



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

FORMACIÓN DE NÚCLEOS DENSOS EN NUBES MOLECULARES

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICA

P R E S E N T A :

MARÍA NORI MENDOZA HERNÁNDEZ.

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. JAVIER BALLESTEROS PAREDES.



FACULTAD DE CIENCIAS
UNAM

2005.



m. 341405



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas

Tesis Digitales

Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©

PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

ACT. MAURICIO AGUILAR GONZÁLEZ
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito:
"Formación de Núcleos Densos en Nubes Moleculares"

realizado por Mendoza Hernández María Nori

con número de cuenta 07931441-7, quien cubrió los créditos de la carrera de: Físico.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis
Propietario

Dr. Javier Ballesteros Paredes

Propietario

Dr. Alejandro Raga Rasmussen

Propietario

Dra. Deborah Dultzin Hacyan

Suplente

Dra. Adriana Gazol Patiño

Suplente

Dr. José Franco López

Consejo Departamental de Físico

M. EN C. ALICIA ZARZOSA PEREZ
Coordinadora de Licenciatura en FÍSICAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Mi profundo agradecimiento

A la Facultad de Ciencias

A la Universidad Nacional Autónoma de México, mi alma mater

A mi asesor Javier Ballesteros por la infinita paciencia que tuvo a lo largo de la elaboración de esta tesis.

A mis amigos, Claudia, Alma , Sergio, Andrea por los buenos momentos

A la hermosa familia Ballesteros-Dalessio por soportarme todo el tiempo

A la familia Calzado: Gloria, Juan, Juan Manuel, Jorge, Jacqueline y Adriana

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la
UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el
contenido de mi trabajo recepcional.
NOMBRE: María Noé Mendoza
Hernández
FECHA: 23-02-05
FIRMA: [Firma]

A mis hermanos por todo el apoyo que me han brindado:

A Hugo por su ayuda invaluable

A Lizarda por su fortaleza

A Obdulia por marcar el camino

A Fernando por querer tanto a Ale

A Raquel por independiente

A los otros integrantes de la familia:

A Gustavo por la buena música, el cine, el café y las matemáticas

A Sofía porque es muy buena

A Ulises por los aventones a la terminal

A Gaby por perseverante

A Fer, Andrea, Adriana y Jimena

A Beatriz por alojarme en su casa

A Marce por alojar a Ale en su casa

Con infinito cariño a los hombres más importantes en mi vida:

Alejandro y Emiliano porque no hay mayor placer en el mundo que ser madre

Lorenzo por todo el amor y apoyo que me ha brindado

Con cariño:

A mi madre porque no hay persona más hermosa, generosa, humana, cariñosa e inteligente en el mundo y ha luchado en la vida sin claudicar nunca.

A mi padre por todo lo que de él aprendimos

Índice general

1. RESUMEN	1
 I Propiedades Físicas y Observacionales de las Nubes Moleculares y sus Núcleos Densos	 5
2. Nubes Moleculares	7
2.1. Propiedades globales de las nubes moleculares	8
2.2. Relaciones de escala	9
2.2.1. Relación densidad-tamaño	9
2.2.2. Relación dispersión de velocidades-tamaño	12
 3. Teorema Virial	 15
3.0.3. Teorema Virial Lagrangiano	15
3.0.4. Teorema Virial Euleriano	17
3.1. Comentarios sobre el Estado Virial de las Nubes Moleculares .	19
3.1.1. Equipartición de Energía	19
3.1.2. Estado Virial de las Nubes Moleculares	20
3.1.3. Relaciones de Larson, teorema virial y equipartición de la energía	22
3.1.4. Energía cinética: ¿Un término para el soporte?	23
3.1.5. Términos superficiales en el Teorema Virial	24
 4. Escenarios Estándar y Turbulento	 27
4.1. Introducción	27

II *ÍNDICE GENERAL*

4.2. Estabilidad y flujo magnético	28
4.3. Escenario Estándar de Formación Estelar	30
4.4. Escenario Dinámico de Formación Estelar	32
4.5. Predicciones observacionales de los modelos numéricos	33
4.5.1. El origen turbulento de los núcleos densos protoestelares	33
4.5.2. Existencia de núcleos densos subsónicos y transónicos .	33
4.5.3. Existencia de núcleos densos “coherentes”	34
4.5.4. Núcleos densos con disfraz hidrostático	35
4.6. Formación rápida de núcleos, estrellas y nubes	37

II Cálculo del Transporte Radiativo en Núcleos Densos de Simulaciones Numéricas 39

5. Introducción	41
6. Transporte Radiativo	43
6.1. Transporte Radiativo	43
6.1.1. Flujo de energía	43
6.1.2. Intensidad específica	43
6.1.3. Transporte Radiativo	44
6.1.4. La ecuación de transporte radiativo	46
6.1.5. Profundidad óptica y función fuente	46
6.1.6. Camino libre medio	48
6.2. Radiación térmica	49
6.2.1. Radiación del cuerpo negro	49
6.3. Los coeficientes de Einstein.	50
6.3.1. Relación entre los coeficientes de Einstein	51
6.3.2. Coeficientes de absorción y emisión en términos de los coeficientes de Einstein	53
6.3.3. Distribución de Maxwell-Boltzman	55
6.3.4. Función de distribución de Boltzmann	55

6.3.5. Ensanchamiento Doppler	56
6.3.6. Equilibrio Termodinámico	58
6.3.7. Equilibrio Termodinámico Local	58
6.3.8. Ecuaciones de Equilibrio Estadístico	58
7. Colapso	61
7.1. Perfiles de Colapso	62
8. Análisis del Trabajo de Transporte Radiativo de Bernes (1979)	65
8.1. Cálculo de la intensidad específica promedio	66
8.2. Técnica de reducción de varianza	68
8.3. Modificaciones al Código Original	70
9. Resultados	71
9.1. Ejemplo Modelo: Nube con Densidad Constante	71
9.1.1. Resultados Originales de Bernes (1979)	71
9.2. Experimentos Realizados	73
9.2.1. Resultados	73
10. Conclusiones	81
A. Ecuaciones de la magnetohidrodinámica	83
A.1. Derivada material	83
A.2. Ecuaciones de la Magnetohidrodinámica	84
B. Inestabilidad Gravitacional	87
C. Derivación del espectro de k^{-2} para un campo de choques unidimensional	91
D. Código Montecarlo 3D	93

Capítulo 1

RESUMEN

Las estrellas y sus planetas se forman dentro de los núcleos densos de nubes moleculares. Sin embargo, el proceso exacto de formación estelar no es claro aún. En el caso de las regiones de formación estelar de baja masa, el escenario tradicional o estándar de formación estelar ha propuesto que estos núcleos densos están soportados contra el colapso gravitacional por una combinación de presiones térmica, turbulenta y magnética (ver, por ej. Shu et al. 1987). La formación de estrellas, en este caso, se da mediante un proceso lento, en el cual la energía gravitacional logra exceder a la suma de las energías internas una vez que logra deshacerse de su exceso de energía magnética.

Sin embargo, la existencia de núcleos isotérmicos en equilibrio hidrostático podría estar en conflicto con el hecho de que las nubes moleculares son turbulentas y supersónicas, ya que parece difícil que estructuras en equilibrio cuasi-estático puedan sobrevivir en un medio altamente compresible con flujos turbulentos y supersónicos, donde las fluctuaciones de densidad son en general transitorias.

Así, el escenario de formación estelar via la fragmentación turbulenta, propone que los núcleos protoestelares se forman de manera general, mediante choques de flujos supersónicos. En el caso particular de que una fluctuación de densidad (núcleo denso) posea mayor energía gravitacional que las energías internas (magnética, cinética o turbulenta, y térmica), el núcleo denso colapsará para formar estrellas. Sin embargo, la gran mayoría de estas estructuras no colapsan, sino que vuelven a reexpandirse y difundirse en el medio que las generó (ver, p.ej., Vázquez-Semadeni et al. 2004; Mac Low & Klessen 2004, y referencias ahí citadas)

Estos dos modelos están actualmente siendo materia de debate entre la comunidad internacional. Por una parte, el modelo estándar parece haber

recibido soporte observacional, pues existen una gran cantidad de núcleos protoestelares cuyas dispersiones de velocidades son muy bajas, o bien que presentan perfiles de densidad que asemejan esferas hidrostáticas. Ambos hechos sugieren entonces que los núcleos densos son cuasi-estáticos. Sin embargo, simulaciones numéricas de nubes moleculares reproducen características similares, aún cuando los núcleos no sean hidrostáticos y evolucionen dinámicamente.

Así, para poder entender el proceso de formación estelar en detalle, es importante poder discernir entre estos modelos. Una manera de hacerlo es mediante una estrecha comparación entre los datos de las simulaciones numéricas y los observacionales. En particular, los perfiles de línea observados hacia núcleos protoestelares deben ser reproducidos de manera satisfactoria por los modelos de turbulencia interestelar.

Es conveniente mencionar que el estudio de la emisión de núcleos densos en nubes moleculares de simulaciones numéricas es un problema que no ha sido atacado en la literatura. Los trabajos de Mardones, Myers, etc., presuponen estructuras *ad-hoc* para el campo de densidad y velocidad. Sin embargo, los perfiles de línea de los núcleos densos producto de las simulaciones numéricas no han sido estudiados.

Actualmente existen algunos códigos de transporte radiativo que han sido aplicados a simulaciones numéricas. Pero las características de éstas (típicamente malla fija, con resoluciones de, en el mejor de los casos, 512^3 pixeles) han hecho difícil el estudio detallado de perfiles de línea en los núcleos densos dentro de las nubes, ya que, en el mejor de los casos, logran tamaños de $1/10$ el tamaño de la caja, es decir, unos 50 pixeles por lado (típicamente, un núcleo denso en las simulaciones numéricas tiene tamaños de unos 10 pixeles por lado).

Nuestro grupo de trabajo cuenta con un código SPH (Smooth Particle Hydrodynamics), el cual, por ser un código de partículas, tiene de manera natural mayor resolución en las regiones más densas (núcleos). Así, podemos alcanzar resoluciones equivalentes de hasta 128 pixeles al cubo por cada núcleo denso, por lo cual el estudio de la emisión de núcleos densos resultado de dichas simulaciones es de gran importancia.

En la presente tesis se proponen algunas modificaciones al trabajo realizado por Bernes (1978, 1979), quien desarrolló un código Montecarlo de transporte radiativo para el cálculo de perfiles de línea en núcleos densos. Dado que el trabajo original de Bernes supone que los núcleos densos tienen simetría esférica, fue necesario relajar esta hipótesis, y permitir funcionar al código con estructuras tridimensionales.

La tesis consta de dos partes. La primera, una revisión bibliográfica sobre

los modelos estandar y turbulento. En ella se describen las características de las nubes moleculares y sus núcleos densos, haciendo especial énfasis en las relaciones de escala descubiertas por Larson (1981) (Capítulo 2). En el Capítulo 3 se discute el balance energético y virial de las nubes interestelares, haciendo especial incapié en el hecho de que las nubes no estan en equilibrio virial, pero sí en balance de energía. Este hecho tiene repercusiones importantes, pues sugiere fuertemente que las nubes son más transientes que lo que tradicionalmente se ha creído (Capítulo 4). En este capítulo se describen brevemente los escenarios de formación estelar estándar y turbulento.

Así, ante la necesidad de producir perfiles de línea en núcleos densos de simulaciones numéricas con el propósito de compararlos con los observados y con los predichos por el escenario estándar, en la segunda parte de esta tesis se discuten, primeramente, conceptos básicos de la teoría de transporte radiativo (Capítulo 6). En el Capítulo 7 se describe brevemente cómo podemos distinguir un perfil de línea que muestre características de colapso. En el Capítulo 8 se describe el trabajo realizado por Bernes (1978, 1979), y las modificaciones realizadas al código 1D para convertirlo en un código que funcione en 3D. En el Capítulo 9 presentamos la aplicación del código 3D a un problema modelo (nube de densidad constante), comparando entre los resultados del código 1D y 3D. Finalmente, en el Capítulo 10 se presentan las conclusiones de este trabajo.

Por último, hemos añadido cuatro apéndices. El Apéndice C presenta una explicación sencilla sobre cómo el espectro de energías de un campo de choques (unidimensional por simplicidad) de la forma k^{-2} puede asociarse con la relación dispersion de velocidades-tamaño, con pendiente 1/2. El Apéndice A presenta las ecuaciones de la magnetohidrodinámica, las cuales son de importancia para la realización de las simulaciones numéricas y para entender el teorema virial (Capítulo 3). En el Apéndice B se discute la inestabilidad gravitacional. Por último, el Apéndice D presenta el código montecarlo 3D.

Parte I

Propiedades Físicas y Observacionales de las Nubes Moleculares y sus Núcleos Densos

Capítulo 2

Nubes Moleculares

Hoy día sabemos que las estrellas se forman dentro de los núcleos más densos y compactos de las nubes moleculares, por lo que el estudio de éstos es de importancia fundamental para entender el proceso de la formación estelar. En el presente capítulo recopilamos la información más importante de las nubes moleculares.

Un descubrimiento del siglo pasado es la existencia de grandes regiones oscuras en el cielo estrellado (ver Fig 2.1). Con la llegada de los radiotelescopios fue posible determinar que dichas regiones son nubes de gas molecular y polvo que oscurece la luz de las estrellas que se encuentran detrás.

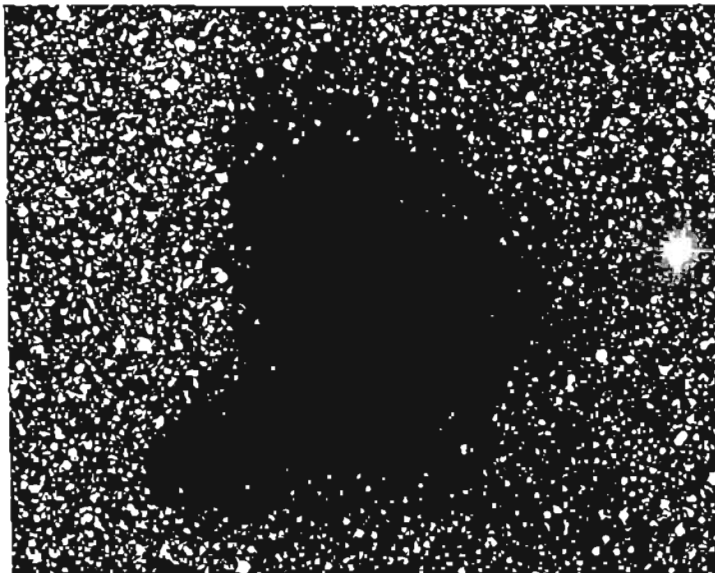


Figura 2.1: Las regiones oscuras son nubes de gas molecular y polvo que oscurece la luz de las estrellas que se encuentran detrás

Las nubes moleculares son la componente más densa y fría del gas interestelar. Sus masas oscilan entre algunas masas solares y $10^6 M_{\odot}$. También se sabe que la dispersión de velocidad, así como la densidad de masa promedio siguen algunas relaciones estadísticas, llamadas relaciones de Larson (1981), que su espectro de masas tiene una ley de potencias con pendiente de ~ -1.5 con al menos dos ordenes de magnitud¹; que poseen campos magnéticos, y que están en equipartición de energías, punto al cual regresaremos en el capítulo §3.

2.1. Propiedades globales de las nubes moleculares

Las nubes moleculares se dividen, a grosso modo, en tres categorías: difusas, oscuras y gigantes. En el Cuadro 2.1 se muestran las principales características de cada una de éstas.

Cuadro 2.1: Propiedades de las nubes moleculares

Tipo	$R(\text{pc})$	$n(\text{cm}^{-3})$	$M(M_{\odot})$	$\delta v(\text{Km s}^{-1})$	$T(\text{K})$	Núcleos y estrellas
Difusas	0.3-3	30-500	0.5-100	0.7-1.5	10	baja masa
Oscuras	3-10	10^3 - 3	10^3 - 4	1-3	10	baja masa
Gigantes	20-100	10-300	10^5 - 6	5-15	10-20	masivas y de baja masa

Todas las nubes moleculares presentan evidencias de formación estelar. En particular, las estrellas masivas jóvenes de tipo OB se encuentran siempre asociadas a las nubes moleculares gigantes. Adicionalmente, observaciones del material molecular dentro de un kiloparsec (kpc) alrededor del Sol muestran que no hay nubes moleculares sin formación estelar. La única excepción es la nube de Coalsack, localizada a unos 150 parsecs (pc). Más aún, dentro de un radio de 3 kpc alrededor del Sol, sólo una nube molecular gigante no presenta evidencias de formación estelar (Maddalena & Thaddeus 1985).

Las nubes moleculares tienen a su vez subestructura, con grumos y núcleos densos dentro de éstas. Las propiedades generales de los núcleos densos se presentan en el Cuadro 2.2

¹ Cabe notar que el espectro de masas de los núcleos proto-estelares tiene una pendiente más alta, de aproximadamente -2.1 , más parecido a la pendiente encontrada en la Función de Masa Inicial (IMF, por sus siglas en inglés).

Cuadro 2.2: Propiedades de los núcleos densos

Tipo	$R(\text{pc})$	$n(\text{cm}^{-3})$	$M(M_{\odot})$	$\delta v(\text{Km s}^{-1})$	$T(\text{K})$	Estrellas
Baja masa	0.05-0.2	10^4-6	0.3-10	0.2-0.4	10	T Tauri
Masivos						
(grandes)	0.3-6	10^4-5	30-10 ⁴	1-2	10-30	OB
(pequeños)	0.01-0.03	10^6-7	0.3-300	1-3	30-100	OB

Dentro de las principales propiedades de las nubes moleculares y sus núcleos densos se encuentran las llamadas relaciones de escala o de Larson (1981), discutidas a continuación.

2.2. Relaciones de escala

Larson (1981) estudió dos relaciones que abarcan tres ordenes de magnitud en tamaño, desde ~ 0.1 hasta 100 pc.

$$\langle \rho \rangle \propto R^{\alpha} \quad (2.1)$$

$$\delta V \propto R^{\beta} \quad (2.2)$$

en donde R es el tamaño de la nube, $\langle \rho \rangle$ es la densidad promedio de la nube, δV es la dispersión de velocidades derivada de los anchos de línea, y α , y β son los exponentes constantes de escala.

Aunque han sido encontrados resultados similares en trabajos subsecuentes, existe cierta dispersión en los valores reportados para los exponentes, con $\alpha \sim -1.15 \pm 0.15$, $\beta \sim 0.4 \pm 0.1$. En particular, los valores de $\alpha = -1$ y $\beta = 1/2$ han sido atribuidos al equilibrio Virial (ver Capítulo §3).

2.2.1. Relación densidad-tamaño

En la figura 2.2 se presenta la relación densidad promedio vs tamaño de la nube, encontrada por Larson (1981)

El hecho de que el exponente α sea igual a -1 en esta relación tiene una implicación muy importante sobre la densidad columnar. Por definición la densidad columnar es:

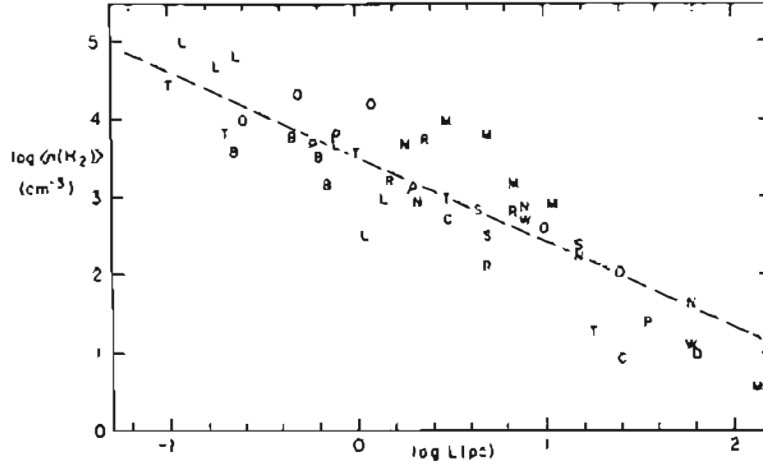


Figura 2.2: Densidad promedio vs. tamaño de la nube para un conjunto de nubes observadas (tomada de Larson, 1981).

$$N = \int \rho dl, \quad (2.3)$$

que puede ser reescrita, usando el Teorema del Valor Medio, como:

$$N \propto \langle \rho \rangle R \quad (2.4)$$

sustituyendo en esta última la ec (2.1) obtenemos

$$N \propto R^\alpha R = R^{\alpha+1} = R^0 = 1 \quad (2.5)$$

es decir la densidad columnar es independiente del tamaño de la nube si $\alpha = -1$. Sin embargo, uno podría preguntarse qué hay de particular en la naturaleza para que todas las nubes tuvieran una densidad columnar constante.

Larson (1981) ya había sugerido que las relaciones que él había identificado, y en particular la primera, podían deberse a las limitaciones de las observaciones, pero fue Kegel (1989) el primero en demostrar que la relación observada entre la densidad media y el tamaño podía deberse a efectos observacionales, es decir, existe una intensidad mínima a partir de la cual una nube puede ser detectada, pues todo instrumento cuenta con cierta sensibilidad y que, por lo tanto, las propiedades físicas tales como el radio y la densidad volumétrica podían ser diferentes a las inferidas por las observaciones. Como

la intensidad es proporcional a la densidad columnar esto quiere decir que existe una densidad columnar mínima a partir de la cual una nube puede ser detectada. Scalo (1990) demostró que para que las nubes puedan ser detectadas es necesario que tengan una densidad columnar mínima de 10^{21} cm^{-2} pero después de una densidad columnar de 10^{22} cm^{-2} la intensidad se satura, por lo que no es posible inferir densidades columnares mayores a este valor. Con la ayuda de simulaciones numéricas del medio interestelar, Vázquez-Semadeni et al. (1997) reportaron la ausencia de una relación entre la densidad media y el tamaño para nubes en el espacio físico (posición, posición, posición), confirmando el análisis de Kegel en el sentido de que hay nubes con tamaños pequeños y baja densidad columnar que podrían no ser detectadas en inspecciones observacionales

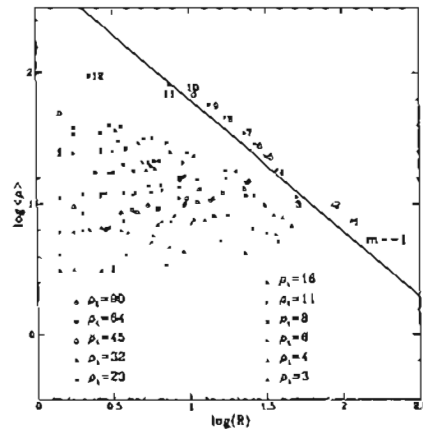


Figura 2.3: Densidad promedio vs. tamaño de la nube para un conjunto de nubes en simulaciones numéricas de Vázquez-Semadeni et al. (1997). Nótese que en el espacio físico no existe una relación entre la densidad promedio y el tamaño.

Más recientemente, Ballesteros-Paredes & Mac Low (2002) tomaron nubes en simulaciones numéricas y simularon observaciones de éstas con el propósito de comparar las relaciones de Larson (1981) tanto en el espacio físico (3D) como en el espacio observacional (posición-posición-velocidad). Ellos encontraron que la relación $\rho - R$ aparece para las nubes observadas, pero no para nubes físicas en el mismo conjunto de datos (ver fig. 2.4), sugiriendo fuertemente que la relación encontrada por Larson (1981), de hecho, es producto del proceso observacional mismo. Esto explica entonces los resultados numéricos de Vázquez-Semadeni et al. (1997), así como el análisis de Vázquez-Semadeni et al. (1997); Kegel (1989) y Scalo (1990).

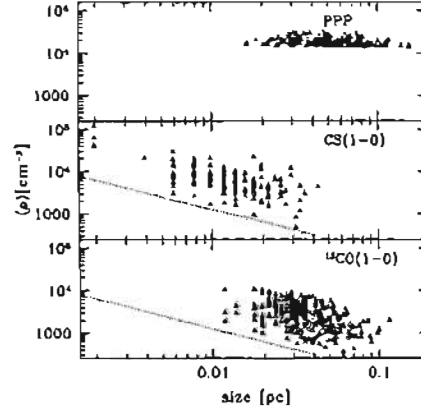


Figura 2.4: Densidad promedio vs. tamaño de la nube para un conjunto de nubes en simulaciones numéricas de Ballesteros-Paredes & Mac Low (2002). Panel superior: nubes en el espacio físico 3D. Panel de en medio: nubes en el espacio observacional (posición-posición-velocidad), usando la molécula de CS como trazador. Panel inferior: nubes en el espacio observacional (posición-posición-velocidad), usando el isótopo ^{13}CO . Nótese que en el espacio físico no existe una relación entre la densidad promedio y el tamaño, pero claramente aparece en el espacio observacional.

2.2.2. Relación dispersión de velocidades-tamaño

Con respecto a la relación dispersión de velocidades-tamaño, podemos decir que existe una relación con pendiente de aproximadamente $1/2$. En la Fig. 2.5 mostramos el resultado de la compilación de datos realizada por Larson (1981). La pendiente encontrada originalmente por Larson fue de ~ 0.38 .

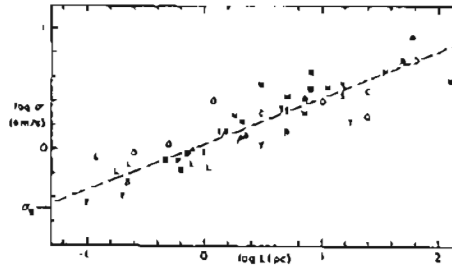


Figura 2.5: Dispersión de velocidades vs. tamaño de la nube para un conjunto de observaciones compiladas por Larson (1981).

Cabe notar que, aunque Larson (1981) atribuyó su resultado a un medio interestelar con turbulencia incompresible, ya que en este caso, el resultado

esperado corresponde a una ley de potencias con pendiente $1/3$. Sin embargo, diferentes autores han reportado valores cercanos a $\beta = 1/2$, el cual es, de hecho, el resultado que se espera en turbulencia compresible dominada por choques, ya que en este caso el espectro de energía es de la forma k^{-2} . Esto es cierto siempre y cuando pueda asociarse Δv^2 , el ancho no-térmico de la línea, con u_l^2 , la energía cinética cuadrática media por unidad de masa en modos turbulentos de tamaño menor o igual que una escala l (ver Apéndice C). Desde el punto de vista de la turbulencia, es natural esperar grandes dispersiones de velocidad a grandes escalas, ya que la turbulencia exhibe modos en todas las escalas, y entre más grande sea la separación entre dos puntos, más grande será (estadísticamente hablando) la diferencia de velocidades entre éstos. Estos resultados han sido verificados en diferentes simulaciones numéricas de diferentes grupos (Vázquez-Semadeni et al. 1997; Ostriker et al. 2001; Ballesteros-Paredes & Mac Low 2002). En particular, Ballesteros-Paredes & Mac Low (2002) muestran que, en efecto, esta tendencia no parece ser un resultado falso producto de las limitaciones de las simulaciones. Para dar un ejemplo, en la Fig. 2.6 se muestra la relación dispersión de velocidades-tamaño para un conjunto de simulaciones numéricas. La gráfica superior corresponde al espacio físico, mientras que las gráficas de enmedio e inferior corresponden al espacio observacional, tomando como trazadores el CS y ^{13}CO , respectivamente.

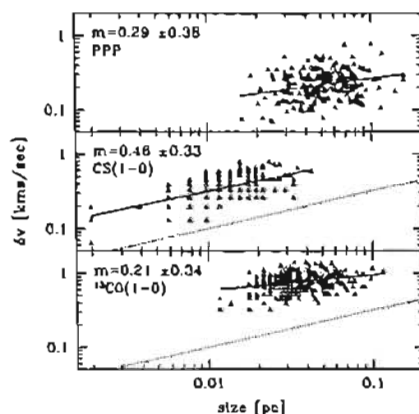


Figura 2.6: Dispersión de velocidades vs. tamaño de la nube para un conjunto de nubes en simulaciones numéricas de Ballesteros-Paredes & Mac Low (2002). Gráfica superior: nubes en el espacio físico 3D. Gráfica de enmedio: nubes en el espacio observacional (posición-posición-velocidad), usando la molécula de CS como trazador. Gráfica inferior: nubes en el espacio observacional (posición-posición-velocidad), usando el isótopo ^{13}CO . Nótese en este caso que la tendencia general de mayor dispersión de velocidades a mayor tamaño es válida tanto en el espacio físico como en el observacional.

