

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA
DEPARTAMENTO DE ASTRONOMIA

Estudo teórico dos perfis de linhas do Hidrogênio perturbado por colisão com prótons

Márcio Gabriel dos Santos

Tese de Doutorado realizada sob orientação do Prof. Dr. Kepler de Souza Oliveira Filho e apresentada ao curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de Doutor em Ciências.

Porto Alegre, RS, Brasil
Outubro de 2012.

Ex umbris ad lucem!

Agradecimentos

Quero agradecer primeiramente ao meu orientador professor Dr. Kepler de Souza Oliveira Filho, por esta longa orientação, pela sua paciência, seu apoio, mas principalmente pelo incentivo e confiança.

Agradeço em especial àquela que sempre me apoiou incondicionalmente, que apostou em mim mais do que ninguém e que seguramente é a que mais compartilha da minha alegria: Elizandra Martinazzi.

Por fim, agradeço aqueles que, de alguma maneira, contribuíram com este trabalho e que me incentivaram muito!

Resumo

Estudo teórico dos perfis de linhas de Hidrogênio perturbado por colisão com prótons

O foco deste trabalho é o estudo da interação do átomo de hidrogênio com prótons, criando momentaneamente a molécula H_2^+ , determinando os potenciais do H_2^+ para níveis atômicos mais altos ($n > 3$), bem como analisando todas as possíveis transições que podem ocorrer. O cálculo do momento de dipolo elétrico do H_2^+ para todas as possíveis transições que encontramos é de suma importância para determinar as linhas espectrais observáveis. A aplicação de tais dados teóricos terá sua inserção no estudo dos perfis de linhas de estrelas anãs brancas DA, com o intuito de obter melhores ajustes dos modelos de atmosferas estelares. Para isso calculamos todos os potenciais relevantes para as transições das séries de Lyman e Balmer até $n=10$ (número quântico principal) do H_2^+ e os respectivos momentos de dipolo elétricos para tais séries. Na literatura encontra-se somente os valores para $Ly\alpha$, $Ly\beta$, $Ly\gamma$ e $H\alpha$, mas mesmo estes, com aproximações mais grosseiras do que as que calculamos.

As leis da física permitem o cálculo de um modelo de atmosfera estelar num dado instante de sua evolução e o confronto com os dados observacionais. Entretanto, por melhor que seja o modelo, ainda não se obteve um resultado plenamente satisfatório entre teoria e observação. Ainda existem muitas incertezas nos modelos estelares, principalmente nos cálculos de opacidade e convecção, quando comparamos aos dados observacionais, o que implica na necessidade de cálculo mais detalhado da física que rege tais modelos.

O objetivo principal desse trabalho é calcular os potenciais de interação das partículas constituintes da atmosfera e analisar as linhas espectrais das estrelas que já estão na última fase de evolução, as anãs brancas com uma atmosfera pura de hidrogênio, chamadas de DAs.

Um dos melhores métodos para a determinação da temperatura efetiva e obtenção da gravidade superficial de anãs brancas, é a comparação do perfil da linha observado, a forma da linha espectral com o predito teoricamente. A eficiência desse método está no fato que o perfil da linha teórico é extremamente sensível à variação dos parâmetros atmosféricos - os perfis de $H\alpha$ e $H\beta$ são bons indicadores de temperatura efetiva (T_{ef}), enquanto os perfis das linhas mais altas são bons indicadores da gravidade superficial.

Entretanto, a técnica supostamente simples possui um grau elevado de dificuldade, pois precisamos saber quais são todas as causas físicas responsáveis pela variação dos parâmetros atmosféricos que determinam o perfil da linha. Este é o objetivo de nosso trabalho, o cálculo do perfil de linha de H perturbado por colisões com prótons.

Abstract

Theoretical study of the line profiles of the hydrogen perturbed by collisions with protons

The subject of this work is the study of the interaction of the hydrogen atom with protons, temporarily creating from this interaction the H_2^+ molecule. We estimated the potential for all levels with $n \leq 10$ and analyze all possible transitions that can occur. We also calculated the electric dipole moment of H_2^+ for all possible transitions that we find, necessary for the line profile calculation. The application of such theoretical data will be in the context of the line profiles of DA white dwarfs, as refinement in the models of stellar atmospheres. For this, I calculated all the potential relevant to the transitions of the Lyman and Balmer series to $n=10$ (principal atomic quantum number), and their electric dipole moments. In the literature we find only $\text{Ly}\alpha$, $\text{Ly}\beta$, $\text{Ly}\gamma$ and $\text{H}\alpha$ calculations, but even these at lower resolutions and with the asymptotic approximations.

The laws of physics allow the calculation of a stellar atmosphere model for a particular moment in its evolution and the comparison with observational data. However, no matter how good the model is, it has not yet achieved a fully satisfactory result. There are still many uncertainties in the stellar models in relation the observational data, showing the need for a more detailed analysis of the physics that governs such models.

The main objective of this thesis is to analyze the spectral lines, calculating the potential of interacting particles constituents of the atmosphere of white dwarf stars with pure hydrogen atmosphere, called DAs.

One of the best methods for analysis of spectral lines, determining the effective temperature and obtaining surface gravity of white dwarfs with hydrogen lines, is the comparison the observation of line profile, the shape of the spectral line, with the theoretically predicted. The efficiency of this method is based on the fact that the theoretical line profile is extremely sensitive to variations of atmospheric parameters.

However, the supposedly simple technique has a high degree of difficulty, because we need to know all the causes responsible for the determination of the physical parameters of the atmosphere affecting the line profile. This is the purpose of our work, the calculation of the line profile of H perturbed by collisions with protons.

Conteúdo

Conteúdo	VI
Lista de Figuras	VIII
Lista de Tabelas	1
1 Introdução	2
1.1 Mecanismos de alargamento das linhas espectrais	3
1.1.1 Alargamento Natural	3
1.1.2 Alargamento Doppler	4
1.1.3 Alargamento Colisional	6
1.2 Contexto teórico	9
1.3 Visão geral da tese	16
2 Potenciais da molécula de Hidrogênio H_2^+	18
2.1 A aproximação de Born-Oppenheimer	18
2.2 O íon molecular do Hidrogênio H_2^+	21
2.2.1 Função angular	26
2.2.2 Função radial	30
2.2.3 Solução geral da parte eletrônica	32
2.2.4 Diagrama de Correlação	34
2.2.5 Análise numérica	36
3 Dipolo	41
3.1 Momento de dipolo elétrico do íon H_2^+	41
3.2 Funções de onda do H_2^+	41
3.3 Componentes do momento de dipolo elétrico	43
3.4 Análise numérica	50

4 Perfis e satélites	53
4.1 Análise teórica	53
4.2 Aproximação quase-estática	56
4.3 Série de Lyman e Balmer	57
4.3.1 Lyman- α	58
4.3.2 Lyman- β	65
4.3.3 Lyman- γ	69
4.3.4 Lyman- δ	73
4.3.5 Série de Lyman	77
4.3.6 Balmer- α	79
4.3.7 Balmer- β	83
4.3.8 Balmer- γ	93
4.3.9 Balmer- δ	95
4.3.10 Balmer- ϵ	96
4.3.11 Balmer-8	97
4.3.12 Balmer-9	98
4.3.13 Balmer-10	99
4.3.14 Série de Balmer	100
5 Discussão e Conclusão	103
6 Apêndices	107
Apêndice A	107
6.1 Unidades atômicas	107
Apêndice B	109
6.2 Artigo publicado	109
Bibliografia	110

Lista de Figuras

1.1	Alargamento natural de acordo com o princípio da incerteza de Heisenberg.	4
1.2	Espectro observado com o SDSS da anã branca SDSS J073708.00+411227.45, com sinal-ruído S/R=68 e magnitude $g=15,77$, e em vermelho um modelo de D. Koester de 11 000 K e $\log g=8,25$ que se ajusta, para comparação.	10
1.3	Espectro observado com o Hubble Space Telescope (HST) da anã branca G226-29, de Kepler et al. (2000), mostrando a asa vermelha de $L\alpha$, centrada em 1 215 Å e as linhas satélites em 1 405 Å do H_2^+ e 1 600 Å, do H_2	14
1.4	Abundância relativa das quantidades de $n(H_2^+)/n(H_2)$ em preto e $n(H_2^+)/n(H)$ em vermelho, com densidade inicial de $1,0 \times 10^{17} \text{ H}_2 \text{ cm}^{-3}$	16
2.1	Estrutura do íon molecular do Hidrogênio H_2^+ [Adaptado de Levine (2004)]	21
2.2	Coordenadas esferoidais [Adaptado de Li et al. (2001)]	23
2.3	Diagrama de correlação em detalhe para os estados $n_s = 1$, $n_s = 2$ e $n_s = 3$ do H_2^+ [Adaptado de Allard et al. (1998b)]	35
2.4	Energia eletrônica com (E) e sem (ε) repulsão nuclear do estado fundamental ($1s\sigma_g$) do H_2^+ a partir dos dados obtidos.	37
2.5	Energia eletrônica (ε) para os estados com $n_s = 1$ do H_2^+	38
2.6	Energia potencial (E) para os estados com $n_s = 1$ do H_2^+	39
2.7	Energia eletrônica (ε) para os estados com $n_s = 2$ do H_2^+	39
2.8	Energia potencial (E) para os estados com $n_s = 2$ do H_2^+	40

3.1	Momento de dipolo elétrico das transições de Lyman- α , listadas na tabela 3.1, devido ao átomo de H perturbado por colisões com prótons. O $D(R)$ é dado aqui em unidades atômicas e a distância internuclear R em a_0 (raio de Bohr).	52
4.1	Comparação entre as três aproximações do perfil de linha de Lyman- α normalizado: aproximação quase-estática (linha tracejada), aproximação quântica (linha pontilhada) e a teoria unificada (linha sólida) [Adaptado de Allard et al. (1999)]	55
4.2	Diferença de potencial das transições permitidas em função da distância interatômica da molécula de H_2^+ de Lyman- α	59
4.3	Momento de dipolo elétrico das transições de Lyman- α devido ao átomo de H perturbado por colisões com prótons. O $D(R)$ é dado aqui em unidades atômicas.	60
4.4	Transições que contribuem para a formação de Lyman- α mostradas individualmente para $T=10\,000\text{ K}$ e $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$	61
4.5	Todas as transições que formam o perfil linha de Lyman- α juntas, exibindo a contribuição de cada uma delas para $T=10\,000\text{ K}$ e $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$	62
4.6	Comparação entre os perfis de Lyman- α , devido ao alargamento Stark e colisional do $H - H^+$ para $T=10\,000\text{ K}$ e $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$. Note que as asas das linhas não são idênticas assintoticamente.	63
4.7	Comparação entre os perfis de Lyman- α , devido ao alargamento Stark e colisional do $H - H^+$ convoluído com o efeito Doppler para $T=10\,000\text{ K}$ e $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$	64
4.8	Diferença de potencial das transições permitidas em função da distância interatômica da molécula de H_2^+ de Lyman- β	66
4.9	Momentos de dipolo elétrico das transições que contribuem para formação de Lyman- β devido ao átomo de H perturbado por colisões com prótons. O momento de dipolo elétrico $D(R)$ é dado aqui em unidades atômicas.	67
4.10	Perfil de linha de Lyman- β calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$	68
4.11	Diferenças dos potenciais das transições em função da distância interatômica do H_2^+ de Lyman- γ	70

4.12	Transições dos momentos de dipolo elétrico de Lyman- γ do H_2^+ em função da distância internuclear. O valor de $D(R)$ é dado aqui em unidades atômicas.	71
4.13	Perfil de linha de Lyman- γ calculado para $T=10\,000$ K e uma densidade de prótons de $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$	72
4.14	Diferença da energia potencial das transições permitidas de Lyman- δ , em função da distância interatômica do H_2^+	74
4.15	Momentos de dipolo elétrico das transições de Lyman- δ devido ao átomo de H perturbado por colisões com prótons. O valor de $D(R)$ está em unidades atômicas.	75
4.16	Perfil de linha de Lyman- δ calculado para $T=10\,000$ K e uma densidade de prótons de $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$	76
4.17	Perfil total de Lyman- α , Lyman- β , Lyman- γ e Lyman- δ do H perturbado por prótons ($n_H^+ = 10^{17} \text{cm}^{-3}$) para uma temperatura de $T=10\,000$ K.	77
4.18	Perfil total teórico de Lyman- α , Lyman- β , Lyman- γ e Lyman- δ do H perturbado por prótons ($n_H^+ = 10^{17} \text{cm}^{-3}$) para uma temperatura de $T=10\,000$ K do H_2^+ juntamente com os respectivos perfis calculados para o alargamento Stark para a mesma temperatura e densidade de perturbadores.	78
4.19	Momentos de dipolo elétrico das transições que contribuem para formação dos satélites no perfil de linha de Balmer α , devido ao átomo de Hidrogênio perturbado por prótons. As transições plotadas aqui estão listadas na tabela 4.5. O valor de $D(R)$ está dado em unidades atômicas.	80
4.20	Comparação entre o perfil de Balmer- α do H_2^+ com o perfil de VCS - alargamento eletrônico Stark (Koester (2011)), para $T=12\,000$ K e densidade de 10^{16}cm^{-3}	81
4.21	Perfil de linha de Balmer- α calculado para uma temperatura de $10\,000$ K e densidade de prótons de 10^{17}cm^{-3} . Estão indicados na imagem alguns dos satélites calculados bem como o satélite $\lambda = 8650 \text{Å}$ encontrado em laboratório (Kielkopf et al., 2002)	82
4.22	Momentos de dipolo elétrico das transições responsáveis pela formação de satélites no perfil de linha de Balmer- β devido à perturbação do átomo de H por prótons. As transições plotadas aqui estão listadas na tabela 4.6. E os valores de $D(R)$ são dados em unidades atômicas.	85

4.23	Perfil de linha de Balmer- β calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$	86
4.24	Perfil de linha de Balmer- β para a temperatura $T=13\,526\text{ K}$ e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$ de um experimento Z-pinch, como observado por Falcon et al. (2010).	87
4.25	Perfil de linha de Balmer- β teórico somente do efeito de $H - H^+$ para a temperatura $T=13\,526\text{ K}$ e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$. A janela no topo direito mostra uma expansão do pico central, mostrando a assimetria.	88
4.26	Perfil de linha linear de Balmer- β teórico para a temperatura $T=13\,526\text{ K}$ e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$ do H_2^+ juntamente com o perfil Stark.	89
4.27	Perfil de linha de Balmer- β teórico para a temperatura $T=13\,526\text{ K}$ e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$ do H_2^+ juntamente com o perfil Stark.	90
4.28	Perfil de linha linear de Balmer- β teórico para a temperatura $T=13\,526\text{ K}$ e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$ do H_2^+ somado com o perfil Stark convoluídos com o efeito Doppler.	91
4.29	Perfil de linha de Balmer- β para a temperatura $T=13\,526\text{ K}$ e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$ de um experimento Z-pinch, como observado por Falcon et al. (2010) e sobreposto ao mesmo o perfil de linha linear de Balmer- β teórico para a temperatura $T=13\,526\text{ K}$ e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$ do H_2^+ juntamente com o perfil Stark convoluídos com o efeito Doppler. As linhas Stehle e Finer Grid foram calculadas por Michael H. Montgomery com o programa <i>hlinfit_lemke.f90</i>	92
4.30	Perfil de linha de Balmer- γ calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$	93
4.31	Perfil de linha linear de Balmer- γ calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$ do H_2^+ em comparação com o perfil Stark para mesma temperatura e densidade de perturbadores.	94
4.32	Perfil de linha de Balmer- δ calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$	95
4.33	Perfil de linha de Balmer- ϵ calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$	96

4.34	Perfil de linha de Balmer-8 calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$	97
4.35	Perfil de linha de Balmer-9 calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$	98
4.36	Perfil de linha de Balmer-10 calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$	99
4.37	Contribuição do $H - H^+$ para o perfil de linha linear total de Balmer calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$	100
4.38	Contribuição do $H - H^+$ e do elétron (Stark) para o perfil de linha total de Balmer calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$ juntamente com o perfil de linha Stark, para a mesma temperatura e densidade de perturbadores (elétrons para o Stark). A normalização foi calculada para cada transição individual da série de Balmer.	101
4.39	Contribuição do $H - H^+$ para o perfil de linha total de Balmer calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$. A normalização foi calculada para a soma das transições da série de Balmer.	102

Lista de Tabelas

2.1	Terminologia dos orbitais moleculares (estados eletrônicos) de uma molécula diatômica homonuclear	33
2.2	Representação de l	33
2.3	Energia potencial para o estado fundamental do H_2^+	37
3.1	Tabela de comparação entre os dados de Ramaker & Peek (1973) [†] e esse trabalho [‡] dos momentos de dipolo elétrico para Lyman- α do H_2^+ , em unidades atômicas.	51
4.1	Transições permitidas e satélites devidos a colisões de H- H^+ para Lyman- α na distância $R(\text{Å})$	58
4.2	Transições permitidas e satélites de Lyman- β devido a colisões do átomo de H com H^+ na distância internuclear $R(\text{Å})$ na qual um extremo no potencial ocorre.	65
4.3	Transições permitidas e satélites devido às colisões H- H^+ de Lyman- γ na distância internuclear R na qual um extremo para a diferença de potencial ocorre.	69
4.4	Transições permitidas e satélites de Lyman- δ devido a colisões de H- H^+ para uma distância R entre o par átomo-íon no qual um valor extremo da diferença de potencial ocorre.	73
4.5	Satélites de Balmer- α devido à colisões de H com H^+ na distância internuclear R para a qual um extremo na diferença dos potenciais da transição ocorre.	79
4.6	Satélites de Balmer β devidos às colisões do átomo de H com H^+ na distância internuclear R	84

Capítulo 1

Introdução

Ao imaginar que as linhas espectrais são formadas pelas transições eletrônicas entre níveis com energias muito bem definidas de átomos e moléculas, concluir-se-ia que essas linhas deveriam ser funções delta da frequência e apareceriam como linhas infinitesimalmente estreitas nos espectros estelares. Entretanto, muitos processos tendem a alargar essas linhas, de modo que elas desenvolvem uma forma -perfil-característica (e.g., Margenau & Watson, 1936). Os efeitos que alargam as linhas espectrais, intrínsecos aos átomos e extrínsecos, são o alargamento natural e as perturbações produzidas pelas partículas vizinhas no gás, bem como pelo movimento dos átomos. Mas cada um desses efeitos produz seu perfil característico. As formas características são muitas; por exemplo, alguns perfis tem a linha central alargada e pequenas asas, outros possuem uma linha central estreita e grandes asas alargadas. A representação adequada desses efeitos permite o cálculo do perfil de linha observado e, no processo, revela dados sobre as condições físicas nas camadas da estrela onde se origina o espectro, ou seja, comparando-se perfis calculados e observados, pode-se obter informações sobre abundâncias relativas de elementos químicos e seus estados de ionização e excitação, temperaturas efetivas e densidades das regiões de emissão do espectro. Portanto, para entender como as linhas se formam, é necessário conhecer os mecanismos de alargamento. A largura e a forma das linhas espectrais são de interesse em pesquisas físicas e astrofísicas porque:

- fornecem informações sobre a temperatura, densidade e composição química existente na fonte do espectro;
- o perfil de linha é importante na determinação das características físicas da atmosfera estelar, ou do plasma emitente para experimentos em laboratório,
- a interação da radiação com átomos fornece informações para o cálculo do

perfil de linha.

1.1 Mecanismos de alargamento das linhas espectrais

A representação correta de um espectro implicará no conhecimento de todos os processos físicos que produzem esse espectro. Portanto, para entender como as linhas se formam, é necessário conhecer os mecanismos de alargamento. Dentre os processos de alargamento das linhas espectrais, três são os mais significativos:

1. alargamento natural;
2. alargamento Doppler,
3. alargamento colisional ou devido à pressão.

O alargamento natural é devido ao tempo de vida finito dos estados envolvidos em uma transição eletrônica. É geralmente importante somente em baixas temperaturas e pressões, mas é o único mecanismo que persiste mesmo para um átomo estacionário isolado.

O alargamento Doppler é devido a alteração das frequências da radiação absorvida ou emitida por um átomo em movimento e, portanto, ocorre em um gás a uma temperatura não nula, pelo movimento térmico das partículas.

E o alargamento colisional é devido às colisões de átomos com perturbadores que podem ser outros átomos, íons ou moléculas.

1.1.1 Alargamento Natural

A aproximação básica do alargamento natural está centrada no princípio da incerteza de Heisenberg. Ao considerar um átomo em um certo estado, o período de tempo Δt que ele pode permanecer nesse estado está relacionado à incerteza da energia ΔE desse estado por:

$$\Delta E \Delta t \approx \frac{h}{2\pi}. \quad (1.1)$$

onde h é a constante de Plank.

Se houver um grande número de estados para os quais o átomo pode fazer uma transição, então a probabilidade de que isso ocorra é grande, logo o Δt será pequeno, e a incerteza da energia do nível será grande. Uma grande incerteza na energia de

um estado implica que um grande intervalo de frequências pode estar envolvido na transição associada a esse estado. Conseqüentemente, qualquer linha resultante da tal transição será alargada, conforme figura (1.1).

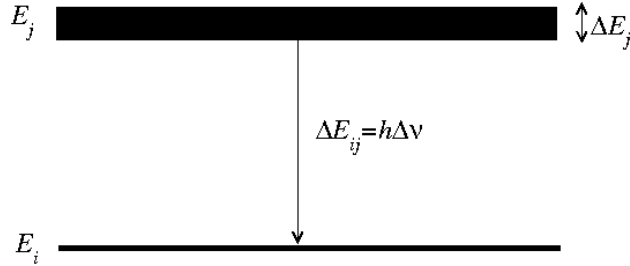


Figura 1.1: Alargamento natural de acordo com o princípio da incerteza de Heisenberg.

$$E = h\nu \quad (1.2)$$

$$\Delta E = h\Delta\nu \quad (1.3)$$

$$\Delta\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{1}{2\pi\Delta t} \approx \frac{A_{ij}}{2\pi} \quad (1.4)$$

onde ΔE é a incerteza na energia de um nível particular de energia, Δt é o tempo que um elétron permanecerá no estado de particular energia antes de espontaneamente decair para um estado de energia inferior, chamado tempo de vida da transição, e A_{ij} é a probabilidade de transição espontânea de Einstein que nos fornece a probabilidade por unidade de tempo de um átomo excitado no nível i decair para um nível inferior j com emissão de um fóton. O alargamento natural, em termos do comprimento de onda torna-se:

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{2\pi c} \left(\frac{1}{\Delta t} \right) \approx \frac{\lambda^2}{2\pi c} A_{ij} \quad (1.5)$$

1.1.2 Alargamento Doppler

As partículas que compõem o gás de uma atmosfera estelar, estão em constante movimento, e este movimento desloca os comprimentos de onda, visto por um observador. As linhas espectrais são então alargadas, já que os átomos têm velocidades

diferentes e os comprimentos de onda se deslocam pelo efeito Doppler. O alargamento Doppler é o alargamento de linhas espectrais devido ao efeito Doppler em que o movimento térmico dos átomos ou moléculas deslocam a frequência aparente da radiação emitida. As distintas velocidades das partículas componentes do gás provocam pequenos deslocamentos, e o efeito cumulativo é que alarga a linha. Para um gás em equilíbrio térmico, alargamento é dependente unicamente da frequência da linha, da massa das partículas que irradiam e da temperatura. Portanto o alargamento Doppler pode ser usado como um método para medir a temperatura de objetos observados. Para velocidades térmicas não relativísticas, o efeito Doppler na frequência é dado por:

$$\nu = \nu_0 \left(1 + \frac{v}{c}\right) \quad (1.6)$$

onde ν é a frequência observada, ν_0 é a frequência da fonte de radiação, v é a velocidade da fonte de radiação em relação ao observador, e c é a velocidade da luz.

Como há uma distribuição de velocidades em todas as direções, o efeito cumulativo será o de alargar a linha observada. Para baixas densidades, a distribuição de velocidades em qualquer direção é dada pela distribuição de Maxwell. Se $P(v)dv$ é a fração de partículas com velocidades entre v e $v + dv$ em qualquer direção, então:

$$P(v)dv = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) dv \quad (1.7)$$

onde m é a massa das partículas, T a temperatura e k é a constante de Boltzmann.

Escrevendo o efeito Doppler em termos da velocidade $v = c\left(\frac{\nu}{\nu_0} - 1\right)$, e substituindo a velocidade em função do efeito Doppler, tal que, $\frac{dv}{d\nu} = \frac{c}{\nu_0}$ obtemos:

$$P(\nu)d\nu = \left(\frac{c}{\nu_0}\right) \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{m\left[c\left(\frac{\nu}{\nu_0} - 1\right)\right]^2}{2kT}\right) d\nu \quad (1.8)$$

Podemos reescrever esta expressão como:

$$P(\nu)d\nu = \sqrt{\frac{mc^2}{2\pi kT\nu_0^2}} \exp\left(-\frac{mc^2(\nu - \nu_0)^2}{2kT\nu_0^2}\right) d\nu \quad (1.9)$$

Analisando a equação acima observamos que,

$$P(\nu)d\nu = C \exp \left[- \left(\frac{\Delta\nu}{\Delta\nu_{Doppler}} \right)^2 \right] \quad (1.10)$$

onde

$$\Delta\nu_{Doppler} = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \quad (1.11)$$

é o alargamento provocado na frequência devido ao alargamento Doppler e C é uma constante de normalização. Escrevendo a equação acima em termos do comprimento de onda e lembrando que $|\frac{d\lambda}{\lambda}| = |\frac{d\nu}{\nu}|$, obtemos que a espessura da linha espectral devido ao alargamento Doppler é dada por:

$$\Delta\lambda = \frac{2\lambda}{c} \sqrt{\frac{2kT}{m}}. \quad (1.12)$$

1.1.3 Alargamento Colisional

Todos os fenômenos que causam alargamento nas linhas espectrais devido à perturbações de partículas vizinhas são chamados de alargamento colisional, ou de alargamento por pressão, já que a fonte microscópica de pressão é a colisão de partículas com uma parede real ou imaginária.

O alargamento colisional é devido a colisões de átomos com outros átomos, moléculas ou íons. Essas irão perturbar os estados atômicos ou moleculares e levarão a um alargamento da linha que é em geral, muitas vezes maior do que a sua largura natural. Este aumento na largura da linha é uma função da densidade dos vários tipos de perturbadores e é conhecido como alargamento por pressão. Portanto, se $\Delta V_j(r)$ e $\Delta V_i(r)$ são, respectivamente, as mudanças nas energias dos níveis superiores e inferiores de uma dada transição devido à influência de um perturbador a uma distância r de um átomo excitado, a frequência angular da transição sofre a seguinte alteração:

$$\Delta\omega_{ji} = \frac{\Delta V_j(r) - \Delta V_i(r)}{\hbar}. \quad (1.13)$$

Se o potencial é central, isto é, só depende da distância r , é possível representar a interação de longo alcance entre o átomo excitado e um perturbador por um potencial da forma.

$$\Delta V_j(r) = \frac{C_n^j}{r^n} \quad (1.14)$$

onde c_n^j é uma constante que depende do nível excitado envolvido e também do tipo de perturbador. O valor de n está associado ao tipo de perturbador e processo físico envolvido da seguinte forma:

- $n = 2$, aplica-se ao caso do hidrogênio e íons hidrogenoides no campo elétrico externo ou produzido por outros íons ou elétrons. Essa forma de alargamento é conhecida como *alargamento Stark linear* dos níveis de energia, e depende linearmente da intensidade do campo elétrico;
- $n = 4$, aplica-se ao caso que descreve o *alargamento Stark quadrático* por exemplo do hélio e outros sistemas onde a separação é uma função quadrática do campo elétrico dos perturbadores;
- $n = 3$, aplica-se ao caso da interação ressonante dipolo-dipolo. Esta interação é finita somente quando o átomo excitado interage com um átomo idêntico no estado fundamental e quando há uma forte transição de dipolo elétrico permitido, geralmente a linha de ressonância do átomo, que liga os dois níveis. Esse alargamento é conhecido como *alargamento ressonante* ou *auto-alargamento*,
- $n = 6$, aplica-se ao caso de interação dipolo-dipolo atrativa de longo alcance que existe sempre entre quaisquer dois átomos. Alargamento desse tipo é conhecido como *alargamento de van der Waal's*.

Os dois primeiros efeitos são importantes apenas em gases altamente ionizados enquanto que os dois últimos são mais significativos em gases não ionizados. Entretanto, outras contribuições para forças atrativas de longo alcance existem.

As forças de curto alcance, que são responsáveis pelas ligações químicas ou repulsão interatômica, diferentemente das de longo alcance, não possuem uma expressão geral, e são de difícil obtenção. No entanto, para o caso de linhas espectrais alargadas por colisões com hidrogênio, hélio e neônio, estas forças repulsivas desempenham um papel muito significativo.

A equação (1.14) é obtida a partir do caso de um sistema binário de um átomo excitado e um perturbador a uma dada distância e orientação fixa. Mas, em geral, o átomo excitado pode interagir com vários perturbadores e é necessário obter uma média sobre as distintas orientações e caminhos desses perturbadores. Essa média somente pode ser realizada de forma satisfatória em dois casos limites conhecidos como aproximação quase-estática e aproximação de impacto ou aproximação de deslocamento de fase. O critério que define o intervalo de validade de cada uma das aproximações está associado com o tempo de colisão t_c . A forma do perfil de

linha para uma frequência de separação $\Delta\omega = \omega_0 - \omega$ a partir do centro da linha é determinada pelo trem de ondas emitido durante o intervalo de tempo Δt , onde $\Delta t \approx \frac{1}{\Delta\omega}$. Se o átomo emite um trem de ondas até ser perturbado por uma forte colisão, o tempo de interesse, Δt , será o tempo médio entre as colisões t_c . É uma aproximação que pode ser considerada como se o perturbador estivesse ultrapassando o átomo emissor em uma trajetória clássica. Para os perturbadores neutros, essas trajetórias seriam aproximadamente linhas retas, enquanto que para íons ou elétrons seriam hipérbolas. Pode-se então considerar que o átomo emissor será perturbado somente durante a duração da perturbação, definida por:

$$t_c = \frac{\rho}{\bar{v}} \quad (1.15)$$

onde ρ é a distância de maior aproximação (parâmetro de impacto) e \bar{v} é a velocidade média nesse ponto.

Quando a duração de uma colisão (t_c) é muito maior do que o tempo entre colisões (T_c), a linha alargada é produzida enquanto o perturbador move-se apenas uma pequena distância. Portanto, é possível ignorar o movimento dos perturbadores completamente e temos a aproximação quase-estática:

$$t_c \gg \frac{1}{\Delta\omega} \approx T_c. \quad (1.16)$$

Essa aproximação é usada para calcular o alargamento Stark produzido por íons em um plasma e para alargamento de átomos neutros em pressões ≥ 100 Torr. A partir das equações (1.15) e (1.16), observa-se que a aproximação quase estática é melhor aplicada em altas densidades, onde T_c é menor, e para baixas temperaturas, onde \bar{v} é pequeno.

No outro extremo, onde a duração da colisão é pequena comparada com o tempo entre colisões, a aproximação de impacto pode ser usada:

$$t_c \ll \frac{1}{\Delta\omega} \approx T_c. \quad (1.17)$$

Na aproximação por impacto o deslocamento de fase produzido por uma colisão é calculado e o resultado é uma média sobre todos os parâmetros de impacto. A aproximação de impacto é geralmente usada para descrever o alargamento das linhas para pressões entre 0 e 100 Torr. Analisando as equações (1.15) e (1.16) observa-se que essa aproximação é melhor aplicada para baixas pressões e altas temperaturas, onde T_c e \bar{v} são grandes.

Entretanto, deve ser recordado que o tempo de interesse é determinado pelo

deslocamento da frequência a partir da linha central, $\Delta\omega$. Portanto, é possível que partes do perfil de linha sejam calculadas pela aproximação quase estática e outras sejam descritas pela aproximação de impacto.

1.2 Contexto teórico

Linhas satélites presentes nas asas distantes dos perfis de linhas das séries de Lyman e Balmer do hidrogênio atômico têm sido observadas em estrelas e em plasmas em laboratório (e.g., Kielkopf et al., 2002). Entretanto, a descrição adequada do fenômeno encontra dois grandes problemas.

A primeira dificuldade é do lado experimental, que tem sido o desenvolvimento de técnicas para observar as interações do hidrogênio atômico neutro em densidades suficientemente altas para efeitos de alargamento das linhas espectrais serem observados, e para caracterizar as condições quantitativas sob as quais os espectros são criados. Por outro lado, do ponto de vista teórico, desenvolver métodos para calcular as contribuições a partir de todos os possíveis estados moleculares do H_2 e H_2^+ para o espectro de átomos livres na colisão, pois outro absorvedor contínuo hidrogenoide é a molécula de hidrogênio H_2 , cuja abundância excede a de hidrogênio atômico na atmosfera de estrelas tipo M ($T_{\text{eff}} \leq 2500 \text{ K}$). Embora essa molécula não absorva na região do visível, seus íons H_2^+ e H_2^- o fazem. A densidade dos íons H_2^+ é proporcional ao produto da densidade de átomos de H neutros pela densidade de prótons, portanto ele contribui de forma significativa na opacidade contínua em intervalos de temperaturas e pressões dentro das quais existem prótons e átomos de H neutro em quantidades significativas. Esse intervalo de pressão e temperatura ocorre precisamente na fotosfera de estrelas tipo A ($T_{\text{eff}} \simeq 10000 \text{ K}$), nas quais existem aproximadamente as mesmas quantidades de H neutro e ionizado. Consequentemente, aproximadamente 10% da opacidade contínua no visível dessas estrelas é devida à contribuição do íon H_2^+ . A contribuição deste íon para a opacidade contínua foi estudada por Bates (1951), Bates (1952), Bates et al. (1953) e Matsushima (1964) entre outros. Matsushima (1964) demonstrou que, para estrelas frias, a contribuição do íon H_2^+ é inferior a 10% da contribuição do H_2^- para $\lambda > 4000 \text{ \AA}$. Doyle (1968) estudou a absorção produzida pela assim chamada quase-molécula H_2 e descobriu que a sua contribuição é significativa na região ultravioleta para $\lambda < 2500 \text{ \AA}$ e estrelas do tipo solar. Enquanto isso, o íon H_2^- existe principalmente em baixas temperaturas, próprias de estrelas M.

Experimentalmente, linhas satélites características em 1600 \AA e 1405 \AA nas

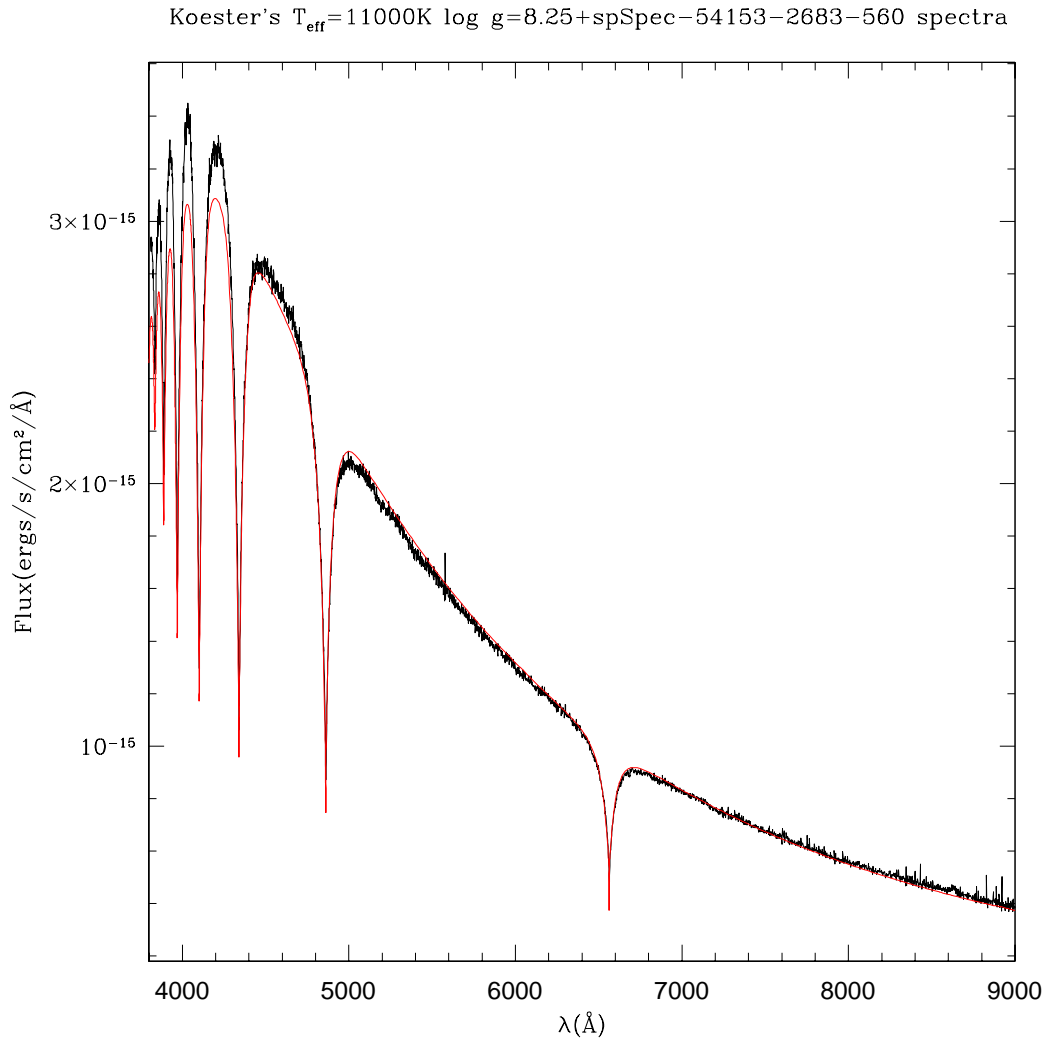


Figura 1.2: Espectro observado com o SDSS da anã branca SDSS J073708.00+411227.45, com sinal-ruído $S/R=68$ e magnitude $g=15,77$, e em vermelho um modelo de D. Koester de $11\,000\text{ K}$ e $\log g=8,25$ que se ajusta, para comparação.

asas de Lyman- α , associadas com transições livre-livre quase-molecular do H_2 e H_2^+ , foram observadas nos espectros ultravioletas (UV) de algumas estrelas obtidos com o *International Ultraviolet Explorer* (IUE) e com *Hubble Space Telescope* (HST), Greenstein (1980), Koester et al. (1985) e Nelan & Wegner (1985). Os satélites na asa vermelha de Lyman- β na região espectral de 905 a $1\,187\text{ \AA}$, foram observados com o *Far Ultraviolet Spectroscopic Explorer* (FUSE).

As estrelas que apresentam linhas satélites na serie de Lyman são as estrelas anãs brancas DA (*WDs*), estrelas velhas do ramo horizontal do tipo espectral A, e estrelas λ Bootis, estrelas de População I com tipo espectral compreendido entre B

e F (Allard et al., 2000). As estrelas anãs brancas são o produto final da evolução de mais de 95% de todas as estrelas (e.g., Kepler et al., 2007). Elas consumiram todo seu combustível nuclear (que depende da massa individual da estrela) e, portanto, sua fonte de luminosidade é dominada pela energia interna residual. Seu esfriamento via irradiação é lento, devido à pequena área superficial (um raio típico de uma anã branca é da ordem de 10 000 km), logo tem um tempo de esfriamento longo, levando aproximadamente 10^{10} anos para sua temperatura efetiva diminuir de cerca de 10^5 K para próximo de 10^3 K. Portanto, as estrelas anãs brancas mais frias são velhas, e guardam em sua estrutura o registro histórico da formação estelar e da evolução de nossa Galáxia.

As observações espectroscópicas no ultravioleta (UV) de anãs brancas revelam uma forma da linha muito diferente daquela esperada a partir de um simples alargamento Stark, com linhas satélites na asa vermelha de Lyman- β próximas de 1078 e 1060 Å (Koester et al., 1996, 1998). A intensidade desses satélites característicos e, na verdade, a forma inteira das asas na série Lyman, é muito sensível ao grau de ionização da atmosfera estelar e em plasmas em laboratório, pois é a ionização que determina a importância relativa do alargamento colisional por íons, ou partículas neutras.

