σ_u	6d π_g	2	-
3d σ_g	6f π_u	2	-	4f σ_u	6d σ_g	1	6590.05
3d σ_g	6p σ_u	1	-	4f σ_u	7g π_g	2	-
3d σ_g	7f σ_u	1	-	4f σ_u	7g σ_g	1	4322.45
3d σ_g	7h π_u	2	4440.04	4f σ_u	8i π_g	2	4355.85
3d σ_g	8h σ_u	1	-	4f σ_u	8i σ_g	1	4539.65
3d σ_g	8k π_u	2	4610.32	4f σ_u	9l π_g	2	4432.23
3d σ_g	9k σ_u	1	4397.72	4f σ_u	9l σ_g	1	4655.91

Tabela 4.7: níveis inicial e final, peso estatístico e o comprimento de onda previsto dos satélites das 60 transições que contribuem para Balmer- γ para uma temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17}cm^{-3} .

4.2.4 Balmer- δ

A linha de Balmer- δ , aproximadamente em 4102\AA , tem contribuições devido a 74 transições da molécula de H_2^+ , dadas na tabela 4.8. O satélite mais intenso é em 4200\AA , conforme pode-se ver na figura 4.28, mas ele nunca foi observado. As transições que contribuem a ele são $2s\sigma_g-12o\sigma_u$, $3d\sigma_g-9k\pi_u$, $3d\pi_g-12o\sigma_u$, $3d\pi_g-9k\pi_u$ e $3p\sigma_u-9i\sigma_g$.

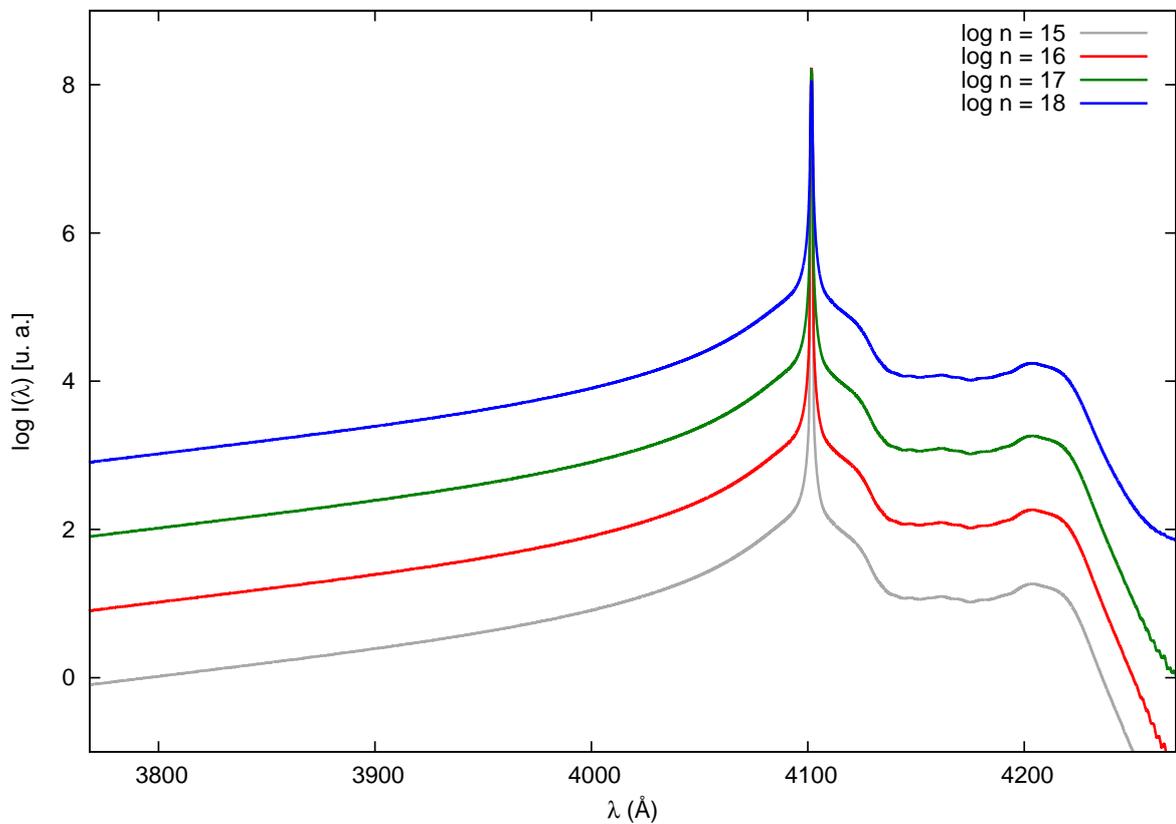


Figura 4.28: perfil da linha de Balmer- δ para um temperatura de 10000K e densidades de perturbadores entre 10^{15}cm^{-3} e 10^{20}cm^{-3} .

n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)	n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)
2s σ_g	10k σ_u	1	4130.08	3d π_g	10k σ_u	1	4120.54
2s σ_g	10m π_u	2	4294.07	3d π_g	10m δ_u	2	4165.86
2s σ_g	11m σ_u	1	4172.38	3d π_g	10m π_u	2	4283.61
2s σ_g	12o σ_u	1	4195.63	3d π_g	11m σ_u	1	4164.87
2s σ_g	6p π_u	2	-	3d π_g	12o σ_u	1	4190.44
2s σ_g	7f π_u	2	-	3d π_g	6p π_u	2	-
2s σ_g	7p σ_u	1	-	3d π_g	7f δ_u	2	-
2s σ_g	8f σ_u	1	-	3d π_g	7f π_u	2	-
2s σ_g	8h π_u	2	4139.10	3d π_g	7p σ_u	1	2512.09
2s σ_g	9h σ_u	1	-	3d π_g	8f σ_u	1	-
2s σ_g	9k π_u	2	4241.43	3d π_g	8h δ_u	2	-
2p π_u	10l π_g	2	4145.22	3d π_g	8h π_u	2	4116.55
2p π_u	10l σ_g	1	4259.06	3d π_g	9h σ_u	1	-
2p π_u	11n π_g	2	4180.03	3d π_g	9k δ_u	2	4120.31
2p π_u	11n σ_g	1	4299.48	3d π_g	9k π_u	2	4225.01
2p π_u	6d δ_g	2	-	3p σ_u	10l π_g	2	4154.07
2p π_u	6s σ_g	1	-	3p σ_u	10l σ_g	1	4272.07
2p π_u	7d π_g	2	-	3p σ_u	11n π_g	2	4186.35
2p π_u	7d σ_g	1	-	3p σ_u	11n σ_g	1	4307.79
2p π_u	7g δ_g	2	-	3p σ_u	6s σ_g	1	-
2p π_u	8g π_g	2	-	3p σ_u	7d π_g	2	-
2p π_u	8g σ_g	1	-	3p σ_u	7d σ_g	1	-
2p π_u	8i δ_g	2	4176.35	3p σ_u	8g π_g	2	-
2p π_u	9i π_g	2	-	3p σ_u	8g σ_g	1	-
2p π_u	9i σ_g	1	4177.97	3p σ_u	9i π_g	2	4103.23
2p π_u	9l δ_g	2	4260.66	3p σ_u	9i σ_g	1	4197.77
3d σ_g	10k σ_u	1	4111.45	4f σ_u	10l π_g	2	4136.30
3d σ_g	10m π_u	2	4272.59	4f σ_u	10l σ_g	1	4245.39
3d σ_g	11m σ_u	1	4157.16	4f σ_u	11n π_g	2	4173.51
3d σ_g	12o σ_u	1	4185.06	4f σ_u	11n σ_g	1	4290.75
3d σ_g	6p π_u	2	-	4f σ_u	6s σ_g	1	-
3d σ_g	7f π_u	2	-	4f σ_u	7d π_g	2	-
3d σ_g	7p σ_u	1	-	4f σ_u	7d σ_g	1	-
3d σ_g	8f σ_u	1	-	4f σ_u	8g π_g	2	-
3d σ_g	8h π_u	2	4094.92	4f σ_u	8g σ_g	1	-
3d σ_g	9h σ_u	1	-	4f σ_u	9i π_g	2	-
3d σ_g	9k π_u	2	4207.87	4f σ_u	9i σ_g	1	4157.64

Tabela 4.8: níveis inicial e final, peso estatístico e o comprimento de onda previsto dos satélites das 74 transições que contribuem para Balmer- δ para uma temperatura de 10000K e densidade de 10^{17}cm^{-3} .