Cabe notar que aún cuando la tendencia general es a aceptar la validez

de la relación (2.2) con pendiente 1/2, algunos autores han encontrado resultados ligeramente diferentes. Por ejemplo, para regiones de formación estelar masiva se encuentran exponentes más aplanados (Carr 1987; Caselli & Myers 1995), mientras que en regiones de formación de estrellas de baja masa se han encontrado valores más cercanos a 1/2 (Torrelles et al. 1983; Myers & Goodman 1988). Este hecho puede verse en la Fig. 2.7 donde presentamos resultados compilados por Garay (comunicación personal) de diferentes regiones de formación estelar.

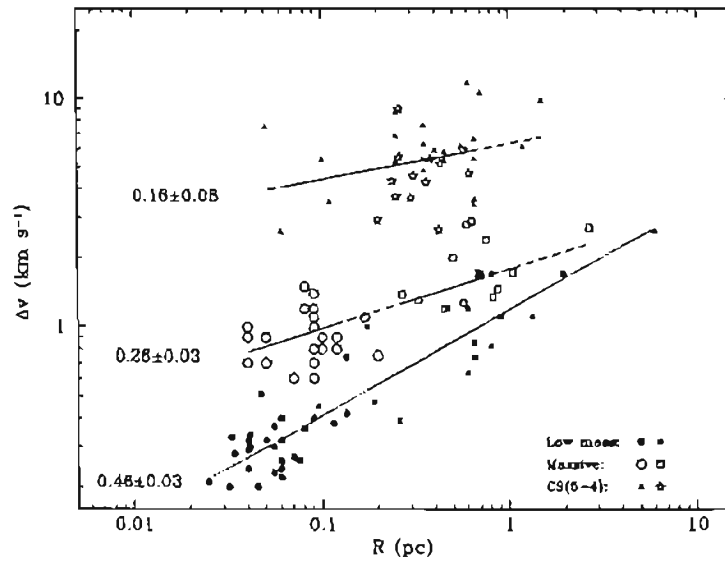


Figura 2.7: Dispersión de velocidades vs. tamaño de la nube para un conjunto de diferentes observaciones. Círculos y cuadrados negros representan observaciones de objetos de baja masa. Círculos y cuadrados claros representan observaciones de objetos masivos. Las estrellas y triángulos corresponden a observaciones aún no publicadas por Garay y colaboradores de núcleos densos, masivos y medianamente fríos ($T \sim 30\text{K}$). (Fig. cortesía de G. Garay)

Capítulo 3

Teorema Virial

El teorema virial (TV) es una herramienta ampliamente usada para entender el balance energético de las nubes moleculares. En el caso de un medio continuo, como en un fluido, este se obtiene haciendo el producto punto del vector de posición por la ecuación de momento e integrando sobre el volumen, y permite estudiar de manera global el balance energético de las nubes interestelares. Para derivarlo, es necesario usar la ecuación de momento, ya sea en su forma lagrangiana o euleriana.

3.0.3. Teorema Virial Lagrangiano

Se deriva aquí el TV en su forma lagrangiana, de manera que la masa de la nube es constante mientras que su volumen va deformándose siguiendo a la masa. Esta es la forma más comúnmente usada y se deduce a partir del producto escalar del vector de posición $\mathbf{x}$ con la ecuación de momento (ver Apéndice A) en su forma lagrangiana, e integrando sobre el volumen:

$$\int x_i \rho \frac{du_i}{dt} dV = - \int x_i \frac{\partial P}{\partial x_i} dV - \int \rho x_i \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} dV + \int x_i \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} dV. \quad (3.1)$$

El término del lado izquierdo puede desarrollarse de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \int x_i \rho \frac{du_i}{dt} dV &= \int x_i \frac{du_i}{dt} dm = \int x_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} dm = \\ &= \int \frac{d}{dt} \left(x_i \frac{dx_i}{dt} \right) dm - \int \left(\frac{dx_i}{dt} \right)^2 dm. \end{aligned}$$

El segundo término de esta última expresión es el doble de la energía cinética $\mathcal{E}_{kin}$, mientras que el primer término puede reescribirse como

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int 2x_i \frac{dx_i}{dt} dm &= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int \frac{dx^2}{dt} dm = \\ \frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} \int x^2 dm &\equiv \frac{1}{2} \ddot{I}_L,\end{aligned}\quad (3.2)$$

donde $\ddot{I}_L$ es el momento de inercia y en donde se han extraído de las integrales las derivadas temporales. Esto es válido ya que en la descripción lagrangiana el elemento de masa dm es constante y no depende del tiempo. Así, el lado izquierdo de la ec.(3.1) puede escribirse como:

$$\int x_i \rho \frac{du_i}{dt} dV = \frac{1}{2} \ddot{I}_L - 2\mathcal{E}_{kin} \quad (3.3)$$

Consideremos ahora los términos del lado derecho de la ec.(3.1). El primero puede reescribirse como:

$$\int x_i \frac{\partial P}{\partial x_i} dV = \int \frac{\partial(x_i P)}{\partial x_i} dV - 3 \int P dV = \oint (x_i P) \hat{n}_i dS - 2\mathcal{E}_{th}, \quad (3.4)$$

donde se ha usado el hecho de que $\partial x_i / \partial x_i = 3$, y $\mathcal{E}_{th}$ es la energía térmica del gas, $3/2 \int P dV$. De manera similar el término magnético puede reescribirse como:

$$\begin{aligned}\mathcal{M} &\equiv \int x_i \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} dV = \int \frac{\partial}{\partial x_j} (x_i T_{ij}) dV - \int T_{ij} \frac{\partial x_i}{\partial x_j} dV = \\ &= \oint (x_i T_{ij}) \hat{n}_j dS - \int T_{ij} dV = \\ &= \oint (x_i T_{ij}) \hat{n}_j dS - \frac{1}{8\pi} \int B_i B_i dV,\end{aligned}\quad (3.5)$$

donde ahora ha sido usado el hecho de que $\partial x_i / \partial x_j = \delta_{ij}$, siendo δ_{ij} la delta de Kröenecker. El segundo término del lado derecho de la última igualdad es la energía magnética $\mathcal{E}_{mag}$. Por último el término gravitacional se puede escribir como:

$$\mathcal{W} \equiv - \int \rho x_i \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} dV = - \frac{1}{2} \int \rho \Phi dV \quad (3.6)$$

si el potencial gravitacional se debe exclusivamente a la nube misma (es decir, suponiendo que el potencial debido a la masa externa de la nube es cero). Recopilando las ecs. (3.3), (3.4), (3.5), (3.6) para sustituirlas en la ec. (3.1)

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 I_L}{dt^2} = 2\mathcal{E}_{kin} + 2\mathcal{E}_{th} + \mathcal{E}_{mag} + \mathcal{W} - 2\tau_{th} + \tau_{mag} \quad (3.7)$$

donde hemos definido

$$\tau_{th} \equiv \frac{1}{2} \oint (x_i P) \hat{n}_i dS \quad (3.8)$$

y

$$\tau_{mag} \equiv \oint (x_i T_{ij}) \hat{n}_j dS \quad (3.9)$$

los cuales son los términos de superficie térmico y magnético.

3.0.4. Teorema Virial Euleriano

Para derivar el teorema virial euleriano, fijémonos en un volumen constante, y consideremos el producto escalar de la ecuación de momento en su forma euleriana (A.5) por el vector x_i e integremos en volumen:

$$\begin{aligned} \int_V \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} x_i dV &= - \int x_i \frac{\partial P}{\partial x_i} dV - \int x_i \rho \frac{\partial \phi}{\partial x_i} dV + \\ &+ \int x_i \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_i} dV - \int x_i \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} dV \end{aligned} \quad (3.10)$$

donde hemos considerado despreciables los términos disipativos de la ec. (A.5). Dado que ni el vector x_i ni el volumen V dependen del tiempo, las derivadas parciales respecto al tiempo dentro de las integrales de volumen pueden escribirse como derivadas totales afuera de éstas. Por lo tanto, el lado izquierdo de la ecuación (3.10) puede escribirse como:

$$\begin{aligned} \int_V x_i \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} dV &= \frac{d}{dt} \int_V x_i \rho u_i dV = \\ &= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left[\int_V \frac{\partial(\rho u_i x^2)}{\partial x_i} dV - \int_V \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} x^2 dV \right] = \\ &= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \oint_S (\rho x^2 u_i) \hat{n}_i dS + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} x^2 dV = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \oint_S (\rho x^2 u_i) \hat{n}_i dS + \frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} \int_V \rho x^2 dV = \\
&= \frac{1}{2} \frac{d\Phi}{dt} + \frac{1}{2} \ddot{I}_E
\end{aligned} \tag{3.11}$$

donde se ha utilizado la ecuación de masa (A.3) para pasar del segundo al tercer renglón, $\Phi \equiv \oint_S (\rho x^2 u_i) \hat{n}_i dS$ es el flujo de densidad de momento de inercia (ρx^2) a través de la superficie de la nube, e $I_E \equiv \int_V \rho x^2 dV$ es el momento de inercia en el sistema euleriano. Considerando ahora el lado derecho de la ecuación (3.10), notamos que todos los términos escritos ya han aparecido en el TVL excepto el último, el cual puede reescribirse como:

$$\begin{aligned}
\int x_i \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} dV &= \int \frac{\partial(x_i \rho u_i u_j)}{\partial x_j} dV - \int \rho u_i u_j \frac{\partial x_i}{\partial x_j} dV \\
&= 2(\mathcal{T}_{\text{kin}} - \mathcal{E}_{\text{kin}})
\end{aligned} \tag{3.12}$$

donde $\mathcal{E}_{\text{kin}} \equiv 1/2 \int \rho u^2 dV$ es la energía cinética contenida en el volumen V , y $\mathcal{T}_{\text{kin}} \equiv 1/2 \oint_S (x_i \rho u_i u_j) \hat{n}_j dS$. En particular, en el caso incompresible, $\mathcal{T}_{\text{kin}}$ es la cuarta parte del flujo a través de la superficie de la nube de la tasa de cambio del momento de inercia $2x_i \rho u_i$ (en el caso compresible, la interpretación de este término no es tan clara). Igualando entonces las ecuaciones (3.10) y (3.11) y utilizando la ecuación (3.12), queda escrito el teorema virial en su forma euleriana:

$$\frac{1}{2} \ddot{\mathcal{I}}_E = 2 \left(\mathcal{E}_{\text{kin}} + \mathcal{E}_{\text{th}} - \mathcal{T}_{\text{kin}} - \mathcal{T}_{\text{th}} \right) - \frac{1}{2} \frac{d\Phi}{dt} + \mathcal{W} + \mathcal{E}_{\text{mag}} + \mathcal{T}_{\text{mag}}. \tag{3.13}$$

Si al tiempo t la masa considerada en el caso lagrangiano coincide espacialmente con el volumen euleriano, entonces $\mathcal{I}_E = \mathcal{I}_L$. Sin embargo, sus segundas derivadas son diferentes:

$$\ddot{\mathcal{I}}_L - \ddot{\mathcal{I}}_E = 4\mathcal{T}_{\text{kin}} + \frac{d\Phi}{dt} \tag{3.14}$$

como consecuencia del flujo de masa a través de la superficie del volumen euleriano.

3.1. Comentarios sobre el Estado Virial de las Nubes Moleculares

3.1.1. Equipartición de Energía

Es frecuente encontrar en la literatura que las nubes moleculares están virializadas (por ej. Larson 1981; Myers & Goodman 1988). Esto se debe en gran medida a que existe equipartición entre la energía interna de las nubes y la energía gravitacional (dentro de un factor de 2), ya que si, en la ecuación (3.7), tanto el lado izquierdo como los términos de superficie son cero, entonces tenemos que la suma de las energías internas es igual al valor absoluto de la energía gravitacional dividido por dos. Para dar un ejemplo, Myers & Goodman (1988) grafican los valores observados de campo magnético *vs.* los valores esperados del campo magnético suponiendo (a) equilibrio virial (sin considerar el factor de 2 en la ec. (3.7) y (b) que los términos de superficie son despreciables. Esta gráfica se presenta en la Fig. 3.1).

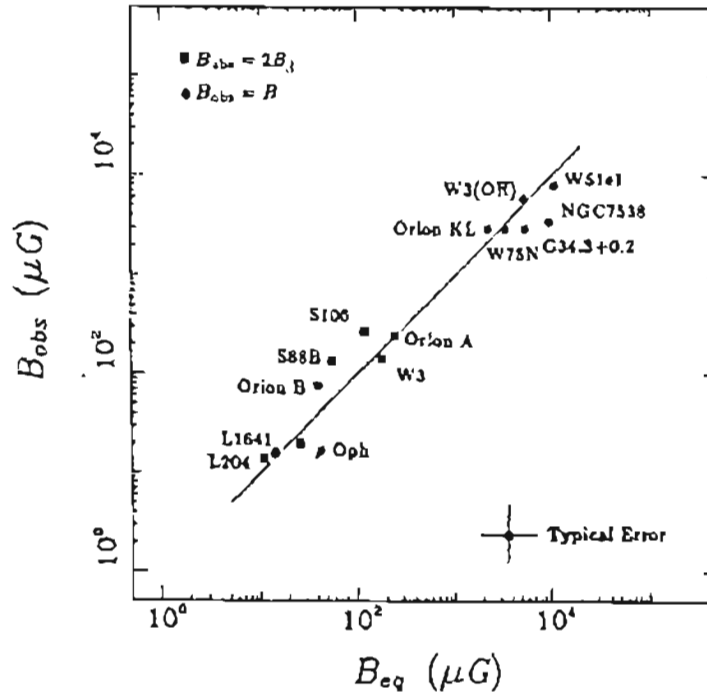


Figura 3.1: Intensidades de campo magnético observadas y predichas en 14 nubes moleculares y núcleos densos graficados por Myers & Goodman (1988) (tomada de esta misma referencia).

Sin embargo, esta gráfica realmente significa (dentro de un factor de 2)

equipartición entre energía gravitacional, magnética y turbulenta, no propiamente equilibrio virial, tal como lo indican Myers & Goodman (1988):

"The predicted field strength B_{eq} is based on an equilibrium model of a uniform sphere, where the magnetic, kinetic, and gravitational energy density terms of the virial theorem are all equal ($M \sim K \sim G$)."

Ballesteros-Paredes & Vázquez-Semadeni (1995) encontraron que para nubes en simulaciones numéricas, *sí* existe una aproximada equipartición entre las energías gravitacional, cinética, magnética e interna (ver Fig. 3.2), confirmando los resultados observacionales, y por tanto, la así llamada "masa virial" estimada es una buena aproximación de la masa real de la nube, dentro de un orden de magnitud. Sin embargo, las nubes *no* se encuentran equilibrio virial, como se verá en §3.1.2.

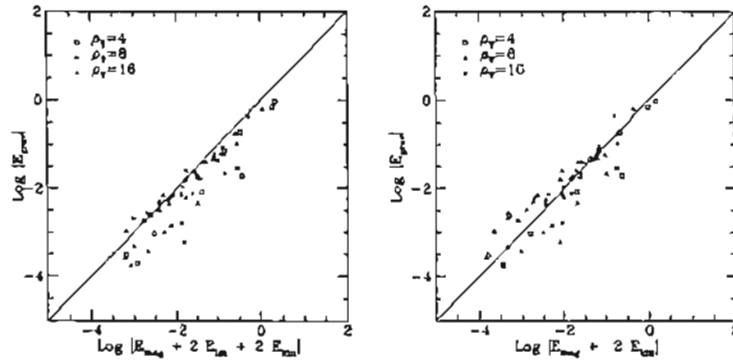


Figura 3.2: Energía gravitacional vs. la suma de las energías magnética, térmica y cinética (lado izquierdo) y vs. la suma de las energías magnética y cinética (lado derecho) para un conjunto de nubes en simulaciones numéricas de Passot et al. (1995) (tomada de Ballesteros-Paredes & Vázquez-Semadeni 1995). Nótese que existe equipartición de energías, aunque como se verá en §3.1.2, las nubes *NO* están en equilibrio virial.

En resumen, si una nube está en equilibrio virial, y si los términos de superficie son despreciables respecto a los términos volumétricos, entonces existe, aproximadamente, equipartición de energías. Sin embargo, el inverso no es necesariamente cierto: la equipartición de energías no implica equilibrio virial.

3.1.2. Estado Virial de las Nubes Moleculares

La única prueba para determinar si una nube está en equilibrio virial o no es la medida de la segunda derivada del momento de inercia, d^2I/dt^2 , y

comprobar que es igual a cero. Tal prueba no es posible hacerla de un modo observacional. La única manera en la que ésto ha sido realizado es por medio de simulaciones numéricas. Ballesteros-Paredes & Vázquez-Semadeni (1997) mostraron que, para un *ensamble* de nubes en simulaciones numéricas del medio interestelar, las nubes no están en EV. Obedecen el teorema virial, pero la segunda derivada respecto del tiempo del momento de inercia no es igual a cero. Por el contrario, es siempre igual a la suma de los términos del lado derecho de la ecuación (3.7), (ver Fig. 3.3).

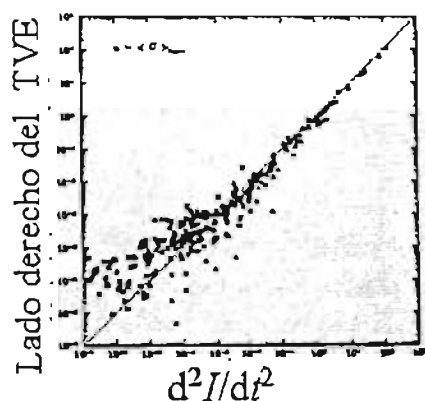


Figura 3.3: Teorema virial euleriano calculado para un conjunto de nubes en las simulaciones de Vázquez-Semadeni et al. (1997). Nótese que la segunda derivada respecto al tiempo del momento de inercia siempre es comparable al lado derecho de la ec. (3.13), indicando que las nubes *no* están en equilibrio virial, aunque sí obedecen el teorema virial. Para poder decir que las nubes están en equilibrio virial sería necesario que $d^2I/dt^2 = 0$, al igual que la suma de los términos en el lado derecho de la ec. (3.13).

La suposición de EV implica ya sea que las nubes no redistribuyen la masa en su interior, o que la variación con el tiempo de la redistribución de su masa es constante. Ambas aseveraciones parecen ser poco plausibles en un medio interestelar altamente dinámico y no lineal. McKee (1999) sugirió dos posibilidades a fin de suponer el EV en nubes moleculares:

1. La primera posibilidad consiste en que, para una nube sola, la segunda derivada con respecto al tiempo del momento de inercia podría promediar a cero si el tiempo en el cual se promedia es mucho mayor que el tiempo dinámico de la nube, $t_{\text{prom}} \gg t_{\text{din}}$. Esta posibilidad encierra una hipótesis: que la nube pudiera estar oscilando alrededor de “una forma promedio” sin una redistribución grande de masa, de tal manera que las variaciones en el tiempo de d^2I/dt^2 promediaran a cero. Sin embargo, en un régimen no lineal los cambios de cualquier variable pueden crecer exponencialmente, y no necesariamente promediar a cero.

2. La otra posibilidad es que para un *ensamble* de nubes, algunas de ellas tuvieran valores positivos de d^2I/dt^2 , mientras que otras tuvieran valores negativos, de tal forma que el teorema virial pueda ser aplicado para el *ensamble*. Sin embargo, el análisis hecho por Ballesteros-Paredes & Vázquez-Semadeni (1997) muestra que el momento de inercia varía diez ordenes de magnitud entre las nubes más grandes y las más pequeñas (ver Fig. 3.3). Entonces no es claro que el valor promedio de una distribución tan amplia de valores sea representativo de la dinámica de las nubes.

3.1.3. Relaciones de Larson, teorema virial y equipartición de la energía

Los valores encontrados observacionalmente para los exponentes $\alpha \sim -1$ y $\beta \sim 1/2$ en las relaciones de Larson (ver ecs. [2.1] [2.2]) han sido considerados como pruebas observacionales de que las nubes están en equilibrio virial. Sin embargo, esta pareja de valores son solo una combinación del conjunto infinito de parejas consistentes con equipartición de energías. En otras palabras, para cualquier valor arbitrario del exponente de escala α se puede encontrar un valor de β tales que satisfagan el balance virial (ver, p. ej., Vázquez-Semadeni & Gazol 1995), como puede verse a continuación. Supongamos equipartición de energía gravitacional y turbulenta:

$$W \propto E_k \Rightarrow \frac{GM}{R} \propto \delta V^2. \quad (3.15)$$

Dado que $M \propto \rho R^3$, la expresión anterior puede escribirse como:

$$G\rho R^2 \propto \delta V^2. \quad (3.16)$$

Sustituyendo la relación de escala de Larson para la densidad (ec. [2.2]) en la ecuación anterior

$$R^{\alpha+2} \propto \delta V^2 \Rightarrow \quad (3.17)$$

$$\delta V \propto R^{(\alpha+2)/2} \Rightarrow \quad (3.18)$$

$$\beta = \frac{\alpha + 2}{2}. \quad (3.19)$$

Como puede verse, para cada valor de α es posible encontrar un valor de β que satisfaga la última relación. Esto significa que, en efecto, $\alpha = -1$ y $\beta = 1/2$ es sólo una de las infinitas parejas consistentes con la equipartición de la energía.

Como se mencionó anteriormente, las relaciones de Larson (1981) han sido atribuidas al EV (e.g., Larson 1981; Myers & Goodman 1988). Esto es debido a que, considerando $\mathcal{W} \sim \mathcal{E}_k$ se obtiene

$$G\rho R^2 \sim \delta^2 v.$$

A partir de esta ecuación es claro que, si una de las relaciones de Larson es válida, la otra surge como una consecuencia. En otras palabras, sólo dos de las tres ecuaciones (equipartición de la energía, tamaño-densidad, dispersión de velocidades-tamaño) son independientes. El punto a enfatizar es que si las relaciones de Larson se cumplen, esto implica la equipartición de la energía, pero no el equilibrio virial.

3.1.4. Energía cinética: ¿Un término para el soporte?

Frecuentemente se cree que la energía turbulenta (o cinética), $1/2 \int \rho v^2 dV$, provee soporte a las nubes en contra del colapso gravitacional (por ej., Vázquez-Semadeni & Gazol 1995). Esto es cierto si los movimientos turbulentos están confinados a escalas mucho más pequeñas que la nube (e.g., Ballesteros-Paredes et al. 1999b), y más precisamente si la escala de la turbulencia es menor que la longitud de Jeans (Leorat et al. 1990; Klessen et al. 2000). Sin embargo, la turbulencia es un fenómeno que se da en todas las escalas y no está necesariamente confinada a escalas pequeñas.

Uno podría preguntarse entonces cuál es la escala característica de los movimientos turbulentos en el medio interestelar. Tanto Ballesteros-Paredes et al. (1999a), como Brunt (2003), mostraron que existe evidencia observacional de turbulencia en escalas similares a las del tamaño de la nube (en el rango de 5-50 pc). De manera similar, Ossenkopf & Mac Low (2002), comparando observaciones de nubes moleculares con simulaciones numéricas, encontraron que la estructura de las nubes moleculares interestelares es mucho más parecida a simulaciones en donde la turbulencia está presente en todas las escalas, que en aquellas donde la turbulencia está confinada a pequeñas escalas. Incluso Falgarone et al. (1998) muestran que aún los núcleos densos moleculares (con escalas de ~ 0.1 pc) presentan evidencia de turbulencia en escalas comparables al tamaño de los núcleos mismos.

Entonces, si la turbulencia está presente en escalas grandes, puede favorecer la formación de estructura en escalas menores, de manera que no es claro que toda la energía cinética pueda proporcionar soporte, ya que parte de esta energía puede contribuir a la compresión del gas y a la formación de la nube. En particular, Klessen et al. (2000) encontraron que cuando la turbulencia está presente en grandes escalas, la energía cinética involucrada fomenta el colapso rápido. Así, de la energía cinética total, solamente los movimientos incompresibles, y aquellos cuya divergencia del campo de velocidad sea positiva, podrán proporcionar soporte en contra del colapso gravitacional, mientras que el colapso o el soporte debe de ser el resultado de la energía total involucrada en todos los modos de la turbulencia.

3.1.5. Términos superficiales en el Teorema Virial

El teorema virial lagrangiano completo incluye los términos superficiales τ_{th} , τ_{mag} (en el caso euleriano, debe considerarse además el término τ_{kin}). Frecuentemente estos términos son despreciados, especialmente en trabajos observacionales (Larson 1981; Torrelles et al. 1983; Myers & Goodman 1988; Fuller & Myers 1992) aunque ha sido una práctica común en estudios teóricos, como una consecuencia de considerar nubes aisladas (Chandrasekhar & Fermi 1953; Parker 1979). Quizá el término superficial de presión térmica es el más frecuentemente incluido mediante el “confinamiento por presión” (Keto & Myers 1986; Maloney 1988; McLaughlin & Pudritz 1996; Yonekura et al. 1997). Aunque los términos superficiales no pueden medirse observacionalmente, en un medio altamente dinámico, donde los procesos como la inyección de energía por flujos estelares, el colapso en sí mismo, el choque, o la expansión de una región HII recién formada, puede esperarse que en vez de despreciables, sean, al menos, tan importantes como los términos volumétricos (energías).

Regresando a las simulaciones, donde es posible calcular todos los términos del teorema virial para nubes en simulaciones numéricas, Ballesteros-Paredes & Vázquez-Semadeni (1997) han demostrado que los términos superficiales son siempre comparables a sus respectivos términos volumétricos. En la Fig. 3.4 presentamos los valores de los términos volumétrico vs. superficial de (a) presión térmica, (b) presión magnética, y (c) presión cinética, para un conjunto de nubes en las simulaciones de Passot et al. (1995).

El hecho de que los términos de superficie sean comparables con los volumétricos sugiere que las nubes están realmente intercambiando masa, momento y energía con el medio que las rodea. Esto sugiere, a su vez, que las nubes son mucho más transientes de lo que se había pensado anteriormente.

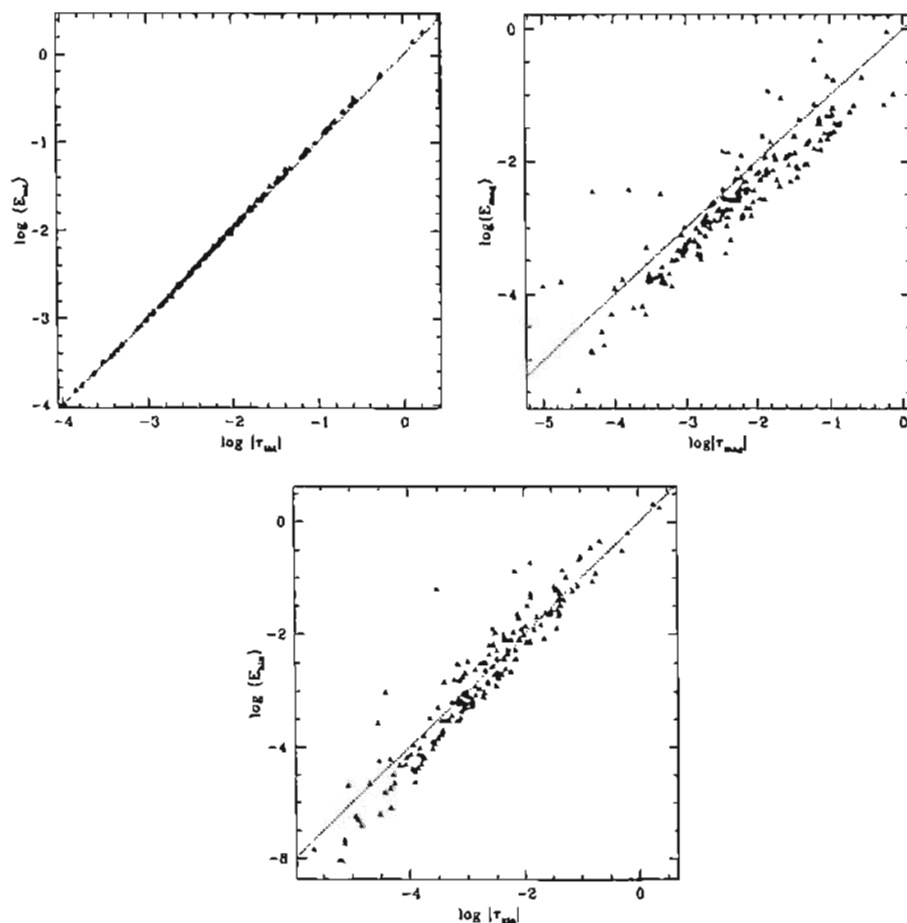


Figura 3.4: Términos de volumen vs. términos de superficie en el teorema virial euleriano, calculados para un conjunto de nubes en simulaciones numéricas de Passot et al. (1995). (a) ϵ_{th} vs τ_{th} . (b) ϵ_{mag} vs τ_{mag} . (c) ϵ_{kin} vs τ_{kin} . Nótese que los términos superficiales son siempre comparables a los términos volumétricos.

