

O espectro de um gás permite obter diversas informações sobre suas condições físicas, como temperatura e densidade. Tal fato é muito utilizado, por exemplo, em astronomia: a partir do espectro de uma estrela, pode-se determinar sua temperatura efetiva e estimar sua massa. Isso é feito ajustando espectros teóricos das partículas que compõem a atmosfera da estrela, calculados para temperaturas e densidades definidas. Por isso, é importante que esse espectro teórico seja bem conhecido.

No caso do hidrogênio, presente na atmosfera da maioria das estrelas por ser o elemento mais abundante do Universo, o espectro devido às transições eletrônicas de um átomo isolado possui cálculos muito precisos, pois existe solução analítica. Com a melhoria das técnicas de observação e medida, contudo, é necessário levar em conta efeitos de muitos corpos. É o caso das colisões com prótons (H^+), que interferem nas transições, alterando o perfil da linha espectral observada.

Um modelo comumente utilizado para o cálculo dessa contribuição é o de Anderson-Talman (1956). Nessa abordagem, interações entre os prótons (perturbadores) são desprezadas, considerando-se uma trajetória retilínea e uma colisão adiabática. Não é um modelo exato, mas serve como aproximação. Com ele, pode-se calcular a função de autocorrelação associada às ondas luminosas emitidas pelo átomo de hidrogênio. Fazendo a Transformada de Fourier dessa função, tem-se o perfil de linha.

Em meu trabalho, desenvolvi um programa que, dada uma temperatura, uma densidade de perturbadores e um potencial descrevendo a interação $H-H^+$, calcula a função de autocorrelação. Também escrevi um programa que calcula sua Transformada de Fourier, para se obter o perfil da linha espectral esperada. Calculei, então, o espectro considerando diferentes temperaturas, densidades e potenciais descrevendo a interação entre próton e hidrogênio.

Considere potenciais com complexidade crescente: função degrau, meia-gaussiana invertida, potencial de Lennard-Jones. Cada potencial apresenta uma contribuição com forma característica à linha. A intensidade dessa contribuição e o espaçamento entre suas diferentes componentes irá depender da temperatura e da densidade escolhidos.

Finalmente, esse programa, com algumas considerações extras, pode ser utilizado para calcular a contribuição ao espectro a partir de um potencial realista. Deve-se, nesse caso, levar em conta que a intensidade em cada ponto depende do elemento de matriz (momento de dipolo) entre os estados inicial e final do emissor. Essa contribuição pode, então, ser somada às demais, devido a transições eletrônicas, Efeito Stark e Efeito Doppler, obtendo-se assim um modelo de atmosfera para estrelas. Com isso, pode-se comparar o modelo teórico com dados observacionais, ou mesmo experimentais, já que atualmente é possível obter condições similares às da atmosfera de uma anã branca em experimentos com o Z-Pinch, no Sandia National Laboratories.