4.2.5 Balmer- ϵ

Próximo ao comprimento de onda de 3970Å, tem-se a linha de Balmer- ϵ , à qual contribuem 88 transições da molécula de H_2^+ , listadas na tabela 4.9. O satélite mais proeminente encontra-se próximo a 4000Å, mas ele é pouco intenso em relação à linha central. Várias transições formam esse satélite: $2s\sigma_g-12m\sigma_u$, $2p\pi_u-12n\pi_g$, $3d\sigma_g-10k\pi_u$, $3d\sigma_g-13o\sigma_u$, $3d\pi_g-10k\pi_u$, $3p\sigma_u-12n\pi_g$ e $4f\sigma_u-12n\pi_g$

n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)	n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)
$2s\sigma_g$	$10h\sigma_u$	1	-	$3d\pi_g$	$10h\sigma_u$	1	-
$2s\sigma_g$	$10k\pi_u$	2	4024.35	$3d\pi_g$	$10k\delta_u$	2	3791.94
$2s\sigma_g$	$11k\sigma_u$	1	3969.59	$3d\pi_g$	$10k\pi_u$	2	4014.40
$2s\sigma_g$	$11m\pi_u$	2	4071.32	$3d\pi_g$	$11k\sigma_u$	1	-
$2s\sigma_g$	$12m\sigma_u$	1	4002.48	$3d\pi_g$	$11m\delta_u$	2	3997.72
$2s\sigma_g$	$12o\pi_u$	2	4096.89	$3d\pi_g$	$11m\pi_u$	2	4064.42
$2s\sigma_g$	$13o\sigma_u$	1	4025.35	$3d\pi_g$	$12m\sigma_u$	1	3997.58
$2s\sigma_g$	$14r\sigma_u$	1	4038.44	$3d\pi_g$	$12o\delta_u$	2	4022.26
$2s\sigma_g$	$7p\pi_u$	2	-	$3d\pi_g$	$12o\pi_u$	2	4092.22
$2s\sigma_g$	$8f\pi_u$	2	-	$3d\pi_g$	$13o\sigma_u$	1	4021.67
$2s\sigma_g$	$8p\sigma_u$	1	-	$3d\pi_g$	$14r\sigma_u$	1	4035.80
$2s\sigma_g$	$9f\sigma_u$	1	-	$3d\pi_g$	$7p\pi_u$	2	-
$2s\sigma_g$	$9h\pi_u$	2	3950.55	$3d\pi_g$	$8f\delta_u$	2	-
$2p\pi_u$	$10i\pi_g$	2	-	$3d\pi_g$	$8f\pi_u$	2	-
$2p\pi_u$	$10i\sigma_g$	1	3979.30	$3d\pi_g$	$8p\sigma_u$	1	-
$2p\pi_u$	$10l\delta_g$	2	4042.78	$3d\pi_g$	$9f\sigma_u$	1	-
$2p\pi_u$	$11l\pi_g$	2	3981.41	$3d\pi_g$	$9h\delta_u$	2	-
$2p\pi_u$	$11l\sigma_g$	1	4042.80	$3d\pi_g$	$9h\pi_u$	2	-
$2p\pi_u$	$11n\delta_g$	2	4081.15	$3p\sigma_u$	$10i\pi_g$	2	-
$2p\pi_u$	$12n\pi_g$	2	4011.16	$3p\sigma_u$	$10i\sigma_g$	1	3990.40
$2p\pi_u$	$12n\sigma_g$	1	4080.27	$3p\sigma_u$	$11l\pi_g$	2	3986.65
$2p\pi_u$	$13q\pi_g$	2	4029.96	$3p\sigma_u$	$11l\sigma_g$	1	4051.09
$2p\pi_u$	$13q\sigma_g$	1	4100.35	$3p\sigma_u$	$12n\pi_g$	2	4015.48
$2p\pi_u$	$7d\delta_g$	2	-	$3p\sigma_u$	$12n\sigma_g$	1	4085.91
$2p\pi_u$	$7s\sigma_g$	1	-	$3p\sigma_u$	$13q\pi_g$	2	4033.07
$2p\pi_u$	$8d\pi_g$	2	-	$3p\sigma_u$	$13q\sigma_g$	1	4104.19
$2p\pi_u$	$8d\sigma_g$	1	-	$3p\sigma_u$	$7s\sigma_g$	1	-
$2p\pi_u$	$8g\delta_g$	2	-	$3p\sigma_u$	$8d\pi_g$	2	-
$2p\pi_u$	$9g\pi_g$	2	-	$3p\sigma_u$	$8d\sigma_g$	1	-
$2p\pi_u$	$9g\sigma_g$	1	-	$3p\sigma_u$	$9g\pi_g$	2	-
$2p\pi_u$	$9i\delta_g$	2	3977.19	$3p\sigma_u$	$9g\sigma_g$	1	-
$3d\sigma_g$	$10h\sigma_u$	1	-	$4f\sigma_u$	$10i\pi_g$	2	-
$3d\sigma_g$	$10k\pi_u$	2	4004.23	$4f\sigma_u$	$10i\sigma_g$	1	3968.34
$3d\sigma_g$	$11k\sigma_u$	1	-	$4f\sigma_u$	$11l\pi_g$	2	3976.36
$3d\sigma_g$	$11m\pi_u$	2	4057.26	$4f\sigma_u$	$11l\sigma_g$	1	4034.23
$3d\sigma_g$	$12m\sigma_u$	1	3992.67	$4f\sigma_u$	$12n\pi_g$	2	4006.76

$3d\sigma_g$	$12o\pi_u$	2	4087.37	$4f\sigma_u$	$12n\sigma_g$	1	4074.42
$3d\sigma_g$	$13o\sigma_u$	1	4017.90	$4f\sigma_u$	$13q\pi_g$	2	4026.72
$3d\sigma_g$	$14r\sigma_u$	1	4033.08	$4f\sigma_u$	$13q\sigma_g$	1	4096.36
$3d\sigma_g$	$7p\pi_u$	2	-	$4f\sigma_u$	$7s\sigma_g$	1	-
$3d\sigma_g$	$8f\pi_u$	2	-	$4f\sigma_u$	$8d\pi_g$	2	-
$3d\sigma_g$	$8p\sigma_u$	1	-	$4f\sigma_u$	$8d\sigma_g$	1	-
$3d\sigma_g$	$9f\sigma_u$	1	-	$4f\sigma_u$	$9g\pi_g$	2	-
$3d\sigma_g$	$9h\pi_u$	2	-	$4f\sigma_u$	$9g\sigma_g$	1	-

Tabela 4.9: níveis inicial e final, peso estatístico e o comprimento de onda previsto dos satélites das 88 transições que contribuem para Balmer- ϵ para uma temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17}cm^{-3} .

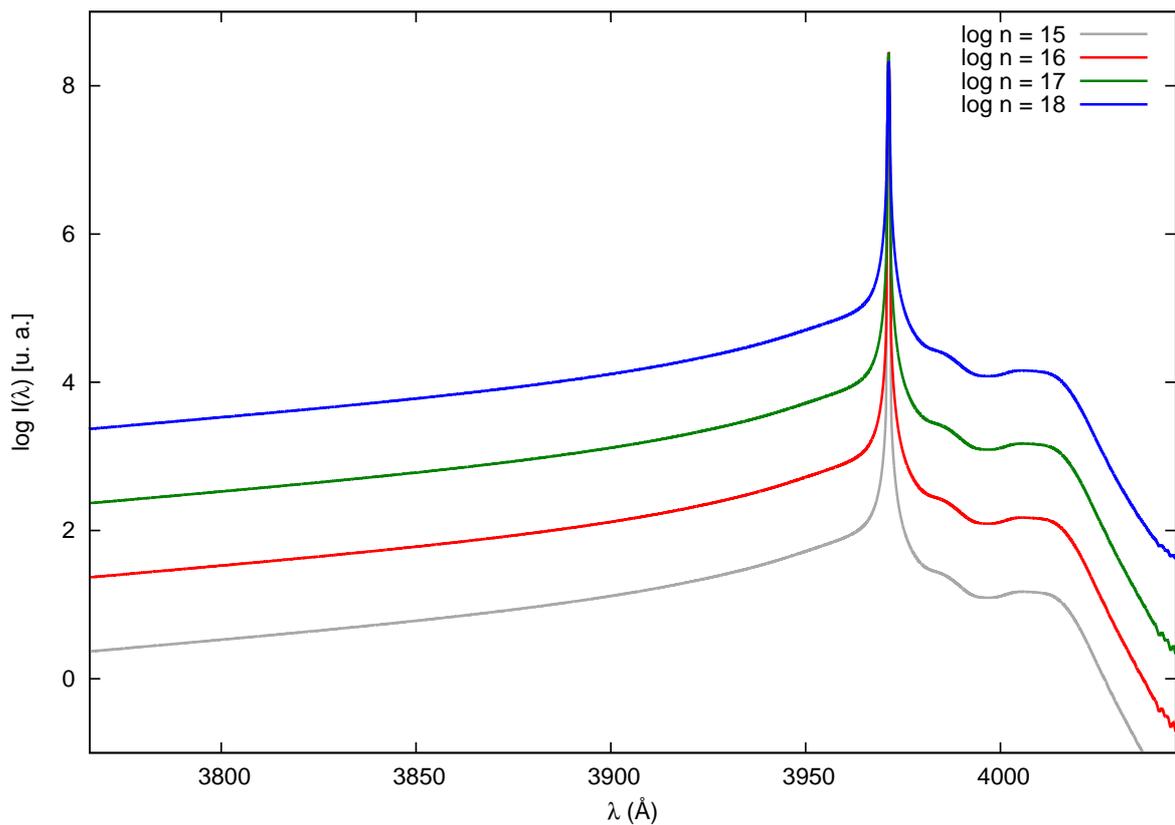


Figura 4.29: perfil da linha de Balmer- ϵ para temperatura de 10000K e densidades de perturbadores entre 10^{15}cm^{-3} e 10^{20}cm^{-3} .