Portanto as linhas satélites podem ser usadas como um diagnóstico da temperatura em plasmas onde o equilíbrio de ionização de Saha se mantém. A forma do potencial desempenha um papel dominante na grande diferença das características do alargamento quase-molecular (Allard et al., 1998a). Transições quase-moleculares ocorrem quando um fóton é absorvido ou emitido por um átomo enquanto esse átomo interage com uma ou mais partículas vizinhas, que podem ser átomos, íons ou moléculas (Allard & Kielkopf, 1982). Em curtas distâncias, a interação entre o átomo perturbado e a(s) outra(s) partícula(s) geralmente leva à formação de linhas satélites moleculares nas asas das linhas atômicas (Allard et al., 1998b,a, 1999). As estruturas observadas na asa de Lyman- α em 1 623 Å e 1 405 Å são devidas a absorções das quase-moléculas H_2 e H_2^+ , respectivamente. A intensidade desses dois satélites depende fortemente do grau de ionização da atmosfera estelar e consequentemente da temperatura efetiva T_{eff} e gravidade superficial $\log g$ (e.g., Holweger et al., 1994).

A região de formação de linhas espectrais, chamada de atmosfera, em uma anã branca, representa menos que 10^{-13} da massa da estrela e é dominada por hidrogênio (anãs brancas DA) ou hélio (DB/DO) e algumas vezes com pequenas quantidade de elementos pesados (por exemplo, anãs brancas DAZ, DBZ e DOZ) (e.g., Koester,

2010). É através da atmosfera estelar que a radiação é emitida para o espaço interestelar, e grande parte das informações são obtidas através de modelos atmosféricos, que revelam parâmetros como T_{eff} , $\log g$ e composição química.

A técnica mais bem sucedida para a determinação da temperatura efetiva (T_{eff}) e gravidade superficial ($\log g$) de estrelas anãs brancas DA é a comparação dos perfis de linha do hidrogênio observados com espectros sintéticos a partir de modelos teóricos de atmosfera (e.g., Tremblay & Bergeron, 2009). O sucesso dessa técnica consiste no fato de que os perfis de linha teóricos são sensíveis às variações dos parâmetros atmosféricos (Wegner & Schulz, 1981) e que as linhas de hidrogênio são as únicas presentes nos espectros de estrelas anãs brancas DA, como segue no exemplo da figura 1.2.

A física utilizada para construir os modelos incluem o modelo de gás ideal, e as fontes de opacidade radiativa. As abundâncias relativas dos componentes químicos podem ser determinadas através da função partição usando a probabilidade ocupacional de Hummer & Mihalas (1988), que resolvem a população de cada nível do gás com a técnica de minimização de energia livre.

É necessário conhecer as transições atômicas para explorar ao máximo a técnica espectroscópica. Bergeron et al. (1992) foram um dos primeiros a aplicar esta aproximação a um grande número de anãs brancas; eles analisaram as linhas de Balmer. A técnica foi mais tarde aplicada às linhas UV da série de Lyman (Kepler & Nelan, 1993, Bergeron et al., 1995, Vennes et al., 2005). A análise espectroscópica é limitada principalmente pela qualidade das observações, tais como a razão sinal/ruído, calibração de fluxo, etc. O valor absoluto dos parâmetros atmosféricos depende diretamente do nível de sofisticação da física incluída nos cálculos do modelo de atmosfera, da consistência no cálculo do efeito Stark e da teoria de convecção (Tremblay & Bergeron, 2009).

Em 2002 Bergeron & Leggett (2002) publicaram melhorias nos modelos, levando em conta o efeito nas opacidades óticas quase-moleculares dos momentos de dipolo induzidos por interações entre as partículas. Essa interação provoca um rearranjo temporário das cargas eletrônicas, com formação de uma molécula temporária, produzindo assim absorções ou emissões além daquelas dos átomos isolados.

Atualmente existe um grande número de espectros óticos de anãs brancas obtidas como parte do *Sloan Digital Sky Survey* (SDSS) (Eisenstein et al., 2006, Kleinman, 2010), permitindo assim o estudo da distribuição de massa das anãs brancas (Kepler et al., 2007). Kleinman et al. (2004) e Liebert et al. (2005) já tinham estimado as massas a partir de análise espectroscópica. Bergeron et al. (1991) e Koester (1991)

discutem o aparente aumento na massa média de estrelas anãs brancas DA com $T_{\text{eff}} < 12\,000$ K. Kepler et al. (2006) compararam os espectros do SDSS com espectros de alto sinal/ruído (S/R) obtidos com o telescópio Gemini 8 m para quatro anãs brancas com $T_{\text{eff}} \sim 12\,000$ K e determinaram que as massas derivadas a partir da análise dos espectros do SDSS, com S/R relativamente baixos, estão sistematicamente superestimadas por $\Delta M \simeq 0.13M_{\odot}$. Devido à correlação entre T_{eff} e $\log g$ (um pequeno aumento em T_{eff} pode ser compensado por uma pequena diminuição em $\log g$), tais discrepâncias estão concentradas unicamente nas regiões em torno do máximo das linhas de Balmer, $14\,000 \text{ K} \geq T_{\text{eff}} \geq 10\,000 \text{ K}$. Para estudar a tendência de aumento da massa média aparente das anãs brancas DAs, Kepler et al. (2010) analisaram 1505 delas com $S/N \geq 20$ e $T_{\text{eff}} > 12\,000$ K e determinaram uma massa média das DAs de $M/M_{\odot} = 0.604 \pm 0.003$. Eles observaram que a distribuição da amostra é similar à publicada por Liebert et al. (2005) obtida do *Palomar Green Survey* com 348 estrelas. Falcon et al. (2010) usaram uma média de conjunto de avermelhamento gravitacional de 449 DAs, método independente dos perfis de linha pois usa somente a posição do centro da linha, e estimou uma massa média de $0.640 \pm 0.014M_{\odot}$, e que não apresentava mudanças significativas para $T_{\text{eff}} \leq 12\,000$ K. O valor de massa média obtido por Falcon et al. (2010) é similar ao obtido por Tremblay & Bergeron (2009) para as estrelas quentes quando incluem o formalismo de Hummer & Mihalas (1988) para o cálculo do campo elétrico médio causador do efeito Stark.

Koester et al. (2009), Koester (2010), Tremblay & Bergeron (2009) e Gianninas et al. (2010) estudaram as possíveis causas para o aumento aparente na massa determinada espectroscopicamente para $T_{\text{eff}} \leq 12\,000$ K, não observado nas determinações fotométricas. Eles concluíram que esse fenômeno não é causado por contaminação de He, e Tremblay et al. (2011) propôs que o uso de modelos unidimensionais nos cálculos da convecção da atmosfera, comparados a um modelo mais realístico tridimensional, poderia ser a causa. Kepler et al. (2010) descobriram campos magnéticos acima de 1 MG em cerca de 5% das anãs brancas, e que o campo magnético tende a ser maior quando a estrela desenvolve uma zona de convecção atmosférica profunda, em $T_{\text{eff}} \leq 12\,000$ K e propõe que uma causa do possível alargamento de linha observado, interpretado como aumento de gravidade superficial, possa ser alargamento magnético (efeito Zeeman) para campos abaixo do limite de detecção observacional. Há um enorme esforço para eliminar as inconsistências nos cálculos do modelo, e essas tentativas mostram a necessidade do contínuo estudo da interação do hidrogênio perturbado por prótons, elétrons, átomos e moléculas em alta pressão.

As estrelas anãs brancas possuem uma alta densidade em sua atmosfera, o que torna o alargamento colisional (alargamento por pressão) dominante em relação aos demais. As colisões ou interações entre partículas e um átomo perturbado induzem mudanças nos níveis de energia dos átomos perturbados e correspondentes alterações nas frequências das transições atômicas. Essas colisões entre átomos perturbados e partículas perturbadoras são responsáveis pela formação temporária de quase-moléculas que levam ao surgimento de possíveis satélites característicos nas asas do perfil de linha, ou seja, absorções ou emissões além das esperadas. A figura 1.3 mostra o espectro da anã branca G226-29, observada com o Hubble Space Telescope (HST) por 6 exposições, cada tempo de 3 horas, entre setembro de 1994 e dezembro de 1995 por Kepler et al. (2000). O espectro da G226-29 mostra a existência e forma dos satélites.

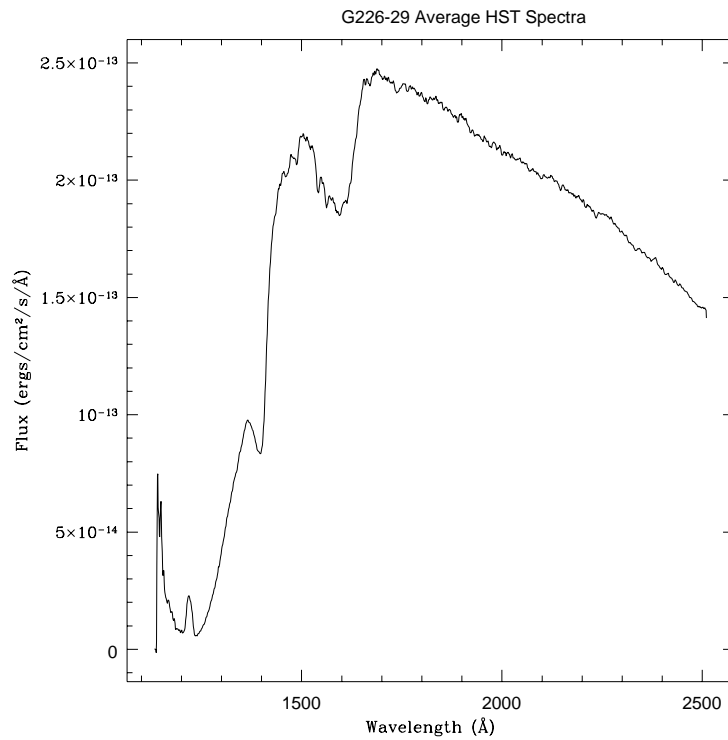


Figura 1.3: Espectro observado com o Hubble Space Telescope (HST) da anã branca G226-29, de Kepler et al. (2000), mostrando a asa vermelha de $L\alpha$, centrada em 1215 \AA e as linhas satélites em 1405 \AA do H_2^+ e 1600 \AA , do H_2

Portanto, o perfil de linha de estrelas anãs brancas, devido a interações entre o hidrogênio atômico e prótons, é distinto daquele calculado levando em consideração apenas partículas isoladas da atmosfera. Há a formação da quase-molécula H_2^+ e sua dissociação. E quando a diferença $\Delta V(R)$ entre um potencial de um nível superior

e um potencial de um nível inferior apresenta um extremo, haverá a formação de um satélite centrado periodicamente em $\Delta\omega = k\Delta V_{ext}(R)$, com $(k = 1, 2, 3, \dots)$ (Anderson, 1956, Allard & Kielkopf, 1982). A variação da frequência $\Delta\omega$ é medida a partir do centro da linha espectral não perturbada e o satélite característico, e escrita na mesma unidade da diferença de potencial, por conveniência. A posição de $\Delta V_{ext}(R)$ e a dependência de $\Delta V(R)$ com a separação internuclear R determinam a amplitude e a forma dos satélites, respectivamente.

1.3 Visão geral da tese

Nessa tese apresentarei o estudo da interação do átomo de hidrogênio com prótons, que temporariamente cria a molécula de H_2^+ , com abundâncias mostrada na figura 1.4, para densidade inicial de $1,0 \times 10^{17}$ moléculas de H_2 por cm^{-3} e pressão constante.

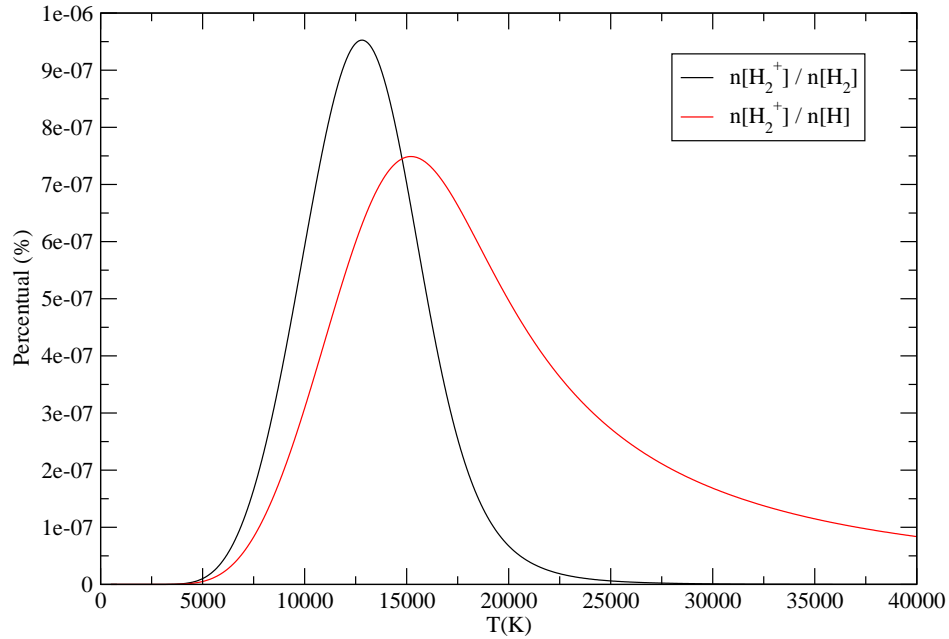


Figura 1.4: Abundância relativa das quantidades de $n(H_2^+)/n(H_2)$ em preto e $n(H_2^+)/n(H)$ em vermelho, com densidade inicial de $1,0 \times 10^{17} H_2 cm^{-3}$.

No capítulo 2 serão apresentados os cálculos do potencial do H_2^+ até o nível $n = 10$ (número quântico principal da molécula), bem como a análise de todas as possíveis transições que podem ocorrer. Apesar da molécula de H_2^+ ser muito bem conhecida, seus potenciais não possuem publicações até o nível $n = 10$, nem o grau de resolução que será apresentado. Esses novos dados teóricos devem ser inseridos no modelo de perfis de linha para altas densidades, em adição ao alargamento Stark.

No capítulo 3, apresentarei nosso estudo dos momentos de dipolo elétrico para todas as possíveis transições. Da mesma forma que os potenciais, na literatura encontramos os valores somente para $Ly\alpha$, $Ly\beta$, $Ly\gamma$ e $H\alpha$, sendo que os momentos de dipolo elétrico para $Ly\gamma$ foram usados por Allard et al. (2004), mas não foram publicados até o momento.

O capítulo 4 é destinado aos cálculos dos perfis de linhas das transições das séries de Lyman e Balmer, bem como a análise das linhas satélites e quais transições produzem tais linhas.

Os capítulos 3 e 4 foram publicados por Santos & Kepler (2012) no Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, Volume 423, Issue 1, pp. 68-79, em junho de 2012, DOI: 10.1111/j.1365-2966.2012.20631.x

Finalmente, no capítulo 5 serão apresentadas as discussões e conclusões referentes à essa tese.

Capítulo 2

Potenciais da molécula de Hidrogênio H_2^+

A estrutura do íon molecular H_2^+ foi estudada por Teller (1930), Hylleraas (1931), Jaffé (1934), Baber & Hassé (1935), Bates & Poots (1953) e Madsen & Peek (1971). Entretanto, tabelas precisas da energia eletrônica em função da distância internuclear para estados excitados $n \geq 3$ não foram até agora publicadas.

Como originalmente demonstrado por Burrau (1927), a equação de Schrödinger para o H_2^+ pode ser separada e a energia eletrônica calculada.

2.1 A aproximação de Born-Oppenheimer

As funções de onda e energias de uma molécula são obtidas a partir da equação de Schrödinger:

$$\hat{H}\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = E\Psi(\vec{R}, \vec{r}) \quad (2.1)$$

onde \vec{R} e \vec{r} representam as coordenadas nucleares e eletrônicas respectivamente.

Considerando uma molécula diatômica composta por núcleos e elétrons com massas pontuais e desprezando as interações de spin-órbita e outras correções relativísticas, o Hamiltoniano molecular é dado por (Levine, 2004):

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2}_{\hat{T}_N(\vec{R})} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2}_{\hat{T}_e(\vec{r})} + \underbrace{\sum_{\alpha} \sum_{\beta > \alpha} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta} e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{\alpha\beta}}}_{\hat{V}_{NN}(\vec{R})} - \underbrace{\sum_{\alpha} \sum_i \frac{Z_{\alpha} e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{i\alpha}}}_{\hat{V}_{eN}(\vec{r}, \vec{R})} + \underbrace{\sum_j \sum_{i > j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}}_{\hat{V}_{ee}(\vec{r})} \quad (2.2)$$

onde α e β se referem aos núcleos e i e j aos elétrons.

Os cinco termos do Hamiltoniano (2.2) representam os operadores:

$\hat{T}_N(\vec{R})$ energia cinética dos núcleos;

$\hat{T}_e(\vec{r})$ energia cinética dos elétrons;

$\hat{V}_{NN}(\vec{R})$ repulsão entre os núcleos, sendo $R_{\alpha\beta}$ a distância entre os núcleos α e β de números atômicos Z_α e Z_β ;

$\hat{V}_{eN}(\vec{r}, \vec{R})$ interação entre os elétrons e os núcleos, onde $r_{i\alpha}$ é a distância entre o elétron i e o núcleo α ,

$\hat{V}_{ee}(\vec{r})$ interação entre os elétrons, onde r_{ij} é a distância entre os elétrons i e j .

O termo $\hat{V}_{eN}(\vec{r}, \vec{R})$ infelizmente impede a separação do \hat{H} em componentes nuclear e eletrônica, que permitiria escrever a função de onda molecular como um produto de termos nuclear e eletrônica, $\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \chi(\vec{R})\phi(\vec{r})$. Torna-se então necessário utilizar algum tipo de aproximação. Introduzimos a aproximação de Born-Oppenheimer. O termo $\hat{V}_{eN}(\vec{r}, \vec{R})$ não pode ser desprezado, mas pode-se parametrizar \vec{R} de modo que a função de onda total possa ser reescrita como $\chi(\vec{R})\phi(\vec{r}; \vec{R})$. A aproximação de Born-Oppenheimer consiste no fato de que os núcleos são muito mais massivos que os elétrons, permitindo considerar que os núcleos estão fixos enquanto os elétrons realizam o movimento. Fixando \vec{R} , pode-se resolver a função de onda eletrônica $\phi(\vec{r}; \vec{R})$ com dependência apenas parametricamente em R . Com isto, obtém-se a curva de energia potencial ao longo do movimento parametrizado do núcleo. Consequentemente, a função de onda pode ser reescrita:

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \chi(\vec{R})\phi(\vec{r}; \vec{R}). \quad (2.3)$$

e o Hamiltoniano, em uma forma simplificada e em unidades atômicas (Apêndice A):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \nabla_i^2 + V(\vec{r}, \vec{R}) \quad (2.4)$$

onde $V(\vec{r}, \vec{R})$ é a energia potencial total do sistema.

Substituindo 2.3 e 2.4 em 2.1 obtém-se:

$$\left[-\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 - \frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 + V(\vec{r}, \vec{R}) \right] \chi(\vec{R})\phi(\vec{r}; \vec{R}) = E\chi(\vec{R})\phi(\vec{r}; \vec{R}) \quad (2.5)$$

ou seja,

$$-\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 \left[\chi(\vec{R}) \phi(\vec{r}; \vec{R}) \right] + \left[-\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 + V(\vec{r}, \vec{R}) \right] \chi(\vec{R}) \phi(\vec{r}; \vec{R}) = E \chi(\vec{R}) \phi(\vec{r}; \vec{R}), \quad (2.6)$$

sendo

$$\nabla_{\alpha}^2 \left[\chi(\vec{R}) \phi(\vec{r}; \vec{R}) \right] = \chi(\vec{R}) \nabla_{\alpha}^2 \phi(\vec{r}; \vec{R}) + \nabla \phi(\vec{r}; \vec{R}) \cdot \nabla \chi(\vec{R}) + \phi(\vec{r}; \vec{R}) \nabla_{\alpha}^2 \chi(\vec{R})$$

onde $\nabla \phi(\vec{r}; \vec{R}) \cdot \nabla \chi(\vec{R})$ representa o acoplamento elétron-núcleo.

De acordo com a aproximação de Born-Oppenheimer, $\nabla \phi(\vec{r}; \vec{R}) \approx 0$ e $\nabla_{\alpha}^2 \phi(\vec{r}; \vec{R}) \approx 0$, pois a nuvem eletrônica reorganiza-se quase instantaneamente para qualquer mudança na posição nuclear, significando que uma pequena perturbação na configuração nuclear é desprezível, motivo pelo qual essa aproximação também é conhecida como aproximação adiabática. Resta então:

$$\nabla_{\alpha}^2 \left[\chi(\vec{R}) \phi(\vec{r}; \vec{R}) \right] = \phi(\vec{r}; \vec{R}) \nabla_{\alpha}^2 \chi(\vec{R})$$

que é aplicada em 2.6:

$$-\frac{1}{2} \phi(\vec{r}; \vec{R}) \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 \chi(\vec{R}) + \left[-\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 + V(\vec{r}, \vec{R}) \right] \chi(\vec{R}) \phi(\vec{r}; \vec{R}) = E \chi(\vec{R}) \phi(\vec{r}; \vec{R}), \quad (2.7)$$

Devido, ainda, à aproximação de Born-Oppenheimer, o primeiro termo, correspondente ao operador energia cinética nuclear da equação 2.7, é desprezado, e o termo que descreve a repulsão nuclear $[\hat{V}_{NN}(\vec{R})]$ torna-se uma constante e pode, sem perda de generalidade, ser adicionado ao hamiltoniano, sem alteração de suas autofunções. Portanto, pode-se dividir ambos membros da equação 2.7 por $\chi(\vec{R})$ resultando em:

$$\left[-\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 + V(\vec{r}, \vec{R}) \right] \phi(\vec{r}; \vec{R}) = E_e \phi(\vec{r}; \vec{R}), \quad (2.8)$$

onde E_e é a energia eletrônica do sistema para uma dada configuração nuclear.

Conseqüentemente a equação de Schrödinger eletrônica pode ser escrita como:

$$\hat{H}_e \phi(\vec{r}; \vec{R}) = E_e \phi(\vec{r}; \vec{R}) \quad (2.9)$$

A obtenção da função de onda nuclear depende diretamente da resolução da

equação 2.8, ou seja:

$$-\frac{1}{2}\phi(\vec{r}; \vec{R}) \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 \chi(\vec{R}) + \left[-\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 + \mathbb{V}(\vec{r}, \vec{R}) + \sum_{\alpha} \sum_{\beta > \alpha} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{R_{\alpha\beta}} \right] \chi(\vec{R}) \phi(\vec{r}; \vec{R}) = E \chi(\vec{R}) \phi(\vec{r}; \vec{R}) \quad (2.10)$$

Simplificando a 2.10 e usando a 2.8, obtém-se:

$$-\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 \chi(\vec{R}) + \left[E_e + \sum_{\alpha} \sum_{\beta > \alpha} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{R_{\alpha\beta}} \right] \chi(\vec{R}) = E \chi(\vec{R}) \quad (2.11)$$

O termo entre colchetes da 2.11 é o potencial efetivo do sistema e a grandeza E é a energia total, que envolve as energias eletrônica, vibracional, rotacional e translacional da molécula.

2.2 O íon molecular do Hidrogênio H_2^+

A estrutura do H_2^+ é formada por um elétron e dois prótons, conforme a figura 2.1. O problema do íon molecular do Hidrogênio é de grande interesse, tanto para físicos quanto para astrofísicos, pois o H_2^+ e outras moléculas diatômicas com um elétron são as únicas entre moléculas em que a equação de Schrödinger para seu movimento eletrônico pode ser separável em três equações diferenciais ordinárias (Madsen & Peek, 1971), devido ao fato que os núcleos são muito mais massivos e lentos em relação ao movimento eletrônico, ou seja, na aproximação de Born-Oppenheimer.

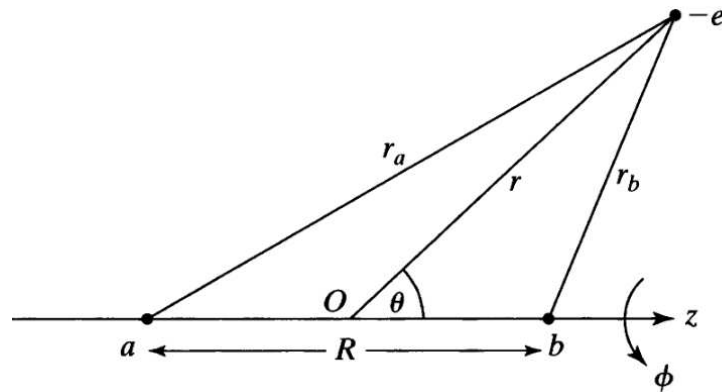


Figura 2.1: Estrutura do íon molecular do Hidrogênio H_2^+ [Adaptado de Levine (2004)]

Portanto, pode-se escrever a partir da equação 2.8, a equação de Schrödinger da parte eletrônica, que possui a seguinte forma em unidades atômicas:

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b}\right)\Psi = \left(E - \frac{1}{R}\right)\Psi \quad (2.12)$$

Na figura 2.1 a origem de coordenadas está no centro do segmento de reta que une as cargas positivas e essa linha coincide com o eixo z em coordenadas cartesianas. Devido à simetria do sistema apresentado nessa figura, tende-se a resolver, em primeira instância, a equação de Schrödinger eletrônica utilizando as coordenadas polares esféricas (r, θ, ϕ) do elétron, ou seja, escrevendo r_a e r_b nessas coordenadas. Entretanto, utilizando as coordenadas polares esféricas, a equação de Schrödinger não pode ser separada.

Por sua vez, se forem utilizadas coordenadas esferoidais prolatas, também conhecidas como coordenadas elípticas confocais (λ, μ, ϕ) , conforme figura 2.2, é possível fazer a separação de variáveis e obter soluções, como demonstrado por Burrau (1927). As coordenadas elípticas são usadas em problemas envolvendo dois centros, a e b , separados por uma distância fixa R . Se r_a é a distância do núcleo a até a posição do elétron, e r_b é a distância do núcleo b até o mesmo ponto, então as coordenadas elípticas são definidas como:

$$\lambda = \frac{r_a + r_b}{R} \quad (2.13)$$

$$\mu = \frac{r_a - r_b}{R} \quad (2.14)$$

$$\phi = \tan^{-1}\left(\frac{x}{y}\right) \quad (2.15)$$

λ define elipsóides de revolução com focos a e b e μ define parabolóides de revolução em torno do eixo z , ϕ é o ângulo de rotação do elétron em torno do eixo internuclear z , o mesmo usado em coordenadas polares esféricas.

Os intervalos dessas coordenadas são:

$$1 \leq \lambda \leq \infty,$$

$$-1 \leq \mu \leq 1,$$

$$0 \leq \phi \leq 2\pi.$$

As coordenadas elípticas da figura 2.2 estão relacionadas com as coordenadas

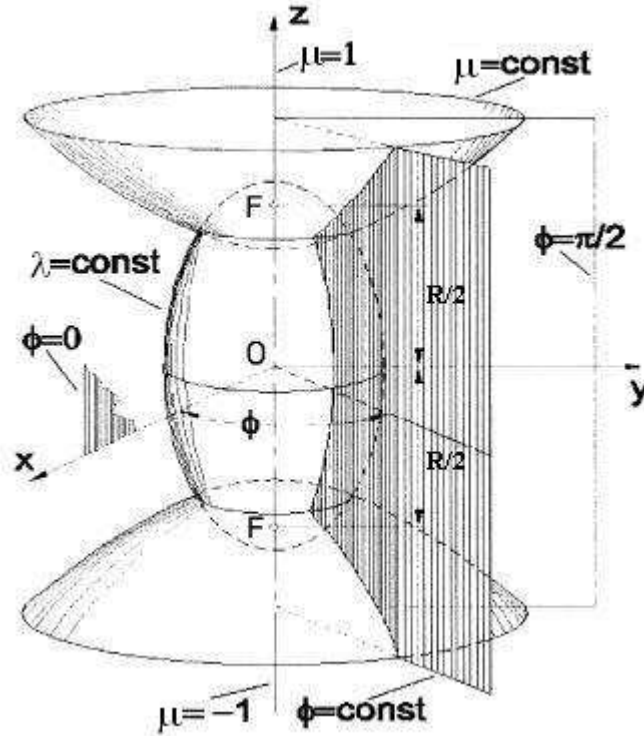


Figura 2.2: Coordenadas esféricas [Adaptado de Li et al. (2001)]

cartesianas pelas seguintes transformações:

$$x = \frac{R}{2} \cos \phi \sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \quad (2.16)$$

$$y = \frac{R}{2} \text{sen} \phi \sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \quad (2.17)$$

$$z = \frac{R\lambda\mu}{2} \quad (2.18)$$

e o elemento de volume é dado por:

$$d\tau = \frac{R^3}{8} (\lambda^2 - \mu^2) d\lambda d\mu d\phi. \quad (2.19)$$

A equação de Schrödinger 2.12 pode ser escrita agora em função do novo sistema de coordenadas. Para tanto, é preciso obter r_a , r_b e o ∇^2 em coordenadas elípticas. Os valores de r_a e r_b são obtidos diretamente das equações 2.13 e 2.14, fazendo a soma e subtração de ambas:

$$r_a = \frac{R}{2}(\lambda + \mu) \quad (2.20)$$

$$r_b = \frac{R}{2}(\lambda - \mu). \quad (2.21)$$

A expressão do Laplaciano em coordenadas elípticas é obtida a partir do Laplaciano em coordenadas curvilíneas ortogonais, pois o sistema de coordenadas esféricas prolatas é um sistema curvilíneo ortogonal. O Laplaciano em coordenadas curvilíneas é dado por (Kaplan, 1953):

$$\nabla^2 = \frac{1}{h_\lambda h_\mu h_\phi} \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\frac{h_\mu h_\phi}{h_\lambda} \frac{\partial}{\partial \lambda} \right) + \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{h_\phi h_\lambda}{h_\mu} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) + \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{h_\lambda h_\mu}{h_\phi} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right]. \quad (2.22)$$

E seus coeficientes métricos são dados por:

$$h_\lambda = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \lambda}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \lambda}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \lambda}\right)^2} = \frac{R}{2} \sqrt{\frac{\lambda^2 - \mu^2}{\lambda^2 - 1}} \quad (2.23)$$

$$h_\mu = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \mu}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \mu}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \mu}\right)^2} = \frac{R}{2} \sqrt{\frac{\lambda^2 - \mu^2}{1 - \mu^2}} \quad (2.24)$$

$$h_\phi = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \phi}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \phi}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \phi}\right)^2} = \frac{R}{2} \sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \quad (2.25)$$

Substituindo 2.23, 2.24 e 2.25 em 2.22 obtém-se o Laplaciano em coordenadas elípticas:

$$\nabla^2 = \frac{4}{R^2(\lambda^2 - \mu^2)} \left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[(\lambda^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \lambda} \right] + \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} \right] + \frac{(\lambda^2 - \mu^2)}{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \quad (2.26)$$

Com as equações 2.20, 2.21 e 2.26 reescreve-se a equação de Schrödinger eletrônica em coordenadas elípticas da seguinte forma:

$$-\frac{2}{R^2(\lambda^2 - \mu^2)} \left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[(\lambda^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \lambda} \right] + \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} \right] + \frac{(\lambda^2 - \mu^2)}{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \Psi - \frac{4\lambda\Psi}{R(\lambda^2 - \mu^2)} = \left(E - \frac{1}{R} \right) \Psi \quad (2.27)$$

Multiplicando a equação 2.27 por $\left[-\frac{2}{R^2(\lambda^2-\mu^2)}\right]^{-1}$ e usando a notação $\varepsilon = E - \frac{1}{R}$ para a energia eletrônica, temos

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[(\lambda^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \lambda} \right] + \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} \right] + \frac{(\lambda^2 - \mu^2)}{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \Psi + 2\lambda R \Psi = -\frac{\varepsilon R^2 (\lambda^2 - \mu^2)}{2} \Psi \quad (2.28)$$

Por conveniência, define-se um parâmetro (real) p via $p^2 = \frac{-\varepsilon R^2}{2}$ e reescreve-se a equação 2.28:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[(\lambda^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \lambda} \right] + \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} \right] + \frac{(\lambda^2 - \mu^2)}{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \Psi + 2\lambda R \Psi = p^2 (\lambda^2 - \mu^2) \Psi \quad (2.29)$$

passando todos os termos para o lado esquerdo,

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[(\lambda^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \lambda} \right] + \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} \right] + \frac{(\lambda^2 - \mu^2)}{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \Psi + [2\lambda R - p^2 (\lambda^2 - \mu^2)] \Psi = 0 \quad (2.30)$$

A equação (2.30) é completamente separável, resultado já esperado pelo uso das coordenadas elípticas, e isso permite que a função de onda seja escrita como

$$\Psi(\lambda, \mu, \phi) = \Lambda(\lambda)M(\mu)\Phi(\phi) \quad (2.31)$$

Fazendo a substituição de $\Psi(\lambda, \mu, \phi) = \Lambda(\lambda)M(\mu)\Phi(\phi)$, na equação 2.30, obtém-se a equação separada em três equações diferenciais ordinárias (Bates et al., 1953),

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + m^2 \right] \Phi = 0 \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial M}{\partial \mu} \right] + \left[-A + p^2 \mu^2 - \frac{m^2}{1 - \mu^2} \right] M = 0 \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \left[(\lambda^2 - 1) \frac{\partial \Lambda}{\partial \lambda} \right] + \left[A + 2R\lambda - p^2 \lambda^2 - \frac{m^2}{\lambda^2 - 1} \right] \Lambda = 0 \quad (2.34)$$

onde A e m^2 são as constantes de separação. As constantes m , A e p são determinadas pelas condições de que a $\Psi(\lambda, \mu, \phi)$ seja única, contínua e finita sobre toda a região do espaço definido por $1 \leq \lambda \leq \infty$, $-1 \leq \mu \leq 1$ e $0 \leq \phi \leq 2\pi$.

A primeira equação, equação (2.32), refere-se à parte azimutal do problema enquanto que as equações (2.33) e (2.34) referem-se às partes angular e radial, respectivamente.

A equação azimutal (2.32) pode ser resolvida diretamente com uma solução da forma:

$$\Phi(\phi) = e^{(\pm im\phi)} \quad (2.35)$$

para que a função de onda tenha solução única, onde m , a constante de separação, deve assumir valores inteiros ($m = 0, 1, 2, 3, \dots$) e está associada à projeção do momentum angular orbital do elétron sobre o eixo nuclear. A designação do orbital está associada ao valor de m , ou seja, a componente σ corresponde a $m = 0$, e a componente π a $m = 1$, e assim por diante.

2.2.1 Função angular

A solução da parte angular 2.33 pode ser obtida a partir do método sugerido por Hylleraas (1931), que consiste em representar a solução de 2.33 como uma expansão em polinômios associados de Legendre na forma:

$$M(\mu) = \sum_{l=m}^{\infty} c_l P_l^m(\mu) \quad (2.36)$$

onde $P_l^m(\mu)$ é o l -ésimo polinômio de Legendre, solução da equação diferencial de Legendre,

$$\frac{\partial}{\partial \eta} \left[(1 - \eta^2) \frac{\partial P_l^m(\eta)}{\partial \eta} \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] P_l^m(\eta) = 0 \quad (2.37)$$

que possui a mesma forma da equação 2.33. Substituindo 2.36 em 2.33, a parte angular toma a forma:

$$\sum_{l=m}^{\infty} c_l \left\{ \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial P_l^m(\mu)}{\partial \mu} \right] + \left[-A + p^2 \mu^2 - \frac{m^2}{1 - \mu^2} \right] P_l^m(\mu) \right\} = 0. \quad (2.38)$$

Fazendo agora a substituição de 2.36 na equação diferencial de Legendre 2.37, obtemos:

$$\sum_{l=m}^{\infty} c_l \left\{ \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial P_l^m(\mu)}{\partial \mu} \right] + \left[-l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \mu^2} \right] P_l^m(\mu) \right\} = 0 \quad (2.39)$$

A relação entre a parte angular e a equação de Legendre é direta, pois isolando a primeira parte do lado esquerdo da equação angular 2.38 temos:

$$\sum_{l=m}^{\infty} c_l \left\{ \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial P_l^m(\mu)}{\partial \mu} \right] \right\} = \sum_{l=m}^{\infty} c_l \left\{ \left[+A - p^2 \mu^2 + \frac{m^2}{1 - \mu^2} \right] \right\} P_l^m(\mu) \quad (2.40)$$

Substituindo na equação de Legendre, encontramos:

$$\sum_{l=m}^{\infty} c_l \left[+A - p^2 \mu^2 + \frac{m^2}{1 - \mu^2} - l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \mu^2} \right] P_l^m(\mu) = 0 \quad (2.41)$$

ou seja,

$$\sum_{l=m}^{\infty} c_l \left[+A - p^2 \mu^2 - l(l+1) \right] P_l^m(\mu) = 0 \quad (2.42)$$

Usando a relação de recorrência dos polinômios de Legendre $P_l^m(\mu)$,

$$\mu P_l^m(\mu) = \frac{(l+m)P_{l-1}^m(\mu) + (l-m+1)P_{l+1}^m(\mu)}{2l+1} \quad (2.43)$$

duas vezes para eliminar os termos μ e μ^2 obtemos

$$\begin{aligned} \mu^2 P_l^m(\mu) &= \left[\frac{(l+m-1)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)} \right] P_{l-2}^m(\mu) + \\ &+ \left[\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)} + \frac{(l-m)(l+m)}{(2l+1)(2l-1)} \right] P_l^m(\mu) + \\ &+ \frac{(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)} P_{l+2}^m(\mu) \end{aligned} \quad (2.44)$$

Substituindo o termo 2.44 na equação 2.42, temos

$$\sum_{l=m}^{\infty} c_l \left[A - l(l+1) \right] P_l^m(\mu) - p^2 \left[\frac{(l+m-1)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)} \right] P_{l-2}^m(\mu) +$$

$$\begin{aligned}
& -p^2 \left[\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)} + \frac{(l-m)(l+m)}{(2l+1)(2l-1)} \right] P_l^m(\mu) + \\
& -p^2 \frac{(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)} P_{l+2}^m(\mu) = 0 \quad (2.45)
\end{aligned}$$

Agrupando os termos em função dos polinômios de Legendre,

$$\begin{aligned}
& \sum_{l=m}^{\infty} -p^2 \left[\frac{(l+m-1)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)} \right] c_l P_{l-2}^m(\mu) + \\
& \left[A - l(l+1) - p^2 \left(\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)} + \frac{(l-m)(l+m)}{(2l+1)(2l-1)} \right) \right] c_l P_l^m(\mu) + \\
& -p^2 \frac{(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)} c_l P_{l+2}^m(\mu) = 0 \quad (2.46)
\end{aligned}$$

Baixando os índices dos polinômios de Legendre de (2.46)

$$\begin{aligned}
& c_{l-2} \left\{ -p^2 \left[\frac{(l-m-1)(l-m)}{(2l-1)(2l-3)} \right] \right\} + \\
& + c_l \left\{ A - l(l+1) - p^2 \left[\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)} + \frac{(l-m)(l+m)}{(2l+1)(2l-1)} \right] \right\} + \\
& + c_{l+2} \left\{ -p^2 \frac{(l+m+2)(l+m+1)}{(2l+5)(2l+3)} \right\} = 0 \quad (2.47)
\end{aligned}$$

$$a_l c_{l-2} + b_l c_l + d_l c_{l+2} = 0 \quad (2.48)$$

A equação (2.48) é a relação de recorrência para os coeficientes c_l em função dos termos a_l , b_l e d_l :

$$a_l = -p^2 \left[\frac{(l-m-1)(l-m)}{(2l-1)(2l-3)} \right] \quad (2.49)$$

$$b_l = A - l(l+1) - p^2 \left[\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)} + \frac{(l-m)(l+m)}{(2l+1)(2l-1)} \right] \quad (2.50)$$

$$d_l = -p^2 \frac{(l+m+2)(l+m+1)}{(2l+5)(2l+3)}. \quad (2.51)$$

Os coeficientes da relação (2.48), são obtidos a partir da relação em fração

contínua da forma:

$$\begin{aligned}
 a_l c_{l-2} + b_l c_l + d_l c_{l+2} &= 0 \\
 b_l c_l + d_l c_{l+2} &= -a_l c_{l-2} \\
 c_l \left(b_l + \frac{d_l c_{l+2}}{c_l} \right) &= -a_l c_{l-2} \\
 c_l &= \frac{-a_l c_{l-2}}{\left(b_l + \frac{d_l c_{l+2}}{c_l} \right)}
 \end{aligned} \tag{2.52}$$

A relação em fração contínua (2.52) possui infinitamente muitas raízes que podem estar correlacionadas com as autofunções, possuindo 0, 1, 2, 3, ... nodos no intervalo $-1 \leq \mu \leq 1$. A obtenção dos coeficientes c_l , via fração contínua (2.52), ocorre por sucessivas aproximações, e no caso limite de l quando $l \rightarrow \infty$, o termo $\frac{c_{l+2}}{c_l} \rightarrow 0$, e $c_0 = 1$. Portanto a expansão (2.36) converge no intervalo $-1 \leq \mu \leq 1$ unicamente se m , A e p satisfazem a relação em fração contínua (2.52) e conseqüentemente os coeficientes c_l devem ser nulos ou mínimos para $l \rightarrow \infty$.

