

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

**ESTUDO DO EFEITO DE COLISÕES  $H-H^+$  NO ESPECTRO DO  
ÁTOMO DE HIDROGÊNIO**

Porto Alegre  
2012

Ingrid Domingos Pelisoli

**ESTUDO DO EFEITO DE COLISÕES  $H-H^+$  NO ESPECTRO DO  
ÁTOMO DE HIDROGÊNIO<sup>1</sup>**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado  
ao Instituto de Física da Universidade Federal  
do Rio Grande do Sul, como requisito parcial  
para obtenção do título de Bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. Kepler de Souza  
Oliveira Filho

Porto Alegre  
2012

---

<sup>1</sup>O presente trabalho foi realizado com o apoio da Pró-Reitoria de Pesquisa - UFRGS - Brasil

# *Sumário*

**Agradecimentos**

**Resumo**

**Abstract**

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	p. 6
1.1	Modelo Semiclássico de Anderson-Talman . . . . .	p. 11
1.2	Inclusão dos Elementos de Dipolo no Modelo . . . . .	p. 13
<b>2</b>	<b>Objetivos</b>	p. 17
<b>3</b>	<b>Metodologia</b>	p. 19
<b>4</b>	<b>Desenvolvimento do trabalho</b>	p. 24
4.1	Solução analítica: potencial tipo poço-quadrado . . . . .	p. 24
4.1.1	Variação com a Densidade . . . . .	p. 32
4.1.2	Variação com a Temperatura . . . . .	p. 34
4.2	Solução Numérica do Modelo Semiclássico . . . . .	p. 41
4.2.1	Teste do programa: poço-quadrado . . . . .	p. 41
4.2.2	Potencial Gaussiano . . . . .	p. 43
4.2.3	Potencial de Lennard-Jones . . . . .	p. 50
4.2.4	Discussão . . . . .	p. 51
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	p. 58
	<b>Referências Bibliográficas</b>	p. 60

# *Agradecimentos*

Ao meu avô Cláudio, o primeiro a me apontar a beleza das estrelas.

Ao professor Márcio, por me ensinar que elas são muito mais que bonitas.

Ao meu orientador, Prof. Kepler, que nunca me deixou esquecer disso.

Aos meus pais, Ana Cláudia e Paulo Ricardo, que sempre foram meus maiores fãs e incentivadores - desde as primeiras palavras até a primeira integral.

Ao meu irmão, Pedro Lucas, meu companheiro nas (poucas) horas de descanso e meu refúgio nos (muitos) momentos de inquietude.

A toda a minha família, que é bem grande e não cabe toda aqui, por sempre me apoiar e compreender as minhas ausências.

Ao meu namorado, que sempre esteve ao meu lado, seja me trazendo o café da manhã depois de uma semana inteira de estudos até tarde da noite, seja me oferecendo o ombro quando a ansiedade batia, e ainda dividindo uma cerveja depois de uma boa nota.

A todos os meus amigos, em especial Augusto, Natália e Felipe, que estudaram, surtaram e comemoraram comigo praticamente do início ao fim.

# *Resumo*

Neste trabalho, estudamos o efeito de colisões sobre o espectro de um átomo de hidrogênio. A teoria de alargamento espectral foi revisada, com ênfase no alargamento por colisões. Para esse tipo de alargamento, existem três modelos: a Aproximação Quasi-estática, que desconsidera a velocidade das partículas perturbadoras, o Modelo Quântico, que considera o emissor e os perturbadores como uma quasimolécula gigante e resolve a equação de Schrödinger para esse sistema, e as Teorias Unificadas.

Dentre as Teorias Unificadas, adotamos o Modelo de Anderson-Talman, o qual inclui todas as características dos outros modelos, mas assume que o emissor e o perturbador interagem fracamente, de modo que a perturbação é adiabática e a trajetória do perturbador pode ser aproximada como retilínea e com velocidade constante. Além disso, desconsidera-se a interação entre os perturbadores.

Utilizando esse modelo, nos concentramos no efeito das colisões com prótons no espectro do átomo de hidrogênio. Tal efeito é observado, por exemplo, no espectro ultravioleta de anãs brancas, especialmente na forma de linhas-satélite. Para modelar essa interação, utilizamos primeiramente um potencial de poço-quadrado com profundidade e alcance ajustados a um potencial realista.

Com o potencial do tipo poço, que permite o cálculo analítico da função de autocorrelação, pudemos descrever o efeito de variações na densidade, e na temperatura, sobre a linha espectral. A densidade afeta apenas a amplitude das linhas e sua largura à meia altura. Já a temperatura afeta também a posição das linhas e pode, ainda, tornar os satélites assimétricos.

Também utilizamos outros potenciais para verificar sua adequação em descrever a interação entre perturbador e emissor. Verificamos que um potencial da forma de uma meia gaussiana invertida é inadequado, já que tem um alcance exageradamente longo e uma parte confinante também muito larga. Além disso, ele não vai a infinito conforme se aproximam as partículas, o que é esperado em razão da repulsão coulombiana. Isso é resolvido com o uso de um potencial de Lennard-Jones, com o qual foi possível obter uma linha espectral em concordância com o que se tem na literatura, apresentando alargamento coerente com o observado e, ainda, alguns satélites.

Esperamos que, com os conhecimentos adquiridos nesse trabalho, seja possível obter um perfil de linha a partir de potenciais realistas calculados numericamente e levando em conta, além disso, os momentos de dipolo que descrevem a probabilidade entre transições. Com isso, pode-se incorporar o efeito de colisões com prótons como uma fonte de opacidade em modelos de atmosfera, obtendo-se modelos mais precisos que permitirão melhor determinação de propriedades físicas de estrelas que contenham hidrogênio em sua atmosfera.

# *Abstract*

We studied the effect of collisions in the spectrum of a hydrogen atom. The theory of spectral broadening was reviewed, with emphasis on collisional broadening. There are three models for this type of broadening: the Quasi-static Approximation, which disregards the motion of the perturber particles, the Quantum Model, which treats the radiator and the perturbers as a giant quasimolecule and solves the Schrödinger equation to the system, and the Unified Theories.

For the Unified Theory, we adopted the Anderson-Talman model, which includes all other models, but assumes that the radiator and the perturbers interact weakly, so that the perturbation is adiabatic and the perturber trajectory may be treated as rectilinear and with constant speed. In addition, it desconsiders the interaction between the perturbers.

Using this model, we focused on the effect of collisions with protons in the spectrum of the hydrogen atom. Such effect is observed on the ultraviolet spectrum of white dwarf stars, especially by means of satellite lines. To model this interaction, we used initially a square-well potential with depth and range fitted to a realistic potential.

With the square-well potential, which gives an analytical autocorrelation function, we could describe the effect of changes in the density of the perturbers, and of the temperature, on the spectral line. The density affects only the amplitude and the full width at half maximum of the lines. The temperature has effect on the position of the lines as well and can also make the satellites asymmetrical.

We checked whether other simple potentials could describe the interaction between perturber and radiator. We verified that a potential written as a half-gaussian upside down is inappropriate, because it has a range which is exceedingly large and a confining-well too wide. Besides, it doesn't diverges when  $R \rightarrow 0$ , which is expected due to the coulombian repulsion. That is solved by the use of a Lennard-Jonnes potential, with which it was possible to obtain an spectral line in agreement with the literature, showing a broadening consistent with the observed and, also, some satellites.

We hope that, with the knowledge acquired in this work, it will be possible to obtain a spectral profile from realistic potentials evaluated numerically and also taking in account the dipole moment which describes the probability between transitions. Therewith, one can add the effect of collisions with protons as a source of opacity in atmosphere models, obtaining better models which are going to provide more accurately the physical properties of stars whose atmosphere contains hydrogen.

# 1 Introdução

As transições eletrônicas nos átomos conferem a cada elemento químico um conjunto de linhas espectrais características. Considerando apenas os saltos quânticos, essas linhas teriam a forma de deltas de Dirac nos comprimentos de onda referentes às diferenças de energia entre os níveis final e inicial do elétron (figura 1.1). Essa situação não se verifica experimentalmente quando se analisa o espectro de um conjunto de átomos, em razão da existência de vários mecanismos de alargamento (figuras 1.2 e 1.3).

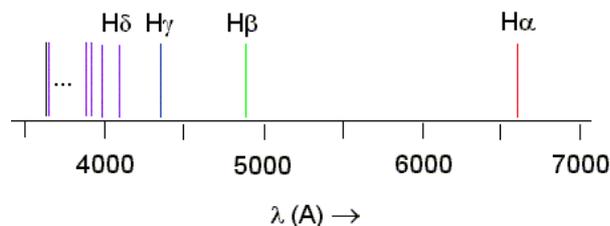


Figura 1.1: Linhas da série de Balmer (transições do hidrogênio com nível final  $n=2$ ). Considerando apenas a diferença de energia entre os níveis, as linhas espectrais não possuem estrutura.

O mais elementar desses mecanismos é chamado alargamento natural. Ele decorre do fato de que a população no nível inicial, em geral um estado excitado, diminui com o tempo, em razão das transições para níveis de menor energia, de modo que a intensidade do pulso de luz emitido devido a essa transição também diminui. Em geral, esse decaimento tem uma forma exponencial, o que confere à linha espectral uma forma lorentziana muito estreita. Tal efeito pode ser interpretado em termos do Princípio de Incerteza entre tempo e energia:

$$\Delta E \Delta t \leq \hbar,$$

porque a largura do nível de energia (que pode ser relacionada à largura em frequência,  $\Delta E = \hbar \Delta \nu$ ) vezes o tempo de decaimento natural possui um limite inferior, de forma que  $\Delta \nu$  é finito.

Outro mecanismo de alargamento é o Efeito Doppler. Os átomos possuem energia térmica, e o movimento relativo entre eles e o observador, associado a essa energia, causa deslocamentos nas frequências medidas em relação às emitidas. O deslocamento depende da velocidade das partículas, que segue uma distribuição de Maxwell-Boltzmann, e ocorre para frequências maiores ou menores que o esperado dependendo do sentido da velocidade, o que alarga a linha. Por esse mecanismo, a linha teria forma gaussiana. Esse efeito é dominante no espectro de gases à temperatura ambiente.

Se os átomos estão imersos em um campo eletromagnético, temos os efeitos Stark (campo elétrico) e Zeeman (campo magnético). Além do alargamento da linha, esses efeitos podem, ainda, deslocar seu centro e desdobrá-la em componentes, já que pode ocorrer a quebra de si-

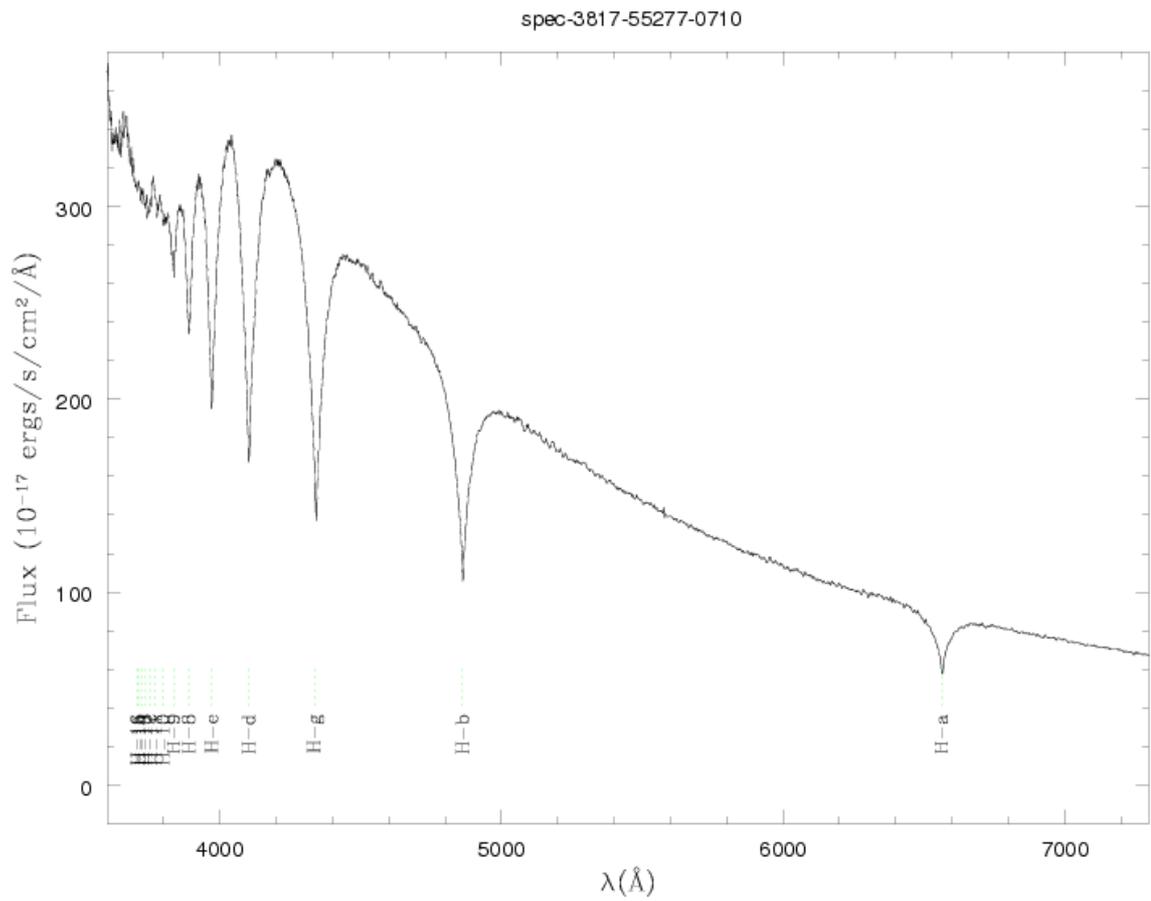


Figura 1.2: Espectro no ótico de uma anã branca do tipo DA com temperatura efetiva de 12500K e  $\log(g)=8,25$ , obtido pelo *Sloan Digital Sky Survey*. Todas as linhas observadas pertencem à série de Balmer do hidrogênio, como as da figura 1.1, mas estão fortemente alargadas pela alta pressão na atmosfera da anã branca.

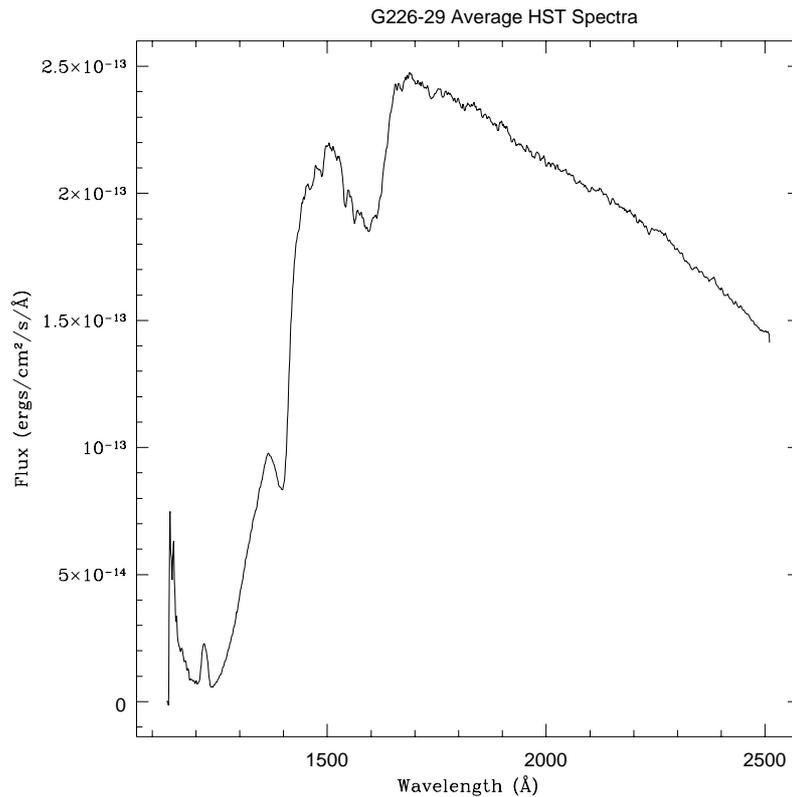


Figura 1.3: Espectro no ultravioleta da anã branca do tipo DA G226-29 obtido com o *Hubble Space Telescope* (HST). A temperatura efetiva é de  $12000 \pm 125\text{K}$  e o  $\log(g)$  de  $8,30 \pm 0,05$  [1]. Em  $\simeq 1216\text{\AA}$ , vemos a linha de Lyman  $\alpha$  (transição de  $n=2$  para  $n=1$ ) em absorção, com uma emissão geocoronal em seu centro. Além da linha ter forma totalmente distinta das da figura 1.1, há ainda linhas-satélite em  $\simeq 1405\text{\AA}$  e em  $\simeq 1600\text{\AA}$ , as quais não são explicadas pelas transições eletrônicas do átomo de hidrogênio.

metrias espaciais devido à presença dos campos orientados. O Efeito Stark é dominante, por exemplo, nas estrelas anãs brancas, que possuem temperaturas em sua atmosfera altas o suficiente ( $\sim 10^4\text{K}$ ) para que o gás esteja parcialmente ionizado. Os elétrons livres desse gás colidem com as partículas emissoras (hidrogênio, se houver, pois os elementos mais pesados depositam-se no núcleo da estrela devido à sedimentação gravitacional), interrompendo o processo de emissão de luz e efetivamente encurtando o tempo de vida do estado excitado, o que causa um alargamento adicional semelhante ao natural. Cerca de 5-10% das anãs brancas apresenta também Efeito Zeeman decorrente da presença de campos magnéticos, cuja origem está relacionada à formação da estrela e ao campo magnético que permeia nossa galáxia.

O alargamento devido a colisões, ou ainda, alargamento por pressão, pode também ocorrer em razão da presença de outras partículas que não o elétron, como por exemplo o próton que resta da ionização do H. Esse efeito tem, em geral, menor importância no alargamento da linha, mas, sob determinadas condições de temperatura e densidade, as colisões podem causar a formação de moléculas temporárias (*quasimoléculas*). As transições eletrônicas nessas moléculas causam os chamados satélites: emissões em comprimentos de onda diferentes daqueles associados ao elemento puro, em geral com baixa intensidade. Esse processo explica, por exemplo, as linhas vistas na figura 1.3 [1].

Linhas-satélite no espectro de uma anã branca foram observadas pela primeira vez por Jesse Greenstein [2] e Gary Wegner [3]. Eles notaram que os espectros de anãs brancas relativamente frias (temperaturas da ordem de 15000K) obtidos com o *International Ultraviolet Explorer* (IUE) apresentavam absorções na asa de Lyman  $\alpha$  em um comprimento de onda de aproximadamente 1400Å. Greenstein apontou que a linha é na mesma posição de uma transição do Silício, mas que ocorre a temperaturas consideravelmente maiores. Ele sugeriu que a linha decorria de um envelope circumestelar a alta temperatura, surgido a partir de acreção, ou ainda que a linha se formasse em camadas mais internas da estrela, que precisaria então de uma alta razão Si/H. Admitindo que nenhuma dessas hipóteses é satisfatória, ele apresentou outra sugestão, de que as linhas decorreriam da presença de H<sub>2</sub> na estrela, apesar de, a essa temperatura, a fração de hidrogênio molecular ser pequena, e apontou a necessidade de cálculos da contribuição do H<sub>2</sub> à Lyman  $\alpha$ .

Holm et al. [4] também detectaram a linha-satélite em 1400Å e, além disso, observaram uma outra absorção em 1600Å, também em espectros obtidos com o IUE. Em sua tentativa de explicá-las, ambas possibilidades levantadas por Greenstein, Si e H<sub>2</sub>, foram descartadas, a primeira devido ao fato de que as linhas observadas diminuem com o aumento da temperatura, diferente do que seria esperado para o Si, e a segunda em razão da ausência de absorções devido ao H<sub>2</sub> em outros comprimentos de onda esperados. O artigo não propôs uma explicação para a linha de 1400Å, mas sugeriu que o satélite em 1600Å poderia ser explicado pela presença de hidrogênio quasimolecular, conforme os cálculos de Sando e Wormhoudt [5].

A confirmação dessa hipótese e a explicação correta para a linha de 1400Å foi dada no mesmo ano por Detlev Koester et al. [6], em um artigo convenientemente intitulado “*The explanation of the 1400 and 1600 Å features in DA white dwarfs*”. Uma quasimolécula formada pela colisão de prótons com o hidrogênio atômico foi a ideia proposta no artigo para justificar a absorção em 1400Å. Por meio de cálculos aproximados baseados na teoria de Sando e Wormhoudt, os autores demonstram que essa hipótese é correta. Considerando que hidrogênio é de fato o elemento mais abundante na atmosfera da maioria das anãs brancas, e que raramente outros são encontrados devido à alta gravidade, que causa sua sedimentação, tal conclusão foi amplamente aceita.

O estudo teórico dos efeitos de colisões começou, contudo, muito antes dessas observações, com Michelson [7]. Seu modelo era simples: considerava que as partículas, emissor e perturbador, chocavam-se como bolas de bilhar. O efeito obtido era um alargamento da linha proporcional ao inverso do tempo entre colisões, mas sem nenhum deslocamento do comprimento de onda central ou presença de linhas-satélite. A principal contribuição desse trabalho foi, na verdade, a ideia de estudar o perfil de linha por meio de sua transformada de Fourier, o que é feito até hoje. Lorentz ainda melhorou o modelo, em 1905, incluindo uma distribuição de probabilidades descrevendo o tempo entre colisões, obtendo o famoso perfil lorentziano [8].

Comum a todas as interpretações nessa época era a suposição de que a colisão não apenas alterava o processo de emissão, mas o encerrava. Uma nova interpretação foi sugerida por Lenz [9, 10] e por Weisskopf [11, 12]: os perturbadores agiriam a longa distância, alterando gradualmente a frequência emitida conforme se aproximariam da partícula emissora, sem interromper a emissão. Para descrever tal efeito, introduziram um desvio de fase (*phaseshift*) de modo que

$$\omega(t) = \omega_0 + \frac{d\eta}{dt},$$

sendo  $\omega_0$  a frequência emitida na ausência de perturbadores e  $\eta$  o desvio de fase.

Considerações semelhantes foram feitas nos estudos de Kuhn [13–15] e Kuhn e London [16], ainda na década de 1930. Esses trabalhos culminaram na chamada *Aproximação Quasi-estática*; nela, o movimento dos perturbadores é negligenciado, e, de maneira semelhante à da abordagem de Lenz e Weisskopf, a emissão é descrita como:

$$\begin{aligned}\omega + \Delta\omega &= (E_i - E_f)/\hbar \\ &= \omega_0 + \Delta V/\hbar,\end{aligned}$$

onde  $E_i$  e  $E_f$  são respectivamente as energias dos estados inicial e final e  $\Delta V$  é a diferença total entre as perturbações desses estados. Daí obtemos:

$$\hbar\Delta\omega = \Delta V(R).$$

A intensidade da linha em um dado  $\Delta\omega$  deve, sendo assim, estar relacionada ao potencial a que a partícula está sujeita, de modo que deve ser proporcional à probabilidade de um perturbador encontrar-se entre  $R$  e  $R + dR$ . Sendo  $n$  a densidade de perturbadores e considerando simetria esférica, temos:

$$I(\Delta\omega)|d\omega| = n4\pi R^2|dR| \Rightarrow I(\Delta\omega) = n4\pi R^2 \left| \frac{d\omega}{dR} \right|^{-1},$$

o que leva a

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

Assim, teremos máximos na intensidade, ou seja, linhas-satélite, sempre que existir um extremo no potencial.

Essa aproximação descreve bem as asas da linha, sendo ainda utilizada atualmente com esse propósito. Márcio Santos & Kepler [17], por exemplo, utilizaram essa aproximação para calcular as linhas das séries de Lyman e de Balmer para colisões de H com prótons. Para a linha de Ly $\alpha$ , eles mostraram a discrepância existente nas asas obtidas por meio do cálculo quântico. Contudo, a Aproximação Quasi-estática falha na caracterização do centro da linha. Uma das razões disso é que ela leva em conta apenas colisões simples, negligenciando o movimento do perturbador durante a colisão e a probabilidade de colisões múltiplas, de modo que se deve limitar a distância  $R$  a regiões próximas do emissor. Assim, os efeitos que afetariam o centro da linha, que ocorrem a longa distância (afinal, devem ser dominados pela emissão original  $\omega_0$ ), são ignorados.

Tal problema é resolvido na aproximação molecular, que trata o emissor e os  $N$  perturbadores como uma grande quasimolécula. Nessa aproximação, desenvolvida por Jablonski numa série de artigos [18–25], levamos em conta que a intensidade emitida em uma dada frequência deve ser proporcional à mudança na energia translacional do perturbador, pois, por conservação de energia,

$$\hbar\omega_0 + E_i = \hbar\omega + E_f \Rightarrow \Delta\omega = \frac{E_f - E_i}{\hbar} = \frac{\xi}{\hbar},$$

ou seja, as alterações na frequência emitida devem ser explicadas por essa mudança, a qual deve seguir uma distribuição de probabilidades  $W(\xi)$ , de modo que teremos

$$I(\omega)d\omega = W(\xi)d\xi,$$

sendo que  $W(\xi)$  é calculada utilizando a aproximação de Born-Oppenheimer. Nessa abordagem, também se assume que as colisões não alteram o estado quântico do elétron, cuja função de onda dependerá apenas da posição do núcleo, o que é conhecido por hipótese adiabática.

A Aproximação Quasi-estática e a Teoria Quântica iniciada por Jablonski foram conectadas por Foley [26], que mostrou que a expressão em termos da integral de Fourier para o perfil de linha, típica das abordagens quasi-estáticas, poderia ser derivada do tratamento quântico considerando as colisões como adiabáticas. Lindholm [27] já havia deduzido que tal conexão deveria existir. A partir daí, desenvolveram-se as chamadas teorias unificadas, que têm a vantagem de descrever satisfatoriamente qualquer região espectral da linha, para qualquer pressão. Dentre essas teorias, a mais popular foi desenvolvida por Anderson e Talman [28, 29].

## 1.1 Modelo Semiclássico de Anderson-Talman

O Modelo de Anderson e Talman foi desenvolvido com base nas teorias de Lindholm [27] e Foley [26] e permite descrever o perfil de uma linha espectral atômica, alargada devido às colisões, para qualquer densidade de perturbadores. As suposições necessárias são as seguintes:

- as forças interatômicas podem ser somadas escalarmente;
- os perturbadores descrevem trajetórias clássicas e retilíneas;
- os perturbadores são independentes;
- o emissor é apenas adiabaticamente perturbado.