Cabe mencionar en este momento que, por analogía con la presión térmica de confinamiento, McKee & Zweibel (1992) han considerado la posibilidad de confinamiento por presión turbulenta, considerando a la turbulencia como una presión en pequeña escala. Ballesteros-Paredes et al. (1999b) argumentaron, sin embargo, que el confinamiento por presión (sea térmica, turbulenta o magnética) requiere de condiciones altamente idealizadas, las cuales difícilmente se dan en el medio interestelar real. Si el medio interestelar es globalmente turbulento, el campo de velocidades es, en general, localmente diferente de cero. En este ambiente, una nube en balance de presión con el exterior (p.ej., térmica) puede aún así sufrir deformaciones debidas a los movimientos de inercia, haciendo irrelevante el confinamiento por presión. En términos del TVE, esto significa que el lado derecho de la ec. (3.13) es

diferente de cero vía los términos cinéticos $\mathcal{E}_{kin}$, τ_{kin} , y $d\Phi/dt$.

Cabe recordar que en el caso particular del confinamiento por presión turbulenta se requiere además la consideración adicional que la turbulencia sea microscópica (es decir, en escalas mucho menores al tamaño de la nube). Sin embargo, como se mencionó previamente, la turbulencia es un fenómeno inherentemente multiescala, y es de esperarse que contenga modos en todas las escalas comparables o aún mayores que las de la nube. Adicionalmente, la presión turbulenta no es isotrópica, lo que hace difícil que pueda darse el confinamiento por presión turbulenta.

Capítulo 4

Escenarios Estándar y Turbulento

4.1. Introducción

En la década de los 70s las ideas básicas sobre la dinámica del medio interestelar eran que éste debía estar en un estado de equilibrio donde no hubiera fuerzas netas sobre las parcelas de gas. Esto se ve claramente reflejado en el texto clásico de Spitzer (1978):

"The present chapter discusses the equilibrium of gas in interstellar space, on the assumption that all forces are in balance and the medium is motionless, with no net acceleration. In some regions... it is obviously incorrect, but for the general distribution of matter in the Galaxy, and for the interrelation between gas in the low-velocity clouds and in the intercloud regions such a model may have some relevance to reality."

"It is clear from the basic equations that interstellar motions tend toward pressure equilibrium... One might expect these (HI) clouds to approach pressure equilibrium at least partially..."

Así, las nubes han sido consideradas configuraciones estáticas que pueden bien estar confinadas por una presión externa (Maloney 1988; Bertoldi & McKee 1992), o bien en equilibrio virial entre la autogravedad y alguna forma de energía interna, sea ésta magnética, turbulenta, o simplemente térmica (Chandrasekhar 1951; Chieze 1987; Bonazzola et al. 1987; Myers & Goodman 1988)).

Dentro de esta visión de un medio interestelar bastante estático y en balance de fuerzas se desarrollaron varios trabajos sobre el equilibrio virial de

las nubes y sus núcleos densos. A continuación se resumen las ideas clásicas sobre colapso gravitacional en una nube que inicialmente está soportada contra el colapso principalmente por su energía magnética.

4.2. Estabilidad y flujo magnético

Supóngase una nube esférica, con radio R_N , en balance de fuerzas, y que se encuentra rodeada de un medio más tenue, de densidad y temperatura constantes. Por simplicidad se supone que el campo magnético dentro de la nube es constante, con valor B_N , mientras que en el exterior varía como $B = B_N(r/R_N)^{-3}$. Esta aproximación reproduce el comportamiento de un dipolo a grandes distancias. Considérese el TVL (ec. [3.7]) para un volumen esférico de radio R_b lo suficientemente grande de manera tal que los efectos de superficie del campo magnético sean despreciables en R_b , y que el término gravitacional de todo el volumen pueda aproximarse a la energía gravitacional de la nube de radio R_N . Con estas suposiciones, el término gravitacional puede escribirse como:

$$\mathcal{W} = \mathcal{E}_g = -\frac{3}{5} \frac{GM_N^2}{R_N},$$

donde $M_N = \int \rho dV$ es la masa de la nube. La energía magnética para esta configuración puede escribirse como:

$$\mathcal{E}_{\text{mag}} = \frac{1}{3} R_N^3 B_N^2,$$

donde la mitad proviene del interior de la nube y la otra mitad del volumen entre R_N y R_b . Supóngase que el gas es ideal e isotérmico, de manera que $P = c^2 \rho$ por lo tanto la energía térmica y el término superficial de presión pueden escribirse como:

$$\mathcal{E}_{\text{th}} = \frac{3}{2} \int P dV = \frac{3}{2} c^2 M_N$$

y

$$\oint_S (Px_i) \hat{n}_i dS = P_{\text{ext}} \oint_S x_i \hat{n}_i dS = 4\pi R_N^3 P_{\text{ext}},$$

donde P_{ext} es la presión externa a la nube, la cual se considera constante. Sustituyendo estos términos en el TVL y suponiendo equilibrio cuasi hidrostático, se tiene

$$-\frac{3}{5} \frac{GM_N^2}{R_N} + \frac{1}{3} B_N^2 R_N^3 + 3c^2 M_N - 4\pi R_N^3 P_{\text{ext}} = 0. \quad (4.1)$$

A partir de esta ecuación se encuentra que la presión externa es

$$P_{\text{ext}} = \frac{1}{4\pi} \left(-\frac{3}{5} \frac{GM_N^2}{R_N^4} + \frac{1}{3} B_N^2 + \frac{3c^2 M_N}{R_N^3} \right),$$

por lo que

$$P_{\text{ext}} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{3}{5} \frac{G}{R_N^4} (M_\Phi^2 - M_N^2) + \frac{3c^2 M_N}{R_N^3} \right), \quad (4.2)$$

donde M_Φ es la masa crítica, definida como

$$M_\Phi = \sqrt{\frac{5}{9G\pi^2}} \Phi_m, \quad (4.3)$$

y $\Phi_m = \pi R_N^2 B_N$ es el flujo de campo magnético a través de la nube.

Analicemos ahora el cambio en la presión externa requerido para el equilibrio como función del radio de la nube

$$\frac{dP_{\text{ext}}}{dR_N} = \frac{1}{4\pi} \left(-\frac{12G}{5} \frac{(M_\Phi^2 - M_N^2)}{R_N^5} - \frac{9c^2 M_N}{R_N^4} \right). \quad (4.4)$$

De esta ecuación se pueden analizar dos casos:

1. Caso magnéticamente subcrítico, si $M_N < M_\Phi$. En este caso, $dP_{\text{ext}}/dR_N < 0$, por lo que independientemente del valor de la presión externa, ésta es una configuración de equilibrio estable, ya que si el radio de la nube aumenta repentinamente, existe un exceso de presión externa sobre la configuración original de equilibrio, induciendo a que la región regrese a su posición original. De manera similar si el radio de la nube disminuye, existe un defecto de presión externa respecto a la configuración de equilibrio, permitiendo que la nube se re-expanda (ver Fig. 4.1a).
2. Caso magnéticamente supercrítico, si $M_N > M_\Phi$ se tienen tres casos. Si $R_N \rightarrow \infty$ entonces $dP_{\text{ext}}/dR_N < 0$, al igual que en el caso anterior la configuración es estable mientras que si $R_N \rightarrow 0$ entonces $dP_{\text{ext}}/dR_N > 0$, en este caso la configuración es inestable, pues un decremento en el tamaño de la nube causaría que la presión externa fuese mayor que la presión de equilibrio, provocando que el sistema se contraiga aún más (ver Fig. 4.1b).

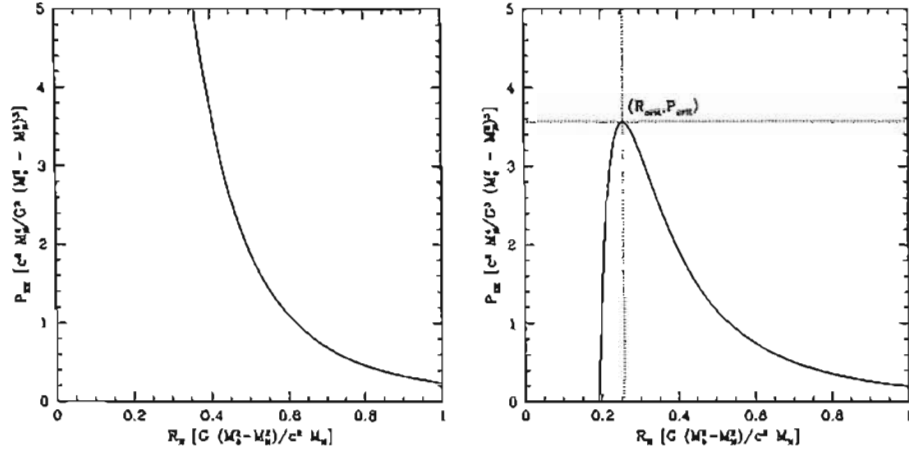


Figura 4.1: Presión externa de equilibrio vs radio de la nube para una configuración esférica en equilibrio cuasihidrostático. (a) Caso magnéticamente subcrítico. (b) Caso magnéticamente supercrítico.

Finalmente $dP_{ext}/dR_N = 0$ si

$$R_{crit} = -\frac{4}{15} \frac{G}{c^2} \frac{(M_\Phi^2 - M_N^2)}{M_N}, \quad (4.5)$$

para el cual la presión máxima de equilibrio es

$$P_{ext} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{3}{5} \frac{G}{R^4} (M_\Phi^2 - M_N^2) + \frac{3c^2 M_N}{R^3} \right). \quad (4.6)$$

Además si la presión externa es mayor a este valor, la nube se colapsará forzosamente.

4.3. Escenario Estándar de Formación Estelar

En el escenario estándar de formación estelar, las estrellas se forman de manera bimodal. Por una parte, las estrellas de alta masa (varias veces la masa del Sol) se forman cuando la energía gravitacional excede a la suma de las energías internas, de manera que una región super-Jeans¹ y supercrítica se colapsa, fragmentándose en núcleos de alrededor de una masa de Jeans. En este escenario, las estrellas masivas se forman aproximadamente de manera simultánea, junto con estrellas menos masivas.

¹Aquella región cuya masa es mayor a la de Jeans, ver Apéndice B.

Por otra parte, los núcleos densos protoestelares de baja masa que son super-Jeans, pero subcríticos, se encuentran en equilibrio cuasi-estático y soportados en contra del colapso gravitacional por una combinación de presiones térmica y magnética. En este caso, un núcleo denso de baja masa forma estrellas de masas similares a la del Sol una vez que el soporte magnético es perdido mediante un proceso conocido como difusión ambipolar, en el cual las partículas neutras del gas resbalan lentamente hacia el pozo de potencial gravitacional mientras que los iones se quedan anclados al campo magnético, permitiendo que el núcleo denso eventualmente alcance la masa crítica y que la energía gravitacional exceda a la energía magnética². En este momento se produce el colapso gravitacional.

Este escenario ha sido favorecido por muchos autores debido a que existen varias evidencias observacionales que parecieran sustentarlo. La primera y más directa evidencia, consiste en el hecho de que algunas nubes moleculares como Tauro forman solamente estrellas de baja masa, mientras que otras, como Orión, forman estrellas tanto de baja como de alta masa. Otras evidencias son la existencia de núcleos densos proto-estelares con dispersiones de velocidad sub- o trans-sónicas (por ej., Myers 1983), o bien con perfiles de columna de densidad que asemejan esferas de Bonnor-Ebert³ (Ebert 1955; Bonnor 1956)). El primer hecho sugiere que los núcleos densos son poco dinámicos, y por ende, posiblemente cuasi-estáticos. El segundo sugiere directamente que los núcleos están en equilibrio hidrostático. Asimismo, como se mencionó anteriormente, la existencia de las relaciones de Larson (1981) y de la aproximada equipartición de energía gravitacional, magnética y turbulenta ha sido interpretada en términos de núcleos en equilibrio Virial (por ej., Larson 1981; Myers & Goodman 1988).

Aunque estos hechos parecen reforzar el escenario estándar de formación estelar, recientemente ha sido mostrado (ver sección siguiente) que dichas propiedades también son reproducidas en un medio dinámico y turbulento. Adicionalmente, el escenario estándar no resuelve el problema de cómo los núcleos densos cuasi-estáticos se pueden formar y subsistir dentro de un ambiente supersónico y turbulento, mientras que en el escenario turbulento el proceso de formación y destrucción (vía colapso y/o redispersión en el medio ambiente) los núcleos se da de manera natural.

²Estrictamente hablando, la difusión ambipolar no requiere de un pozo de potencial. Esta es simplemente el deslizamiento de las partículas neutras respecto a las cargadas, estas últimas, "congeladas" al campo magnético.

³El perfil tipo Bonnor-Ebert surge cuando un núcleo denso isotérmico está en equilibrio hidrostático con su gravedad, y en equilibrio de presión con el medio externo.

4.4. Escenario Dinámico de Formación Estelar

El escenario más reciente, el turbulento o dinámico, sugiere que los núcleos densos están formados por compresiones del gas debido a flujos turbulentos en el medio interestelar. En este escenario, dos flujos supersónicos al chocar forman a las nubes y a su estructura interna. Así, los núcleos más densos con un exceso de energía gravitacional se colapsan rápidamente para formar estrellas, mientras que aquellos con energía interna suficientemente grande pueden re-expandirse una vez que la compresión turbulenta cede (Vázquez-Semadeni et al. 2004).

En este esquema de formación estelar, la bimodalidad de la formación estelar es consecuencia de cómo la turbulencia, estadísticamente, deposita más masa en algunas regiones, y menos en otras, de manera que serán las nubes menos masivas las que formen solamente estrellas de baja masa, y las nubes más masivas formarán estrellas tanto de alta como de baja masa. En ambos casos, de cualquier manera, la propuesta es que el colapso de las regiones super-Jeans y supercríticas es dinámico, mientras que regiones densas subcríticas (o más generalmente, con un exceso de energía interna) simplemente se re-expandirán (Vázquez-Semadeni et al. 2004).

Como se vio en el Capítulo §3, modelos numéricos de nubes moleculares sugieren que éstas no están en equilibrio Virial. Sin embargo, podría pensarse que si los núcleos densos presentan movimientos muy pequeños comparados con la velocidad del sonido, entonces éstos podrían estarlo. De hecho, como se mencionó en la sección anterior, el escenario estándar propone que las estrellas de baja masa se forman dentro de núcleos densos, en equilibrio (magneto)-hidrostático e inicialmente soportados en contra del colapso gravitacional por una combinación de presiones térmica, magnética y turbulenta. Al igual que para las nubes, el modelo de núcleos densos isotérmicos en equilibrio hidrostático entra en conflicto con el hecho de que las nubes moleculares sean turbulentas. El punto clave es que los núcleos densos hidrostáticos necesitan un medio externo más tenue, caliente y de presión constante para estar en equilibrio. Como discuten Vázquez-Semadeni et al. (2004), si los núcleos densos isotérmicos están inmersos en una nube isotérmica a la misma temperatura y son formados por compresiones turbulentas, entonces no pueden permanecer en equilibrio: durante la compresión, la densidad del núcleo y su presión interna crecen, balanceadas por la presión turbulenta externa. Cuando la compresión cede, el núcleo denso tiene un exceso de presión interna, haciendo que éste se re-expanda, excepto si la compresión fuese suficientemente grande para proceder al colapso gravitacional. Por otra parte, si la

compresión no logró el colapso gravitacional del núcleo denso, se espera que el tiempo en el cual logra re-expandirse sea mayor que el tiempo de compresión debido a que la autogravedad retarda la reexpansión. Sin embargo, este retardo no es mucho mayor a algunas veces el tiempo de caída libre. Así la probabilidad de que se alcance un balance entre la autogravedad y su presión interna es extremadamente pequeña. Esto puede implicar que muchos de los núcleos densos observados no estén en posibilidades de formar estrellas.

4.5. Predicciones observacionales de los modelos numéricos

Como se mencionó en la §4.3, existen algunas observaciones que parecen favorecer el modelo estándar de formación estelar, por lo que diferentes autores han intentado verificar si los modelos numéricos que favorecen el escenario estándar entran o no en contradicción con dichas observaciones. En la siguiente sección se analizan diferentes resultados.

4.5.1. El origen turbulento de los núcleos densos protoestelares

Padoan et al. (2001) estudiaron la relación entre la emisión de núcleos densos y su dispersión de velocidad, comparando simulaciones numéricas y observaciones, encontrando que núcleos densos en las nubes de Perseo, Taurus y la Roseta presentaban comportamientos similares a los núcleos densos en sus simulaciones numéricas. Dado que en el caso de las simulaciones, los estudios de la evolución de éstas indican que los núcleos densos se producen en general mediante choques de gas en flujos isotérmicos supersónicos, argumentaron que este resultado es una evidencia más de que los núcleos densos reales sean formados por colisiones de gas.

4.5.2. Existencia de núcleos densos subsónicos y transónicos

Recientemente, Klessen et al. (2004) estudiaron la estructura de velocidad de núcleos protoestelares que resultan de modelos numéricos de nubes moleculares supersónicas. Estos autores encontraron que el 69% de los núcleos analizados presentaban dispersión de velocidad transónicas ($\Delta v_{\text{turb}} \leq 2c_s$), mientras que el 23% de éstos eran subsónicas ($\Delta v_{\text{turb}} \leq c_s$) (ver Fig. 4.2).

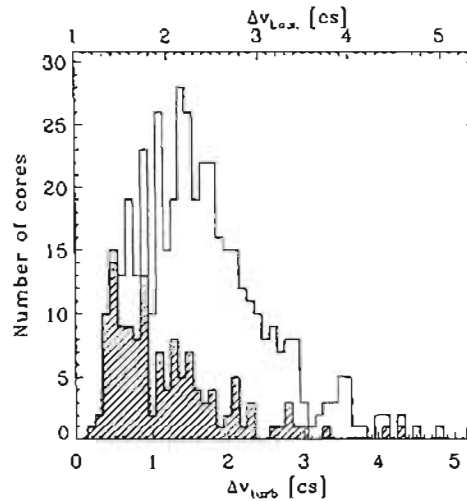


Figura 4.2: Histograma de la dispersión de velocidad para una muestra de núcleos densos en simulaciones numéricas con turbulencia forzada a gran escala (escala de forzamiento de 1/2 el tamaño de la caja) y a pequeña escala (1/8 del tamaño de la caja). El histograma sombreado representa las simulaciones a gran escala, mientras que otro representa el total de núcleos densos estudiados en ambas simulaciones. Figura tomada de Klessen et al. (2004).

El hecho de que los núcleos dentro de flujos altamente supersónicos puedan tener dispersiones de velocidad bajas fue interpretado por Klessen et al. (2004) como consecuencia directa del espectro de energía de un flujo turbulento, donde las escalas más pequeñas tienen menor energía que las escalas grandes.

4.5.3. Existencia de núcleos densos “coherentes”

Barranco & Goodman (1998) y Goodman et al. (1998) encontraron que algunos núcleos densos presentaban una dispersión de velocidad constante en su interior (ver Fig. 4.3). A estos núcleos se les llamó coherentes.

Con el fin de verificar si los núcleos densos en las simulaciones numéricas también presentaban este comportamiento, Klessen et al. (2004) estudiaron mapas de dispersión de velocidad de núcleos densos, identificando a más de la mitad de la muestra de núcleos densos estudiados como “coherentes”, es decir, con dispersiones de velocidad turbulentas aproximadamente independientes de la columna de densidad (ver Fig.4.4).

Klessen et al. (2004) explicaron la presencia de núcleos coherentes en las simulaciones en términos del mismo mecanismo que los forma: dado que los

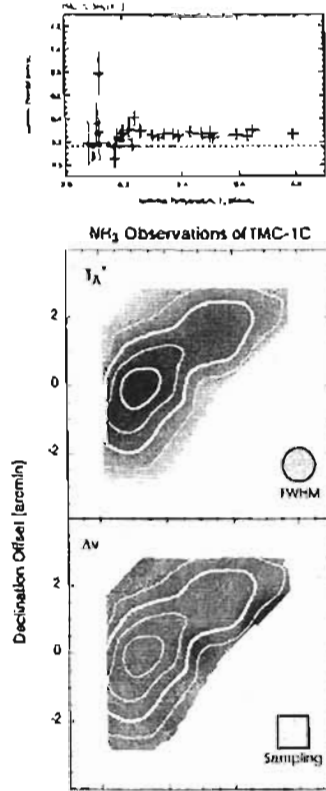


Figura 4.3: Panel superior: dispersión de velocidad vs. temperatura de antena para TMC-1C. Nótese cómo las regiones mas internas al núcleo (con mayor temperatura de antena) presentan dispersión de velocidad constante. Panel medio: mapa de densidad columnar de TMC-1C. Panel inferior: los contornos representan la densidad columnar, mientras que la escala de grises representa la dispersión de velocidad al interior de TMC-1C. (Figuras adaptadas de Barranco & Goodman 1998)

núcleos densos son frecuentemente formados por compresiones turbulentas, éstos se localizan en puntos de “estancamiento” (*stagnation points*): aparecen como coherentes debido a que se encuentran en los lugares donde la compresión es máxima, y las diferencias de velocidades relativas son mínimas.

4.5.4. Núcleos densos con disfraz hidrostático

Una pregunta natural que surge en este momento es ¿Por qué hay estructuras que parecen estar en equilibrio hidrostático, como B68 Alves et al. (2001); Hotzel et al. (2002) (ver fig. 2.1) las cuales tienen un perfil Bonnor-Ebbert (ver Fig. 4.5)?

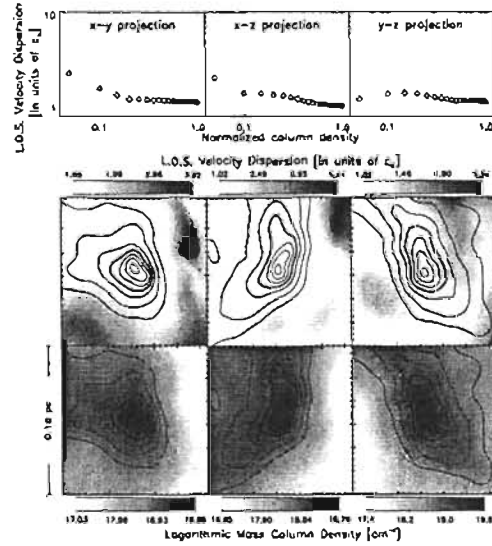


Figura 4.4: Tres proyecciones (de izquierda a derecha, $x-y$, $x-z$ y $y-z$) de un mismo núcleo seleccionado de las simulaciones numéricas de Klessen et al. (2004). De abajo a arriba: mapa de densidad columnar, mapa de dispersión de velocidad (escala de grises) con los isocontornos de densidad columnar superpuestos, y gráfica de dispersión de velocidad vs. la columna de densidad normalizada al valor máximo (proporcional a la temperatura de antena medida observacionalmente). Compárese esta gráfica con la Fig. 4.3. (tomada de Klessen et al. 2004)

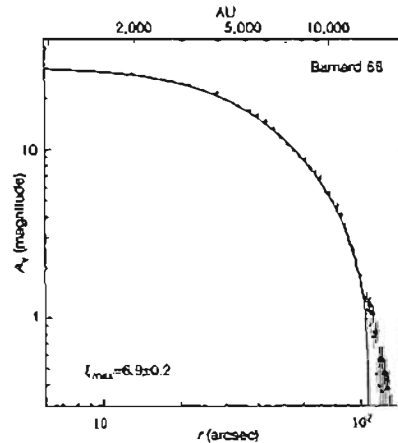


Figura 4.5: B68 (ver Fig. 2.1). Perfil de densidad columnar promediado azimutalmente. Por convención, la densidad columnar de polvo se expresa en términos de magnitudes de extinción visual A_v . Los círculos muestran los datos observacionales del perfil promediado. La línea sólida representa el mejor ajuste de una esfera de Bonnor-Ebert.

Es importante en este punto enfatizar el mensaje de Alves et al. (2001), quienes comentan:

The close match of the data with theory indicates that the internal struc-

ture of the cloud is well characterized by the equations for a self-gravitating, pressure-confined, isothermal sphere and thus Barnard 68 seems to be a distinct dynamical unit near a state of hydrostatic equilibrium, with gravity balanced by thermal pressure.

Primero que nada, es importante recalcar que B68 puede realmente ser una estructura especialmente suave y redonda, embebida en un medio externo más caliente. Alves et al. (2001) demostraron que esta estructura exhibe un perfil tipo Bonnor-Ebert, que sus perfiles de línea implican temperaturas de alrededor de $T \sim 10K$ Hotzel et al. (2002), con una pequeña contribución de aproximadamente 3% por movimientos turbulentos. Sin embargo, hay una pequeña inconsistencia: los perfiles Bonnor-Ebert encontrados por Alves et al. (2001) son inestables a una temperatura de $16K$, pero la temperatura real es un factor de 30-50% menor, es decir, hay un soporte térmico real menor al calculado por Alves et al. (2001) a partir del perfil de la densidad columnar.

Por otro lado Ballesteros-Paredes et al. (2003) mostraron que siempre existe la posibilidad de que núcleos densos que evolucionen dinámicamente, presenten un perfil que de manera fortuita se parezca a un perfil Bonnor-Ebert. Ballesteros-Paredes et al. (2003) usaron simulaciones SPH de Klessen et al. (2000) y encontraron que aproximadamente el 50% de los núcleos densos estudiados tenían perfiles de densidad columnar similares a los de Bonnor-Ebert y no se encuentran en equilibrio hidrostático (ver Fig. 4.6).

Por último, es conveniente mencionar que no existen simulaciones numéricas de nubes moleculares turbulentas que presenten núcleos densos en equilibrio hidrostático, ya que la turbulencia es capaz de deformarlos e incluso de deshacerlos, tal como fue sugerido por Ballesteros-Paredes et al. (1999b).

Así, el escenario turbulento naturalmente incorpora el proceso de la formación de los núcleos densos y reproduce de manera satisfactoria una serie de propiedades en éstos.

4.6. Formación rápida de núcleos, estrellas y nubes

Si, como sugieren las simulaciones, las nubes están lejos del equilibrio virial y la turbulencia supersónica decae rápidamente, entonces probablemente la formación de las nubes puede ser más rápida que las estimaciones de 20-30 millones de años sugeridas por Blitz & Shu (1980).

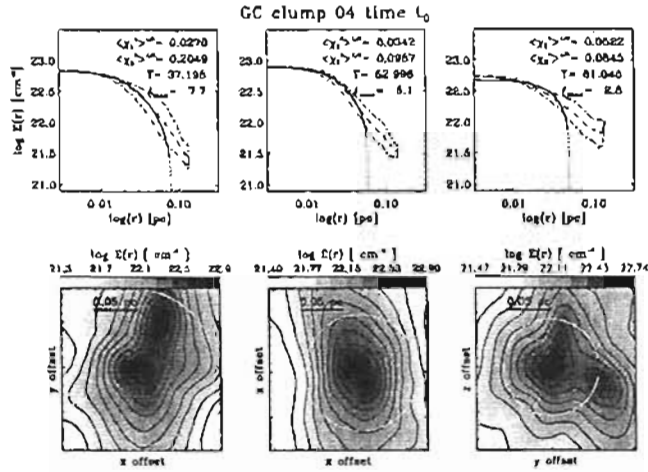


Figura 4.6: Tres proyecciones (de izquierda a derecha, $x-y$, $x-z$ y $y-z$) de un mismo núcleo seleccionado de las simulaciones numéricas de Klessen et al. (2004). De abajo a arriba: mapas de densidad columnar y perfiles de densidad columnar promediados azimutalmente. Nótese que, aún cuando estos núcleos densos no están en equilibrio hidrostático, sus perfiles de densidad columnar pueden parecer a los perfiles de esferas Bonnor-Ebert proyectadas. (Figura tomada de Ballesteros-Paredes et al. 2003).