A relação de recorrência (2.48), da solução da parte angular, é um conjunto infinito de equações lineares homogêneas e para ter solução distinta da trivial, o determinante da matriz formada pelos coeficientes deve ser nulo. Observa-se na relação de recorrência que somente os termos em l que diferem por 2 estão relacionados, então, somente os termos pares ou ímpares são relevantes para determinado estado. Isso é devido ao número quântico l , reponsável pela paridade do orbital. Com isso, teremos duas matrizes, uma para l par e outra para l ímpar e ambos os determinantes dessas matrizes precisam ser zero para que a solução seja distinta da trivial.

Para l par:

$$\begin{bmatrix}
 b_0 & d_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 a_2 & b_2 & d_2 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 0 & a_4 & b_4 & d_4 & 0 & 0 & \dots \\
 0 & 0 & a_6 & b_6 & d_6 & 0 & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots & \vdots
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 c_0 \\
 c_2 \\
 c_4 \\
 c_6 \\
 c_8 \\
 \vdots
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 \vdots
 \end{bmatrix} \tag{2.53}$$

Para l ímpar:

$$\begin{bmatrix} b_1 & d_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ a_3 & b_3 & d_3 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a_5 & b_5 & d_5 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & a_7 & b_7 & d_7 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots & \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_3 \\ c_5 \\ c_7 \\ c_9 \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.54)$$

Portanto, podemos reescrever a equação (2.36), a solução da equação (2.33), para levar em conta de forma explícita nos cálculos o fator de paridade gerado por l .

$$M(\mu) = \sum_s^l c_s P_{m+s}^m(\mu), \quad (2.55)$$

onde o somatório se estende somente sobre valores pares ou ímpares de s .

O cálculo do determinante da matriz dos coeficientes (par ou ímpar) da relação de recorrência (2.48) gera uma função $f_1(A, \varepsilon, R)$, que depende de A , ε e R , que sozinha não possui solução nem analítica nem numérica, necessitando da solução da parte radial para formação de um sistema.

2.2.2 Função radial

Para resolver a equação radial (2.34) considera-se a solução na forma proposta por Jaffé (1934), isto é:

$$\Lambda(\lambda) = (\lambda^2 - 1)^{\frac{m}{2}} (\lambda + 1)^\sigma e^{(-p\lambda)} y(\zeta) \quad (2.56)$$

com

$$\sigma = \frac{R}{p} - m - 1 \quad (2.57)$$

e

$$\zeta = \frac{(\lambda - 1)}{(\lambda + 1)} \quad (2.58)$$

Essa é a modificação da expansão original proposta por Hylleraas (1931), em termos dos polinômios associados de Laguerre de argumento $(\lambda - 1)$, que é matematicamente mais satisfatória. Substituindo a solução (2.56) na equação 2.34, (e.g., Bates & Poots, 1953):

$$\zeta(1 - \zeta)^2 \frac{\partial^2 y}{\partial \zeta^2} + [-(m + 2\sigma - 1)\zeta^2 + 2(\sigma - 2p - 1)\zeta + m + 1] \frac{\partial y}{\partial \zeta} +$$

$$+[\sigma(\sigma + m)\zeta + \sigma(1 + 2p) + m(m + 1 + \sigma) + A - p^2]y = 0 \quad (2.59)$$

Expandindo $y(\zeta)$ em série de potência,

$$y(\zeta) = \sum_{t=0}^{\infty} g_t \zeta^t \quad (2.60)$$

e substituindo em 2.59, obtém-se a relação de recorrência

$$\alpha_t g_{t+1} - \beta_t g_t + \gamma_t g_{t-1} = 0 \quad (2.61)$$

com

$$\alpha_t = (t + 1)(t + m + 1) \quad (2.62)$$

$$\beta_t = 2t^2 + (4p - 2\sigma)t - A + p^2 - 2p\sigma - (m + 1)(m + \sigma) \quad (2.63)$$

$$\gamma_t = (t - 1 - \sigma)(t - 1 - \sigma - m) \quad (2.64)$$

Os coeficientes da série $\sum_{t=0}^{\infty} g_t \zeta^t$ são obtidos a partir de uma nova fração contínua da forma:

$$\begin{aligned} \alpha_t g_{t+1} - \beta_t g_t + \gamma_t g_{t-1} &= 0 \\ \alpha_t g_{t+1} - \beta_t g_t &= -\gamma_t g_{t-1} \\ g_t \left(-\beta_t + \frac{\alpha_t g_{t+1}}{g_t} \right) &= -\gamma_t g_{t-1} \\ g_t &= \frac{-\gamma_t g_{t-1}}{\left(-\beta_t + \frac{\alpha_t g_{t+1}}{g_t} \right)} \end{aligned} \quad (2.65)$$

A fração contínua (2.65) possui uma infinidade enumerável de raízes correspondendo as autofunções possuindo 0, 1, 2, 3, ... nodos no intervalo $1 \leq \lambda \leq \infty$. A partir da expressão (2.65) observa-se que $g_{-1} = 0$ e quando t tende ao valor extremo da expansão ($t \rightarrow \infty$) e portanto $\frac{g_{t+1}}{g_t} \rightarrow 0$.

A expressão $\gamma_t g_{t-1} - \beta_t g_t + \alpha_t g_{t+1} = 0$ da solução da parte radial também constitui um conjunto infinito de equações lineares homogêneas, que para ter solução distinta da trivial, requer que o determinante da matriz formada pelos coeficientes seja nulo.

$$\begin{bmatrix} -\beta_0 & \alpha_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \gamma_1 & -\beta_1 & \alpha_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \gamma_2 & -\beta_2 & \alpha_2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \gamma_3 & -\beta_3 & \alpha_3 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots & \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ g_3 \\ g_4 \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.66)$$

O cálculo do determinante da matriz dos coeficientes da relação de recorrência (2.61) gera a função $f_2(A, \varepsilon, R)$, que depende de A , ε e R , que juntamente com a função $f_1(A, \varepsilon, R)$, forma um sistema de equações não lineares que somente possui solução numérica. Dessa forma encontra-se os valores dos parâmetros A , ε e R .

2.2.3 Solução geral da parte eletrônica

A solução geral é obtida a partir das soluções da parte azimutal, angular e radial da equação diferencial (2.30) e possui a forma:

$$\Psi(\lambda, \mu, \phi) = N e^{(im\phi)} (\lambda^2 - 1)^{\frac{1}{2}m} (\lambda + 1)^\sigma e^{(-p\lambda)} \sum_s^l c_s P_{m+s}^m(\mu) \sum_{t=0}^{\infty} g_t \left(\frac{\lambda - 1}{\lambda + 1} \right)^t \quad (2.67)$$

onde N é a constante de normalização e é obtida a partir de:

$$\int_1^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} |\Psi(\lambda, \mu, \phi)|^2 dv = 1 \quad (2.68)$$

onde dv é o elemento de volume.

Analisando a solução geral, bem como as equações que a geraram, observa-se a dependência direta de ε com m^2 , o que origina uma dupla degenerescência para valores com $m \neq 0$. Desta forma existem dois estados possíveis com o mesmo valor de m^2 , com números quânticos dados por m e $-m$ e que podem ser duplicados se for levado em conta o spin eletrônico $+\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$. Há também a dependência com l , número quântico responsável pela paridade. Portando cada estado possui muitos autovalores que o distinguem dos demais, o que leva a um conjunto de terminologia dos mesmos. A terminologia dos orbitais moleculares (OM) de uma molécula diatômica homonuclear pode ser dada conforme a notação de átomos separados, ou notação de único átomo, ou ainda notação de simetria (Levine, 2004). A notação de átomos separados leva em consideração o estado do átomo de hidrogênio obtido através da dissociação da molécula para grandes valores de R . A notação de único

Tabela 2.1: Terminologia dos orbitais moleculares (estados eletrônicos) de uma molécula diatômica homonuclear

Átomos Separados	Único Átomo	Simetria
$\sigma_g 1s$	$1s\sigma_g$	$1\sigma_g$
$\sigma_u^* 1s$	$2p\sigma_u^*$	$1\sigma_u$
$\sigma_g 2s$	$2s\sigma_g$	$2\sigma_g$
$\sigma_u^* 2s$	$3p\sigma_u^*$	$2\sigma_u$
$\pi_u 2p$	$2p\pi_u$	$1\pi_u$
$\sigma_g 2p$	$3s\sigma_g$	$3\sigma_g$

Tabela 2.2: Representação de l .

l_{par}	letra	l_{impar}	letra
0	<i>s</i>	1	<i>p</i>
2	<i>d</i>	3	<i>f</i>
4	<i>g</i>	5	<i>h</i>
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

átomo, também chamado de átomo unido, leva em consideração o átomo formado quando a distância internuclear tende à zero. A notação de simetria leva em consideração a simetria do estado molecular. A tabela 2.1 apresenta as três notações para alguns orbitais moleculares de moléculas diatômicas, onde cada letra grega representa o valor absoluto de m , ou seja:

$ m $	0	1	2	3	...
letra	σ	π	δ	ϕ	...

As letras *s*, *p*, *d*, *f*, *g*, ... representam os valores de l , responsável pela paridade do orbital da molécula de H_2^+ , conforme a tabela (2.2).

Os subscritos *g* e *u*, designam a paridade da molécula. Se forem pares ou ímpares com respeito à simetria de inversão da molécula são denotados pelos símbolos *g* (*gerade*) e *u* (*ungerade*)¹, respectivamente. Para que esta classificação seja válida, é necessário que o sistema contenha um centro de inversão. Por este motivo a paridade somente se aplica a moléculas diatômicas homonucleares. Então, os estados moleculares relacionados aos estados atômicos *s*, *d*, *g*, ... possuem simetria *g*, enquanto que os relacionados aos estados *p*, *f*, *h*, ... possuem simetria *u*. O símbolo * é usado para representar estado anti-ligante ou a ausência dele para representar estado ligante. Se existe um estado ligante, existe um valor da distância internuclear R para o qual a energia eletrônica é mínima e a configuração molecular permanece estável, também chamado de orbital ligante. Quando a energia eletrônica não atinge um mínimo para

¹*Gerade* e *ungerade* são palavras alemãs que significam par e ímpar, respectivamente.

quaisquer valores de R , resultando na dissociação da molécula, chama-se de orbital anti-ligante.

2.2.4 Diagrama de Correlação

O problema consiste em construir um diagrama de correlação que conecta o átomo unido ($R=0$) e átomos separados ($R = \infty$) com os níveis de energia dos orbitais moleculares (OM). As propriedades da função de onda dependem da separabilidade da equação de Schrödinger em coordenadas elípticas, pois elas podem ser especificadas pelo número de nodos em cada coordenada, os números quânticos nodais n_1 , n_2 e n_3 . Morse & Stueckelberg (1929) descreveram em seu artigo como os três números quânticos surgiram no problema de dois centros: n_1 , n_2 e n_3 são os números de superfícies nodais correspondentes às raízes da solução (equação 2.67) da equação de Schrödinger (equação 2.30) em coordenadas elípticas (λ, μ, ϕ) , onde $n_1 = n_\lambda$, $n_2 = n_\mu$ e $n_3 = n_\phi$. Devido ao fato que o número de superfícies nodais é conservado para todas as distâncias internucleares, esse números quânticos são "bons", e o diagrama de correlação resultante é denominado diabático, em vez de adiabático, que possui regras diferentes. Os números quânticos nodais estão relacionados aos números quânticos atômicos da seguinte forma:

$$n_1 = n_\lambda = n - \ell - 1 \quad (2.69)$$

$$n_2 = n_\mu = \ell - |m| \quad (2.70)$$

$$n_3 = n_\phi = |m| \quad (2.71)$$

no limite do átomo unido (Morse & Stueckelberg, 1929).

No limite de átomos separados os números quânticos são usualmente dados por n'_1 , n'_2 e m' , que satisfazem a equação:

$$n_s = n'_1 + n'_2 + |m'| + 1 \quad (2.72)$$

Como $n'_1 = n_\lambda$, obtemos:

$$n_s = n_\lambda + n'_2 + |m'| + 1 \quad (2.73)$$

onde

$$n_\mu = \left\{ \begin{array}{ll} 2n'_2, & \text{gerade} \\ 2n'_2 + 1, & \text{ungerade} \end{array} \right\} \quad (2.74)$$

e

$$n_\phi = |m'| \tag{2.75}$$

A forma mais geral de construir o diagrama de correlação para o H_2^+ consiste em:

$$n_s = \left\{ \begin{array}{ll} \left[n - \frac{(\ell - |m|)}{2} \right], & \text{para } (\ell - |m|) \text{ par} \\ \left[n - \frac{(\ell - |m| + 1)}{2} \right], & \text{para } (\ell - |m| + 1) \text{ ímpar} \end{array} \right\} \tag{2.76}$$

A figura (2.3) mostra os diagramas de correlação para os estados $n_s = 1$, $n_s = 2$ e $n_s = 3$ do H_2^+ .

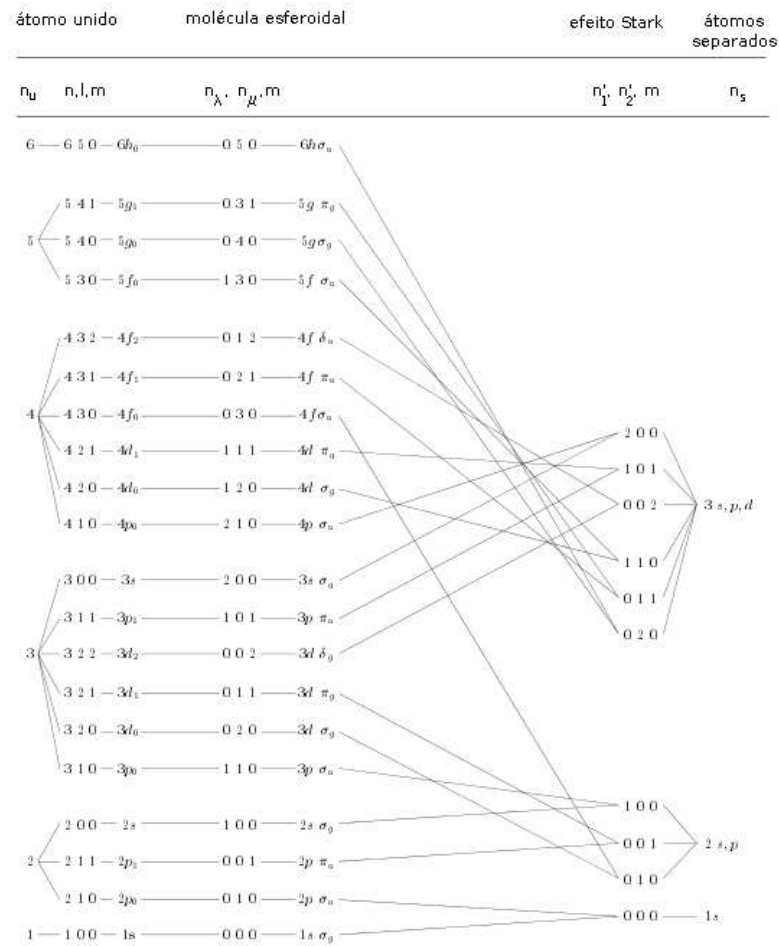


Figura 2.3: Diagrama de correlação em detalhe para os estados $n_s = 1$, $n_s = 2$ e $n_s = 3$ do H_2^+ [Adaptado de Allard et al. (1998b)]

2.2.5 Análise numérica

Cada raiz de qualquer uma das relações de recorrência, (2.48) ou (2.61), especifica uma relação funcional entre A e p . A solução comum de um par de tais raízes, uma de cada relação, resulta nos autovalores de A e p para um certo estado quântico (Wallis & Hulburt, 1954). Portanto, o método numérico consiste em resolver o sistema de equações não lineares $f_1(A, \varepsilon, R)$ e $f_2(A, \varepsilon, R)$ a partir do método de Newton-Raphson para sistemas de equações não lineares, implementado em linguagem FORTRAN no nosso caso.

A estrutura básica e sequência do nosso programa implementado em FORTRAN é a seguinte:

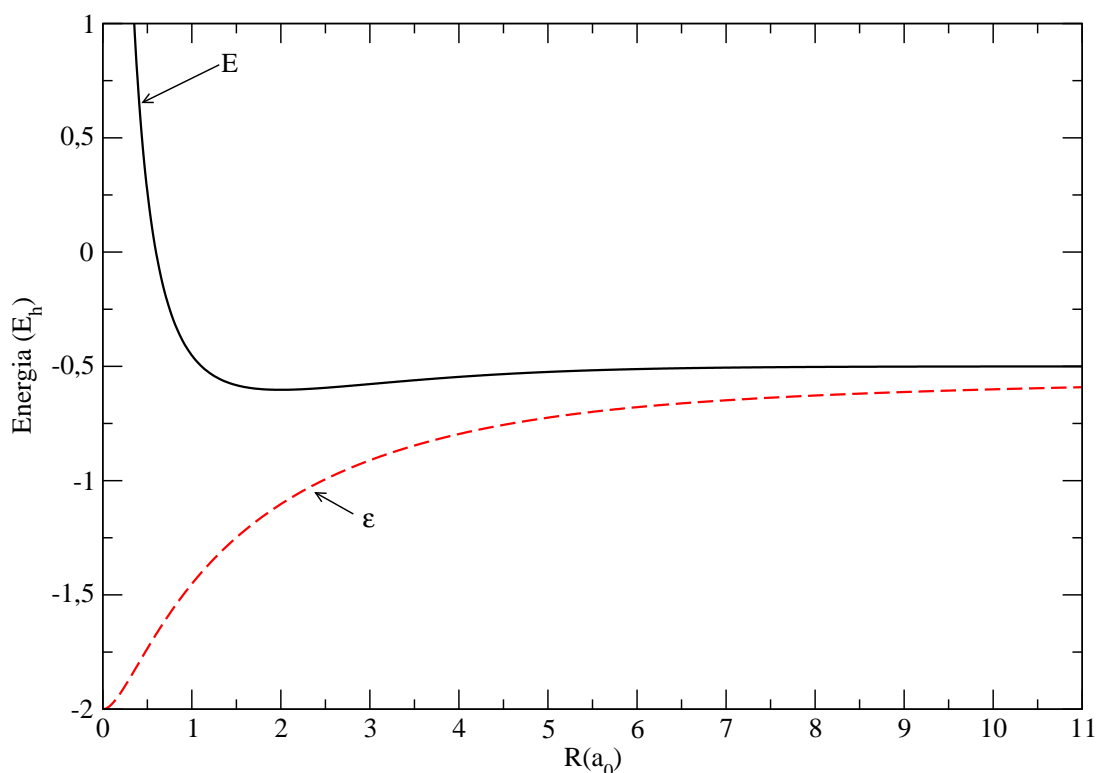
1. Inicialização dos valores de n, l, m, ε, A , e R ;
2. Incremento da distância internuclear R ;
3. Gerar as matrizes e efetuar o cálculo dos determinantes obtendo as funções $f_1(A, \varepsilon, R)$ e $f_2(A, \varepsilon, R)$;
4. Resolução do sistema de equações não lineares via método de Newton-Raphson.

Os valores iniciais dos estados moleculares do H_2^+ são obtidos por aproximação em função de R : Quando $R \rightarrow 0$ a molécula comporta-se como um átomo hidrogenoide de número atômico $Z = 2$ com energia eletrônica dada por $\varepsilon = -\frac{2}{n^2}$ e $A = l(l+1)$. A outra aproximação é quando $R \rightarrow \infty$, e nesse caso a molécula comporta-se como um átomo hidrogenoide com número atômico $Z = 1$ e energia eletrônica dada por $\varepsilon = -\frac{1}{2n^2}$. Para uma varredura completa de todas as possíveis linhas satélites, precisão nos cálculos e convergência da solução, o incremento em R adotado em nosso cálculo foi de 0,01 u.a., a partir de um valor inicial de $R = 0,01a_0$, onde a_0 é o raio de Bohr. As matrizes criadas possuem ordem 25 devido ao critério de convergência do programa (10^{-21}) que adotamos. Os valores obtidos para a energia potencial do H_2^+ , possuem discrepâncias somente na última casa decimal (10^{-13}) quando comparados aos valores obtidos por Madsen & Peek (1971); nosso resultado deve ser mais preciso. A tabela (2.3) mostra alguns valores do potencial E , ($E = \varepsilon + \frac{1}{R}$), em função de R , publicados por Madsen & Peek (1971) comparados com os resultados obtidos nesse trabalho para o estado fundamental do H_2^+ .

A figura (2.4) mostra as curvas de energia eletrônica com (E) e sem (ε) repulsão nuclear do estado fundamental ($1s\sigma_g$) do H_2^+ a partir dos dados obtidos nesse trabalho. Em $R \rightarrow \infty$, a repulsão nuclear é 0 e $E = \varepsilon = -\frac{1}{2}E_h$.

Tabela 2.3: Energia potencial para o estado fundamental do H_2^+ .

R(au)	E_{Marcio}	$E_{Madsen1971}$
1,0	-0,451786313378449655431	-0,4517863133781
2,0	-0,602634214494942477280	-0,6026342144949
11,0	-0,500299229370435249997	-0,5002992293704
20,0	-0,500014259330904820011	-0,5000142593309
40,0	-0,500000881084767589968	-0,5000008810848
90,0	-0,500000034308793139814	-0,5000000343088
111,0	-0,500000014825746297298	-

Figura 2.4: Energia eletrônica com (E) e sem (ε) repulsão nuclear do estado fundamental ($1s\sigma_g$) do H_2^+ a partir dos dados obtidos.

A curva E tem um mínimo em $R = 2,00a_0 = 1,06 \text{ \AA}$, indicando que o estado eletrônico fundamental do H_2^+ é um estado ligante estável. O valor obtido para ε a $2,00a_0$ foi de $-1,102634214494942144213 E_h$ e somando o termo devido a repulsão nuclear $\frac{1}{R}$, obtém-se $E = -0,602634214494942477280 E_h$, comparável com $-\frac{1}{2}E_h$ para $R \rightarrow \infty$. Conseqüentemente, a energia de dissociação do estado fundamental é $D=0,10263421 E_h = 2,79282056 eV = 64,40395570 \text{ kcal/mol}$, ou seja, 17,02% da energia total (E) na separação de equilíbrio.

As figuras (2.5) e (2.6) mostram a energia eletrônica e a energia potencial re-

spectivamente dos estados com $n_s = 1$ do H_2^+ .

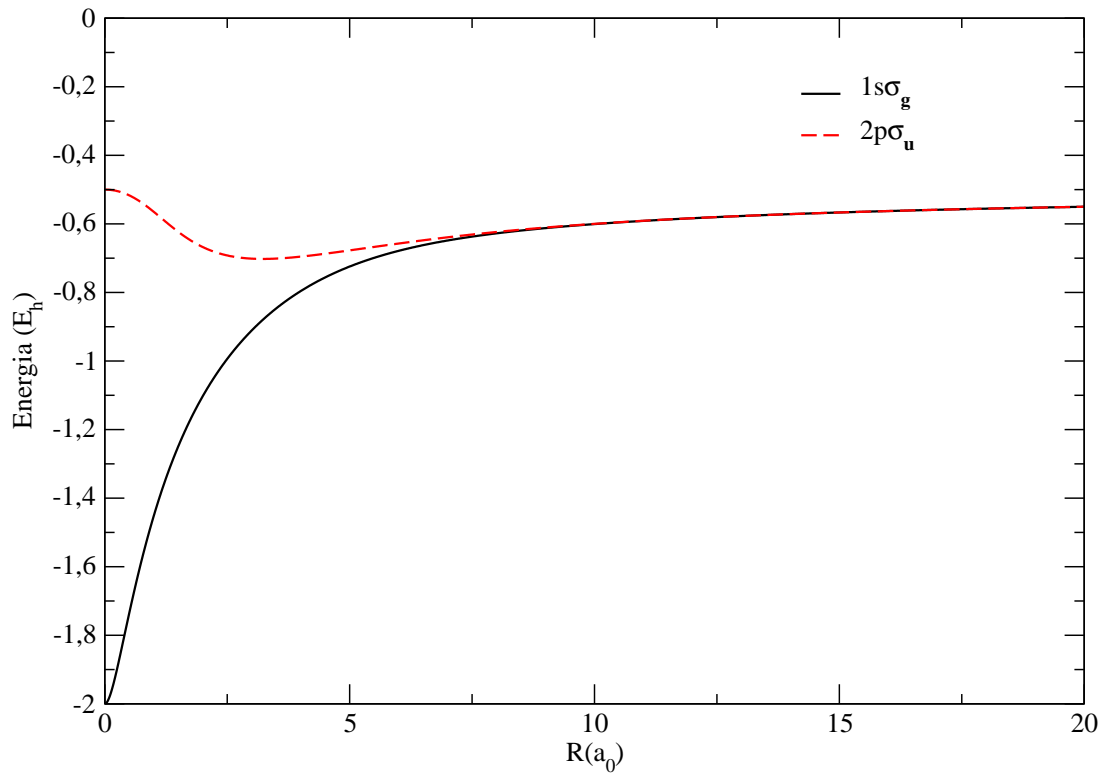
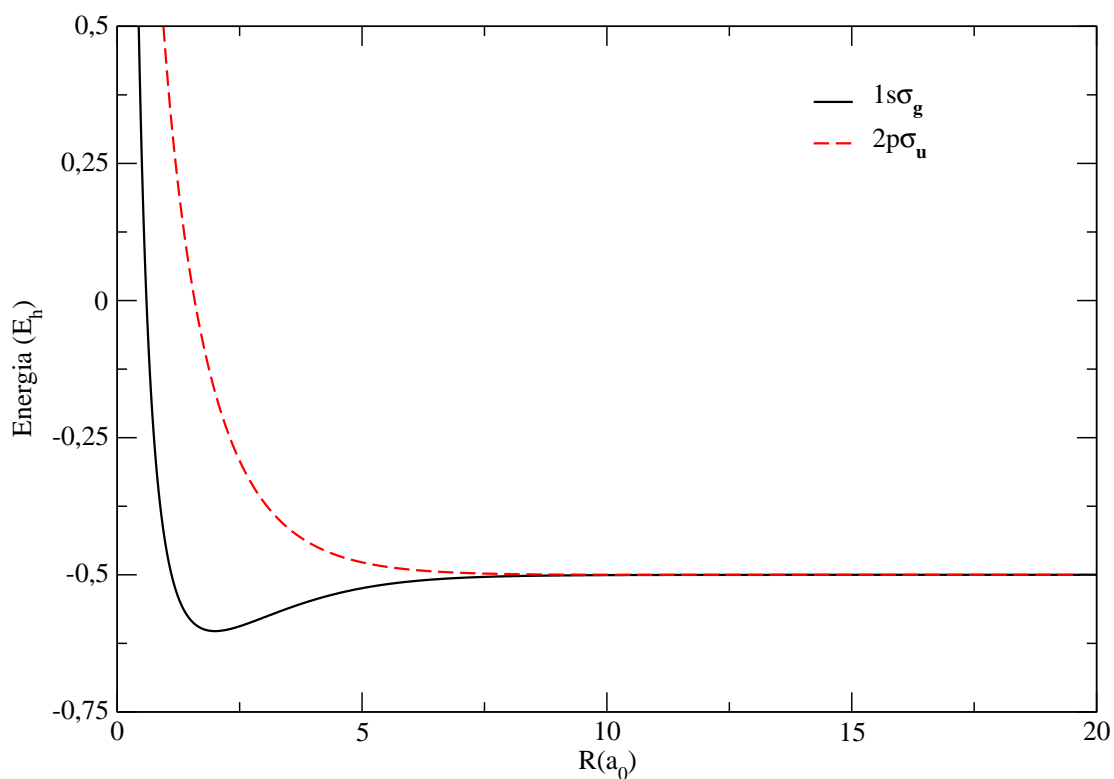
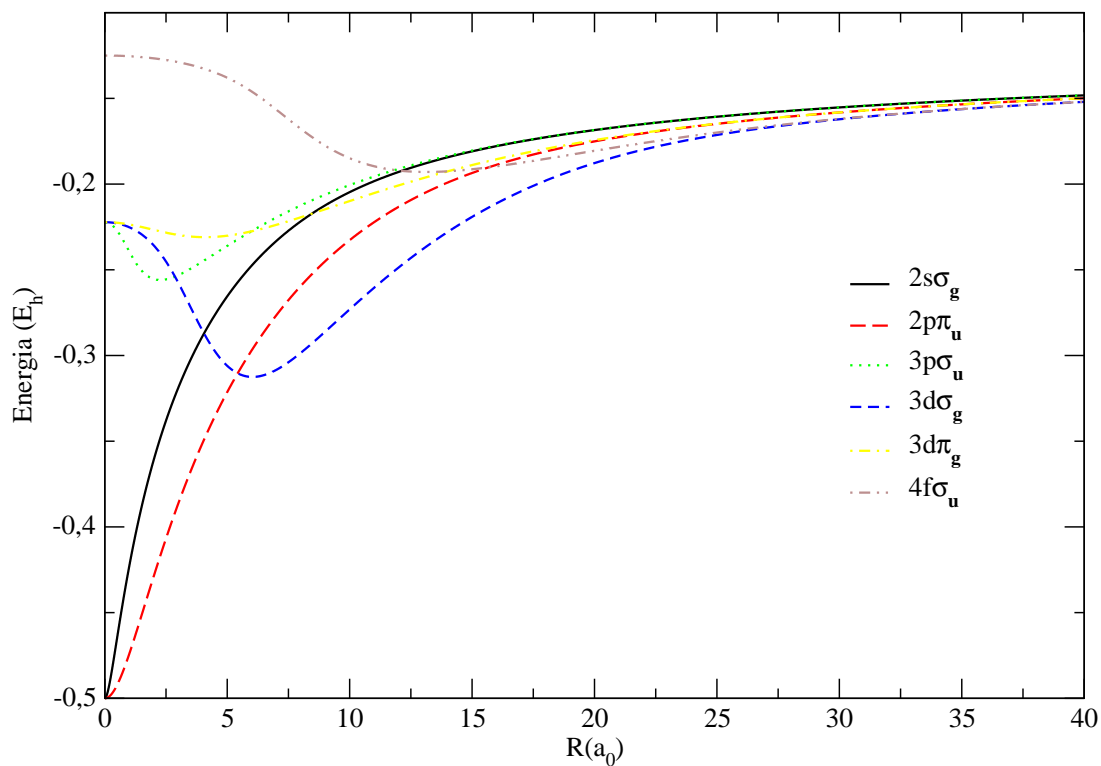
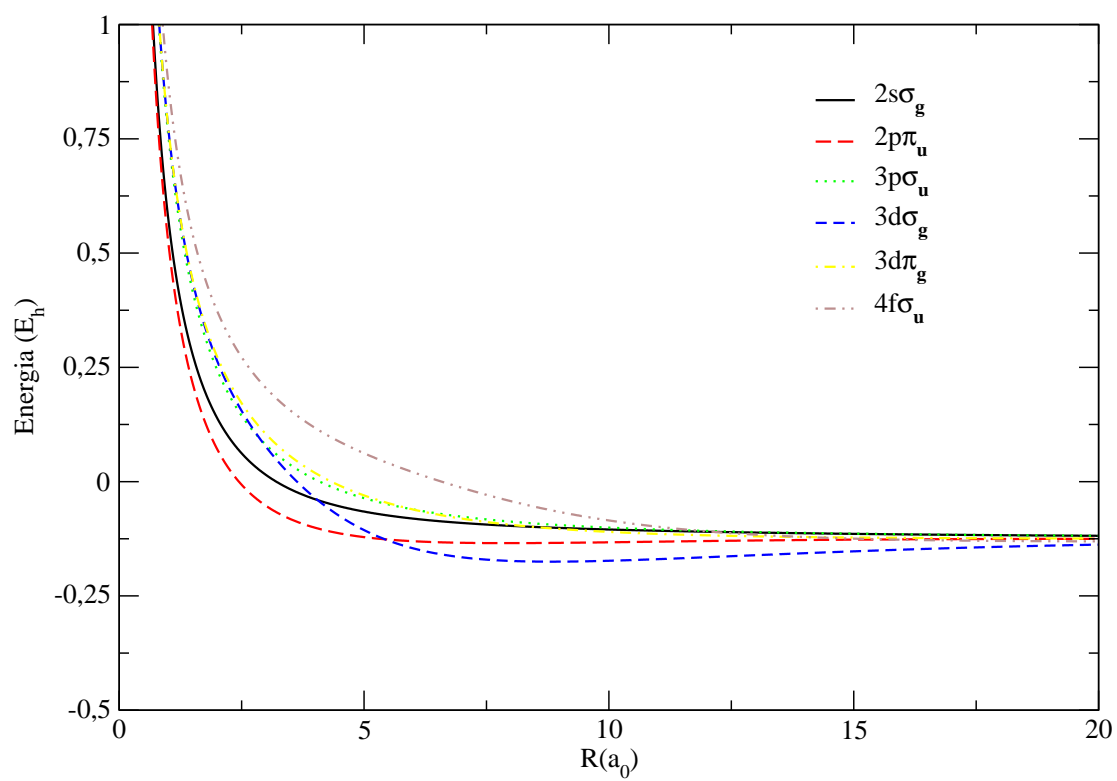


Figura 2.5: Energia eletrônica (ε) para os estados com $n_s = 1$ do H_2^+ .

As figuras (2.7) e (2.8) mostram a energia eletrônica e a energia potencial respectivamente dos estados com $n_s = 2$ do H_2^+ .

Figura 2.6: Energia potencial (E) para os estados com $n_s = 1$ do H_2^+ .Figura 2.7: Energia eletrônica (ϵ) para os estados com $n_s = 2$ do H_2^+ .

Figura 2.8: Energia potencial (E) para os estados com $n_s = 2$ do H_2^+ .

Capítulo 3

Dipolo

Os momentos de dipolo elétrico produzem alterações na intensidade dos satélites nas asas distantes dos perfis de linha (Allard et al., 1999). Os perfis de linha mostram que a amplitude dos satélites depende da intensidade do momento de dipolo elétrico na distância internuclear onde o satélite é formado. Como consequência, a variação do momento de dipolo elétrico deve ser levada em conta para se obter resultados confiáveis, pois são usados como diagnósticos de parâmetros estelares e de plasmas, portanto, não podem ser negligenciados.

3.1 Momento de dipolo elétrico do íon H_2^+

O momento de dipolo elétrico para transições entre estados eletrônicos ligados do íon molecular H_2^+ para uma dada separação internuclear pode ser obtido analiticamente, usando as soluções de Hylleraas (1931) da função de onda.

3.2 Funções de onda do H_2^+

Escrevendo a equação de Schrödinger para o íon molecular H_2^+ em termos de coordenadas elípticas confocais (λ, μ, ϕ) , obtém-se a equação (2.30), que é completamente separável e cuja solução pode ser escrita como um produto de três funções:

$$\Psi(\lambda, \mu, \phi) = \Lambda(\lambda)M(\mu)\Phi(\phi) \quad (3.1)$$

Substituindo a solução (3.1) na equação de Schrödinger escrita em coordenadas elípticas (2.30), obtivemos as equações (2.32, 2.33 e 2.34).

A solução da equação 2.32, parte azimutal, é da forma:

$$\Phi(\phi) = e^{(\pm im\phi)}, \quad (3.2)$$

A solução para a equação 2.33, parte angular, é dada por Hylleraas (1931),

$$M(\mu) = \sum_s^l c_s P_{m+s}^m(\mu), \quad (3.3)$$

como uma expansão em polinômios associados de Legendre $P_{m+s}^m(\mu)$, onde o somatório somente se estende sobre os valores de s pares ou ímpares, dependendo da paridade do estado e onde os coeficientes c_s são obtidos via frações contínuas, conforme equação (2.52).