A primeira dessas suposições consiste, em outras palavras, em admitir que todas as forças envolvidas possuem a mesma direção. Assumindo que elas sejam centrais, e que o problema será adiante reduzido a análise de uma colisão, isso é bastante razoável. Já a segunda suposição é mais restritiva: estamos assumindo que a força entre o emissor e o perturbador é pequena a ponto de não interferir na sua trajetória. Isso facilita consideravelmente os cálculos e, ainda assim, os resultados encontrados são coerentes com experimentos e observações, validando a suposição. Tal análise também permite concluir que a independência entre perturbadores é uma boa aproximação. Já o fato de considerarmos que o emissor é apenas adiabaticamente perturbado é coerente com assumirmos que a força entre ele e o perturbador é pequena e permite, além disso, que se utilize a aproximação de Born-Oppenheimer.

O Modelo de Anderson-Talman assume, ainda, que a emissão de um dos átomos pode ser descrita como um trem de ondas:

$$f(t) = f_0 e^{-i\omega_0 t} e^{-i\eta(t)}, \quad (1.1)$$

onde  $\omega_0$  é a frequência original do emissor e  $\eta(t)$  é a fase adquirida durante a colisão. O espectro de potências  $I(\omega)$  é calculado considerando o Teorema de Wiener-Khintchine, pelo

qual se obtém que  $I(\omega)$  é igual à transformada de Fourier da função de autocorrelação de  $f(t)$ ,  $\Phi(s)$ , ou seja:

$$\begin{aligned} I(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(s) e^{i\omega s} ds \\ &= \frac{1}{\pi} \text{Re} \left\{ \int_0^{\infty} \Phi(s) e^{i\omega s} ds \right\}. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Sendo o tempo de acompanhamento do trem de ondas  $s$ , essa função de autocorrelação, calculada a partir de um tempo inicial  $t$  em termos da amplitude de emissão  $f(t)$ , pode ser escrita como:

$$\Phi(s) = \langle f(t)^* f(t+s) \rangle_t, \quad (1.3)$$

de modo que

$$\Phi(s) \propto e^{-i\omega_0 s} \left\langle e^{\{-i[\eta(t+s)-\eta(t)]\}} \right\rangle_t. \quad (1.4)$$

Para simplificar a expressão, as frequências podem ser medidas a partir de  $\omega_0$ , o que permite remover a constante e escrever apenas:

$$\Phi(s) = \left\langle e^{\{-i[\eta(t+s)-\eta(t)]\}} \right\rangle_t. \quad (1.5)$$

Os desvios de fase são calculados considerando o efeito simultâneo de todos os perturbadores, de modo que a diferença de fase pode ser escrita como:

$$\eta(t+s) - \eta(t) = \int_t^{t+s} \sum_{k=1}^N \hbar^{-1} V_k [R_k(t')] dt', \quad (1.6)$$

onde consideramos que o potencial devido aos  $N$  perturbadores é:

$$V(t) = \sum_{k=1}^N V_k [R_k(t)], \quad (1.7)$$

sendo  $R_k$  a distância do  $k$ -ésimo perturbador ao emissor e  $V_k$  o potencial que descreve a interação entre eles. Teoricamente, a equação 1.7 é exata apenas para estados  $s$  [30], que são esfericamente simétricos, mas Baylis [31] e Sando, Erickson e Binning [32] verificaram que ela é uma aproximação satisfatória. Assim sendo, a função de autocorrelação fica:

$$\Phi(s) = \left\langle \exp \left[ -i \left( \int_t^{t+s} \sum_{k=1}^N \hbar^{-1} V_k [R_k(t')] dt' \right) \right] \right\rangle_t \quad (1.8)$$

$$= \left\langle \exp \left[ -i \left( \sum_{k=1}^N \int_t^{t+s} \hbar^{-1} V_k [R_k(t')] dt' \right) \right] \right\rangle_t. \quad (1.9)$$

Utilizando a hipótese ergódica, a média temporal da equação 1.8 pode ser substituída pela média sobre todas as geometrias de colisão possíveis a partir de um mesmo tempo inicial, que

pode ser tomado como  $t=0$ . Assim:

$$\Phi(s) = \left\langle \prod_{k=1}^N \exp \left[ -i \left( \int_0^s \hbar^{-1} V_k [R_k(t')] dt' \right) \right] \right\rangle_{\text{colisões}}. \quad (1.10)$$

Com a suposição de que os perturbadores são independentes, a média entre o produto de colisões pode ser substituída pelo produto das médias, de modo que obtemos enfim:

$$\Phi(s) = [\phi(s)]^N, \quad (1.11)$$

com

$$\phi(s) = \left\langle \exp \left( -i \int_0^s \hbar^{-1} V [R(t')] dt' \right) \right\rangle_{\text{colisões}}. \quad (1.12)$$

## 1.2 Inclusão dos Elementos de Dipolo no Modelo

A abordagem semiclássica do Modelo de Anderson-Talman fornece resultados satisfatórios, mas o modelo pode também ser abordado do ponto de vista quântico, que permite considerar interações mais realistas, melhorando as previsões. Em especial, a amplitude das linhas-satélite pode ser aperfeiçoada. Sabemos que elas aparecem quando há um extremo no potencial de interação [30], o qual permite a formação de um estado ligado entre emissor e perturbador, porém elas devem ser moduladas pelo momento de dipolo, que está associado à probabilidade de transição do elétron entre os estados final e inicial. Considerando essa probabilidade, é possível obter um perfil de linha mais realista.

Essa abordagem é desenvolvida por Nicole F. Allard [33] e será aqui resumida. A ideia básica é que a função de autocorrelação deve ser calculada em termos do momento de dipolo:

$$\Phi(s) = \left\langle \mathbf{D}^\dagger(0) \mathbf{D}(s) \right\rangle, \quad (1.13)$$

onde  $\mathbf{D}$  é o operador de dipolo na representação de Heisenberg.

O hamiltoniano total do gás, composto pelas partículas emissoras e pelos perturbadores, pode ser escrito como

$$\mathbf{H} = \mathbf{T}_{\text{nucl}} + \mathbf{T}_{\text{elec}} + V(\mathbf{x}, \mathbf{R}), \quad (1.14)$$

onde  $\mathbf{T}$  é o operador referente à soma das energias cinéticas nucleares (subscrito *nucl*) ou eletrônicas (subscrito *elec*) e  $V$  é a interação entre as partículas, sendo que  $\mathbf{x}$  refere-se ao conjunto de coordenadas dos elétrons e  $\mathbf{R}$  ao dos núcleos.

Desse modo, a matriz densidade é escrita como

$$\rho = \frac{e^{-\beta \mathbf{H}}}{\text{Tr} e^{-\beta \mathbf{H}}}, \quad (1.15)$$

e a função de autocorrelação fica:

$$\Phi(s) = \text{Tr} \rho \mathbf{D}^\dagger e^{-is\mathbf{H}/\hbar} \mathbf{D} e^{is\mathbf{H}/\hbar}, \quad (1.16)$$

sendo que Tr representa a operação de cálculo do traço, maneira pela qual as médias são calculadas nessa representação.

Consideramos, novamente, que os estados nucleares são apenas adiabaticamente perturbados, de modo que os estados do gás podem ser expandidos em termos das funções de onda eletrônicas correspondentes a uma determinada configuração nuclear. Esses estados  $\chi_e(x; R)$  são ditos adiabáticos, porque seguem adiabaticamente o movimento nuclear representado pela coordenada  $R$ , que assume o papel de parâmetro. Com isso, eliminamos o termo cinético do hamiltoniano referente aos núcleos, que agora são fixos na configuração representada por  $R$ , e a equação de Schrödinger fica:

$$[\mathbf{T}_{\text{elec}} + V(\mathbf{x}, \mathbf{R})] \chi_e(x; R) = \mathbf{H}_{\text{elec}}(R) \chi_e(x; R) \quad (1.17)$$

$$= E_e(R) \chi_e(x; R) \quad (1.18)$$

Desconsiderando a interferência entre diferentes linhas, podemos levar em conta apenas os elementos diagonais da função de autocorreção, de forma que

$$\Phi(s) = \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha}(s) = \sum_{\alpha} \langle \mathbf{D}_{\alpha}^{\dagger}(0) \mathbf{D}_{\alpha}(s) \rangle, \quad (1.19)$$

onde o índice  $\alpha$  representa um conjunto de transições que, quando  $R \rightarrow \infty$ , têm contribuição na mesma frequência, ou seja, compõem uma mesma linha.

É útil, ainda, tratar da função de autocorrelação em uma representação de interação em que descontamos o comportamento de ordem zero,  $\Phi_{\alpha}^{(0)}(s)$ , obtido na ausência de perturbadores. Escrevemos:

$$\Psi_{\alpha}(s) = \frac{\Phi_{\alpha}(s)}{\Phi_{\alpha}^{(0)}(s)}. \quad (1.20)$$

Então, no caso de ausência de perturbadores,  $\Psi_{\alpha}(s) = 1$ . Assumindo, a seguir, que os perturbadores são descorrelacionados, escrevemos a função para  $N$  perturbadores  $\Psi_{\alpha}^{(N)}(s)$  como:

$$\Psi_{\alpha}^{(N)}(s) = \left[ \Psi_{\alpha}^{(1)}(s) \right]^N. \quad (1.21)$$

A função  $\Psi_{\alpha}^{(1)}(s)$  é distinta da função de ordem zero apenas se o perturbador interage com o emissor no tempo  $s$ . A probabilidade de que interação ocorra é proporcional a  $1/\mathcal{V}$ , onde  $\mathcal{V}$  é o volume de interação. É razoável, portanto, considerar que ela possa ser expandida na forma

$$\Psi_{\alpha}^{(1)}(s) = 1 + \frac{1}{\mathcal{V}} f_{\alpha}(s), \quad (1.22)$$

onde

$$f_\alpha(s) = \mathcal{V} \left[ \Psi_\alpha^{(1)}(s) - 1 \right] \quad (1.23)$$

$$= \mathcal{V} \left( \frac{\Phi_\alpha^{(1)}(s)}{\Phi_\alpha^{(0)}(s)} - 1 \right) \quad (1.24)$$

$$= \mathcal{V} \left( \frac{\langle \mathbf{D}_\alpha^{(1)\dagger}(0) \mathbf{D}_\alpha^{(1)}(s) - \mathbf{D}_\alpha^{(0)\dagger}(0) \mathbf{D}_\alpha^{(0)}(s) \rangle}{\Phi_\alpha^{(0)}(s)} \right). \quad (1.25)$$

No limite  $\mathcal{V} \rightarrow \infty$ , para o qual a aproximação é boa, podemos escrever

$$\Psi_\alpha^{(N)}(s) = \left( 1 + \frac{1}{N} \frac{N}{\mathcal{V}} f_\alpha(s) \right)^N \quad (1.26)$$

$$\approx e^{n f_\alpha(s)}, \quad (1.27)$$

onde a densidade de perturbadores,  $N/\mathcal{V}$ , é expressa como  $n$ .

Definimos, também,

$$g_\alpha(s) = f_\alpha(s) - f_\alpha(0) \quad (1.28)$$

e um perfil de linha normalizado

$$J_\alpha(\Delta\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^\infty e^{n g_\alpha(s)} e^{-i\Delta\omega s} ds, \quad (1.29)$$

no qual o produto entre a função  $\Phi_\alpha^{(0)}(s)$  e sua conjugada é omitido, o que é equivalente a normalizar o perfil pela norma quadrada  $\Phi_\alpha^{(0)}(s)$ . Tal perfil pode ser calculado, por conseguinte, apenas a partir da função  $g_\alpha(s)$ .

Utilizando o hamiltoniano dado, obtemos, conforme a referência [33]:

$$g_\alpha(s) = \frac{(2\pi\hbar)^3}{\int d\vec{p} e^{-\beta(\vec{p}^2/2\mu)}} \times \frac{\sum_{e \in \mathcal{E}_i} \sum_{e' \in \mathcal{E}_f} \text{Tr}_r e^{-\beta \mathbf{H}_e} d_{ee'}(\vec{r}) \left[ e^{i s \mathbf{H}_{e'}/\hbar} d_{e'e}(\vec{r}) e^{-i s \mathbf{H}_e/\hbar} - d_{ee'}(\vec{r}) \right]}{\sum_{e, e'}^{(\alpha)} |d_{ee'}^{(0)}|^2}, \quad (1.30)$$

onde  $\mathcal{E}_i$  é o subespaço que contém todos os estados iniciais,  $\mathcal{E}_f$  contém os finais,  $\text{Tr}_r$  é o traço sobre os estados nucleares e

$$\mathbf{H}_e = \mathbf{T}_{nucl} + V_e(\vec{r}) \quad (1.31)$$

$$\mathbf{d}_\alpha(s) = \mathbf{D}_\alpha(s) e^{-i\omega_\alpha s} \quad (1.32)$$

$$d_{ee'}(\vec{r}) = \langle \chi_e(\vec{r}) | \mathbf{d} | \chi_{e'}(\vec{r}) \rangle. \quad (1.33)$$

O traço é mais convenientemente calculado em uma base  $|\vec{r}\vec{p}\rangle$  com a aproximação:

$$\mathbf{r}_0(t)|\vec{r}\vec{p}\rangle \approx \left(\vec{r} + \frac{\vec{p}t}{\mu}\right)|\vec{r}\vec{p}\rangle, \quad (1.34)$$

o que permite obter

$$g_\alpha(s) = \frac{1}{\int d\vec{p} e^{-\beta(\vec{p}^2/2\mu)} \sum_{ee'}^{(\alpha)} |d_{ee'}|^2} \sum_{ee'}^{(\alpha)} \int d\vec{r} d\vec{p} e^{-\beta(\vec{p}^2/2\mu)} \tilde{d}_{ee'}(\vec{r}) \times \\ \left\{ \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_0^s V_{ee'}(\vec{r} + \vec{p}t/m) dt \right] \tilde{d}_{ee'}(\vec{r} + \vec{p}s/m) - d_{ee'}(\vec{r}) \right\}, \quad (1.35)$$

onde

$$V_{ee'}(\vec{r}) = V_{e'}(\vec{r}) - V_e(\vec{r}) \quad (1.36)$$

$$\tilde{d}_{ee'}(\vec{r}) = d_{ee'}(\vec{r}) e^{-\frac{\beta}{2} V_e(\vec{r})}. \quad (1.37)$$

Basta, então, escolher um conjunto de coordenadas adequado para o cálculo da integral, e o perfil de linha fica determinado, conforme 1.29.

## 2 *Objetivos*

Vimos que a forma da linha espectral está fortemente atrelada às propriedades químicas e físicas do gás que a origina, como composição química, temperatura e densidade. Assim, por meio do conhecimento teórico da linha, e de como cada propriedade do gás a afeta, podemos ajustar modelos às medidas experimentais ou observacionais e obter informações sobre o gás. O hidrogênio atômico, por sua estrutura elementar, permite que se obtenham resultados teóricos bastante precisos. Além disso, sua interação com prótons ( $H^+$ ) pode ser reduzida a um problema de dois corpos e modelada de uma maneira simples, mas satisfatória.

Sendo hidrogênio o componente da atmosfera de estrelas anãs brancas do tipo DA, a compreensão do seu espectro é essencial na determinação das propriedades físicas dessas estrelas. Além disso, a maioria das anãs brancas têm temperaturas altas o bastante para que existam prótons livres em sua atmosfera, já que sua escala de tempo de esfriamento é da ordem da idade do Universo, de modo que o estudo do efeito de suas colisões com o hidrogênio é necessário para conhecermos as propriedades da estrela. Como cerca de 95% de todas as estrelas evoluem para anãs brancas, e mais de 80% das anãs brancas são DAs [34], tais estrelas traçam a história da formação e evolução das estrelas na Galáxia.

A inclusão de cálculos levando em conta os efeitos de prótons como uma fonte de opacidade em modelos de atmosfera permite, por meio da comparação de espectros observados com calculados, uma determinação mais precisa da temperatura e da gravidade superficial da estrela. Atualmente, existem discrepâncias entre as determinações feitas via espectroscopia e via outros métodos, como fotometria ou avermelhamento gravitacional, o que comprova a necessidade de melhorias nos modelos. A luz emitida pela estrela também está associada a seu resfriamento, já que as anãs brancas não realizam processos de fusão. A taxa de resfriamento pode ser estimada modelando a atmosfera e estudando a opacidade, de modo que a temperatura da estrela também dá indicativos de sua idade [35]. Esse último fato é de interesse da cosmologia, pois a idade das anãs brancas mais velhas pode ser utilizada como limite inferior para as idades da Galáxia e do Universo.

Na literatura, esses cálculos podem ser encontrados, para diferentes interações, utilizando os três métodos descritos na introdução: a Aproximação Quasi-estática [30, 36, 37], o Modelo Quântico [38] e a Teoria Unificada [33] e apresentam resultados que têm boa concordância [17]. Contudo, para o hidrogênio perturbado por prótons, os dados teóricos referentes aos potenciais e dipolos existiam para poucos níveis de energia, permitindo apenas o cálculo de perfis até  $Ly\gamma$ , para a série de Lyman, e, para a série de Balmer, apenas  $H\alpha$ . Essa deficiência foi preenchida pelo artigo de Santos & Kepler [17], em que se realizam os cálculos de potenciais e dipolos suficientes para que se obtenha a série de Lyman até  $Ly\delta$  e a série de Balmer até  $H10$ .

Considerando, então, a importância do conhecimento preciso do espectro do hidrogênio e a recente publicação de novos dados teóricos, o objetivo deste trabalho é nos familiarizarmos com

a Teoria Unificada para podermos utilizá-la para descrever o efeito das colisões com prótons no espectro do átomo de hidrogênio. Os cálculos necessários para isso podem, na maior parte dos casos, ser realizados apenas numericamente, afinal não existe solução analítica mesmo para sistemas de três corpos (como dois prótons e um elétron). Logo, é necessário desenvolver um programa capaz de calcular, dada uma temperatura e uma densidade de prótons, a contribuição à linha espectral devido às colisões com esses prótons. Esse é o primeiro passo do trabalho. É preciso, também, escolher um potencial que modele a interação entre as partículas. Potenciais simples, como do tipo poço-quadrado ou de Lennard-Jones podem ser utilizados, e já mostram, como veremos, os efeitos qualitativos das colisões. Eles serão utilizados, além disso, por minimizarem o custo computacional. Contudo, melhores resultados quantitativos são obtidos com potenciais realistas, como são os calculados por Santos & Kepler, conforme comentado no parágrafo anterior.

### 3 Metodologia

Mesmo com as simplificações do Modelo de Anderson-Talman, o cálculo da função de autocorrelação não pode, em geral, ser realizado analiticamente [39]. A única exceção é no caso do potencial do tipo poço-quadrado [40]. Esse potencial, apesar de ser rudimentar demais para descrever bem a interação entre hidrogênio e prótons, é uma primeira aproximação que permite estudar algumas propriedades das linhas-satélite, como variação com densidade de perturbadores e temperatura, já que os cálculos da linha podem ser realizados de maneira rápida.

Além disso, de posse dos resultados analíticos, temos um bom teste para um programa numérico: basta rodá-lo com os mesmos parâmetros de entrada e exigir que os resultados sejam iguais. Com o cálculo numérico, podemos então obter os perfis de linha, dentro de uma certa precisão, para diferentes potenciais, que descrevam melhor a interação entre o emissor e o perturbador, como, por exemplo, o potencial de Lennard-Jones. Com algumas modificações no programa, podemos ainda incluir os momentos de dipolo no cálculo e obter uma linha espectral realista, que possa ser utilizada em modelos de atmosfera, os quais calculam a contribuição ao espectro para temperaturas e pressões de diferentes profundidades óticas.

O primeiro passo é escolher uma geometria adequada para realizar o cálculo da média na equação 1.12. Se o potencial for esfericamente simétrico, a geometria ilustrada na figura 3.1 é uma boa opção. Como já dito, assumimos que as trajetórias dos perturbadores são retilíneas e, ainda, supomos que eles se deslocam a uma velocidade constante. Essa aproximação é boa se a energia cinética é muito superior à potencial, o que ocorre para altas temperaturas. O parâmetro de impacto é denotado por  $b$  e a posição no tempo inicial é  $x_0$ .

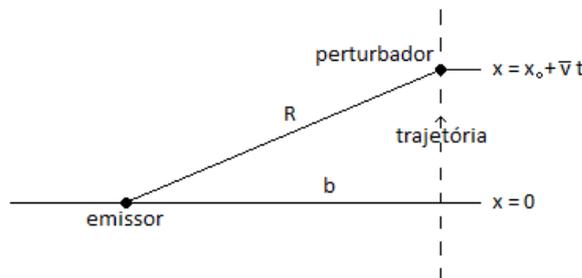


Figura 3.1: Geometria escolhida para o cálculo da média sobre colisões.

Sendo assim, a média da equação 1.12 pode ser expressa por integrais sobre todos os possíveis parâmetros de impacto e posições iniciais do perturbador no interior do volume de interação  $\mathcal{V}$ , limitado pelo alcance do potencial, e sobre todas as velocidades possíveis dada a

temperatura considerada, ou seja:

$$\phi(s) = \frac{1}{\mathcal{V}} \iiint_{\mathcal{V}} 2\pi b f(v) dv db dx_0 \exp\left(-i \int_0^s \hbar^{-1} V \left[(b^2 + x^2)^{1/2}\right] dt\right), \quad (3.1)$$

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

$$f(v) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{k_b T}\right)^3 v^2 e^{-\frac{mv^2}{2k_b T}}, \quad (3.2)$$

sendo  $k_b$  a constante de Boltzmann e  $m$  a massa dos perturbadores, e, conforme a figura 3.1,  $R = \sqrt{b^2 + x^2}$  e  $x = x_0 + vt$ . A média sobre todas as velocidades eleva bastante o custo computacional, de modo que, na maioria dos cálculos, será assumida uma velocidade única para as partículas, dada pela velocidade média maxwelliana a temperatura  $T$ , ou seja:

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8k_b T}{\pi m}},$$

o que equivale a substituir  $f(v)$  por uma delta de Dirac,  $\delta(v - \bar{v})$ , eliminando a integral em  $v$ .

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

$$\Phi(s) = \frac{1}{\mathcal{V}} \iint_{\mathcal{V}} 2\pi b db dx_0 \exp\left(-i \int_0^s \hbar^{-1} V \left[(b^2 + x^2)^{1/2}\right] dt\right) \quad (3.3)$$

$$= \left\{ 1 - \frac{1}{\mathcal{V}} \iint_{\mathcal{V}} 2\pi b db dx_0 \times \right. \\ \left. \times \left[ 1 - \exp\left(-i \int_0^s \hbar^{-1} V \left[(b^2 + x^2)^{1/2}\right] dt\right) \right] \right\}^N \quad (3.4)$$

onde, agora,  $x = x_0 + \bar{v}t$ . Assumindo um volume de interação suficientemente grande, podemos utilizar a aproximação  $(1 - \alpha)^N \simeq e^{-N\alpha}$ , válida para  $\alpha \ll 1$  e  $N \gg 1$  e escrever  $\Phi(s)$  de maneira semelhante à obtida no Modelo Quântico:

$$\Phi(s) = e^{-ng(s)}, \quad (3.5)$$

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

$$g(s) = 2\pi \int_0^\infty b db \int_{-\infty}^\infty dx_0 \left[ 1 - \exp\left(-i \int_0^s \hbar^{-1} V [R(t')] dt\right) \right]. \quad (3.6)$$

A partir dessa equação, o caráter unificado da teoria é facilmente verificado fazendo os limites de  $\bar{v} \rightarrow 0$  e de  $s \rightarrow \infty$ . No primeiro caso, é como se a partícula estivesse parada no interior do volume de interação, o que simplifica a integral do desvio de fase, que fica igual a  $\hbar^{-1} V(R)s$ , e reduz a integração apenas à variável  $R$ . Conforme Allard & Kielkopf [30], o que se obtém são os perfis dados pela Aproximação Quasi-estática desenvolvida por Kuhn [13–15]. Fazendo o outro limite, Anderson [28] demonstrou que se obtinha um perfil lorentziano deslocado, compatível com a chamada Aproximação de Impacto. Assim, o Modelo de Anderson-Talman mostra-se ligado a pelo menos três diferentes abordagens: a Aproximação Quasi-estática, a Aproximação de Impacto e, ainda, o Modelo Quântico.

A escolha da geometria da figura 3.1, mais a suposição de que os perturbadores têm velocidade constante, permite também simplificar as equações para a abordagem quântica do modelo. A expressão 1.35 pode ser escrita como:

$$g_{\alpha}(s) = \frac{1}{\sum_{ee'}^{(\alpha)} |d_{ee'}|^2} \sum_{ee'}^{(\alpha)} \int_0^{\infty} 2\pi b db \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \tilde{d}_{ee'} [r(0)] \times \left[ \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_0^s dt' V_{ee'} [r(t')] \right) \tilde{d}_{ee'} [r(s)] - d_{ee'} [r(0)] \right]. \quad (3.7)$$

Podemos notar que as duas expressões, 3.6 e 3.7, diferem apenas devido à inclusão dos dipolos no cálculo, os quais, conforme já dito, funcionarão como moduladores. Assim, o problema numérico é análogo, e o mesmo programa pode ser utilizado para ambos cálculos, basta apenas adaptá-lo para que leve em conta os dipolos, que serão um parâmetro de entrada extra.

Devemos, primeiramente, converter o potencial  $V(R)$  para  $V(t)$ . Para isso, precisamos calcular a trajetória do perturbador para cada valor de  $b$  e  $x_0$ . Por simplicidade, isso é feito considerando uma velocidade constante, conforme já discutido. Depois, calculamos os desvios de fase para cada valor de  $s$ ,  $b$  e  $x_0$  e, por fim, integramos a expressão sobre todos os valores de  $b$  e  $x_0$ , o que dá  $g(s)$ , ou  $g_{\alpha}(s)$  no caso quântico. A função de autocorrelação fica assim determinada. Para obter o perfil de linha, é necessário fazer a transformada de Fourier de  $\Phi(s)$ . Neste ponto há uma complicação a mais: dificilmente conseguimos calcular a função de autocorrelação em um intervalo grande o suficiente para que ela vá a zero em tempo computacional hábil, ou seja, a função fica truncada em um valor  $\tau$ , o que é equivalente a dizer que ela foi multiplicada por um pulso retangular, como o da figura 3.2. Assim, pelo teorema da convolução,

$$\mathcal{F}\{f \cdot g\} = \mathcal{F}\{f\} * \mathcal{F}\{g\},$$

o que obtemos não é diretamente o perfil de linha, e sim o perfil convoluído com a transformada de um pulso retangular, também mostrada na figura 3.2.