4.2.6 Balmer-8, Balmer-9 e Balmer-10

As linhas de Balmer-8, Balmer-9 e Balmer-10, nos comprimentos de onda 3890Å, 3835Å e 3798Å, possuem contribuições em razão de 102, 116 e 130 transições, respectivamente (tabelas 4.10, 4.11 e 4.12). Nenhuma dessas linhas apresenta qualquer satélite proeminente, como mostram as figuras 4.30, 4.31 e 4.32, já que a maioria dos possíveis satélites é muito próxima à linha central, acabando por misturar-se a ela. Contudo, elas apresentam uma assimetria bastante forte entre a asa vermelha e a asa azul, também evidente nos cálculos de Santos & Kepler [20], a qual não apareceria em cálculos de efeito Stark simples, o que mostra a importância da realização de cálculos considerando contribuições quase-moleculares.

n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)	n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)
2s σ_g	10f σ_u	1	-	3d π_g	10f σ_u	1	-
2s σ_g	10h π_u	2	-	3d π_g	10h δ_u	2	-
2s σ_g	11h σ_u	1	-	3d π_g	10h π_u	2	-
2s σ_g	11k π_u	2	3900.76	3d π_g	11h σ_u	1	-
2s σ_g	12k σ_u	1	-	3d π_g	11k δ_u	2	3711.82
2s σ_g	12m π_u	2	3940.52	3d π_g	11k π_u	2	3894.56
2s σ_g	13m σ_u	1	3899.49	3d π_g	12k σ_u	1	-
2s σ_g	13o π_u	2	3965.05	3d π_g	12m δ_u	2	3896.20
2s σ_g	14o σ_u	1	3919.91	3d π_g	12m π_u	2	3935.79
2s σ_g	14r π_u	2	3979.25	3d π_g	13m σ_u	1	3896.37
2s σ_g	15r σ_u	1	3933.37	3d π_g	13o δ_u	2	3917.44
2s σ_g	16u σ_u	1	3941.45	3d π_g	13o π_u	2	3961.67
2s σ_g	8p π_u	2	-	3d π_g	14o σ_u	1	3917.26
2s σ_g	9f π_u	2	-	3d π_g	14r δ_u	2	3931.74
2s σ_g	9p σ_u	1	-	3d π_g	14r π_u	2	3976.85
2p π_u	10g π_g	2	-	3d π_g	15r σ_u	1	3931.37
2p π_u	10g σ_g	1	-	3d π_g	16u σ_u	1	3939.96
2p π_u	10i δ_g	2	-	3d π_g	8p π_u	2	-
2p π_u	11i π_g	2	-	3d π_g	9f δ_u	2	-
2p π_u	11i σ_g	1	-	3d π_g	9f π_u	2	-
2p π_u	11l δ_g	2	3916.85	3d π_g	9p σ_u	1	-
2p π_u	12l π_g	2	-	3p σ_u	10g π_g	2	-
2p π_u	12l σ_g	1	3917.42	3p σ_u	10g σ_g	1	-
2p π_u	12n δ_g	2	3950.52	3p σ_u	11i π_g	2	-
2p π_u	13n π_g	2	3907.62	3p σ_u	11i σ_g	1	3875.77
2p π_u	13n σ_g	1	3950.32	3p σ_u	12l π_g	2	3887.72
2p π_u	13q δ_g	2	3970.70	3p σ_u	12l σ_g	1	3922.92
2p π_u	14q π_g	2	3925.20	3p σ_u	13n π_g	2	3910.60
2p π_u	14q σ_g	1	3970.19	3p σ_u	13n σ_g	1	3954.30
2p π_u	15t π_g	2	3936.33	3p σ_u	14q π_g	2	3927.52
2p π_u	15t σ_g	1	3981.57	3p σ_u	14q σ_g	1	3973.02
2p π_u	8d δ_g	2	-	3p σ_u	15t π_g	2	3938.07
2p π_u	8s σ_g	1	-	3p σ_u	15t σ_g	1	3983.61

2p π_u	9d π_g	2	-	3p σ_u	8s σ_g	1	-
2p π_u	9d σ_g	1	-	3p σ_u	9d π_g	2	-
2p π_u	9g δ_g	2	-	3p σ_u	9d σ_g	1	-
3d σ_g	10f σ_u	1	-	4f σ_u	10g π_g	2	-
3d σ_g	10h π_u	2	-	4f σ_u	10g σ_g	1	-
3d σ_g	11h σ_u	1	-	4f σ_u	11i π_g	2	-
3d σ_g	11k π_u	2	3888.40	4f σ_u	11i σ_g	1	-
3d σ_g	12k σ_u	1	-	4f σ_u	12l π_g	2	-
3d σ_g	12m π_u	2	3930.92	4f σ_u	12l σ_g	1	3911.82
3d σ_g	13m σ_u	1	3893.33	4f σ_u	13n π_g	2	3904.63
3d σ_g	13o π_u	2	3958.19	4f σ_u	13n σ_g	1	3946.22
3d σ_g	14o σ_u	1	3914.57	4f σ_u	14q π_g	2	3922.83
3d σ_g	14r π_u	2	3974.37	4f σ_u	14q σ_g	1	3967.27
3d σ_g	15r σ_u	1	3929.33	4f σ_u	15t π_g	2	3934.56
3d σ_g	16u σ_u	1	3938.44	4f σ_u	15t σ_g	1	3979.48
3d σ_g	8p π_u	2	-	4f σ_u	8s σ_g	1	-
3d σ_g	9f π_u	2	-	4f σ_u	9d π_g	2	-
3d σ_g	9p σ_u	1	-	4f σ_u	9d σ_g	1	-

Tabela 4.10: níveis inicial e final, peso estatístico e o comprimento de onda previsto dos satélites das 102 transições que contribuem para Balmer-8 para uma temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17}cm^{-3} .

n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)	n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)
2s σ_g	10f π_u	2	-	3d π_g	10f δ_u	2	-
2s σ_g	10p σ_u	1	-	3d π_g	10f π_u	2	-
2s σ_g	11f σ_u	1	-	3d π_g	10p σ_u	1	-
2s σ_g	11h π_u	2	-	3d π_g	11f σ_u	1	-
2s σ_g	12h σ_u	1	-	3d π_g	11h δ_u	2	-
2s σ_g	12k π_u	2	3825.48	3d π_g	11h π_u	2	-
2s σ_g	13k σ_u	1	-	3d π_g	12h σ_u	1	-
2s σ_g	13m π_u	2	3857.78	3d π_g	12k δ_u	2	3659.55
2s σ_g	14m σ_u	1	3833.80	3d π_g	12k π_u	2	-
2s σ_g	14o π_u	2	3880.07	3d π_g	13k σ_u	1	-
2s σ_g	15o σ_u	1	3850.36	3d π_g	13m δ_u	2	-
2s σ_g	15r π_u	2	3894.24	3d π_g	13m π_u	2	3854.45
2s σ_g	16r σ_u	1	3863.15	3d π_g	14m σ_u	1	-
2s σ_g	16u π_u	2	3902.91	3d π_g	14o δ_u	2	3848.43
2s σ_g	17u σ_u	1	3871.65	3d π_g	14o π_u	2	3877.58
2s σ_g	18w σ_u	1	-	3d π_g	15o σ_u	1	3848.45
2s σ_g	9p π_u	2	-	3d π_g	15r δ_u	2	3861.77
2p π_u	10d π_g	2	-	3d π_g	15r π_u	2	3892.40
2p π_u	10d σ_g	1	-	3d π_g	16r σ_u	1	3861.61
2p π_u	10g δ_g	2	-	3d π_g	16u δ_u	2	3870.70