Esto concuerda con la sugerencia de, entre otros, Sasao (1973); Hunter (1979); Hunter et al. (1986); Elmegreen (1993); Ballesteros-Paredes et al. (1999b), que las nubes son fluctuaciones de densidad producidas por choques de flujos turbulentos en el medio interestelar.

En la nube de Tauro no se encuentran estrellas mayores a 5×10^6 años, esto contradice la estimación de 20-30 millones de años para la formación de las nubes. Este problema es llamado post-T-Tauri (Herbig 1978). Ballesteros-Paredes et al. (1999a) demostraron que la turbulencia debida a eventos de formación estelar global puede producir nubes inestables gravitacionalmente con características similares (perfiles de línea de HI y CO) a las que presenta la nube de Tauro. Ellos argumentaron que las nubes moleculares pueden construirse y formar estrellas rápidamente, explicando así el problema post-T-Tauri. Hartmann et al. (2001) tabularon las edades de estrellas en 13 regiones de formación estelar cercanas. Para regiones en donde había estrellas mayores 5×10^6 años, no había gas molecular, sugiriendo que las escalas de tiempo de formación de ambos, nubes y estrellas es más corto.

x-y

x-z

y-z

Parte II

Cálculo del Transporte Radiativo en Núcleos Densos de Simulaciones Numéricas

Capítulo 5

Introducción

Hasta ahora se ha realizado una revisión bibliográfica sobre las nubes moleculares y la formación estelar y, en particular, se ha repasado brevemente el esquema de formación estelar estándar y el dinámico. Respecto a este último, se han presentado una serie de “predicciones” observacionales (entrecomillado porque, más que predicciones, son reproducciones de hechos observacionales). Sin embargo, existe un faltante importante: el cálculo detallado del transporte radiativo en los núcleos densos de simulaciones numéricas de nubes moleculares, con el propósito de hacer una comparación detallada de los perfiles de línea observados hacia nubes moleculares, y los perfiles de línea de los núcleos en las simulaciones numéricas.

Para cumplir este propósito se adaptó el código de transporte radiativo “montecarlo” de Bernes (1979) para funcionar en tres dimensiones. El código original funciona exclusivamente en simetría esférica, pero dado que los núcleos densos (tanto los observados, como los de las simulaciones) no son esféricos, es necesario relajar esta aproximación.

En la presente sección se dan primeramente algunas definiciones útiles, como el flujo de energía, intensidad específica, profundidad óptica, así como una descripción de la ecuación de transporte radiativo, los coeficientes de Einstein, etc., para acabar con las ecuaciones de equilibrio estadístico (§6). En el Capítulo §8 se describe la metodología utilizada por Bernes (1979), y se describen las modificaciones al código de Bernes (1979) para su funcionamiento en tres dimensiones. Finalmente, en el capítulo §9 se presentan los resultados de esta adaptación, y una comparación con los resultados del programa con simetría esférica.

Capítulo 6

Transporte Radiativo

6.1. Transporte Radiativo

6.1.1. Flujo de energía

Una medida de la energía transportada por los rayos es el flujo, F . Este se define como la cantidad de energía que pasa a través de un elemento de área dA en un intervalo de tiempo dt , y depende de la orientación del elemento de área.

6.1.2. Intensidad específica

Una descripción más detallada de la radiación nos la da el considerar la energía que transportan rayos individuales, aunque como los rayos inciden en un área infinitesimal, se considera la energía transportada por un conjunto de rayos que difieren infinitesimalmente del rayo. La intensidad específica I_ν es la energía transportada por el conjunto de rayos contenidos en un elemento de ángulo sólido $d\Omega$ en un rango de frecuencias $d\nu$ que atraviesan un área dA en una unidad de tiempo dt . La cantidad de energía transportada por este conjunto de rayos es (como el elemento de área puede tener cualquier orientación, el elemento de área se ve reducido a $\cos\theta dA$)

$$dE \equiv I_\nu \cos\theta dA dt d\Omega d\nu. \quad (6.1)$$

La intensidad específica promedio se define como

$$J_\nu \equiv \frac{1}{4\pi} \int I_\nu d\Omega \quad (6.2)$$

6.1.3. Transporte Radiativo

La intensidad específica puede en general no mantenerse constante si los rayos atraviesan materia, debido a que puede sumarse o restarse energía por emisión o absorción.

- Emisión. El coeficiente de emisión j se define como la energía emitida por unidad de tiempo, por unidad de volumen y por unidad de ángulo sólido

$$dE = j dV d\Omega dt$$

De la misma manera se puede definir un coeficiente de emisión monocromático

$$dE_\nu = j_\nu dV d\Omega dt d\nu \quad (6.3)$$

En general, el coeficiente de emisión depende de la dirección en la cual la emisión se da. Para un emisor isotrópico, o para una distribución de emisores orientados aleatoriamente, se puede escribir

$$j_\nu = \frac{1}{4\pi} P_\nu \quad (6.4)$$

donde P_ν es la potencia radiada por unidad de volumen y por unidad de frecuencia. Algunas veces el coeficiente de radiación se define en términos de la emisividad ε_ν , definida como la energía (integrada en ángulo sólido) emitida espontáneamente por unidad de frecuencia, por unidad de tiempo y por unidad de masa

$$dE_\nu = \varepsilon_\nu \rho dV dt d\nu \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (6.5)$$

donde ρ es la densidad de masa y el último término toma en cuenta la fracción de energía radiada en el ángulo sólido $d\Omega$. Comparando la (ec.6.3) y la (ec.6.5):

$$j_\nu = \frac{\varepsilon_\nu \rho}{4\pi} \quad (6.6)$$

Cuando un rayo de sección transversal dA viaja una distancia ds , atraviesa un volumen $dV = dA ds$, el cambio en la energía del rayo debido a la emisión espontánea después de atravesar el volumen dV es

$$dI_\nu dA dt d\Omega d\nu$$

que es igual a la energía emitida escrita en términos del coeficiente de emisión monocromático. Así,

$$j_\nu dV d\Omega dt d\nu = dI_\nu dA dt d\Omega d\nu,$$

por lo que la intensidad sumada al rayo por emisión espontánea, dI_ν es

$$dI_\nu = j_\nu ds$$

- Absorción. El coeficiente de absorción α_ν es definido por la siguiente ecuación

$$dI_\nu = -\alpha_\nu I_\nu ds \quad (6.7)$$

la cual representa la pérdida de intensidad en un rayo cuando viaja una distancia ds . Esta ley fenomenológica puede ser entendida en términos de un modelo microscópico en el cual partículas con densidad numérica n están distribuidas aleatoriamente y presentan, cada una, un área de absorción efectiva o sección recta de magnitud $\sigma_\nu(\text{cm}^2)$. El efecto que estas partículas tienen en la radiación depende de la intensidad del rayo y del área total de absorción. El área total de absorción es igual al producto del área efectiva de absorción por el número de partículas que absorben, es decir, $\sigma_\nu n dA ds$, por lo que la energía absorbida por unidad de volumen, unidad de tiempo y unidad de frecuencia es:

$$dE_\nu = I_\nu(\sigma_\nu n dA ds) d\Omega dt d\nu$$

El cambio en la energía del rayo debido a la absorción después de atravesar el volumen dV es:

$$-dI_\nu dA dt d\Omega d\nu$$

Igualando las dos ecuaciones anteriores

$$-dI_\nu dA dt d\Omega d\nu = I_\nu(\sigma_\nu n dA ds) d\Omega dt d\nu$$

$$-dI_\nu = \sigma_\nu n I_\nu ds$$

la cual es precisamente la ley fenomenológica establecida anteriormente, en donde

$$\alpha_\nu = n\sigma_\nu \quad (6.8)$$

6.1.4. La ecuación de transporte radiativo

Se puede ahora incorporar los efectos de la emisión y la absorción dentro de una sola ecuación que nos dé la variación de la intensidad específica a lo largo del rayo.

$$\frac{dI_\nu}{ds} = -\alpha_\nu I_\nu + j_\nu \quad (6.9)$$

Una vez que se conocen los coeficientes de emisión y absorción es relativamente fácil resolver la ecuación de transporte para la intensidad específica. Se darán las soluciones para los dos casos límites:

1. Sólo emisión:

En este caso la ecuación de transporte

$$\frac{dI_\nu}{ds} = j_\nu \quad (6.10)$$

tiene la solución

$$I_\nu(s) = I_\nu(s_0) + \int_{s_0}^s j_\nu(s') ds' \quad (6.11)$$

El aumento en la intensidad es igual al coeficiente de emisión integrado a lo largo de la visual.

2. Sólo absorción:

En este caso la ecuación de transporte

$$\frac{dI_\nu}{ds} = -\alpha_\nu I_\nu \quad (6.12)$$

tiene la solución

$$I_\nu(s) = I_\nu(s_0) \exp \left[- \int_{s_0}^s \alpha_\nu(s') ds' \right] \quad (6.13)$$

6.1.5. Profundidad óptica y función fuente

La ecuación de transporte toma otra forma si en lugar de usar s , se usa otra variable τ_ν llamada profundidad óptica y definida como la distancia medida en unidades del camino libre medio del fotón

$$d\tau_\nu = \alpha_\nu ds \quad (6.14)$$

o

$$\tau_\nu(s) = \int_{s_0}^s \alpha_\nu(s') ds' \quad (6.15)$$

dividiendo la ecuación de transporte entre α_ν

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = -I_\nu + S_\nu \quad (6.16)$$

donde la función fuente S_ν es definida como el cociente entre los coeficientes de emisión y absorción:

$$S_\nu \equiv \frac{j_\nu}{\alpha_\nu} \quad (6.17)$$

La ecuación de transporte se puede resolver poniendo todas las cantidades como función de la profundidad óptica en vez de s . Multiplicando la ecuación de transporte por el factor de integración e^τ y definiendo las cantidades $\mathcal{I} \equiv I_\nu e^{\tau_\nu}$, $\mathcal{S} \equiv S_\nu e^{\tau_\nu}$

$$e^{\tau_\nu} \frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = -I_\nu e^{\tau_\nu} + S_\nu e^{\tau_\nu}$$

$$e^{\tau_\nu} \frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} + I_\nu e^{\tau_\nu} = S_\nu e^{\tau_\nu}$$

$$\frac{d(e^{\tau_\nu} I_\nu)}{d\tau_\nu} = S_\nu e^{\tau_\nu}$$

La ecuación de transporte toma la forma

$$\frac{d\mathcal{I}}{d\tau_\nu} = \mathcal{S}$$

cuya solución es

$$\mathcal{I}(\tau_\nu) = \mathcal{I}(0) + \int_0^{\tau_\nu} \mathcal{S}(\tau'_\nu) d\tau'_\nu$$

Rescribiendo la solución en términos de I_ν y S_ν se tiene la solución de la ecuación de transporte.

$$\begin{aligned}
I(\tau_\nu)e^{\tau_\nu} &= I_\nu(0)e^0 + \int_0^{\tau_\nu} S_\nu(\tau'_\nu)e^{\tau'_\nu}d\tau'_\nu \\
I(\tau_\nu) &= I_\nu(0)e^{-\tau_\nu} + \int_0^{\tau_\nu} S_\nu(\tau'_\nu)e^{\tau_\nu}e^{-\tau'_\nu}d\tau'_\nu \\
I(\tau_\nu) &= I_\nu(0)e^{-\tau_\nu} + \int_0^{\tau_\nu} S_\nu(\tau'_\nu)e^{-(\tau_\nu-\tau'_\nu)}d\tau'_\nu \quad (6.18)
\end{aligned}$$

La solución de la ecuación de transporte es la suma de la intensidad inicial disminuida por absorción, mas la integral de la función fuente disminuida por absorción. En el caso en que la función fuente sea constante, la solución a la ecuación de transporte es:

$$\begin{aligned}
I(\tau_\nu) &= I_\nu(0)e^{-\tau_\nu} + \int_0^{\tau_\nu} S_\nu(\tau'_\nu)e^{-(\tau_\nu-\tau'_\nu)}d\tau'_\nu \\
I(\tau_\nu) &= I_\nu(0)e^{-\tau_\nu} + S_\nu \left[e^{-(\tau_\nu-\tau'_\nu)} \right]_0^{\tau_\nu} \\
I(\tau_\nu) &= I_\nu(0)e^{-\tau_\nu} + S_\nu (1 - e^{-\tau_\nu}) \\
I(\tau_\nu) &= S_\nu + e^{-\tau_\nu} (I_\nu(0) - S_\nu)
\end{aligned}$$

Si $\tau_\nu \rightarrow \infty$, $e^{-\tau_\nu} \rightarrow 0$ y $I_\nu \rightarrow S_\nu$

De la ecuación de transporte se ve que cuando $I_\nu > S_\nu$, $dI_\nu/d\tau_\nu < 0$, por lo que I_ν tiende a decrecer a lo largo del rayo, y cuando $I_\nu < S_\nu$, $dI_\nu/d\tau_\nu > 0$, I_ν tiende a aumentar a lo largo del rayo. Por lo tanto la función fuente es la cantidad a la que la intensidad específica trata de aproximarse y lo hace si hay suficiente profundidad óptica.

6.1.6. Camino libre medio

Un concepto muy útil para describir la absorción es el camino libre medio. Se define como la distancia promedio que puede viajar un fotón a través de un material sin ser absorbido. La probabilidad de que un fotón pueda viajar al menos una profundidad óptica τ_ν es $e^{-\tau_\nu}$, por lo que la profundidad óptica media es:

$$\langle \tau_\nu \rangle \equiv \int_0^\infty \tau_\nu e^{-\tau_\nu} d\tau_\nu = 1$$

El camino libre medio l_ν queda determinado por $\langle \tau_\nu \rangle = \alpha_\nu l_\nu = 1$ o

$$l_\nu = \frac{1}{\alpha_\nu} = \frac{1}{n\sigma_\nu}$$

6.2. Radiación térmica

La radiación térmica es la radiación emitida por materia en equilibrio térmico.

6.2.1. Radiación del cuerpo negro

Para investigar la radiación térmica es necesario considerar la radiación del cuerpo negro, radiación que está en equilibrio térmico. Para obtener la radiación se mantiene un contenedor a temperatura T sin que salga o entre ningún tipo de radiación hasta que se haya alcanzado el equilibrio. Se abre un pequeño agujero en el contenedor y se mide la radiación sin que se altere el equilibrio. Usando algunos argumentos generales de termodinámica y el hecho de que los fotones no tienen masa se pueden derivar algunas propiedades importantes de la radiación del cuerpo negro. Ya que los fotones no tienen masa, las paredes del contenedor pueden crearlos y destruirlos. Por lo tanto no hay una ley de conservación del número de fotones y esperamos que el número de fotones se ajustará por sí mismo en el equilibrio a la temperatura T . Una propiedad importante de I_ν es que es independiente de las paredes del contenedor y sólo depende de la temperatura. Para probar esto consideremos dos contenedores de formas arbitrarias a igual temperatura, unidos por sus aberturas y colocando entre ellos un filtro que deje pasar únicamente un tipo de frecuencias. Si las intensidades son diferentes, la energía fluiría espontáneamente entre los dos contenedores, pero ya que ambos contenedores están a la misma temperatura esto violaría la segunda ley de la termodinámica. Por tanto, se tiene la siguiente relación:

$$I_\nu = f(T, \nu) \equiv B_\nu(T) \quad (6.19)$$

donde $f(T, \nu)$ =función universal de la temperatura y la frecuencia. Por lo que I_ν es independiente de la forma del contenedor. Un corolario es que

también es isotrópica; $I_\nu \neq I_\nu(\Omega)$. La función $B_\nu(T)$ es llamada la función de Planck, y tiene la forma

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}, \quad (6.20)$$

donde c es la velocidad de la luz, y h y k son las constantes de Planck y Boltzmann, respectivamente. En términos de la longitud de onda, la función de Planck se lee:

$$B_\nu(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}. \quad (6.21)$$

6.3. Los coeficientes de Einstein.

La relación que hay entre los coeficientes de absorción y emisión a escala microscópica fue descubierta por Einstein. Para encontrarla, Consideremos el caso simple de dos niveles discretos de energía: el primero de energía E con peso estadístico g_1 y el segundo con energía $E + h\nu_0$ y peso estadístico g_2 . El sistema hace una transición del nivel 1 al 2 absorbiendo un fotón de energía $h\nu_0$ y una transición del nivel 2 al 1 emitiendo un fotón de energía $h\nu_0$. Einstein identificó tres procesos:

1. Absorción: Esta ocurre en la presencia de fotones con energía $h\nu_0$. El sistema hace una transición del nivel 1 al 2 absorbiendo un fotón. Ya que no hay autointeracción entre el campo de radiación, se espera que la probabilidad por unidad de tiempo de este proceso nos proporcionará la densidad de fotones de frecuencia ν_0 . Para ser precisos, se debe reconocer que la diferencia de energía entre los dos niveles no es abrupta sino que está descrita por un perfil de línea $\Phi(\nu_0)$, el cual tiene cierto ancho alrededor de un pico en ν_0 . Dicho perfil describirá la probabilidad de que un fotón de frecuencia $\nu_0 + \Delta\nu$ cause una transición, por lo que se normaliza de la siguiente manera:

$$\int_0^\infty \Phi(\nu) d\nu = 1.$$

Así, definimos al coeficiente B_{12} de Einstein como $B_{12}\bar{J}$, el cual cuantifica la probabilidad de la transición por unidad de tiempo para la absorción, donde $\bar{J} \equiv \int_0^\infty J_\nu \Phi(\nu) d\nu$. La constante B_{12} es el coeficiente B de Einstein.

2. Emisión espontánea. Esta ocurre cuando el sistema está en el nivel 2 y cae al nivel 1 emitiendo un fotón, y ocurre aún en ausencia de un campo de radiación. Se define el coeficiente A_{12} de Einstein como

A_{21} = Probabilidad de la transición por unidad de tiempo para la emisión espontánea.

3. Emisión estimulada. Einstein encontró que para derivar la ley de Planck se requería otro proceso que fuera proporcional a $\bar{J}$ y causara la emisión de un fotón

$B_{21}\bar{J}$ = Probabilidad de la transición por unidad de tiempo para la emisión estimulada. A B_{12} se le conoce como el coeficiente de Einstein de emisión estimulada.

Nótese que mientras A_{21} refleja directamente una probabilidad de transición, los coeficientes B requieren de un campo de radiación, de manera que es el producto de estos coeficientes por la intensidad promediada en frecuencias la que tiene valores de probabilidad.

6.3.1. Relación entre los coeficientes de Einstein

En equilibrio termodinámico el número de transiciones por unidad de tiempo y por unidad de volumen hacia afuera del estado 1 es igual al número de transiciones por unidad de tiempo y por unidad de volumen hacia adentro del estado 1. Si n_1 y n_2 son las densidades numéricas de los niveles 1 y 2 respectivamente esto se reduce a:

$$n_1 B_{12} \bar{J} = n_2 A_{21} + n_2 B_{21} \bar{J} \quad (6.22)$$

Resolviendo para $\bar{J}$

$$(n_1 B_{12} - n_2 B_{21}) \bar{J} = n_2 A_{21}$$

se tiene que

$$\bar{J} = \frac{A_{21}/B_{21}}{(n_1/n_2)(B_{12}/B_{21}) - 1}$$

En equilibrio termodinámico la razón entre n_1 y n_2 está dada por

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{g_1 \exp(-E/kT)}{g_2 \exp(-(E + h\nu_0)/kT)} = \frac{g_1}{g_2} \exp(h\nu_0/kT)$$

por lo que queda

$$\bar{J} = \frac{A_{21}/B_{21}}{(g_1 B_{12}/g_2 B_{21}) \exp(h\nu/kT) - 1}$$

En equilibrio termodinámico, $J_\nu = B_\nu$. Además, el hecho de que B_ν varíe lentamente en la escala $\Delta\nu$ implica que $\bar{J} = B_\nu$ por lo tanto

$$\frac{2h\nu^3/c^2}{\exp(h\nu/kT) - 1} = \frac{A_{21}/B_{21}}{(g_1 B_{12}/g_2 B_{21}) \exp(h\nu/kT) - 1}$$

$$(2h\nu^3/c^2) \left[(g_1 B_{12}/g_2 B_{21}) \exp(h\nu/kT) - 1 \right] = (A_{21}/B_{21}) (\exp(h\nu/kT) - 1)$$

$$\frac{2h\nu^3}{c^2} \left[\frac{g_1 B_{12}}{g_2 B_{21}} \right] \exp(h\nu/kT) - \frac{2h\nu^3}{c^2} = \frac{A_{21}}{B_{21}} \exp(h\nu/kT) - \frac{A_{21}}{B_{21}}$$

$$\left[\frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{g_1 B_{12}}{g_2 B_{21}} - \frac{A_{21}}{B_{21}} \right] \exp(h\nu/kT) = \frac{2h\nu^3}{c^2} - \frac{A_{21}}{B_{21}}$$

La única manera de que esta igualdad se cumpla para todo valor de la frecuencia ν es que el término que multiplica a la exponencial en el lado izquierdo y el lado derecho sean iguales entre ellos y sean iguales a cero

$$\frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{g_1 B_{12}}{g_2 B_{21}} - \frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{2h\nu^3}{c^2} - \frac{A_{21}}{B_{21}} \Rightarrow$$

$$A_{21} = \frac{2h\nu^3}{c^2} B_{21} \quad (6.23)$$

y

$$g_1 B_{12} = g_2 B_{21} \quad (6.24)$$

Estas dos últimas relaciones conectan propiedades atómicas A_{21} , B_{21} y B_{12} y no hacen referencia a la temperatura T , por lo tanto se satisfacen aún si no hay equilibrio termodinámico.

6.3.2. Coeficientes de absorción y emisión en términos de los coeficientes de Einstein

Para obtener el coeficiente de emisión j_ν se hace la consideración de que la emisión está distribuida de acuerdo con la misma función perfil de línea con la que lo hace la absorción. La cantidad de energía emitida por unidad de volumen, unidad de ángulo sólido, unidad de frecuencia y unidad de tiempo es por definición

$$dE = j_\nu dV d\Omega d\nu dt.$$

Ya que en una transición cada fotón contribuye con una energía $h\nu_0$ distribuida sobre un ángulo sólido 4π , dE puede también ser expresada como:

$$\left(\frac{h\nu_0}{4\pi}\right) \Phi(\nu) n_2 A_{21} dV d\Omega d\nu dt$$

al igualar estas dos relaciones, el coeficiente de absorción se escribe:

$$j_\nu = \frac{h\nu_0}{4\pi} A_{21} n_2 \Phi(\nu). \quad (6.25)$$

Para encontrar el coeficiente de absorción, se encuentra la energía absorbida por unidad de volumen y por unidad de tiempo

$$\begin{aligned} dE &= B_{12} \bar{J} n_1 h\nu_0 dV dt = \\ &= B_{12} n_1 h\nu_0 dV dt \int_0^\infty J_\nu d\nu = B_{12} n_1 h\nu_0 dV dt \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \int_0^\infty I_\nu \Phi(\nu) d\nu. \end{aligned}$$

La energía absorbida por unidad de volumen, unidad de ángulo sólido en un rango de frecuencias $d\nu$ por cada unidad de tiempo es:

$$dE = B_{12} n_1 h\nu_0 dV dt \left(\frac{1}{4\pi}\right) d\Omega I_\nu \Phi(\nu) d\nu.$$

Considerando el elemento de volumen $dV = dA ds$

$$dE = B_{12} n_1 h\nu_0 dA ds dt \left(\frac{1}{4\pi}\right) d\Omega I_\nu \Phi(\nu) d\nu \quad (6.26)$$

La energía absorbida en un elemento de volumen está asociada al cambio de intensidades entrante y saliente por lo que la energía absorbida puede expresarse en términos de dI_ν :

$$dI_\nu dA dt d\Omega d\nu$$

Como el coeficiente de absorción se define por $dI_\nu = -\alpha_\nu I_\nu ds$, entonces

$$-\alpha_\nu I_\nu ds dA dt d\Omega d\nu \quad (6.27)$$

Igualando las ecuaciones (6.26) y (6.27) se obtiene

$$\alpha_\nu = \frac{h\nu_0}{4\pi} n_1 B_{12} \Phi(\nu)$$

Como la emisión estimulada es proporcional a la intensidad específica y únicamente afecta a los fotones que se encuentran a lo largo del rayo, tiene una analogía con el proceso de absorción. Por tanto es mucho más conveniente considerar a la emisión estimulada como una absorción negativa e incluir su efecto en el coeficiente de absorción. El resultado para el coeficiente de absorción, corregido por emisión estimulada es:

$$\alpha_\nu = \frac{h\nu_0}{4\pi} \Phi(\nu) (n_1 B_{12} - n_2 B_{21}) \quad (6.28)$$

Es posible escribir la ecuación de transporte en términos de los coeficientes de Einstein:

$$\frac{dI_\nu}{ds} = \frac{h\nu_0}{4\pi} \Phi(\nu) (n_1 B_{12} - n_2 B_{21}) I_\nu + \frac{h\nu}{4\pi} n_2 A_{21} \Phi(\nu)$$

La función fuente también puede ser obtenida en términos de los coeficientes de Einstein dividiendo la ec. (6.25) entre la ec. (6.28)

$$S_\nu = \frac{n_2 A_{21}}{n_1 B_{12} - n_2 B_{21}} \quad (6.29)$$

Utilizando las relaciones de Einstein el coeficiente de absorción y la función fuente también se pueden escribir como:

$$\alpha_\nu = \frac{h\nu}{4\pi} n_1 B_{12} \left[1 - \frac{g_1 n_2}{g_2 n_1} \right] \Phi(\nu) \quad (6.30)$$

$$S_\nu = \frac{A_{21}/B_{21}}{(n_1 B_{12}/n_2 B_{21}) - 1} = \frac{2h\nu^3}{c^2 (g_2 n_1 / g_1 n_2 - 1)} \quad (6.31)$$

Emisión térmica. Si el material está en equilibrio termodinámico con él mismo pero no necesariamente con la radiación se tiene

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{g_1}{g_2} \exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) \Rightarrow \frac{g_1}{g_2} \frac{n_2}{n_1} = \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right)$$

$$\alpha_n u = \frac{h\nu}{4\pi} n_1 B_{12} \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right)\right) \Phi(\nu)$$

$$S_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2 \left(e^{(h\nu/kT)} - 1\right)} = B_\nu(T)$$

6.3.3. Distribución de Maxwell-Boltzman

Un gas tiene un gran número de partículas con amplios rangos de velocidad y energía. Aunque es imposible conocer con exactitud el comportamiento de una sola partícula, el gas como un todo tiene propiedades bien definidas como su temperatura, presión y densidad. Para un gas en equilibrio térmico, la fracción de partículas que tiene una velocidad dada es estable y está descrita por la función de distribución de Maxwell-Boltzmann. El número de partículas por unidad de volumen que tienen una velocidad entre v y $v + dv$

$$n_v dv = n \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT}\right] 4\pi v^2 dv \quad (6.32)$$

donde n es la densidad total del gas, m es la masa de la partícula, k es la constante de Boltzmann y T es la temperatura del gas medida en Kelvin.

6.3.4. Función de distribución de Boltzmann

Los átomos de un gas ganan o pierden energía conforme chocan. Esto da como resultado una redistribución de electrones en los orbitales atómicos. Esta distribución de electrones está gobernada por un resultado fundamental de la mecánica estadística: es menos probable que los electrones ocupen orbitales de mayor energía. Sea S_a el conjunto de números cuánticos que identifican un estado de energía E_a para un sistema de partículas. De igual manera sea S_b el conjunto de números cuánticos que identifican el estado con energía E_b . El cociente entre la probabilidad de que el sistema esté en el estado S_b , $P(S_b)$, y la probabilidad de que el sistema esté en el estado S_a , $P(S_a)$, está dado por

$$\frac{P(S_b)}{P(S_a)} = \frac{\exp(-E_b/kT)}{\exp(-E_a/kT)} = \exp[-(E_b - E_a)/kT], \quad (6.33)$$

donde T es la temperatura común entre los dos sistemas.