Isso irá introduzir uma série de oscilações no perfil que podem ser confundidas com linhas-satélite, mas não são reais. Esse problema é discutido por Allard et al. [41], que sugerem o uso de uma função janela distinta do pulso retangular. Essa função deve ser escolhida tal que sua transformada não possua oscilações consideráveis, de modo que o perfil de linha não seja contaminado. Uma boa escolha é a função, ou núcleo, de Fejér, dada por:

$$f_n(x) = \frac{1}{n} \left( \frac{\text{sen} \frac{nx}{2}}{\text{sen} \frac{x}{2}} \right)^2 \quad (3.8)$$

onde o  $n$  é escolhido tal que a função tenha um zero no valor desejado. Podemos ainda multiplicar a função por uma constante para que ela possua a amplitude conveniente. Um exemplo de função utilizada, juntamente com sua transformada, encontra-se na figura 3.3. Podemos notar que as oscilações são drasticamente reduzidas pelo uso de um núcleo de Fejér, o que minimiza a possibilidade de falsos satélites nos perfis de linha calculados, apesar de alargar o perfil (conforme figura 3.3).

Há ainda um outro fator complicador: o método da transformada de Fourier discreta utilizado para obter os perfis, já que a função de autocorrelação é obtida numericamente para um conjunto discreto de valores  $s$ , dá uma transformada periódica. Essa periodicidade, contudo, não

é real, e sim um efeito de amostragem, sendo proporcional ao inverso do passo  $ds$  do cálculo da função de autocorrelação, conforme pode ser visto na figura 3.4.

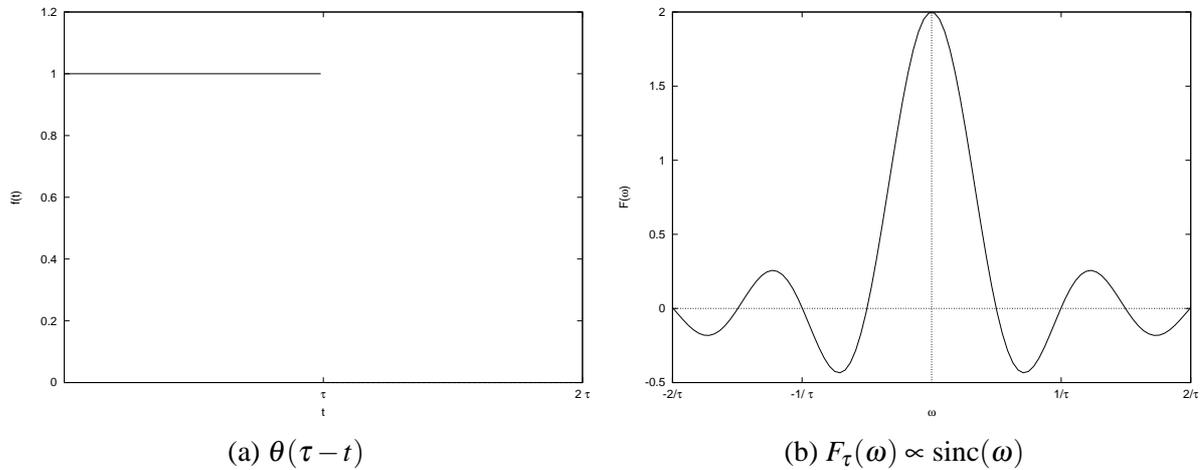


Figura 3.2: Pulso retangular e sua transformada de Fourier.

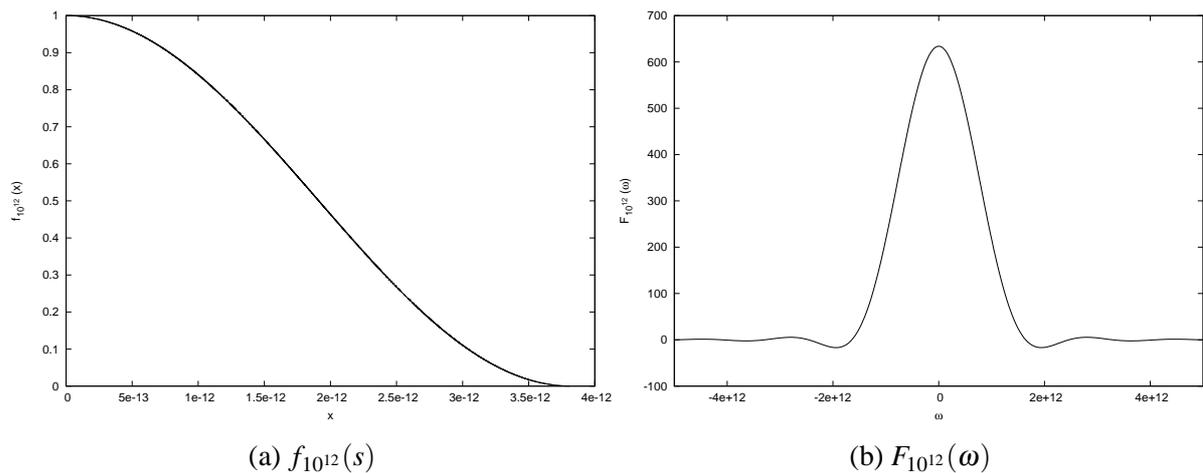


Figura 3.3: Função de Fejér para  $n = 10^{12}$  e sua transformada de Fourier.

Sendo assim, é necessário utilizar um passo pequeno o bastante para que o intervalo em frequências obtido seja suficiente para descrever o perfil espectral (Teorema de Nyquist). Devido ao problema anterior, porém, não podemos ir até um valor muito pequeno de  $s$ , pois haverá perda de informação e o perfil acabará dominado pela função janela. Devemos, então, encontrar um passo pequeno tal que o intervalo em frequências seja satisfatório, mas também grande o suficiente para que se atinja um valor aceitável de  $s$  em tempo computacional hábil, o que nem sempre é possível.

O método se resume então a escolher um potencial adequado, calcular a função de autocorrelação para uma dada temperatura e uma dada densidade de perturbadores com o passo conveniente encontrado, escolher uma boa função janela e, enfim, calcular a transformada de Fourier da função de autocorrelação multiplicada por essa janela, que não insira novas oscilações. Os programas para cada um desses passos foram escritos em linguagem Fortran90, escolhida por sua facilidade em lidar com números complexos e matrizes.

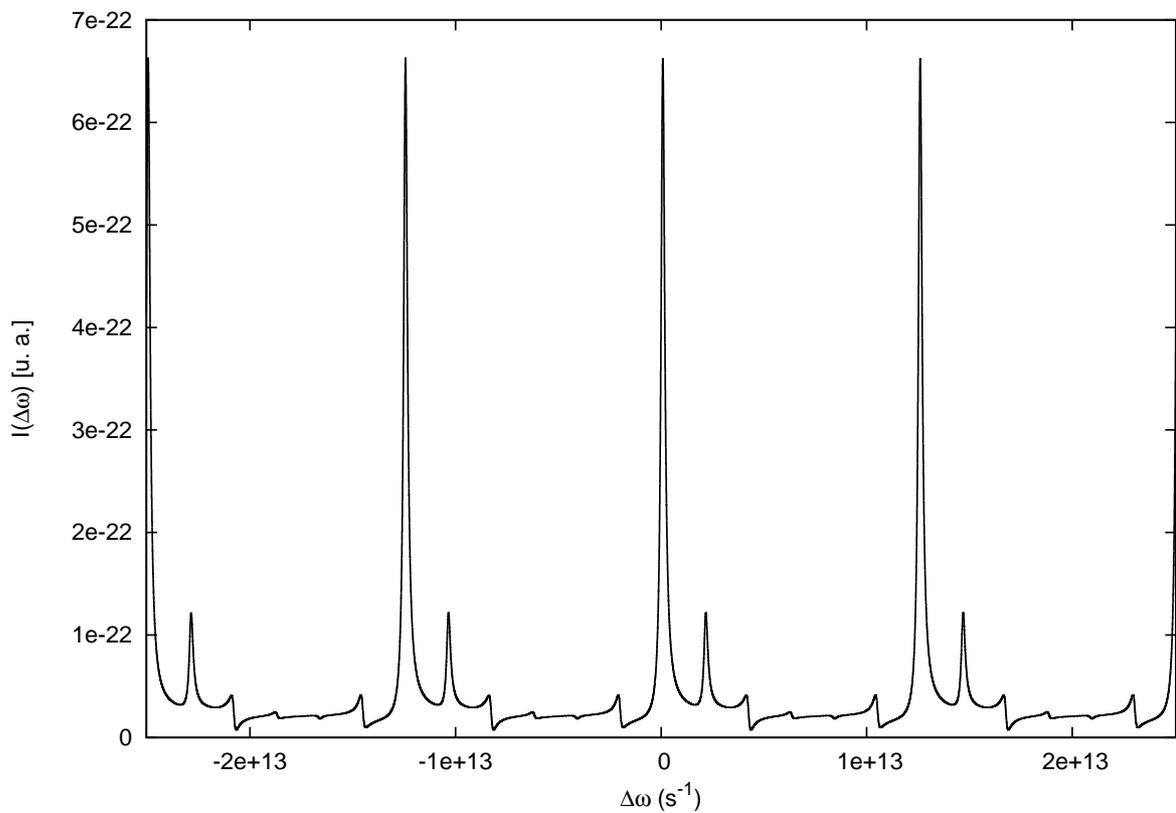


Figura 3.4: Transformada de Fourier discreta para uma função de autocorrelação calculada para um potencial de Lennard-Jones, com passo  $ds = 5,0185 \times 10^{-13}$  s. O que obtemos é um perfil com periodicidade de  $T = \frac{2\pi}{ds} = 1,2520 \times 10^{13} \text{s}^{-1}$ , sendo que a informação real está contida em apenas um período, no intervalo entre  $-6,260 \times 10^{12} \text{s}^{-1}$  e  $6,260 \times 10^{12} \text{s}^{-1}$ .

## 4 Desenvolvimento do trabalho

### 4.1 Solução analítica: potencial tipo poço-quadrado

É evidente que a interação entre duas partículas como o H e o  $H^+$  não pode ser representada por um potencial de poço-quadrado. Ela é muito mais complexa do que isso, dependendo dos estados quânticos final e inicial das partículas e da transição que estamos analisando. Só a linha ultravioleta de Lyman  $\alpha$  corresponde a seis diferentes transições [17], e cada uma delas está associada a uma diferença de energia potencial distinta, conforme figura 4.1.

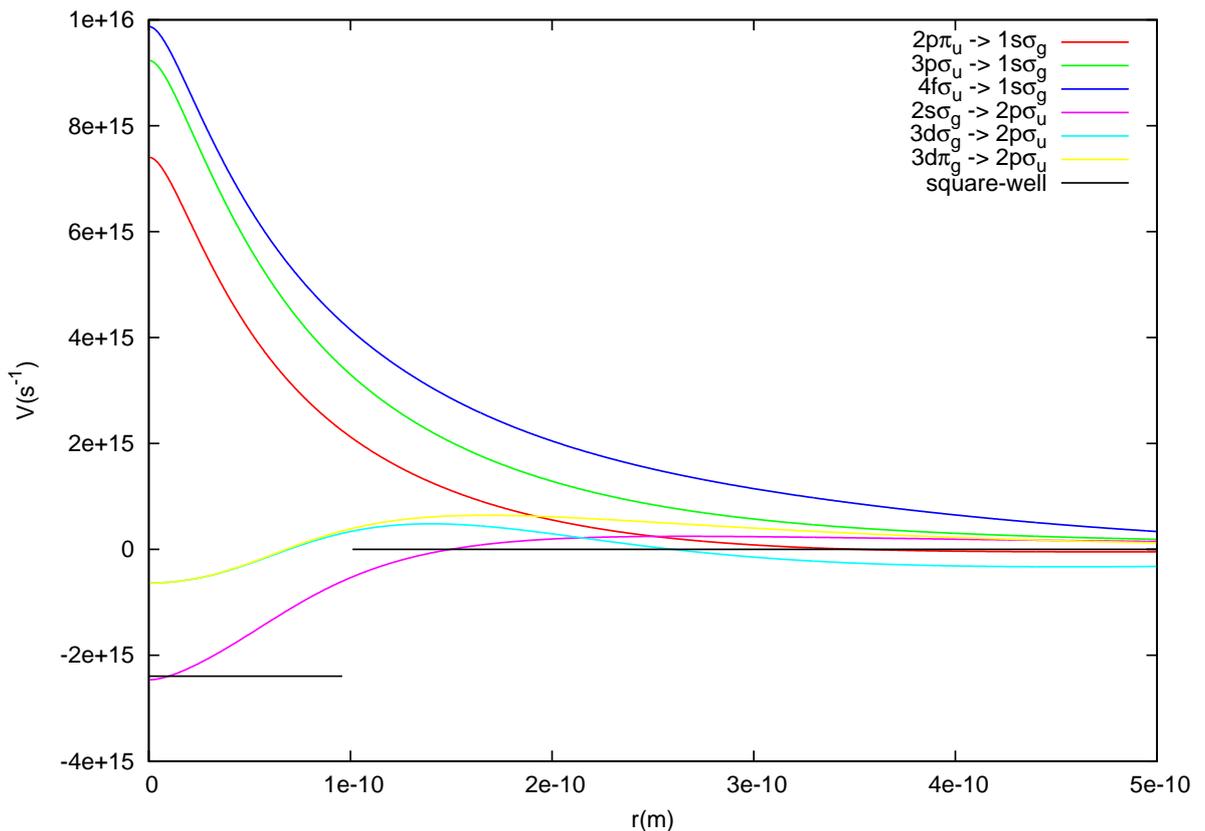


Figura 4.1: Diferenças de potencial, em  $s^{-1}$ , para as transições que contribuem para a linha  $Ly\alpha$ , juntamente com o potencial de poço-quadrado a ser utilizado. Na legenda do gráfico, os estados que correspondem a cada transição.

Contudo, antes de partir para cálculos realistas, é interessante trabalhar com o modelo mais

simples e, além disso, analítico, que corresponde ao uso de um potencial de poço-quadrado:

$$V(R) = \begin{cases} V_0, & \text{se } R \leq a \\ 0, & \text{se } R > a \end{cases} . \quad (4.1)$$

Tal modelo é sugerido por Allard [40] para o estudo das linhas de emissão do céσιο perturbado por xenônio. Nele, consideramos que as partículas interagem apenas por meio do potencial tipo poço, sem levar em conta diferentes transições contribuindo para a linha, nem momentos de dipolo modulando-a. O problema é completamente análogo ao do hidrogênio perturbado por prótons, as equações e soluções serão as mesmas, a diferença são os parâmetros físicos a serem utilizados.

Em seu artigo, Allard utiliza, para a maioria dos cálculos, os valores  $V_0 = -2,5 \times 10^{-13} \text{s}^{-1}$  e  $a = 6 \times 10^{-10} \text{m}$ . Ela considera, também, temperaturas de no máximo algumas centenas de Kelvin e densidades na faixa de  $10^{20} \text{cm}^{-3}$ . Em alguns momentos, esses parâmetros serão utilizados neste trabalho com o intuito de verificar os resultados obtidos com os publicados por Allard. Contudo, para descrever a interação entre o hidrogênio e o próton, os parâmetros utilizados serão aqueles do potencial representado na figura 4.1,  $V_0 = -2,3967 \times 10^{15} \text{s}^{-1}$  e  $a = 1 \times 10^{-10} \text{m}$ , obtidos a partir do ajuste de um poço-quadrado a um dos potenciais realistas. Além disso, as condições de temperatura e pressão também devem ser distintas se quisermos especificamente descrever a atmosfera de uma anã branca DA. As temperaturas devem ser da ordem de  $10^4 \text{K}$  e a densidade em torno de  $10^{17} \text{cm}^{-3}$ .

Desconsiderando o dipolo, vimos que o perfil de linha pode ser escrito em termos de uma Transformada de Fourier via a equação 1.2, sendo que a função de autocorrelação é dada pelas equações 3.5 e 3.6. É útil separar as partes real e imaginária de  $g(s)$ , ou seja, escrever

$$g(s) = w(s) + id(s), \quad (4.2)$$

de modo que

$$w(s) + id(s) = \int_0^\infty 2\pi b db \int_{-\infty}^\infty (1 - e^{-i\eta(s)}) dx_0, \quad (4.3)$$

onde  $\eta(s)$  é o desvio de fase calculado ao longo da trajetória retilínea de velocidade constante  $\bar{v}$ , dado em unidades atômicas ( $\hbar = 1$ ) por:

$$\eta(s) = \int_0^s V(t') dt'. \quad (4.4)$$

O desvio de fase só irá depender do tempo de correlação  $s$  no caso desse tempo ser menor do que o tempo máximo de colisão, que, sendo o alcance do potencial dado por  $a$ , é  $\tau_{max} = 2a/\bar{v}$ . Caso contrário, ele é simplesmente a magnitude do potencial vezes o tempo de permanência na região de potencial não-nulo  $V_0$ , dada por  $2\sqrt{a^2 + b^2}/\bar{v}$ . Substituindo essa expressão em 4.3 e integrando sobre todo o volume de interação, obtemos as expressões para  $w(s)$  e  $d(s)$  no caso  $t \geq \tau_{max}$ , dadas, conforme [40], por:

$$w_{>}(s) = \alpha s + w_0 \quad (4.5)$$

$$d_{>}(s) = \beta s + d_0 \quad (4.6)$$

onde

$$\alpha = \frac{3\bar{v}}{4a} \left\{ 1 + \frac{\bar{v}^2}{2a^2V_0^2} \left[ 1 - \cos\left(\frac{2aV_0}{\bar{v}}\right) - \left(\frac{2aV_0}{\bar{v}}\right) \text{sen}\left(\frac{2aV_0}{\bar{v}}\right) \right] \right\} \quad (4.7)$$

$$\beta = \frac{3\bar{v}^3}{8a^3V_0^2} \left[ \left(\frac{2aV_0}{\bar{v}}\right) \cos\left(\frac{2aV_0}{\bar{v}}\right) - \text{sen}\left(\frac{2aV_0}{\bar{v}}\right) \right] \quad (4.8)$$

$$w_0 = 1 + \frac{3\bar{v}^3}{2a^3V_0^3} \left[ \left(\frac{2aV_0}{\bar{v}}\right) \cos\left(\frac{2aV_0}{\bar{v}}\right) + \text{sen}\left(\frac{2aV_0}{\bar{v}}\right) \left(\frac{a^2V_0^2}{\bar{v}^2} - 1\right) \right] \quad (4.9)$$

$$d_0 = \frac{3\bar{v}}{2aV_0} \left\{ 1 + \frac{\bar{v}^2}{a^2V_0^2} \left[ 1 - \left(\frac{2aV_0}{\bar{v}}\right) \text{sen}\left(\frac{2aV_0}{\bar{v}}\right) + \cos\left(\frac{2aV_0}{\bar{v}}\right) \left(\frac{a^2V_0^2}{\bar{v}^2} - 1\right) \right] \right\}. \quad (4.10)$$

Já no caso de  $t \leq \tau_{max}$ , o desvio de fase depende de  $s$ , pois esse é o tempo de permanência na região de potencial não-nulo. Isso torna as integrais em 4.3 mais complicadas, mas a expressão ainda é analítica e, segundo [40], igual a:

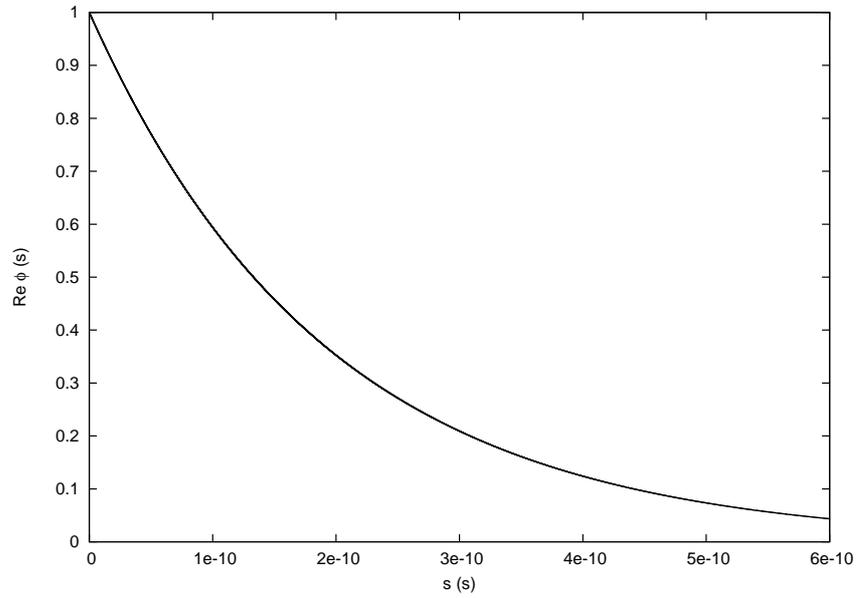
$$w_{<}(s) = 1 - \cos(V_0s) + 3 \left[ \frac{\bar{v}s}{2a} \left( \frac{\bar{v}}{4a^2V_0^2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\bar{v}s}{2a} \cos(V_0s) \left( \frac{1}{2} + \frac{3\bar{v}^2}{4a^2V_0^2} - \frac{\bar{v}^2s^2}{24a^2} \right) \right. \\ \left. + \frac{\bar{v}}{2aV_0} \text{sen}(V_0s) \left( \frac{\bar{v}^2s^2}{4a^2} - \frac{\bar{v}}{a^2V_0^2} - 1 \right) \right] \quad (4.11)$$

$$d_{<}(s) = \frac{3\bar{v}}{2aV_0} \left( 1 + \frac{\bar{v}^2}{a^2V_0^2} \right) + \text{sen}(V_0s) - 3 \left[ \frac{\bar{v}s}{2a} \text{sen}(V_0s) \left( \frac{1}{2} + \frac{3\bar{v}^2}{4a^2V_0^2} - \frac{\bar{v}^2s^2}{24a^2} \right) \right. \\ \left. + \frac{\bar{v}}{2aV_0} \cos(V_0s) \left( 1 + \frac{\bar{v}}{a^2V_0^2} - \frac{\bar{v}^2s^2}{4a^2} \right) \right]. \quad (4.12)$$

De posse dessas expressões, é simples escrever um programa que, dados o valor da amplitude do potencial  $V_0$ , da temperatura  $T$ , da densidade de perturbadores  $n$  e do alcance  $a$  do potencial, calcule a expressão para a função de autocorrelação. É necessário que ela possa ser expressa numericamente porque, apesar de ter forma analítica, sua Transformada de Fourier, que dá o perfil de linha, não é analítica, e precisa ser calculada por métodos numéricos.

Nas figuras 4.2 e 4.3, um exemplo de função de autocorrelação calculada com esse programa. O potencial utilizado é o poço-quadrado da figura 4.1, assumindo ainda uma temperatura de 13000K e densidade de perturbadores  $\sim 10^{19} \text{cm}^{-3}$ , parâmetros compatíveis com a atmosfera de uma anã branca DA. Notamos que as funções oscilam até o valor de  $s = 2a/\bar{v}$ , e depois passam a decair. O perfil de linha correspondente a essa função pode ser visto na figura 4.4. O pico central é completamente dominante, mas há satélites nos múltiplos da profundidade  $V_0$  do poço, conforme verificado por Allard [40]. Apenas o primeiro deles é plotado, pois os demais tornam-se imperceptíveis. Notamos, também, algumas oscilações na borda do satélite, as quais também foram observadas por Allard [40] e estão associadas à geometria do potencial. É um efeito que pode ser interpretado de forma análoga à difração por uma fenda: um perturbador passando pelo potencial é análogo a uma onda difratando por uma fenda, resultando em oscilações coerentes com o padrão de difração. O período dessas oscilações depende da velocidade, de modo que realizar uma média sobre velocidades em vez de assumir uma velocidade única elimina o efeito, o que explica porque ele não é observado.

Para o mesmo potencial, mas uma temperatura de 20000K e densidade de  $\sim 10^{17} \text{cm}^{-3}$ , os



(a) comportamento geral

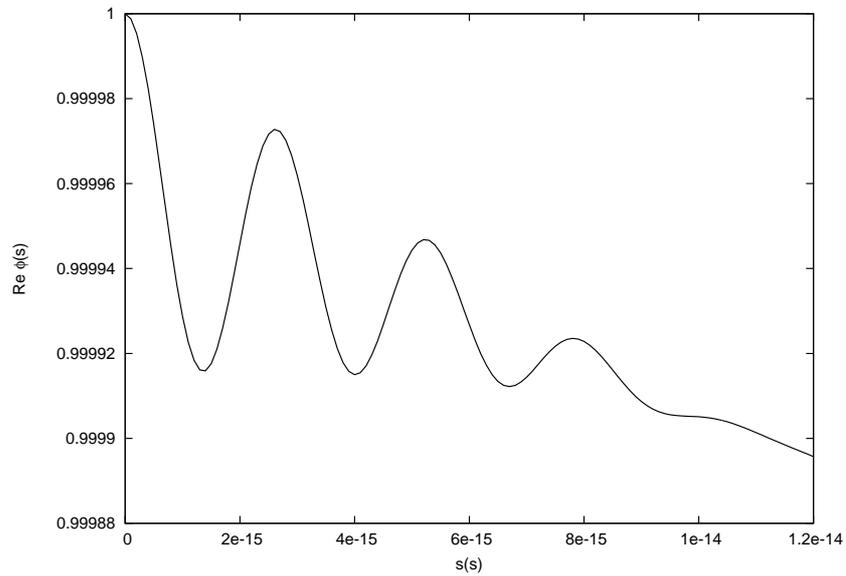
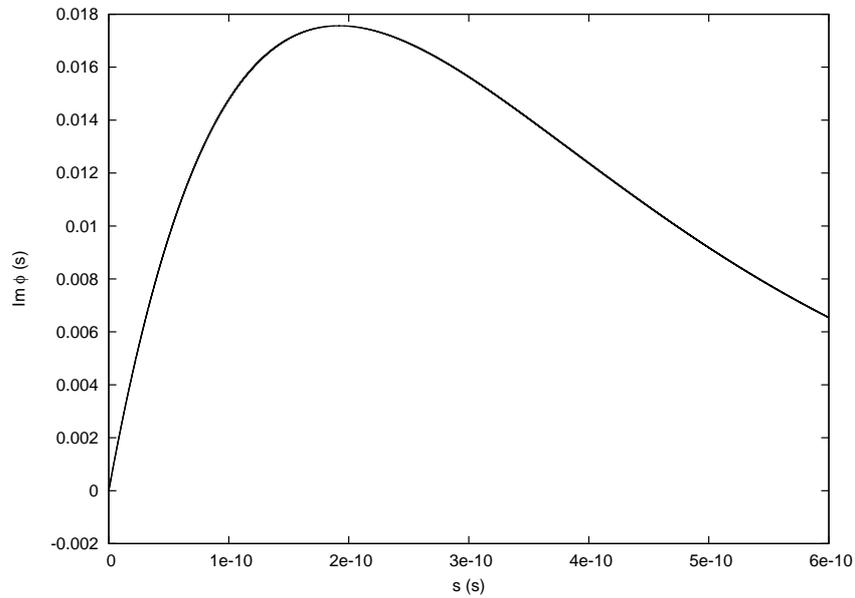
(b) detalhe das oscilações que ocorrem para  $s \leq \tau_{max}$ 

Figura 4.2: Parte real da função de autocorrelação para  $T = 13000\text{K}$  e  $n = 10^{19}\text{cm}^{-3}$ .