2p π_u	11g π_g	2	-	3d π_g	16u π_u	2	3901.55
2p π_u	11g σ_g	1	-	3d π_g	17u σ_u	1	3870.47
2p π_u	11i δ_g	2	-	3d π_g	18w σ_u	1	-
2p π_u	12i π_g	2	-	3d π_g	9p π_u	2	-
2p π_u	12i σ_g	1	-	3p σ_u	10d π_g	2	-
2p π_u	12l δ_g	2	3838.50	3p σ_u	10d σ_g	1	-
2p π_u	13l π_g	2	-	3p σ_u	11g π_g	2	-
2p π_u	13l σ_g	1	3839.20	3p σ_u	11g σ_g	1	-
2p π_u	13n δ_g	2	3867.14	3p σ_u	12i π_g	2	-
2p π_u	14n π_g	2	3840.23	3p σ_u	12i σ_g	1	-
2p π_u	14n σ_g	1	3867.26	3p σ_u	13l π_g	2	-
2p π_u	14q δ_g	2	3885.99	3p σ_u	13l σ_g	1	3842.90
2p π_u	15q π_g	2	3855.63	3p σ_u	14n π_g	2	3842.22
2p π_u	15q σ_g	1	3885.80	3p σ_u	14n σ_g	1	3870.14
2p π_u	15t δ_g	2	3897.78	3p σ_u	15q π_g	2	3857.37
2p π_u	16t π_g	2	3866.57	3p σ_u	15q σ_g	1	3887.94
2p π_u	16t σ_g	1	3897.47	3p σ_u	16t π_g	2	3867.92
2p π_u	17v π_g	2	-	3p σ_u	16t σ_g	1	3899.05
2p π_u	17v σ_g	1	3904.54	3p σ_u	17v π_g	2	-
2p π_u	9d δ_g	2	-	3p σ_u	17v σ_g	1	3905.72
2p π_u	9s σ_g	1	-	3p σ_u	9s σ_g	1	-
3d σ_g	10f π_u	2	-	4f σ_u	10d π_g	2	-
3d σ_g	10p σ_u	1	-	4f σ_u	10d σ_g	1	-
3d σ_g	11f σ_u	1	-	4f σ_u	11g π_g	2	-
3d σ_g	11h π_u	2	-	4f σ_u	11g σ_g	1	-
3d σ_g	12h σ_u	1	-	4f σ_u	12i π_g	2	-
3d σ_g	12k π_u	2	-	4f σ_u	12i σ_g	1	-
3d σ_g	13k σ_u	1	-	4f σ_u	13l π_g	2	-
3d σ_g	13m π_u	2	3851.06	4f σ_u	13l σ_g	1	3835.49
3d σ_g	14m σ_u	1	-	4f σ_u	14n π_g	2	3838.27
3d σ_g	14o π_u	2	3875.02	4f σ_u	14n σ_g	1	3864.31
3d σ_g	15o σ_u	1	3846.54	4f σ_u	15q π_g	2	3853.88
3d σ_g	15r π_u	2	3890.52	4f σ_u	15q σ_g	1	3883.61
3d σ_g	16r σ_u	1	3860.05	4f σ_u	16t π_g	2	3865.19
3d σ_g	16u π_u	2	3900.15	4f σ_u	16t σ_g	1	3895.85
3d σ_g	17u σ_u	1	3869.26	4f σ_u	17v π_g	2	-
3d σ_g	18w σ_u	1	-	4f σ_u	17v σ_g	1	3903.33
3d σ_g	9p π_u	2	-	4f σ_u	9s σ_g	1	-

Tabela 4.11: níveis inicial e final, peso estatístico e o comprimento de onda previsto dos satélites das 116 transições que contribuem para Balmer-9 para uma temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17}cm^{-3} .

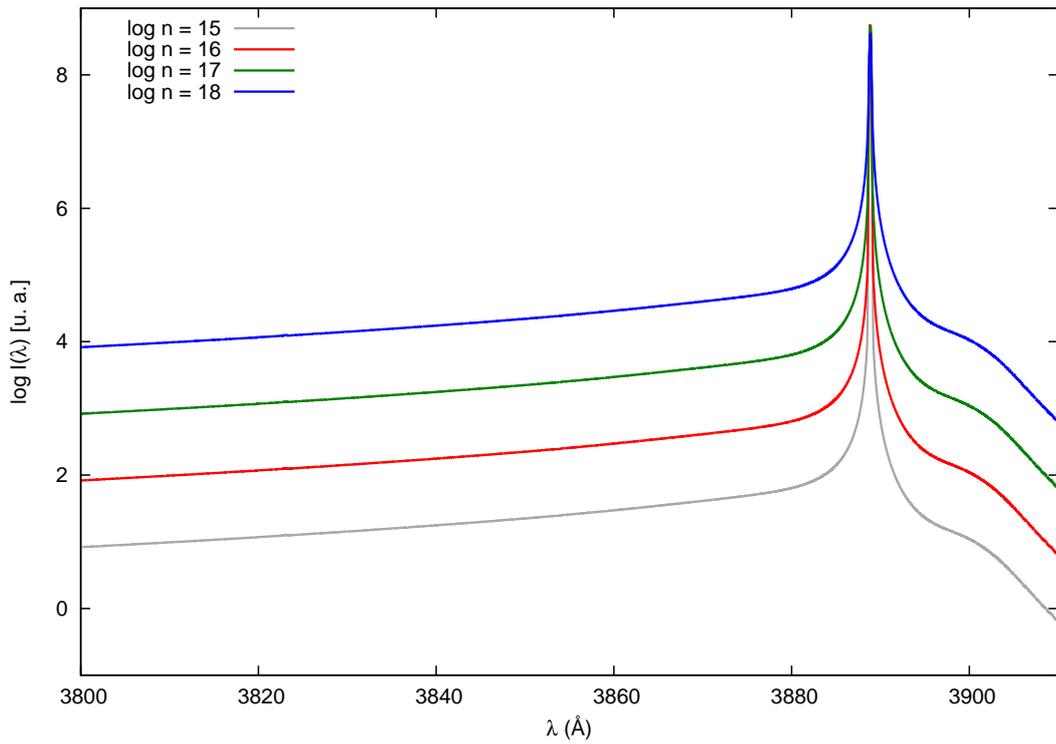


Figura 4.30: perfil da linha de Balmer-8 para temperatura de 10000K e densidades de perturbadores entre 10^{15}cm^{-3} e 10^{20}cm^{-3} .

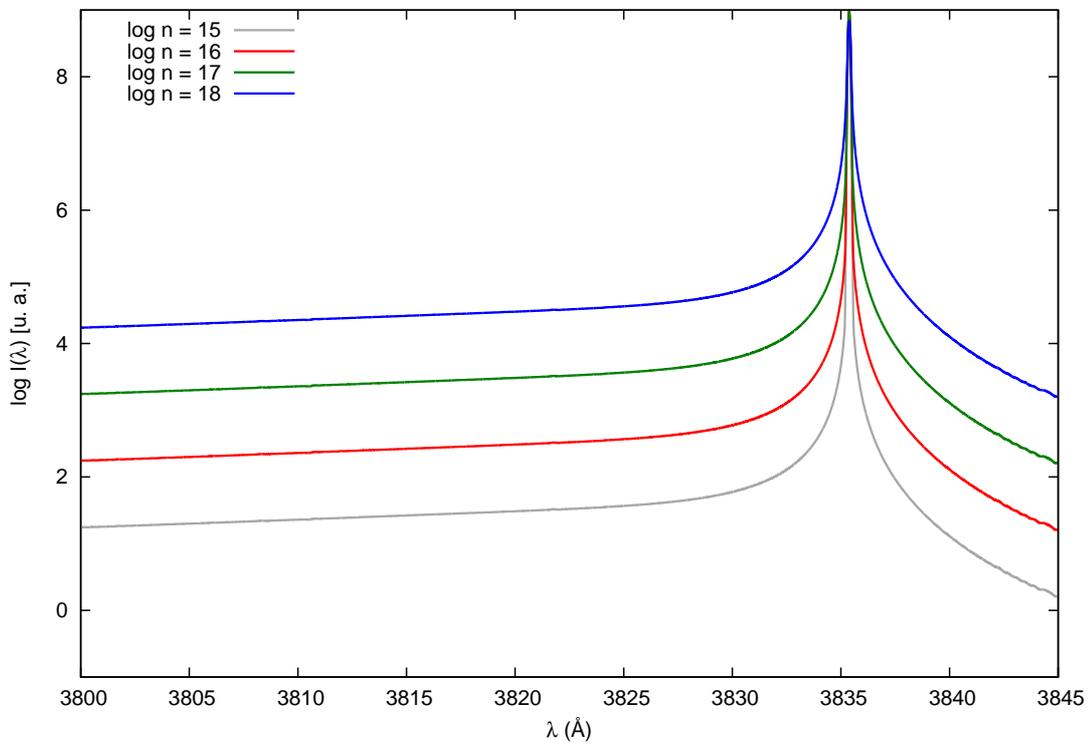


Figura 4.31: perfil da linha de Balmer-9 para temperatura de 10000K e densidades de perturbadores entre 10^{15}cm^{-3} e 10^{20}cm^{-3} .