A parte radial será resolvida conforme Hylleraas (1931) e não mais de acordo com Jaffé (1934), como foi feito para obtenção da energia eletrônica ε . Portanto a solução da equação (2.34) é dada por:

$$\Lambda(\lambda) = (\lambda^2 - 1)^{m/2} e^{-\xi/2} y(\xi) \quad (3.4)$$

$$\xi = 2p(\lambda - 1) \quad (3.5)$$

$$y(\xi) = \sum_{t=0}^{\infty} \frac{g_t}{(m+t)!} L_{m+t}^m(\xi) \quad (3.6)$$

onde $L_{m+t}^m(\xi)$ são os polinômios de Laguerre associados e, devido às suas propriedades, são mais adequados nos cálculos dos momentos de dipolo elétrico. Os coeficientes g_t são obtidos a partir de uma nova relação de recorrência gerada pelo uso da solução de Hylleraas (1931) na parte radial,

$$\alpha_t g_{t+1} - \beta_t g_t + \gamma_t g_{t-1} = 0 \quad (3.7)$$

$$\alpha_t = (t - \sigma - m)(t + m + 1) \quad (3.8)$$

$$\beta_t = \{2t^2 + 2t(2p - \sigma) - [A - p^2 + 2p\sigma + (m + 1)(m + \sigma)]\} \quad (3.9)$$

$$\gamma_t = t(t - 1 - \sigma) \quad (3.10)$$

3.3 Componentes do momento de dipolo elétrico

Escolhendo, conforme a figura (2.1), a origem do sistema de coordenadas no centro do segmento de reta que une os dois prótons e tomando essa reta como eixo z , os elementos da matriz a ser calculada dos componentes do momento de dipolo elétrico de uma transição entre os estados i e j , D_{ij} , podem ser escritos como:

$$D_{ij} = e \langle i | \mathbf{r} | j \rangle = e Q_{i,j}(\mathbf{r}), \quad (3.11)$$

onde e representa a carga do elétron, \mathbf{r} é o vetor posição do elétron parametrizado em função de R (distância internuclear) e $Q_{i,j}(\mathbf{r})$ os elementos da matriz. Os elementos da matriz $Q_{i,j}(\mathbf{r})$ dos vários componentes do momento de dipolo elétrico, de acordo com Ramaker & Peek (1973), são especificados por:

$$Q_{i,j}(\mathbf{r}) = \int \Psi_i^*(\lambda, \mu, \phi) \mathbf{r} \Psi_j(\lambda, \mu, \phi) d\tau \quad (3.12)$$

onde Ψ_i e Ψ_j são as funções eletrônicas na aproximação de Born-Oppenheimer dos estados i e j , e $d\tau$ é o elemento de volume. $Q_{i,j}(\mathbf{r})$ é obtido inserindo as equações (3.2), (3.3) e (3.4) na equação (3.12). Portanto os elementos da matriz $Q_{i,j}(\mathbf{r})$ podem ser escritos, de acordo com Herman & Wallis (1956), como função das coordenadas x , y and z como:

$$Q_{i,j}(x) = N_i N_j \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \int_1^\infty \Psi_i^*(\lambda, \mu, \phi)(x) \Psi_j(\lambda, \mu, \phi) \frac{R^3}{8} (\lambda^2 - \mu^2) d\lambda d\mu d\phi \quad (3.13)$$

$$Q_{i,j}(x) = N_i N_j \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \int_1^\infty \Psi_i^*(\lambda, \mu, \phi) \Psi_j(\lambda, \mu, \phi) \left[\frac{r}{2} \cos \phi (\lambda^2 - 1)^{\frac{1}{2}} (1 - \mu^2)^{\frac{1}{2}} \right] \times \\ \times \frac{R^3}{8} (\lambda^2 - \mu^2) d\lambda d\mu d\phi \quad (3.14)$$

$$Q_{i,j}(x) = N_i N_j \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \int_1^\infty \Psi_i^*(\lambda, \mu, \phi) \Psi_j(\lambda, \mu, \phi) \frac{R^4}{16} \cos \phi \times \\ \times \left[(\lambda^2 - 1)^{\frac{1}{2}} (1 - \mu^2)^{\frac{1}{2}} \lambda^2 - (\lambda^2 - 1)^{\frac{1}{2}} (1 - \mu^2)^{\frac{1}{2}} \mu^2 \right] d\lambda d\mu d\phi \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned}
Q_{i,j}(x) = N_i N_j \frac{R^4}{16} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \int_1^\infty \Lambda_i^*(\lambda) M_i^*(\mu) \Phi_i^*(\phi) \Lambda_j(\lambda) M_j(\mu) \Phi_j(\phi) \cos \phi \times \\
\times \left[(\lambda^2 - 1)^{\frac{1}{2}} (1 - \mu^2)^{\frac{1}{2}} \lambda^2 - (\lambda^2 - 1)^{\frac{1}{2}} (1 - \mu^2)^{\frac{1}{2}} \mu^2 \right] d\lambda d\mu d\phi
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Agrupando os termos, obtemos para $Q_{i,j}(x)$:

$$\begin{aligned}
Q_{i,j}(x) = N_i N_j \left(\frac{R}{2} \right)^4 \int_0^{2\pi} \Phi_i^*(\phi) \cos(\phi) \Phi_j(\phi) d\phi \times \\
\times \left[\Omega_{i,j} \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 2 \right) - \Omega_{i,j} \left(\frac{1}{2}, 2, \frac{1}{2}, 0 \right) \right]
\end{aligned} \tag{3.17}$$

analogamente para $Q_{i,j}(y)$,

$$\begin{aligned}
Q_{i,j}(y) = N_i N_j \left(\frac{R}{2} \right)^4 \int_0^{2\pi} \Phi_i^*(\phi) \text{sen}(\phi) \Phi_j(\phi) d\phi \times \\
\times \left[\Omega_{i,j} \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 2 \right) - \Omega_{i,j} \left(\frac{1}{2}, 2, \frac{1}{2}, 0 \right) \right]
\end{aligned} \tag{3.18}$$

e para $Q_{i,j}(z)$,

$$\begin{aligned}
Q_{i,j}(z) = N_i N_j \left(\frac{R}{2} \right)^4 \int_0^{2\pi} \Phi_i^*(\phi) \Phi_j(\phi) d\phi \times \\
\times [\Omega_{i,j}(0, 1, 0, 3) - \Omega_{i,j}(0, 3, 0, 1)]
\end{aligned} \tag{3.19}$$

onde $\Omega_{i,j}(a, b, c, d)$ é definido por:

$$\begin{aligned}
\Omega_{i,j}(a, b, c, d) = \int_{-1}^1 M_i^*(\mu) (1 - \mu^2)^a \mu^b M_j(\mu) d\mu \times \\
\times \int_1^\infty \Lambda_i^*(\lambda) (\lambda^2 - 1)^c \lambda^d \Lambda_j(\lambda) d\lambda
\end{aligned} \tag{3.20}$$

As constantes de normalização podem ser calculadas como:

$$N_i^{-2} = \left(\frac{R}{2} \right)^3 [\Omega_{i,i}(0, 0, 0, 2) - \Omega_{i,i}(0, 2, 0, 0)] \times \int \Phi_i^*(\phi) \Phi_i(\phi) d\phi \tag{3.21}$$

$$N_j^{-2} = \left(\frac{R}{2}\right)^3 [\Omega_{j,j}(0,0,0,2) - \Omega_{j,j}(0,2,0,0)] \times \int \Phi_j^*(\phi)\Phi_j(\phi)d\phi \quad (3.22)$$

Para a solução completa dos valores de $Q_{i,j}(\mathbf{r})$ faz-se necessário calcular as integrais que compõem as expressões para $Q_{i,j}(x)$, $Q_{i,j}(y)$ e $Q_{i,j}(z)$ de cada transição (i, j) . Podemos classificar as integrais em três tipos, a saber, as que dependem de ϕ , as que dependem de μ e as que possuem dependência em λ . No que segue trataremos dos três tipos e suas respectivas soluções.

As integrais,

$$\int_0^{2\pi} \Phi_i^*(\phi) \cos(\phi)\Phi_j(\phi)d\phi$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi_i^*(\phi) \text{sen}(\phi)\Phi_j(\phi)d\phi$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi_i^*(\phi)\Phi_j(\phi)d\phi$$

que dependem de ϕ e cujos valores são diferentes de zero ao substituir as funções $\Phi(\phi)$ por $e^{im\phi}$ são:

$$\int_0^{2\pi} \text{sen}(m\phi)\text{sen}(m'\phi)d\phi = \left\{ \begin{array}{ll} \pi, & \text{para } m' = m = 1, 2, 3, \dots \\ 0, & \text{para os demais casos} \end{array} \right\} \quad (3.23)$$

$$\int_0^{2\pi} \cos(m\phi) \cos(m'\phi)d\phi = \left\{ \begin{array}{ll} \pi, & \text{para } m' = m = 1, 2, 3, \dots \\ 2\pi, & \text{para } m' = m = 0 \\ 0, & \text{para os demais casos} \end{array} \right\} \quad (3.24)$$

$$\int_0^{2\pi} \text{sen}(m\phi)\text{sen}(m'\phi) \cos \phi d\phi = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\pi}{2}, & \text{para } m' = m + 1, m \neq 0 \\ 0, & \text{para os demais casos} \end{array} \right\} \quad (3.25)$$

$$\int_0^{2\pi} \cos(m\phi) \cos(m'\phi) \cos\phi d\phi = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, & \text{para } m' = m + 1, m \neq 0 \\ \pi, & \text{para } m' = m + 1, m = 0 \\ 0, & \text{para os demais casos} \end{cases} \quad (3.26)$$

$$\int_0^{2\pi} \text{sen}(m\phi) \cos(m'\phi) \text{sen}\phi d\phi = \begin{cases} -\frac{\pi}{2}, & \text{para } m' = m + 1, m \neq 0 \\ 0, & \text{para os demais casos} \end{cases} \quad (3.27)$$

$$\int_0^{2\pi} \cos(m\phi) \text{sen}(m'\phi) \text{sen}\phi d\phi = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, & \text{para } m' = m + 1, m \neq 0 \\ \pi, & \text{para } m' = m + 1, m = 0 \\ 0, & \text{para os demais casos} \end{cases} \quad (3.28)$$

As integrais dependentes de (μ) são:

$$\int_{-1}^1 M_i^*(\mu)(1 - \mu^2)^a \mu^b M_j(\mu) d\mu = \Delta$$

cuja solução depende dos estados (i, j) e dos valores de (a, b) , da seguinte forma:

Para $i = j$ e $a = b = 0$:

$$\Delta = \sum_s' \left[\frac{2(2m + s)!}{(2m + 2s + 1)s!} \right] c_{s,i}^2$$

Para $i = j$, $a = 0$ e $b = 2$:

$$\Delta = \sum_s' \left[\frac{2(2m + s)!}{(2m + 2s + 1)s!} \right] c_{s,i} (c_{s-2,i} a_{2,m,s-2} + c_{s,i} a'_{2,m,s} + c_{s+2,i} a''_{2,m,s+2})$$

Observando as soluções das integrais dependentes de ϕ , equações 3.23 a 3.28, somente os valores em que $m' = m$ e $m' = m + 1$ são não nulos. Os estados i e j são escolhidos de tal maneira que $m' \geq m$.

Para o caso em que $m' = m + 1$,

com $i \neq j$, $a = \frac{1}{2}$ e $b = 0$:

$$\Delta = \sum_s' \left[\frac{2(2m + s)!}{(2m + 2s + 1)s!} \right] c_{s,i} (b_{m,s} c_{s,j} - b'_{m,s-2} c_{s-2,j})$$

e com $i \neq j$, $a = \frac{1}{2}$ e $b = 2$:

$$\Delta = \sum_s' \left[\frac{2(2m+s)!}{(2m+2s+1)s!} \right] c_{s,i} \left[-a_{2,m,s-2} b'_{m,s-4} c_{s-4,j} + (a_{2,m,s-2} b_{m,s-2} - a'_{2,m,s} b'_{m,s-2}) c_{s-2,j} \right. \\ \left. + (a'_{2,m,s} b_{m,s} - a''_{2,m,s+2} b'_{m,s}) c_{s,j} + (a''_{2,m,s+2} b_{m,s+2} c_{s+2,j}) \right]$$

Para o caso em que $m' = m$, com $i \neq j$, $a = 0$ e $b = 1$:

$$\Delta = \sum_s' \left[\frac{2(2m+s)!}{(2m+2s+1)s!} \right] c_{s,i} (a_{1,m,s-1} c_{s-1,j} + a'_{1,m,s+1} c_{s+1,j})$$

e com $i \neq j$, $a = 0$ e $b = 3$:

$$\Delta = \sum_s' \left[\frac{2(2m+s)!}{(2m+2s+1)s!} \right] c_{s,i} (a_{3,m,s-3} c_{s-3,j} + a'_{3,m,s-1} c_{s-1,j} + a''_{3,m,s+1} c_{s+1,j} + a'''_{3,m,s+3} c_{s+3,j})$$

Os termos $a_{1 \rightarrow 3,m,s}$ e $b_{m,s}$ são os coeficientes das relações de recorrência dos polinômios associados de Legendre (Abramowitz & Stegun (1972), Arfken & Weber (1995)):

$$\mu P_{m+s}^m(\mu) = a_{1,m,s} P_{m+s+1}^m(\mu) + a'_{1,m,s} P_{m+s-1}^m(\mu),$$

$$\mu^2 P_{m+s}^m(\mu) = a_{2,m,s} P_{m+s+2}^m(\mu) + a'_{2,m,s} P_{m+s}^m(\mu) + a''_{2,m,s} P_{m+s-2}^m(\mu),$$

$$\mu^3 P_{m+s}^m(\mu) = a_{3,m,s} P_{m+s+3}^m(\mu) + a'_{3,m,s} P_{m+s+1}^m(\mu) + a''_{3,m,s} P_{m+s-1}^m(\mu) + a'''_{3,m,s} P_{m+s-3}^m(\mu),$$

$$(1 - \mu^2)^{\frac{1}{2}} P_{m+1+s}^{m+1}(\mu) = b_{m,s} P_{m+s}^m(\mu) - b'_{m,s} P_{m+2+s}^m(\mu),$$

e são dados por:

$$a_{1,m,s} = \frac{(s+1)}{(2m+2s+1)},$$

$$a'_{1,m,s} = \frac{(2m+s)}{(2m+2s+1)},$$

$$\begin{aligned}
a_{2,m,s} &= \frac{(s+2)}{(2m+2s+3)} a_{1,m,s}, \\
a'_{2,m,s} &= \frac{(2m+s+1)}{(2m+2s+3)} a_{1,m,s} + \frac{(s)}{(2m+2s-1)} a'_{1,m,s}, \\
a''_{2,m,s} &= \frac{(2m+s-1)}{(2m+2s-1)} a'_{1,m,s}, \\
a_{3,m,s} &= \frac{(s+3)}{(2m+2s+5)} a_{2,m,s}, \\
a'_{3,m,s} &= \frac{(2m+s+2)}{(2m+2s+5)} a_{2,m,s} + \frac{(s+1)}{(2m+2s+1)} a'_{2,m,s}, \\
a''_{3,m,s} &= \frac{(2m+s)}{(2m+2s+1)} a'_{2,m,s} + \frac{(s-1)}{(2m+2s-3)} a''_{2,m,s}, \\
a'''_{3,m,s} &= \frac{|2m+s-2|}{(2m+2s-3)} a''_{2,m,s}, \\
b_{m,s} &= \frac{(2m+s+1)(2m+s+2)}{(2m+2s+3)}, \\
b'_{m,s} &= \frac{(s+1)(s+2)}{(2m+2s+3)}.
\end{aligned}$$

As integrais dependentes de λ são:

$$\int_1^\infty \Lambda_i^*(\lambda)(\lambda^2 - 1)^c \lambda^d \Lambda_j(\lambda) d\lambda = \Xi$$

onde a solução depende dos estados (i, j) e dos valores de (a, b) , da seguinte forma:

Para $i = j$ e $a = b = 0$:

$$\Xi = \sum_{t,t'}^\infty g_{t,i} g_{t',i} \sum_{v=0}^m \binom{m}{v} 2^{m-v} I_{t,t'}^{m,m}(v+m, p_i, p_j)$$

Para $i = j$, $a = 0$ e $b = 2$:

$$\begin{aligned}
\Xi &= \sum_{t,t'}^\infty g_{t,i} g_{t',i} \sum_{v=0}^m \binom{m}{v} 2^{m-v} \times \\
&[I_{t,t'}^{m,m}(v+m+2, p_i, p_j) + 2I_{t,t'}^{m,m}(v+m+1, p_i, p_j) + I_{t,t'}^{m,m}(v+m, p_i, p_j)]
\end{aligned}$$

Para $i \neq j$, $a = \frac{1}{2}$ e $b = 2$:

$$\Xi = - \sum_{t,t'}^{\infty} g_{t,i} g_{t',i} \sum_{v=0}^{m+1} \binom{m+1}{v} 2^{m-v+1} \times \\ \times [I_{t,t'}^{m,m+1}(v+m+3, p_i, p_j) + 2I_{t,t'}^{m,m+1}(v+m+2, p_i, p_j) + I_{t,t'}^{m,m+1}(v+m+1, p_i, p_j)]$$

Para $i \neq j$, $a = \frac{1}{2}$ e $b = 0$:

$$\Xi = - \sum_{t,t'}^{\infty} g_{t,i} g_{t',i} \sum_{v=0}^{m+1} \binom{m+1}{v} 2^{m-v+1} I_{t,t'}^{m,m+1}(v+m+1, p_i, p_j)$$

Para $i \neq j$, $a = 0$ e $b = 3$:

$$\Xi = \sum_{t,t'}^{\infty} g_{t,i} g_{t',i} \sum_{v=0}^m \binom{m}{v} 2^{m-v} \times \\ \times [I_{t,t'}^{m,m}(v+m+3, p_i, p_j) + 3I_{t,t'}^{m,m}(v+m+2, p_i, p_j) + 3I_{t,t'}^{m,m}(v+m+1, p_i, p_j) + I_{t,t'}^{m,m}(v+m, p_i, p_j)]$$

Para $i \neq j$, $a = 0$ e $b = 1$:

$$\Xi = \sum_{t,t'}^{\infty} g_{t,i} g_{t',i} \sum_{v=0}^m \binom{m}{v} 2^{m-v} \times \\ \times [I_{t,t'}^{m,m}(v+m+1, p_i, p_j) + I_{t,t'}^{m,m}(v+m, p_i, p_j)]$$

Nas expressões acima os termos $\binom{u}{v}$ são números binomiais e os valores de p_i e p_j são obtidos a partir de $p^2 = -\frac{\varepsilon R^2}{2}$. A integral $I_{t,t'}^{m,m'}(q, p_i, p_j)$ pode ser escrita em função de $\rho = \lambda - 1 = \frac{\xi}{2p}$ da seguinte forma:

$$I_{t,t'}^{m,m'}(q, p_i, p_j) = \int_0^{\infty} \frac{(-1)^{m+m'}}{(m+t)!(m'+t)!} \rho^q e^{-(p_i+p_j)\rho} \times \\ \times L_{m+t}^m(2p_i\rho) L_{m'+t'}^{m'}(2p_j\rho). \quad (3.29)$$

A solução da integral (3.29), de acordo com Herman & Rubin (1955), possui a forma:

$$I_{t,t'}^{m,m'}(q, p_i, p_j) = (p_i + p_j)^{-(1+q)} \sum_{u=0}^t \sum_{v=0}^{t'} (-1)^{u+v} \binom{t+m}{t-u} \binom{t'+m'}{t'-v} \times \\ \times \frac{\Gamma(1+q+u+v)(2p_i)^u (2p_j)^v}{u!v!(p_i+p_j)^{u+v}}, \quad (3.30)$$

Tendo calculado os valores de $Q_{i,j}(\mathbf{r})$, obtemos o valor de D_{ij} da seguinte maneira:

$$|D_{ij}|^2 = e [|Q_{i,j}(x)|^2 + |Q_{i,j}(y)|^2 + |Q_{i,j}(z)|^2] \quad (3.31)$$

3.4 Análise numérica

As regras de seleção dipolar são:

1. Transição entre estados com paridade oposta;
2. A variação em $|m|$ deve ser zero ou unitária ($|m - m'| = 0, 1$);
3. Não existe restrições na mudança em n_u .

Baseado nas regras de seleção, foram calculados os valores do momento de dipolo elétrico, equação (3.31), para as transições das séries de Lyman e Balmer do H_2^+ até $n = 10$, com separações nucleares até $300 a_0$. As convergências das séries envolvidas no programa escrito em linguagem FORTRAN foram distintas, ou seja, cada série teve que ser analisada individualmente até a sua convergência. Para as equações 3.3 e 3.4 serem soluções apropriadas das funções de onda Ψ_i , as séries devem ir ao infinito. Dentro da precisão numérica proposta, a convergência ocorreu para $s = 31$ e $t = 10$. A tabela 3.1 mostra os valores dos momentos de dipolo elétrico desse trabalho comparados com os obtidos por Ramaker & Peek (1973) para algumas transições, demonstrando que os cálculos descritos aqui apresentam grande precisão e cobrem uma vasta distância internuclear.

A figura 3.1 mostra as transições listadas na tabela 3.1 dos momentos de dipolo elétrico calculados nesse trabalho.

Tabela 3.1: Tabela de comparação entre os dados de Ramaker & Peek (1973)[†] e esse trabalho[‡] dos momentos de dipolo elétrico para Lyman- α do H_2^+ , em unidades atômicas.

$R(a_0)$	Transição	$D_{i,j}(R)^\dagger$	$D_{i,j}(R)^\ddagger$
1,0	$2p\pi_u-1s\sigma_g$	0,5494	0,5493774
11,0	$2p\pi_u-1s\sigma_g$	0,7169	0,7168555
60,0	$2p\pi_u-1s\sigma_g$	0,7450	0,7449931
1,0	$3p\sigma_u-1s\sigma_g$	0,1651	0,1651107
11,0	$3p\sigma_u-1s\sigma_g$	0,4859	0,4858565
80,0	$3p\sigma_u-1s\sigma_g$	0,5207	0,5207119
1,0	$4f\sigma_u-1s\sigma_g$	0,001055	0,0010541
11,0	$4f\sigma_u-1s\sigma_g$	0,6609	0,6608712
80,0	$4f\sigma_u-1s\sigma_g$	0,5326	0,5325508
1,0	$2s\sigma_g-2p\sigma_u$	1,241	1,2406089
11,0	$2s\sigma_g-2p\sigma_u$	0,4844	0,4844248
80,0	$2s\sigma_g-2p\sigma_u$	0,5207	0,5207119
1,0	$3d\sigma_g-2p\sigma_u$	1,010	1,0104411
11,0	$3d\sigma_g-2p\sigma_u$	0,6349	0,6349347
80,0	$3d\sigma_g-2p\sigma_u$	0,5326	0,5325508
1,0	$3d\pi_g-2p\sigma_u$	0,8584	0,8584398
11,0	$3d\pi_g-2p\sigma_u$	0,7935	0,7935359
60,0	$3d\pi_g-2p\sigma_u$	0,7450	0,7449931

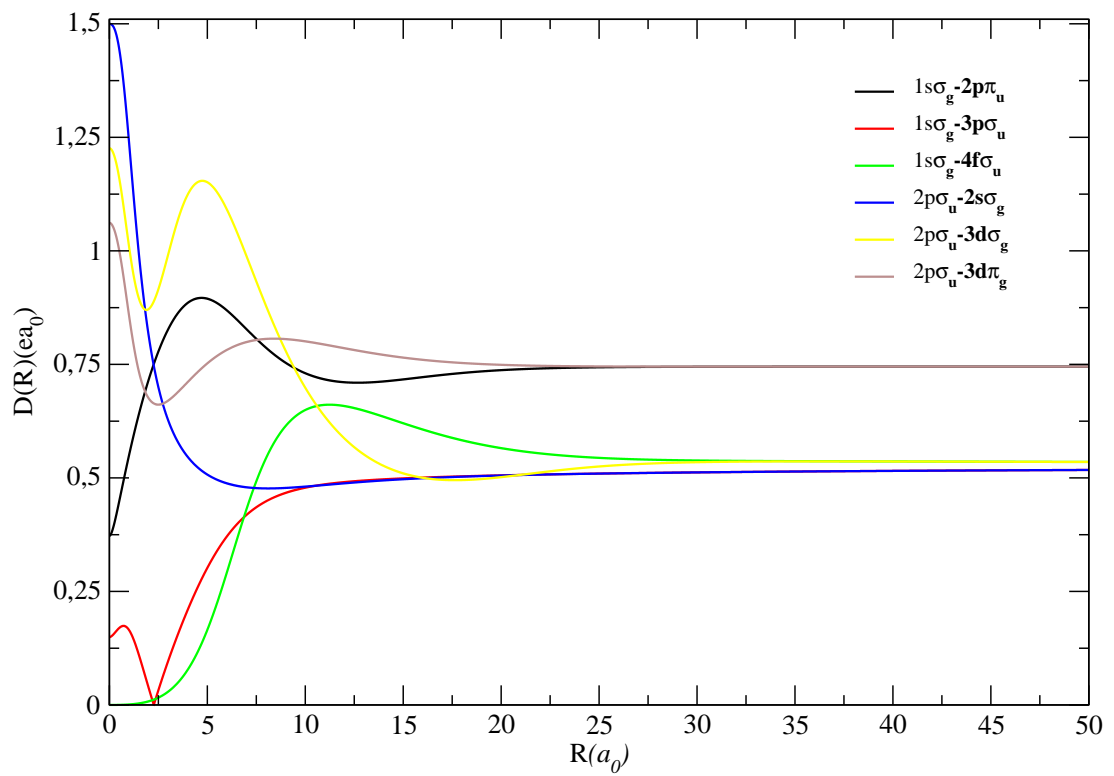


Figura 3.1: Momento de dipolo elétrico das transições de Lyman- α , listadas na tabela 3.1, devido ao átomo de H perturbado por colisões com prótons. O $D(R)$ é dado aqui em unidades atômicas e a distância internuclear R em a_0 (raio de Bohr).

Capítulo 4

Perfis e satélites

4.1 Análise teórica

Na introdução já foi discutido que a técnica espectroscópica fornece medidas precisas dos parâmetros atmosféricos estelares, T_{eff} e $\log g$, permitindo dessa forma a comparação relativa desses parâmetros entre estrelas distintas. No entanto, os valores absolutos dos parâmetros atmosféricos podem ser imprecisos devido às incertezas na física incluída nos cálculos do modelo (e.g., Tremblay & Bergeron, 2009). A principal fonte de alargamento, na maioria das estrelas anãs brancas DA, é devido à interação das partículas com o campo elétrico, ou seja, o alargamento Stark. A teoria que descreve esse perfil de linha até hoje é a teoria unificada de alargamento Stark de Vidal, Cooper e Smith (Vidal et al., 1970) conhecida como *VCS*. Essa teoria foi usada desde o início na análise de grandes amostras de estrelas anãs brancas DA e é a base da maioria dos resultados aceitos das propriedades globais dessas estrelas (e.g., Tremblay & Bergeron, 2009). Lemke (1997) disponibilizou novas tabelas do alargamento Stark para as séries de Lyman, Balmer, Paschen e Brackett do hidrogênio, calculadas a partir da teoria de VCS. Essas novas tabelas cobriram todas as possíveis transições, temperaturas e densidades eletrônicas encontradas nas atmosferas de estrelas anãs brancas DA. Antes do trabalho de Lemke (1997) os perfis de linha eram obtidos por extrapolação para altas densidades ou utilizando teorias de alargamento menos precisas, como de Edmonds et al. (1967), para linhas superiores a $H\epsilon$ da série de Balmer. Mas para temperaturas da ordem de 10 000K para as linhas de Balmer e abaixo de 30 000K para as linhas de Lyman, outros tipos de alargamento de linha devem ser incluídos no modelo de atmosferas. Uma das aproximações mais expressivas tem sido o trabalho de Allard et al. (2004) sobre opacidade de linhas quase moleculares.

Existem diferentes aproximações para o cálculo dos perfis de linha; as principais são:

- aproximação quase-estática;
- aproximação quântica,
- teoria unificada.

Na aproximação quase-estática, o coeficiente de absorção, $K(\nu)$ (medido em cm^{-1}), causado pelas absorções induzidas por colisões (CIA)¹ (Margenau & Lewis, 1959, Allard & Kielkopf, 1982, Rohrmann et al., 2011), pode ser escrito como:

$$K(\nu) = n_{H_i} \sigma_{tot}(\nu) \quad (4.1)$$

Onde $\sigma_{tot}(\nu)$ é o coeficiente de absorção total, dado por:

$$\sigma_{tot}(\nu) = \sum_{ij} \pi_{ij} \sigma_{ij}(\nu) \quad (4.2)$$

Os valores π_{ij} são os pesos de cada transição de um estado i para um estado j de um átomo ou molécula e $\sigma_{ij}(\nu)$ é a seção de choque da radiação absorvida na respectiva transição. Para o caso de $H - H^+$, o coeficiente é dado por (Bates, 1951, 1952, Rohrmann et al., 2011):

$$\sigma_{ij}(\nu) = \frac{16}{3} \pi^3 n_p \alpha \left\{ \frac{h\nu}{|dV_{ij}/dR|} \right\} D_{ij} R^2 e^{(4\pi n_p R^3/3)} e^{-\beta E_i(R)} \quad (4.3)$$

onde $\beta = \frac{1}{kT}$, k é a constante de Boltzmann, e T é temperatura do gás. O n_p é a densidade média de perturbadores no gás, V_{ij} é a diferença da energia potencial associada com uma transição com uma energia $h\nu = V_{ij} \equiv V_j(R) - V_i(R)$ para uma separação internuclear R , $D_{ij}(R)$ é o momento de dipolo, e $E_i(R)$ corresponde a mudança na energia (com relação a $R = \infty$) no estado i do H_2^+ . Quando existe um extremo na curva correspondendo à diferença nas energias potenciais entre um estado superior e inferior, $\frac{dV_{ij}}{dR}$ é nula. Portanto, se a derivada é nula, a expressão do perfil é divergente, levando aos satélites nas asas dos perfis.

Na aproximação quântica, a seção de choque para processos associados espontâneos e estimulados é dada por (Zygelman & Dalgarno, 1990),

¹ *Collisional Induced Absorptions*

$$\sigma(E) = \sum_{N'} \sum_{v''} \frac{64 \pi^5 \nu^3}{3 c^3 \kappa^2} \frac{1}{1 - \exp(-h\nu/kT)} \times$$

$$p[N' M_{v'', N'-1; \kappa, N'}^2 + (N' + 1) M_{v'', N'+1; \kappa, N'}^2]$$
(4.4)

onde E é a energia relativa da colisão, κ é o número de onda do movimento relativo, p é a probabilidade de aproximação no estado eletrônico inicial, N' é o número quântico rotacional inicial, v'' é número quântico vibracional final, e M é o elemento da matriz de dipolo elétrico.

A teoria unificada foi desenvolvida em Allard et al. (1999), e uma discussão detalhada é apresentada nesse artigo. A expressão fundamental do espectro normalizado $F_\nu(\Delta\nu)$ é calculada a partir da transformada de Fourier (Allard et al., 2009).

$$F_\nu(\Delta\nu) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^{+\infty} \Phi(s) e^{-i\Delta\nu s} ds.$$
(4.5)

onde $\Phi(s)$ é a função de autocorrelação dipolar (Allard et al., 1999).

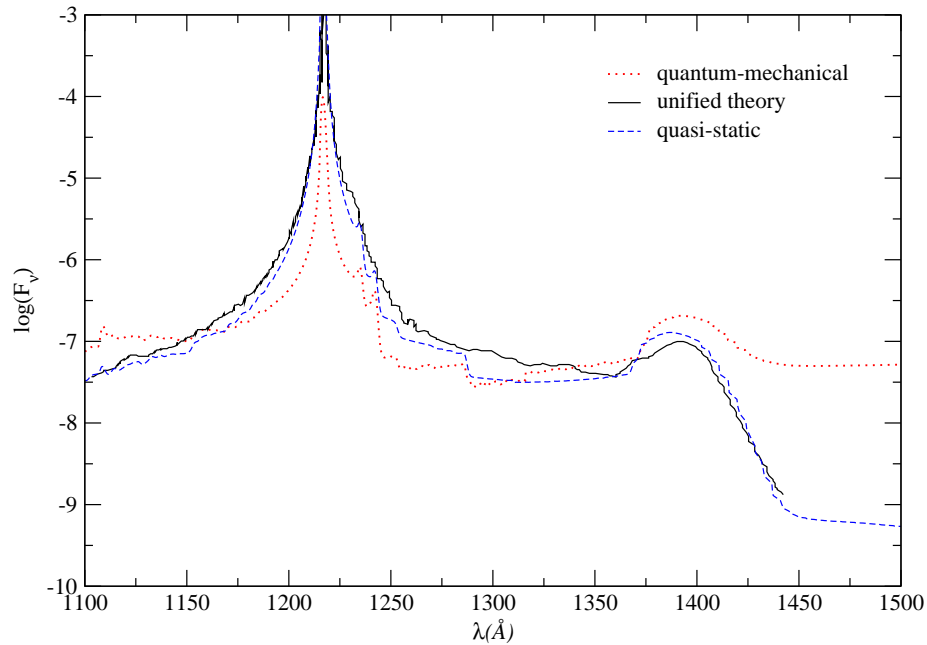


Figura 4.1: Comparação entre as três aproximações do perfil de linha de Lyman- α normalizado: aproximação quase-estática (linha tracejada), aproximação quântica (linha pontilhada) e a teoria unificada (linha sólida) [Adaptado de Allard et al. (1999)]

A figura 4.1 mostra a comparação entre as três aproximações, mencionadas

acima, do perfil de linha de Ly α como calculado por Allard et al. (1999). A linha sólida representa a aproximação da teoria unificada, que possui uma resolução determinada pela transformada de Fourier (equação 4.5), enquanto que a aproximação quântica (linha pontilhada) e a aproximação quase-estática (linha tracejada) fornecem valores semelhantes, mas perfis distintos devido ao cálculo da derivada pela diferença numérica na aproximação quase-estática, e por expansão em série na aproximação quântica. Os três perfis são semelhantes, mas a aproximação quase-estática melhor representa a forma correta global das asas da linha e a posição dos satélites, em comparação com dados publicados anteriormente (Allard et al., 1999).

Como os objetivos principais desse trabalho são os cálculos dos momentos de dipolo elétrico, os potenciais do íon H $_2^+$, os cálculos da forma global dos perfis de linha e a localização dos satélites, usamos a aproximação quase-estática para calcular os perfis de linha. Infelizmente a aproximação quase-estática não fornece uma boa representação do centro das linhas dominado pelo efeito Stark. Portanto, há uma necessidade de uma melhor modelagem das partes centrais de cada transição.

Nosso interesse é encontrar a posição correta dos satélites nas asas do perfil de linha e sua forma geral, ou seja, as divergências no perfil, e levar esses resultados para a atenção dos astrofísicos. Se eles são observados, são devidos a prótons.

4.2 Aproximação quase-estática

A abordagem teórica usada nesse trabalho é baseada na absorção quase-molecular H - H $^+$ calculada na aproximação quase-estática, da mesma forma que Rohrmann et al. (2011). O método de cálculo segue o procedimento de Rohrmann et al. (2011), para perfis de linha das séries de Lyman e Balmer em uma aproximação quase-estática:

- Primeiramente identifica-se cada par de níveis (i, j) da quase-molécula H - H $^+$ que contribui para a formação de uma dada linha. Somente transições entre estados u (*ungerade*)² e g (*gerade*)³ são permitidas (transições dipolares), isto é, levam a emissão de um fóton, ou seja, com paridade oposta e possuindo $|m - m'| = 0$ ou 1 como dipolo permitido.
- O segundo passo é o cálculo da seção de choque efetiva $\sigma_{ij}(\nu)$, equação (4.3) usando os potenciais e momentos de dipolo elétrico para as transições já identificadas.

²Palavra alemã para ímpar

³Palavra alemã para par

- Para o cálculo correto de $\sigma_{ij}(\nu)$ precisa-se analisar as frequências ν que surgem a partir da diferença da energia $h\nu = V_j - V_i$ entre os níveis que contribuem para a formação da linha. Deve-se levar em conta que distâncias internucleares distintas podem produzir frequências iguais ou extremamente próximas.
- A seção de choque efetiva é a soma de cada uma das contribuições de todas as possíveis transições.
- O perfil de linha é a soma das seções de choque efetivas $\sigma_{ij}(\nu)$ multiplicadas pelo peso estatístico de cada uma das respectivas transições permitidas.

O perfil calculado é então convoluído com uma distribuição Maxwelliana de velocidades para levar em conta o efeito do alargamento térmico Doppler. Os perfis de linha e satélites das séries de Lyman e Balmer foram calculados para densidades únicas de 10^{16} até 10^{18} cm^{-3} típicas das atmosferas de estrelas anãs brancas e que podem ser produzidas em laboratório em experimentos Z-pinch. A última etapa para a obtenção do perfil real é somar o perfil obtido ao perfil devido somente ao alargamento por elétrons, alargamento Stark, o qual não possui satélites.

4.3 Série de Lyman e Balmer

As linhas de Balmer do hidrogênio atômico são proeminentes na maioria dos espectros estelares óticos bem como as linhas de Lyman na maioria das estrelas quentes o suficiente para terem um fluxo de energia no ultravioleta observável. A interpretação correta dos espectros e, por consequência, a determinação dos parâmetros estelares, necessita do conhecimento da forma do coeficiente de absorção da linha. O objetivo dos cálculos apresentados aqui é fornecer perfis de linha para as condições físicas nas atmosferas de estrelas anãs brancas, plasmas e experimentos do tipo Z-pinch.

4.3.1 Lyman- α

O perfil total de Lyman- α depende de seis transições individuais da molécula de H_2^+ , todas listadas na tabela 4.1. A tabela 4.1 também exhibe o comprimento de onda das linhas satélites, bem como o nível superior e inferior da transição que gera o respectivo satélite e a distância entre $H - H^+$ para a qual o extremo na diferença de potencial ocorre.

Tabela 4.1: Transições permitidas e satélites devidos a colisões de $H-H^+$ para Lyman- α na distância $R(\text{\AA})$.

Nº	Nível superior	Nível inferior	$\Delta\nu_{H_2^+}$ (cm^{-1})	$\lambda_{H_2^+}$ (\AA)	R (\AA)
1	$2p\pi_u$	$1s\sigma_g$	-1 628,54	1 240,56	4,72
2	$3p\sigma_u$	$1s\sigma_g$	-	-	-
3	$4f\sigma_u$	$1s\sigma_g$	-1 172,40	1 233,58	11,07
4	$2s\sigma_g$	$2p\sigma_u$	8 139,91	1 106,47	2,65
5	$3d\sigma_g$	$2p\sigma_u$	-11 055,90	1 404,87	4,56
			16 001,33	1 017,93	1,39
6	$3d\pi_g$	$2p\sigma_u$	21 384,28	965,05	1,67

A figura 4.2 exhibe as seis transições listadas na tabela 4.1. Nessa figura é possível observar as distâncias onde ocorrem os extremos da diferença de potencial, que são responsáveis pela criação dos satélites no perfil de linha.

Os momentos de dipolo elétrico de cada uma das transições que contribuem para Lyman α , são exibidos na figura 4.3.

De acordo com o método de Rohrmann et al. (2011), para obtenção do perfil de linha primeiramente calcula-se a contribuição de cada transição, as quais podem ser observadas na figura 4.4 para uma temperatura de 10 000 K, com um número de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ de H^+ . O indicador de que cada contribuição está correta é a linha de corte que cada uma delas apresenta. A figura 4.5 mostra todas as transições exibidas na figura 4.4, mostrando como cada uma delas contribui na formação do perfil de linha.

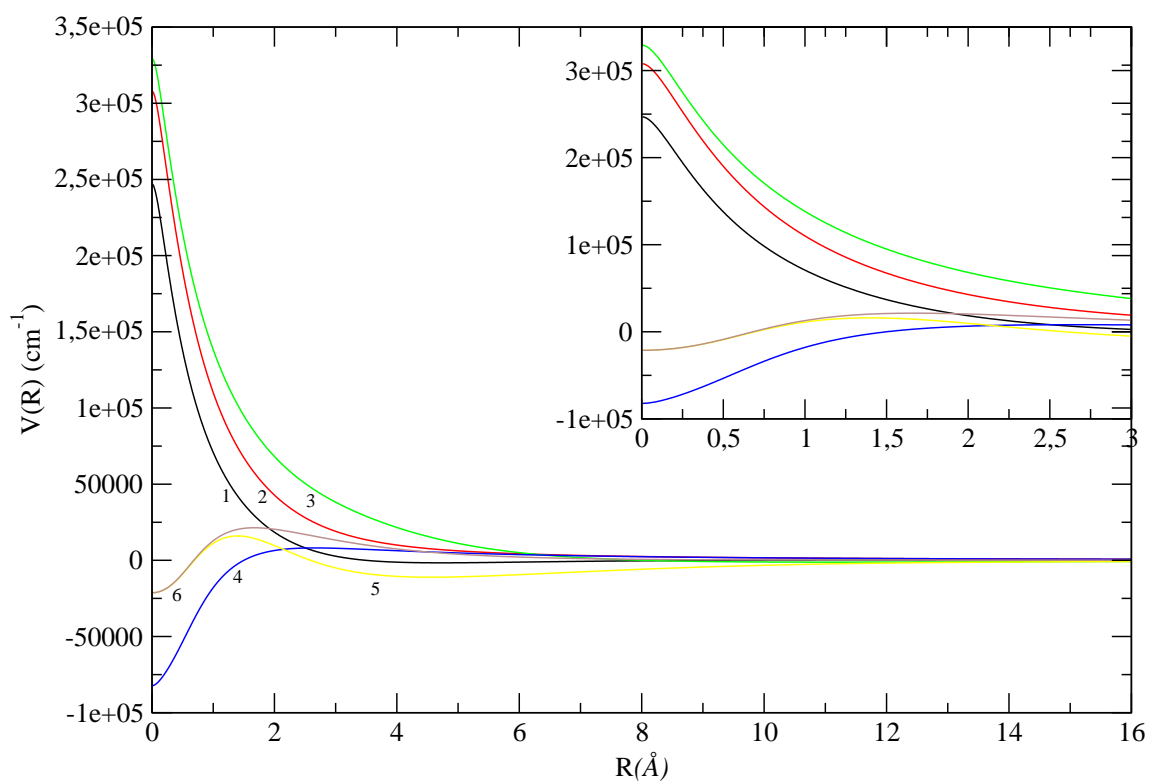


Figura 4.2: Diferença de potencial das transições permitidas em função da distância interatômica da molécula de H_2^+ de Lyman- α .