(a) comportamento geral

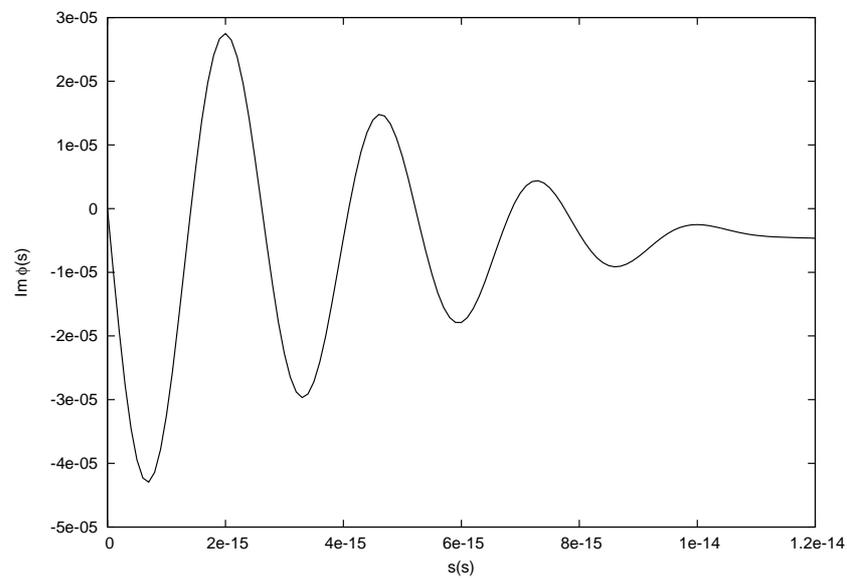
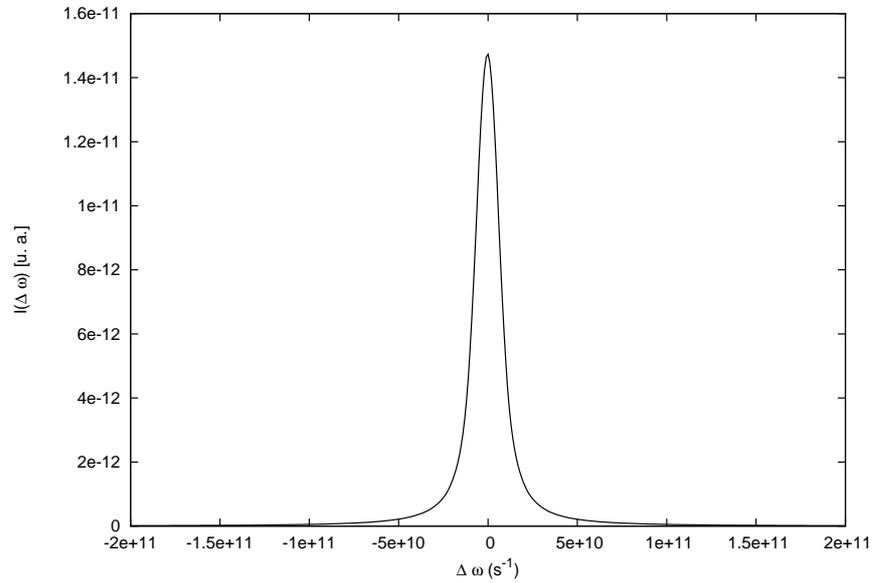
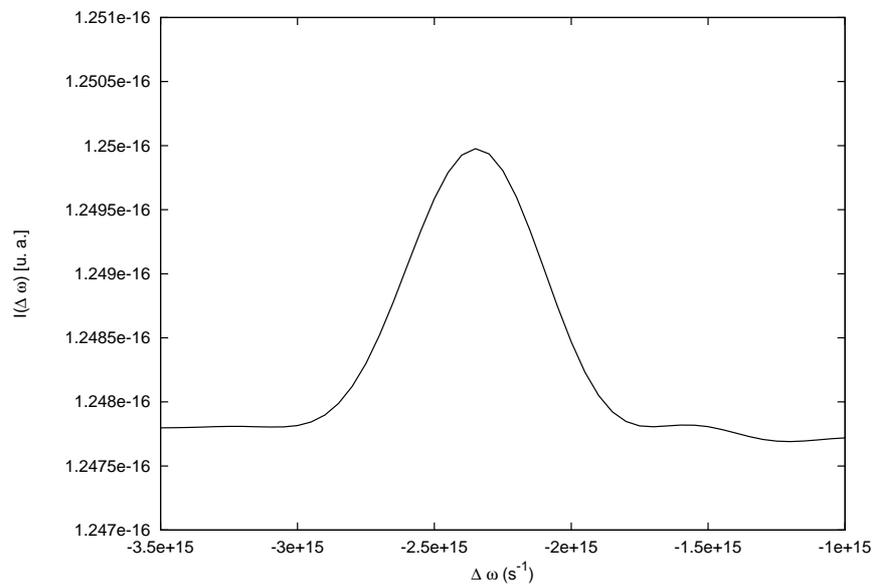
(b) oscilações para  $s \leq \tau_{max}$ .

Figura 4.3: Parte imaginária da função de autocorrelação para  $T = 13000\text{K}$  e  $n = 10^{19}\text{cm}^{-3}$ . O decaimento exponencial vai a zero para  $s$  grande.



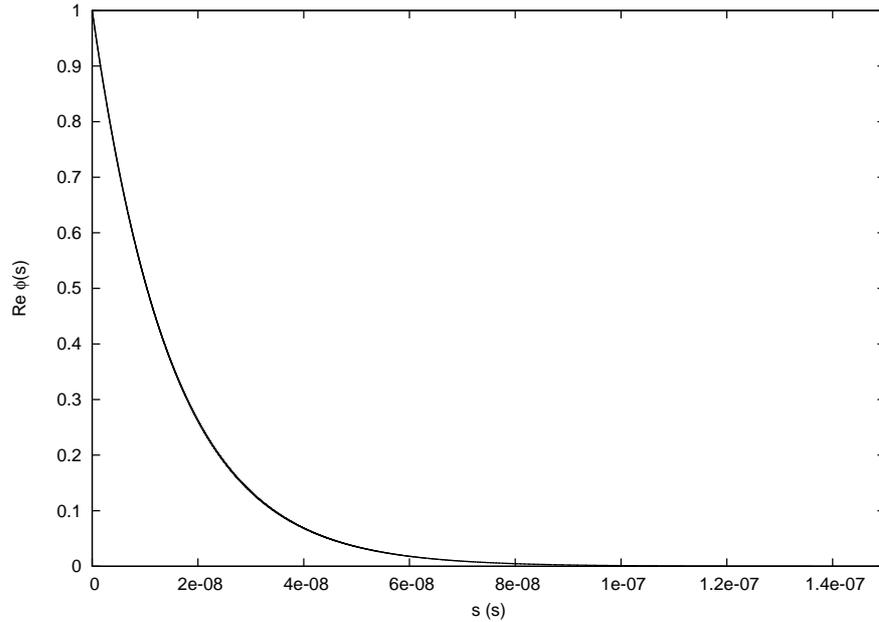
(a) linha central



(b) primeiro satélite

Figura 4.4: Perfil espectral para temperatura de 13000K e densidade de  $\simeq 10^{19}\text{cm}^{-3}$ , gerado a partir da função de autocorrelação mostrada nas figuras 4.2 e 4.3. A linha central é completamente dominante, por isso ela e o satélite foram normalizados e plotados separadamente. Caso contrário, o satélite é quase indistinguível.

resultados encontram-se nas figuras 4.5, 4.6 e 4.7. O mais importante a notarmos é que, especialmente devido à diminuição da densidade, é necessário ir até um valor consideravelmente maior de  $s$  para que a função de autocorrelação vá a zero e o perfil seja significativo. Além disso, para detectar o primeiro satélite, em torno de  $\Delta\omega = -2,4 \times 10^{15} \text{s}^{-1}$ , um passo pequeno ( $\simeq 2,618 \times 10^{-15} \text{s}$ ) é necessário, de modo que o arquivo de saída tem um número muito grande de pontos, tornando o cálculo da Transformada de Fourier bastante lento (em torno de 10 dias com um processador CORE™ i7). Por isso, apenas a aparência da linha central foi calculada.



(a) comportamento geral

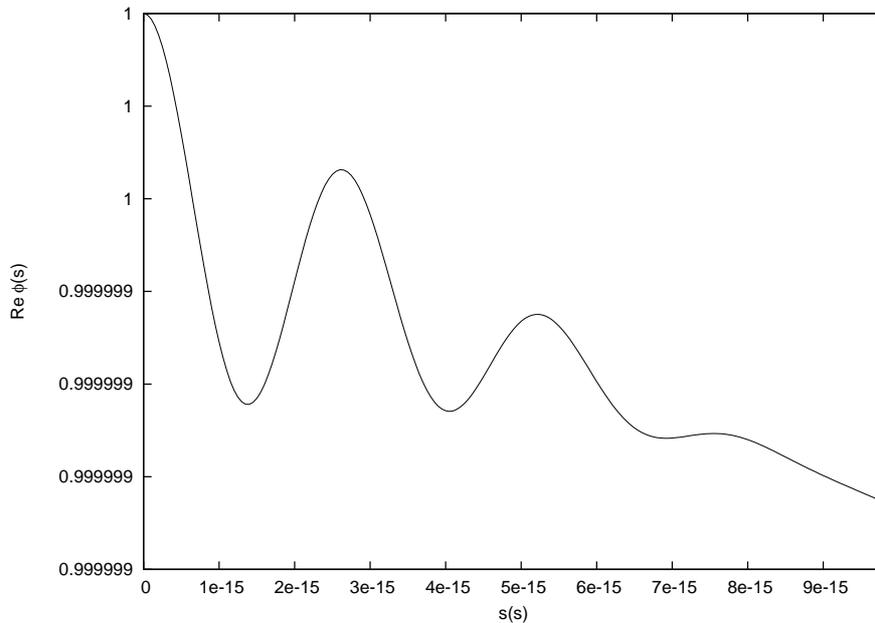
(b) detalhe das oscilações que ocorrem para  $s \leq \tau_{max}$ 

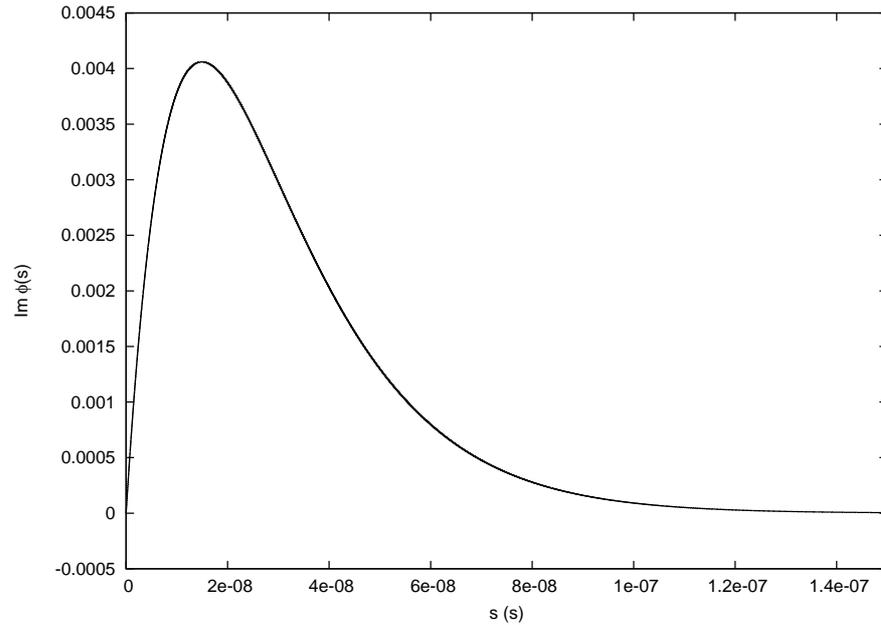
Figura 4.5: Parte real da função de autocorrelação para  $T = 20000\text{K}$  e  $n = 10^{17} \text{cm}^{-3}$ .

Notamos, ainda, uma diminuição da largura da linha em relação aos parâmetros anteriores. Esse fato, além de os satélites tornarem-se imperceptíveis, à exceção do primeiro, para alguns

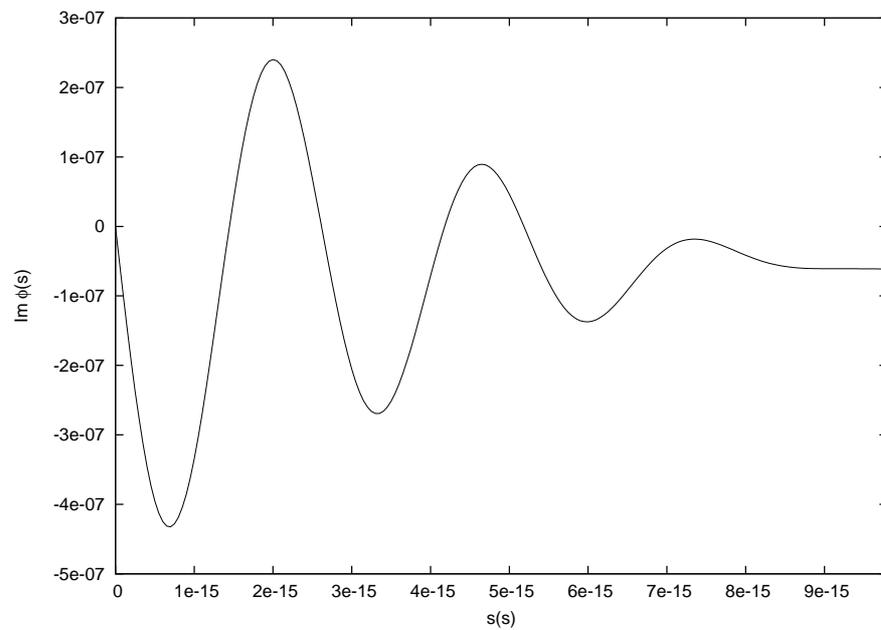
dos parâmetros físicos escolhidos, leva-nos a questionar como esses parâmetros influenciam os satélites. Já sabemos que a profundidade do poço indica a posição dos satélites, isto é, para  $\Delta\omega$  satisfazendo

$$\Delta\omega = nV_0, n \in \mathbb{N} \quad (4.13)$$

deve existir um satélite. Contudo, há também a influência da densidade e da temperatura sobre as características desses satélites.



(a) comportamento geral



(b) oscilações para  $s \leq \tau_{max}$

Figura 4.6: Parte imaginária da função de autocorrelação para  $T = 20000\text{K}$  e  $n = 10^{17}\text{cm}^{-3}$ .

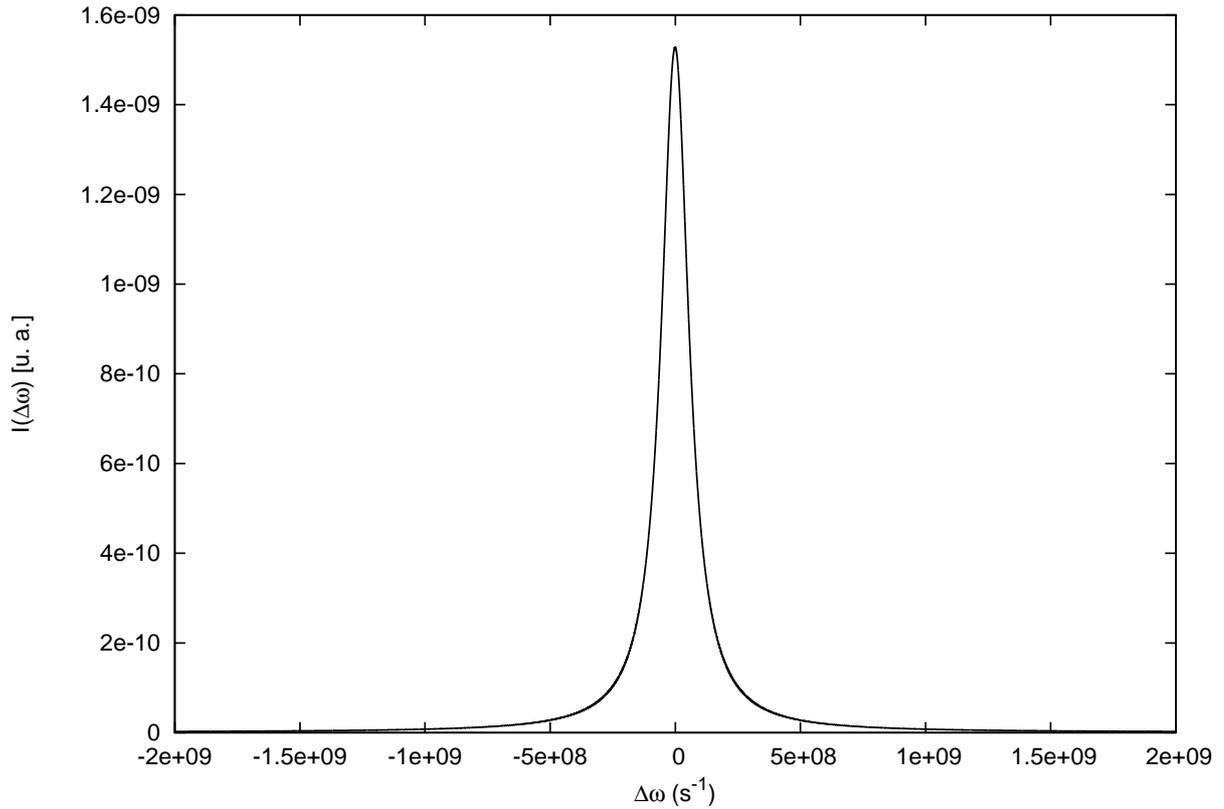


Figura 4.7: Linha central do perfil gerado a partir da função de autocorrelação mostrada nas figuras 4.5 e 4.6.

### 4.1.1 Variação com a Densidade

A densidade de perturbadores pode ser interpretada mais facilmente se substituída pelo parâmetro

$$h = \frac{4}{3}\pi a^3 n, \quad (4.14)$$

que é igual ao número médio de perturbadores no interior do volume de interação, delimitado pelo alcance do potencial  $a$ . Na figura 4.8, os perfis para diferentes densidades.

A primeira pergunta a ser feita é se a mudança na densidade altera de alguma maneira a posição das linhas dada por 4.13. Na figura 4.9, temos as posições da linha central e dos dois primeiros satélites exibidos na figura 4.8 em função da densidade.

Ao que parece, a densidade não possui influência significativa na posição dos satélites, o que está de acordo com as conclusões de Allard [40]. Notamos, contudo, que há um certo distanciamento do valor esperado para o primeiro satélite, e mais ainda para o segundo. Contudo, esse desvio do valor esperado pode ser explicado pelo fato de que os satélites são mais alargados, de modo que há uma imprecisão maior na determinação de sua posição.

Quanto à amplitude de cada uma das linhas, é interessante notar que os satélites têm comportamento distinto da linha principal: eles tornam-se mais intensos conforme a densidade aumenta, enquanto a linha principal vai perdendo intensidade. Isso pode ser explicado pelo

fato de que um maior número de perturbadores permite a formação de mais quasimoléculas, favorecendo a emissão nos satélites. Na figura 4.10, vemos graficamente esse comportamento. Por essa razão, a uma densidade mais baixa, como a utilizada para calcular o perfil em 4.4, o terceiro satélite é imperceptível e a linha principal é dominante. Novamente, há concordância com o obtido por Allard [40].

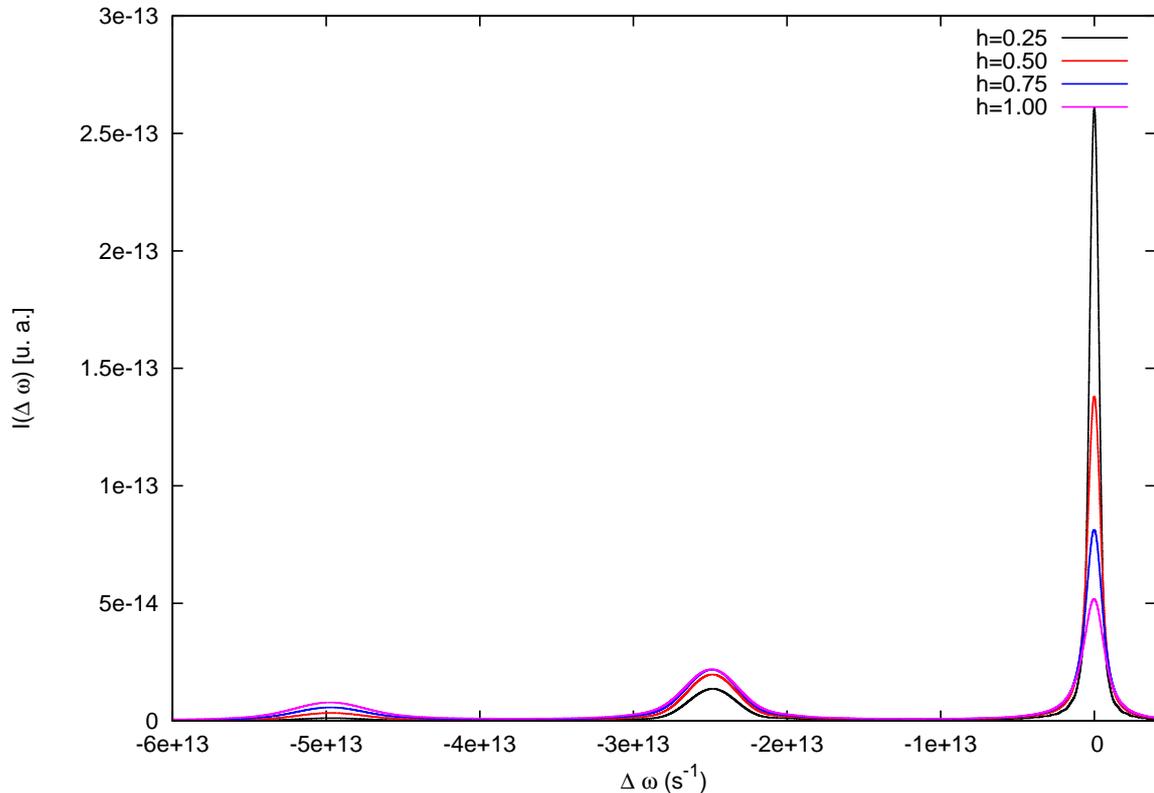


Figura 4.8: Perfis para diferentes valores de densidade. Assumimos os mesmos parâmetros utilizados por Allard [40]:  $V_0 = -2.5 \times 10^{13} \text{s}^{-1}$  e  $a = 6 \times 10^{-10} \text{m}$ , de modo que essas densidades estão aproximadamente entre  $2.7 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$  e  $1.1 \times 10^{21} \text{cm}^{-3}$ .

Vale ressaltar que, conforme notado por Allard [40], o crescimento da amplitude dos satélites com a densidade é válido apenas para até um dado valor, pois, devido ao alargamento das linhas e à conservação da energia emitida, em algum momento a amplitude passa a diminuir. Contudo, conforme descrito no artigo citado, isso ocorre para densidades altas, que não são encontradas em atmosferas de anãs brancas, problema que se intenciona estudar, de modo que aqui isso não é relevante.

Outra variável importante em espectroscopia é a chamada “largura à meia altura”, mais comumente expressa em termos da sigla em inglês FWHM (*full width at half-maximum*). Trata-se da medida da espessura do pico no ponto em que sua intensidade é a metade da intensidade máxima. É uma forma simples de quantificarmos o alargamento da linha. Na figura 4.11, vemos como se comporta a FWHM em função da densidade.

Vemos que o número de perturbadores é um fator importante no alargamento da linha, sendo que a largura à meia altura parece aumentar linearmente com a densidade para o potencial do tipo poço. Esse parâmetro não é diretamente estudado no artigo de Allard [40], que apenas comenta que, como a amplitude da linha central decai rapidamente com o aumento da densidade,

é esperado que exista o alargamento, pois a energia total emitida deve ser conservada.