n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)	n_i	n_f	peso	λ_{sat} (Å)
2s σ_g	10p π_u	2	-	3d π_g	10p π_u	2	-
2s σ_g	11f π_u	2	-	3d π_g	11f δ_u	2	-
2s σ_g	11p σ_u	1	-	3d π_g	11f π_u	2	-
2s σ_g	12f σ_u	1	-	3d π_g	11p σ_u	1	-
2s σ_g	12h π_u	2	-	3d π_g	12f σ_u	1	-
2s σ_g	13h σ_u	1	-	3d π_g	12h δ_u	2	-
2s σ_g	13k π_u	2	-	3d π_g	12h π_u	2	-
2s σ_g	14k σ_u	1	-	3d π_g	13h σ_u	1	-
2s σ_g	14m π_u	2	3802.72	3d π_g	13k δ_u	2	3624.74
2s σ_g	15m σ_u	1	-	3d π_g	13k π_u	2	-
2s σ_g	15o π_u	2	3822.42	3d π_g	14k σ_u	1	-
2s σ_g	16o σ_u	1	3802.54	3d π_g	14m δ_u	2	3692.77
2s σ_g	16r π_u	2	3835.84	3d π_g	14m π_u	2	3800.36
2s σ_g	17r σ_u	1	3814.03	3d π_g	15m σ_u	1	-
2s σ_g	17u π_u	2	3844.69	3d π_g	15o δ_u	2	3801.11
2s σ_g	18u σ_u	1	-	3d π_g	15o π_u	2	3820.54
2s σ_g	18w π_u	2	-	3d π_g	16o σ_u	1	3801.21
2s σ_g	19w σ_u	1	-	3d π_g	16r δ_u	2	3812.89
2s σ_g	20y σ_u	1	-	3d π_g	16r π_u	2	3834.41
2p π_u	10d δ_g	2	-	3d π_g	17r σ_u	1	3812.85
2p π_u	10s σ_g	1	-	3d π_g	17u δ_u	2	3761.68
2p π_u	11d π_g	2	-	3d π_g	17u π_u	2	3843.60
2p π_u	11d σ_g	1	-	3d π_g	18u σ_u	1	-
2p π_u	11g δ_g	2	-	3d π_g	18w δ_u	2	3763.36
2p π_u	12g π_g	2	-	3d π_g	18w π_u	2	-
2p π_u	12g σ_g	1	-	3d π_g	19w σ_u	1	-
2p π_u	12i δ_g	2	-	3d π_g	20y σ_u	1	-
2p π_u	13i π_g	2	-	3p σ_u	10s σ_g	1	-
2p π_u	13i σ_g	1	-	3p σ_u	11d π_g	2	-
2p π_u	13l δ_g	2	3787.67	3p σ_u	11d σ_g	1	-
2p π_u	14l π_g	2	-	3p σ_u	12g π_g	2	-
2p π_u	14l σ_g	1	3788.22	3p σ_u	12g σ_g	1	-
2p π_u	14n δ_g	2	3811.13	3p σ_u	13i π_g	2	-
2p π_u	15n π_g	2	-	3p σ_u	13i σ_g	1	-
2p π_u	15n σ_g	1	3811.38	3p σ_u	14l π_g	2	-
2p π_u	15q δ_g	2	3828.18	3p σ_u	14l σ_g	1	3790.58
2p π_u	16q π_g	2	3807.37	3p σ_u	15n π_g	2	-
2p π_u	16q σ_g	1	3828.16	3p σ_u	15n σ_g	1	3813.51
2p π_u	16t δ_g	2	3839.60	3p σ_u	16q π_g	2	3808.66
2p π_u	17t π_g	2	3817.55	3p σ_u	16q σ_g	1	3829.80
2p π_u	17t σ_g	1	3839.46	3p σ_u	17t π_g	2	3818.62
2p π_u	17v δ_g	2	-	3p σ_u	17t σ_g	1	3840.70
2p π_u	18v π_g	2	-	3p σ_u	18v π_g	2	-
2p π_u	18v σ_g	1	-	3p σ_u	18v σ_g	1	-

2p π_u	19x π_g	2	-	3p σ_u	19x π_g	2	-
2p π_u	19x σ_g	1	-	3p σ_u	19x σ_g	1	-
3d σ_g	10p π_u	2	-	4f σ_u	10s σ_g	1	-
3d σ_g	11f π_u	2	-	4f σ_u	11d π_g	2	-
3d σ_g	11p σ_u	1	-	4f σ_u	11d σ_g	1	-
3d σ_g	12f σ_u	1	-	4f σ_u	12g π_g	2	-
3d σ_g	12h π_u	2	-	4f σ_u	12g σ_g	1	-
3d σ_g	13h σ_u	1	-	4f σ_u	13i π_g	2	-
3d σ_g	13k π_u	2	-	4f σ_u	13i σ_g	1	-
3d σ_g	14k σ_u	1	-	4f σ_u	14l π_g	2	-
3d σ_g	14m π_u	2	3797.98	4f σ_u	14l σ_g	1	-
3d σ_g	15m σ_u	1	-	4f σ_u	15n π_g	2	-
3d σ_g	15o π_u	2	3818.63	4f σ_u	15n σ_g	1	3809.23
3d σ_g	16o σ_u	1	3799.89	4f σ_u	16q π_g	2	3806.08
3d σ_g	16r π_u	2	3832.95	4f σ_u	16q σ_g	1	3826.50
3d σ_g	17r σ_u	1	3811.66	4f σ_u	17t π_g	2	-
3d σ_g	17u π_u	2	3842.49	4f σ_u	17t σ_g	1	3838.19
3d σ_g	18u σ_u	1	-	4f σ_u	18v π_g	2	-
3d σ_g	18w π_u	2	-	4f σ_u	18v σ_g	1	-
3d σ_g	19w σ_u	1	-	4f σ_u	19x π_g	2	-
3d σ_g	20y σ_u	1	-	4f σ_u	19x σ_g	1	-

Tabela 4.12: níveis inicial e final, peso estatístico e o comprimento de onda previsto dos satélites das 130 transições que contribuem para Balmer-10 para uma temperatura de 10000K e densidade de perturbadores de 10^{17}cm^{-3} .