Los niveles de energía del sistema pueden ser degenerados, con más de un estado cuántico que tenga la misma energía. Es decir, si el estado S_a y el estado S_b son degenerados, entonces $E_a = E_b$ pero $S_a \neq S_b$. Para contar apropiadamente el número de estados que tienen una energía dada, se define como g_a el número de estados que tienen la energía E_a . De igual forma se define g_b como el número de estados que tienen energía E_b . El cociente entre la probabilidad de que el sistema se encuentre en cualquiera de los g_b estados degenerados con energía E_b y la probabilidad de que el sistema se encuentre en cualquiera de los g_a estados degenerados con energía E_a está dado por:

$$\frac{P(E_b)}{P(E_a)} = \frac{g_b \exp(-E_b/kT)}{g_a \exp(-E_a/kT)} = \frac{g_b}{g_a} \exp[-(E_b - E_a)/kT] \quad (6.34)$$

Las nubes moleculares contienen un vasto número de átomos, por tanto la razón de probabilidades es esencialmente igual a la razón entre el número de átomos. Así, para átomos de un elemento dado en un estado específico de ionización, la razón del número de átomos n_b con energía E_b y el número de átomos n_a con energía E_a en diferentes estados de excitación está dado por la ecuación de Boltzmann

$$\frac{n_b}{n_a} = \frac{g_b \exp(-E_b/kT)}{g_a \exp(-E_a/kT)} = \frac{g_b}{g_a} \exp[-(E_b - E_a)/kT] \quad (6.35)$$

6.3.5. Ensanchamiento Doppler

Cuando se tiene una fuente emisora de ondas (en este caso lumínicas) se mueve respecto al observador, la frecuencia de estas ondas medidas por el observador depende de la velocidad con la que la fuente se mueve respecto al sistema de referencia donde se mide la onda.

El cambio en la frecuencia asociado a un fotón emitido por un átomo que se mueve respecto al observador con velocidad v_z está dado por

$$\nu - \nu_0 = \frac{\nu_0 v_z}{c} \Rightarrow v_z = \frac{c(\nu - \nu_0)}{\nu_0}$$

de manera que

$$dv_z = \frac{cd\nu}{\nu_0}.$$

En un gas cuya distribución de velocidades está dada por la distribución de Maxwell-Boltzmann, el número de átomos que tienen velocidades entre v y $v + dv$ es proporcional a la distribución Maxwelliana

$$\exp\left(-\frac{m_a v^2}{2kT}\right) dv$$

Por tanto la intensidad de frecuencias de emisión en un rango de ν y $\nu + d\nu$ es proporcional a

$$\exp\left[-\frac{m_a c^2 (\nu - \nu_0)^2}{2\nu_0^2 kT}\right] d\nu$$

Para encontrar la función perfil de línea tenemos que encontrar el valor de la integral de la función anterior.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{m_a c^2 (\nu - \nu_0)^2}{2\nu_0^2 kT}\right] d\nu = \sqrt{\frac{\pi 2\nu_0^2 kT}{m_a c^2}}$$

esto ya que $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\pi/a}$

Para que se cumpla la condición de normalización de la función perfil de línea, $\int \Phi(\nu) = 1$

$$\Phi(\nu) = \sqrt{\frac{m_a c^2}{2\pi\nu_0^2 kT}} \exp\left[-\frac{m_a c^2 (\nu - \nu_0)^2}{2\nu_0^2 kT}\right]$$

$$\Phi(\nu) = \frac{1}{\Delta\nu_D \sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{(\nu - \nu_0)^2}{\Delta\nu_D^2}\right] \quad (6.36)$$

donde $\Delta\nu_D = \sqrt{2kT/m_a}$ es el ensanchamiento Doppler.

6.3.6. Equilibrio Termodinámico

Supongamos un gas cuyas partículas tienen velocidades tales que el gas obedece la distribución de Maxwell-Boltzmann (ec. [6.32]) a una temperatura T_1 , y cuyos niveles de excitación están descritos por la ecuación de Boltzmann (ec. [6.35]) a una temperatura T_2 . En este gas, se tiene un campo de radiación de cuerpo negro (ec. [6.20]) a temperatura T_3 .

En el presente trabajo consideraremos que el gas está en equilibrio termodinámico si $T_1 = T_2 = T_3$ ¹.

6.3.7. Equilibrio Termodinámico Local

En general un cuerpo puede no estar en perfecto equilibrio termodinámico si existe un flujo neto de energía de un lugar a otro. En este caso la temperatura varía con la posición. Las partículas y fotones en cualquier posición de la estrella pueden llegar de otras regiones, ya sea más calientes o más frías. La distribución en las velocidades de las partículas y las energías de los fotones reflejan entonces un rango de temperaturas. Conforme las partículas del gas colisionan unas con otras e interactúan con el campo de radiación absorbiendo o emitiendo fotones, la descripción de los procesos de excitación e ionización se convierten verdaderamente complejos. Sin embargo un caso idealizado de una sola temperatura puede ser empleado si la distancia sobre la cual se dan los cambios de temperatura es significativamente más grande que las distancias que viajan las partículas y fotones entre colisiones. En este caso, referido como un equilibrio termodinámico local (ETL), las partículas y fotones no pueden escapar del medio local y están efectivamente confinadas a un volumen determinado de temperatura aproximadamente constante.

En el caso del medio interestelar la condición de equilibrio termodinámico local se relaja aún más y se considera un objeto en ETL si su temperatura de excitación y cinética coinciden. Está será la definición de ETL que adoptaremos en el presente trabajo

6.3.8. Ecuaciones de Equilibrio Estadístico

En equilibrio estadístico, el número de transiciones por unidad de tiempo y por unidad de volumen desde el estado l es igual al número de transiciones por unidad de tiempo y por unidad de volumen hacia el estado l .

¹Nótese que en atmósferas estelares, el equilibrio termodinámico requiere que la temperatura dada por la ecuación de Saha (la cual no tratamos aquí y describe los niveles de excitación de un átomo) sea también igual a las anteriores.

Los procesos que pueden llevar a un átomo de un nivel inferior l a un nivel superior u son:

1. Excitaciones radiativas: Dado un campo de radiación promedio,

$$\bar{J} = \frac{1}{4\pi} \oint \int_0^\infty I(\nu, n) \Phi(\nu) d\nu d\Omega$$

el número de excitaciones radiativas es

$$n_l \frac{B_{lu}}{4\pi} \oint \int_0^\infty I(\nu, n) \Phi(\nu) d\nu d\Omega \quad (6.37)$$

donde n_l y n_u son las densidades numéricas de los niveles l y u respectivamente, y B_{lu} es el coeficiente de Einsten de excitaciones radiativas.

2. Excitaciones colisionales. Estas están dadas por el producto de la densidad numérica de partículas en el estado inferior, n_l y el coeficiente de excitación colisional C_{lu} .

$$n_l C_{lu} \quad (6.38)$$

Este último dependerá de las propiedades atómicas de las partículas bajo consideración, y de la temperatura cinética local.

En el caso de la desexcitación, además de los procesos inversos a los mencionados previamente, puede darse la desexcitación espontánea.

1. Desexcitación espontánea: Está dada por

$$n_u A_{ul} \quad (6.39)$$

2. Desexcitaciones radiativas:

$$n_u \frac{B_{ul}}{4\pi} \oint \int_0^\infty I(\nu, n) \Phi(\nu) d\nu d\Omega \quad (6.40)$$

3. Excitaciones colisionales.

$$n_u C_{ul} \quad (6.41)$$

Suponiendo que las poblaciones de los niveles no cambian en el tiempo, podemos igualar el número de excitaciones y el número de desexcitaciones. Así, la primer ecuación de equilibrio estadístico para un átomo de dos niveles se escribe como:

$$n_l \left\{ \frac{B_{lu}}{4\pi} \oint \int_0^\infty I(\nu, n) \Phi(\nu) d\nu d\Omega + C_{lu} \right\} = n_u \left\{ A_{ul} + \frac{B_{ul}}{4\pi} \oint \int_0^\infty I(\nu, n) \Phi(\nu) d\nu d\Omega + C_{ul} \right\} \quad (6.42)$$

En donde el primer término del lado izquierdo de la igualdad corresponde al número de absorciones de fotones y el segundo término corresponde al número de excitaciones debido a las colisiones. En el lado derecho de la igualdad el primer término corresponde al número de emisiones espontáneas, el segundo término corresponde al número de emisiones inducidas y el tercero corresponde al número de desexcitaciones debidas a colisiones.

Sin embargo, falta una ecuación para tener un sistema cerrado. Esta se obtiene de considerar que la suma de la densidad de partículas en cada uno de los niveles es igual a la densidad total, i.e.,

$$n_l + n_u = n_{\text{tot}} \quad (6.43)$$

Capítulo 7

Colapso

Aunque el colapso gravitacional debe ser el proceso que debe tener lugar en un núcleo protoestelar para que forme estrellas, no es claro que las nubes moleculares en general estén en un estado de colapso global. En la década de los setentas hubo mucha controversia al respecto. En particular, Goldreich & Kwan (1974) propusieron que las nubes estaban en un estado de colapso gravitacional global. Por su parte, Zuckerman & Evans (1974) argumentaron que tal estado de colapso implicaría una rápida evolución de las nubes y una alta tasa de formación estelar, y sugirieron que el ancho observado en las líneas moleculares se debe no a movimientos sistemáticos a gran escala, sino a movimientos turbulentos locales, principalmente.

Aunque esta visión es la que ha prevalecido en la comunidad astronómica durante los pasados 30 años, recientes simulaciones numéricas del medio interestelar sugieren que, si bien los perfiles de línea no se deben de manera prioritaria al colapso (en cuyo caso la eficiencia de formación estelar¹ sería mucho más grande que la observada, que es de unos pocos %), la turbulencia no está solamente presente en pequeñas escalas, sino que, de hecho, debe estar siendo inyectada en escalas grandes y transmitirse a todas las demás escalas mediante una cascada turbulenta. En efecto, como se mencionó en los capítulos anteriores, de acuerdo con simulaciones numéricas del medio interestelar Ballesteros-Paredes et al. (1999a), las nubes moleculares deben tener una evolución mucho más rápida (no mucho mayor a 10 millones de años) de lo que se creía en los setentas (de hasta 100–200 millones de años) u ochentas (~ 30 millones de años).

Sin embargo, dejando a un lado esta discusión, el legado más importante de Zuckerman & Evans (1974) consiste en la interpretación de los perfiles de

¹La eficiencia de formación estelar se define como el cociente de la masa de las estrellas jóvenes dividida por la la masa total de la nube.

línea en términos de movimientos turbulentos del gas interestelar.

En la década de los noventa, se logró determinar de manera mucho más precisa la evidencia de movimientos convergentes, los cuales han sido interpretados generalmente en términos de colapso gravitacional (Evans 2002; Myers et al. 2000).

7.1. Perfiles de Colapso

La principal característica observacional del colapso es que, al observar una región usando un trazador ópticamente delgado, el perfil de la línea es simétrico respecto a la velocidad sistemática (promedio) de la nube, mientras que al observar la región con un trazador ópticamente grueso, una línea con dos picos y una absorción en el centro debe tener lugar. Además, el pico corrido al azul debe ser más intenso que el pico corrido al rojo (ver, p.ej., Zhou 1992). Para entender esto consideremos el siguiente ejemplo: Tomemos una nube esférica, centralmente condensada y en colapso de tal forma que el perfil de velocidad radial aumenta conforme disminuye la distancia al centro. Los isocontornos de velocidad proyectada a lo largo de la línea de la visual se muestran en la Fig 7.1.

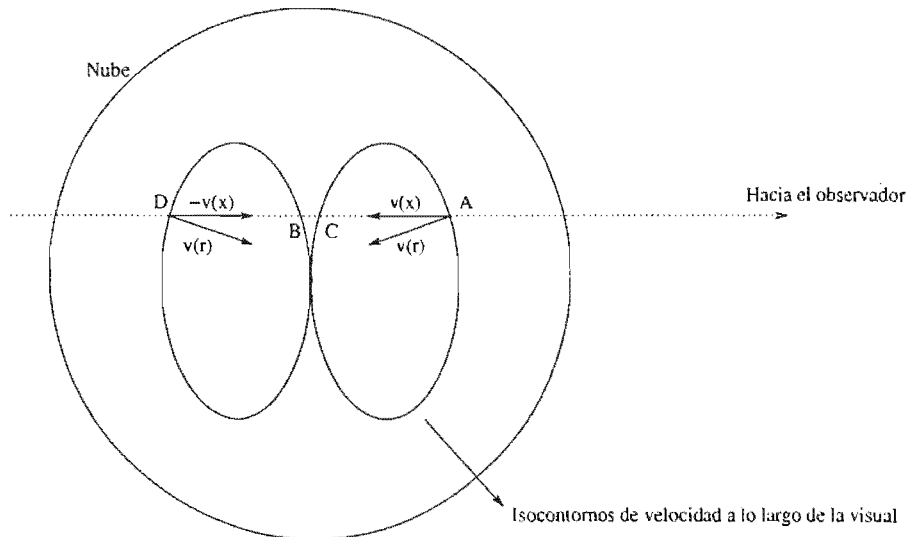


Figura 7.1: Isocontornos de velocidad a lo largo de la línea de la visión para una nube esférica con un perfil de velocidad radial que aumenta conforme disminuye la distancia al centro.

Por argumentos de simetría debe ser más o menos claro que una línea ópticamente delgada que traza toda la región debe ser simétrica, centrada en la velocidad del sistema. Considérese ahora un trazador ópticamente grueso,

y considérese una velocidad $v(x)$ medida por el observador. Dado que estamos utilizando un trazador ópticamente grueso, el observador verá únicamente el material que se localiza más cerca de él. Por lo tanto, para el isocontorno de la derecha en la Fig. 7.1, el observador detectará material corrido al rojo, que se encuentra más lejos del centro de la nube (punto A en dicha figura). Si ahora el observador cambia de frecuencia para medir el material que tiene velocidad $-v(x)$ (isocontorno de la izquierda en la Fig. 7.1), detectará el material que se encuentra más cerca del centro de la nube (punto B). El material de los puntos C y D no es detectado, pues la emisión de C es absorbida en A, mientras que la emisión de D es absorbida en B. Dado que la temperatura de excitación en una nube es menor en las partes externas, donde la densidad es menor², entonces la emisión corrida al rojo (velocidades positivas) debe ser más débil que la emisión corrida al azul (velocidades negativas), dando origen al perfil de colapso (ver Fig. 7.2).

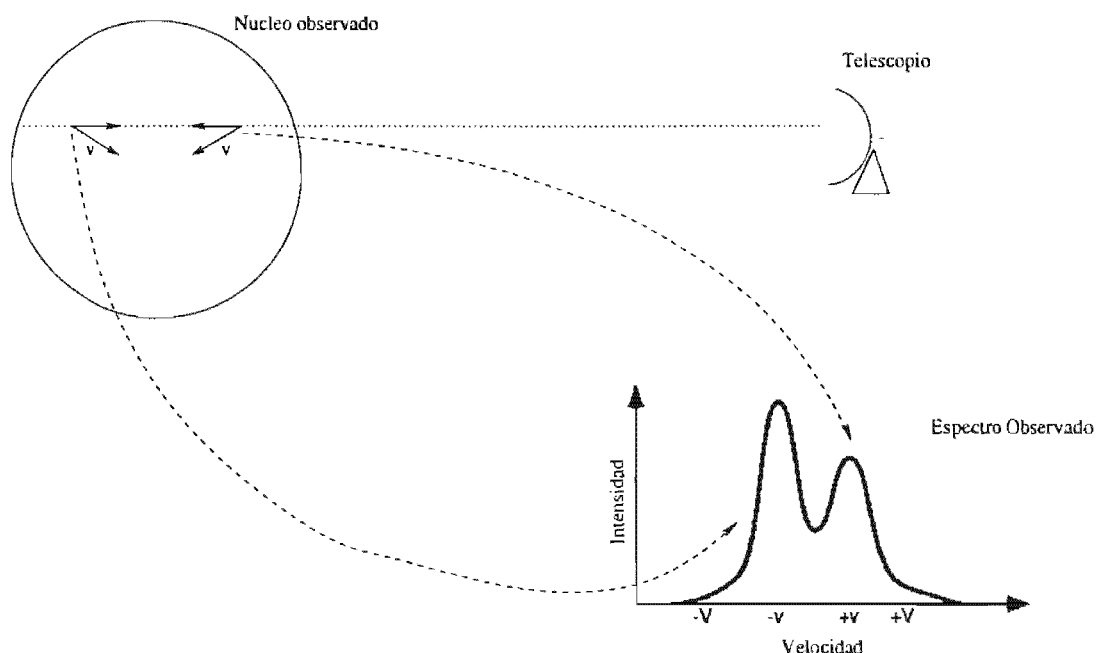


Figura 7.2: Perfil de una línea ópticamente gruesa que debe detectarse en una nube colapsando.

A la fecha han sido realizados varios censos hacia núcleos densos con el fin de determinar si éstos se encuentran en colapso o no (ver Evans 2002; Myers et al. 2000, y referencias ahí citadas). En general, ha sido posible determinar perfiles de colapso en un buen número de núcleos tanto con estrellas como sin estrellas embebidas.

²Una región fuera de equilibrio termodinámico local tendrá, en general, menor temperatura de excitación si la densidad es baja que una región con mayor densidad.

Sin embargo, la situación es en general complicada. Por una parte han sido encontrados perfiles invertidos, donde el pico más grande se da en la componente corrida al rojo, indicando expansión. Adicionalmente, conforme se observa con mejor resolución, ha sido posible determinar estructura dentro de estas regiones. De hecho, en términos generales los núcleos densos no son esféricos, y aunque en muchos casos se ha considerado que son esferoides con un cociente de tamaño mayor a menor de 2, la presencia de subestructura se hace clara conforme mejoran los datos observacionales.

Es por esto que se hace necesario relajar la suposición de que los núcleos densos son esferas, y permitir el cálculo de estructuras de densidad producto de la evolución (magneto-) hidrodinámica de un sistema que simule el interior de las nubes moleculares.

Con esta motivación, se estudió el código montecarlo 1D de Bernes (1978, 1979), a fin de poder utilizarlo con datos de simulaciones numéricas. El procedimiento se describe en los siguientes capítulos.

Capítulo 8

Análisis del Trabajo de Transporte Radiativo de Bernes (1979)

La meta última para modelar observaciones espectroscópicas de un núcleo denso dentro de una nube molecular es conocer la temperatura de excitación de cada parcela del fluido. Conociendo la función fuente $S_\nu(\tau)$ es posible resolver la ecuación de transporte

$$\begin{aligned} I(\tau_\nu) &= I_\nu(0)e^{-\tau_\nu} + \int_0^\infty S_\nu(\tau'_\nu)e^{-(\tau_\nu-\tau'_\nu)}d\tau'_\nu \\ &= I_\nu(0)e^{-\tau_\nu} + \int_0^\infty B_\nu(T_{ex}, \tau'_\nu)e^{-(\tau_\nu-\tau'_\nu)}d\tau'_\nu \end{aligned} \quad (8.1)$$

a lo largo de cada línea de la visión, y en cada frecuencia de interés. Una vez resuelta esta ecuación es posible conocer el perfil de la línea (ver Fig. 7.2), convolucionando con la respuesta de un telescopio dado. así conocer el perfil de la línea. En esta ecuación, I_0 es la intensidad específica de fondo, y $\tau(\nu)$ es la profundidad óptica.

En general la nube no se encuentra en equilibrio termodinámico local (ETL), por lo que la temperatura de excitación no necesariamente coincide con la temperatura cinética del gas. Consideraremos entonces que la función fuente será dada por la función de Planck evaluada a la temperatura de excitación,

$$S_\nu = B_\nu(T_{ex}) \quad (8.2)$$

donde

$$B_\nu(T_{ex}) = \frac{2h\nu^3/c^2}{\exp(h\nu/kT_{ex}) - 1} \quad (8.3)$$

y la temperatura de excitación T_{ex} está dada por la ecuación de Boltzmann (6.35)

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{g_2}{g_1} \exp\left(-\frac{h\nu_{12}}{kT_{ex}}\right).$$

Por lo tanto, para poder encontrar la temperatura de excitación T_{ex} es necesario conocer las poblaciones de los niveles. Para esto, necesitamos plantear las ecuaciones de equilibrio estadístico. Como se vió en la §6.3.8, para un átomo de 2 niveles, (l, u) éstas se escriben

$$\begin{aligned} n_l \left\{ \frac{B_{lu}}{4\pi} \oint \int_0^\infty I(\nu, n) \Phi(\nu) d\nu d\Omega + C_{lu} \right\} = \\ n_u \left\{ A_{ul} + \frac{B_{ul}}{4\pi} \oint \int_0^\infty I(\nu, n) \Phi(\nu) d\nu d\Omega + C_{ul} \right\} \end{aligned} \quad (8.4)$$

y

$$n_l + n_u = n_{tot} \quad (8.5)$$

donde C_{lu} y C_{ul} son las matrices colisionales de excitación y desexcitación por átomo, respectivamente, e $I(\nu, \mathbf{n})$ es la intensidad específica en una frecuencia ν en la dirección $\mathbf{n}$. De estas ecuaciones se desprende que es necesario conocer la intensidad específica promedio

$$\bar{J} = \frac{1}{4\pi} \oint \int_0^\infty I(\nu, n) \Phi(\nu) d\nu d\Omega. \quad (8.6)$$

8.1. Cálculo de la intensidad específica promedio

La nube será discretizada en pequeños elementos de volumen (píxeles). Cada uno de éstos emitirá fotones de cuerpo negro a la temperatura de excitación T_{ex} y en direcciones aleatorias. Como primera aproximación supondremos $T_{ex} = T_{kin}$, donde T_{kin} es la temperatura cinética del gas, dada por la ecuación de Maxwell-Boltzmann.

Para poder resolver las poblaciones de los diferentes niveles, es necesario resolver la ecuación de equilibrio estadístico. En ésta entra la intensidad específica promedio J .

$$J = \frac{1}{4\pi} \oint \int_0^\infty I_\nu(\nu) \Phi(\nu) d\Omega d\nu \quad (8.7)$$

donde $\Phi(\nu)$ es el perfil de la línea, que consideraremos gaussiano (ver ec. 6.36).

$$\Phi(\nu) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left[-\left(\nu - \nu_{ul} - v_z \frac{\nu_{ul}}{c}\right)^2 / \sigma^2\right] \quad (8.8)$$

ν_{ul} es la frecuencia de la línea, v_z es la velocidad a lo largo de la línea de la visión, y σ es la dispersión de velocidades térmica.

Para calcular esta J en cada punto del núcleo consideraremos dos tipos de fotones: fotones de la radiación de fondo a 3 K provenientes del exterior, y fotones emitidos por todos y cada uno de los elementos de la nube. En ambos casos, los fotones viajarán en direcciones aleatorias.

Consideremos ahora cómo se modifica la intensidad específica a lo largo de un rayo. Conforme un fotón viaja a través de un elemento de volumen desde $x = 0$ hasta $x = s_1$, induce excitaciones y desexcitaciones radiativas. A este fotón se le asignará un peso dado por, $W_0 \exp(-\tau_1 x/s_1)$, donde W_0 es el peso inicial del fotón, y $\tau_1 = \alpha s_1$ es la profundidad óptica en una distancia s_1 . Utilizando la ec.(6.28), la profundidad óptica puede escribirse como:

$$\tau_1 = \frac{h\nu_{ul}}{4\pi} \Phi(\nu) (n_l B_{lu} - n_u B_{ul}) s_1 \quad (8.9)$$

El número total N_{lu} de excitaciones radiativas a lo largo de esta trayectoria es

$$N_{lu} = \frac{h\nu_{ul}}{4\pi} \Phi(\nu) n_l B_{lu} \int_0^{s_1} W(x) dx \quad (8.10)$$

donde $h\nu_{ul}$ es la energía de la transición que se está considerando, n_l es la densidad numérica de átomos en el nivel inferior l , y B_{lu} es el coeficiente de excitación de Einstein. Dado que el número de átomos en el estado inferior es $n_l V$, donde V es el elemento de volumen, el número S_{lu} de excitaciones radiativas por átomo por unidad de tiempo en el estado inferior se vuelve

$$S_{lu} = \frac{N_{lu}}{n_l V} = \frac{h\nu_{ul}}{4\pi} \Phi(\nu) B_{lu} \frac{s_1 W_0}{V \tau_1} \left\{ 1 - \exp(-\tau_1) \right\} \quad (8.11)$$

Cuando tomamos un nuevo paso en la misma dirección se repiten los cálculos de arriba. La versión generalizada de la ecuación 8.11 es

$$S_{lu} = \frac{h\nu_{ul}}{4\pi} \Phi(\nu) B_{lu} \frac{s_k W_0}{V \tau_k} \exp\left(-\sum_{i=1}^{k-1} \tau_i\right) \{1 - \exp(-\tau_k)\}. \quad (8.12)$$

Nótese que S_{lu} es el número de excitaciones radiativas por unidad de tiempo debidas a un fotón que ha caminado k pasos. Si consideramos ahora fotones proviniendo en todas las direcciones en un elemento de volumen dado, $\sum S_{lu}$ nos dará la probabilidad de absorción por unidad de tiempo. Recordando que esta probabilidad es $B_{lu}J$, entonces

$$\sum S_{lu} = B_{lu}J \quad (8.13)$$

. Esta relación junto con la relación de Einstein $B_{ul} = (g_l/g_u)B_{lu}$ pueden introducirse en las ecuaciones de equilibrio estadístico (8.4), por lo que:

$$n_l \left(\sum S_{lu} + C_{lu} \right) = n_u \left(A_{ul} + \frac{g_l}{g_u} \sum S_{lu} + C_{ul} \right) \quad (8.14)$$

Esta ecuación, junto con la ecuación de cerradura (8.5), representan un sistema lineal de m ecuaciones, m incógnitas, con m el número de transiciones consideradas, el cual puede resolverse mediante cualquier método convencional, para obtener las poblaciones de los niveles n_u y n_l . Una vez obtenidos éstos,

Una vez resuelto el sistema de ecuaciones, se utiliza la ec. de Boltzmann (6.35) para encontrar la temperatura de excitación T_{ex} . Con estos nuevos valores de T_{ex} se repiten los cálculos en un proceso iterativo hasta que las poblaciones converjan.

Es conveniente mencionar que, aunque los contadores $\sum S_{lu}$ pueden vaciarse después de cada iteración, es más conveniente mantenerlos, ya que con ello se disminuye el ruido aleatorio. En este caso $\sum S_{lu}$ se sustituye por $\sum S_{lu}/N_{iter}$ en la ecuación (8.14), en donde N_{iter} es el número de iteraciones. Si las estimaciones iniciales de las poblaciones están lejos de ser las adecuadas, la convergencia será muy lenta, por lo que es conveniente vaciar los contadores, modificar las estimaciones iniciales de las poblaciones y reiniciar el proceso.

8.2. Técnica de reducción de varianza

En un proceso de Montecarlo se estima que la integral de una función f sobre un volumen multidimensional es

$$\int f dV \approx V \langle f \rangle \pm V \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{N}} \quad (8.15)$$

donde los paréntesis denotan el promedio aritmético sobre N puntos tomados aleatoriamente dentro del volumen multidimensional V ,

$$\langle f \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (8.16)$$

$$\langle f^2 \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f^2(x_i) \quad (8.17)$$

El segundo término del lado derecho es la estimación de un error mediante la desviación estándar, por lo que no hay garantía de que el error esté distribuido como una gaussiana, y tendrá que tomarse sólo como una indicación del error probable.

Si se quiere integrar una función g , sobre una región W , cuyas fluctuaciones alrededor del promedio son muy grandes es recomendable hacer un cambio de variable de forma tal que las fluctuaciones disminuyan. A esta técnica se le denomina “Técnica de Reducción de Varianza”.