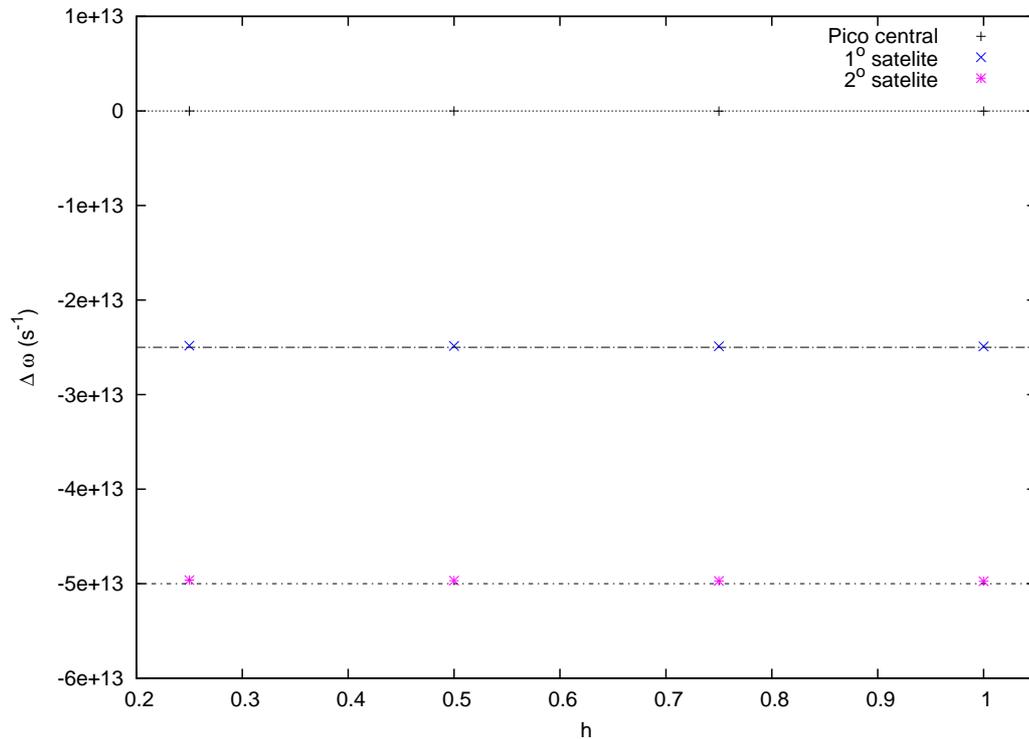


Figura 4.9: Posição da linha central e dos satélites em função da densidade. A linha em preto representa a posição esperada de acordo com 4.13. A mudança posição dos satélites devido à variação de densidade não é significativa.

Nenhum ajuste é feito, para essa situação ou para as demais, porque se trata de um modelo bastante simplificado, de modo que suas previsões numéricas certamente não condizem com as observações. A intenção é apenas analisar o efeito *qualitativo* de mudanças na densidade, e na temperatura, sobre o espectro.

#### 4.1.2 Variação com a Temperatura

Na figura 4.12, podemos ver os perfis obtidos para diferentes temperaturas, a um valor fixo de  $h = 0,25$ . É imediato notar que a mudança na temperatura parece afetar muito mais o espectro do que a densidade de perturbadores. Tanto que os satélites são visíveis apenas para as temperaturas de 17 e 170K. Para os dois outros perfis, os satélites parecem mascarados pela linha central, que fica extremamente alargada.

Essas grandes variações com a temperatura, que é o que determina a velocidade assumida, indica que deve ser importante realizar a média sobre velocidades no cálculo da função de autocorrelação. Assim, para o estudo do efeito da temperatura sobre os perfis, a integral sobre velocidades, desconsiderada nos cálculos anteriores, foi realizada. Para isso, a curva maxwelliana de velocidades foi amostrada em 50 velocidades igualmente espaçadas entre zero e  $2\bar{v}$ , intervalo que compreende mais de 98% da distribuição, e a média sobre as funções de autocorrelação calculadas para essas velocidades foi feita, considerando como peso a distribuição de Maxwell-Boltzmann. Os perfis obtidos encontram-se na figura 4.13. Na figura 4.14, eles são plotados juntamente com os perfis sem a média para que a diferença seja notada.

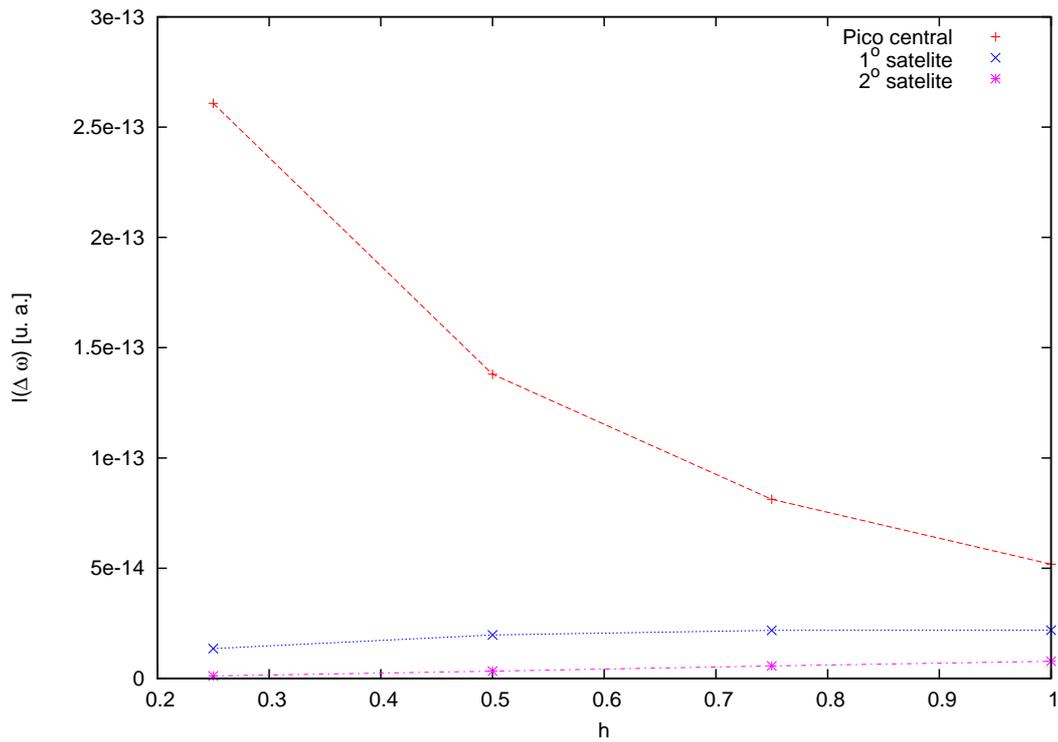


Figura 4.10: Amplitude da linha central e dos primeiros satélites em função da densidade de perturbadores. O comportamento da linha central é distinto do comportamento dos satélites.

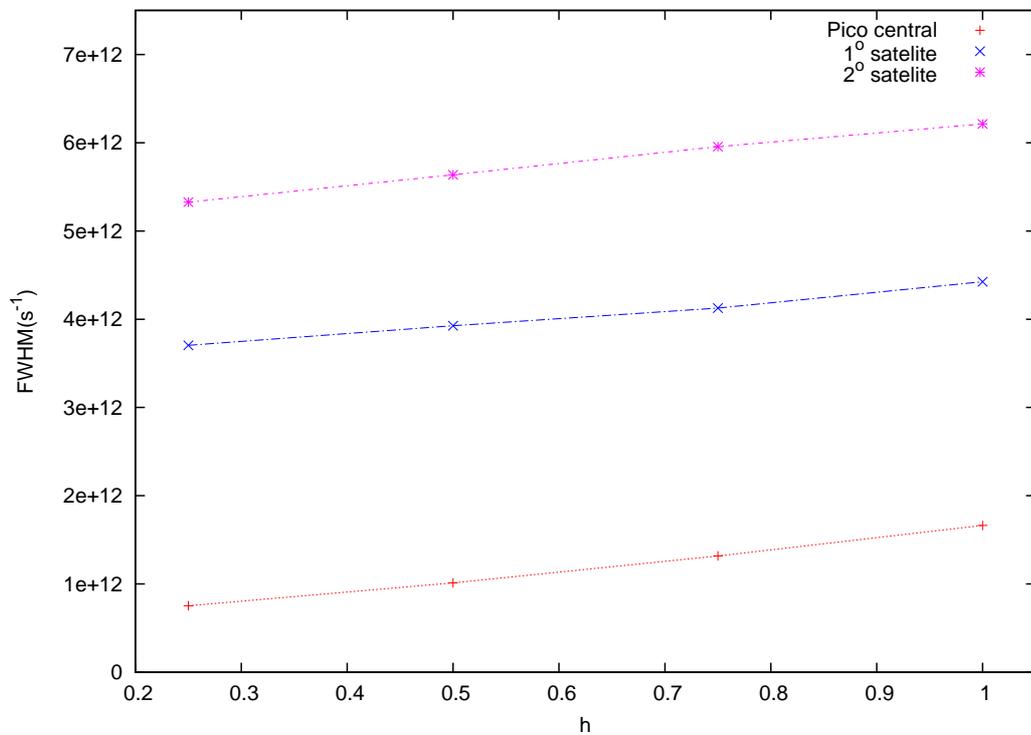


Figura 4.11: Largura à meia altura da linha central e dos primeiros satélites em função da densidade de perturbadores. Há um crescimento aproximadamente linear da largura de todas as linhas com o aumento da densidade.

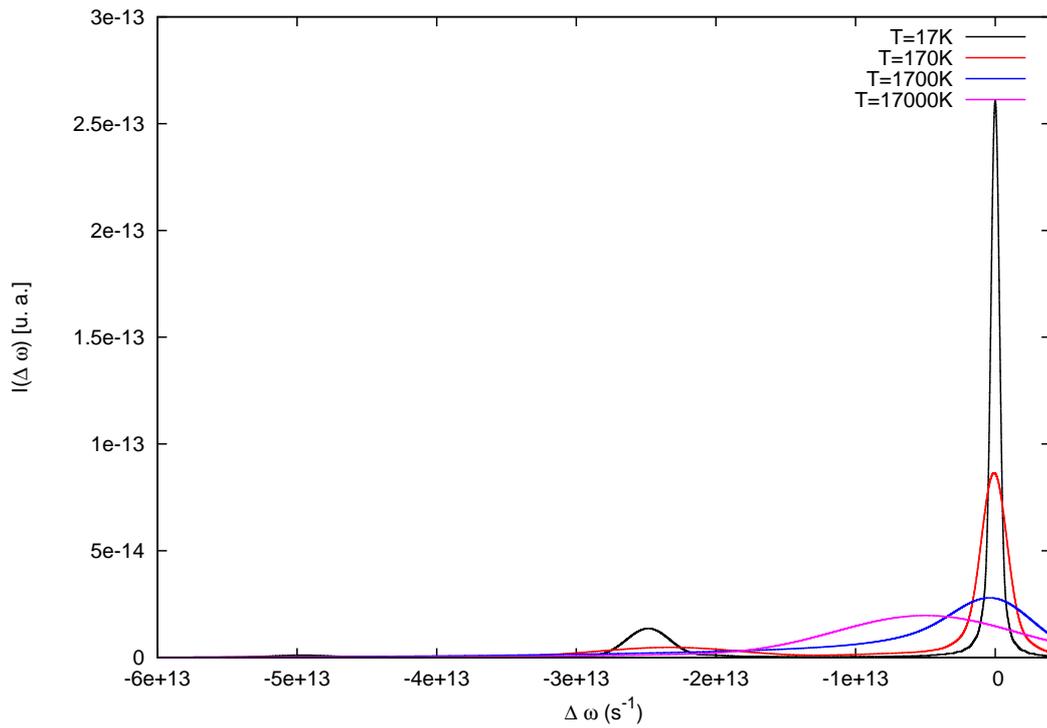


Figura 4.12: Perfis para diferentes valores de temperatura. Como na seção anterior, assumimos  $V_0 = -2.5 \times 10^{13} \text{s}^{-1}$  e  $a = 6 \times 10^{-10} \text{m}$ .

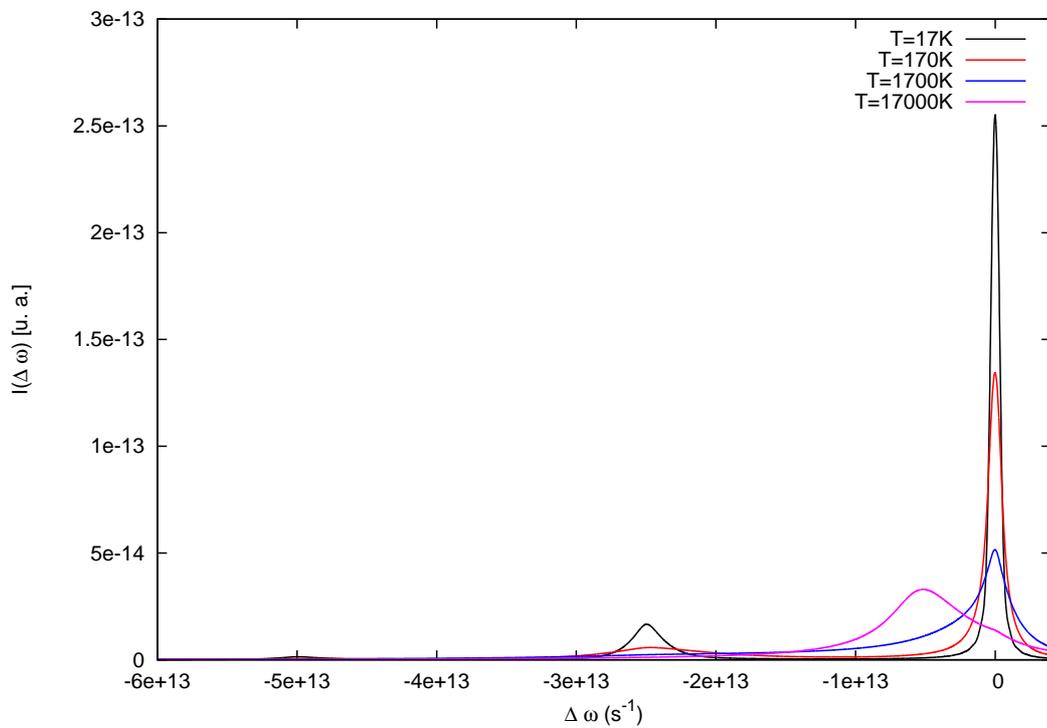


Figura 4.13: Perfis para diferentes valores de temperatura, agora realizando a média sobre velocidades.

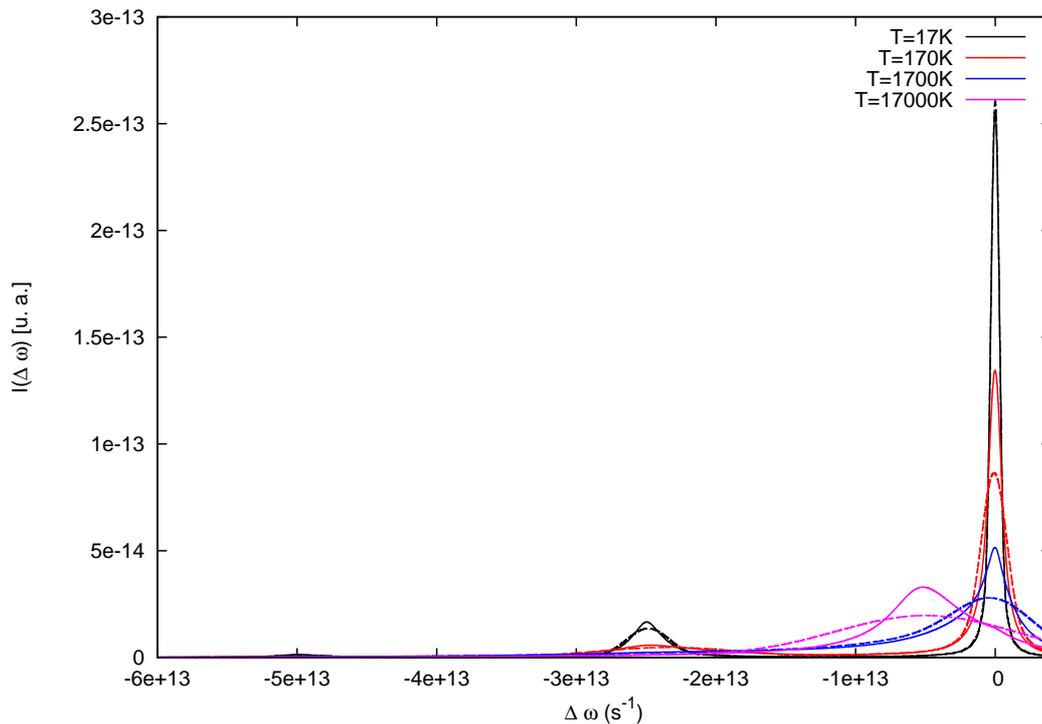


Figura 4.14: Comparação entre os perfis calculados sem a média sobre velocidades (linha tracejada) e com a média sobre velocidades (linhas contínuas). A mudança é maior para temperaturas maiores.

Para a temperatura de 17K, a única alteração evidente ocorre no satélite, que agora é visivelmente assimétrico. Essa assimetria também é verificada por Allard & Biraud [42], em um artigo em que estudam o efeito da média sobre velocidades para os perfis calculados para um potencial de poço-quadrado. Para as demais temperaturas, notamos que as linhas tornam-se mais estreitas. O satélite e a linha central ainda se sobrepõem para as temperaturas de 1700K e 17000K. No entanto, fica claro agora que, com o aumento da temperatura, é o satélite que se torna mais assimétrico e se desloca em direção à linha central, que permanece, aproximadamente, na sua posição original, conclusão a que também chegam Allard & Biraud. Nas figuras 4.15 e 4.16, vemos como os perfis poderiam ser compostos a partir de lorentzianas. Uma delas permaneceria no centro, representando a linha central, e a outra desloca-se em direção a essa.

Os ajustes não levam em conta a assimetria constatada no satélite, por isso não são representados bem a linha completa, mas mostram a posição dos picos, evidenciando que a linha central permanece pouco deslocada. Vemos também que, além de tornar-se assimétrico e deslocar-se, o satélite tem amplitude maior do que a linha central para altas temperaturas. Nas figuras 4.17 e 4.18, vemos a variação dessa duas propriedades das linhas, posição e amplitude, com a temperatura. Devido à sobreposição entre a linha central e o satélite, os parâmetros não puderam ser estimados para todas as temperaturas. O comportamento para as mais altas temperaturas pode, entretanto, ser inferido a partir das figuras 4.15 e 4.16.

Assim, a diminuição da amplitude das linhas, verificada para as temperaturas mais baixas, não ocorre para a temperatura alta, quando o satélite até supera a linha central em amplitude, podendo ser confundido com ela, como no caso do perfil na figura 4.16, em que a lorentziana com  $\Delta\omega$  nulo tem amplitude inferior à lorentziana que representaria o satélite. Isso provavel-

mente ocorre porque, inicialmente, a diminuição em amplitude é explicada pelo aumento na largura da linha, mas, como vemos na figura 4.19, esse aumento não ocorre de forma muito rápida, especialmente para a linha central, de forma que, em algum momento, o satélite passa a aumentar em amplitude para que a emissão total seja conservada. Tal fato também é verificado em [42].

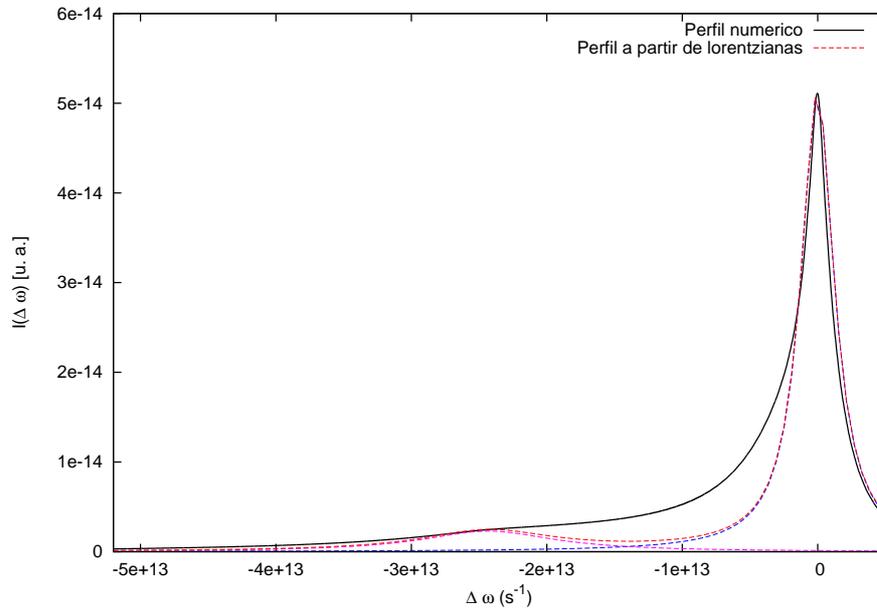


Figura 4.15: Composição do perfil para a temperatura de 1700K a partir de lorentzianas.

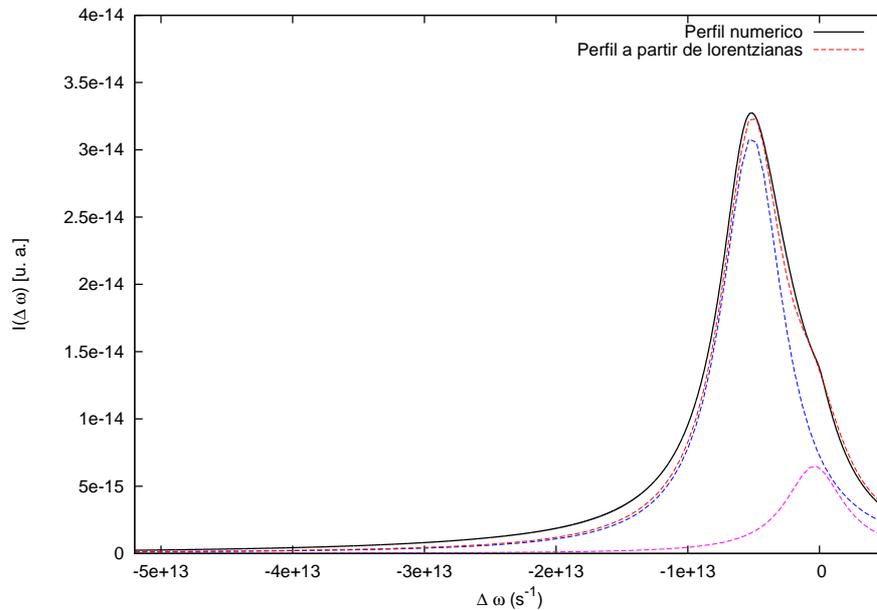


Figura 4.16: Composição do perfil para a temperatura de 1700K a partir de lorentzianas.

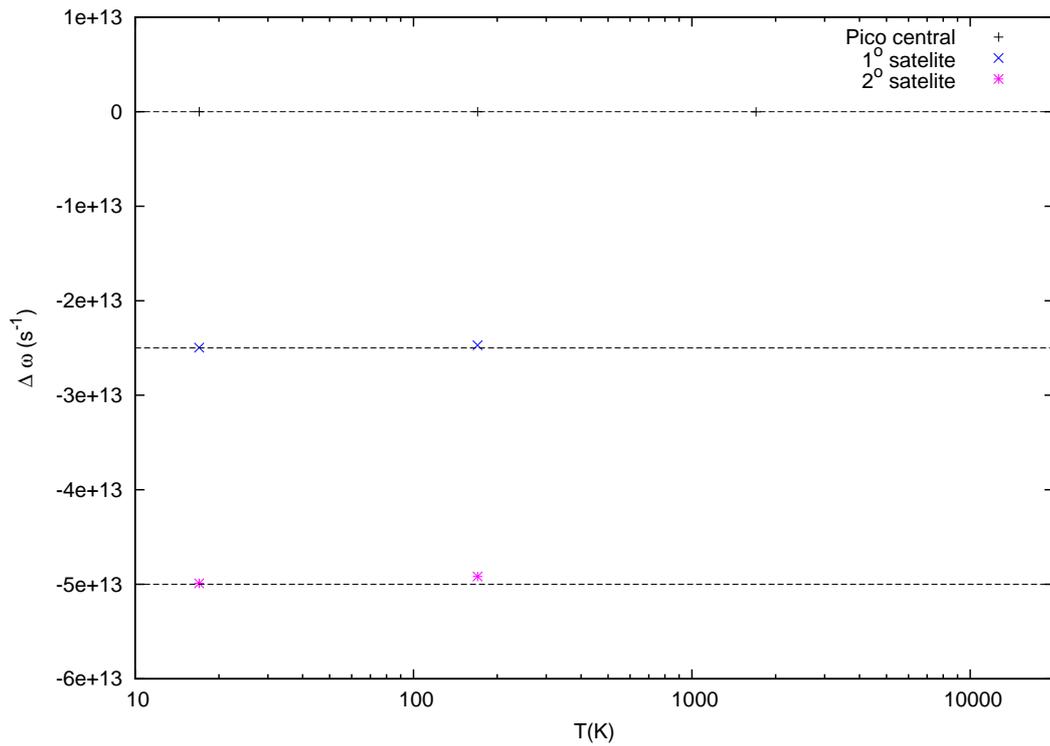


Figura 4.17: Posição da linha central em função da temperatura. A linha em preto representa a posição esperada de acordo com 4.13. A escala do eixo-x é logarítmica para melhor visualização. Conforme aumenta a temperatura, o satélite desvia-se em direção a maiores frequências.

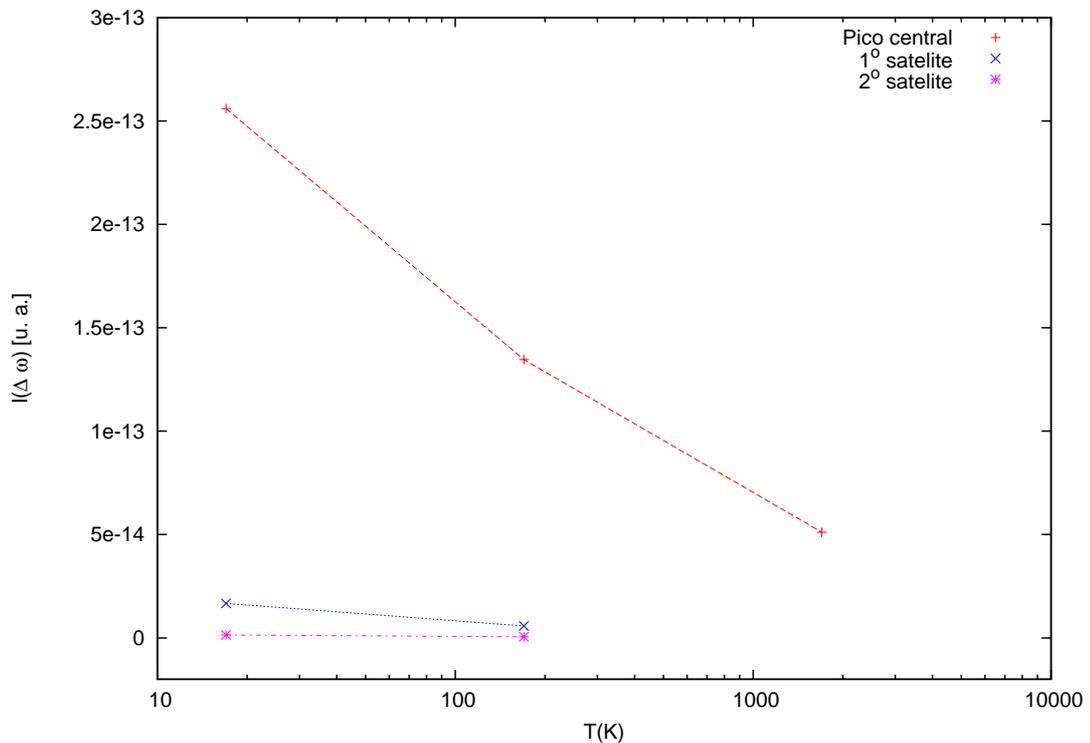


Figura 4.18: Amplitude das linhas em função da temperatura. Todas as linhas medidas diminuem em amplitude com o aumento da temperatura.