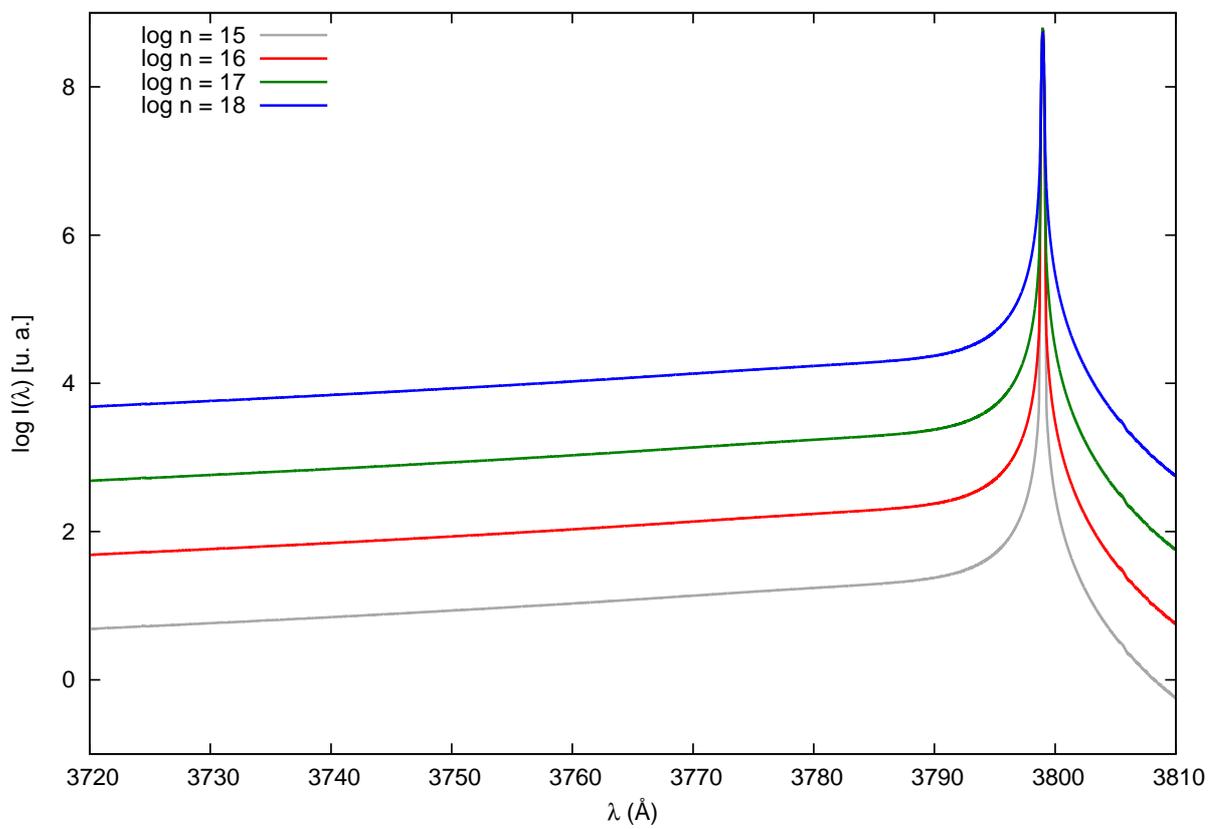


Figura 4.32: perfil da linha de Balmer-10 para temperatura de 10000K e densidades de perturbadores entre 10^{15}cm^{-3} e 10^{20}cm^{-3} .

5 Conclusões

O estudo do efeito de colisões no espectro de gases começou há mais de cem anos, quando Michelson provou que existia um efeito de alargamento da linha, e, desde então, a teoria foi bastante aprimorada. Abordagens distintas existem, cada qual com um determinado objetivo. A teoria de impacto, a de fato proposta por Michelson, se concentra na determinação precisa do centro da linha, já que assume que as colisões têm um tempo de duração muito menor que o intervalo entre colisões. Assumindo o oposto, tem-se a aproximação quase-estática, que então determina melhor as asas da linha, sendo por isso predominantemente utilizada para determinar coeficientes de opacidade e não necessariamente perfis de linha em si.

Uma tentativa de conciliar as duas abordagens foi feita por Anderson [47] ao desenvolver a teoria unificada. Essa teoria não faz suposições prévias sobre a relação entre o tempo de duração das colisões e o intervalo entre elas, sendo bem indicada para a determinação da forma da linha como um todo. A desvantagem dessas três teorias é a utilização da hipótese adiabática, em que se assume que não há mudança dos níveis de energia durante uma transição. Esse feito torna-se importante principalmente para boa determinação do deslocamento do comprimento de onda da linha espectral, em especial seu centro, que é gerado pelas contribuições de quando as partículas estão distantes e, por consequência, as diferenças de potencial têm energias próximas o suficiente para que efeitos não-adiabáticos de interferência entre elas sejam importantes.

A primeira confirmação da necessidade do emprego de teorias de alargamento colisional que incluíssem efeitos quase-moleculares em modelos de atmosfera estelar de anãs brancas foi feita em 1985, por Koester *et al.* [12], que mostrou que um par de absorções observadas na asa vermelha de Ly α de estrelas anãs brancas com temperatura efetiva da ordem de 15000K devia-se à contribuição das quase-moléculas H $_2^+$ e H $_2$. Apesar disso, ainda não existem modelos de atmosfera que empregam consistentemente as opacidades quase-moleculares, em especial devido ao custo computacional alto para determinar a forma da linha com precisão. Habitualmente, o efeito dos prótons livres é simplesmente considerado idêntico ao dos elétrons e modelos de Stark são empregados considerando como densidade a soma das densidades de prótons e elétrons. Isso desconsidera as contribuições quase-moleculares, que são responsáveis por assimetria na linha e formação de satélites. Com a crescente melhora na qualidade dos dados espectroscópicos, faz-se necessário um cálculo mais preciso dessas contribuições.

Outra razão para a não existência de um modelo de atmosfera que leve em conta os efeitos da quase-molécula H $_2^+$ era a escassez de dados referentes aos níveis de energia e momentos de dipolo da quase-molécula, de forma que, até 2012, apenas era possível o cálculo de quatro linhas: Ly α , Ly β , Ly γ e H α . Com o trabalho de Santos & Kepler [20],

passou a ser possível o cálculo preciso da série de Lyman até $\text{Ly}\delta$ e da série de Balmer até H10. Nesse mesmo trabalho, foram calculados os perfis quase-estáticos para essas linhas. No entanto, como já mencionado, a teoria quase-estática não é confiável no centro da linha. Para obter então uma determinação mais acurada da linha, empreguei neste trabalho a teoria unificada em sua abordagem quântica, conforme desenvolvido por Allard *et al.* [54].

Apesar das várias aproximações feitas nessa teoria, ela ainda exige o cálculo completamente numérico da linha. Cada transição contribuindo para a linha deve ser computada individualmente, obtendo-se primeiramente os desvios de fase em um número representativo de trajetórias no interior do volume de interação e depois integrando funções trigonométricas desse desvio por todo o volume de interação. Além do custo computacional¹, uma grande precisão é necessária para determinar corretamente a posição e a forma dos satélites e o comportamento das asas da linha. O código que desenvolvi em Fortran 90 para realização dos cálculos cumpriu esse requisito, pelo que se nota dos resultados obtidos.

Os modelos que calculei para os perfis concordam com dados teóricos publicados anteriormente [20, 54, 58, 65] e, além disso, permitem prever a existência de satélites ainda não detectados em outras linhas espectrais. Um estudo mais detalhado foi feito para o satélite 1400Å em $\text{Ly}\alpha$, que já foi observado em diversas estrelas e é, possivelmente, um bom parâmetro para determinação precisa da temperatura. Mostrei que o fluxo e a posição desse satélite variam significativamente para temperaturas entre 8000K e 50000K, intervalo que cobre desde a temperatura mais alta na base da atmosfera até possíveis temperaturas mais baixas da superfície. Ele se desloca para menores comprimentos de onda com o aumento da temperatura, enquanto seu fluxo aumenta, oscila e, aparentemente, volta a decair. Em geral, para anãs brancas cujo máximo da linha forma-se nas camadas com temperatura próxima a 10000-14000K, a determinação de T_{ef} e $\log(g)$ utilizando espectros no visível não é confiável, pois existe uma correlação entre esses valores que resulta na obtenção de uma solução mais fria com $\log(g)$ mais alto, e outra quente com menor $\log(g)$. Como nessa faixa de temperatura satélites são observados, a solução física poderia ser identificada a partir da análise do comportamento no UV.

Para as demais linhas da série de Lyman, calculei perfis para temperaturas entre 10000K e 20000K, intervalo representativo das temperaturas efetivas em que se costumam observar satélites. Em todas as linhas existe pelo menos um satélite proeminente. Para $\text{Ly}\beta$, dois já foram observados: em 1060Å e em 1078Å, ambos visíveis no perfil obtido. Para $\text{Ly}\gamma$, um satélite próximo a 990Å já foi detectado em anãs brancas, o qual também é evidente nos modelos calculados. Já para $\text{Ly}\delta$, há um satélite aparentemente forte em 962Å que ainda não foi reportado em nenhuma observação. Nota-se, além disso, que ele parece ter uma variação significativa com temperatura, assim como o satélite 1400Å de $\text{Ly}\alpha$, sugerindo que, se detectável, ele pode ser também um bom parâmetro para determinação de temperatura.

Nas linhas da série de Balmer, não se tem nenhuma detecção de satélite em anãs brancas ou outros objetos astronômicos. A única detecção é em plasmas produzidos em laboratório de um satélite próximo a 8500Å na linha de $\text{H}\alpha$. Esse satélite é bastante claro

¹Cada transição leva entre 15min e 1h, dependendo da precisão desejada, com um processador Intel® Core™ i7 @ 1.6 GHz.

no perfil aqui calculado. Em $H\beta$, tem-se um pequeno satélite próximo a 5400\AA , mas a característica mais marcante é a grande assimetria da linha, devida a contribuições de vários pequenos satélites com comprimentos de onda distintos na asa vermelha da linha. A depressão central e a assimetria entre os picos de $H\beta$, observada em experimentos, não aparece, contudo, nos perfis. Uma possível razão para isso, se esse efeito é de fato devido às contribuições quase-moleculares, como sugerem Santos & Kepler [20], é o fato de o deslocamento do comprimento de onda central ser subestimado da teoria unificada, como consequência da aproximação adiabática. No entanto, existe a possibilidade de que essa depressão central seja simplesmente efeito de auto-absorção [69].