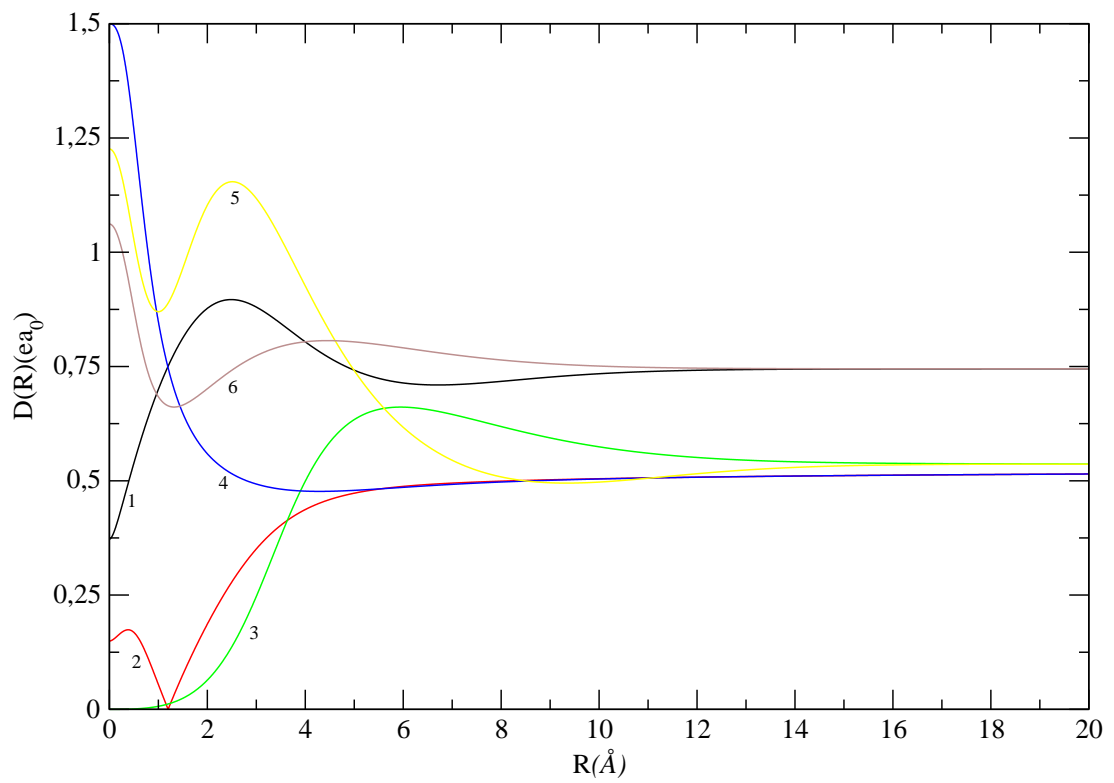


Figura 4.3: Momento de dipolo elétrico das transições de Lyman- α devido ao átomo de H perturbado por colisões com prótons. O $D(R)$ é dado aqui em unidades atômicas.

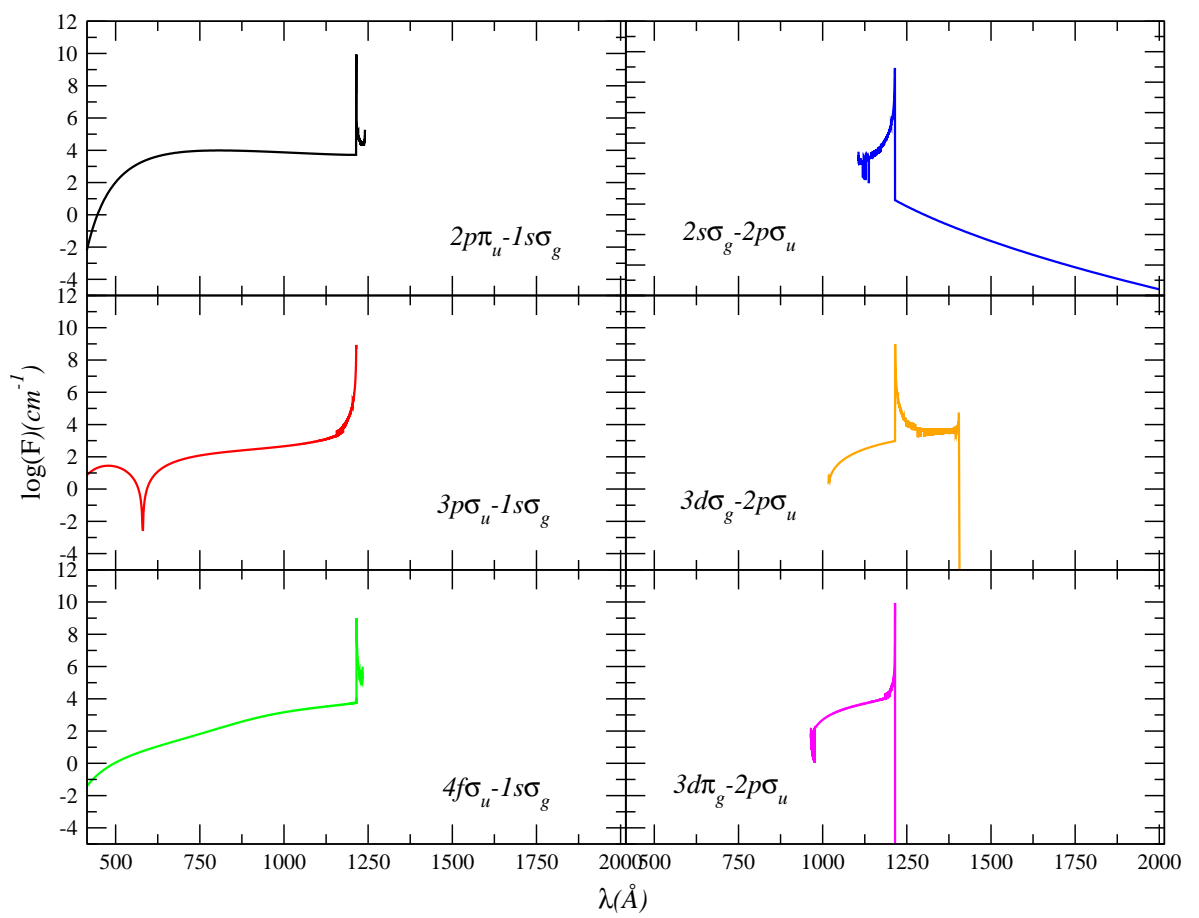


Figura 4.4: Transições que contribuem para a formação de Lyman- α mostradas individualmente para $T=10\,000\text{ K}$ e $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$

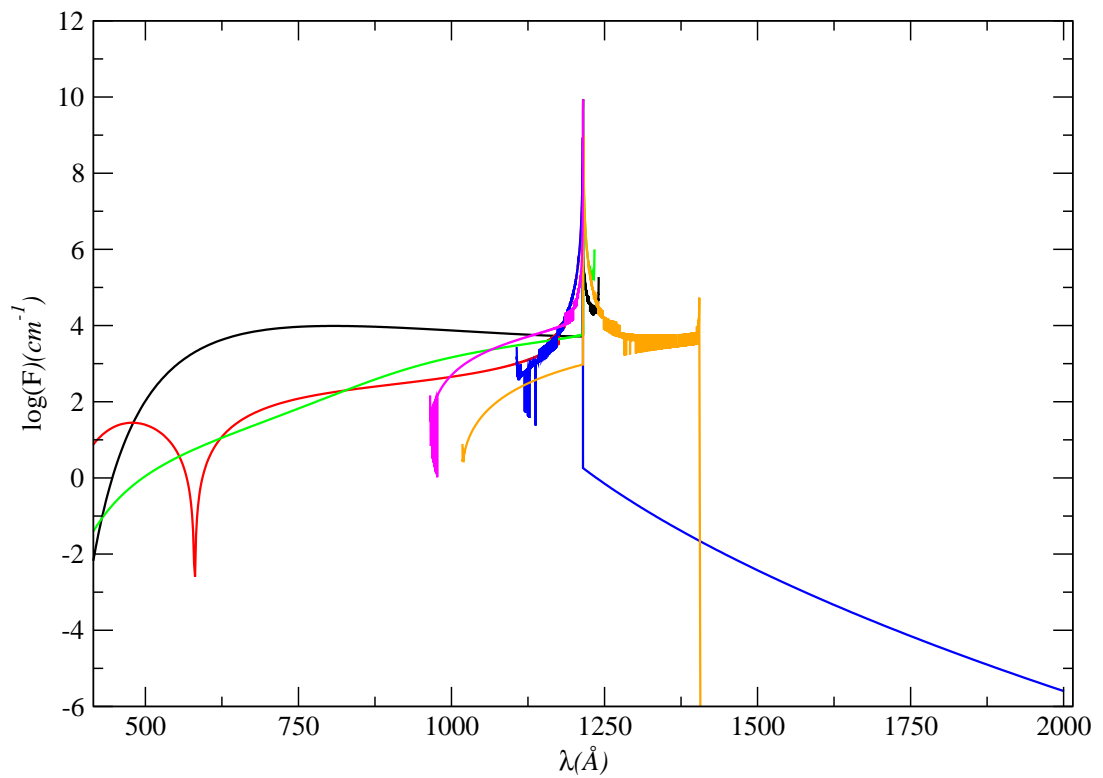


Figura 4.5: Todas as transições que formam o perfil linha de Lyman- α juntas, exibindo a contribuição de cada uma delas para $T=10\,000\text{ K}$ e $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$

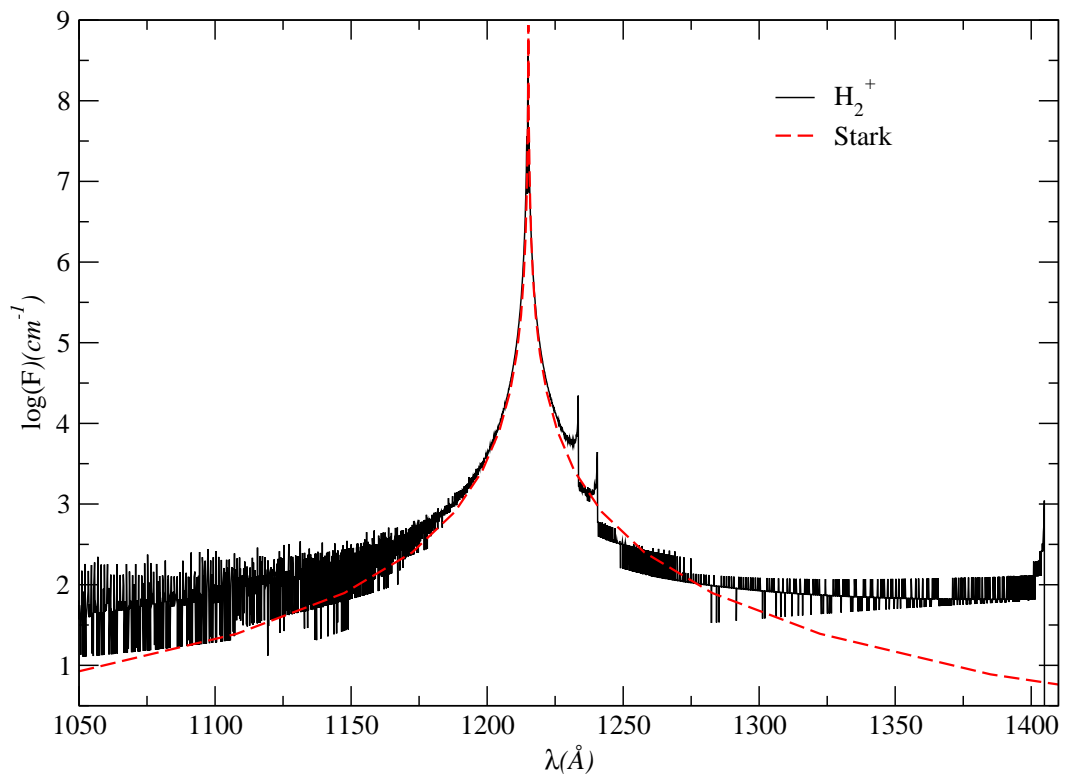


Figura 4.6: Comparação entre os perfis de Lyman- α , devido ao alargamento Stark e colisional do $H - H^+$ para $T=10\,000$ K e $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Note que as asas das linhas não são idênticas assintoticamente.

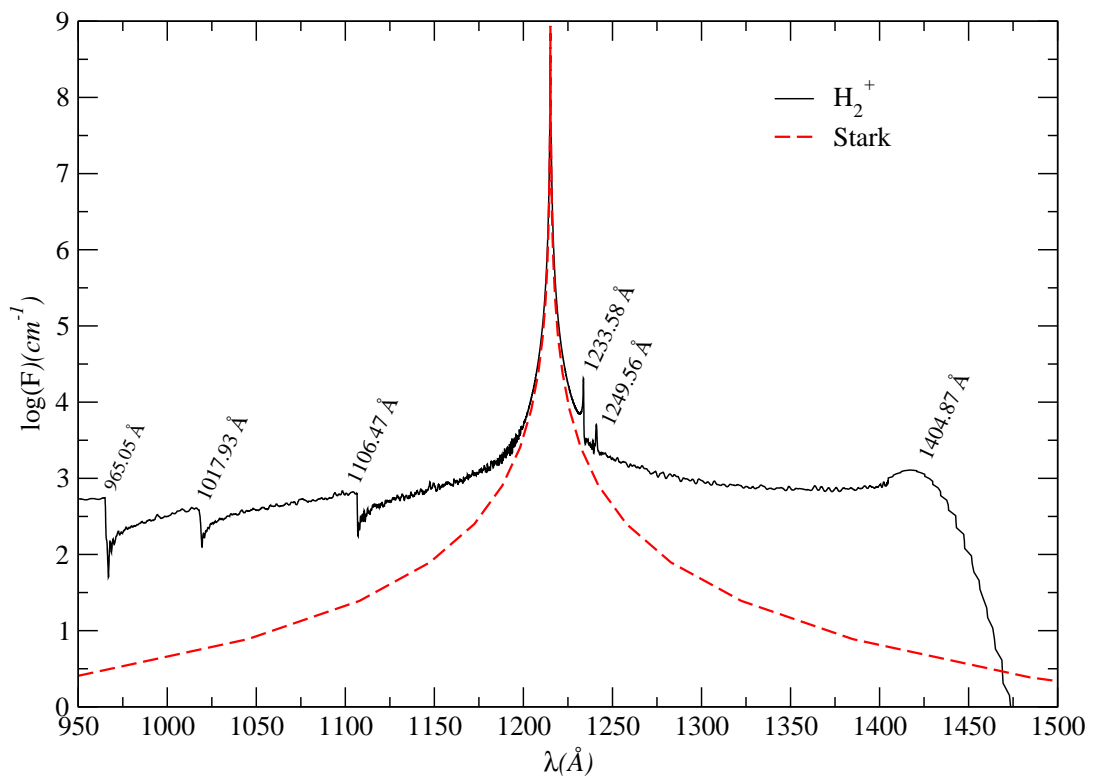


Figura 4.7: Comparação entre os perfis de Lyman- α , devido ao alargamento Stark e colisional do $H - H^+$ convoluído com o efeito Doppler para $T=10\,000\text{ K}$ e $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$

4.3.2 Lyman- β

O perfil de linha de Lyman- β depende de dez transições individuais da molécula de H_2^+ , que estão listadas na tabela 4.2. A tabela 4.2 lista todos os comprimentos de onda dessas transições e as possíveis linhas satélites. As linhas satélites de Lyman- β foram observadas nos espectros da estrela anã branca DA Wolf 1346 com o telescópio *HUT* (*Hopkins Ultraviolet Telescope*) (Koester et al., 1996). Koester et al. (1998) observaram satélites característicos nos comprimentos de onda 1 060Å e 1 080Å nos espectros de quatro outros alvos obtidos com o *ORFEUS Orbiting and Retrievable Far and Extreme Ultraviolet Spectrometer*. Essas linhas satélites do perfil de linha de Lyman- β são devidas às contribuições das transições ($4f\pi_u-1s\sigma_g$) e ($5g\sigma_g-2p\sigma_u$), conforme tabela 4.2. Tais linhas satélites também foram calculadas por Allard et al. (1998b). A figura 4.8 exibe a diferença entre os potenciais das transições que contribuem para a formação do perfil de linha de Lyman- β , listadas na tabela 4.2. Na figura 4.9 são graficados os momentos de dipolo elétrico de cada uma das dez transições. Observa-se nas figuras 4.8 e 4.9 que quando a diferença de potencial produz um extremo e o momento de dipolo elétrico possui declividade positiva, há formação de uma linha satélite no perfil de linha. O perfil de linha de Lyman- β calculado para uma temperatura de 10 000 K e número de perturbadores (prótons) $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ é exibido na figura 4.10.

Tabela 4.2: Transições permitidas e satélites de Lyman- β devido a colisões do átomo de H com H^+ na distância internuclear $R(\text{Å})$ na qual um extremo no potencial ocorre.

Nº	Nível superior	Nível inferior	$\Delta\nu_{H_2^+}$ (cm^{-1})	$\lambda_{H_2^+}$ (Å)	R (Å)
1	$3p\pi_u$	$1s\sigma_g$	-	-	-
2	$4p\sigma_u$	$1s\sigma_g$	-	-	-
3	$4f\pi_u$	$1s\sigma_g$	-3 361,25	1 062,64	9,85
4	$5f\sigma_u$	$1s\sigma_g$	-	-	-
5	$6h\sigma_u$	$1s\sigma_g$	-1 037,33	1 037,03	21,45
6	$3s\sigma_g$	$2p\sigma_u$	22 200,04	835,65	1,96
7	$4d\sigma_g$	$2p\sigma_u$	-633,34	1 032,71	9,46
			25 868,59	810,80	1,55
8	$4d\pi_g$	$2p\sigma_u$	28 666,11	792,82	1,70
9	$5g\sigma_g$	$2p\sigma_u$	-4 899,9272	1 080,31	12,65
			38 880,59	733,42	1,69
10	$5g\pi_g$	$2p\sigma_u$	-516,61	1 031,46	18,89
			38 914,86	733,24	1,69

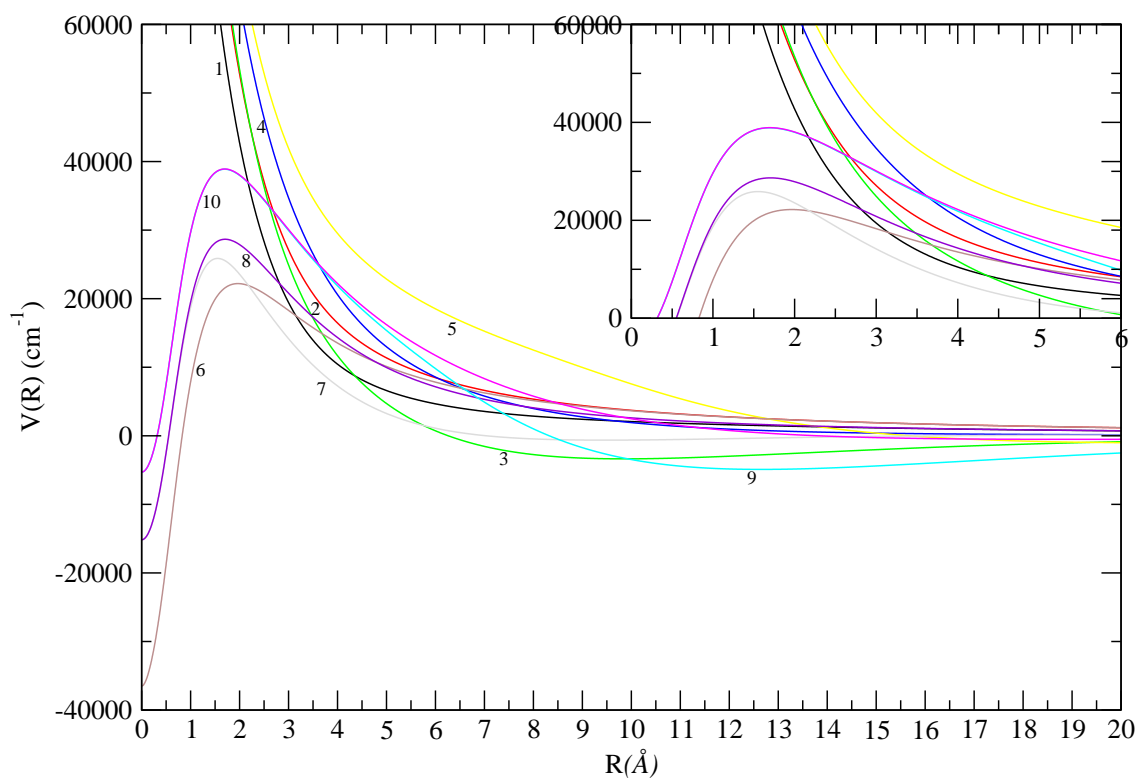


Figura 4.8: Diferença de potencial das transições permitidas em função da distância interatômica da molécula de H_2^+ de Lyman- β .

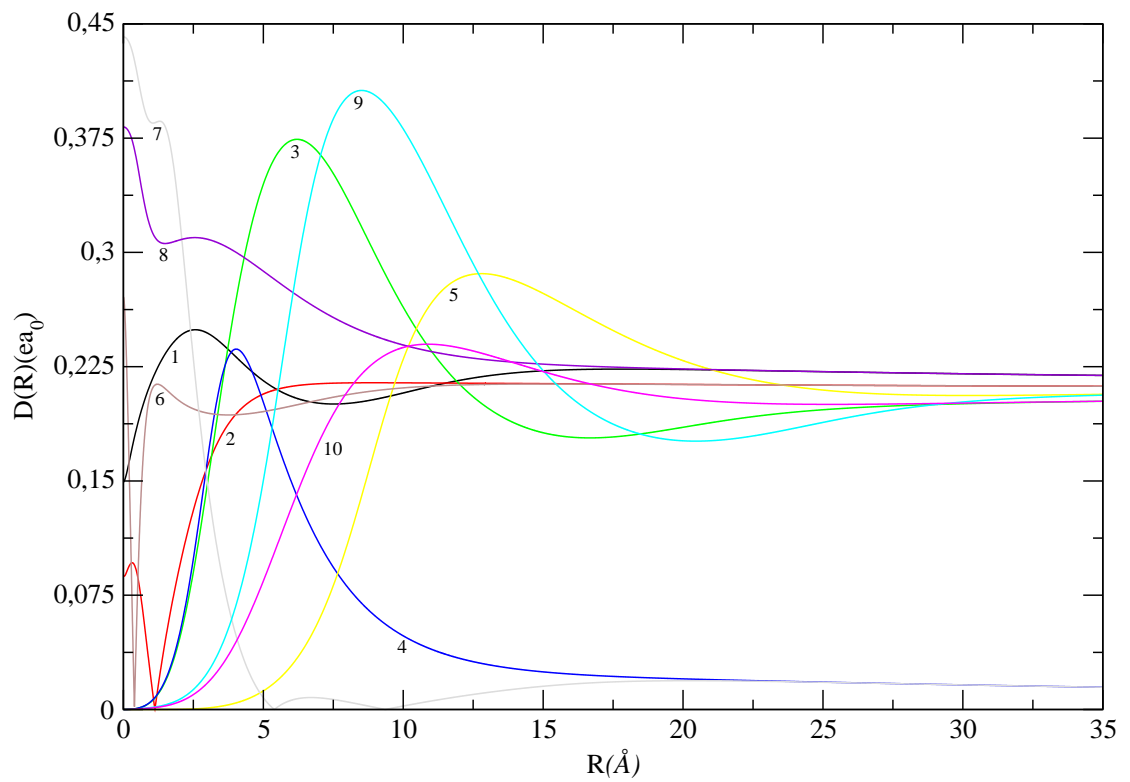


Figura 4.9: Momentos de dipolo elétrico das transições que contribuem para formação de Lyman- β devido ao átomo de H perturbado por colisões com prótons. O momento de dipolo elétrico $D(R)$ é dado aqui em unidades atômicas.

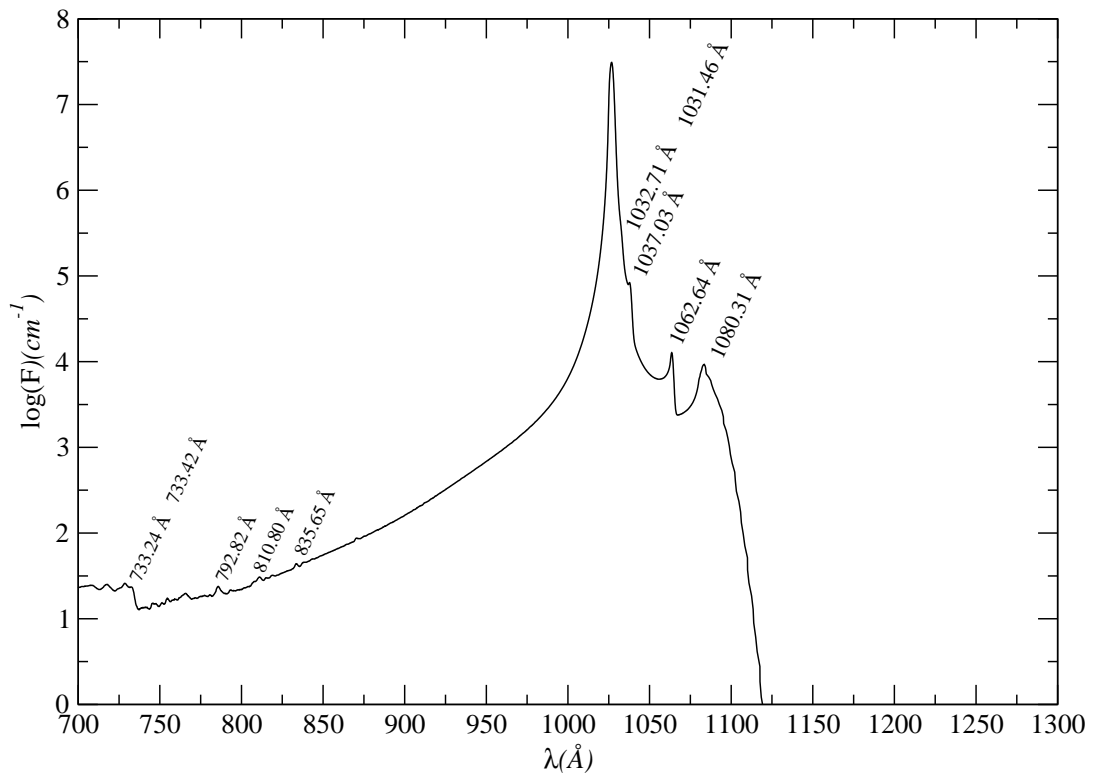


Figura 4.10: Perfil de linha de Lyman- β calculado para a temperatura $T=10000$ K e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

4.3.3 Lyman- γ

O perfil de linha para Lyman- γ é formado por 14 transições permitidas do íon molecular H_2^+ devido às colisões de H-H $^+$. Essas transições são listadas na Tabela 4.3, bem como a posição e a distância internuclear entre H e H $^+$ dos possíveis satélites gerados. Um dos satélites predito para ocorrer, em $\lambda = 995 \text{ \AA}$, foi observado em um espectro do *HUT* (*Hopkins Ultraviolet Telescope*) e mais tarde em um espectro obtido com *ORFEUS* (*Orbiting and Retrievable Far and Extreme Ultraviolet Spectrometer*). Esse satélite em Lyman- γ também foi observado nos espectros das anãs brancas *CD - 38°10980* (Wolff et al., 2001) e *Sírius B* (Holberg et al., 2003). Allard et al. (2004) calcularam o perfil de linha de Lyman- γ utilizando os potenciais do H_2^+ calculados por Madsen & Peek (1971) e assumiram que o momento de dipolo era constante para cada transição. Allard et al. (2009) recalcularam o perfil de linha para Lyman- γ com a inclusão dos momentos de dipolo elétrico para cada transição, mas os dados de dipolo não foram publicados.

Tabela 4.3: Transições permitidas e satélites devido às colisões H-H $^+$ de Lyman- γ na distância internuclear R na qual um extremo para a diferença de potencial ocorre.

Nº	Nível superior	Nível inferior	$\Delta\nu_{H_2^+}$ (cm $^{-1}$)	$\lambda_{H_2^+}$ (Å)	R (Å)
1	$4p\pi_u$	$1s\sigma_g$	-	-	-
2	$5p\sigma_u$	$1s\sigma_g$	-	-	-
3	$5f\pi_u$	$1s\sigma_g$	-192,78	974,62	16,65
4	$6f\sigma_u$	$1s\sigma_g$	-	-	-
5	$6h\pi_u$	$1s\sigma_g$	-2 188,78	993,96	20,69
6	$7h\sigma_u$	$1s\sigma_g$	-230,90	974,98	29,66
7	$8j\sigma_u$	$1s\sigma_g$	-784,17	980,27	36,06
8	$4s\sigma_g$	$2p\sigma_u$	30 153,49	752,16	1,82
9	$5d\sigma_g$	$2p\sigma_u$	32 004,30	741,83	1,62
10	$5d\pi_g$	$2p\sigma_u$	33 520,98	733,58	1,70
11	$6g\sigma_g$	$2p\sigma_u$	-1 395,38	986,18	17,79
			39 005,56	705,21	1,69
12	$6g\pi_g$	$2p\sigma_u$	39 025,78	705,11	1,69
13	$7i\sigma_g$	$2p\sigma_u$	-2 627,07	998,31	25,06
			42 340,74	689,00	1,70
14	$7i\pi_g$	$2p\sigma_u$	-565,52	978,18	31,65
			42 342,54	688,99	1,70

A figura 4.11 exhibe todas as diferenças dos potenciais das 14 transições que contribuem para a formação do perfil de linha de Lyman- γ , ou seja, ΔV para cada

transição. Na figura 4.12 temos todas as transições dos momentos de dipolo elétrico para Lyman- γ envolvidas na colisão de prótons com o átomo de H.

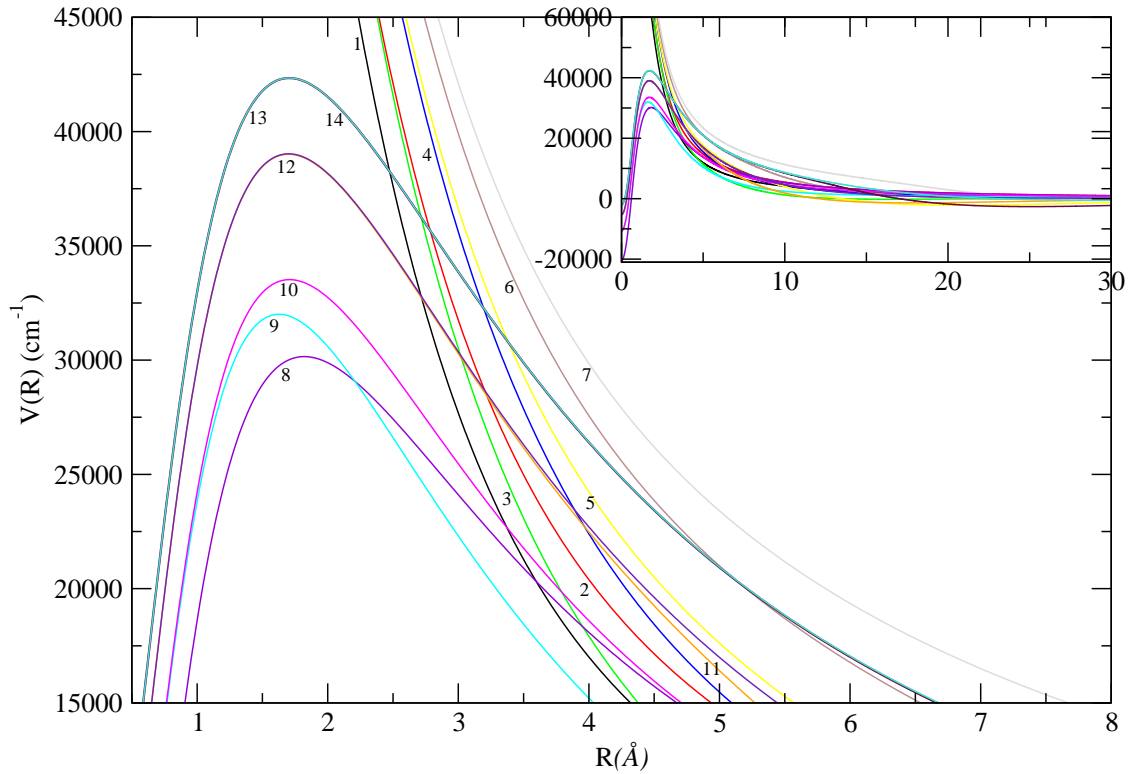


Figura 4.11: Diferenças dos potenciais das transições em função da distância interatômica do H_2^+ de Lyman- γ .

O perfil de linha calculado para Lyman- γ é mostrado na figura 4.13, para uma temperatura de 10 000 K e uma densidade de perturbadores de $n_p = 10^{17} \text{cm}^{-3}$. Na figura 4.13 pode-se observar muitos satélites no perfil de linha de Lyman γ , entretanto os satélites em $\lambda = 998.31 \text{ Å}$, $\lambda = 1062.64 \text{ Å}$, $\lambda = 688.99 \text{ Å}$ e $\lambda = 733.58 \text{ Å}$ são os mais proeminentes e, como no caso do satélite em $\lambda = 998.31 \text{ Å}$, já observado em espectros de anãs brancas obtidas com o *HUT* e *ORFEUS*.

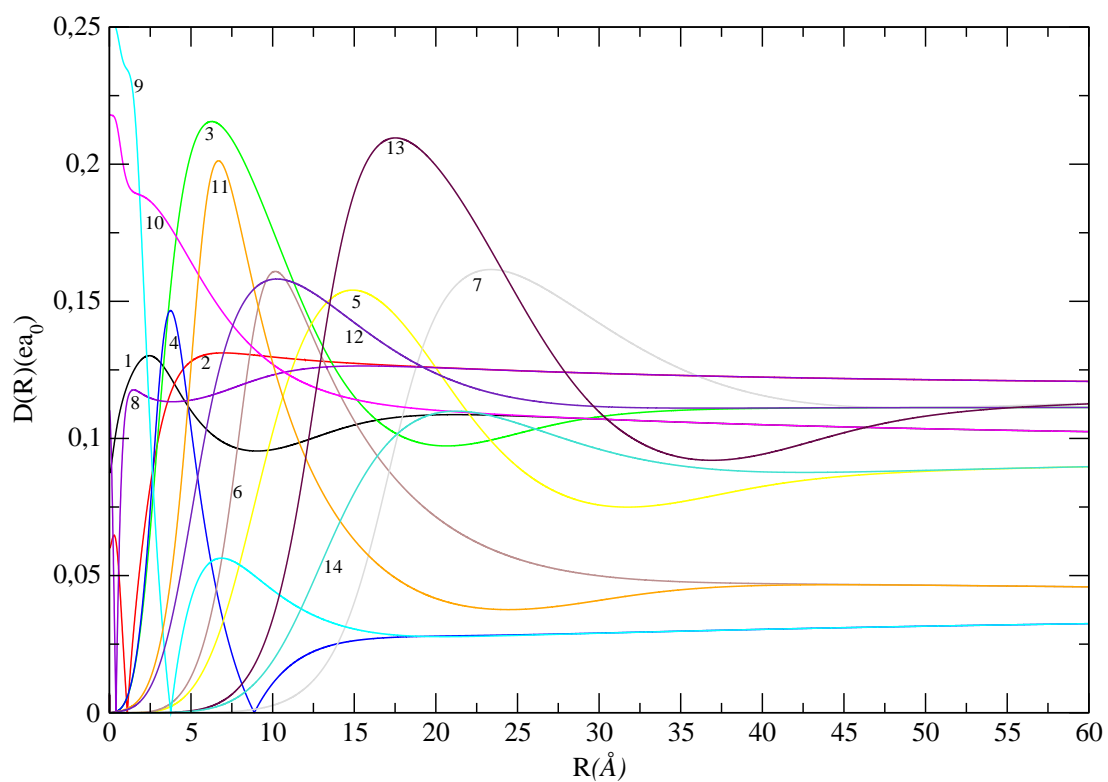


Figura 4.12: Transições dos momentos de dipolo elétrico de Lyman- γ do H_2^+ em função da distância internuclear. O valor de $D(R)$ é dado aqui em unidades atômicas.

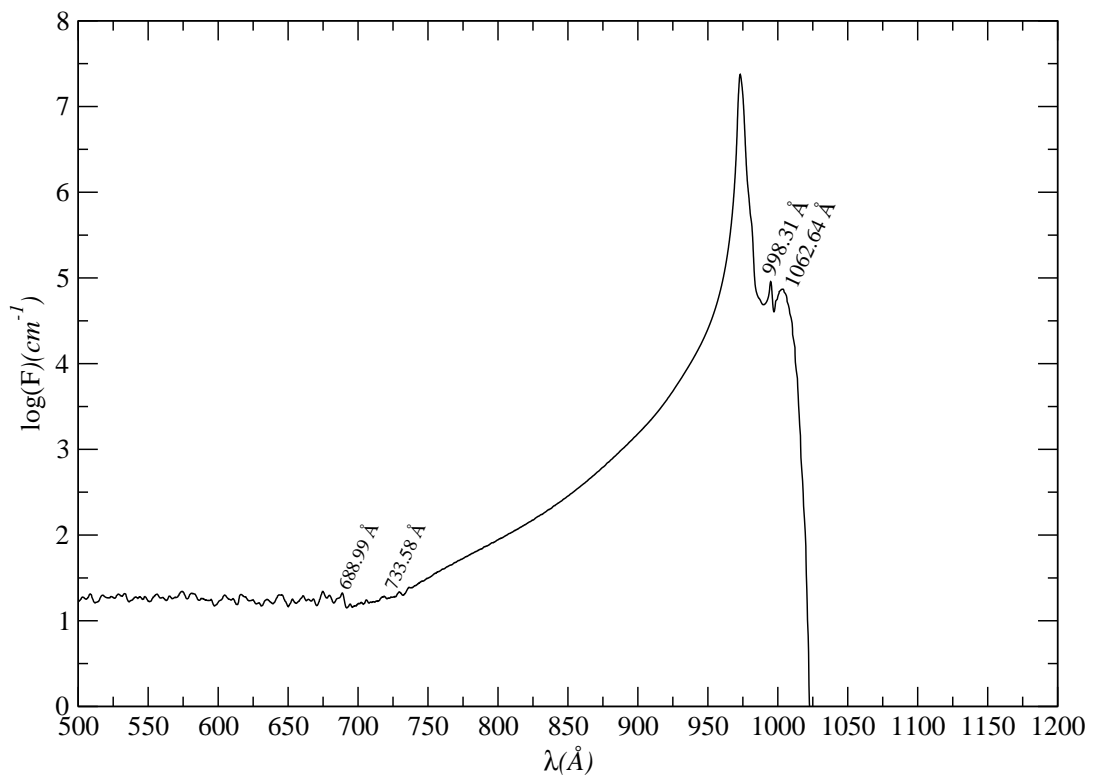


Figura 4.13: Perfil de linha de Lyman- γ calculado para $T=10\,000$ K e uma densidade de prótons de $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

4.3.4 Lyman- δ

Existem 18 transições moleculares que contribuem para Lyman- δ devido a colisões do átomo de H com H^+ . Todas as transições estão listadas na tabela 4.4.

Tabela 4.4: Transições permitidas e satélites de Lyman- δ devido a colisões de H- H^+ para uma distância R entre o par átomo-íon no qual um valor extremo da diferença de potencial ocorre.

N ^o	Nível superior	Nível inferior	$\Delta\nu_{H_2^+}$ (cm ⁻¹)	$\lambda_{H_2^+}$ (Å)	R (Å)
1	5p π_u	1s σ_g	-	-	-
2	6p σ_u	1s σ_g	-	-	-
3	6f π_u	1s σ_g	-	-	-
4	7f σ_u	1s σ_g	-	-	-
5	7h π_u	1s σ_g	-679,23	956,16	27,56
6	8h σ_u	1s σ_g	-	-	-
7	8j π_u	1s σ_g	-1 413,57	962,93	36,17
8	9j σ_u	1s σ_g	-312,56	952,82	44,76
9	10l σ_u	1s σ_g	-582,87	955,28	54,98
10	5s σ_g	2p σ_u	-	-	-
11	6d σ_g	2p σ_u	-	-	-
12	6d π_g	2p σ_u	-	-	-
13	7g σ_g	2p σ_u	-76,95	950,69	26,02
14	7g π_g	2p σ_u	-	-	-
15	8i σ_g	2p σ_u	-1 119,44	960,21	31,54
16	8i π_g	2p σ_u	-99,84	950,90	42,38
17	9k σ_g	2p σ_u	-1 589,40	964,56	41,91
18	9k π_g	2p σ_u	-475,45	954,31	49,00

A figura 4.14 exhibe a diferença da energia potencial de todas as transições que contribuem para o perfil de linha de Lyman- δ . E na figura 4.15 os momentos de dipolo elétrico dessas transições. A figura 4.16 mostra o perfil de Lyman- δ calculado para a temperatura de T=10 000 K e uma densidade de perturbadores (prótons) de $n_H^+ = 10^{17}$ cm⁻³. O satélite mais proeminente no perfil de linha de Lyman- δ surge em $\lambda = 964.56$ Å devido a colisões de átomos de H com prótons formando temporariamente a molécula de H₂⁺.