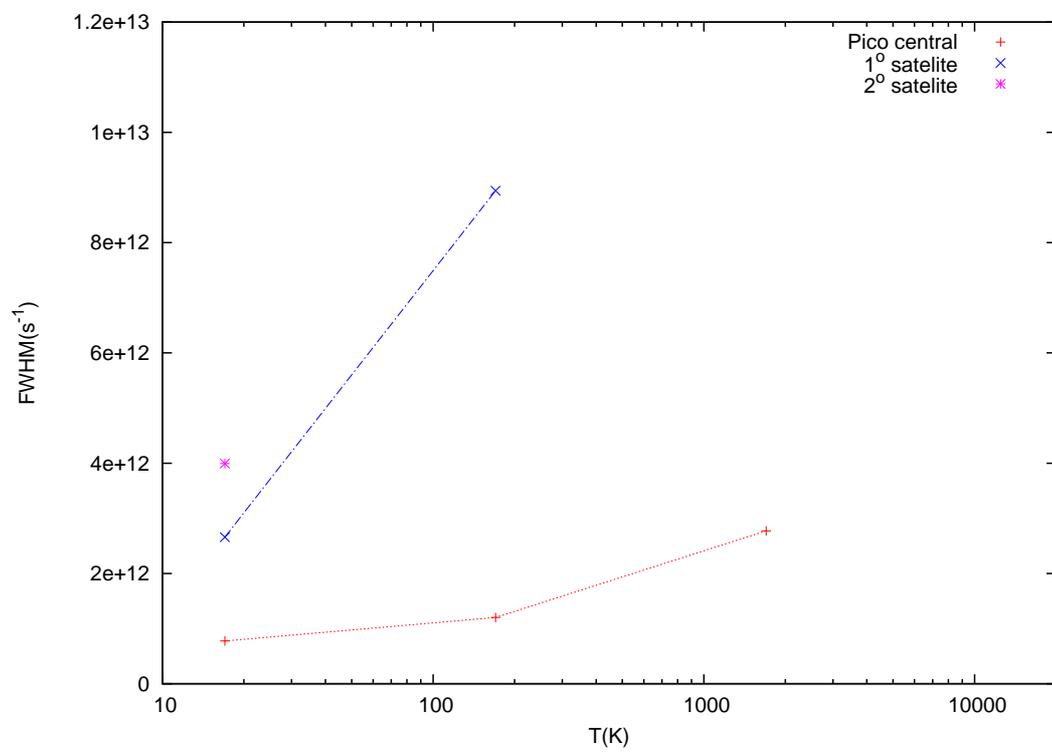


Figura 4.19: Largura à meia altura em função da temperatura.

## 4.2 Solução Numérica do Modelo Semiclássico

Estando o cálculo analítico funcionando corretamente, podemos passar para a solução numérica do modelo. A ideia é resolver numericamente a equação 3.6, isto é: calcular a trajetória da partícula, converter o potencial fornecido  $V(R)$  para  $V(t)$  considerando que, na geometria escolhida,

$$R^2 = (x_0 + \bar{v}t)^2 + b^2, \quad (4.15)$$

e calcular numericamente as integrais. Isso é feito computando o valor de cada um dos integrandos em um número suficiente de pontos e utilizando o método de integração do trapézio. Primeiro, calculamos o desvio de fase, em função de  $s$ , para um número grande de configurações de parâmetro de impacto e posição inicial no interior do volume de interação. Depois, a integral em  $x_0$  é feita e, por fim, a integral no parâmetro de impacto  $b$ . Multiplicando pela densidade de perturbadores e tirando a exponencial do resultado, temos a função de autocorrelação.

### 4.2.1 Teste do programa: poço-quadrado

Como o resultado para um poço-quadrado é conhecido, o programa desenvolvido pode ser testado comparando seu resultado com o resultado do cálculo analítico. Ambos devem coincidir, exceto por imprecisões no programa numérico, afinal utilizamos um método de aproximação para a integral. Com um potencial de poço-quadrado  $V_0 = -2.5 \times 10^{13} \text{s}^{-1}$  e considerando  $T = 13000\text{K}$  e  $h = 3$  (onde  $h$  foi definido na equação 4.14), temos uma função de autocorrelação com oscilações bastante acentuadas e que vai rapidamente a zero, sendo ideal para o teste. Foram obtidos os resultados das figuras 4.20 a 4.22.

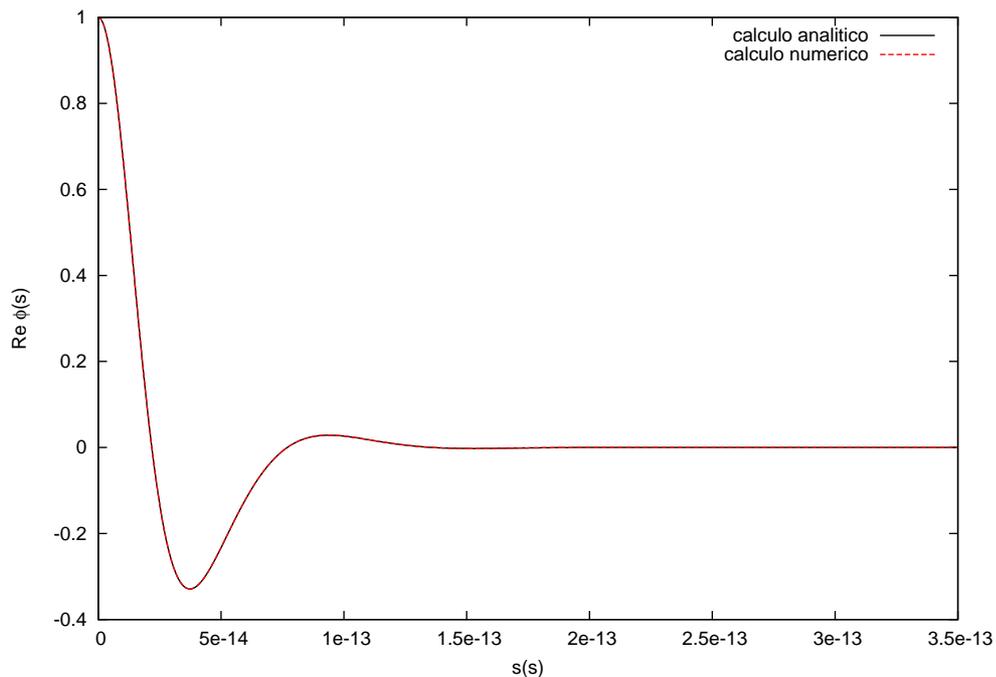


Figura 4.20: Comparação entre os cálculos analítico (preto) e numérico (vermelho) da parte real da função de autocorrelação. A concordância é excelente.

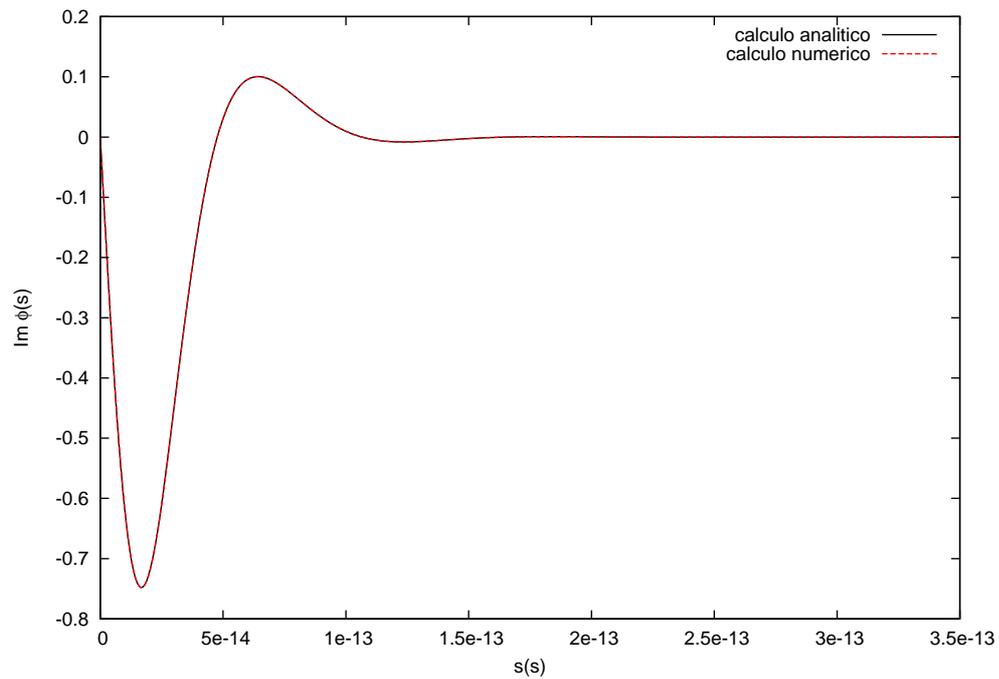


Figura 4.21: Comparação entre os cálculos analítico e numérico da parte imaginária da função de autocorrelação. Novamente, ambos resultados sobrepõem-se.

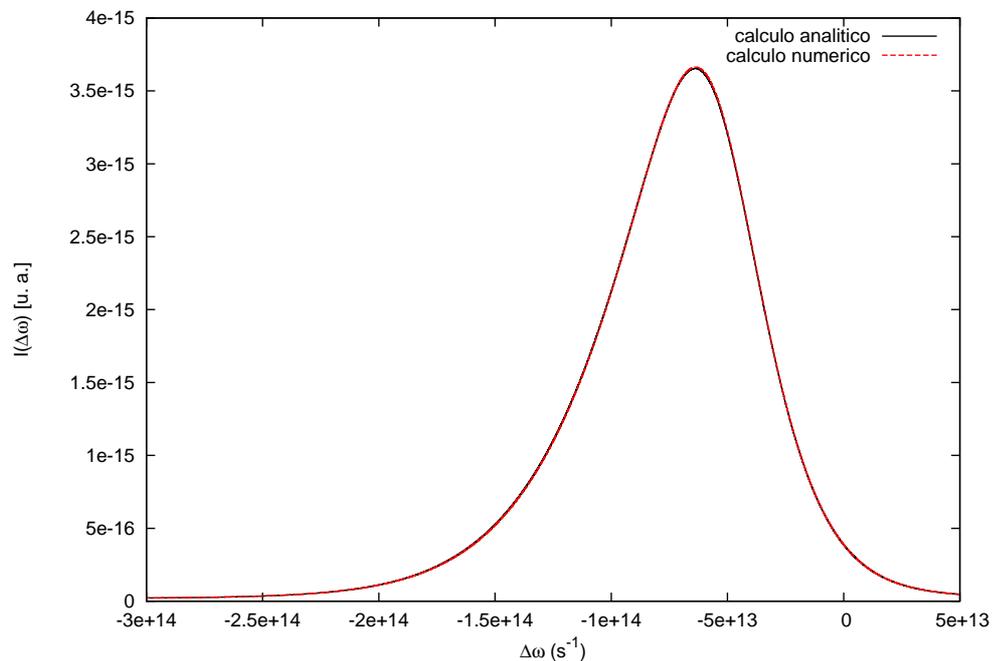


Figura 4.22: Comparação entre os perfis de linha obtidos a partir das funções de autocorrelação numérica e analítica. Apesar de uma pequena discrepância em amplitude (pouco importante considerando que os perfis são normalizados), a forma e a posição do pico central são condizentes uma com a outra.

Vemos que, dentro das limitações de uma aproximação numérica, o programa funciona bem, tendo sido capaz de fornecer resultados que são compatíveis com o cálculo analítico. O

custo computacional é, contudo, relativamente elevado. Como é necessário calcular o desvio de fase para um grande número de tempos de correlação  $s$ , para que se tenham pontos suficientes de modo que a Transformada de Fourier seja coerente, a função de autocorrelação leva até horas para ser calculada, enquanto que, no caso analítico, isso é feito em segundos.

A comparação entre os cálculos analítico e numérico foi realizada também para outros valores de  $V_0$ ,  $T$  e  $h$ . O erro médio no perfil de linha foi, em todos os casos, inferior a 1%. Ele chega próximo a esse valor quando o potencial é intenso, como o da figura 4.1, o que causa grandes oscilações na função de autocorrelação, as quais não são tão bem obtidas numericamente. Para potenciais mais fracos, o erro fica em torno de 0,5%. Sendo assim, podemos estimar que os erros associados aos perfis de linha obtidos numericamente serão da ordem de 1%, valor que consideramos satisfatório.

## 4.2.2 Potencial Gaussiano

É possível, agora, calcularmos o perfil de linha para potenciais distintos do poço-quadrado. O primeiro que consideraremos é um potencial na forma de meia-gaussiana invertida, que é um forma simples de suavizar a borda brusca do poço-quadrado. Para que se tenha  $V(R = a) = V_0/2$ , onde  $V_0$  é a profundidade do poço, escrevemos  $V(R)$  na forma:

$$V(R) = -V_0 e^{-\ln(2) \frac{r^2}{a^2}} \quad (4.16)$$

o que dá um potencial como na figura 4.23.

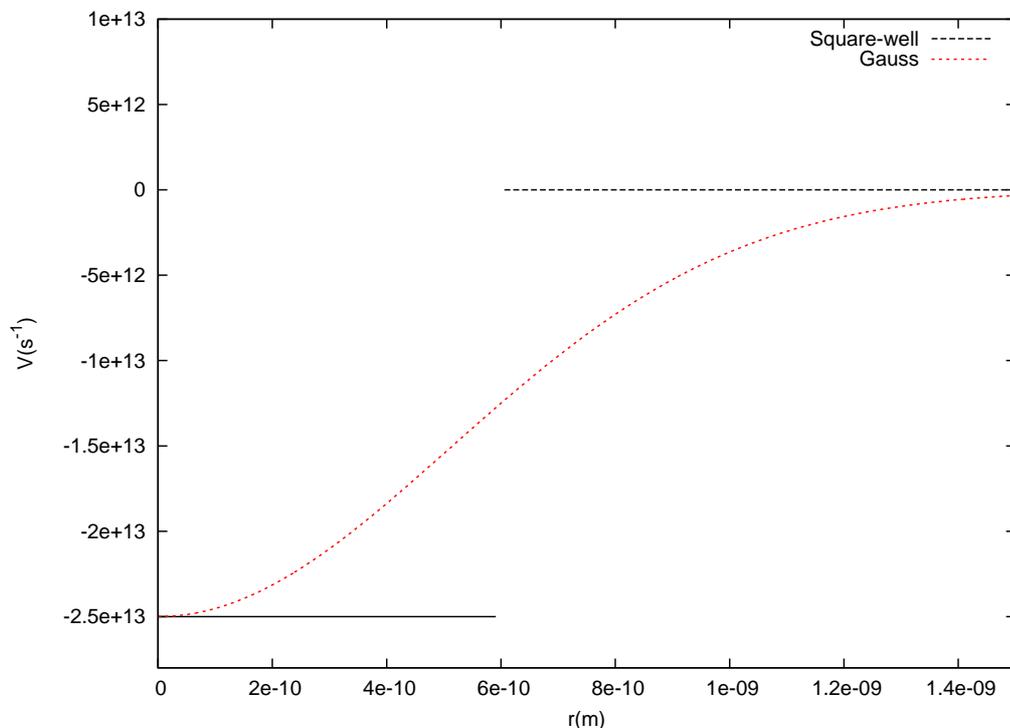
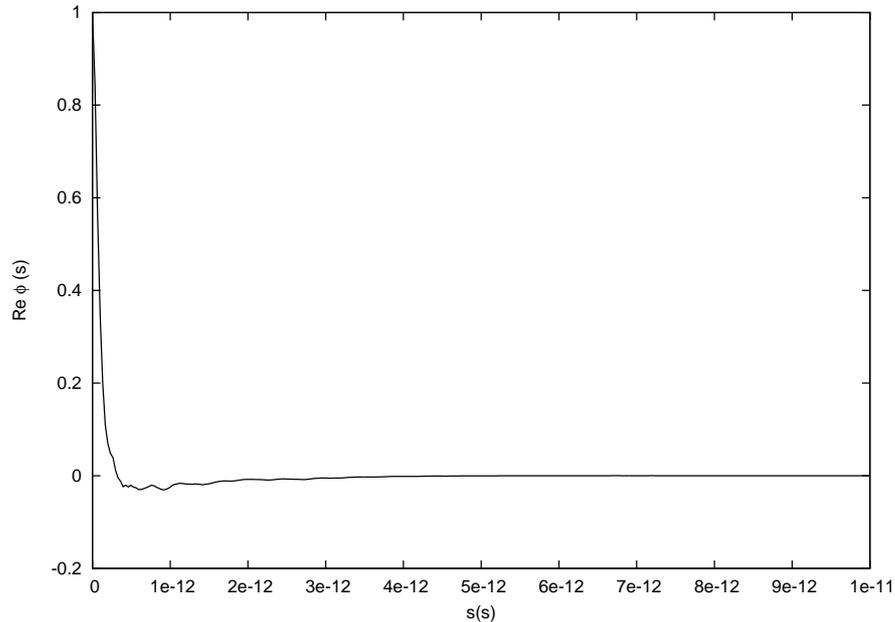


Figura 4.23: Potencial de poço-quadrado e o potencial gaussiano utilizado com o intuito de suavizar a variação brusca existente para o potencial do tipo poço.

O cálculo foi realizado utilizando o potencial da figura 4.23, temperatura de 17K e densi-

dade de  $\simeq 10^{20}\text{cm}^{-3}$ . Uma temperatura baixa foi utilizada inicialmente porque, de acordo com a análise qualitativa feita a partir do poço-quadrado, o perfil é pouco afetado, o que torna o cálculo mais rápido. A função de autocorrelação obtida é representada nas figuras 4.24 e 4.25.



(a) comportamento geral

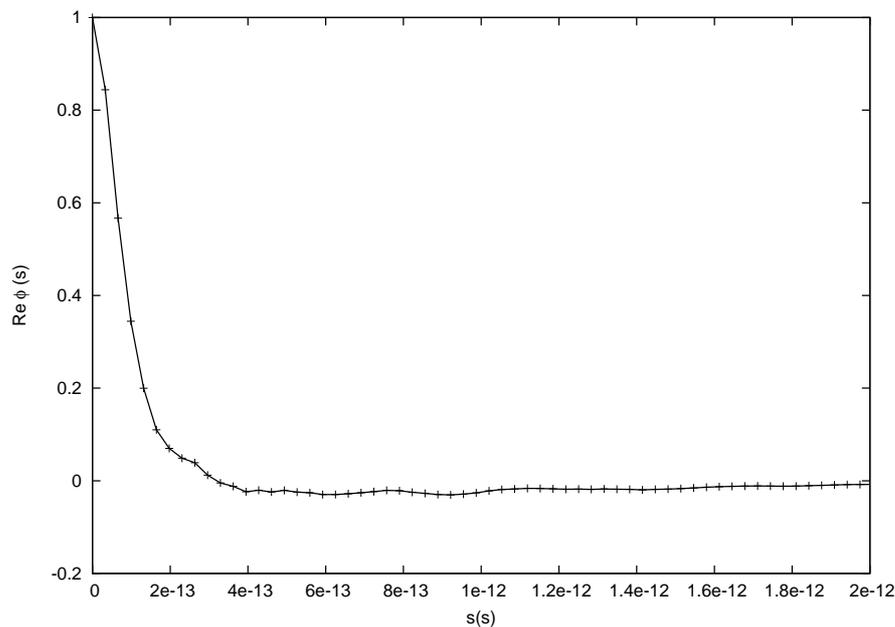
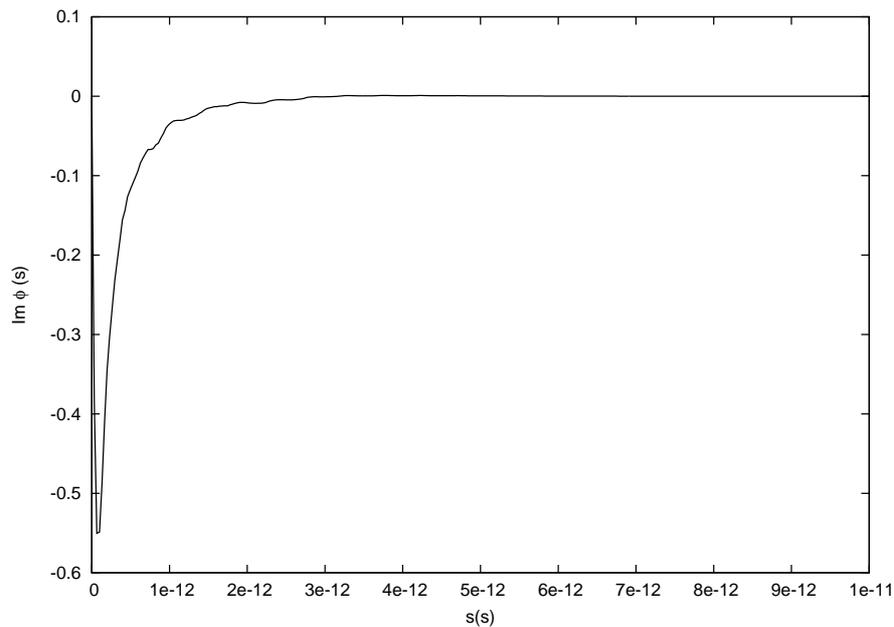
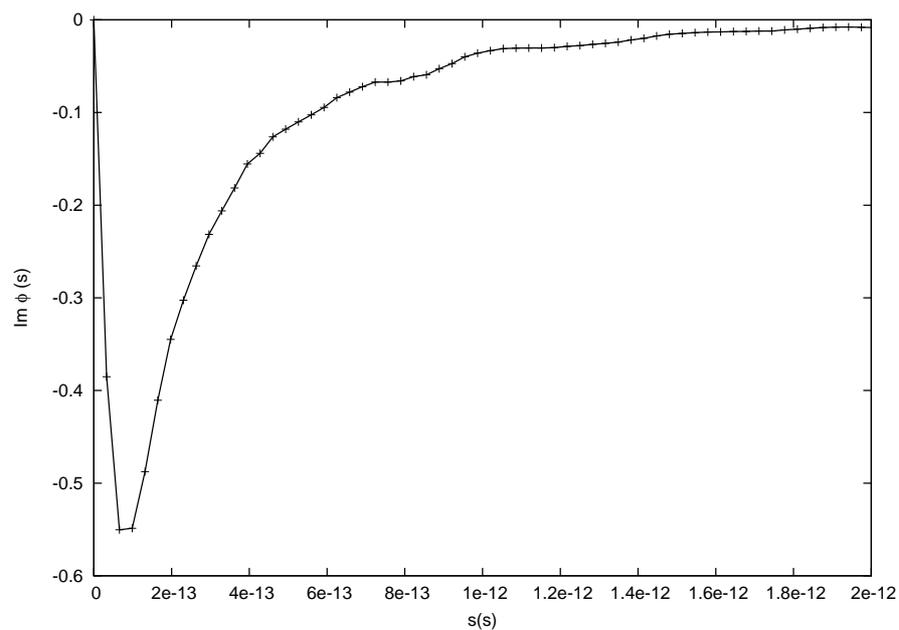
(b) detalhe das oscilações para menores valores de  $s$ 

Figura 4.24: Parte real da função de autocorrelação para  $T = 17\text{K}$  e  $n \approx 10^{20}\text{cm}^{-3}$ .

O caráter geral da função é semelhante ao da função obtida com poço quadrado: para  $s$  pequeno, existem oscilações, as quais diminuem com o aumento de  $s$ , enquanto a função vai a zero, ou seja, é tão afetada pelo potencial que deixa de ser correlacionada com seu estado inicial. Mais interessante e elucidativo é verificar como fica o perfil da linha. Na figura 4.26, ele é mostrado.



(a) comportamento geral



(b) em um menor intervalo

Figura 4.25: Parte imaginária da função de autocorrelação para  $T = 17\text{K}$  e  $n \approx 10^{20}\text{cm}^{-3}$ .

Notamos que o potencial gaussiano, provavelmente devido a seu grande alcance, afeta bastante a linha. Nenhum satélite é aparente para a temperatura e densidade utilizados, mas o alargamento é tão intenso que é possível que eles tenham sido incorporados à linha principal. Para temperatura e densidade compatíveis com a atmosfera de uma anã branca ( $T = 20000\text{K}$  e  $n = 10^{17}\text{cm}^{-3}$ ), a função de autocorrelação é mostrada nas figuras 4.27 e 4.28. Ela demora mais para ir a zero, de forma que calculá-la em um intervalo significativo com um passo pequeno é inviável em um computador comum.