Já a linha $H\gamma$ parece ter um satélite bastante forte em 4600\AA , mas possivelmente seu fluxo é muito pequeno comparado ao da linha central para que ele seja detectado. O mesmo valeria para os satélites próximos a 4200\AA e 4000\AA , obtidos, respectivamente, nos perfis para $H\delta$ e $H\epsilon$. Nas linhas de maior energia, $H8$, $H9$ e $H10$, nota-se apenas que existe uma forte assimetria entre as asas azul e vermelha, a qual não ocorre para perfis que desconsideram contribuições quase-moleculares, o que comprova a importância desse efeito.

Para todos os perfis obtidos, *scripts* em linguagem *shell* foram escritos, de forma que realizar o cálculo para intervalos mais completos de temperatura e densidade de perturbadores é imediato. Com esses dados, é possível implementar as contribuições quase-moleculares em modelos de atmosfera e, com isso, espera-se que melhore de maneira considerável a determinação de temperatura efetiva e gravidade superficial para anãs brancas, em especial com temperaturas na faixa de 12000K - 13000K , minimizando as incongruências encontradas nas atuais análises. Além disso, o código foi escrito de forma que é possível calcular os perfis para quaisquer energia potencial e momento de dipolo fornecidos, de sorte que é possível utilizá-lo para determinação dos efeitos de outros perturbadores.

Apêndice A – Regras de seleção para radiação de dipolo de átomos hidrogenoides

Em transições do tipo dipolo, com emissão de um único fóton (que possui spin 1), as regras são as seguintes:

1. A paridade da função de onda deve mudar na transição (regra de Laporte). Assim, só são permitidas transições de estados g para u ;
2. O momento angular total muda, no máximo, uma unidade: $\Delta\ell = 0, \pm 1$;
3. O número quântico magnético não muda ($\Delta m = 0$) se a radiação emitida é polarizada paralelamente a z e muda uma unidade ($\Delta m = \pm 1$) se a radiação é perpendicular a z ;
4. O número quântico de spin total S permanece inalterado, $\Delta S = 0$;
5. Transições entre dois estados com número quântico $\ell = 0$ são proibidas devido a considerações de simetria.

Apêndice B – Teorema de Wiener-Khinchin

O teorema de Wiener-Khinchin é o ponto de partida da teoria unificada. Ele pode ser facilmente obtido a partir do teorema de correlação [70]. A correlação entre duas funções $f(t)$ e $g(t)$, denotada por $f \star g$, é definida como:

$$f \star g = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(\tau)g(t+\tau)d\tau. \quad (\text{B.1})$$

Escrevendo $f(t)$ e $g(t)$ em termos de suas transformadas de Fourier, $F(\nu)$ e $G(\nu)$, tem-se:

$$f \star g = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} F^*(\nu)e^{2\pi i\nu\tau} d\nu \int_{-\infty}^{\infty} G(\nu')e^{-2\pi i\nu'(t+\tau)} d\nu' \right] d\tau \quad (\text{B.2})$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \int_{-\infty}^{\infty} d\nu' F^*(\nu)G(\nu')e^{-2\pi i\tau(\nu'-\nu)}e^{-2\pi i\nu't} \quad (\text{B.3})$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \int_{-\infty}^{\infty} d\nu' F^*(\nu)G(\nu')e^{-2\pi i\nu't} \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i\tau(\nu'-\nu)} d\tau \right] \quad (\text{B.4})$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \int_{-\infty}^{\infty} d\nu' F^*(\nu)G(\nu')e^{-2\pi i\nu't}\delta(\nu'-\nu) \quad (\text{B.5})$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\nu F^*(\nu)G(\nu)e^{-2\pi i\nu't} \quad (\text{B.6})$$

$$= \mathcal{F}[F^*(\nu)G(\nu)], \quad (\text{B.7})$$

onde \mathcal{F} denota a transformada de Fourier. Assim sendo, a correlação entre duas funções é igual à transformada de Fourier do produto entre o complexo conjugado da transformada de Fourier da primeira e a transformada de Fourier da segunda:

$$f \star g = \mathcal{F}[F^*(\nu)G(\nu)]. \quad (\text{B.8})$$

No caso $f = g$, tem-se o teorema de Wiener-Khinchin: o espectro de potências de uma dada função é dado pela transformada de Fourier de sua função de autocorrelação.

Referências Bibliográficas

- 1 HOLTSMARK, J. Über die verbreiterung von spektrallinien. *Annalen der Physik*, v. 363, p. 577–630, 1919.
- 2 VIDAL, C. R.; COOPER, J.; SMITH, E. W. Hydrogen Stark broadening calculations with the unified classical path theory. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, v. 10, p. 1011–1063, 1970.
- 3 ALTHAUS, L. G. et al. Evolutionary and pulsational properties of white dwarf stars. *The Astronomy and Astrophysics Review*, v. 18, p. 471–566, 2010.
- 4 KLEINMAN, S. J. et al. SDSS DR7 white dwarf catalog. *The Astrophysical Journal Supplement*, v. 204, p. 5, 2013.
- 5 KLEIN, B. et al. Rocky extrasolar planetary compositions derived from externally polluted white dwarfs. *The Astrophysical Journal*, v. 741, p. 64, 2011.
- 6 KOESTER, D.; GÄNSICKE, B. T.; FARIHI, J. The frequency of planetary debris around young white dwarfs. *Astronomy & Astrophysics*, v. 566, p. A34, 2014.
- 7 KEPLER, S. O. et al. Magnetic white dwarf stars in the Sloan Digital Sky Survey. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 429, p. 2934–2944, 2013.
- 8 GREENSTEIN, J. L. An absorption line in the ultraviolet spectrum of 40 Eridani B. *Astrophysical Journal*, v. 241, p. L89–L93, 1980.
- 9 WEGNER, G. Detection of the 1400Å absorption in the ultraviolet spectrum of the DA white dwarf LB 3303. *Astrophysical Journal Letters*, v. 261, p. L87–L89, 1982.
- 10 HOLM, A. V. et al. Two-phase ultraviolet spectrophotometry of the pulsating white dwarf ZZ PISCUM. *Astrophysical Journal*, v. 289, p. 774–781, 1985.
- 11 SANDO, K. M.; WORMHOUDT, J. C. Semiclassical shape of satellite bands. *Physical Review A*, v. 7, p. 1889–1898, 1973.
- 12 KOESTER, D. et al. The explanation of the 1400 and 1600 Å features in DA white dwarfs. *Astronomy & Astrophysics*, v. 142, p. L5–L8, 1985.
- 13 SZUDY, J.; BAYLIS, W. E. Unified Franck-Condon treatment of pressure broadening of spectral lines. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, v. 15, p. 641–668, 1975.
- 14 TREMBLAY, P.-E.; BERGERON, P. Spectroscopic analysis of DA white dwarfs: Stark broadening of hydrogen lines including nonideal effects. *The Astrophysical Journal*, v. 696, p. 1755–1770, 2009.

- 15 KEPLER, S. et al. Gemini spectra of 12000K white dwarf stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 372, p. 1799–1803, 2006.
- 16 FALCON, R. E. et al. A gravitational redshift determination of the mean mass of white dwarfs. DA stars. *The Astrophysical Journal*, v. 712, p. 585–595, 2010.
- 17 ROMERO, A. et al. Toward ensemble asteroseismology of ZZ Ceti stars with fully evolutionary models. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 420, p. 1462–1480, 2012.
- 18 KEPLER, S. O. et al. New white dwarf stars in the Sloan Digital Sky Survey data release 10. *Em preparação*, 2014.
- 19 TREMBLAY, P.-E. et al. Spectroscopic analysis of DA white dwarfs with 3D model atmospheres. *Astronomy & Astrophysics*, v. 559, p. A104, 2013.
- 20 SANTOS, M. G.; KEPLER, S. O. Theoretical study of the line profiles of the hydrogen perturbed by collisions with protons. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 423, p. 68–79, 2012.
- 21 KEPLER, S. O. et al. Mode identification of pulsating white dwarfs using the Hubble Space Telescope. *Astrophysical Journal*, v. 539, p. 379–391, 2000.
- 22 DEMTRÖDER, W. *Atoms, Molecules and Photons*. [S.l.]: Springer, 2010.
- 23 HARRIS, D. C.; BERTOLUCCI, M. D. *Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*. [S.l.]: Dover, 1978.
- 24 ALLARD, N. F. et al. Free-free quasi-molecular absorption and satellites in Lyman-alpha due to collisions with H and H⁺. *Astronomy & Astrophysics Supplement Series*, v. 108, p. 417–431, 1994.
- 25 MICHELSON, A. A. On the broadening of spectral lines. *Astrophysical Journal*, v. 2, p. 251–263, 1895.
- 26 LORENTZ, H. A. The absorption and emission lines of gaseous bodies. *Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen Proceedings Series B Physical Sciences*, v. 8, p. 591–611, 1905.
- 27 LENZ, W. Einige korrespondenzmäßige betrachtungen. *Zeitschrift für Physik*, v. 25, p. 299–311, 1924.
- 28 LENZ, W. Allgemeine theorie der verbreiterung von spektrallinien. *Zeitschrift für Physik*, v. 80, p. 423–447, 1933.
- 29 WEISSKOPF, V. Zur theorie der kopplungsbreite und der stoßdämpfung. *Zeitschrift für Physik*, v. 75, p. 287–301, 1932.
- 30 WEISSKOPF, V. Zur theorie der kopplungsbreite. *Zeitschrift für Physik*, v. 77, p. 398–400, 1932.
- 31 LINDHOLM, E. *Arkiv för Fysik*, v. 32, n. 17, p. 1, 1945.