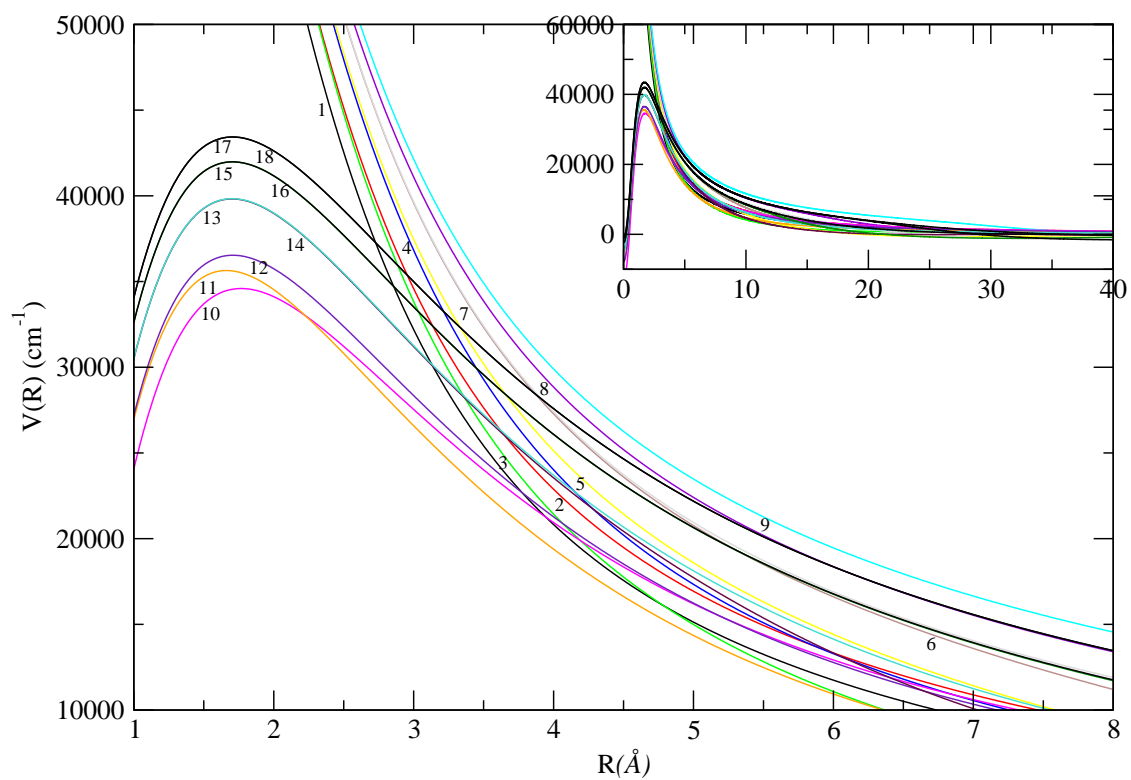


Figura 4.14: Diferença da energia potencial das transições permitidas de Lyman- δ , em função da distância interatômica do H_2^+ .

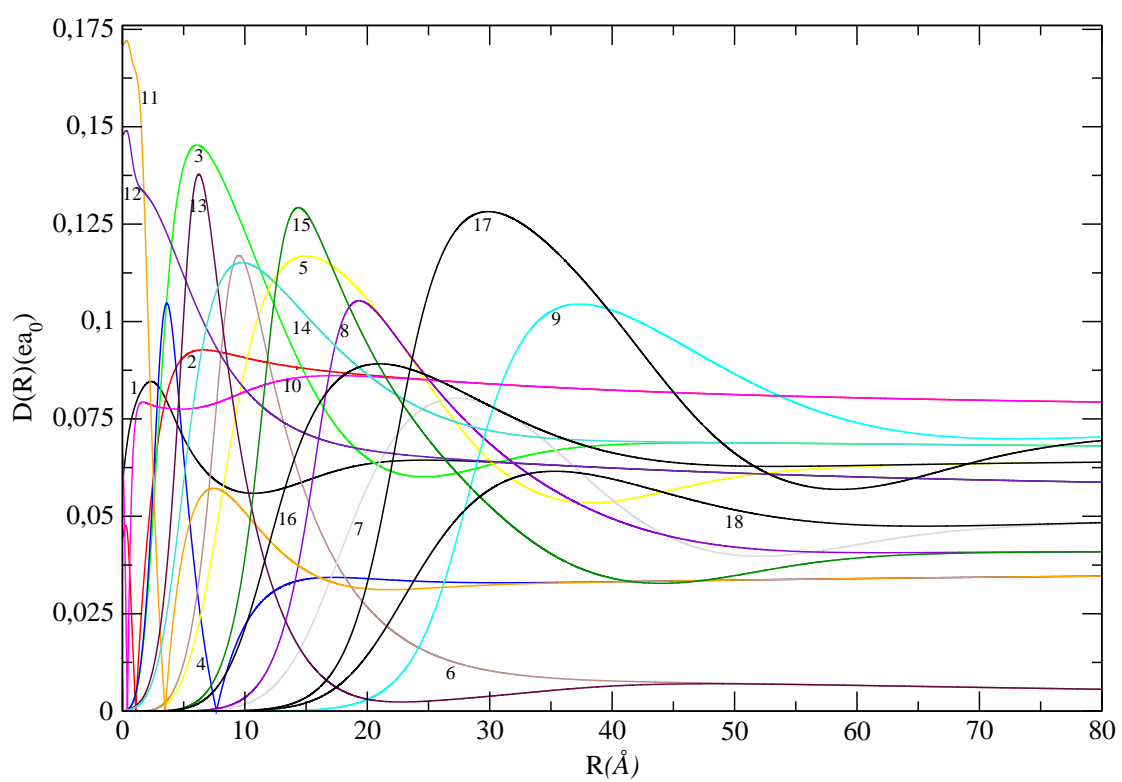


Figura 4.15: Momentos de dipolo elétrico das transições de Lyman- δ devido ao átomo de H perturbado por colisões com prótons. O valor de $D(R)$ está em unidades atômicas.

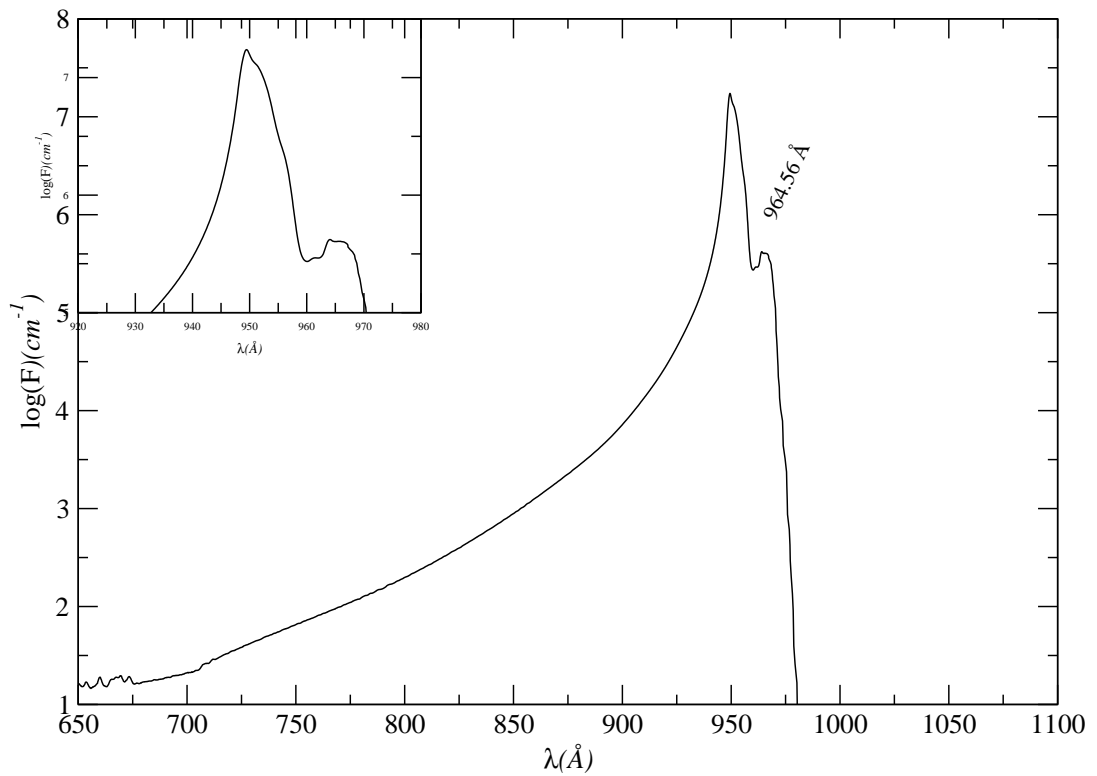


Figura 4.16: Perfil de linha de Lyman- δ calculado para $T=10\,000\text{ K}$ e uma densidade de prótons de $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$.

4.3.5 Série de Lyman

Como uma síntese dos perfis de Lyman, apresentamos nas figuras 4.17 e 4.18 a soma dos perfis de Ly α até Ly δ .

Na figura 4.17 são exibidos os perfis que foram calculados, Ly α , Ly β , Ly γ e Ly δ para uma temperatura de T=10 000 K e uma densidade de perturbadores de $n_H^+ = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Essa figura é similar à figura 3 publicada por Hébrard et al. (2003), mostrando que os cálculos e aproximações aqui executadas são consistentes com os dados atualmente publicados, mas Hébrard et al. (2003) não havia publicado o perfil de linha de Ly δ . A inserção do perfil de linha de Ly δ torna a nossa figura mais completa do que a figura 3 de Hébrard et al. (2003).

A figura 4.18 exhibe os perfis teóricos do H $_2^+$ e os perfis Stark para a temperatura T=10 000 K e densidade de perturbadores de $n_H^+ = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Observa-se que o perfil gerado pelo alargamento Stark não apresenta os satélites nas asas das linhas, que já foram observados.

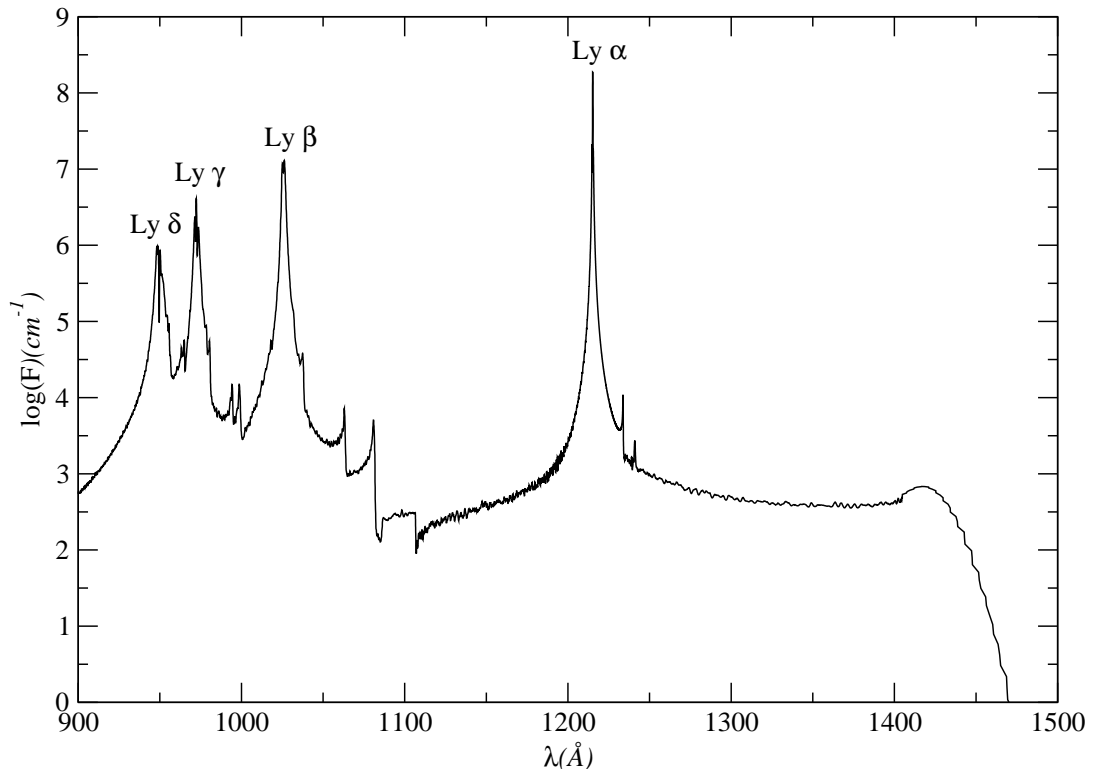


Figura 4.17: Perfil total de Lyman- α , Lyman- β , Lyman- γ e Lyman- δ do H perturbado por prótons ($n_H^+ = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) para uma temperatura de T=10 000K.

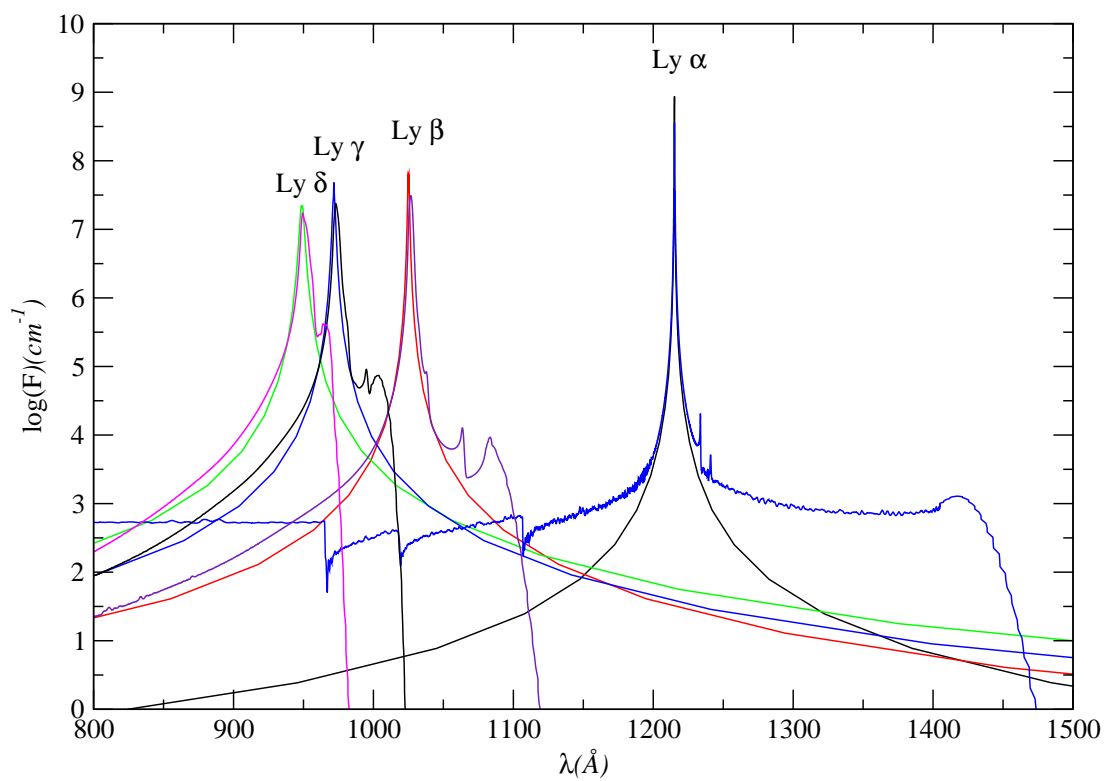


Figura 4.18: Perfil total teórico de Lyman- α , Lyman- β , Lyman- γ e Lyman- δ do H perturbado por prótons ($n_H^+ = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) para uma temperatura de $T=10\,000\text{K}$ do H_2^+ juntamente com os respectivos perfis calculados para o alargamento Stark para a mesma temperatura e densidade de perturbadores.

4.3.6 Balmer- α

O perfil total de Balmer- α depende de 32 transições moleculares do íon molecular H_2^+ , mas nem todas as transições produzem satélites nas asas do perfil de linha de Balmer. As transições que geram possíveis satélites nas asas do perfil de linha de $H\alpha$ são listadas na tabela 4.5. Dentre essas transições, as transições $5g\sigma_g-4f\sigma_u$ e $4f\pi_u-3d\pi_g$ são responsáveis pela formação do satélite em $\lambda = 8\,650 \text{ \AA}$ na asa vermelha do perfil de linha de Balmer- α , confirmado via observações em laboratório, ao medir o espectro do plasma produzido por laser (Kielkopf et al., 2002). Na figura 4.19 estão plotados os momentos de dipolos das transições moleculares listadas na tabela 4.5 que contribuem para a formação do perfil de linha de $H\alpha$.

Tabela 4.5: Satélites de Balmer- α devido à colisões de H com H^+ na distância internuclear R para a qual um extremo na diferença dos potenciais da transição ocorre.

Nº	Nível superior	Nível inferior	$\Delta\nu_{H_2^+} (cm^{-1})$	$\lambda_{H_2^+} (\text{\AA})$	$R (\text{\AA})$
1	$5g\sigma_g$	$4f\sigma_u$	-3 844,18	8 783,59	13,10
			4 956,58	4 954,01	5,60
2	$5g\sigma_g$	$2p\pi_u$	-4 996,57	9 772,81	12,66
3	$6h\sigma_u$	$3d\sigma_g$	40 925,21	1 780,80	3,17
			-702,54	6 883,97	23,03
4	$4f\pi_u$	$3d\sigma_g$	-1 271,27	7 164,46	13,13
			2 379,73	2 562,34	3,06
5	$4d\sigma_g$	$3p\sigma_u$	-3 214,16	8 323,01	6,47
			12 145,77	3 652,99	1,01
6	$4f\pi_u$	$3d\pi_g$	-3 658,85	8 642,89	9,33
			7 163,74	4 465,72	1,69
7	$4f\pi_u$	$2s\sigma_g$	-5 245,35	10 016,33	8,69
			37 537,98	1 895,12	1,00
8	$5f\sigma_u$	$2s\sigma_g$	-424,84	6 754,83	15,47
9	$6h\sigma_u$	$2s\sigma_g$	-1 500,75	7 284,22	20,33
10	$4d\sigma_g$	$2p\pi_u$	-634,82	6 852,02	10,20
11	$5g\pi_g$	$2p\pi_u$	-601,70	6 836,51	18,74
12	$5g\sigma_g$	$3p\sigma_u$	-6 042,60	10 885,60	12,08
			23 287,20	2 596,30	1,18
13	$5g\pi_g$	$3p\sigma_u$	-1 130,91	7 093,14	16,58
			23 303,15	2 595,23	1,18
14	$6h\sigma_u$	$3d\pi_g$	-1 117,22	7 086,25	21,38
			23 163,48	2 604,67	2,10

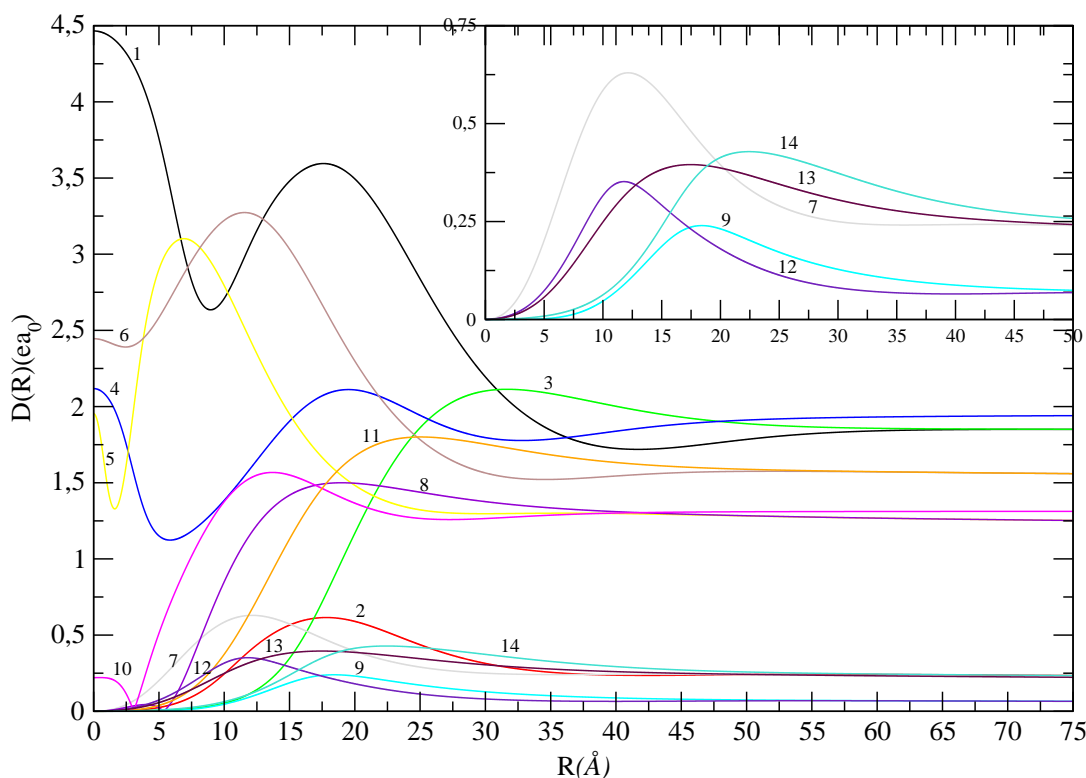


Figura 4.19: Momentos de dipolo elétrico das transições que contribuem para formação dos satélites no perfil de linha de Balmer α , devido ao átomo de Hidrogênio perturbado por prótons. As transições plotadas aqui estão listadas na tabela 4.5. O valor de $D(R)$ está dado em unidades atômicas.

A figura 4.20 exibe uma comparação entre o perfil calculado por Koester (2011) a partir de uma aproximação de alargamento Stark usando os dados obtidos por VCS (Vidal et al., 1973), para uma temperatura $T=12\,000$ K e densidade de perturbadores $n_H^+=10^{16}\text{cm}^{-3}$, e o perfil calculado a partir de uma aproximação quase estática, usando potenciais teóricos precisos do íon molecular H_2^+ , calculado para a mesma temperatura e densidade. Entretanto, há a necessidade de observar que a aproximação de alargamento Stark considera a interação envolvendo prótons da mesma forma que elétrons e assume um fator multiplicativo de 2 vezes para incluir a interação com prótons. Logo, os perfis possuirão uma discrepância da ordem de 0.3 na escala das ordenadas (logaritmo de 2 na base 10). Observa-se também que em altas energias ambos os perfis coincidem assintoticamente, enquanto, devido a possível formação de moléculas, em baixa energia surgem discrepâncias entre os perfis.

O perfil de linha de Balmer- α foi calculado para uma temperatura de $10\,000$ K e densidade de prótons de 10^{17}cm^{-3} e está representado na figura 4.21.

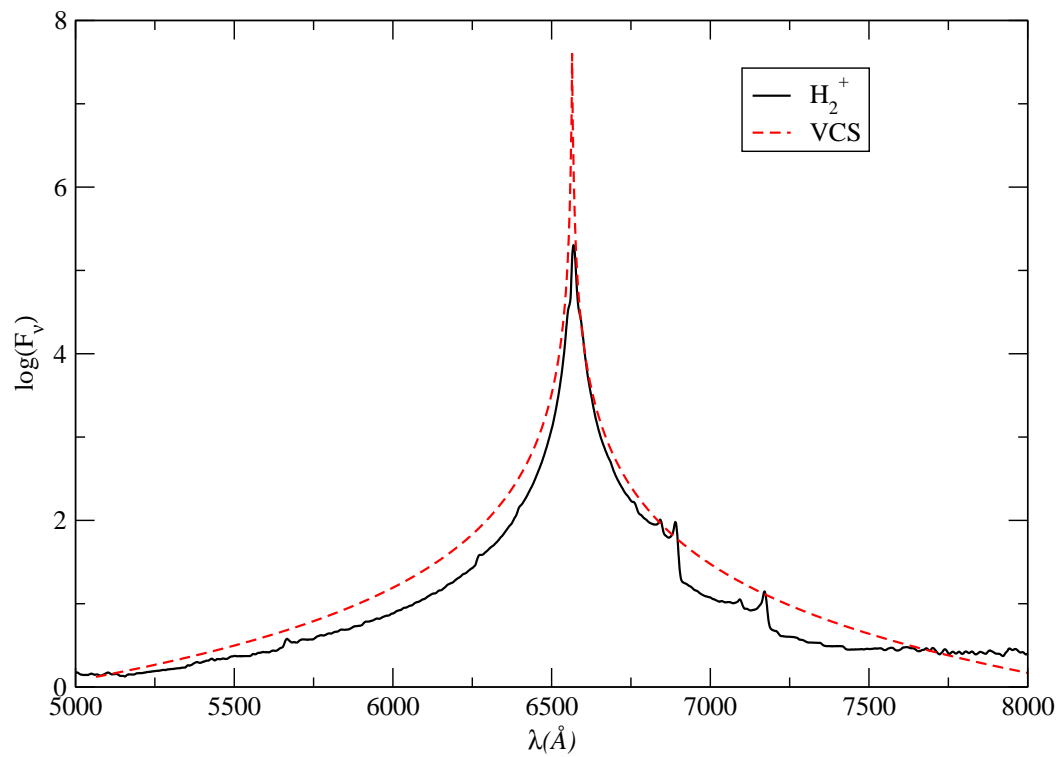


Figura 4.20: Comparação entre o perfil de Balmer- α do H_2^+ com o perfil de VCS - alargamento eletrônico Stark (Koester (2011)), para $T=12\,000$ K e densidade de 10^{16} cm^{-3} .

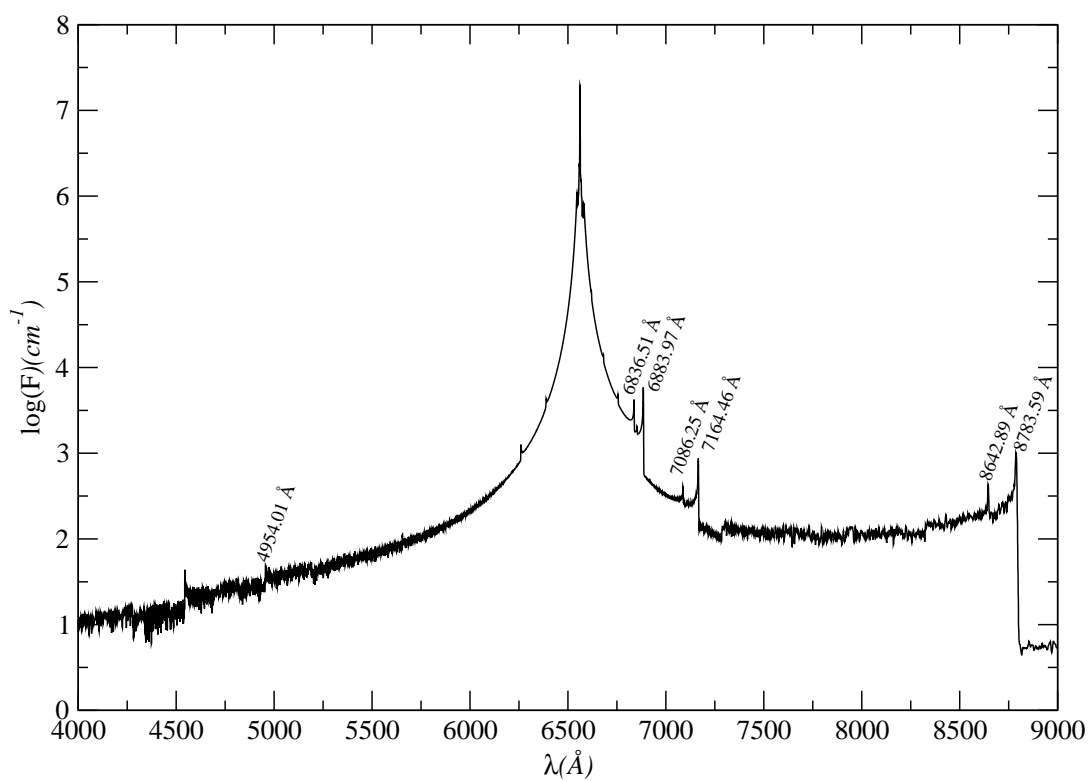


Figura 4.21: Perfil de linha de Balmer- α calculado para uma temperatura de 10 000 K e densidade de prótons de 10^{17} cm^{-3} . Estão indicados na imagem alguns dos satélites calculados bem como o satélite $\lambda = 8650 \text{ \AA}$ encontrado em laboratório (Kielkopf et al., 2002)

4.3.7 Balmer- β

O perfil de linha de Balmer- β depende de 46 transições moleculares permitidas do H_2^+ . Dentre as 46 transições, 17 transições possuem valores extremos, ou seja, produzem possíveis satélites no perfil de linha e estão listadas na tabela 4.6, juntamente com a distância internuclear onde o satélite é gerado e o respectivo comprimento de onda de cada um deles. A figura 4.22 exibe os momentos de dipolo elétrico de cada uma das transições listadas na tabela 4.6. É importante salientar que todos os valores listados na tabela 4.6 e na figura 4.22 são inéditos, jamais publicados para tais transições. Esses valores dos potenciais e momentos de dipolo elétrico do íon molecular H_2^+ somente foram publicados em nosso artigo (Santos & Kepler, 2012). O perfil de linha calculado de Balmer- β é mostrado na figura 4.23 para a temperatura $T=10\,000$ K e densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$. A figura 4.24 exibe o perfil de linha de Balmer- β para a temperatura $T=13\,526$ K e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ de um experimento Z-pinch realizado nos laboratórios Sandia (Sandia National Laboratories - USA) como descrito por Falcon et al. (2010). A figura 4.25 mostra o perfil de linha de Balmer β que calculamos para a mesma temperatura e densidade do experimento Z-pinch. Observa-se que o perfil teórico possui uma depressão central assimétrica similar ao perfil experimental mostrado na figura 4.24. De acordo com Wiese et al. (1972), o VCS, ou seja, o alargamento Stark não consegue reproduzir a assimetria do pico central, já observado naquela época, mas somente a depressão central, o que pode ser observado nas figuras 4.26 e 4.27. A figura 4.28 exibe o perfil de linha linear de Balmer- β teórico para a temperatura $T=13\,526$ K e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ do H_2^+ somado ao perfil Stark e convoluídos com o efeito Doppler. A figura 4.29 mostra a sobreposição das figuras 4.24 e 4.28, onde observa-se que a assimetria no experimento Z-pinch é produzida pela formação de quase moléculas H_2^+ durante a colisão entre $H-H^+$.

Tabela 4.6: Satélites de Balmer β devidos às colisões do átomo de H com H^+ na distância internuclear R .

Nº	Nível superior	Nível inferior	$\Delta\nu_{H_2^+}$ (cm^{-1})	$\lambda_{H_2^+}$ (\AA)	R (\AA)
1	$5f\pi_u$	$2s\sigma_g$	-992,00	5 110,59	13,83
2	$6h\pi_u$	$2s\sigma_g$	-2 674,11	5 591,24	19,90
3	$5g\delta_g$	$2p\pi_u$	-1 466,46	5 237,59	16,80
4	$6g\sigma_g$	$2p\pi_u$	-1 483,16	5 242,17	17,74
5	$6g\sigma_g$	$3p\sigma_u$	-2 040,74	5 400,01	16,50
			23 365,48	2 276,62	1,19
6	$7i\sigma_g$	$3p\sigma_u$	-2 977,17	5 687,62	24,59
			26 648,74	2 118,28	1,19
7	$7i\pi_g$	$3p\sigma_u$	-816,65	5 065,20	29,99
			26 649,62	2 118,24	1,19
8	$6h\pi_u$	$3d\sigma_g$	-1 811,98	5 334,12	21,66
			35 621,24	1 779,97	3,17
9	$8j\sigma_u$	$3d\sigma_g$	-381,85	4 956,05	29,99
			41 130,19	1 621,02	3,19
10	$5f\pi_u$	$3d\pi_g$	-285,48	4 932,49	16,46
			12 088,84	3 062,96	1,91
11	$6h\pi_u$	$3d\pi_g$	-2 269,96	5 467,69	20,64
			17 843,96	2 603,95	2,11
12	$6h\delta_u$	$3d\pi_g$	-308,92	4 938,20	28,53
			17 875,84	2 601,79	2,13
13	$7h\sigma_u$	$3d\pi_g$	-302,86	4 936,72	29,57
			21 106,24	2 400,06	2,12
14	$8j\sigma_u$	$3d\pi_g$	-853,70	5 074,72	36,03
			23 255,19	2 282,35	2,15
15	$5d\sigma_g$	$4f\sigma_u$	-11 612,48	11 177,27	1,95
			3 925,46	4 084,18	8,17
16	$6g\sigma_g$	$4f\sigma_u$	-878,51	5 081,12	20,00
			6 602,41	3 681,66	6,08
17	$7i\pi_g$	$4f\sigma_u$	-405,68	4 961,91	29,99
			12 418,51	3 032,34	6,81

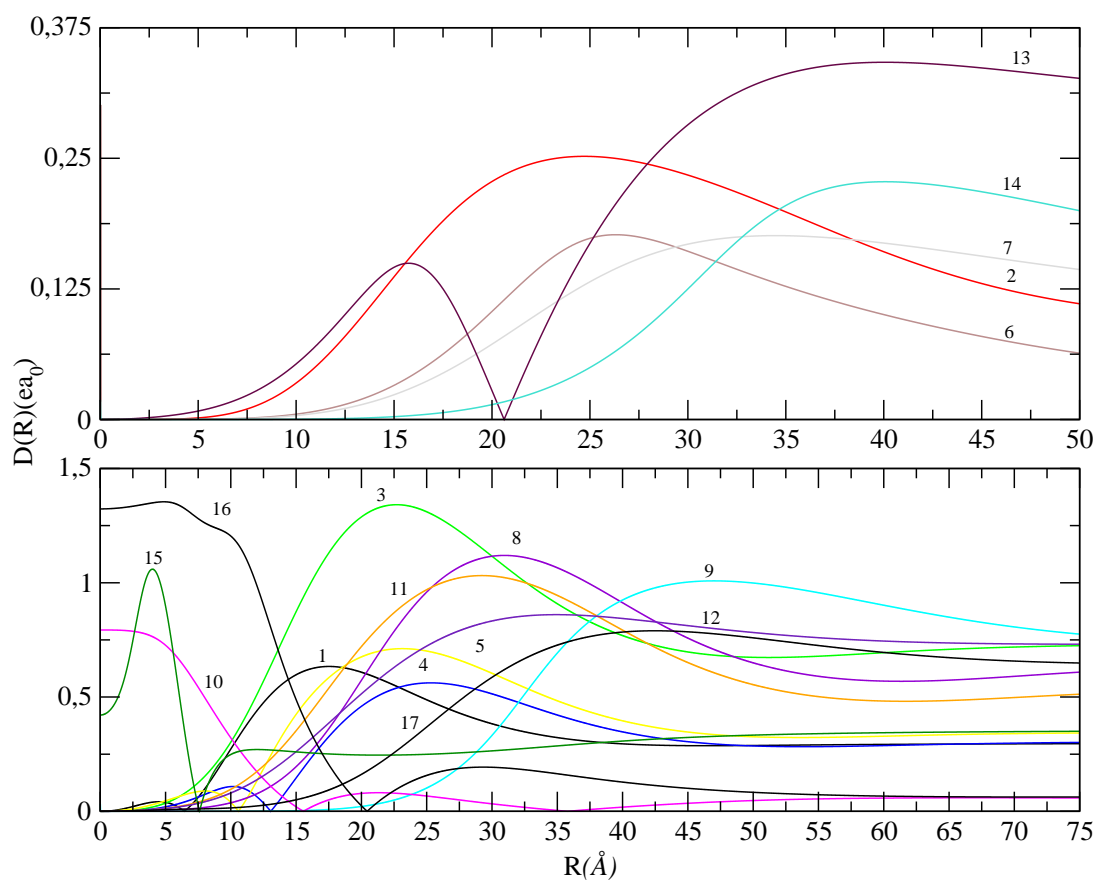


Figura 4.22: Momentos de dipolo elétrico das transições responsáveis pela formação de satélites no perfil de linha de Balmer- β devido à perturbação do átomo de H por prótons. As transições plotadas aqui estão listadas na tabela 4.6. E os valores de $D(R)$ são dados em unidades atômicas.

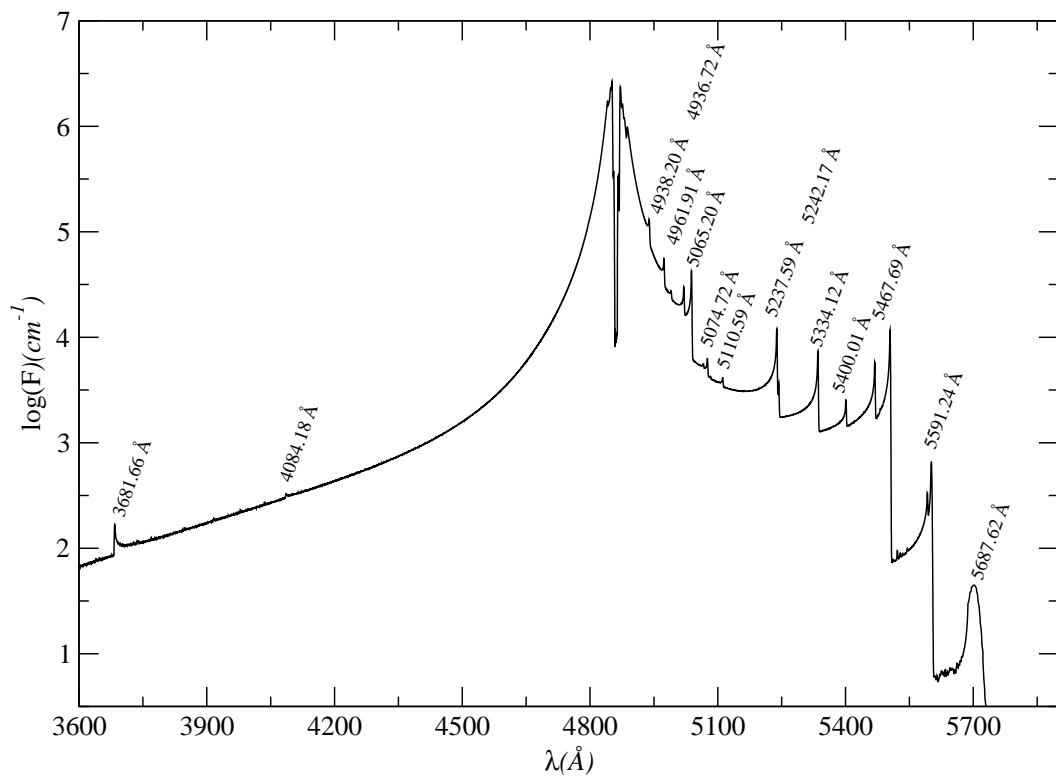


Figura 4.23: Perfil de linha de Balmer- β calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$.