Con el propósito de reducir la varianza se considerará la diferencia entre un campo de radiación verdadero y un campo de radiación continuo. La temperatura de radiación T_{ref} del campo de referencia se puede escoger como un promedio aproximado de la temperatura de excitación en la región. Al incluir un campo de radiación de referencia el número de excitaciones se ve modificado.

$$N_r^{\text{dif}} = \left[n_u - n_l \frac{g_u}{g_l} \exp\left(-\frac{h\nu_{ul}}{kT_{\text{ref}}}\right) \right] A_{ul} \quad (8.18)$$

El resultado inicial de una emisión dentro de la región es un fotón con peso dado por $W_0^{\text{dif}} = W_0^{\text{ver}} - W_0^{\text{ref}}$, donde W_0 es la emisión inicial de un fotón que representa un campo de radiación verdadero y W_0^{ref} la emisión inicial de un fotón que representa el campo de referencia. Estos satisfacen la siguiente ecuación:

$$\frac{W_0^{\text{ver}}}{W_0^{\text{dif}}} = n_u / \left[n_u - n_l \frac{g_u}{g_l} \exp(-h\nu_{ul}/kT_{\text{ref}}) \right] \quad (8.19)$$

El peso W^{dif} será considerado como la diferencia entre el peso W^{ver} y el peso W^{ref} . Durante el primer paso, el peso $W^{\text{dif}}(x)$ varía como

$$W_0^{\text{ver}} \exp\left(-\tau_1 \frac{x}{s_1}\right) - W_0^{\text{ref}} \exp\left(-t_1 \frac{x}{s_1}\right) \quad (8.20)$$

donde t_1 es la profundidad óptica, a lo largo del primer paso, que se obtendría si la temperatura de excitación fuera igual a T_{ref} . esto es:

$$t_1 = \frac{h\nu_{ul}}{4\pi} \Phi(\nu) n_l B_{lu} \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu_{ul}}{kT_{\text{ref}}}\right) \right] s_1 \quad (8.21)$$

Los contadores se verían modificados de la siguiente manera:

$$S_{lu}^{\text{dif}} = \frac{h\nu_{ul}}{4\pi} \Phi(\nu) B_{lu} \frac{s_1}{V} \left[\frac{W_o^{\text{ver}}}{\tau_1} \{1 - \exp(-\tau_1)\} - \frac{W_0^{\text{ref}}}{t_1} \{1 - \exp(-t_1)\} \right] \quad (8.22)$$

y las ecuaciones de equilibrio estadístico quedarían escritas de la siguiente manera:

$$n_l \left\{ B_{lu} B(\nu_{ul}, T_{\text{ref}}) + \sum S_{lu}^{\text{dif}} + C_{lu} \right\} = n_u \left\{ A_{ul} + \frac{g_l}{g_u} (B_{lu} B(\nu_{ul}, T_{\text{ref}}) + \sum S_{lu}^{\text{dif}}) + C_{ul} \right\}, \quad (8.23)$$

y

$$n_l + n_u = n_{\text{tot}}, \quad (8.24)$$

donde $B(\nu, T)$ es la función de Planck.

8.3. Modificaciones al Código Original

Como se mencionó anteriormente, el programa original de Bernes (1978) fue escrito originalmente para funcionar bajo la suposición de que la región de interés presenta simetría esférica. En el presente trabajo esta suposición fue relajada, por lo que el programa permite calcular ahora el transporte radiativo para estructuras de densidad definidas dentro de cubos con dimensiones n_x , n_y , y n_z . Básicamente todas las modificaciones consistieron en modificar los ciclos do para correr, en lugar de sobre cáscaras concéntricas, sobre las tres dimensiones. La única modificación que requirió un cálculo adicional fue la de considerar el número de fotones de radiación de fondo (3 K) que entran a la esfera, la cual fue sustituida por el número de fotones que entran en cada cara del cubo. En el apéndice D se presenta el código modificado.

Capítulo 9

Resultados

Aunque la meta final es el realizar el cálculo de perfiles de línea para cubos de datos de densidad y velocidad en tres dimensiones sin alguna simetría particular, en la presente tesis, por razones de tiempo, se realizaron únicamente las pruebas básicas para mostrar que el cálculo en tres dimensiones predice correctamente la temperatura de excitación, dejando el cálculo detallado de los perfiles de línea y su posterior comparación con datos observacionales para un trabajo de investigación a realizarse a posteriori.

9.1. Ejemplo Modelo: Nube con Densidad Constante

9.1.1. Resultados Originales de Bernes (1979)

En su artículo, Bernes (1979) presenta un ejemplo que consta de una nube esférica, homogénea, cuyas características son: radio de 3×10^{18} cm (~ 1 pc), densidad numérica de moléculas de hidrógeno de 2000 cm^{-3} , temperatura cinética de 20 K, y microturbulencia ($\delta v = 1$ km/seg). La radiación de fondo de 2.7 K se representa mediante fotones modelo emitidos en la superficie de la nube, y uniformemente distribuidos en frecuencia sobre un ancho de banda de 7.5 km/seg en unidades de velocidad. La densidad numérica de ^{12}CO relativa al hidrógeno molecular se tomó como 5×10^{-5} , y fueron considerados los seis niveles rotacionales más bajos en el análisis (5 primeras transiciones), originando por lo tanto un sistema de 6 ecuaciones lineales como las mostradas en [8.23] y [8.24] y seis incógnitas, siendo éstas las densidades de los 6 primeros niveles de la molecula del CO. Bernes (1979) consideró 15 esferas concéntricas que decrecen en grosor hacia la superficie de la nube.

Esto, con el propósito de cubrir en detalle las variaciones de temperatura en las partes externas de la nube (Bernes 1979). Los valores de las posiciones de las cáscaras son: $r = 0, 1.2 \times 10^{18}, 1.6 \times 10^{18}, 1.9 \times 10^{18}, 2.1 \times 10^{18}, 2.3 \times 10^{18}, 2.4 \times 10^{18}, 2.5 \times 10^{18}, 2.6 \times 10^{18}, 2.7 \times 10^{18}, 2.8 \times 10^{18}, 2.85 \times 10^{18}, 2.9 \times 10^{18}, 2.95 \times 10^{18}, 2.975 \times 10^{18}$, y 3×10^{18} cm.

En su artículo, Bernes (1979) muestra dos gráficas de temperatura de excitación, correspondientes a las transiciones 1-0 y 2-1 de la línea del CO, las cuales mostramos a en la Fig. 9.1.

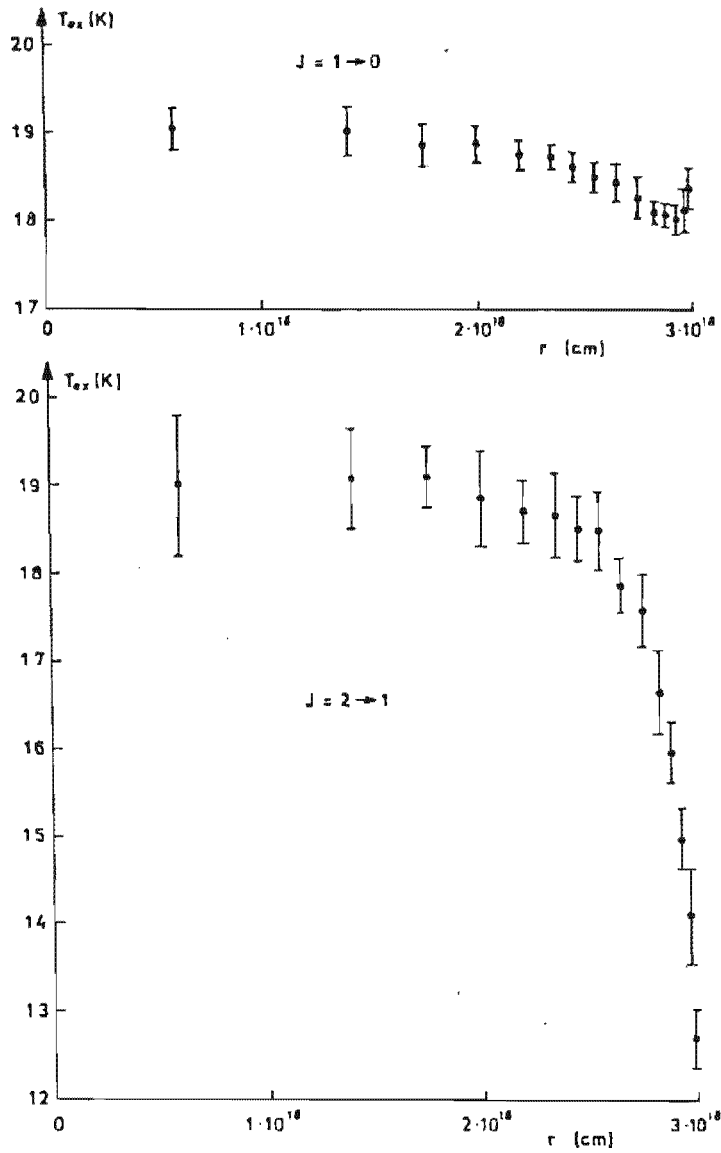


Figura 9.1: Perfil radial de temperatura de excitación para (a) la transición CO(1-0), (b) la transición CO(2-1). Figura tomada de Bernes (1979).

9.2. Experimentos Realizados

Con el fin de hacer una comparación detallada entre el código unidimensional de Bernes (1979), al cual llamaremos caso esférico, y el código modificado para funcionar fuera de simetría esférica (al cual llamaremos caso 3D), se realizaron experimentos lanzando 2×10^2 , 2×10^3 , 2×10^4 , 2×10^5 , y 2×10^6 fotones modelo, con el fin de determinar la convergencia del método. Adicionalmente, en el caso 3D se realizaron experimentos lanzando 2×10^2 , 2×10^3 , 2×10^4 , 4, 6 y 8×10^4 , 1 y 2×10^5 , y 2×10^6 fotones modelo. En cada uno de estos casos se efectuaron 10 experimentos con diferentes números aleatorios, a fin de estimar la variabilidad de los resultados entre dos experimentos iguales con diferentes números aleatorios. Los parámetros, elegidos para reproducir el ejemplo original de Bernes (1979), se muestran en el Cuadro 9.1.

Cuadro 9.1: Comparación entre los casos 1D y 3D

	Caso 1D	Caso 3D
Densidad [cm^{-3}]	2000	2000
Tamaño [cm]	$R = 3 \times 10^{18}$	$L = 6 \times 10^{18}$
Temperatura Cinetica [K]	20	20
Dispersión de Velocidad Turbulenta [km/seg]	1	1
Abundancia CO	5×10^{-5}	5×10^{-5}
No. de niveles rotacionales	6	6
Radiacion de fondo [K]	2.7	2.7
No. de elementos de volumen	15	31^3

En el caso 1D se consideraron las mismas posiciones y grosores de las cáscaras concéntricas del ejemplo de la sección anterior. Sin embargo, en el caso 3D la división del cubo fue de 31 pixeles de igual volumen.

9.2.1. Resultados

Convergencia en el caso 1D

En las gráficas 9.2 mostramos la temperatura de excitación T_{ex} para la transición CO(1-0) como función de la posición para los experimentos realizados con 2×10^2 , 2×10^3 , y 2×10^4 fotones modelo. En cada uno de estos casos, la línea sólida representa el valor promedio de los 10 experimentos efectuados con diferentes números aleatorios, y las barras de error representan la

desviación estándar de éstos valores¹.

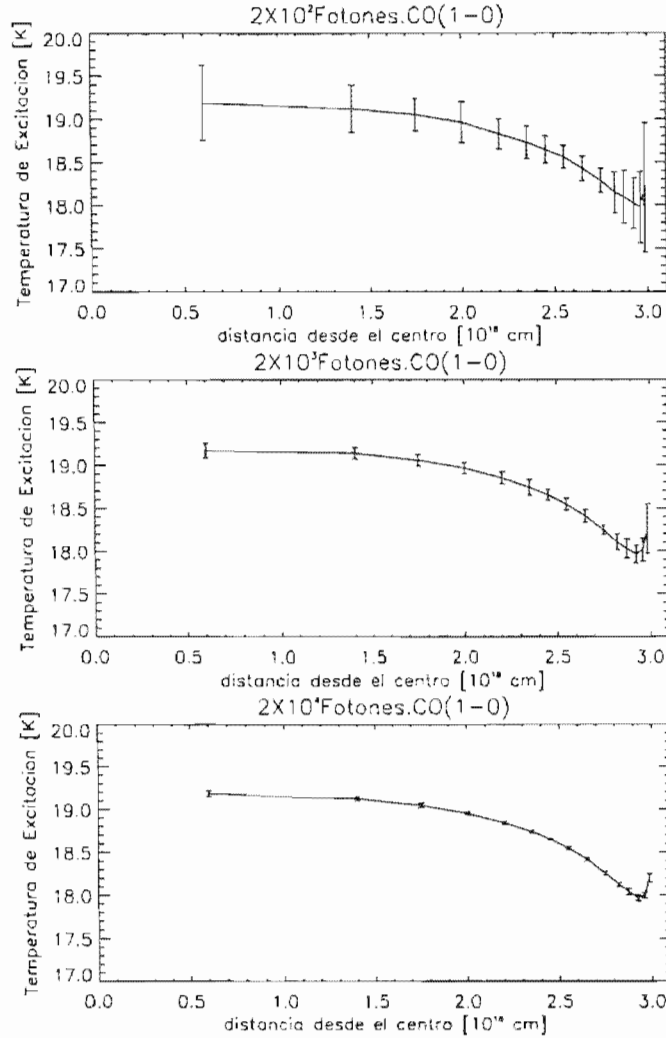


Figura 9.2: Perfil radial de temperatura de excitación para la transición 1 – 0 del CO para el **modelo 1D**. El cálculo fue realizado lanzando 200 fotones (arriba), 2000 fotones (enmedio) y 20,000 fotones (abajo). La línea corresponde al valor promedio de 10 experimentos con diferentes números aleatorios, y las barras de error corresponden a la desviación estándar.

De manera similar, en la Fig. 9.3 se presenta la temperatura de excitación para la transición CO(2-1) como función de la posición para los mismos experimentos que en la figura anterior.

Como podemos ver de estas dos figuras, los valores a los que tiende la temperatura de excitación para una transición dada usando diferente numero

¹Omitimos las gráficas con 2×10^5 y 2×10^6 pues los valores de las temperaturas son básicamente los mismos, y la desviación estándar es prácticamente imperceptible.

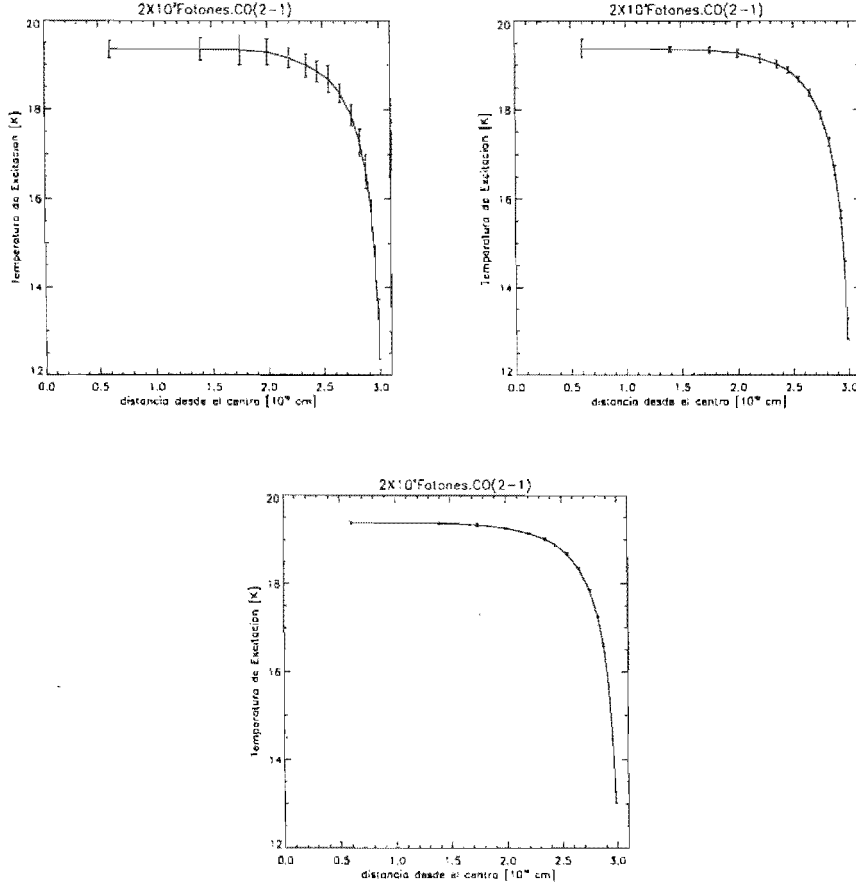


Figura 9.3: Perfil radial de temperatura de excitación para la transición 2 – 1 del CO para el modelo 1D. El cálculo fue realizado lanzando 200 fotones (arriba izquierda), 2000 fotones (arriba derecha) y 20,000 fotones (abajo). La línea corresponde al valor promedio de 10 experimentos con diferentes números aleatorios, y las barras de error corresponden a la desviación estándar.

de fotones es muy similar. Sin embargo, la desviación estándar disminuye considerablemente conforme aumentamos el número de fotones modelo.

Convergencia en el caso 3D

En el caso tridimensional es necesario incrementar el número de fotones modelo lanzados. La razón de esto es que, mientras en el caso 1D, la simetría esférica permite que un fotón que atraviesa una cáscara dada afecte simultáneamente las poblaciones de los niveles de toda esa cáscara, en el caso 3D ese fotón apenas afectaría las poblaciones de tan sólo un pequeño pixel. En otras palabras, en el caso 3D un fotón que atraviesa la celda (x_1, y_1, z_1)

a distancia r_1 no induce transiciones en todas las celdas que se encuentran a dicha distancia del centro. En el caso esférico, por el contrario, todo fotón que cruza por la cáscara r_1 induce transiciones en la cáscara completa.

En principio, para que el código montecarlo funcione de manera adecuada, cada pixel debe recibir fotones de todas las direcciones. En el caso en el que un pixel dado reciba muy pocos fotones de las regiones vecinas, la intensidad específica promedio estará subestimada, por lo que la temperatura de excitación decrecerá. En este caso el código montecarlo se detiene, ya que las poblaciones de dos niveles sucesivos se vuelven cada vez más pequeñas entre iteración e iteración, hasta que ésta llegan a cero. En este caso, el coeficiente de absorción α_ν se vuelve cero, y el código se detiene.

Una estimación empírica del número de fotones mínimo adecuado para que el código montecarlo funcione está dada por $N_{\text{fot}} = n_x \times n_y \times n_z$, donde n_x , n_y y n_z son el número de pixeles en las direcciones x , y y z , respectivamente. En el presente se tomaron $n_x = n_y = n_z = 31$, por lo que el número de fotones mínimo es $N_{\text{fot}} = 31^3 = 29,791$. La razón para este número es que, en principio, dado que el ángulo con el que cada fotón sale de cada elemento de volumen es aleatorio, este número garantizaría que, para una línea ópticamente delgada, al menos un fotón llegaría a cada uno de los $n_x \times n_y \times n_z$ elementos de volumen.

En el presente trabajo se realizaron experimentos con 2×10^2 , 2×10^3 , 2×10^4 , 4×10^4 , 6×10^4 , 8×10^4 , 1×10^5 , 2×10^5 , y 2×10^6 fotones modelo. Sin embargo, en los primeros tres casos al menos uno de los 10 experimentos² realizados se detuvieron al obtenerse poblaciones de algún nivel iguales a cero (de hecho, usando 2×10^2 y 2×10^3 fotones, los 10 experimentos se detuvieron, mientras que usando 2×10^4 , solamente cuatro de los 10 experimentos fueron satisfactorios. Sin embargo, utilizando 4×10^4 fotones modelo o más, los 10 experimentos de cada caso fueron satisfactorios).

En las Figs. 9.4 y 9.5 se muestran las temperaturas de excitación de las transiciones $\text{CO}(1-0)$ y $(2-1)$, respectivamente, para el caso tridimensional utilizando 4×10^4 , 2×10^5 , y 2×10^6 fotones modelo. Dado que en este caso la nube es un cubo que circunscribiría perfectamente a la esfera del caso unidimensional (es decir, $L = 2$ pc), los perfiles que se presentan en esta gráfica corren del centro de este cubo al centro de alguna de las seis caras (tomada aleatoriamente). Al igual que en el caso esférico, la línea sólida representa el perfil promedio de 10 experimentos con diferentes números aleatorios, y las barras de error representan la desviación estándar de estos experimentos.

²Recuérdese que, a fin de garantizar que los valores obtenidos eran representativos estadísticamente, se realizaron 10 experimentos con diferentes números aleatorios en cada caso.

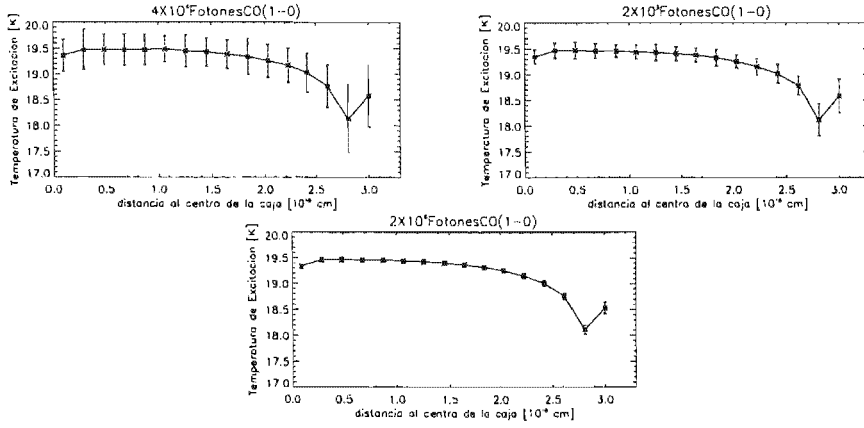


Figura 9.4: Perfil de temperatura de excitación para la transición 1 – 0 del CO para el modelo 3D. Los perfiles corren del centro de la caja a alguna de las caras del cubo. El cálculo fue realizado lanzando 4×10^4 fotones (arriba izquierda), 2×10^5 (arriba derecha), y 2×10^6 (abajo). Al igual que en el caso 1D, la línea corresponde al valor promedio de 10 experimentos con diferentes números aleatorios, y las barras de error corresponden a la desviación estándar.

Como era de esperarse, al igual que en el caso esférico, los valores promedio no varían mucho cuando se aumenta el número de fotones. Sin embargo, las barras de error (i.e., la desviación estándar) sí disminuye considerablemente.

Comparación entre el modelo 1D y el modelo 3D

Aunque de las dos figuras de la sección anterior se pueden notar las diferencias, por razones de claridad se presenta la Fig. 9.6, donde se muestran los perfiles radiales de temperatura de excitación para el caso 3D (línea sólida y asteriscos) y el caso 1D (línea punteada). En este caso se utilizaron 2×10^6 fotones modelo. Por razones de claridad se omitieron las barras de error en el caso 1D, las cuales, vale la pena mencionarlo nuevamente, son extremadamente pequeñas.

De ésta gráfica pueden notarse algunos puntos importantes:

1. La temperatura de excitación en el caso 3D es sistemáticamente mayor. Esto se debe a que la pérdida de energía de un cuerpo es proporcional a su área, pero inversamente proporcional a su volumen. Así, para una esfera de radio R ,

$$\frac{A}{V_{\text{esf}}} = \frac{3}{4r}.$$

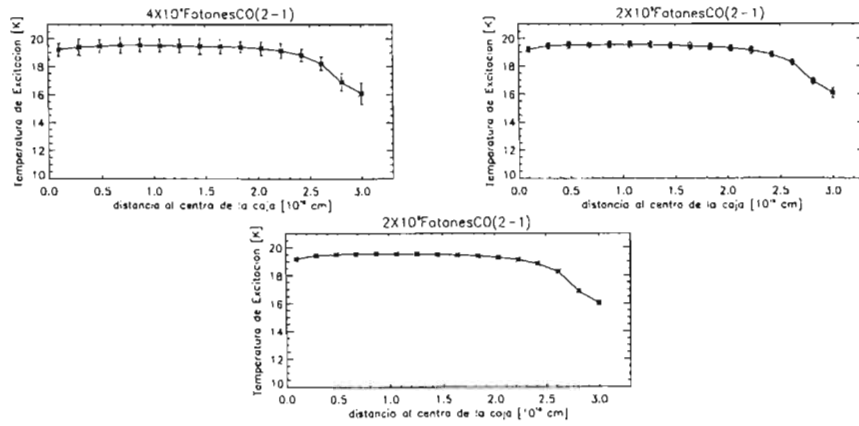


Figura 9.5: Igual que la Fig. 9.4, pero para la transición (2 – 1).

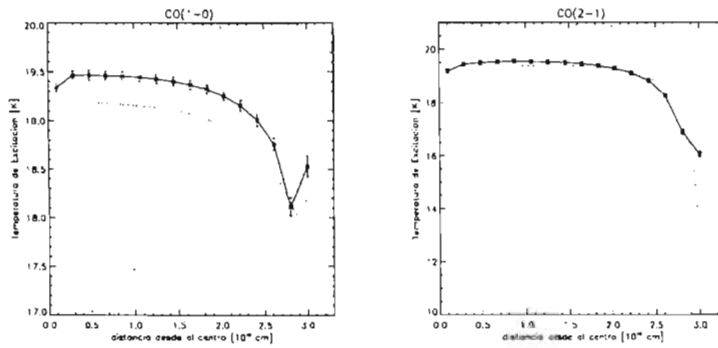


Figura 9.6: Perfil de temperatura de excitación para la transición 1 – 0 (izquierda) y 2 – 1 (derecha) del CO para los modelos 3D (línea sólida) y 1D (línea punteada). En estos ejemplos se utilizaron 2×10^6 fotones. En el caso 3D, los perfiles corren del centro de la caja a alguna de las caras del cubo.

mientras que para un cubo de lado $2R$

$$\frac{A}{V_{\text{cubo}}} = \frac{3}{r},$$

que es mayor por un factor de 4. En otras palabras, en el caso 3D, la probabilidad de que un fotón abandone una caja de lado $2R$ es menor que la probabilidad de que un fotón abandone una esfera de radio R .

2. Las barras de error en el caso esférico son considerablemente menores que en el caso 3D si se utiliza el mismo número de fotones modelo. Para obtener barras de error comparables entre el caso 1D y el 3D, es necesario incrementar el número de fotones modelo por un factor de entre 300 y 500.

Sin embargo, pese a estas diferencias, podemos considerar que el código montecarlo 3D funciona bien, ya que la temperatura de excitación no difiere significativamente de la calculada en el caso esférico. En el apéndice D se presenta el código montecarlo 3D.

ESTA TESIS NO SALI
DE LA BIBLIOTECA

Capítulo 10

Conclusiones

En la presente tesis se han estudiado brevemente las propiedades físicas de las nubes moleculares, así como el proceso de formación estelar. Se discutió primeramente cómo el modelo de fragmentación gravo-turbulenta explica una serie de hechos observacionales en los núcleos densos de nubes moleculares, mismos que al parecer son también explicados mediante el modelo estándar. Sin embargo, mientras el primero explica la formación misma de los núcleos densos, en el segundo la formación no se considera. Por el contrario, el modelo estándar supone configuraciones *ad hoc* de densidad y velocidad a partir de las cuales los núcleos colapsan de adentro hacia afuera.

En el modelo de fragmentación turbulenta, adicionalmente, se encuentra que tanto los núcleos densos como las nubes mismas que los albergan, son fluctuaciones de densidad producto del campo de velocidades turbulento. Las nubes y su subestructura se forman principalmente mediante la convergencia de flujos supersónicos, haciendo que éstas sean entidades mucho más transitorias. Prueba de ello son las mediciones del teorema virial, donde puede cuantificarse que las derivadas temporales en el teorema del virial son los términos dominantes, y donde los términos de superficie son siempre comparables con el término volumétrico equivalente, reflejando flujos de masa, momento y energía a través de la superficie de las nubes.

Estos hechos sugieren entonces que las nubes son mucho más transientes, y que la formación estelar es mucho más rápida de lo que se había pensado. De hecho, el modelo turbulento permite explicar el llamado problema post-T Tauri, el cual consiste en la ausencia de estrellas de unos 10 millones de años de edad (estrellas post-T Tauri) cerca de regiones de formación estelar activa.

Pese a los logros del escenario turbulento para explicar una variedad de propiedades observacionales de las nubes moleculares y sus núcleos densos, y a la creciente aceptación de este modelo entre la comunidad estudiosa de

la formación estelar, a la fecha no han sido analizados en detalle perfiles de línea de los núcleos densos producidos en las simulaciones numéricas de nubes moleculares, a fin de compararlos con las observaciones. Por esta razón, en el presente trabajo se realizaron modificaciones a un código montecarlo unidimensional (donde los perfiles de densidad y velocidad se definen de manera arbitraria), con el propósito de emplearlo utilizando los perfiles de densidad y velocidad de los núcleos en éstas simulaciones.