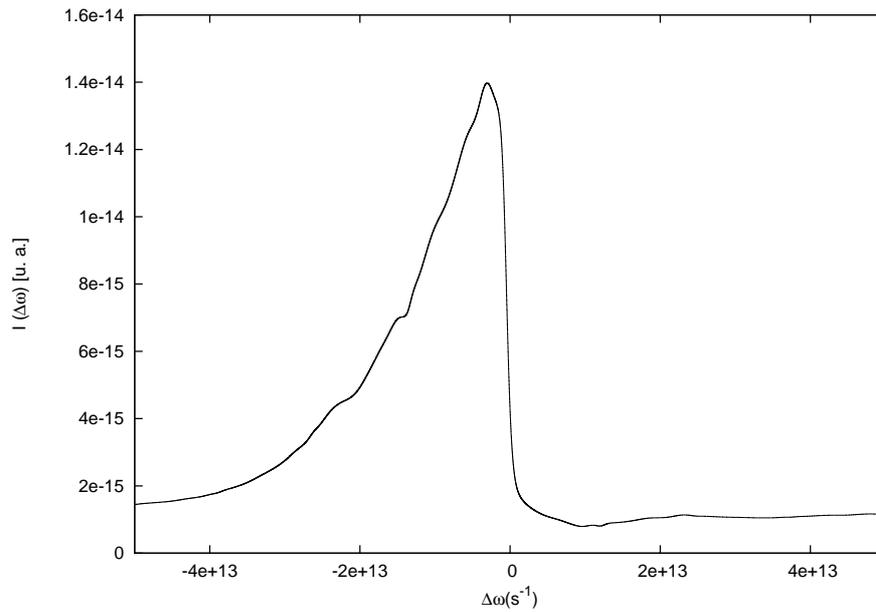
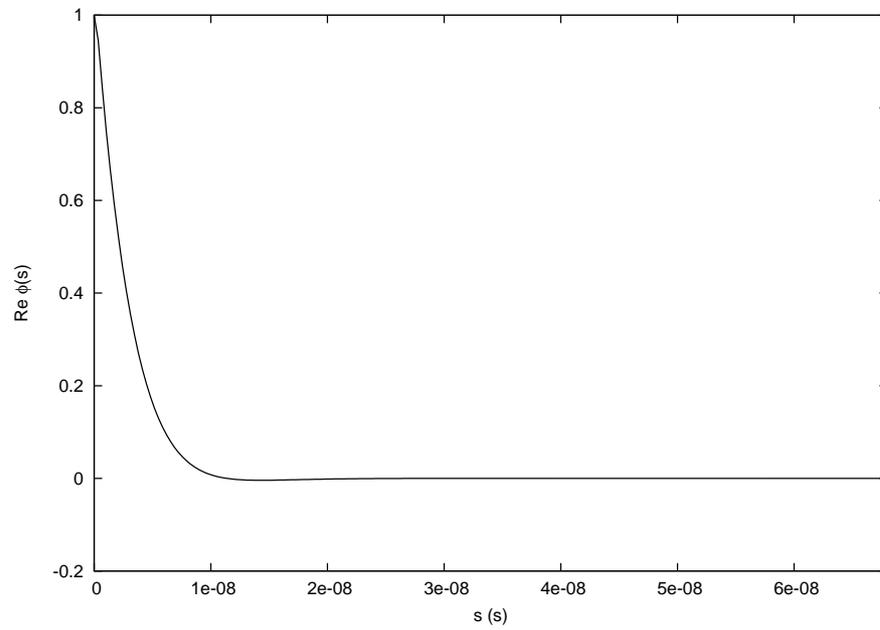


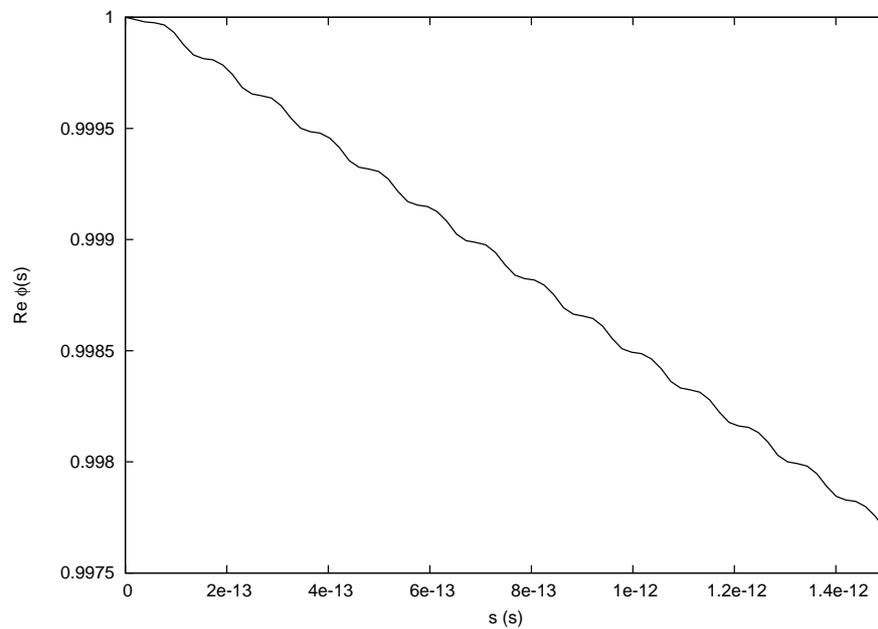
Figura 4.26: Perfil de linha obtido para o potencial gaussiano. A linha é drasticamente alargada, mas nenhum satélite é aparente para essa densidade e temperatura.

O cálculo do perfil de linha, infelizmente, não pôde ser realizado de maneira satisfatória para esse caso. O que ocorre é que o potencial gaussiano alarga bastante a linha, de modo que não foi possível realizar o cálculo com um passo suficientemente pequeno para que a linha toda esteja determinada. Obtivemos apenas o comportamento central dessa linha, mostrado na figura 4.29. Notamos que a linha deve ser, de fato, bastante alargada e, ainda, que há uma pequena emissão no centro da própria linha.

É importante destacar, contudo, que o potencial gaussiano, assim como o poço-quadrado, não é um potencial realista. Especialmente porque, para  $R \rightarrow 0$ , ele ainda é atrativo, sendo que, nesse limite, a interação deve ser dominada pela repulsão entre o próton do átomo de hidrogênio e o próton perturbador. Tanto é que não encontramos na literatura referências ao uso desse potencial. Uma maneira melhor de descrever essa interação é com um potencial de Lennard-Jones, que diverge para  $R$  pequeno.

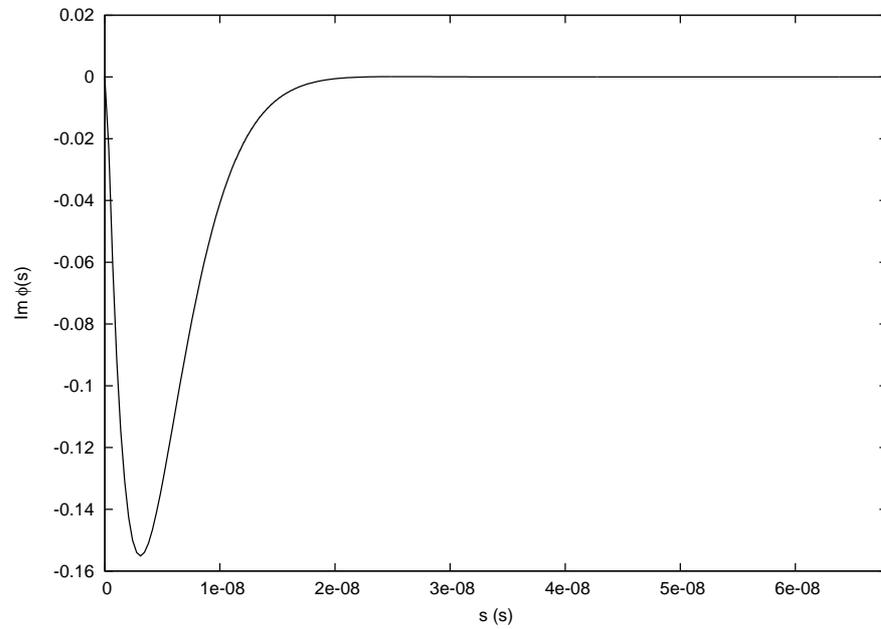


(a) comportamento geral



(b) comportamento oscilatório da função, distinguível quando o passo é pequeno.

Figura 4.27: Parte real da função de autocorrelação para  $T = 20000\text{K}$  e  $n \approx 10^{17}\text{cm}^{-3}$ .



(a) comportamento geral

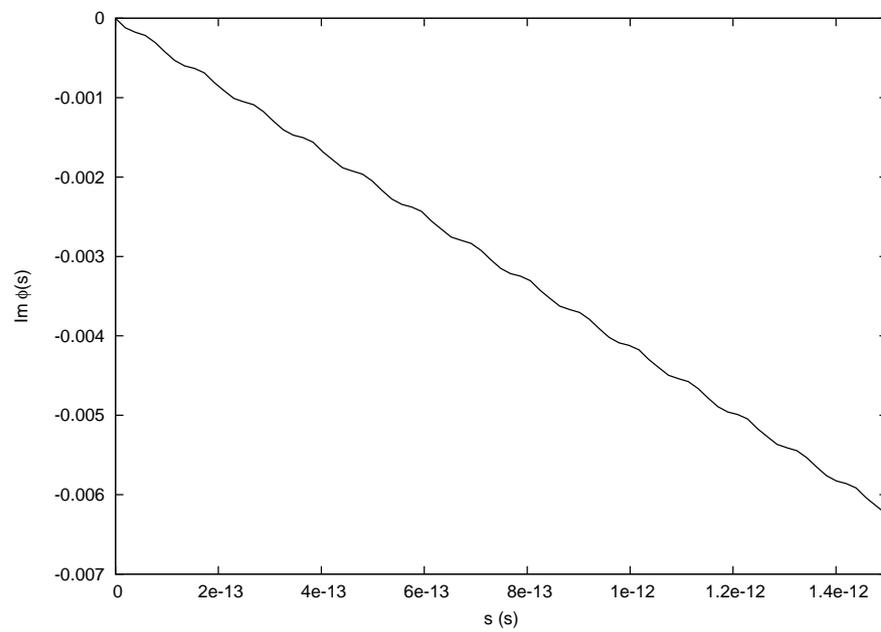
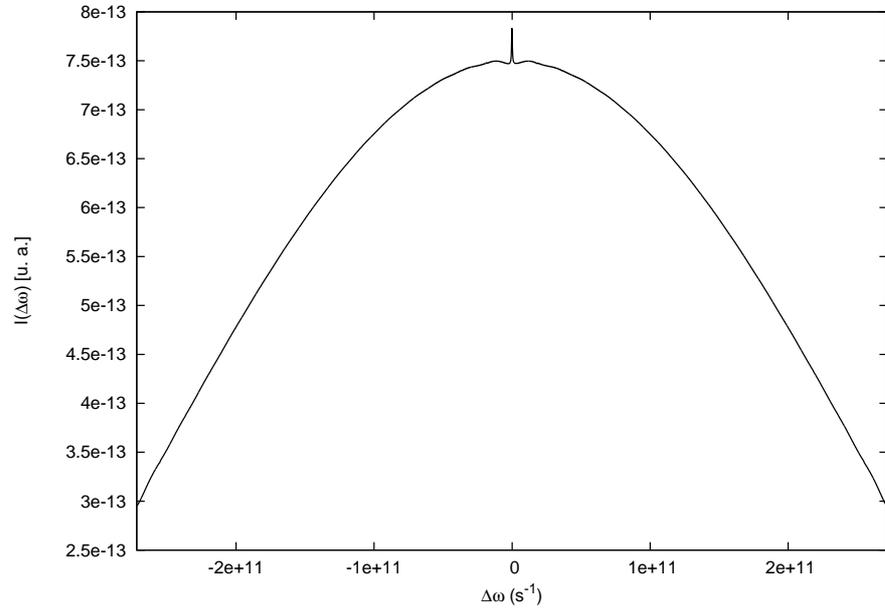
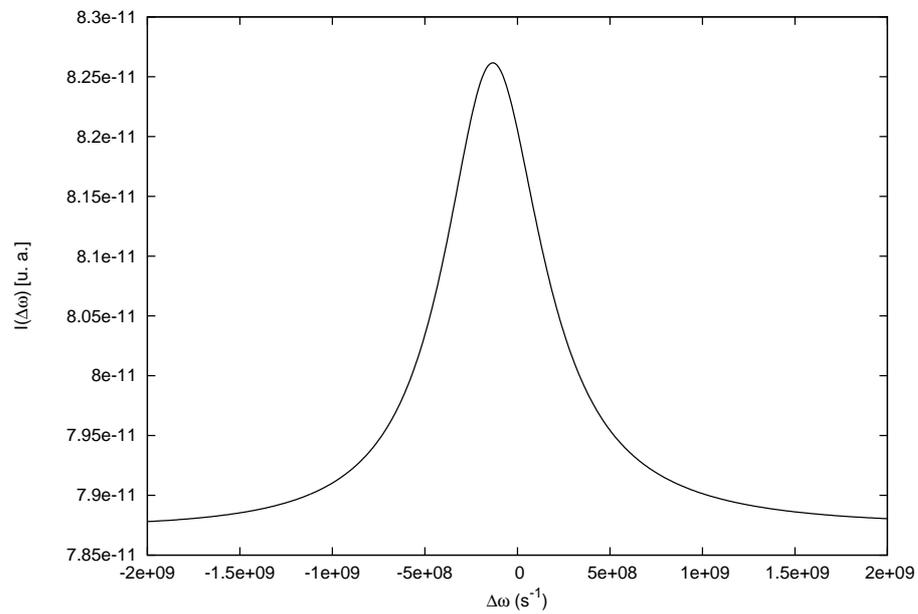
(b) oscilações reveladas com  $ds$  pequeno.

Figura 4.28: Parte imaginária da função de autocorrelação para  $T = 20000\text{K}$  e  $n \approx 10^{17}\text{cm}^{-3}$ .



(a)



(b)

Figura 4.29: Perfil parcial obtido para o potencial gaussiano. A linha é tão alargada que é praticamente inviável calcular o perfil de linha completo, devido às limitações computacionais já descritas. Notamos, contudo, que há uma pequena emissão na frequência central, detalhada em (b).

### 4.2.3 Potencial de Lennard-Jones

O potencial de Lennard-Jones foi sugerido em 1924, por John Lennard-Jones [43], para descrever a interação entre um par de átomos ou moléculas neutras. Contudo, sua forma é útil para aproximar a interação entre quaisquer partículas em que a interação seja, a longo alcance, atrativa, mas repulsiva a curto alcance, como é o caso estudado. O potencial tem a forma:

$$V(R) = V_0 \left[ \left( \frac{a}{R} \right)^{12} - 2 \left( \frac{a}{R} \right)^6 \right], \quad (4.17)$$

onde  $V_0$  é seu valor mínimo e  $a$  é a aproximação máxima entre as partículas. Podemos ver um exemplo na figura 4.30.

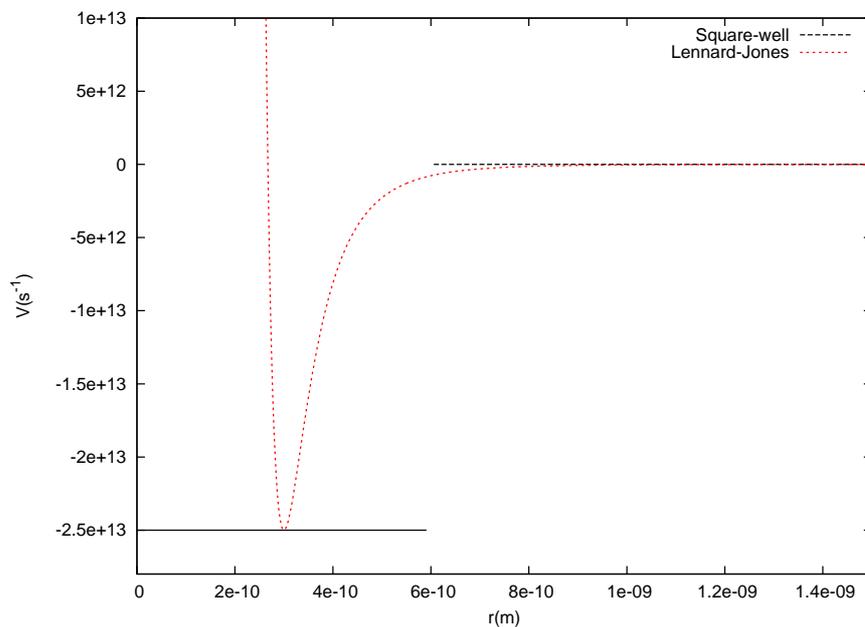


Figura 4.30: Potencial de poço-quadrado e o potencial de Lennard-Jones utilizado para melhor modelar a interação entre o H e o  $H^+$ .

Para esse potencial, e utilizando os mesmos parâmetros da seção anterior, ou seja,  $T = 17K$  e  $n \simeq 10^{20} \text{cm}^{-3}$ , obtemos a função de autocorrelação mostrada nas figuras 4.31 e 4.32. As oscilações rápidas que se observam para  $s$  pequeno são um efeito numérico: como o potencial de Lennard-Jones vai a zero apenas no infinito, é necessário truncá-lo em um dado valor, o que insere tais oscilações. Isso foi verificado alterando o valor em que o potencial é truncado por um fator de dois e notando que as oscilações mudam de período. Contudo, como o período delas é muito curto, elas não afetam os perfis calculados se o passo escolhido para a transformada de Fourier for suficientemente grande.

Com esse potencial, assim como no poço-quadrado, satélites são aparentes, como vemos na figura 4.33. Eles surgem em posições aproximadamente simétricas em torno da linha central, as quais devem estar relacionadas à posição em que há o mínimo de potencial. Percebemos, além disso, que a linha central é assimétrica.

Para a temperatura de 20000K e a densidade de  $10^{17} \text{cm}^{-3}$ , temos os resultados nas figuras 4.34 e 4.35. As oscilações persistem mais antes de a função ir a zero, como seria de se esperar. Novamente, o problema de compatibilizar um  $ds$  pequeno e um alcance grande existirá, mas

como a linha não é tão alargada, foi possível obter o perfil de linha para um intervalo aceitável. Ele encontra-se na figura 4.36. Os satélites deixam de ser visíveis nas proximidades da linha central, que é assimétrica. A diminuição na densidade torna, ainda, a linha menos alargada do que na situação anterior.

O potencial de Lennard-Jonnes foi também utilizado por Takeo [44] e Atakan & Jacobson [45] para o estudo do espectro de alcalinos perturbados por gases nobres. Eles obtiveram boa concordância com resultados experimentais para a linha central, mas discrepâncias, especialmente nas amplitudes, para os satélites. Os resultados acima descritos concordam bastante bem com os desses artigos: a forma da linha e a ocorrência de *redshift*, bastante evidente na figura 4.36, especialmente.

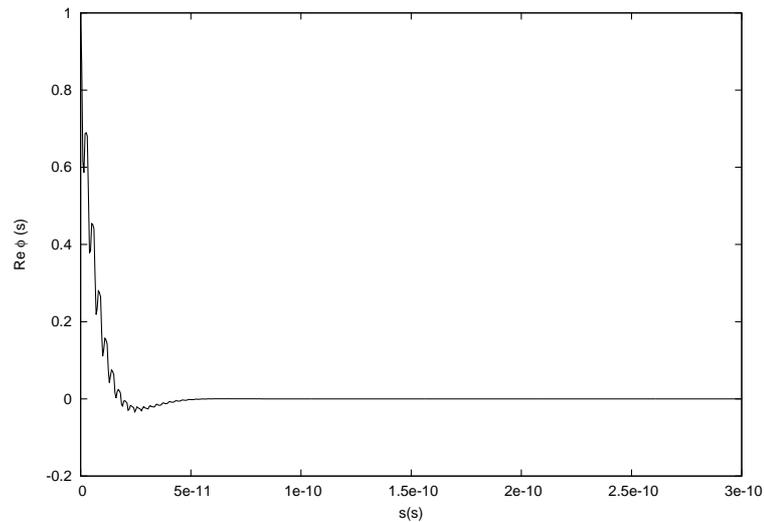


Figura 4.31: Parte real da função de autocorrelação para  $T = 17\text{K}$  e  $n \approx 10^{20}\text{cm}^{-3}$ .

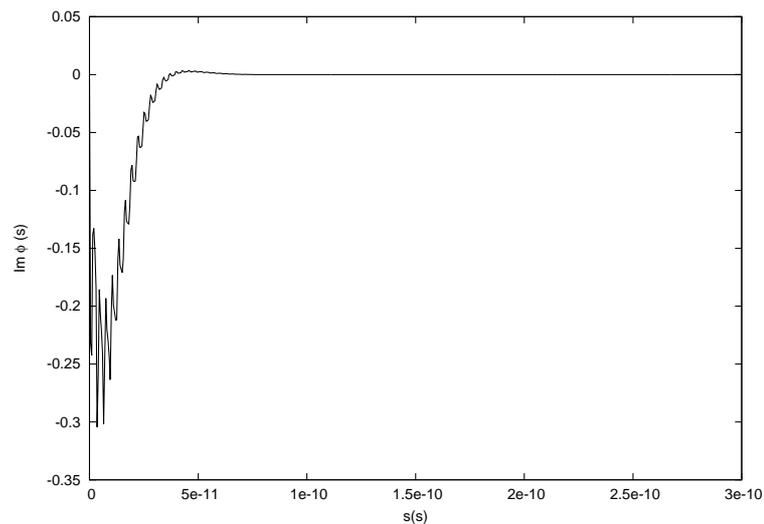


Figura 4.32: Parte imaginária da função de autocorrelação para  $T = 17\text{K}$  e  $n \approx 10^{20}\text{cm}^{-3}$ .

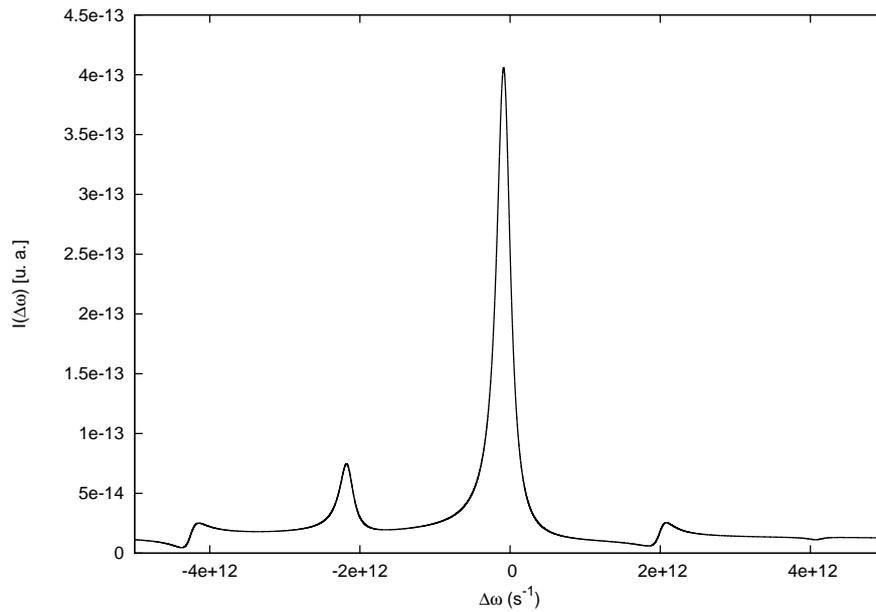


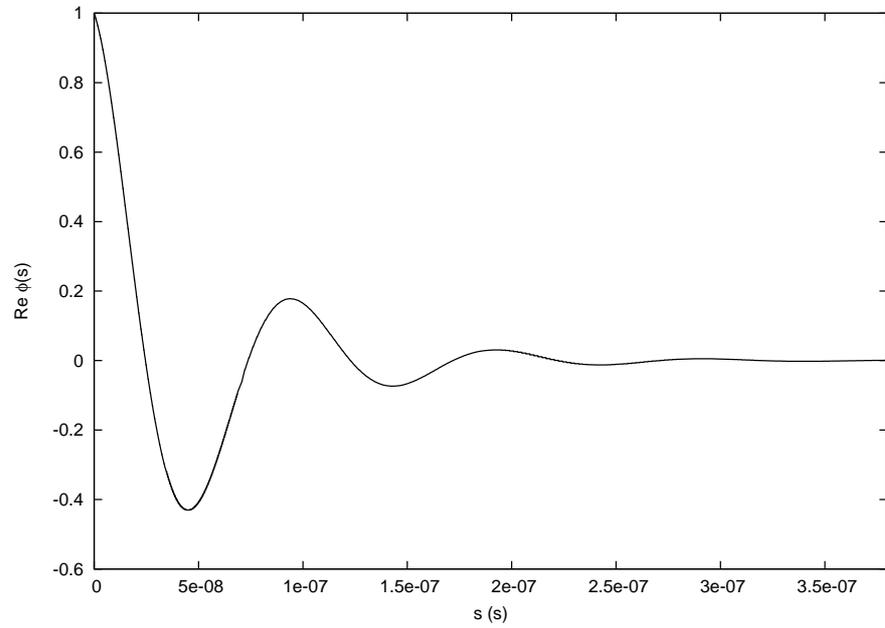
Figura 4.33: Perfil de linha obtido para o potencial de Lennard-Jones. A linha central é alargada e assimétrica. Além disso, surgem linhas-satélite em ambos lados da linha central, de maneira aproximadamente simétrica.

#### 4.2.4 Discussão

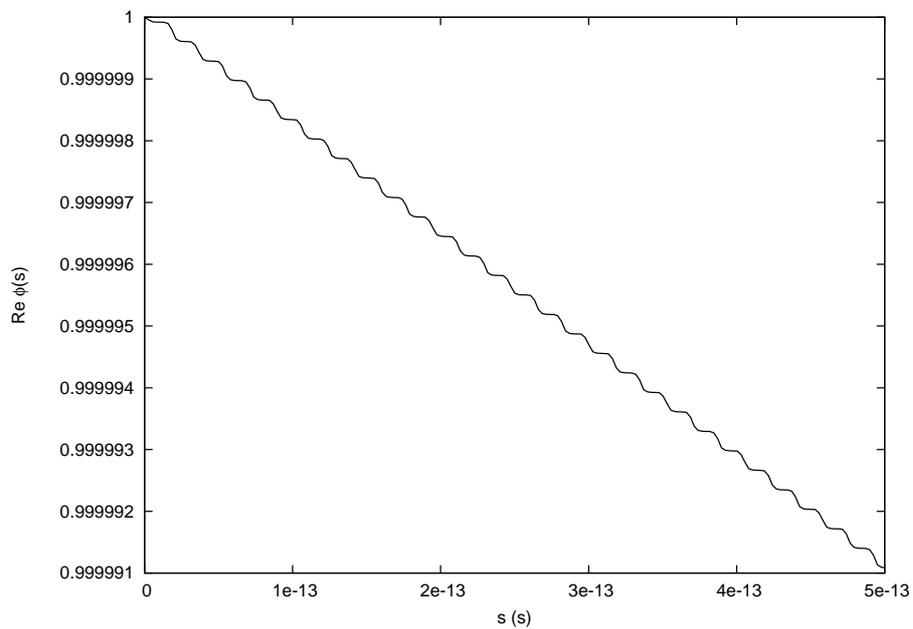
O que se pode verificar quase imediatamente é que o potencial gaussiano não é uma boa descrição para a interação entre o hidrogênio e os prótons perturbadores, pois ele fornece um perfil de linha alargado em excesso, não compatível com o que se observa em 1.2 e 1.3, por exemplo. Podemos, então, comparar quais as diferenças entre os perfis gerados pelo modelo utilizando um poço-quadrado ou utilizando um Potencial de Lennard-Jones.