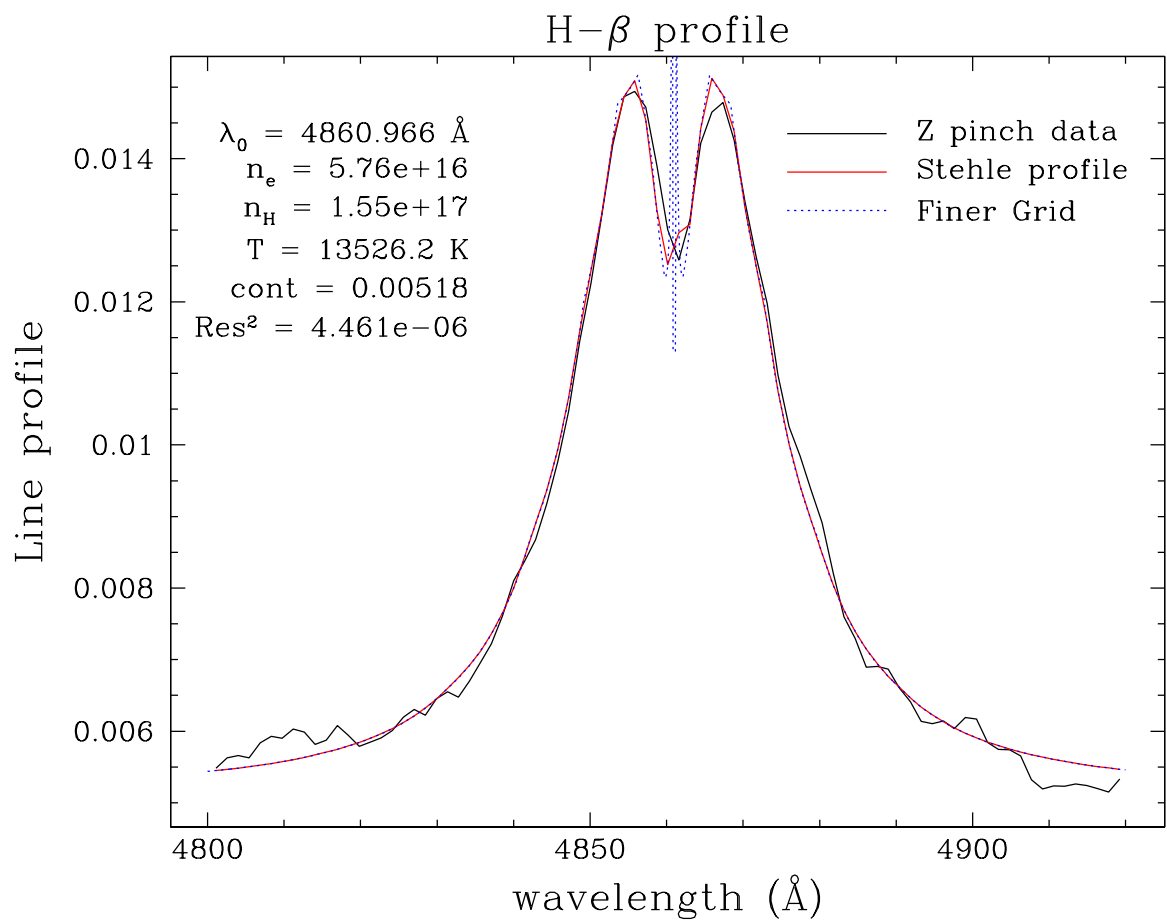


Figura 4.24: Perfil de linha de Balmer- β para a temperatura $T=13\,526 \text{ K}$ e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ de um experimento Z-pinch, como observado por Falcon et al. (2010).

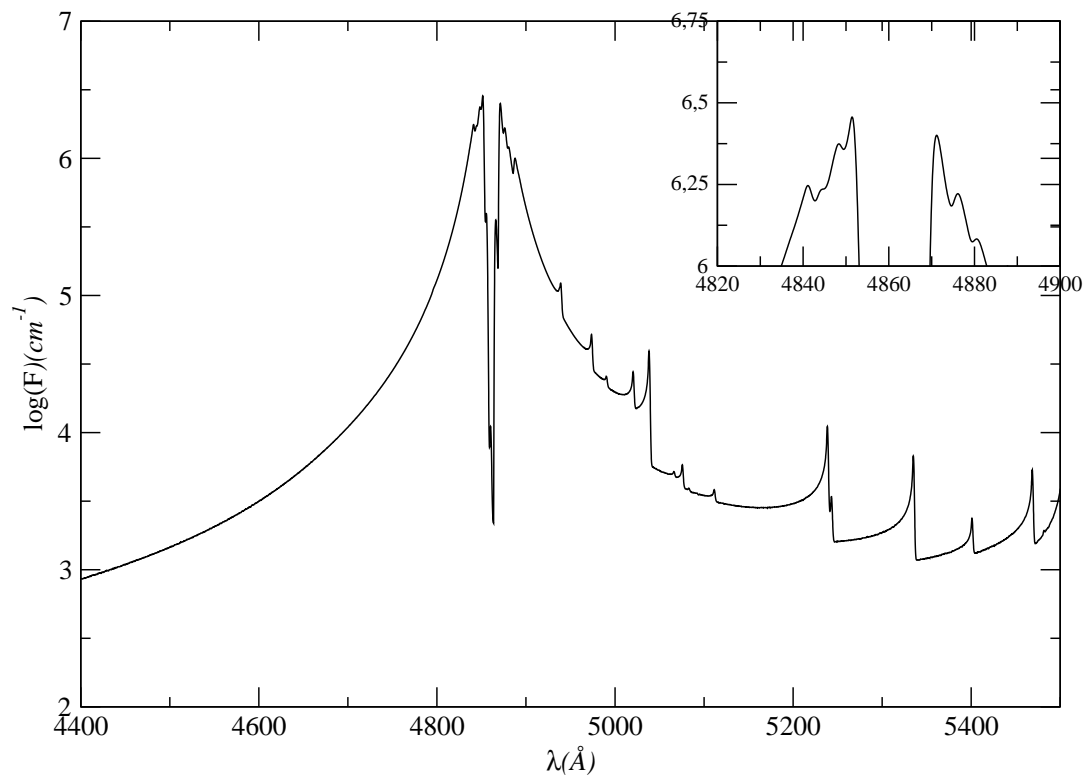


Figura 4.25: Perfil de linha de Balmer- β teórico somente do efeito de $H - H^+$ para a temperatura $T=13\,526$ K e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$. A janela no topo direito mostra uma expansão do pico central, mostrando a assimetria.

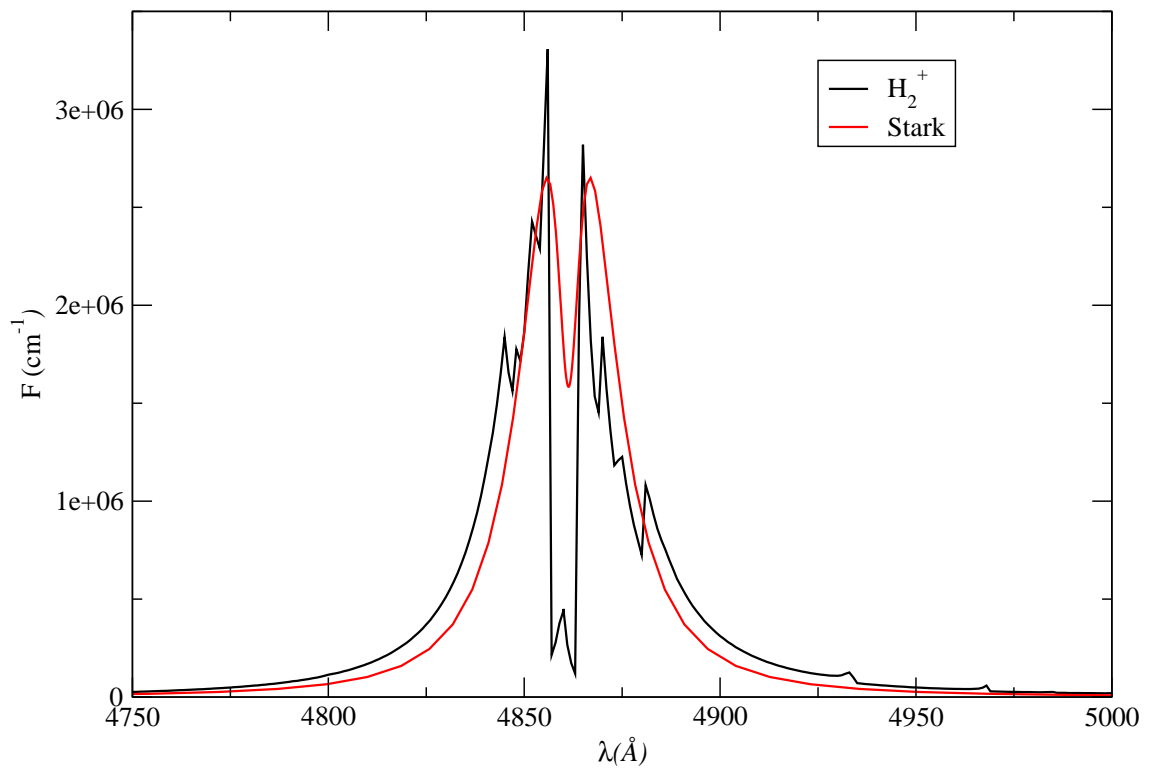


Figura 4.26: Perfil de linha linear de Balmer- β teórico para a temperatura $T=13\,526$ K e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ do H_2^+ juntamente com o perfil Stark.

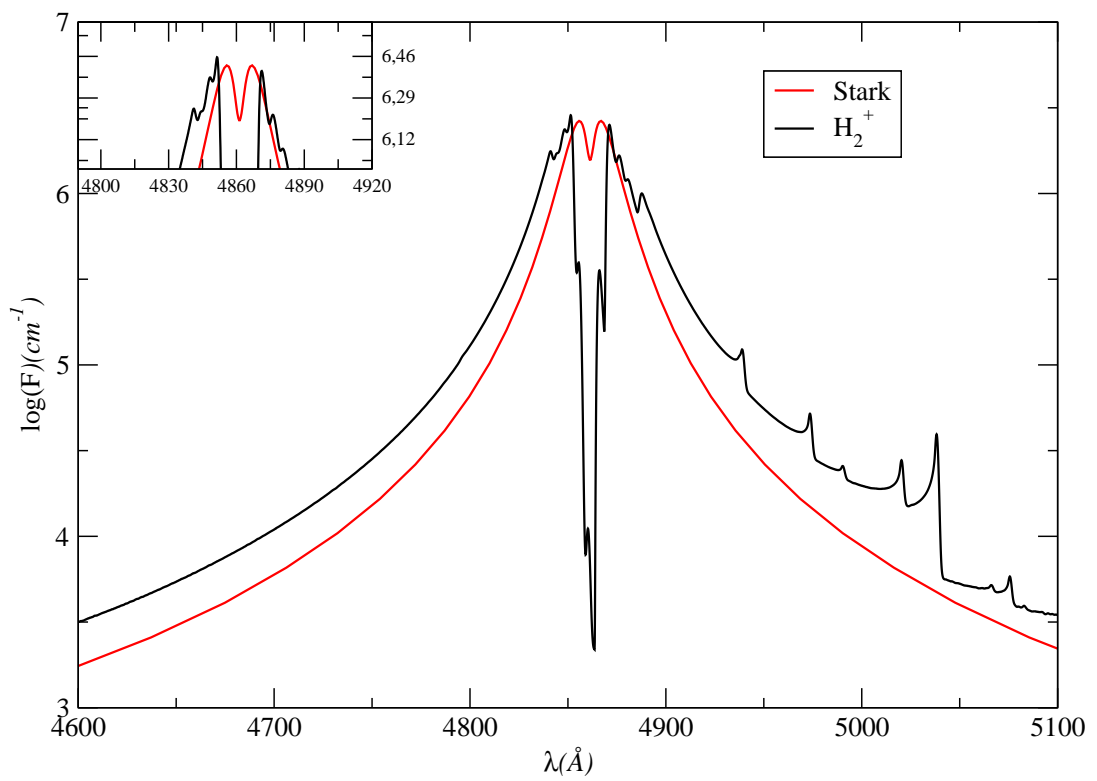


Figura 4.27: Perfil de linha de Balmer- β teórico para a temperatura $T=13\,526\text{ K}$ e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16}\text{ cm}^{-3}$ do H_2^+ juntamente com o perfil Stark.

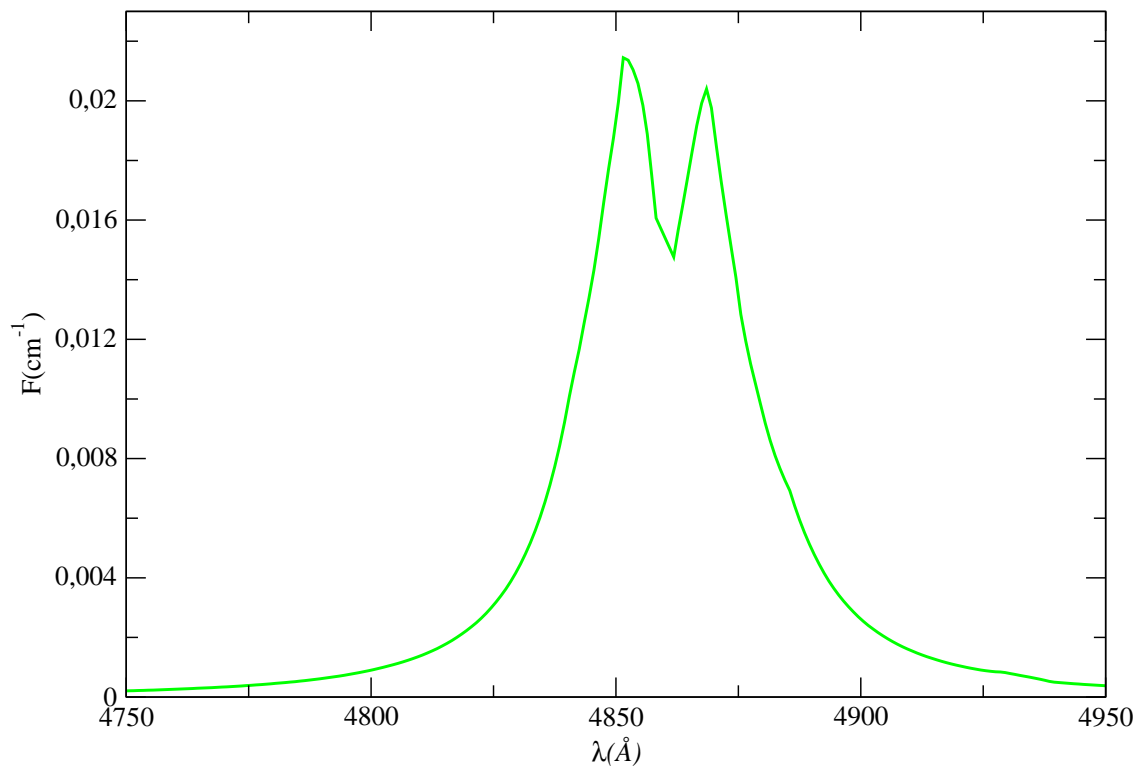


Figura 4.28: Perfil de linha linear de Balmer- β teórico para a temperatura $T=13\,526$ K e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ do H_2^+ somado com o perfil Stark convoluídos com o efeito Doppler.

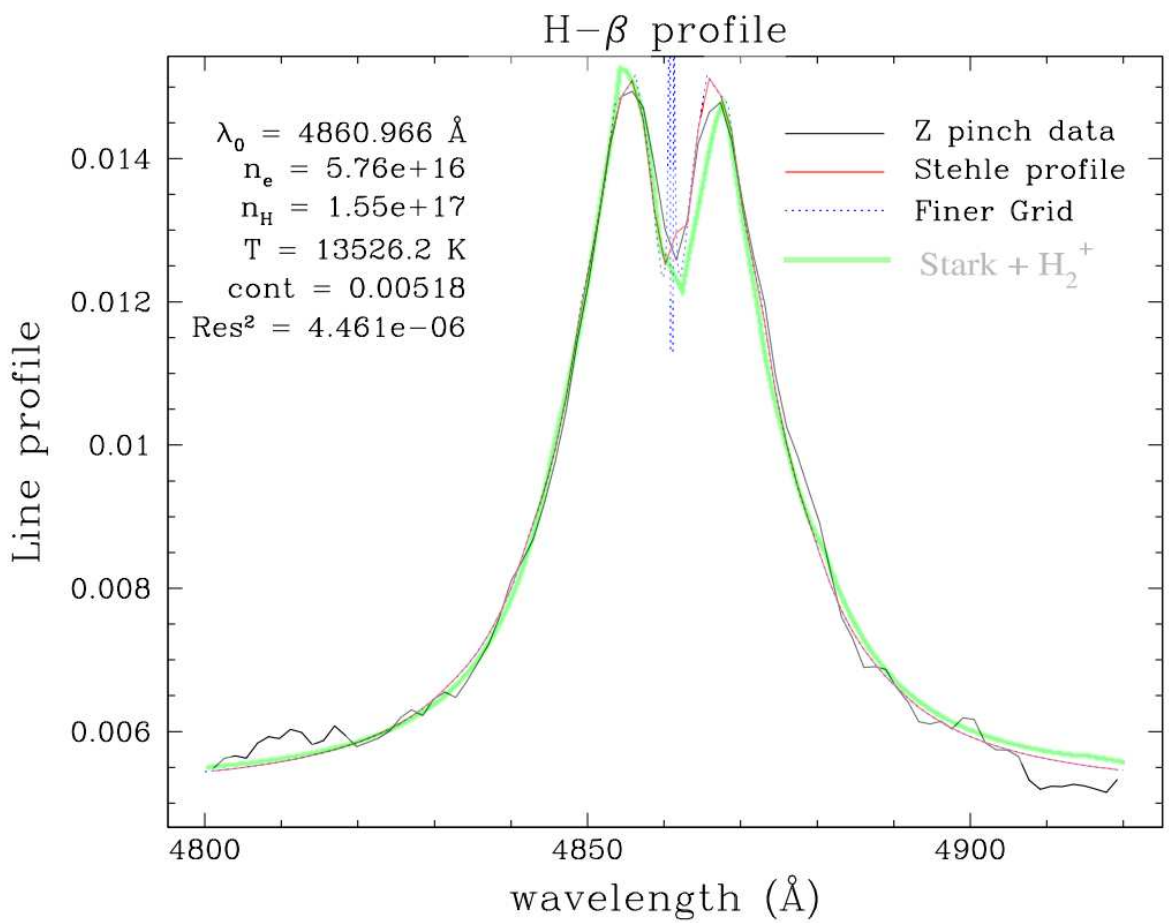


Figura 4.29: Perfil de linha de Balmer- β para a temperatura $T=13\,526 \text{ K}$ e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ de um experimento Z-pinch, como observado por Falcon et al. (2010) e sobreposto ao mesmo o perfil de linha linear de Balmer- β teórico para a temperatura $T=13\,526 \text{ K}$ e densidade de perturbadores $n_p = 5,76 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ do H_2^+ juntamente com o perfil Stark convoluídos com o efeito Doppler. As linhas Stehle e Finer Grid foram calculadas por Michael H. Montgomery com o programa *hlinfit_lemke.f90* .

4.3.8 Balmer- γ

O perfil total da linha de Balmer- γ depende de 60 transições moleculares do H_2^+ . O perfil de linha teórico mostrado na figura 4.30 foi calculado para a temperatura $T=10\,000$ K e para a densidade de perturbadores (prótons) $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

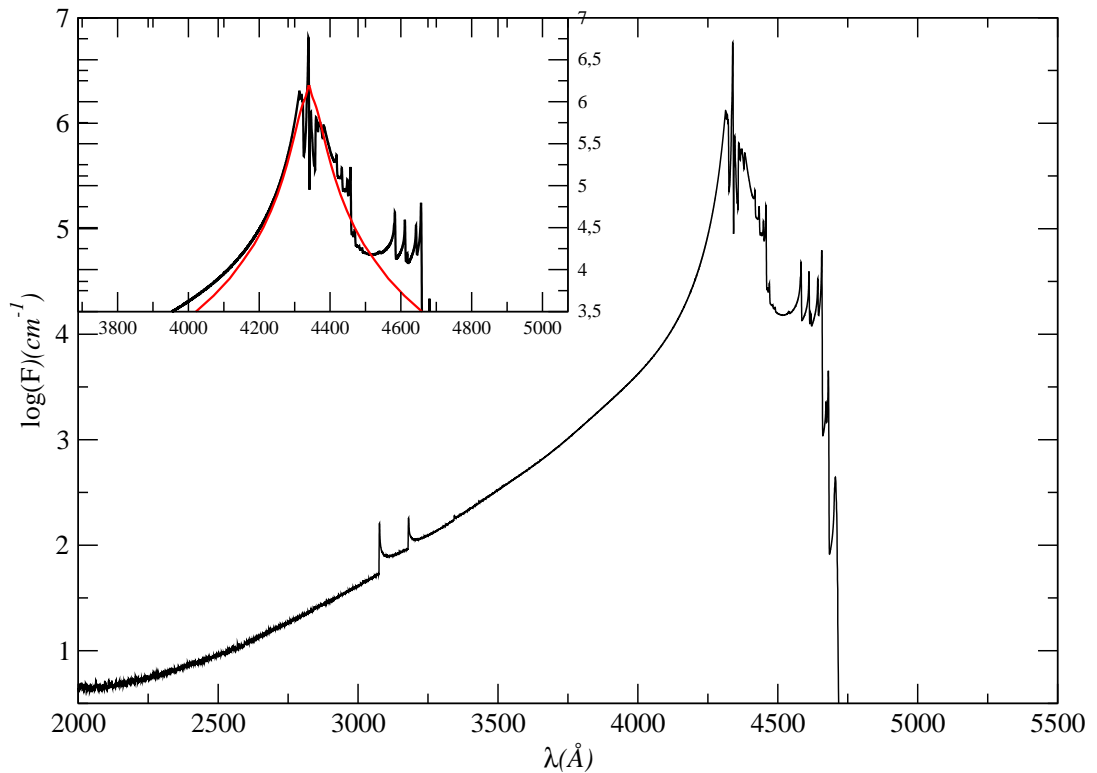


Figura 4.30: Perfil de linha de Balmer- γ calculado para a temperatura $T=10\,000$ K e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

Observando a figura 4.31, a assimetria é clara e vai alterar os cálculos de opacidades.

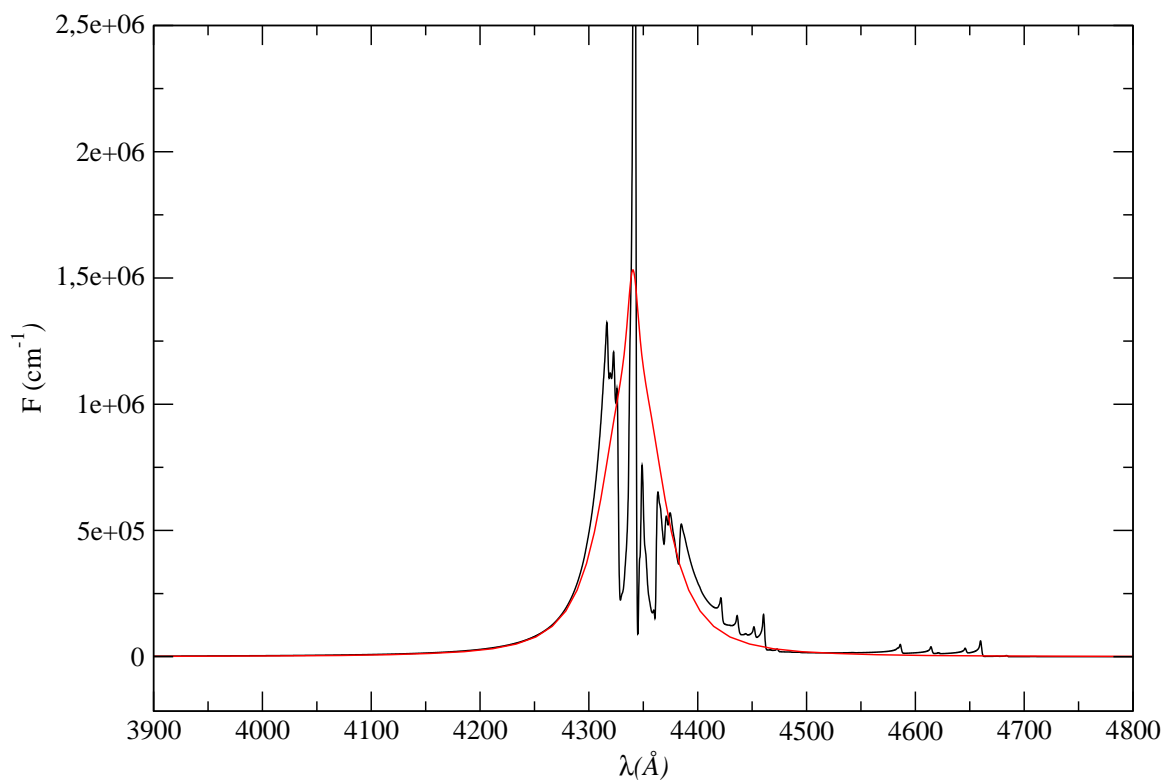


Figura 4.31: Perfil de linha linear de Balmer- γ calculado para a temperatura $T=10\,000$ K e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ do H_2^+ em comparação com o perfil Stark para mesma temperatura e densidade de perturbadores.

4.3.9 Balmer- δ

O perfil de Balmer- δ é obtido a partir de 74 transições moleculares do íon H_2^+ . O perfil de linha teórico foi calculado para a temperatura de 10 000 K e uma densidade de $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ perturbadores (prótons) e está exibido na figura 4.32.

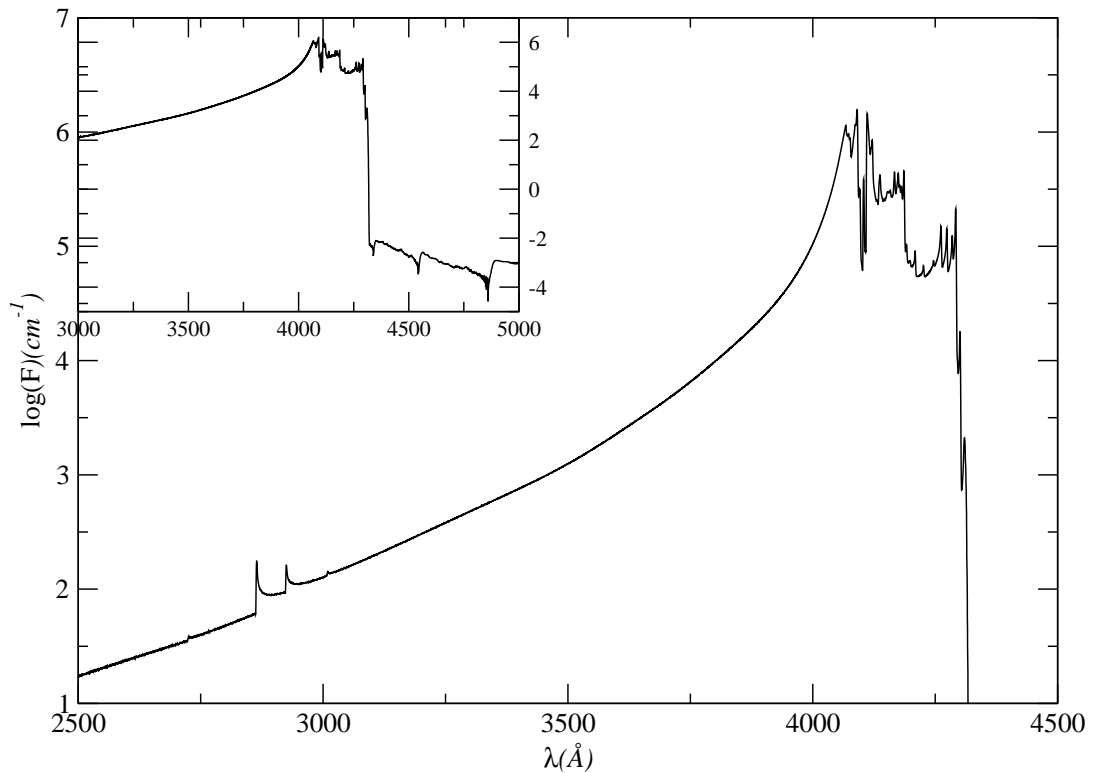


Figura 4.32: Perfil de linha de Balmer- δ calculado para a temperatura $T=10\,000$ K e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

4.3.10 Balmer- ϵ

O perfil de linha total de Balmer- ϵ depende de 88 transições moleculares do íon H_2^+ . A figura 4.33 exibe o perfil teórico calculado para a temperatura $T=10\,000$ K e densidade de perturbadores $n_p = 1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

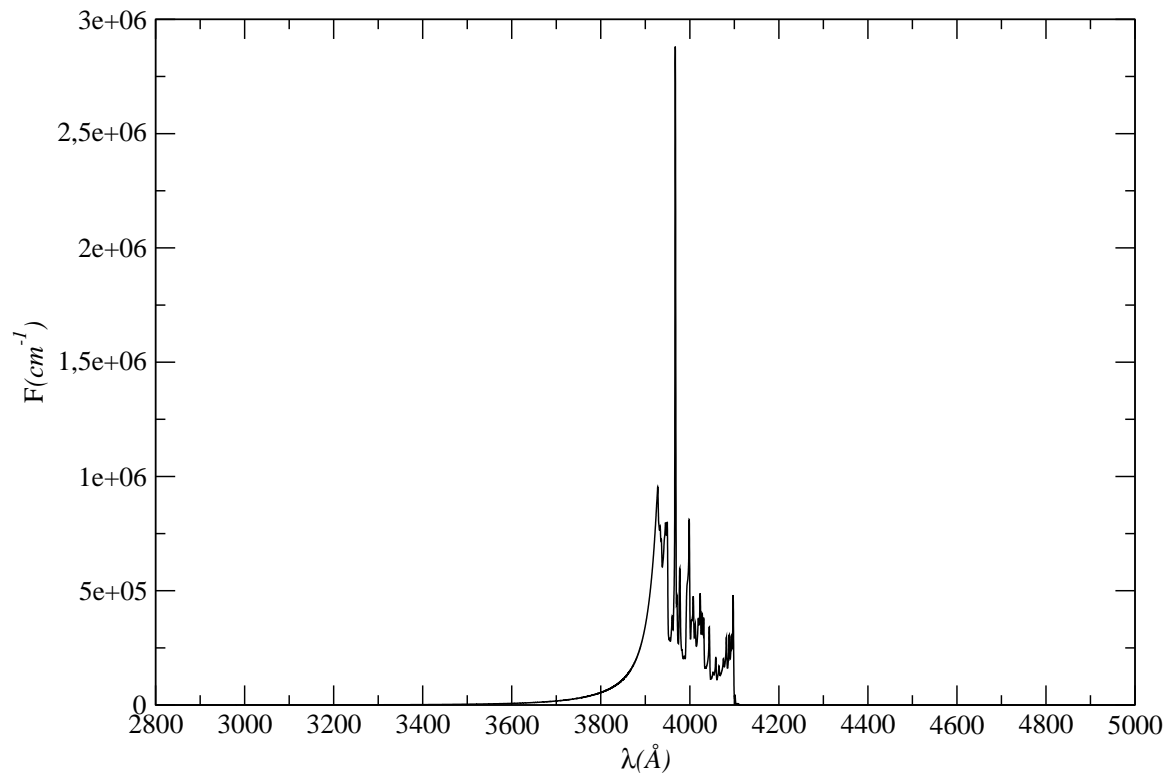


Figura 4.33: Perfil de linha de Balmer- ϵ calculado para a temperatura $T=10\,000$ K e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

4.3.11 Balmer-8

O perfil de linha total de Balmer-8 é gerado a partir de 102 transições moleculares do H_2^+ . Seu perfil teórico é mostrado na figura 4.34 e o mesmo foi calculado para uma temperatura $T=10\,000$ K e densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

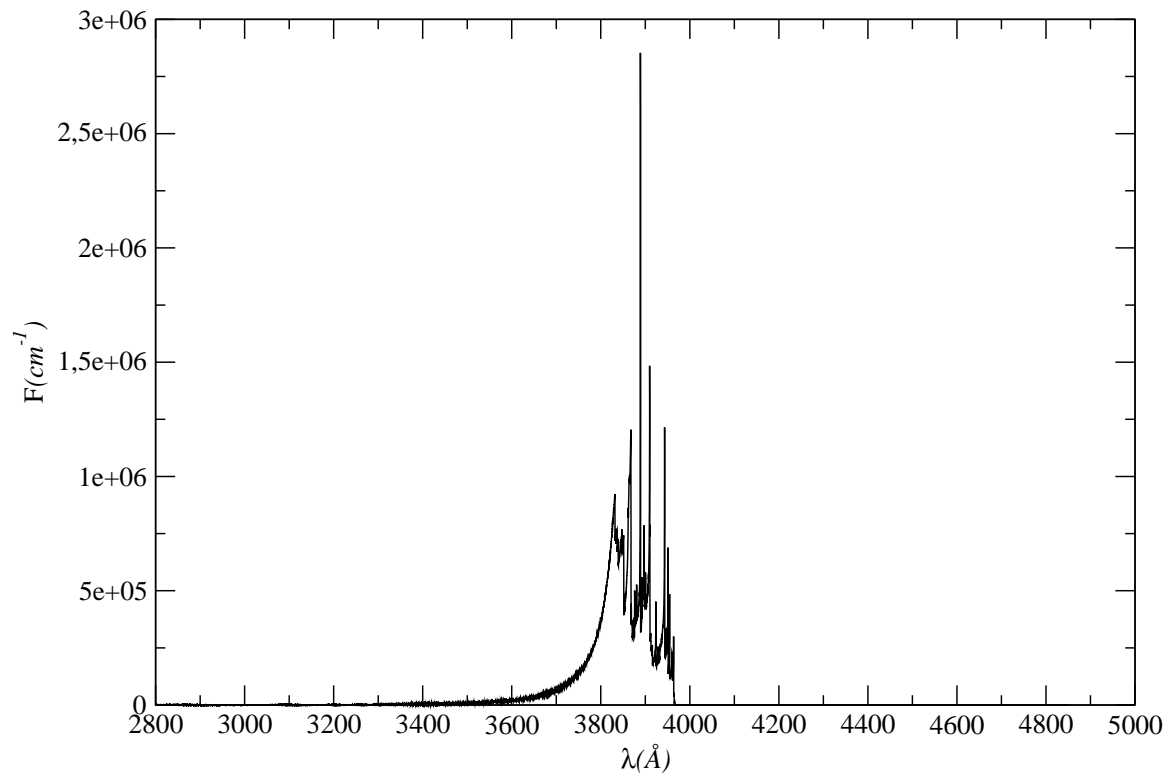


Figura 4.34: Perfil de linha de Balmer-8 calculado para a temperatura $T=10\,000$ K e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

4.3.12 Balmer-9

O perfil de linha total de Balmer-9 depende de 116 transições moleculares do íon H_2^+ . Seu perfil teórico foi calculado para a temperatura de $T=10\,000$ K e densidade de perturbadores $n_p = 1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$. A figura 4.35 exhibe o perfil teórico de Balmer-9 obtido.

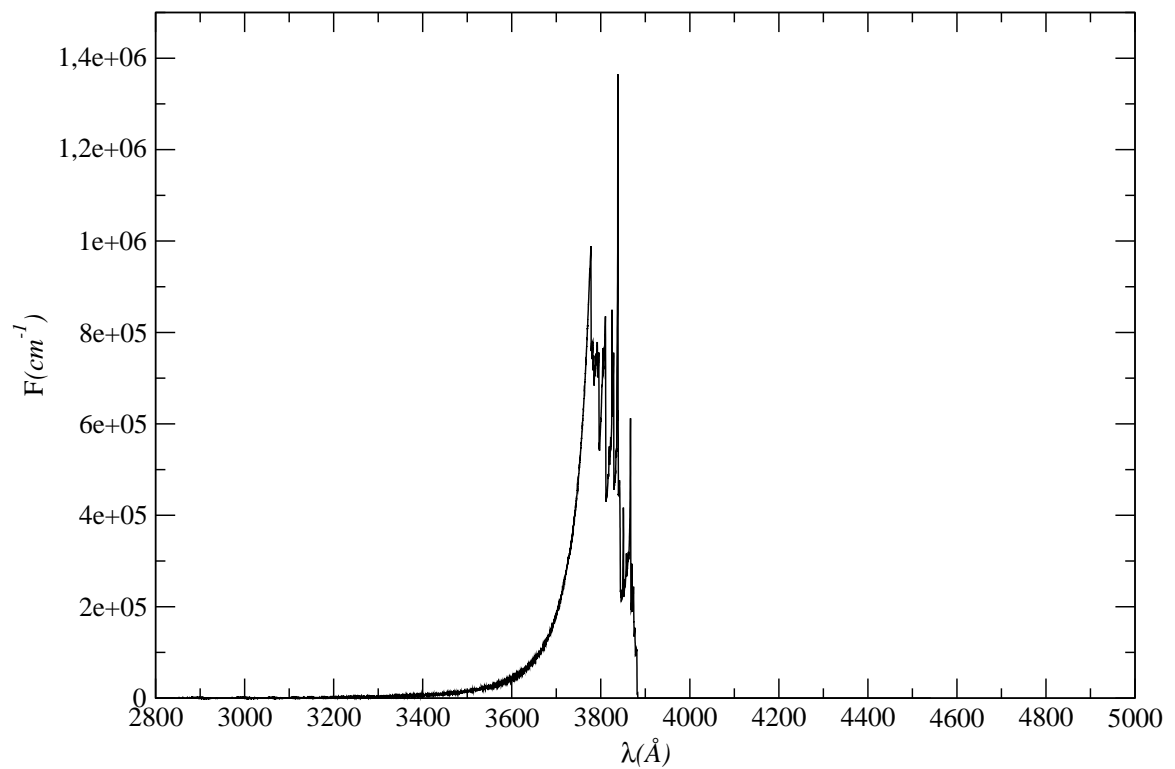


Figura 4.35: Perfil de linha de Balmer-9 calculado para a temperatura $T=10\,000$ K e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

4.3.13 Balmer-10

O perfil de linha total de Balmer-10 é obtido a partir de 130 transições moleculares do íon H_2^+ . O perfil teórico é plotado na figura 4.36 e foi calculado para a temperatura de $T=10\,000$ K e densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

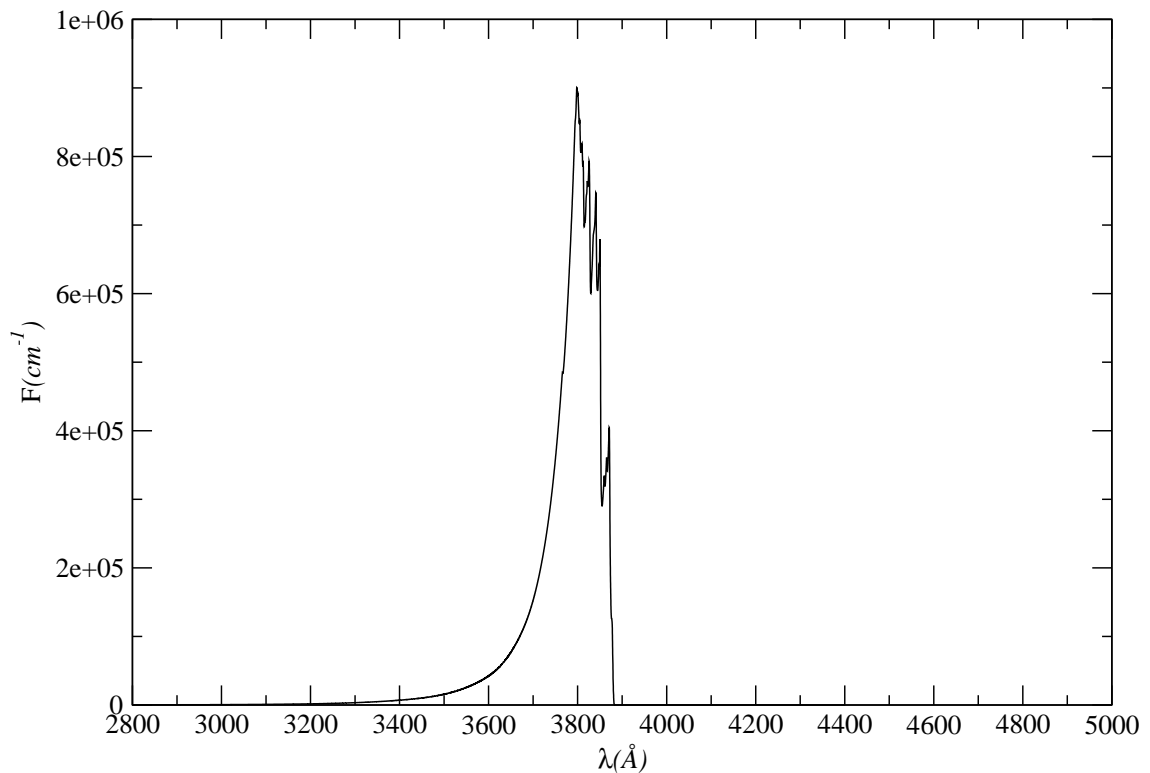


Figura 4.36: Perfil de linha de Balmer-10 calculado para a temperatura $T=10\,000$ K e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

4.3.14 Série de Balmer

Como uma síntese dos perfis de Balmer, apresentamos nas figuras seguintes a soma dos perfis de $H\alpha$ até $H10$, perturbados por colisões de hidrogênio com prótons para a temperatura de $T=10\,000\text{ K}$ e número de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$.