Aunque el paso final, el de producir los perfiles de línea mismos no fue realizado por razones de tiempo, en el presente trabajo se mostró que los perfiles de temperatura de excitación calculados utilizando una configuración 1D y una 3D con propiedades similares son similares, con lo cual podemos afirmar con cierta confianza que el código montecarlo 3D funciona de manera adecuada. El siguiente paso, el cual se realizará *a posteriori*, será el cálculo de los perfiles de línea utilizando estas temperaturas de excitación, y una comparación detallada con los perfiles de línea observados a diferentes núcleos densos y reportados en la literatura.

Apéndice A

Ecuaciones de la magnetohidrodinámica

Existen dos descripciones de un fluido como un medio continuo. En la primera, llamada lagrangiana, se emplea un marco de referencia que se mueve con el fluido, de manera que todas las variables dependen del tiempo. En la segunda, llamada euleriana, el marco de referencia está fijo, de manera que las variables dependen de la posición. Para deducir primeramente la versión lagrangiana introducimos la derivada material.

A.1. Derivada material

Sea α una variable del campo y considérese un sistema lagrangiano. Durante un intervalo de tiempo corto δt , el cambio en la variable α puede escribirse como:

$$\delta\alpha = \frac{\partial\alpha}{\partial t}\delta t + \frac{\partial\alpha}{\partial x}\delta x + \frac{\partial\alpha}{\partial y}\delta y + \frac{\partial\alpha}{\partial z}\delta z$$

de manera que

$$\frac{\delta\alpha}{\delta t} = \frac{\partial\alpha}{\partial t} + \frac{\partial\alpha}{\partial x}\frac{\delta x}{\delta t} + \frac{\partial\alpha}{\partial y}\frac{\delta y}{\delta t} + \frac{\partial\alpha}{\partial z}\frac{\delta z}{\delta t}.$$

El lado izquierdo de esta ecuación representa el cambio total en el intervalo de tiempo δt de la variable α en dicho sistema. Si δt tiende a cero se obtiene la derivada temporal de α en un sistema lagrangiano. Las cantidades $\delta x_i/\delta t$ se vuelven la componente en la dirección i de la velocidad, u_i . Por lo tanto si δt tiende a cero, se tiene

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{\partial\alpha}{\partial t} + u_i \frac{\partial\alpha}{\partial x_i}. \quad (\text{A.1})$$

La cantidad $d\alpha/dt$ es la derivada material o derivada lagrangiana. En esta ecuación se usa la convención de Einstein para la suma, donde índices repetidos se suman. Por ej.,

$$u_i \frac{\partial\alpha}{\partial x_i} = u_x \frac{\partial\alpha}{\partial x} + u_y \frac{\partial\alpha}{\partial y} + u_z \frac{\partial\alpha}{\partial z}.$$

A.2. Ecuaciones de la Magnetohidrodinámica

Sean, ρ , u_i , Φ , P , B_i y e la densidad, velocidad en la dirección i , el potencial gravitacional, la presión térmica, la componente i del campo magnético y la densidad de energía interna, respectivamente, y sea

$$T_{ij} = \frac{1}{4\pi} \left(B_i B_j - \frac{1}{2} B^2 \delta_{ij} \right) \quad (\text{A.2})$$

el tensor de esfuerzos electromagnéticos de Maxwell.

1. La ecuación de conservación de masa está dada por

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (\text{A.3})$$

y puede reescribirse, utilizando la derivada lagrangiana como

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (\text{A.4})$$

2. La ecuación de conservación de momento está dada por,

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} - \rho \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} + \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + \rho \nu_i \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) \quad (\text{A.5})$$

Utilizando la derivada lagrangiana para ρu_i ,

$$\frac{d(\rho u_i)}{dt} = \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + u_j \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_j}$$

, y despreciando los términos viscosos, la ec. (A.5) se escribe

$$\rho \frac{du_i}{dt} + u_i \frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} - \rho u_i \frac{\partial u_j}{\partial x_j}$$

$$\rho \frac{du_i}{dt} + u_i \left\{ \frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right\} = \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j}$$

y usando la ecuación de conservación de masa en esta última expresión, obtenemos

$$\rho \frac{du_i}{dt} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} - \rho \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} + \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} \quad (\text{A.6})$$

3. La ecuación de conservación de energía interna es:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i \Pi_{ij}) + u_i \rho f_i - \frac{\partial q_j}{\partial x_j}, \quad (\text{A.7})$$

donde $\rho u_i f_i$ es el trabajo hecho por la fuerza por unidad de masa f_i sobre el fluido, q_j es el flujo conductivo del calor, y donde Π_{ij} es el tensor de esfuerzos cortantes, el cual está relacionado con la presión mediante la relación

$$P_i = \Pi_{ij} n_j$$

4. Ecuación de campo magnético.

La ecuación que gobierna la evolución de campo magnético se lee:

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \nabla \times (u \times B) + \eta \nabla^2 B. \quad (\text{A.8})$$

5. Finalmente, la autogravedad del fluido se describe a través de la ecuación de Poisson:

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi G \rho. \quad (\text{A.9})$$

Estas ecuaciones permiten describir el comportamiento del medio interestelar bajo la aproximación de un solo fluido con tensor isotrópico, si los procesos físicos relevantes en el medio interestelar son modelados de manera adecuada como fuentes y sumideros en las ecuaciones de momento y energía.

Apéndice B

Inestabilidad Gravitacional

El análisis de inestabilidad gravitacional realizado Jeans (1902) describe cómo un medio auto-gravitante, homogéneo, infinito, isotérmico y sin campo magnético en reposo debe colapsar debido a su propio peso si la masa es suficientemente grande como para que la energía térmica no baste para sostener a la nube contra el colapso gravitacional.

Considérense las ecuaciones de masa y de momento en ausencia de campo magnético

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0, \quad (\text{B.1})$$

y

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \cdot \frac{\partial}{\partial x_j} u_i = -\frac{\partial}{\partial x_i} P - \rho \frac{\partial}{\partial x_i} \Phi. \quad (\text{B.2})$$

Si suponemos que el potencial gravitacional, la velocidad y la densidad pueden ser representadas por la suma del estado de equilibrio más una pequeña perturbación, de tal forma que $\Phi = \Phi_0 + \delta\Phi$, $u = u_0 + \delta u$ y $\rho = \rho_0 + \delta\rho$, la ecuación (B.1) queda

$$\frac{\partial(\rho_0 + \delta\rho)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_0 + \delta\rho)(\delta u)}{\partial x_i} = 0,$$

donde hemos hecho la suposición adicional de que $u_0 = 0$. Como las cantidades δu y $\delta\rho$ son muy pequeñas, cualquier producto entre ellas será despreciable, por lo que la ecuación de masa a primer orden queda

$$\frac{\partial \delta\rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho_0 \delta u}{\partial x_i} = 0. \quad (\text{B.3})$$

Similarmente, la ecuación (B.2) se leería

$$(\rho_0 + \delta\rho) \frac{\partial \delta u}{\partial t} + (\rho_0 + \delta\rho) \delta u_j \frac{\partial \delta u_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial P}{\partial x_i} - (\rho_0 + \delta\rho) \frac{\partial (\Phi_0 + \delta\Phi)}{\partial x_i}.$$

Despreciando las cantidades de segundo orden y considerando $P = C_s^2 \rho = C_s^2(\rho_0 + \delta\rho)$ (con C_s la velocidad del sonido en un medio isotérmico), se obtiene la ecuación linealizada de momento

$$\rho_0 \frac{\partial \delta u}{\partial t} = - \frac{\partial C_s^2 \delta\rho}{\partial x_i} - \rho_0 \frac{\partial \delta\Phi}{\partial x_i}. \quad (\text{B.4})$$

Obteniendo el gradiente de la ecuación (B.4)

$$\rho_0 \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial t} (\delta u) = - \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} C_s^2 \delta\rho - \rho_0 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \delta\Phi. \quad (\text{B.5})$$

Derivando ahora la ecuación (B.3) con respecto del tiempo obtenemos

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta\rho + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_0 \delta u = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_0 \delta u = - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta\rho.$$

Sustituyendo este resultado en (B.5)

$$- \frac{\partial^2 \delta\rho}{\partial t^2} = - \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} C_s^2 \delta\rho - \rho_0 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \delta\Phi,$$

y usando la ecuación de Poisson para las fluctuaciones¹: $\nabla^2 \delta\Phi = 4\pi G \delta\rho$ se obtiene

$$\frac{\partial^2 \delta\rho}{\partial t^2} = \rho_0 \left(\frac{C_s^2}{\rho_0} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \delta\rho + 4\pi G \delta\rho \right). \quad (\text{B.6})$$

Las soluciones de esta ecuación tienen la forma $\delta\rho = \delta\rho_0 e^{i(\omega t - kx)}$. Sustituyendo entonces estas soluciones en la ec. (B.6)

¹Este es el llamado “swindle” de Jeans: se considera que sólo las fluctuaciones de la densidad contribuyen a las fluctuaciones del potencial. Estrictamente hablando, esto es incorrecto, ya que $\nabla(\Phi_0 + \delta\Phi) = 4\pi G(\rho_0 + \delta\rho)$ implica que $\nabla(\delta\Phi) = 4\pi G(\rho_0 + \delta\rho)$. En otras palabras, la componente homogénea de la densidad también contribuye al potencial perturbado.

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta \rho = \delta \rho_0 e^{i(\omega t - kx)} (i\omega)(i\omega) = -\omega^2 \delta \rho_0 e^{i(\omega t - kx)},$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \delta \rho = \delta \rho_0 e^{i(\omega t - kx)} (-ik)(-ik) = -k^2 \delta \rho_0 e^{i(\omega t - kx)},$$

por lo que la ecuación (B.6) se reduce a

$$-\omega^2 \delta \rho_0 e^{i(\omega t - kx)} = \rho_0 \left(\frac{C_s^2}{\rho_0} \left(-k^2 \delta \rho_0 e^{i(\omega t - kx)} \right) \right) + 4\pi G (\delta \rho_0 e^{i(\omega t - kx)}). \quad (\text{B.7})$$

De aquí se tiene que

$$\omega^2 = C_s^2 (k^2 - k_j^2),$$

en donde

$$k_j^2 = \frac{4\pi G \rho_0}{C_s^2}.$$

De aquí puede verse que existen soluciones que decrecen exponencialmente (cuando $k > k_j$, ya que w real y el exponente de la ec. (B.7) es imaginario), y otras que aumentan exponencialmente (cuando $k < k_j$). Este último caso corresponde a la inestabilidad gravitacional, ya que cualquier perturbación hará que la densidad aumente sin límite.

La longitud y la masa de Jeans están definidas como:

$$\lambda_j = \frac{2\pi}{k_j} = \frac{2\pi}{\sqrt{\frac{4\pi G \rho_0}{C_s^2}}}$$

$$\lambda_j = C_s \sqrt{\frac{\pi}{G \rho_0}} \quad (\text{B.8})$$

y

$$M_j = \rho_0 \lambda^3 = \rho_0 \left(C_s \sqrt{\frac{\pi}{G \rho_0}} \right)^3$$

$$M_j = \rho_0^{1/2} \left(\frac{C_s^2 \pi}{G} \right)^{3/2}. \quad (\text{B.9})$$

Apéndice C

Derivación del espectro de k^{-2} para un campo de choques unidimensional

En el Capítulo 2 se mencionó que un campo dominado por choques presenta un espectro de energía de la forma k^{-2} , y que este tipo de espectro puede relacionarse con la relación

$$\delta V \propto R^\beta. \quad (\text{C.1})$$

con $\beta = 1/2$. Para verificar esto de manera cualitativa demostraremos primeramente que para un choque unidimensional, el espectro de energías es del tipo k^{-2} . Representemos entonces al choque por un campo de velocidades de la forma

$$v(x) \propto H(x - x_0)$$

donde $H(x - x_0)$ es la función escalón o de Heaviside. Para encontrar su representación en el espacio de Fourier, notemos que la derivada de esta función está dada por:

$$\frac{dv(x)}{dx} \propto \delta(x - x_0)$$

donde $\delta(x - x_0)$ es la función delta de Dirac. Entonces, la transformada de Fourier (FT) de la derivada espacial del campo de velocidades es una función constante:

$$FT_k(dv/dx) = cte$$

donde k es el número de onda. Como la transformada de Fourier de una derivada espacial es k veces la transformada de la función, entonces

$$FT_k(v) \propto k^{-1}.$$

de manera que el espectro de energía de un choque queda dado por

$$E(k) \propto (FT_k(v))^2 \propto k^{-2} \quad (\text{C.2})$$

Ahora bien, dado un espectro de energía $E(k)$, la energía cinética cuadrática media por unidad de masa contenida en modos de frecuencia mayores a $2\pi/l$ está dada por:

$$u_l^2 \sim \int_{2\pi/l}^{\infty} E(k) dk.$$

Si $E(k) \propto k^n$, con $n < -1$ entonces

$$u_l^2 \propto \left(\frac{2\pi}{l}\right)^{n+1}.$$

En particular, para $n = -2$ (espectro de choques, ec. [C.2])

$$u_l \propto l^{1/2}. \quad (\text{C.3})$$

Finalmente, el último paso, y a su vez el más incierto, consiste en asociar la “velocidad característica” u_l con $\Delta v(l)$, la dispersión de velocidades observada en una región de tamaño proyectado l en el plano del cielo. En el caso de u_l , ésta es, típicamente, la diferencia de velocidades característica entre puntos separados por una distancia l , obtenida como un promedio sobre todo el espacio, y está relacionada con la función de estructura del sistema (ver, por ej. Vázquez-Semadeni 1999). Por su parte, $\Delta v(l)$ es la dispersión de velocidades característica en el plano del cielo, observada en una región particular, utilizando un trazador dado e integrada a lo largo de la visual. Entonces, en principio, no hay razón para esperar que estas dos cantidades sean iguales, aunque si se supone que el tamaño de la región a lo largo de la línea de visión es comparable a su extensión en el plano del cielo, es de esperar que $\Delta v(l)$ sea, en promedio, similar a u_l .

Apéndice D

Codigo Montecarlo 3D

```
PROGRAM MONTECARLO
C IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C COMMON ITER,NITER
INCLUDE 'montecarlo.inc'

      OPEN(16,file='jb.trash', FORM = 'unformatted',
1      status='new',iostat=iopenstatus) ! the image file
      if(iopenstatus.gt.0) then
        write(*,*)'*** el archivo jb.trash ya existe'
        goto 9999
      endif

CALL INITIAL
ITER=1
DO WHILE (ITER.LE.NITER)
  CALL RUN
  CALL ADJUST
  DO IZ=1,NZ
    DO IY=1,NY
  DO IX=1,NX
    DENS3D_SIMPLE(IX,IY,IZ) = DENS3D(IX,IY,IZ)
    DO JT=1,NTRANS
      LLOW = LTRANS(JT,1)
      LUP = LTRANS(JT,2)
      IF(PN3D(IX,IY,IZ,LUP).GT.0..AND.
1      PN3D(IX,IY,IZ,LLOW).GT.0.)
2      TEX3D(IX,IY,IZ,JT) = -HK*FREQ(JT)/
3      (DLOG(PN3D(IX,IY,IZ,LUP)/(GG(JT)*
4      PN3D(IX,IY,IZ,LLOW))))
    ENDDO
  ENDDO
ENDDO
```

```
ENDDO
TIME = FLOAT(ITER)
OPEN(11,FILE='temp3d.dat',STATUS='UNKNOWN',FORM=
1                                     'UNFORMATTED')
WRITE(11)TIME,VELMAX,ILINE
WRITE(11)((((TEX3D(IX,IY,IZ,ijb),IX=1,NX),
1                                     IY=1,NY),IZ=1,NZ),ijb=1,ntransmax)
CLOSE(11)
OPEN(11,FILE='dens3d.dat',STATUS='UNKNOWN',FORM=
1                                     'UNFORMATTED')
WRITE(11)TIME,VELMAX,ILINE
WRITE(11)((((DENS3D_SIMPLE(IX,IY,IZ),IX=1,NX),
1                                     IY=1,NY),IZ=1,NZ)
CLOSE(11)

PRINT*,'ITER=',ITER
ITER=ITER+1
END DO
PRINT*,'ACABE...'
C CALL PROFIL

9999 continue

STOP
END

SUBROUTINE INITIAL

INCLUDE 'montecarlo.inc'
CHARACTER*40 FICH

* --- READ INPUT DATA
* CALLS THE SUBROUTINE MOLECULE.FOR TO DETERMINE MOLECULAR PARAMETERS
*
NAMELIST/INPUTDATA_JB/ SEED, NPHOT, NITER, NEMPTY, NITEMP,
1   TREF, MOLEC,NLEVEL, NTRANS, TBG, FRACO, XMO,
2   NV,TK_RUN,XLO,FILEDENS,FILEVX,FILEVY,FILEVZ,OUTX,OUTY,OUTZ

OPEN(1,FILE='montecarlo.par.bernes',STATUS='OLD')
READ(1,INPUTDATA_JB)
CLOSE(1)

print*,SEED, NPHOT, NITER, NEMPTY, NITEMP,
1   TREF, MOLEC,NLEVEL, NTRANS, TBG, FRACO, XMO,
2   NV,TK_RUN,XLO,FILEDENS,FILEVX,FILEVY,FILEVZ,OUTX,OUTY,OUTZ
OPEN(27,FILE='parametros_usados.dat',STATUS='UNKNOWN')
WRITE(27,*)'SEED = ',SEED
WRITE(27,*)'NPHOT = ',NPHOT
WRITE(27,*)'NITER = ',NITER
WRITE(27,*)'NEMPTY = ',NEMPTY
```

```

WRITE(27,*)'NITEMP = ',NITEMP
WRITE(27,*)'TREF = ',TREF
WRITE(27,*)'MOLEC = ',MOLEC
WRITE(27,*)'NLEVEL = ',NLEVEL
WRITE(27,*)'NTRANS = ',NTRANS
WRITE(27,*)'TBG = ',TBG
WRITE(27,*)'FRACO = ',FRACO
WRITE(27,*)'XMO = ',XMO
C WRITE(27,*)'TIME_RUN = ',TIME_RUN
WRITE(27,*)'NV = ',NV
WRITE(27,*)'TK_RUN = ',TK_RUN
WRITE(27,*)'XLO = ',XLO
WRITE(27,*)'FILEDENS = ',FILEDENS
WRITE(27,*)'FILEVX = ',FILEVX
WRITE(27,*)'FILEVY = ',FILEVY
WRITE(27,*)'FILEVZ = ',FILEVZ
WRITE(27,*)'OUTX = ',OUTX
WRITE(27,*)'OUTY = ',OUTY
WRITE(27,*)'OUTZ = ',OUTZ
WRITE(*,*)'FRACO = ',FRACO
WRITE(*,*)'NPHOT = ',NPHOT

```

* --- INITIAL CLOUD AND MOLECULAR PARAMETERS

```
PIXELSIZE=XLO/FLOAT(NX)
```

```
CALL CLOUD_PARAMETERS
```

```
CALL MOLECULE
```

* --- MISCELLANEOUS CONSTANTS

```

*  CONST  = C^2(CM/SEG)*C/(8*PI*SQRT(PI))
*  BCONST = 4*PI^2/(H*C(KM/S)*RMAX^3)
*  TVKM   = 2*10^-10 *K* AVOGADRO/AMASS
*  HK     = H/K
CONST = 6.049D24          ! CM^2*S^-2*KM/S
BCONST = (1.5/PI)*(2.70874D07/XLO)**3    ! 1/(ERG*S*KM*S*L_CUBO^3)
TVKM   = 0.01651/AMASS      ! ERG/K*MASAS MOLEC
HK     = 4.799D-11          ! S*K
EPS    = 1.D-13              ! USADA PARA LA TOLERANCIA EN

```

```
VXMEAN=0.
```

```
VYMEAN=0.
```

```
VZMEAN=0.
```

```
DO IZ=1,NZ
```

```
  DO IY=1,NY
```

```
    DO IX=1,NX
```

```
    VXMEAN=VXMEAN+VX3D(IX,IY,IZ)
```

```
    VYMEAN=VYMEAN+VY3D(IX,IY,IZ)
```

```
    VZMEAN=VZMEAN+VZ3D(IX,IY,IZ)
```

```
  ENDDO

```

```

      ENDDO
ENDDO
VXMEAN = VXMEAN/FLOAT(NX)**3
VYMEAN = VYMEAN/FLOAT(NX)**3
VZMEAN = VZMEAN/FLOAT(NX)**3

SIGMAVX=0.
SIGMAVY=0.
SIGMAVZ=0.
XMINDWIDIN=1.E10

DO IZ=1,NZ
  DO IY=1,NY
    DO IX=1,NX
      VX3D(IX,IY,IZ)=VX3D(IX,IY,IZ)-VXMEAN
      VY3D(IX,IY,IZ)=VY3D(IX,IY,IZ)-VYMEAN
      VZ3D(IX,IY,IZ)=VZ3D(IX,IY,IZ)-VZMEAN
      SIGMAVX = SIGMAVX + VX3D(IX,IY,IZ)**2
      SIGMAVY = SIGMAVY + VY3D(IX,IY,IZ)**2
      SIGMAVZ = SIGMAVZ + VZ3D(IX,IY,IZ)**2
      DWIDIN3D(IX,IY,IZ) = DSQRT(1.DO/(TVKM*TK3D(IX,IY,IZ) +
1                                     V_MICROTURB3D(IX,IY,IZ)**2))

      IF(DWIDIN3D(IX,IY,IZ).LT.XMINDWIDIN) XMINDWIDIN =
1                                     DWIDIN3D(IX,IY,IZ)

    ENDDO
  ENDDO
ENDDO
SIGMA = SQRT((SIGMAVX+SIGMAVY+SIGMAVZ)/(FLOAT(NX)**3-1 ) )
passb=7.5

* --- INITIAL POPULATIONS. USE BOLTZMANN EQUATION
DO IZ=1,NZ
  DO IY=1,NY
    DO IX=1,NX
      PN3D(IX,IY,IZ,1)=1.
    DO JT=1,NTRANS
      PN3D(IX,IY,IZ,JT+1) = G(JT+1)/G(JT)*
1          EXP(-HK*FREQ(JT)/TK3D(IX,IY,IZ))
      PN3D(IX,IY,IZ,JT+1)= PN3D(IX,IY,IZ,JT)*
1          PN3D(IX,IY,IZ,JT+1)
      PN3D(IX,IY,IZ,1) = PN3D(IX,IY,IZ,1)+
1          PN3D(IX,IY,IZ,JT+1)
    END DO
    PN3D(IX,IY,IZ,1) = FRAC3D(IX,IY,IZ)*DENS3D(IX,IY,IZ)/
1          PN3D(IX,IY,IZ,1)
  DO JL=2,NLEVEL
    SSTIM3D(IX,IY,IZ,JL)=0.
    PN3D(IX,IY,IZ,JL) = PN3D(IX,IY,IZ,1)*

```

```

1                                PN3D(IX,IY,IZ,JL)
END DO
  ENDDO
  ENDDO
ENDDO

*   EN LA ULTIMA DE LAS ECUACIONES DE EQUILIBRIO ESTADISTICO PARA CADA
*   CAPA, LA SUMA DE LAS POBLACIONES DE TODOS LOS NIVELES DEBE PONERSE
*   IGUAL A LA DENSIDAD TOTAL DE NUMERO DEL ATOMO O LA MOLECULA. PARA
*   PREPARAR ESTO, TODOS LOS ELEMENTOS DE LA ULTIMA FILA DE CADA MATRIZ
*   C(M,...,...) SE IGUALAN A 1.
DO IZ=1,NZ
  DO IY=1,NY
    DO IX=1,NX
      DO J=1,NLEVEL
        C3D(IX,IY,IZ,NLEVEL,J)=1.DO
      END DO
    END DO
  ENDDO
ENDDO

*   ANADIMOS LAS TASAS DE DESEXCITACION ESPONTANEA Y TASAS DE EXCITA-
*   CION Y DESEXCITACION INDUCIDA DEBIDAS AL CAMPO DE REFERENCIA (SI LO
*   HAY) A LOS ELEMENTOS DE LAS MATRICES C(M,...,...).
DO JT=1,NTRANS
  LLOW = LTRANS(JT,1)
  LUP  = LTRANS(JT,2)
  E    = 0.DO
  IF(TREF(JT).NE.0.) E=1.DO/(EXP(HK*FREQ(JT)/TREF(JT))-1.DO)
  GG(JT) = G(LUP)/G(LLOW)
  DOWN   = AEM(JT)*(1.DO+E)
  UP     = AEM(JT)*E*GG(JT)
  DO IZ=1,NZ
    DO IY=1,NY
      DO IX=1,NX
        C3D(IX,IY,IZ,LLOW,LLOW)=C3D(IX,IY,IZ,LLOW,LLOW)-UP
        C3D(IX,IY,IZ,LLOW,LUP) =C3D(IX,IY,IZ,LLOW,LUP)+DOWN
        IF(LUP.NE.NLEVEL) THEN
          C3D(IX,IY,IZ,LUP,LUP)=C3D(IX,IY,IZ,LUP,LUP)-DOWN
          C3D(IX,IY,IZ,LUP,LLOW)=C3D(IX,IY,IZ,LUP,LLOW)+UP
        END IF
      END DO
    END DO
  ENDDO
END DO
ENDDO

VOL=((1.)/FLOAT(NX))*3

*   CALCULAMOS, PARA CADA TRANSICION, EL NUMERO TRUOUT (DIVIDIDO POR
*   RMAX**3 -VER MAS ARRIBA) DE LOS FOTONES DE RADIACION DE FONDO EN

```

```
* EL ANCHO DE BANDA (PASSB) QUE ENTRAN EN LA REGION DESDE EL EXTE-
* RIOR CADA SEGUNDO. CALCULAMOS EL NUMERO CORRESPONDIENTE REFOUT DE
* FOTONES DEL CAMPO DE REFERENCIA. OUTPH ES LA DIFERENCIA ENTRE ES-
* TOS NUMEROS Y RATIM ES EL COCIENTE DE TRUOUT A OUTPH. TRUCEN, REF-
* CEN Y RATC SON LOS NUMEROS Y COCIENTES CORRESPONDIENTES PARA LA
* RADIACION PROCEDENTE DE LA REGION CENTRAL.

* CALCULAMOS ACONST PARA CADA TRANSICION.
* ACONST=C^2(CM/S)*C(KM/S)*(COEF. A DE EINSTEIN)/(8*PI*SQRT(PI)*FREC^3)

FA = XLO**2*PASSB*BCONST
DO JT=1,NTRANS
  ST(JT) = (2.45206D-16*FREQ(JT))**3
  FB = 0.DO
  IF(TBG.NE.0.) FB=1.DO/(EXP(HK*FREQ(JT)/TBG)-1.DO)
  FC = 0.DO
  IF(TREF(JT).NE.0.) FC=1.DO/(EXP(HK*FREQ(JT)/TREF(JT))-1.DO)
  FD = ST(JT)*FA
  TRUOUT = FD*FB
  REFOUT = FD*FC
  OUTPH(JT)= TRUOUT-REFOUT
  RATIM(JT)= 0.DO
  IF(OUTPH(JT).NE.0.) RATIM(JT)=TRUOUT/OUTPH(JT)
  FB = 0.DO
  ACONST(JT) = CONST*AEM(JT)/(FREQ(JT)**3)
END DO
RETURN
END

SUBROUTINE CLOUD_PARAMETERS
INCLUDE 'montecarlo.inc'
X0=float(nx+1)/2
Y0=float(ny+1)/2
Z0=float(nz+1)/2
SIGMA=3.
TIME = 1.
DENSMAX=2000.
dens_tenue=2000.

DO IX=1,NX
  DO IY=1,NY
    DO IZ=1,NZ
      R2 = ((FLOAT(IX)-X0)**2+(FLOAT(IY)-Y0)**2+
1          (FLOAT(IZ)-Z0)**2)

      DENS3D(IX,IY,IZ)=dens_tenue
      IF(R2.LE.225) DENS3D(IX,IY,IZ)=DENSMAX

      TK3D(IX,IY,IZ)=TK_RUN
      FRAC3D(IX,IY,IZ)=FRACO
```

```
V_MICROTURB3D(IX,IY,IZ)=1.

VX3D(IX,IY,IZ)=0.
VY3D(IX,IY,IZ)=0.
VZ3D(IX,IY,IZ)=0.
    ENDDO
  ENDDO
ENDDO
x0 = x0*pixelsize
y0 = y0*pixelsize
z0 = z0*pixelsize

RETURN
END

SUBROUTINE MOLECULE
* --- READ MOLECULAR PARAMETERS FROM FILE MOLECULE.DAT
*
* HISTORY:
*
* 04/25/96 - MT - CREATED RECYCLING IRC VERSION
*
INCLUDE 'montecarlo.inc'

CHARACTER ASTERISK*1,NAME*12
NAMELIST/MOLECDATA/AMASS,BROT,DROT,HROT,XMU,MOLTYPE

* INPUT MOLECULAR PARAMETERS

OPEN(1,FILE='molecule.dat',STATUS='OLD')
DO WHILE (.TRUE.)
  READ(1,'(2A)',END=10) ASTERISK,NAME
  IF ((ASTERISK.EQ.'*').AND.(NAME.EQ.MOLEC)) GO TO 20
END DO
10 STOP ' MOLECULE-ERROR: MOLECULE NOT FOUND IN MOLECULE.DAT'
20 READ(1,MOLECDATA)
CLOSE (1)
* GET QUANTUM NUMBERS FOR LEVELS, STATISTICAL WEIGHTS, ALLOWED TRANSITIONS
CALL QUANTUM_NUMBERS
* GET LEVEL ENERGIES/FREQUENCIES
CALL GET_ENERGY
* GET EINSTEIN COEFFICIENTS
CALL EINSTEIN_A
* GET COLLISIONAL COEFFICIENTS IN A MATRIX. THEN, PREPARE C MATRIX.
DO IZ=1,NZ
  DO IY=1,NY
    DO IX=1,NX

      TKIN=TK3D(IX,IY,IZ)
```

```
CALL COLLISIONS
DO K=1,NLEVEL
  AB=0.DO
  DO J=1,NLEVEL
    AB=AB+A(K,J)
  END DO
  DO J=1,NLEVEL-1
    C3D(IX,IY,IZ,J,K)=DENS3D(IX,IY,IZ)*A(K,J)
  END DO
  C3D(IX,IY,IZ,k,k)=-DENS3D(IX,IY,IZ)*AB
END DO
  END DO
ENDDO
```

```
RETURN
END
```