- 32 KUHN, H. G. Pressure shift and broadening of spectral lines. *Philosophical Magazine*, v. 18, p. 987, 1934.
- 33 KUHN, H. Pressure shift of spectral lines. *Physical Review*, v. 52, p. 133–133, 1937.
- 34 KUHN, H. Pressure broadening of spectral lines and van der Waals forces. I. Influence of argon on the mercury resonance line. *Royal Society of London Proceedings Series A*, v. 158, p. 212–229, 1937.
- 35 KUHN, H. G.; LONDON, F. Limitation of the potential theory of the broadening of spectral lines. *Philosophical Magazine*, v. 18, p. 983, 1934.
- 36 KOWALSKI, P. M.; SAUMON, D. Found: The missing blue opacity in atmosphere models of cool hydrogen white dwarfs. *The Astrophysical Journal*, v. 651, p. L137–L140, 2006.
- 37 ROHRMANN, R. D.; ALTHAUS, L. G.; KEPLER, S. Lyman α wing absorption in cool white dwarf stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 411, p. 781–791, 2011.
- 38 JABLOŃSKI, A. Über die stoßverbreiterung der spektrallinien und den energieaustausch bei zusammenstößen. *Zeitschrift für Physik*, v. 70, p. 723–732, 1931.
- 39 JABLOŃSKI, A. On the quantum mechanical treatment of line broadening. *Acta Physica Polonica*, v. 6, p. 371, 1937.
- 40 JABLOŃSKI, A. On the quantum mechanical treatment of spectral line broadening. *Acta Physica Polonica*, v. 7, p. 196, 1938.
- 41 JABLOŃSKI, A. Comments to my paper: On the quantum mechanical treatment of line broadening. *Acta Physica Polonica*, v. 8, p. 71, 1939.
- 42 JABLOŃSKI, A. Pressure broadening of spectral lines. *Physica*, v. 7, p. 541–551, 1940.
- 43 JABLOŃSKI, A. General theory of pressure broadening of spectral lines. *Physical Review*, v. 68, p. 78–93, 1945.
- 44 JABLOŃSKI, A. On the Phase Shift Approximation in the Theory of Pressure Broadening of Spectral Lines. *Physical Review*, v. 73, p. 259–259, 1948.
- 45 JABLOŃSKI, A. Inclusion of the Lorentz effect into theories of pressure broadening of spectral lines based on the Franck-Condon principle. *Acta Physica Polonica*, v. 27, p. 49, 1965.
- 46 FOLEY, H. M. The pressure broadening of spectral lines. *Phys. Rev.*, v. 69, p. 616–628, 1946.
- 47 ANDERSON, P. W. A method of synthesis of the statistical and impact theories of pressure broadening. *Physical Review*, v. 86, p. 809–809, 1952.
- 48 SANDO, K. M.; ERICKSON, G. J.; BINNING JR., R. C. Extended pairwise additivity: interactions of degenerate atoms with rare-gas atoms. *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, v. 12, p. 2697–2705, 1979.

- 49 MARGENAU, H.; LEWIS, M. Structure of spectral lines from plasmas. *Reviews of Modern Physics*, v. 31, p. 569–615, 1959.
- 50 ALLARD, N. F.; KIELKOPF, J. The effect of neutral nonresonant collisions on atomic spectral lines. *Rev. Mod. Phys.*, v. 54, p. 1103–1182, 1982.
- 51 ANDERSON, P. W.; TALMAN, J. D. Pressure broadening of spectral lines at general pressures. *Bell System Technical Publication*, v. 3117, 1956.
- 52 ALLARD, N. F.; SAHAL-BRECHOT, S.; BIRAUD, Y. Unified theory of collisional line profiles: study of the D lines of caesium perturbed by xenon: width, shift, asymmetry and satellites. *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, v. 7, p. 2158–2172, 1974.
- 53 ALLARD, N. F.; KIELKOPF, J. Temperature and density dependence of the Lyman alpha line wing in hydrogen-rich white dwarf atmospheres. *Astronomy & Astrophysics*, v. 242, p. 133–141, 1991.
- 54 ALLARD, N. F. et al. Effect of the variation of electric-dipole moments on the shape of pressure-broadened atomic spectral lines. *Physical Review A*, v. 60, p. 1021–1033, 1999.
- 55 HARRIS, F. J. On the use of windows for harmonic analysis with the discrete Fourier transform. *Proceedings of the IEEE*, v. 66, n. 1, p. 51–83, 1978.
- 56 ALLARD, N. F.; KOESTER, D. Theoretical profiles of Lyman-alpha satellites and application to synthetic spectra of da white dwarfs. *Astronomy & Astrophysics*, v. 258, p. 464–468, 1992.
- 57 KOESTER, D. et al. Quasi-molecular satellites of ly beta in the spectrum of the da white dwarf wolf 1346. *Astrophysical Journal*, v. 463, p. L93, 1996.
- 58 ALLARD, N. F.; KIELKOPF, J.; FEAUTRIER, N. Satellites on the Lyman beta line of atomic hydrogen due to H-H(+) collisions. *Astronomy and Astrophysics*, v. 330, p. 782–790, 1998.
- 59 WOLFF, B. et al. FUSE observations of hot white dwarfs. *Astronomy and Astrophysics*, v. 373, p. 674–682, 2001.
- 60 HOLBERG, J. B.; BARSTOW, M. A.; BURLEIGH, M. R. An archive of IUE low-dispersion spectra of the white dwarf stars. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 147, p. 145–166, 2003.
- 61 ALLARD, N. F. et al. Theoretical study of the Lyman γ line profile of atomic hydrogen perturbed by collisions with protons. *European Physical Journal D*, v. 29, p. 7–16, 2004.
- 62 KIELKOPF, J. F.; ALLARD, N. F. Satellites on Lyman alpha due to H-H and H-H⁺ collisions. *Astrophysical Journal Letters*, v. 450, p. L75, 1995.
- 63 SANTOS, M. G. dos. *Estudo teórico dos perfis de linhas do Hidrogênio perturbado por colisões com prótons*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2012.

- 64 KOESTER, D. et al. Quasi-molecular satellites of Lyman beta in ORFEUS observations of DA white dwarfs. *Astronomy and Astrophysics*, v. 336, p. 276–280, 1998.
- 65 ALLARD, N. F.; NOSELIDZE, I.; KRUK, J. W. New study of the quasi-molecular Lyman- γ satellites due to H-H⁺ collisions. *Astronomy and Astrophysics*, v. 506, p. 993–997, 2009.
- 66 KIELKOPF, J. F.; ALLARD, N. F.; DECRETTE, A. Study of the far wing of the Balmer α line of hydrogen perturbed by collisions with protons . Balmer α . *European Physical Journal D*, v. 18, p. 51–59, 2002.
- 67 FALCON, R. E. et al. An experimental platform for creating white dwarf photospheres in the laboratory. *High Energy Density Physics*, v. 9, p. 82–90, 2013.
- 68 WIESE, W. L.; KELLEHER, D. E.; PAQUETTE, D. R. Detailed study of the Stark broadening of Balmer lines in a high-density plasma. *Physical Review A*, v. 6, p. 1132–1153, 1972.
- 69 ELTON, R. C.; GRIEM, H. R. Measurement of Stark profiles of the Lyman- α and Lyman- β lines of hydrogen in an electromagnetic shock tube. *Physical Review*, v. 135, p. 1550–1559, 1964.
- 70 WEISSTEIN, E. W. *Cross-Correlation Theorem*. Disponível em: <<http://mathworld.wolfram.com/Cross-CorrelationTheorem.html>>.