Na figura 4.37, temos esses dois perfis para a temperatura de 17K e densidade de  $10^{20}$  perturbadores por  $\text{cm}^{-3}$ . Percebemos que a largura à meia altura é consideravelmente inferior para o potencial de Lennard-Jones. Assim, a amplitude da linha parece maior, o que é um efeito da normalização. Além disso, o perfil para Lennard-Jones resulta em uma linha mais assimétrica do que a do poço-quadrado. O caráter confinante desse potencial também garante que exista um maior número de satélites, os quais são visíveis em posições simétricas à linha central. Ele também ocasiona um leve deslocamento da linha central para menores frequências, isto é, um *redshift*, que não é detectado para o poço nessas condições físicas. A provável razão dessa dominância de efeitos na direção da asa vermelha da linha espectral é o fato de que frequências menores correspondem a menores energias. Como há certamente um número maior de partículas com baixas energias do que com alta energias, o desvio da linha ocorre nessa direção, assim como é nela em que aparecem os satélites mais intensos.

Para a temperatura de 20000K e densidade de  $10^{17}$  prótons por  $\text{cm}^{-3}$ , são mostrados os perfis da figura 4.38. Novamente, o potencial de Lennard-Jones resulta em numa menor largura à meia altura e uma maior assimetria. Contudo, devido ao fato de que as energias dos perturbadores são maiores nesse caso, além de que eles estão em menor número, os satélites já não são mais aparentes nas proximidades da linha central, pois é menos provável a formação da quasimolécula.

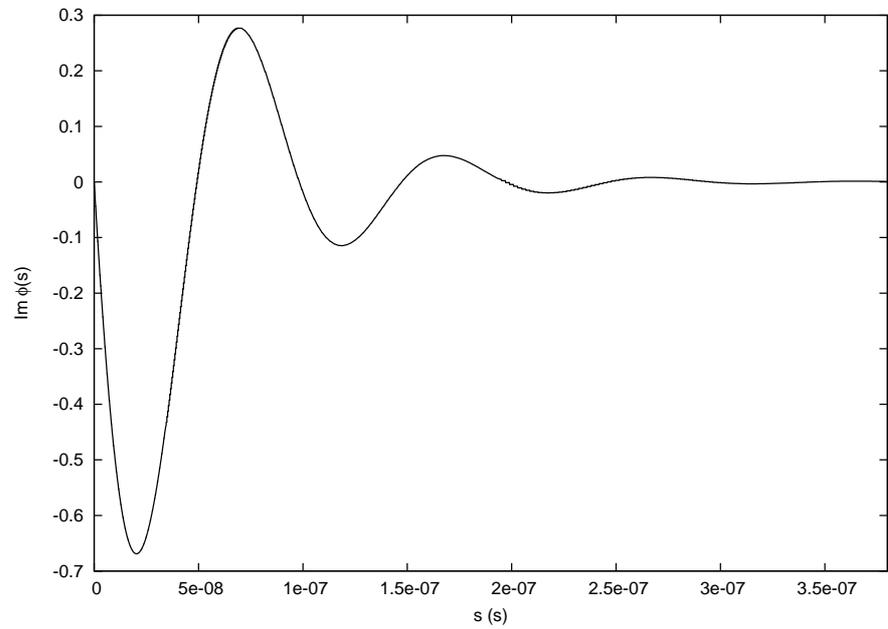


(a) comportamento geral



(b) comportamento oscilatório da função, aparente quando o passo é pequeno.

Figura 4.34: Parte real da função de autocorrelação para  $T = 20000\text{K}$  e  $n \approx 10^{17}\text{cm}^{-3}$ .



(a) comportamento geral

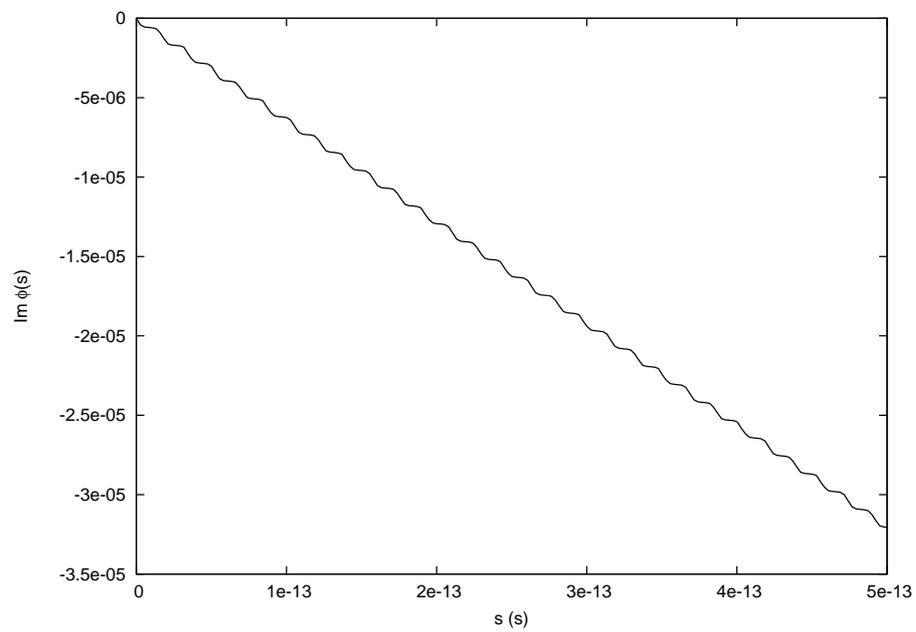
(b) oscilações reveladas com  $ds$  pequeno.

Figura 4.35: Parte imaginária da função de autocorrelação para  $T = 20000\text{K}$  e  $n \approx 10^{17}\text{cm}^{-3}$ .

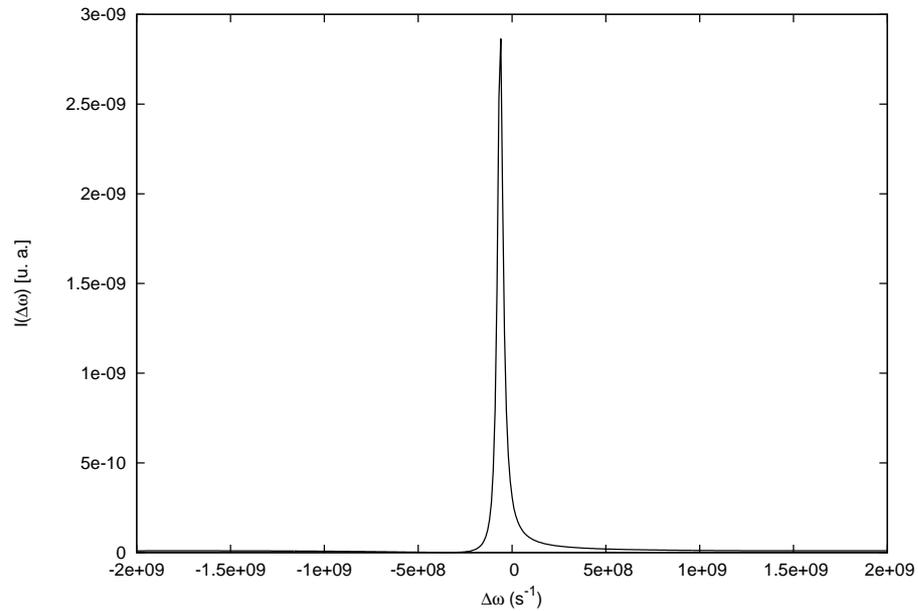


Figura 4.36: Perfil de linha obtido para o potencial de Lennard-Jones, agora com  $T = 20000\text{K}$  e  $n = 10^{17}\text{cm}^{-3}$ . A linha central é alargada e assimétrica.

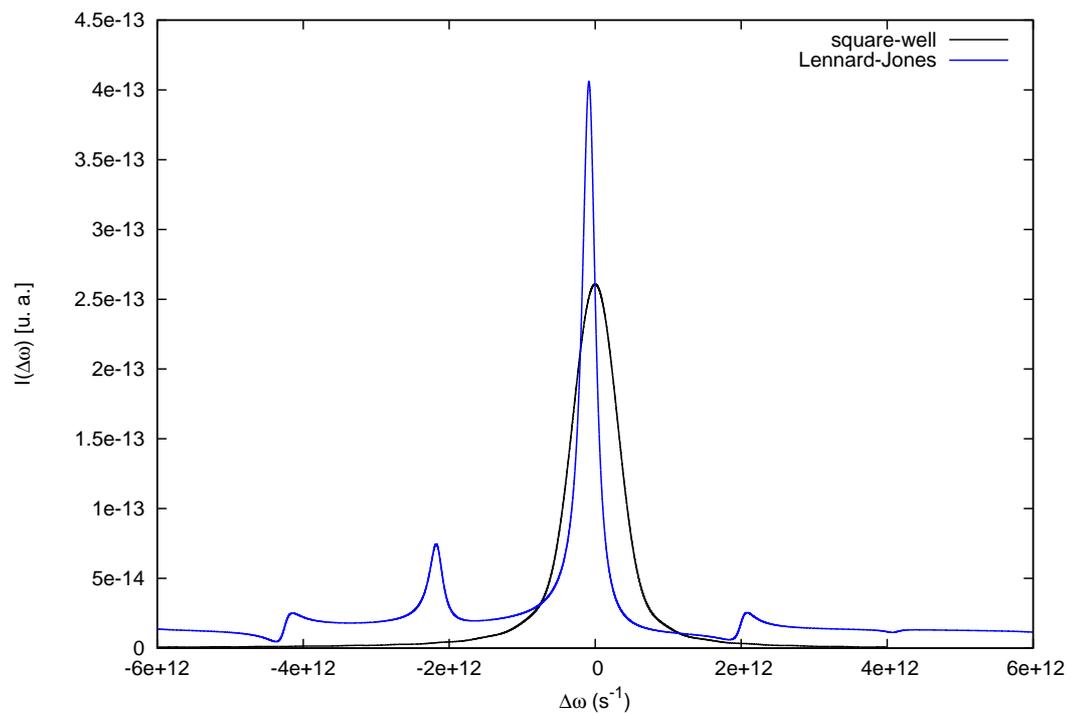


Figura 4.37: Perfis de linha para o potencial de poço-quadrado, em preto, e de Lennard-Jones, em azul, assumindo  $T = 17\text{K}$  e  $n = 10^{20}\text{cm}^{-3}$ .

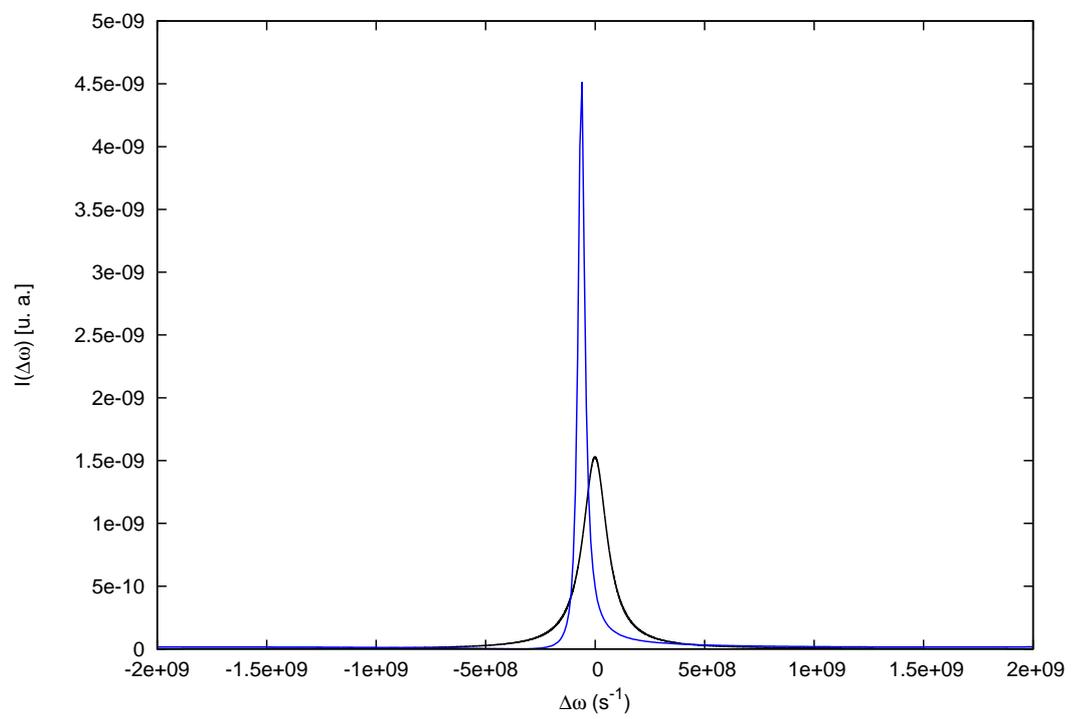


Figura 4.38: Perfis de linha para o potencial de poço-quadrado, em preto, e de Lennard-Jones, em azul, assumindo  $T = 20000K$  e  $n = 10^{17}cm^{-3}$ .

## 5 *Conclusões*

A teoria do efeito de colisões no espectro atômico é bastante desenvolvida e diferentes métodos podem ser empregados no cálculo do perfil espectral. A Abordagem Quasi-estática é a mais indicada para determinar a contribuição das colisões à asa da linha, mas não é confiável no comprimento de onda central. O Modelo Quântico minimiza esse problema ao levar em conta o movimento dos perturbadores, mas é de difícil aplicação. Já a Teoria Unificada, por conter aspectos das duas abordagens, tem a vantagem de permitir o cálculo de toda a linha espectral, para qualquer densidade de perturbadores.

O Modelo de Anderson-Talman é a teoria unificada com maior aceitação e fornece resultados em boa concordância com observações e experimentos. Para aplicá-lo, é necessário fazer algumas suposições sobre a interação entre o emissor e os perturbadores, especialmente que eles interagem fracamente, e assumir que os perturbadores são independentes. Considerando a hipótese ergódica, a interação com os vários perturbadores pode ser estudada através da colisão do emissor com apenas um perturbador. Ela deve ser modelada por algum potencial, de preferência que leve em conta as características da interação: atração a longa distância, mas repulsão quando as partículas são próximas.

Apesar de não cumprir os dois pré-requisitos, um potencial do tipo poço-quadrado é útil por permitir o cálculo analítico da função de autocorrelação, cuja Transformada de Fourier dá o perfil de linha. Com isso, é possível calcular facilmente perfis para diferentes parâmetros físicos e estudar a influência da variação desses parâmetros no espectro. Esses resultados podem ter seu caráter qualitativo generalizado para outros potenciais.

A primeira verificação foi que a profundidade do poço de potencial está associada à posição dos satélites, o que já era previsto pela teoria. Notamos, também, que a densidade de perturbadores influencia a largura e a intensidade da linha central e das linhas-satélite, mas não suas posições. O aumento na densidade causa um crescimento na largura à meia altura de todas as linhas e na amplitude dos satélites, mas diminui a amplitude da linha central, pois o maior número de perturbadores favorece a formação de quasimoléculas.

Verificamos também que, para estudar as influências da temperatura, era necessário realizar a média sobre velocidades. Notamos, feito isso, que ela afeta pouco a linha central, apenas diminuindo sua amplitude e aumentando lentamente sua largura. Já o primeiro satélite é bastante afetado, de maneira que depende bastante de existir ou não sobreposição com a linha central. Não existindo, o satélite é assimétrico, mas permanece na mesma posição e diminui em amplitude e aumenta em largura com o aumento da temperatura. Para temperaturas altas, há sobreposição, dificultando a análise. Inferimos que a assimetria continua, mas agora a posição do satélite varia em direção à linha central e a amplitude aumenta enquanto a largura diminui com o aumento da temperatura. A provável razão para esse comportamento é a conservação do fluxo. Inicialmente, o aumento na largura das linhas compensa a sua diminuição em amplitude.

Contudo, esse aumento ocorre de forma lenta, especialmente para a linha central. Em algum momento, é necessário que a amplitude do satélite também aumente para que a diminuição da amplitude da linha central seja compensada e a energia emitida conservada.

A descontinuidade do poço-quadrado foi eliminada com o uso de um potencial representado por uma meia-gaussiana invertida. A grande largura da parte confinante desse potencial e o fato de que ele vai de maneira lenta a zero causam um alargamento da linha excessivo, incoerente com o que seria esperado para o efeito de colisões. Esse potencial não é, por conseguinte, um potencial adequado para descrever a interação entre o próton e o átomo de hidrogênio. Um potencial de Lennard-Jonnes, que tem um poço com menor largura e, ainda, é repulsivo para distâncias pequenas entre as partículas, é mais adequado para essa interação. Ele resulta em perfis de linha que, qualitativamente, concordam bastante bem com observações, pois têm linhas assimétricas, com desvio para o vermelho e, ainda, satélites visíveis.

O método é, em geral, confiável em suas previsões qualitativas. A forma de corrigi-lo para que elas sejam quantitativamente precisas já foi descrita: uso de potenciais numéricos realistas e inclusão dos momentos de dipolo no cálculo da função de autocorrelação. Além disso, como estamos interessados nas temperaturas relativamente altas que ocorrem na atmosfera de anãs brancas, a média sobre velocidades deve ser realizada, pois vimos, por meio do estudo dos perfis obtidos com o potencial de poço-quadrado, que nessa situação ela é importante para que os perfis corretos sejam obtidos.

Todavia, o estudo da linha espectral por meio de sua transformada de Fourier tem um alto custo computacional, que não permitiu que essas correções fossem implementadas em tempo hábil. O problema resume-se ao fato de que, embora seja imprescindível calcular a função de autocorrelação até que ela seja quase nula, para que não haja perda de informação, também é necessário utilizar um passo pequeno, pois a transformada de Fourier discreta é periódica no inverso do passo. Assim, para obter um intervalo satisfatório de frequências e detectar os satélites, é necessário ter um grande número de pontos na função de autocorrelação. Desse modo, além de empregarmos um grande tempo para obter a função de autocorrelação, acabamos usando quantidades grandes de memória no computador para armazenar todos os valores que serão posteriormente integrados para obter a função, dificultando a execução dos programas.

Esperamos, porém, que, com a otimização do programa, seja possível realizar cálculos realistas da contribuição das colisões ao perfil de linha. Tais contribuições poderão, então, ser consideradas em modelos de atmosfera, melhorando a determinação dos parâmetros físicos de estrelas que possuam hidrogênio parcialmente ionizado, como é o caso das anãs brancas DA. Este trabalho pode ser considerado como o primeiro passo para isso, no sentido de que permitiu a compreensão da teoria de alargamento por colisões e seu emprego em problemas simplificados, que revelaram não só o potencial de previsão do modelo, mas também suas limitações.

## *Referências Bibliográficas*

- 1 KEPLER, S. O. et al. Mode identification of pulsating white dwarfs using the Hubble space telescope. *Astrophysical Journal*, v. 539, p. 379–391, 2000.
- 2 GREENSTEIN, J. L. An absorption line in the ultraviolet spectrum of 40 Eridani b. *Astrophysical Journal*, v. 241, p. L89–L93, 1980.
- 3 WEGNER, G. Detection of the 1400 a absorption in the ultraviolet spectrum of the DA white dwarf LB 3303. *Astrophysical Journal Letters*, v. 261, p. L87–L89, 1982.
- 4 HOLM, A. V. et al. Two-phase ultraviolet spectrophotometry of the pulsating white dwarf ZZ PISCUM. *Astrophysical Journal*, v. 289, p. 774–781, 1985.
- 5 SANDO, K. M.; WORMHOUDT, J. C. Semiclassical shape of satellite bands. *Physical Review A*, v. 7, p. 1889–1898, 1973.
- 6 KOESTER, D. et al. The explanation of the 1400 and 1600 a features in da white dwarfs. *Astronomy & Astrophysics*, v. 142, p. L5–L8, 1985.
- 7 MICHELSON, A. A. On the broadening of spectral lines. *Astrophysical Journal*, v. 2, p. 251, 1895.
- 8 LORENTZ, H. A. The absorption and emission lines of gaseous bodies. *Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen Proceedings Series B Physical Sciences*, v. 8, p. 591–611, 1905.
- 9 LENZ, W. Einige korrespondenzmäßige betrachtungen. *Zeitschrift fur Physik*, v. 25, p. 299–311, 1924.
- 10 LENZ, W. Allgemeine theorie der verbreiterung von spektrallinien. *Zeitschrift fur Physik*, v. 80, p. 423–447, 1933.
- 11 WEISSKOPF, V. Zur theorie der kopplungsbreite und der stoßdämpfung. *Zeitschrift fur Physik*, v. 75, p. 287–301, 1932.
- 12 WEISSKOPF, V. Zur theorie der kopplungsbreite. *Zeitschrift fur Physik*, v. 77, p. 398–400, 1932.
- 13 KUHN, H. G. *Philosophical Magazine*, v. 18, p. 987, 1934.
- 14 KUHN, H. Pressure shift of spectral lines. *Physical Review*, v. 52, p. 133–133, 1937.
- 15 KUHN, H. Pressure broadening of spectral lines and van der Waals forces. I. Influence of argon on the mercury resonance line. *Royal Society of London Proceedings Series A*, v. 158, p. 212–229, 1937.
- 16 KUHN, H. G.; LONDON, F. *Philosophical Magazine*, v. 18, p. 983, 1934.

- 17 SANTOS, M. G.; KEPLER, S. O. Theoretical study of the line profiles of the hydrogen perturbed by collisions with protons. *Monthly Notices of the Royal Astronomic Society*, v. 423, p. 68–79, 2012.
- 18 JABLONSKI, A. Über die stoßverbreiterung der spektrallinien und den energieaustausch bei zusammenstößen. *Zeitschrift für Physik*, v. 70, p. 723–732, 1931.
- 19 JABLONSKI, A. *Acta Physica Polonica*, v. 6, p. 371, 1937.
- 20 JABLONSKI, A. *Acta Physica Polonica*, v. 7, p. 196, 1938.
- 21 JABLONSKI, A. *Acta Physica Polonica*, v. 8, p. 71, 1939.
- 22 JABLONSKI, A. Pressure broadening of spectral lines. *Physica*, v. 7, p. 541–551, 1940.
- 23 JABLONSKI, A. General theory of pressure broadening of spectral lines. *Physical Review*, v. 68, p. 78–93, 1945.
- 24 JABLONSKI, A. On the phase shift approximation in the theory of pressure broadening of spectral lines. *Physical Review*, v. 73, p. 258–259, 1948.
- 25 JABLONSKI, A. *Acta Physica Polonica*, v. 27, p. 49, 1965.
- 26 FOLEY, H. M. The pressure broadening of spectral lines. *Phys. Rev.*, v. 69, p. 616–628, 1946.
- 27 LINDHOLM, E. *Arkiv för Fysik*, v. 32, p. 1, 1945.
- 28 ANDERSON, P. W. A method of synthesis of the statistical and impact theories of pressure broadening. *Physical Review*, v. 86, p. 809–809, 1952.
- 29 ANDERSON, P. W.; TALMAN, J. D. Pressure broadening of spectral lines at general pressures. *Bell System Technical Publication*, v. 3117, 1956.
- 30 ALLARD, N. F.; KIELKOPF, J. The effect of neutral nonresonant collisions on atomic spectral lines. *Rev. Mod. Phys.*, v. 54, p. 1103–1182, 1982.
- 31 BAYLIS, W. E. Three-body alkali-noble-gas interactions and secondary satellites. *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, v. 10, p. L477–L481, 1977.
- 32 SANDO, K. M.; ERICKSON, G. J.; BINNING JR., R. C. Extended pairwise additivity: interactions of degenerate atoms with rare-gas atoms. *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, v. 12, p. 2697–2705, 1979.
- 33 ALLARD, N. F. et al. Effect of the variation of electric-dipole moments on the shape of pressure-broadened atomic spectral lines. *Physical Review A*, v. 60, p. 1021–1033, 1999.
- 34 KLEINMAN, S. J. et al. SDSS DR7 white dwarf catalog. *Astrophysical Journal*, *aguardando publicação*, 2012.
- 35 RICHER, H. B. White dwarfs sing the blues. *Nature*, v. 394, p. 825–826, 1998.
- 36 MARGENAU, H.; LEWIS, M. Structure of spectral lines from plasmas. *Reviews of Modern Physics*, v. 31, p. 569–615, 1959.

- 37 ROHRMANN, R. D.; ALTHAUS, L. G.; KEPLER, S. Lyman  $\alpha$  wing absorption in cool white dwarf stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 411, p. 781–791, 2011.
- 38 ZYGELMAN, B.; DALGARNO, A. The radiative association of He(+) and H. *Astrophysical Journal*, v. 365, p. 239, 1990.
- 39 ALLARD, N. F. et al. Free-free quasi-molecular absorption and satellites in Lyman-alpha due to collisions with H and H<sup>+</sup>. *Astronomy & Astrophysics Supplement Series*, v. 108, p. 417–431, 1994.
- 40 ALLARD, N. F. Alkali-rare-gas line profiles in a square-well potential approximation. I. Satellites. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, v. 11, n. 8, p. 1383, 1978.
- 41 ALLARD, N. F.; SAHAL-BRECHOT, S.; BIRAUD, Y. Unified theory of collisional line profiles: study of the D lines of caesium perturbed by xenon: width, shift, asymmetry and satellites. *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, v. 7, p. 2158–2172, 1974.
- 42 ALLARD, N.; BIRAUD, Y. Effect of the velocities of the perturbers on alkali-rare gas line profiles. *J. Phys. France*, v. 43, n. 3, p. 501–507, 1982.
- 43 LENNARD-JONES, J. E. On the determination of molecular fields. *Proc. R. Soc. Lond. A*, v. 106, n. 738, p. 463–477, 1924.
- 44 TAKEO, M. Theoretical calculation of pressure-broadened atomic line profiles. *Physical Review A*, v. 1, p. 1143–1149, 1970.
- 45 ATAKAN, A. K.; JACOBSON, H. C. Comparison of experimental and theoretical pressure-broadening atomic line shapes. *Journal of Quantum Spectroscopy and Radiative Transfer*, v. 12, p. 289–298, 1972.