A figura 4.37 exhibe os perfis lineares dessa série.

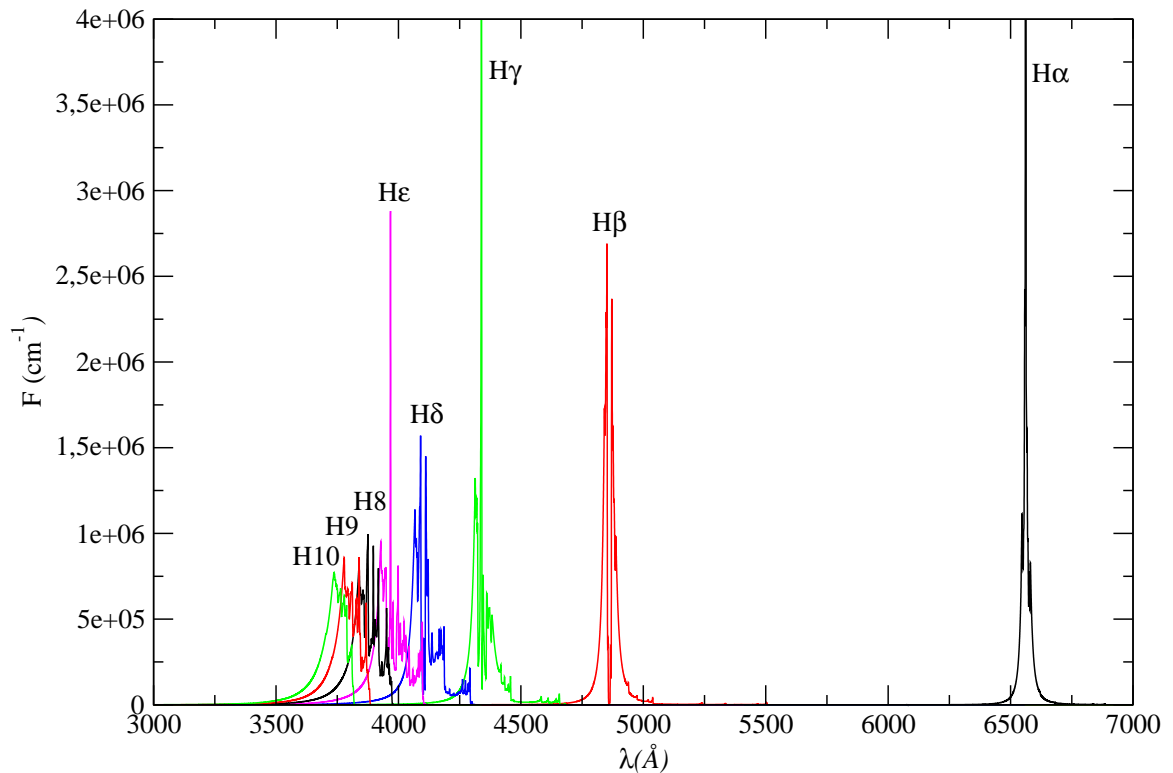


Figura 4.37: Contribuição do $H - H^+$ para o perfil de linha linear total de Balmer calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$.

Na figura 4.38 colocamos os perfis Stark juntamente com os perfis obtidos para o H_2^+ , para comparação.

A figura 4.39 exhibe os perfil de Balmer- α , Balmer- β , Balmer- γ , Balmer- δ , Balmer- ϵ , Balmer-8, Balmer-9 e Balmer-10 juntos para a mesma temperatura, ou seja, $T=10\,000\text{ K}$ e a mesma densidade de perturbadores $np = 10^{17}\text{ cm}^{-3}$. A normalização do perfil da figura 4.39 foi calculado para o perfil somado e não individual como na figura 4.38.

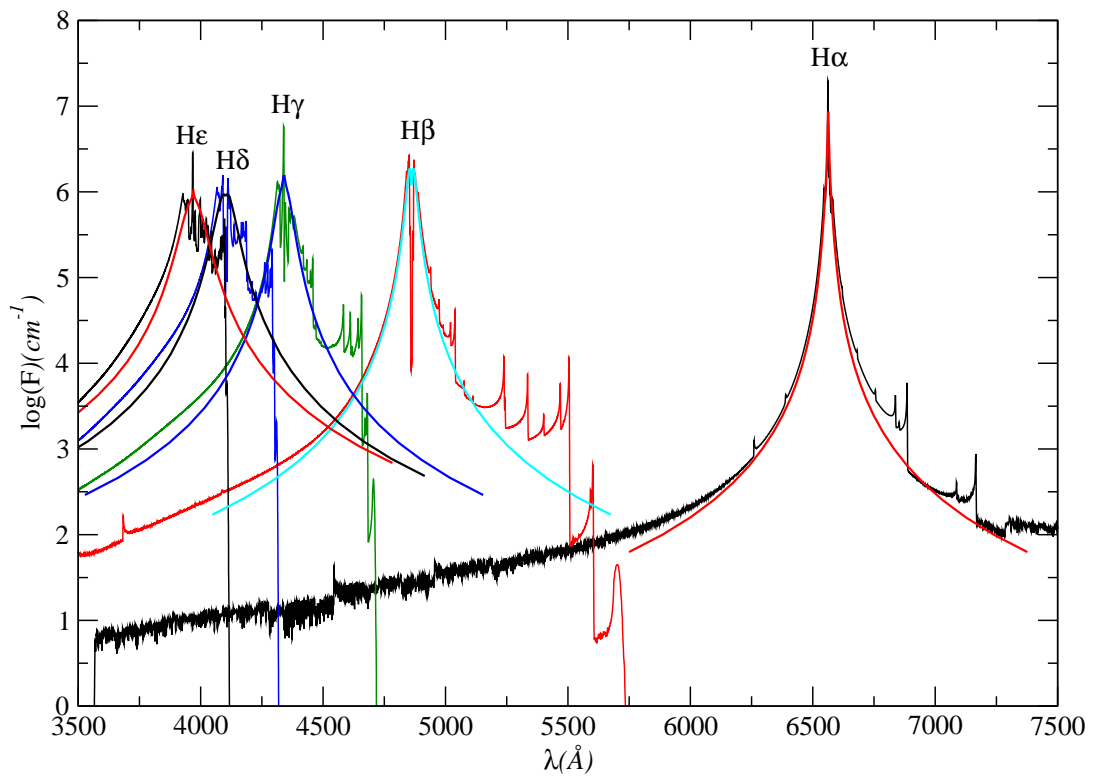


Figura 4.38: Contribuição do $H - H^+$ e do elétron (Stark) para o perfil de linha total de Balmer calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$ juntamente com o perfil de linha Stark, para a mesma temperatura e densidade de perturbadores (elétrons para o Stark). A normalização foi calculada para cada transição individual da série de Balmer.

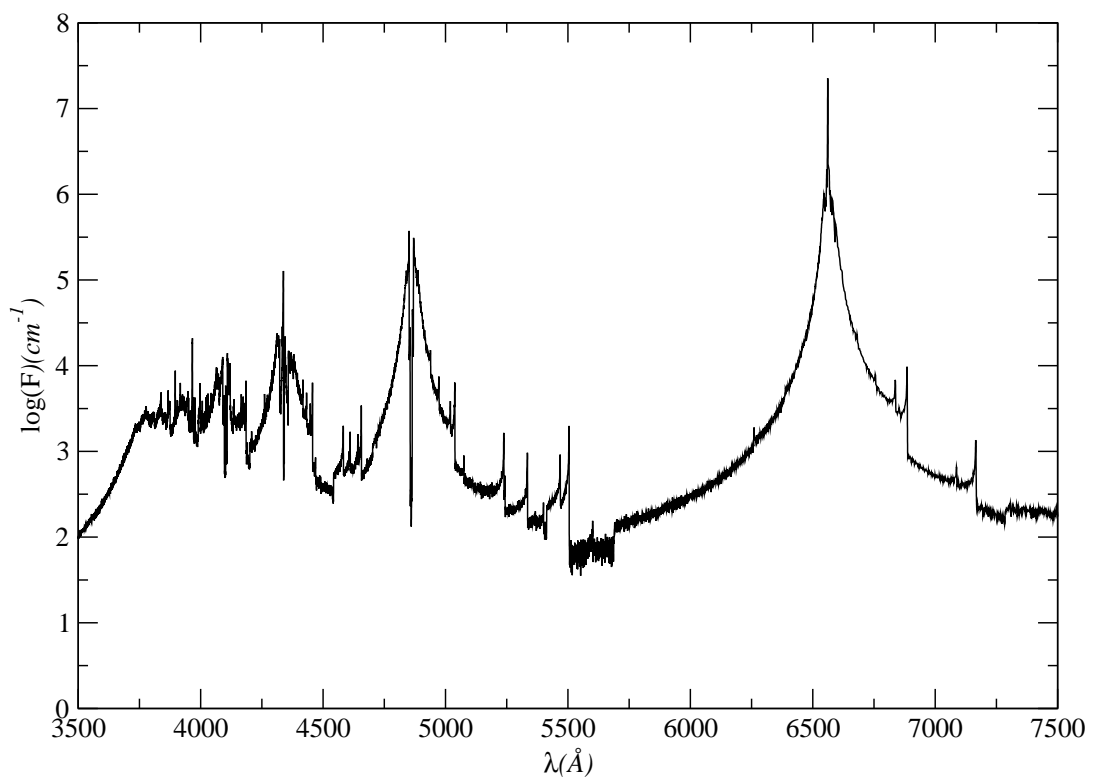


Figura 4.39: Contribuição do $H-H^+$ para o perfil de linha total de Balmer calculado para a temperatura $T=10\,000\text{ K}$ e para uma densidade de perturbadores $n_p = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$. A normalização foi calculada para a soma das transições da série de Balmer.

Capítulo 5

Discussão e Conclusão

Teorias satisfatórias e dados para o perfil de linha existiam somente para o alargamento Stark do hidrogênio neutro (Lemke, 1997, Vidal et al., 1973) e para 21 linhas óticas do Hélio neutro (Barnard et al., 1969, Beauchamp et al., 1997). Somente as três primeiras linhas de Lyman do átomo de hidrogênio alargadas por perturbadores neutros e ionizados, incluindo alguns satélites característicos, eram bem descritas pelo trabalho de Allard et al. (2009) e incluídos nos cálculos de modelos atmosféricos. Os dados atômicos podiam ser obtidos somente a partir de bancos de dados, principalmente das listas de linhas de (Kurucz & Bell, 1995) e do banco de dados VALD (*Vienna Atomic Line Database*) Kupka et al. (1999, 2000), Ryabchikova et al. (1997), Piskunov et al. (1995). Entretanto, para os outros casos a situação não era satisfatória, de modo que havia uma grande necessidade de cálculos e dados que possam explicar de maneira adequada os perfis de linha e as linhas satélites observáveis.

Devido a essa inexistência, calculei os potenciais e momentos de dipolo elétrico do íon molecular H_2^+ , gerado por colisões entre átomos de hidrogênio e prótons, até o nível $n=10$ (número quântico principal) do mesmo. Calculei também os perfis de linha das séries de Lyman e Balmer com densidades apropriadas para aplicação em atmosferas de estrelas anãs brancas [tipicamente $n = 10^{17} cm^{-3}$, Allard et al. (1994)], dados e cálculos nunca publicados até nosso artigo (Santos & Kepler, 2012), e disponibilizados em:

<http://astro.if.ufrgs.br/marcios>.

As observações em laboratório de plasma produzido por laser confirmaram que a maioria dos satélites que aparecem em Lyman- α são devidos às colisões entre átomos de hidrogênio neutros e prótons. Essa confirmação experimental da teoria reforça a identificação desses satélites em espectros de Lyman- α de estrelas anãs brancas e de

estrelas λ Bootis. Nos plasmas em altas temperaturas, tais como plasmas produzidos por laser, processos de recombinação dieletrônicos são muito importantes. Esse processo afeta fortemente a abundância de íons e produz linhas satélites dieletrônicas mas as variações temporais são de difícil cálculo. As linhas satélites de emissão a partir de íons altamente ionizados são frequentemente utilizadas para diagnósticos de diversos tipos de plasmas, por exemplo, *TOKAMAK*, fusão inercial, astrofísico etc.

A comparação das asas de perfil de Lyman- α com perfis de linha gerados por modelos é uma ferramenta para determinar as densidades de átomos neutros e ionizados em plasmas hidrogênicos. Esses experimentos também confirmam que a variação do momento de dipolo radioativo é um fator importante na determinação das asas distantes do perfil de Lyman- α ; quando o momento de dipolo $D(R)$ difere significativamente do seu valor assintótico para uma distância R próxima à região de formação de um satélite, a intensidade da asa pode ser aumentada ou diminuída consideravelmente.

Então, num espectro de absorção induzida por colisão (do inglês *Collision Induced Absorption - CIA*), tal como o mencionado, o momento de dipolo pode ser mais importante do que o potencial na determinação da forma de um satélite. Tais perturbações de muitos corpos alteram a linha da asa distante do perfil, adicionando vários satélites e produzindo um contínuo forte a partir do ultravioleta para o visível. Consequentemente, o estudo de atmosferas de estrelas anãs brancas, plasmas e experimentos associados (Z-pinch) é fundamental para a interpretação dos dados observacionais e representa a ligação dos modelos teóricos com a análise de seus resultados, ou seja, a criação de modelos adequados para explicar as observações de tais processos físicos e astrofísicos.

Os espectros observados de estrelas anãs brancas exibem uma forma característica complexa na qual intervêm processos de difusão, acreção e convecção. Até o momento, essa forma característica não é compreendida em todos os seus detalhes, devido a inexistência de um modelo atmosférico que inclua todos os processos físicos relevantes que ocorrem na atmosfera. Seu estudo é a chave na interpretação de espectros e na análise das predições da teoria de evolução. Portanto, o assunto desse trabalho também é de real interesse para modelamento dos espectros observados.

A aproximação teórica utilizada foi baseada na absorção quase molecular do H_2^+ , devido a interação $H - H^+$, calculada na aproximação quase estática. Nessa aproximação, além de fatores estatísticos, os perfis de linha dependem principalmente da derivada dV_{ij}/dR da diferença de energia entre os estados moleculares i e j de

diferente paridade e dos momentos de dipolo moleculares correspondentes.

O presente trabalho foi dividido essencialmente em duas grandes partes: (1) os cálculos dos dados moleculares e (2) o cálculo dos perfis correspondentes.

Na primeira parte, determinamos os potenciais e dipolos da quase molécula H_2^+ pois, apesar de já ter sido estudada por diversos autores, não haviam dados moleculares para estados eletrônicos superiores a $n = 3$ disponíveis na literatura. Apresentamos o método usado para obter potenciais e momentos de dipolo elétrico precisos, bem como os dados moleculares para estados até $n=10$. Os potenciais e momentos de dipolo elétrico obtidos foram comparados com os existentes publicados até o presente momento, por Madsen & Peek (1971), Ramaker & Peek (1972) e Ramaker & Peek (1973), coincidindo com excelente precisão.

A segunda parte foi dedicada aos cálculos dos perfis de linhas das séries de Lyman e Balmer, onde usei a aproximação quase estática (Bates, 1952, Rohrman et al., 2011). Nessa aproximação, os valores extremos da derivada dV_{ij}/dR produzem divergências no perfil de linha, e é isso que leva ao surgimento de satélites nas asas dos mesmos.

Ao longo dos cálculos, foi mantida a máxima resolução possível para não perder a forma global correta das asas das linhas e nem as posições exatas teóricas dos satélites ao longo do perfil. Calculei a posição de todos os satélites das principais transições das séries de Lyman e Balmer, o que pode ser verificado tanto nos perfis de linha obtidos quanto especificamente nas tabelas 4.1, 4.2, 4.3, 4.4, 4.5 e 4.6.

Na figura 4.5 apresentamos individualmente cada uma das 6 transições moleculares do H_2^+ que contribuem para a formação do perfil de linha de Lyman- α , e pode-se perceber que a transição entre os níveis $2s\sigma_g$ e $2p\sigma_u$ gera uma asa vermelha distante que se estende até a parte azul do espectro ótico, que pode ser a fonte de opacidade que faltava nos modelos de atmosferas de estrelas anãs brancas, corroborando com a ideia de Kowalski & Saumon (2006). Os perfis de Lyman- β e Lyman- γ estão sendo estudados desde Allard & Kielkopf (1982), entretanto somente em Allard et al. (2009) eles incluíram os cálculos do momento de dipolo em Lyman- γ , mas que não foram publicados. O perfil de Ly δ teórico que obtive nunca havia sido calculado até então, e apresenta um satélite proeminente em $\lambda = 964.56 \text{ \AA}$.

O perfil de linha de Balmer- α é mostrado na figura 4.21, com melhor resolução que os artigos previamente publicados. Para o perfil de linha de Balmer- β , encontrei os possíveis satélites listados na 4.6, sendo que alguns podem ser verificados na figura 4.23 para a temperatura de 10 000 K e uma densidade de prótons de $n_p = 1.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Observa-se também que esse perfil possui uma depressão central

assimétrica similar ao perfil experimental da figura 4.24 obtido por Falcon et al. (2010) junto aos Laboratórios Sandia. Sabe-se que o alargamento Stark (Wiese et al., 1972) não reproduz a assimetria na altura dos picos, mas é causado pelos prótons em colisão, formando a quase molécula de H_2^+ . Os demais perfis de linha da série de Balmer foram apresentados nas figuras de 4.30 até 4.36, para a mesma temperatura e densidade de perturbadores.

Esse trabalho mostrou que os perfis obtidos por colisões com íons diferem significativamente do alargamento Stark por elétrons, mostrando não apenas linhas satélites, mas também valores significativos das asas dos perfis que afetam a opacidade. Está centrado no estudo teórico dos perfis de linha do hidrogênio perturbado por colisões com prótons, representando um avanço significativo no campo da modelagem de perfis e de atmosferas estelares de anãs brancas DA, gerando perspectivas para novos estudos e pesquisas da etapa final de evolução da maioria das estrelas, que pode revelar maiores informações sobre a história da nossa galáxia.

A continuação desta pesquisa envolverá a comparação com perfis de densidade única medidos em Sandia, inclusão destes perfis no cálculo de modelos de atmosfera, bem como o cálculo similar para o H_2 .

Capítulo 6

Apêndices

6.1 Unidades atômicas

Para os cálculos deste trabalho, foi conveniente fazer uma troca de unidades para unidades atômicas (u.a.), também chamadas de unidades de Hartree: a unidade de massa é a massa do elétron e a unidade de carga é a carga do elétron, de momento angular é \hbar .

A unidade atômica de comprimento é

$$bohr = a_0 = 0,52918\text{Å}.$$

Quando as unidades foram mudadas para unidades atômicas, \hbar , m e e , trocamos o valor dessas constantes para o valor numérico 1. Assim, a utilização destas unidades simplifica também o hamiltoniano:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r} \Rightarrow -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}$$

e a unidade atômica de energia recebe o nome de hartree:

$$\frac{e^2}{a_0} = 27,212 \text{ eV} = 1 \text{ hartree}$$

Símbolo	Quantidade	S.I.	u.a.
m	massa (do elétron)	$9,1094 \times 10^{-31} \text{kg}$	1
e	carga (do elétron)	$1,6022 \times 10^{-19} \text{C}$	1
\hbar	Constante de Plank ($\hbar/2\pi$)	$6,626 \times 10^{-34} \text{Js}/2\pi$	1
a_0	raio de Bohr	$0,52918 \times 10^{-10} \text{m}$	1
$4\pi\epsilon_0$	Permissividade do vácuo	$1,113 \times 10^{-10} \text{C}^2/\text{Jm}$	1
c	velocidade da luz	$2,998 \times 10^8 \text{m/s}$	-
k	Constante de Boltzmann	$1,38066 \times 10^{-23} \text{J/K}$	-
N_A	número de Avogadro	$6,02205 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$	-

6.2 Artigo publicado

Theoretical study of the line profiles of the hydrogen perturbed by collisions with protons

Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, Volume 423, Issue 1, pp. 68-79. Publicado em Jun 2012 DOI: 10.1111/j.1365-2966.2012.20631.x

We present theoretical calculations of the quasi-molecular line profiles for the Lyman ($Ly\alpha$, $Ly\beta$, $Ly\gamma$ and $Ly\delta$) and Balmer ($H\alpha$, $H\beta$, $H\gamma$, $H\delta$, $H\epsilon$, $H8$, $H9$ and $H10$) series perturbed by collisions with protons. In all calculations, we include the dependence of the dipole moments as a function of the internuclear distance during the collision. The broadening from ion collisions must be added to the normal electron Stark broadening.

Keywords: Astronomy: line: profiles, white dwarfs

arXiv: arXiv:1204.4769

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1365-2966.2012.20631.x/full>

Bibliografia

- [1] ABRAMOWITZ, M., STEGUN, I. A. **Handbook of Mathematical Functions:** 1972.
- [2] ALLARD, N., KIELKOPF, J. The effect of neutral nonresonant collisions on atomic spectral lines. **Reviews of Modern Physics**, v. 54, p. 1103–1182, October 1982.
- [3] ALLARD, N. F., DRIRA, I., GERBALDI, M., KIELKOPF, J., SPIELFIEDEL, A. New study of the quasi-molecular Lyman alpha satellites due to H-H and H-H(+) collisions. **AAP**, v. 335, p. 1124–1129, July 1998a.
- [4] ALLARD, N. F., KIELKOPF, J., DRIRA, I., SCHMELCHER, P. A collision-induced satellite in the Lyman profile due to H-H collisions -Lyman satellites. **European Physical Journal D**, v. 12, p. 263–268, 2000.
- [5] ALLARD, N. F., KIELKOPF, J., FEAUTRIER, N. Satellites on the Lyman beta line of atomic hydrogen due to H-H(+) collisions. **AAP**, v. 330, p. 782–790, February 1998b.
- [6] ALLARD, N. F., KIELKOPF, J. F., HÉBRARD, G., PEEK, J. M. 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, April 2004.
- [7] ALLARD, N. F., KOESTER, D., FEAUTRIER, N., SPIELFIEDEL, A. Free-free quasi-molecular absorption and satellites in Lyman-alpha due to collisions with H and H⁺. **A&A**, v. 108, p. 417–431, December 1994.
- [8] ALLARD, N. F., NOSELIDZE, I., KRUK, J. W. New study of the quasi-molecular Lyman- γ satellites due to H-H⁺ collisions. **AAP**, v. 506, p. 993–997, November 2009.

- [9] ALLARD, N. F., ROYER, A., KIELKOPF, J. F., FEAUTRIER, N. Effect of the variation of electric-dipole moments on the shape of pressure-broadened atomic spectral lines. **PRA**, v. 60, p. 1021–1033, August 1999.
- [10] ANDERSON, P. W. AND TALMAN J. D. Pressure Broadening of Spectral Lines at General Pressures. **Bell System Technical Publication**, v. 3117, 1956.
- [11] ARFKEN, G. B., WEBER, H. J. **Mathematical methods for physicists**: 1995.
- [12] BABER, W. G., HASSÉ, H. R. The Two Centre Problem in Wave Mechanics. **Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**, v. 31, p. 564, 1935.
- [13] BARNARD, A. J., COOPER, J., SHAMEY, L. J. Calculated Profiles of He I 4471 and 4922 Å and their Forbidden Components. **AAP**, v. 1, p. 28, January 1969.
- [14] BATES, D. R. Rate of formation of molecules by radiative association. **MNRAS**, v. 111, p. 303, 1951.
- [15] BATES, D. R. Absorption of radiation by an atmosphere of H, $H^{\{+\}}$ and $H_2^{\{+\}}$ -semi-classical treatment. **MNRAS**, v. 112, p. 40, 1952.
- [16] BATES, D. R., LEDSHAM, K., STEWART, A. L. Wave Functions of the Hydrogen Molecular Ion. **Royal Society of London Philosophical Transactions Series A**, v. 246, p. 215–240, November 1953.
- [17] BATES, D. R., POOTS, G. Properties of the Hydrogen Molecular Ion I: Quadrupole Transitions in the Ground Electronic State and Dipole Transitions of the Isotopic Ions. **Proceedings of the Physical Society A**, v. 66, p. 784–792, September 1953.
- [18] BEAUCHAMP, A., WESEMAEL, F., BERGERON, P. Spectroscopic Studies of DB White Dwarfs: Improved Stark Profiles for Optical Transitions of Neutral Helium. **APJS**, v. 108, p. 559, February 1997.
- [19] BERGERON, P., LEGGETT, S. K. Model Atmosphere Analysis of Two Very Cool White Dwarfs. **APJ**, v. 580, p. 1070–1076, December 2002.
- [20] BERGERON, P., SAFFER, R. A., LIEBERT, J. A spectroscopic determination of the mass distribution of DA white dwarfs. **APJ**, v. 394, p. 228–247, July 1992.
- [21] BERGERON, P., WESEMAEL, F., FONTAINE, G. Synthetic spectra and atmospheric properties of cool DA white dwarfs. **APJ**, v. 367, p. 253–269, January 1991.

- [22] BERGERON, P., WESEMAEL, F., LAMONTAGNE, R., FONTAINE, G., SAFFER, R. A., ALLARD, N. F. Optical and Ultraviolet Analyses of ZZ Ceti Stars and Study of the Atmospheric Convective Efficiency in DA White Dwarfs. **APJ**, v. 449, p. 258, August 1995.
- [23] BURRAU, Ø. Berechnung des Energiewertes des Wasserstoffmolekel-Ions ($H\{2/+\}$) im Normalzustand. **Naturwissenschaften**, v. 15, p. 16–17, January 1927.
- [24] DOYLE, R. O. The Astrophysical Significance of the Continuous Spectrum of the Hydrogen Quasi-Molecule. **ApJ**, v. 153, p. 987, September 1968.
- [25] EDMONDS, JR. F. N., SCHLUTER, H., WELLS, D. C. Hydrogen-line Stark broadening functions. **MmRAS**, v. 71, p. 271, 1967.
- [26] EISENSTEIN, D. J., LIEBERT, J., HARRIS, H. C., KLEINMAN, S. J., NITTA, A., SILVESTRI, N., ANDERSON, S. A., BARENTINE, J. C., BREWINGTON, H. J., BRINKMANN, J., HARVANEK, M., KRZESIŃSKI, J., NEILSEN, JR. E. H., LONG, D., SCHNEIDER, D. P., SNEDDEN, S. A. A Catalog of Spectroscopically Confirmed White Dwarfs from the Sloan Digital Sky Survey Data Release 4. **APJS**, v. 167, p. 40–58, November 2006.
- [27] FALCON, R. E., ROCHAU, G. A., BAILEY, J. E., ELLIS, J. L., MONTGOMERY, M. H., WINGET, D. E., GOMEZ, M. R., LEEPER, R. J. Creating White Dwarf Photospheres in the Laboratory. In: AMERICAN INSTITUTE OF PHYSICS CONFERENCE SERIES, Werner, K., Rauch, T., editores, v. 1273 of **American Institute of Physics Conference Series**, p. 436–439, November 2010.
- [28] GIANNINAS, A., BERGERON, P., DUPUIS, J., RUIZ, M. T. Spectroscopic Analysis of Hot, Hydrogen-rich White Dwarfs: The Presence of Metals and the Balmer-line Problem. **APJ**, v. 720, p. 581–602, September 2010.
- [29] GREENSTEIN, J. L. An absorption line in the ultraviolet spectrum of 40 Eridani B. **APJL**, v. 241, p. L89–L93, October 1980.
- [30] HÉBRARD, G., ALLARD, N. F., KIELKOPF, J. F., CHAYER, P., DUPUIS, J., KRUK, J. W., HUBENY, I. Modeling of the Lyman gamma satellites in FUSE spectra of DA white dwarfs. **AAP**, v. 405, p. 1153–1156, July 2003.

- [31] HERMAN, R., RUBIN, R. J. Influence of Vibration-Rotation Interaction on Line Intensities in Vibration-Rotation Bands of a Rotating Morse Oscillator. **APJ**, v. 121, p. 533, March 1955.
- [32] HERMAN, R., WALLIS, R. F. Matrix Elements of Electronic Transitions in the H_2^+ Hydrogen Molecular Ion. **APJ**, v. 123, p. 353, March 1956.
- [33] HOLBERG, J. B., KRUK, J. W., KOESTER, D., BARSTOW, M. A., BURLEIGH, M. R., SAHU, M. S. A New Determination of the Spectroscopic Mass and Radius for Sirius B. In: NATO ASIB PROC. 105: WHITE DWARFS, D. de Martino, R. Silvotti, J.-E. Solheim, & R. Kalytis, , editor, p. 113, 2003.
- [34] HOLWEGGER, H., KOESTER, D., ALLARD, N. F. Identification of the 1600Å feature in Lambda Bootis stars. **AAP**, v. 290, p. L21–L24, October 1994.
- [35] HUMMER, D. G., MIHALAS, D. The equation of state for stellar envelopes. I - an occupation probability formalism for the truncation of internal partition functions. **ApJ**, v. 331, p. 794–814, August 1988.
- [36] HYLLERAAS, E. A. Über die Elektronenterme des Wasserstoffmoleküls. **Zeitschrift für Physik**, v. 71, p. 739–763, November 1931.
- [37] JAFFÉ, G. Zur Theorie des Wasserstoffmoleküls. **Zeitschrift für Physik**, v. 87, p. 535–544, July 1934.
- [38] KAPLAN, WILFRED. **Advanced Calculus**. 2.ed.: Addison-Wesley Company, INC, 1953.
- [39] KEPLER, S. O., CASTANHEIRA, B. G., COSTA, A. F. M., KOESTER, D. Gemini spectra of 12000 K white dwarf stars. **MNRAS**, v. 372, p. 1799–1803, November 2006.
- [40] KEPLER, S. O., KLEINMAN, S. J., NITTA, A., KOESTER, D., CASTANHEIRA, B. G., GIOVANNINI, O., ALTHAUS, L. The White Dwarf Mass Distribution. In: 15TH EUROPEAN WORKSHOP ON WHITE DWARFS, R. Napiwotzki & M. R. Burleigh, , editor, v. 372 of **Astronomical Society of the Pacific Conference Series**, p. 35, September 2007.
- [41] KEPLER, S. O., KLEINMAN, S. J., PELISOLI, I., PEÇANHA, V., DIAZ, M., KOESTER, D., CASTANHEIRA, B. G., NITTA, A. Magnetic White Dwarfs in the SDSS and Estimating the Mean Mass of Normal DA and DB WDs. In:

- AMERICAN INSTITUTE OF PHYSICS CONFERENCE SERIES, K. Werner & T. Rauch, , editor, v. 1273 of **American Institute of Physics Conference Series**, p. 19–24, November 2010.
- [42] KEPLER, S. O., NELAN, E. P. IUE temperatures for white dwarf stars in and around the ZZ Ceti instability strip. **AJ**, v. 105, p. 608–613, February 1993.
- [43] KEPLER, S. O., ROBINSON, E. L., KOESTER, D., CLEMENS, J. C., NATHER, R. E., JIANG, X. J. Mode Identification of Pulsating White Dwarfs Using the Hubble Space Telescope. **apj**, v. 539, p. 379–391, August 2000.
- [44] 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, January 2002.
- [45] KLEINMAN, S. J. The SDSS DR7 White Dwarf Catalog. In: AMERICAN INSTITUTE OF PHYSICS CONFERENCE SERIES, K. Werner & T. Rauch, , editor, v. 1273 of **American Institute of Physics Conference Series**, p. 156–159, November 2010.
- [46] KLEINMAN, S. J., HARRIS, H. C., EISENSTEIN, D. J., LIEBERT, J., NITTA, A., KRZESIŃSKI, J., MUNN, J. A., DAHN, C. C., HAWLEY, S. L., PIER, J. R., SCHMIDT, G., SILVESTRI, N. M., SMITH, J. A., SZKODY, P., STRAUSS, M. A., KNAPP, G. R., COLLINGE, M. J., MUKADAM, A. S., KOESTER, D., UOMOTO, A., SCHLEGEL, D. J., ANDERSON, S. F., BRINKMANN, J., LAMB, D. Q., SCHNEIDER, D. P., YORK, D. G. A Catalog of Spectroscopically Identified White Dwarf Stars in the First Data Release of the Sloan Digital Sky Survey. **APJ**, v. 607, p. 426–444, May 2004.
- [47] KOESTER, D. A new look at old friends : 40 Eri B and GD 323. In: NATO ASIC PROC. 336: WHITE DWARFS, G. Vauclair & E. Sion, , editor, p. 343, 1991.
- [48] KOESTER, D. White dwarf spectra and atmosphere models . **MENSAI**, v. 81, p. 921, 2010.
- [49] KOESTER, D. **Comunicação privada**. 2011.
- [50] KOESTER, D., FINLEY, D. S., ALLARD, N. F., KRUK, J. W., KIMBLE, R. A. Quasi-molecular Satellites of LY beta in the Spectrum of the DA White Dwarf Wolf 1346. **APJ**, v. 463, p. L93, June 1996.

- [51] KOESTER, D., KEPLER, S. O., KLEINMAN, S. J., NITTA, A. SDSS white dwarf mass distribution at low effective temperatures. **Journal of Physics Conference Series**, v. 172, n. 1, p. 012006, June 2009.
- [52] KOESTER, D., SPERHAKE, U., ALLARD, N. F., FINLEY, D. S., JORDAN, S. Quasi-molecular satellites of Lyman beta in ORFEUS observations of DA white dwarfs. **AAP**, v. 336, p. 276–280, August 1998.
- [53] KOESTER, D., WEIDEMANN, V., ZEIDLER-K.T., E. M., VAUCLAIR, G. The explanation of the 1400 and 1600 Å features in DA white dwarfs. **AAP**, v. 142, p. L5–L8, January 1985.
- [54] KOWALSKI, P. M., SAUMON, D. Found: The Missing Blue Opacity in Atmosphere Models of Cool Hydrogen White Dwarfs. **APJL**, v. 651, p. L137–L140, November 2006.
- [55] KUPKA, F., PISKUNOV, N., RYABCHIKOVA, T. A., STEMPELS, H. C., WEISS, W. W. VALD-2: Progress of the Vienna Atomic Line Data Base. **AAPs**, v. 138, p. 119–133, July 1999.
- [56] KUPKA, F. G., RYABCHIKOVA, T. A., PISKUNOV, N. E., STEMPELS, H. C., WEISS, W. W. VALD-2 – The New Vienna Atomic Line Database. **Baltic Astronomy**, v. 9, p. 590–594, 2000.
- [57] KURUCZ, R., BELL, B. Atomic Line Data. **Atomic Line Data (R.L. Kurucz and B. Bell) Kurucz CD-ROM No. 23. Cambridge, Mass.: Smithsonian Astrophysical Observatory, 1995.**, v. 23, 1995.
- [58] LEMKE, M. Extended VCS Stark broadening tables for hydrogen – Lyman to Brackett series. **AAPs**, v. 122, p. 285–292, April 1997.
- [59] LEVINE, I. N. **Quantum chemistry**. 5ed.ed.: 2004.
- [60] LI, LE-WEI, KANG, XIAO-KANG, LEONG, MOOK-SENG. **Spheroidal Wave Functions in Electromagnetic Theory**: Wiley-Interscience, 2001.
- [61] LIEBERT, J., BERGERON, P., HOLBERG, J. B. DA white dwarfs from the Palomar Green Survey (Liebert+, 2005). **VizieR Online Data Catalog**, v. 215, p. 60047, May 2005.
- [62] MADSEN, M. M., PEEK, J. M. Eigenparameters for the Lowest Twenty Electronic States of the Hydrogen Molecule Ion. **Atomic Data**, v. 2, p. 171, 1971.

- [63] MARGENAU, H., LEWIS, M. Structure of Spectral Lines from Plasmas. **Reviews of Modern Physics**, v. 31, p. 569–615, July 1959.
- [64] MARGENAU, H., WATSON, W. W. Pressure Effects on Spectral Lines. **Reviews of Modern Physics**, v. 8, p. 22–53, January 1936.
- [65] MATSUSHIMA, S. H^+_2 Absorption as a Source of Continuous Opacity in the Stellar Atmospheres. **SAO Special Report**, v. 167, p. 42, December 1964.
- [66] MORSE, P. M., STUECKELBERG, E. C. Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics I: Electronic Levels of the Hydrogen Molecular Ion. **Physical Review**, v. 33, p. 932–947, June 1929.
- [67] NELAN, E. P., WEGNER, G. Identification of the 1400 and 1600 Å features observed in the ultraviolet spectra of DA white dwarfs. **APJL**, v. 289, p. L31–L33, February 1985.
- [68] PISKUNOV, N. E., KUPKA, F., RYABCHIKOVA, T. A., WEISS, W. W., JEFFERY, C. S. VALD: The Vienna Atomic Line Data Base. **AAPs**, v. 112, p. 525, September 1995.
- [69] RAMAKER, D. E., PEEK, J. M. $^2\text{H}_2^+$ dipole strengths by asymptotic techniques. **Journal of Physics B Atomic Molecular Physics**, v. 5, p. 2175–2181, December 1972.
- [70] RAMAKER, D. E., PEEK, J. M. Dipole Strengths Involving the Lowest Twenty Electronic States of H_2^+ . **Atomic Data**, v. 5, p. 167, 1973.
- [71] ROHRMANN, R. D., ALTHAUS, L. G., KEPLER, S. O. Lyman α wing absorption in cool white dwarf stars. **MNRAS**, v. 411, p. 781–791, February 2011.
- [72] RYABCHIKOVA, T. A., PISKUNOV, N. E., KUPKA, F., WEISS, W. W. The Vienna Atomic Line Database : Present State and Future Development. **Baltic Astronomy**, v. 6, p. 244–247, March 1997.
- [73] SANTOS, M. G., KEPLER, S. O. Theoretical study of the line profiles of the hydrogen perturbed by collisions with protons. **MNRAS**, v. 423, p. 68–79, June 2012.
- [74] TELLER, E. über das Wasserstoffmolekülion. **Zeitschrift für Physik**, v. 61, p. 458–480, July 1930.

- [75] TREMBLAY, P.-E., BERGERON, P. Spectroscopic Analysis of DA White Dwarfs: Stark Broadening of Hydrogen Lines Including Nonideal Effects. **APJ**, v. 696, p. 1755–1770, May 2009.
- [76] TREMBLAY, P.-E., LUDWIG, H.-G., STEFFEN, M., BERGERON, P., FREYTAG, B. Solution to the problem of the surface gravity distribution of cool DA white dwarfs from improved 3D model atmospheres. **AAP**, v. 531, p. L19, July 2011.
- [77] VENNES, S., CHAYER, P., DUPUIS, J., LANZ, T. Lyman Line Spectroscopy of Hot Hydrogen-Rich White Dwarfs Revisited. In: 14TH EUROPEAN WORKSHOP ON WHITE DWARFS, D. Koester & S. Moehler, , editor, v. 334 of **Astronomical Society of the Pacific Conference Series**, p. 185, July 2005.
- [78] VIDAL, C. R., COOPER, J., SMITH, E. W. Hydrogen Stark broadening calculations with the unified classical path theory. **JQSRT**, v. 10, p. 1011–1063, 1970.
- [79] VIDAL, C. R., COOPER, J., SMITH, E. W. Hydrogen Stark-Broadening Tables. **APJS**, v. 25, p. 37, January 1973.
- [80] WALLIS, R. F., HULBURT, H. M. Approximation of Molecular Orbitals in Diatomic Molecules by Diatomic Orbitals. **JCP**, v. 22, p. 774–781, May 1954.
- [81] WEGNER, G., SCHULZ, H. Spectroscopy of suspected peculiar DA white dwarfs. I - Equivalent widths and line profiles. **AAPS**, v. 43, p. 473–478, March 1981.
- [82] WIESE, W. L., KELLEHER, D. E., PAQUETTE, D. R. Detailed Study of the Stark Broadening of Balmer Lines in a High-Density Plasma. **pra**, v. 6, p. 1132–1153, September 1972.
- [83] WOLFF, B., KRUK, J. W., KOESTER, D., ALLARD, N. F., FERLET, R., VIDAL-MADJAR, A. FUSE observations of hot white dwarfs. **AAP**, v. 373, p. 674–682, July 2001.
- [84] ZYGELMAN, B., DALGARNO, A. The radiative association of He(+) and H. **APJ**, v. 365, p. 239, December 1990.