SUBROUTINE QUANTUM_NUMBERS

```
* --- CALCULATE QUANTUM NUMBERS AND STATISTICAL WEIGHTS FOR EACH LEVEL.
* ALSO, DECIDE WHAT TRANSITIONS ARE ALLOWED
*
* HISTORY:
*
* 04/25/96 - MT - FIRST WRITTEN
INCLUDE 'montecarlo.inc'
```

```
IF (MOLTYPE.EQ.'lr') THEN ! LINEAR ROTORS ONLY
```

```
DO I=1,NLEVEL
  XJ(I)=I-1 ! QUANTUM J NUMBER IS ONLY NUMBER
  G(I)=2*XJ(I)+1
END DO
```

```
IF (NTRANS.NE.(NLEVEL-1)) THEN ! CHECK NUMBER OF TRANSITIONS
  WRITE(*,50)
50   FORMAT('QUANTUM_NUMBERS-ERROR: WRONG NUMBER OF TRANS.')
  PAUSE
END IF
```

```
DO I=1,NTRANS
  LTRANS(I,1)=I ! LOWER LEVEL OF TRANSITION
  LTRANS(I,2)=I+1 ! UPPER LEVEL OF TRANSITION
  GG(I)=G(LTRANS(I,2))/G(LTRANS(I,1)) ! RATIO STAT. WGHT.
END DO
```

```
ELSE
  WRITE(*,100)
100  FORMAT(' QUANTUM_NUMBERS-ERROR: LINEAR ROTORS ONLY')
  STOP
```

END IF

RETURN

END

SUBROUTINE GET_ENERGY

*

* --- CALCULATE ENERGY FOR EACH MOLECULAR LEVEL AND FREQUENCY FOR EACH
* TRANSITION

*

* HISTORY:

*

* 04/25/96 - MT - FIRST WRITTEN

*

INCLUDE 'montecarlo.inc'

IF (MOLTYPE.EQ.'lr') THEN ! LINEAR ROTORS ONLY

DO I=1,NLEVEL

ENERGY(I) = BROT*XJ(I)*(XJ(I)+1) - ! ROTATION (LINEAR)

2 DROT*(XJ(I)*(XJ(I)+1))**2 + ! QUADRATIC CENTR. DISTORTION

3 HROT*(XJ(I)*(XJ(I)+1))**3 ! CUBIC CENTR. DISTORTION

END DO

DO I=1,NTRANS

FREQ(I)=ENERGY(LTRANS(I,2))-ENERGY(LTRANS(I,1))

END DO

DO I=1,NLEVEL

ENERGY(I)=ENERGY(I)*4.7997132E-11 ! FROM HZ TO K

END DO

ELSE

WRITE(*,100)

100 FORMAT(' ENERGY-ERROR: LINEAR ROTORS ONLY')

STOP

END IF

RETURN

END

SUBROUTINE EINSTEIN_A

*

* --- CALCULATE EINSTEIN COEFFICIENTS FOR EACH TRANSITION

*

* HISTORY:

*

* 04/25/96 - MT - FIRST WRITTEN*

INCLUDE 'montecarlo.inc'

```
IF (MOLTYPE.EQ.'lr') THEN                                ! LINEAR ROTORS ONLY

  DO I=1,NTRANS
    I2=LTRANS(I,2)
    I1=LTRANS(I,1)
    S = XJ(I2)
    AEM(I)=1.05295E-7*(ENERGY(I2)-ENERGY(I1))**3*XMU**2*
    1      S/(2.0*XJ(I2)+1.0)
  END DO

ELSE
  WRITE(*,100)
100  FORMAT(' EINSTEIN_A-ERROR: LINEAR ROTORS ONLY')
  STOP
END IF

END

SUBROUTINE COLLISIONS
*
* --- CALCULATE COLLISIONAL COEFFICIENTS USING INTERPOLATION EQUATIONS
*
* HISTORY:
*
* 04/25/96 - MT - RECYCLED FROM IRC ROUTINE
*
INCLUDE 'montecarlo.inc'

DIMENSION A_SIS_PARA(6),A_SIS_ORTHO(6)
DIMENSION B_SIS_PARA(6),B_SIS_ORTHO(6)
DIMENSION A_CS(20),B_CS(20),C_CS(20)

      INTEGER DELTAJ

* CS COEFF

DATA A_CS/10.35759,11.03258,8.883451,9.641931,7.809433,
1      9.199441,7.425523,8.857485,7.884091,8.701254,
2      9.093239,9.102847,10.15139,10.41153,10.98320,
3      11.65907,12.23172,12.56786,12.98000,13.46871/

DATA B_CS/-14.04851,-13.87741,-11.72670,-12.36264,-10.37700,
1      -11.94096,-9.617364,-11.83214,-10.09489,-11.66852,
2      -12.07070,-12.20918,-13.60956,-14.00692,-14.73210,
3      -15.58413,-16.36966,-16.78471,-17.32250,-17.99528/

DATA C_CS/5.088159,4.820635,3.472995,3.672912,2.615620,
1      3.154852, 2.137866,2.902678,2.189489,2.616295,2.699072,
2      2.661824, 3.018327,3.059366,3.227232,3.388685,3.575172,
```

3 3.667707, 3.788750, 3.972845/

* SIS/CO COEFF

DATA A_SIS_ORTHO/1.602E-10, 2.369E-10, 5.876E-11, 7.02E-11,
1 2.948E-11, 2.655E-11/

DATA B_SIS_ORTHO/1.809, 1.076, 1.336, 0.9683, 1.167, 0.9850/

DATA A_SIS_PARA/1.191E-10, 1.685E-10, 5.021E-11, 5.447E-11,
1 4.201E-11, 2.347E-11/

DATA B_SIS_PARA/1.412, 1.199, 1.244, 1.305, 1.684, 1.427/

C --- FROM OLD GREEN AND THADDEUS CO COEFF:

C DATA A_SIS_ORTHO/1.107E-10, 1.867E-10, 0.793E-10, 0.667E-10,
C 1 0.867E-10, 0.0/

C DATA B_SIS_ORTHO/1.67, 1.47, 1.85, 1.55, 2.24, 0.0/

C DATA A_SIS_PARA/1.107E-10, 1.867E-10, 0.793E-10, 0.667E-10,
C 1 0.867E-10, 0.0/

C DATA B_SIS_PARA/1.67, 1.47, 1.85, 1.55, 2.24, 0.0/

C

* --- ##### CS #####

IF ((MOLEC.EQ.'CS').OR.(MOLEC.EQ.'CS')) THEN

DO IU=2, NLEVEL ! UPPER LEVEL

DO IL=1, IU-1 ! LOWER LEVEL

JU=XJ(IU)

JL=XJ(IL)

DELTAJ = JU-JL

IF (DELTAJ.LE.20) THEN

FF=1.1757*(JU*(JU+1)-JL*(JL+1))/TKIN ! E/KT

A(IU, IL) = (2.0*JL+1.0)/(2.0*JU+1.0)/1E11*FF

1 *EXP(A_CS(DELTAJ)+B_CS(DELTAJ)*FF**0.25

2 +C_CS(DELTAJ)*FF**0.5)

END IF

END DO

END DO

DO I2=2, NLEVEL

DO I1=1, I2-1

J2=XJ(I2)

J1=XJ(I1)

A(I1, I2) = (2.0*J2+1.0)/(2*J1+1.0)*A(I2, I1)* ! DETAILED BAL.

1 EXP(-1.1757*(J2*(J2+1.0)-J1*(J1+1.0))/TKIN)

END DO

END DO

* --- ##### HCO+ #####


```

      1      0.75*F1*A_SIS_ORTHO(JU-JL)*P*
      1 EXP(-B_SIS_ORTHO(JU-JL)*SQRT(FF))
ELSE
      A(IU,IL) = 0
END IF
      END DO
      END DO

* --- USE DATAILED BALANCE FOR EXCITATIONS

      DO IU=2,NLEVEL ! UPPER LEVEL
      DO IL=1,IU-1 ! LOWER LEVEL
      JU=XJ(IU)
      JL=XJ(IL)
      FF=(F2/TKIN)*(JU*(JU+1)-JL*(JL+1)) ! E/KT
      A(IL,IU) = A(IU,IL)*
      1 (2.0*JU+1.0)/(2.0*JL+1.0)*EXP(-FF)
      END DO
      END DO

END IF

RETURN
END
SUBROUTINE RUN
INCLUDE 'montecarlo.inc'

*   USES RND.FOR TO GENERATE RANDOM NUMBERS,
*   V.FOR TO COMPUTE THE RADIAL VELOCITY OF EACH SHELL,
*   AND STEP.FOR TO GENERATE THE PHOTON STEP LENGTH

REAL*8 CCONST3D(NX,NY,NZ,NTRANSMAX),
      1 CRFCST3D(NX,NY,NZ,NTRANSMAX),
      1 DPNREF3D(NX,NY,NZ,NTRANSMAX),DPNTRU3D(NX,NY,NZ,NTRANSMAX),
      2 EM3D(NX,NY,NZ),
      2 NRDIFF3D(NX,NY,NZ,NTRANSMAX),OUTM(NTRANSMAX),
      3 RATCEN(NTRANSMAX),
      3 RATEM3D(NX,NY,NZ,NTRANSMAX),RATIO3D(NX,NY,NZ,NTRANSMAX),
      4 RATOUT(NTRANSMAX),
      4 RATRCN(NTRANSMAX),RATRUT(NTRANSMAX),WREF(NTRANSMAX),
      5 WTRUE(NTRANSMAX),NRREF,NRTRUE

EQUIVALENCE (NRDIFF3D(1,1,1,1),RATIO3D(1,1,1,1)),
      1 (OUTM(1),RATOUT(1))
C 1 (CENM(1),RATCEN(1))

CEN=0.D0
OUT=0.D0
OUT=0.D0

```

```
DO IZ=1,NZ
  DO IY=1,NY
    DO IX=1,NX
      EM3D(IX,IY,IZ)=0.DO
      ENDDO
    ENDDO
  END DO
```

```
C  CALCULAMOS, PARA CADA TRANSICION Y CADA CAPA, EL NUMERO TOTAL
C  NTRUE DE EMISIONES DE FOTONES REALES QUE TIENEN LUGAR POR SE-
C  GUNDO, Y EL NUMERO CORRESPONDIENTE NRREF QUE SE OBTENDRIA SI
C  LA TEMPERATURA DE EXCITACION FUESE IGUAL A LA TEMPERATURA TREF
C  DEL CAMPO DE RADIACION DE REFERENCIA. NRDIFF ES LA DIFERENCIA
C  ENTRE ESTOS NUMEROS Y RATEM ES EL COCIENTE ENTRE NTRUE Y
C  NRDIFF. CCONST, CRFCST, DPNTRU Y DPNREF SERAN UTILIZADOS MAS
C  TARDE EN LOS CALCULOS DE LAS PROFUNDIDADES OPTICAS Y TASAS
C  DE EMISION ESTIMULADA. SI EL COEFICIENTE DE ABSORCION ES
C  CERO EN ALGUN LUGAR DE LA REGION, SE IMPRIME UN MENSAJE DE
C  AVISO Y LA EJECUCION SE DETIENE.
```

```
* --- START TRANSITIONS LOOP
```

```
DO JT=1,NTRANS
  LLOW  = LTRANS(JT,1)
  LUP   = LTRANS(JT,2)
  TOTEMP = 0.DO
  E      = 0.DO
  IF(TREF(JT).NE.0.) E=DEXP(-HK*FREQ(JT)/TREF(JT))
  DO IZ=1,NZ
    DO IY=1,NY
      DO IX=1,NX
        NRTRUE = PN3D(IX,IY,IZ,LUP)*AEM(JT)*VOL
        NRREF  = PN3D(IX,IY,IZ,LLOW)*E*AEM(JT)*VOL*GG(JT)
        NRDIFF3D(IX,IY,IZ,JT)= NRTRUE-NRREF
        RATEM3D(IX,IY,IZ,JT) = 0.DO
        IF(NRDIFF3D(IX,IY,IZ,JT).NE.0.)
          1      RATEM3D(IX,IY,IZ,JT)=NRTRUE/NRDIFF3D(IX,IY,IZ,JT)
        TOTEMP = TOTEMP+ABS(NRDIFF3D(IX,IY,IZ,JT))
        FA = PN3D(IX,IY,IZ,LLOW)*GG(JT)-PN3D(IX,IY,IZ,LUP)

        IF(FA.EQ.0.) then
          print*,'pn3d(' ,ix,',', ,iy,',', ,iz,',', ,llow,')=',pn3d(ix,iy,iz,llow)
          print*,'gg=',gg
          print*,'pn3d(ix,iy,iz,lup)=' ,pn3d(ix,iy,iz,lup)
          print*,'dens3d(ix,iy,iz)=' ,dens3d(ix,iy,iz)
          STOP 'EN RUN.  ABSORPTION COEFF = 0'
        endif
        FB = PN3D(IX,IY,IZ,LLOW)*(1.DO-E)*GG(JT)
        DPNTRU3D(IX,IY,IZ,JT) = 1.DO/FA
        DPNREF3D(IX,IY,IZ,JT) = 1.DO/FB
      END DO
    END DO
  END DO
```

```

      CCONST3D(IX,IY,IZ,JT) = ACONST(JT)*FA*
      1                               DWIDIN3D(IX,IY,IZ)
      CRFCST3D(IX,IY,IZ,JT) = ACONST(JT)*FB*
      1                               DWIDIN3D(IX,IY,IZ)

ENDDO
      ENDDO
END DO

C   PARA CADA TRANSICION, F(JT) INDICA EL NUMERO DE FOTONES
C   REALES REPRESENTADOS POR UN FOTON MODELO DE PESO 1
*   (TOTEMP = TOTAL EMMITTED PHOTONS)

      TOTEMP = TOTEMP+DABS(OUTPH(JT)) !+DABS(CENPH(JT))
      F(JT) = TOTEMP/DFLOAT(NPHOT)

C   CALCULAMOS EL NUMERO DE FOTONES MODELO QUE REPRESENTAN SIMUL-
C   TANEAMENTE A TODAS LAS TRANSICIONES. EM(M), CEN Y OUT SON LAS
C   CANTIDADES DE TALES FOTONES MODELO QUE SERAN EMITIDAS EN LAS
C   CAPAS E INYECTADAS DESDE LA REGION CENTRAL Y DESDE EL EXTERIOR,
C   RESPECTIVAMENTE.

      FA=DFLOAT(NPHOT)/(TOTEMP*NTRANS)

      DO IZ=1,NZ
        DO IY=1,NY
          DO IX=1,NX
            NRDIFF3D(IX,IY,IZ,JT)=NRDIFF3D(IX,IY,IZ,JT)*FA
            EM3D(IX,IY,IZ)=EM3D(IX,IY,IZ)+
            1                               ABS(NRDIFF3D(IX,IY,IZ,JT))
          ENDDO
        ENDDO
      END DO

      OUTM(JT) = OUTPH(JT)*FA
      OUT = OUT+ABS(OUTM(JT))

ENDDO

* --- END TRANSITIONS LOOP

C   UN FOTON MODELO QUE REPRESENTA SIMULTANEAMENTE A TODAS LAS TRAN-
C   SICIONES PUEDE CONSIDERARSE COMO UN CONJUNTO DE FOTONES MODELO
C   (UNO PARA CADA TRANSICION), IDENTICOS UNOS A OTROS EXCEPTO EN SUS
C   PESOS. LOS COCIENTES RATIO(M,JT), RATCEN(JT), Y RATOUT(JT) ENTRE
C   ESTOS PESOS INDIVIDUALES Y EL PESO "PROMEDIO" ASIGNADO AL FOTON
C   MODELO QUE REPRESENTA A TODAS LAS TRANSICIONES, SE CALCULAN MAS
C   ABAJO. MAS AUN, CADA UNO DE LOS PESOS INDIVIDUALES PUEDE VERSE
C   COMO LA DIFERENCIA ENTRE LOS PESOS DE UN FOTON MODELO QUE REPRE-
C   SENTA EL CAMPO VERDADERO Y UNO QUE REPRESENTA EL CAMPO DE REFE-

```

```

C  RENCIA.  LOS VALORES RATEM(M,JT) SE CAMBIAN POR LOS COCIENTES
C  ENTRE LOS PESOS DE LOS FOTONES MODELO "VERDADEROS" INDIVIDUALES
C  Y EL PESO DEL FOTON MODELO "PROMEDIO" MENCIONADO ANTERIORMENTE.
C  RATRCN(JT) Y RATRUT(JT) SON LOS COCIENTES CORRESPONDIENTES DE LA
C  RADIACION DE LA REGION CENTRAL Y DEL EXTERIOR.

      DO IZ=1,NZ
        DO IY=1,NY
          DO IX=1,NX
            FB = 0.DO
            IF(EM3D(IX,IY,IZ).NE.0.) FB=NTRANS/EM3D(IX,IY,IZ)
            DO JT=1,NTRANS
              RATIO3D(IX,IY,IZ,JT) = NRDIFF3D(IX,IY,IZ,JT)*FB
              RATEM3D(IX,IY,IZ,JT) = RATIO3D(IX,IY,IZ,JT)*
                1 RATEM3D(IX,IY,IZ,JT)
            END DO
          END DO
        ENDDO
      ENDDO

      FB=0.DO
      IF(OUT.NE.0.) FB=NTRANS/OUT
      DO JT=1,NTRANS
        RATOUT(JT) = OUTM(JT)*FB
        RATRUT(JT) = RATOUT(JT)*RATIM(JT)
      END DO

      print*, 'emmitting photons from the inside'
* --- SIMULATION STARTS.
* --- FIRST, SIMULATE CLOUD PHOTONS
C PRINT*, 'SIMULATION STARTS'
      DO MAZ=1,NZ
        DO MAY=1,NY
          DO MAX=1,NX

            NPHOTMA=INT(EM3D(MAX,MAY,MAZ))+1 !NUMBER OF PHOTONS FROM SHELL MA
            DO IPHOT=1,NPHOTMA !BEGIN RANDOM PHOTONS LOOP
              WODIFF=1
              IF(IPHOT.EQ.NPHOTMA)WODIFF=1-(NPHOTMA-
                1 EM3D(MAX,MAY,MAZ)) !FRACTION OF PHOTON
              DO JT=1,NTRANS !GET WEIGHTS FOR EACH TRANSIT.
                WTRUE(JT) = WODIFF*RATEM3D(MAX,MAY,MAZ,JT)
                WREF(JT) = WTRUE(JT)-WODIFF*
                  1 RATIO3D(MAX,MAY,MAZ,JT)
              C 1 NRDIFF3D(MAX,MAY,MAZ,JT)
            END DO
          * ASSIGN RANDOM PHOTON PROPERTIES
            MIX = MAX !CURRENT SHELL OF PHOTON
            MIY = MAY !CURRENT SHELL OF PHOTON
            MIZ = MAZ !CURRENT SHELL OF PHOTON

```

```

X = (MIX-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
Y = (MIY-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
Z = (MIZ-1+RND(SEED))*PIXELSIZE

XSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.1
YSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.1
ZSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.1
xDS = SQRT(XSTEP**2 + YSTEP**2 + ZSTEP**2)

DV1 = DSQRT(-DLOG(RND(SEED)))/
1          DWIDIN3D(MIX,MIY,MIZ)

DV2 = DSIN(TPI*RND(SEED))
DV = DV1*DV2- (VX3D(MIX,MIY,MIZ)*xstep +
1          VY3D(MIX,MIY,MIZ)*ystep +
2          VZ3D(MIX,MIY,MIZ)*zstep )/xds

*      FOLLOW PHOTON AS IT TRAVELS THROUGH REGION. UPDATE X,Y,Z
DO WHILE( (X.LT.XLO.AND.X.GT.O.AND.
1          Y.LT.XLO.AND.Y.GT.O.AND.
2          Z.LT.XLO.AND.Z.GT.O.) ) !BEGIN PHOTON PATH LOOP

X = X + XSTEP
Y = Y + YSTEP
Z = Z + ZSTEP

IF(X.LT.O) X=0.
IF(Y.LT.O) Y=0.
IF(Z.LT.O) Z=0.
IF(X.GT.XLO) X=XLO
IF(Y.GT.XLO) Y=XLO
IF(Z.GT.XLO) Z=XLO

IIXX=(X*0.9998)/XLO*NX
IIYY=(Y*0.9998)/XLO*NY
IIZZ=(Z*0.9998)/XLO*NZ
MIX = IIXX + 1
MIY = IIYY + 1
MIZ = IIZZ + 1

V_DOT_U = (VX3D(MIX,MIY,MIZ)*XSTEP +
1          VY3D(MIX,MIY,MIZ)*YSTEP +
2          VZ3D(MIX,MIY,MIZ)*ZSTEP) / xDS

AB = ((V_DOT_U+DV)*DWIDIN3D(MIX,MIY,MIZ))**2 !RELATIVE DOPPLER SHIFT

IF(AB.LE.20.) THEN
BC = EXP(-AB)*DABS(xDS)
DO JT=1,NTRANS !UPDATE WEIGTHS

```

```
EXTTRU=WTRUE(JT)*(1.DO-EXP(-BC*
1                                CCONST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
EXTREF=WREF(JT)*(1.DO-EXP(-BC*
1                                CRFCST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
WTRUE(JT)=WTRUE(JT)-EXTTRU
WREF(JT)=WREF(JT)-EXTREF
SSTIM3D(MIX,MIY,MIZ,JT)=
1                                SSTIM3D(MIX,MIY,MIZ,JT)+
1                                EXTTRU*DPNTRU3D(MIX,MIY,MIZ,JT)-
2                                EXTREF*DPNREF3D(MIX,MIY,MIZ,JT)
END DO
END IF
END DO !END PHOTON PATH (ENDS WHILE)
END DO !END SENDING PHOTONS
END DO !END SHELLS
ENDDO
ENDDO

5555    continue
* --- FINALLY, SIMULATE PHOTONS FROM OUTSIDE

IF (OUT.NE.0) THEN

    OUTJBXY = OUT/6./FLOAT(NX)/FLOAT(NY)
    OUTJBXZ = OUT/6./FLOAT(NX)/FLOAT(NZ)
    OUTJBYZ = OUT/6./FLOAT(NY)/FLOAT(NZ)

    print*, 'emitting photons from face z=nz'
    MAZ=nz
    DO MAY=1,NY
        DO MAX=1,NX
            NPHOTOUT=INT(OUTJBXY)+1 !NUMBER OF PHOTONS FROM CENTRAL SOURCE
            DO IPHOTOUT=1,NPHOTOUT
                WODIFF=1
                IF(IPHOTOUT.EQ.NPHOTOUT)WODIFF=1-(NPHOTOUT-OUTJBXY) !FRACTION OF PHOTON
                INDB=0
                DO JT=1,NTRANS
                    WTRUE(JT) = WODIFF*RATRUT(JT)
                    WREF(JT) = WTRUE(JT)-WODIFF*RATOUT(JT)
                END DO

* Assign random photon properties
                MIX = MAX !CURRENT SHELL OF PHOTON
                MIY = MAY !CURRENT SHELL OF PHOTON
                MIZ = MAZ !CURRENT SHELL OF PHOTON

                X = (MIX-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
                Y = (MIY-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
                Z = (MIZ-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
```

```

XSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.1
YSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.1
ZSTEP = -RND(SEED)*PIXELSIZE*0.1
xDS = SQRT(XSTEP**2 + YSTEP**2 + ZSTEP**2)

DV = (RND(SEED)-0.5D0)*PASSB

III=0
DO WHILE((III.EQ.0).OR.(X.LT.XLO.AND.X.GT.O.AND.
1          Y.LT.XLO.AND.Y.GT.O.AND.
2          Z.LT.XLO.AND.Z.GT.O.))
!BEGIN PHOTON PATH LOOP
  iii=1
  X = X + XSTEP
  Y = Y + YSTEP
  Z = Z + ZSTEP
  IF(X.LT.0) X=0.
  IF(Y.LT.0) Y=0.
  IF(Z.LT.0) Z=0.
  IF(X.GT.XLO) X=XLO
  IF(Y.GT.XLO) Y=XLO
  IF(Z.GT.XLO) Z=XLO

  IIXX=(X*0.9998)/XLO*NX
  IIYY=(Y*0.9998)/XLO*NY
  IIZZ=(Z*0.9998)/XLO*NZ
  MIX = IIXX + 1
  MIY = IIYY + 1
  MIZ = IIZZ + 1
  V_DOT_U = (VX3D(MIX,MIY,MIZ)*XSTEP +
1          VY3D(MIX,MIY ,MIZ)*YSTEP +
2          VZ3D(MIX,MIY ,MIZ)*ZSTEP) / xDS

  AB = ((V_DOT_U+DV)*DWIDIN3D(MIX,MIY,MIZ))**2 !RELATIVE DOPPLER SHIFT

  IF(AB.LE.20.) THEN
BC = EXP(-AB)*DABS(xDS)
DO JT=1,NTRANS !UPDATE WEIGTHS
  EXTTRU=WTRUE(JT)*(1.D0-EXP(-BC*
1          CCONST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
  EXTREF=WREF(JT)*(1.D0-EXP(-BC*
1          CRFCST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
  WTRUE(JT)=WTRUE(JT)-EXTTRU
  WREF(JT)=WREF(JT)-EXTREF
  SSTIM3D(MIX,MIY,MIZ,JT)=
1          SSTIM3D(MIX,MIY,MIZ,JT)+
1          EXTTRU*DPNTRU3D(MIX,MIY,MIZ,JT)-
2          EXTREF*DPNREF3D(MIX,MIY,MIZ,JT)
END DO
  END IF

```

```
      END DO !END PHOTON PATH (ENDS WHILE)
END DO !END SENDING PHOTONS
      END DO !END SHELLS
ENDDO

      print*, 'emitting photons from face z=1'
      MAZ=1
      DO MAY=1, NY
        DO MAX=1, NX
          NPHOTOUT=INT(OUTJBXY)+1 !NUMBER OF PHOTONS FROM CENTRAL SOURCE
          DO IPHOTOUT=1, NPHOTOUT
            WODIFF=1
            IF(IPHOTOUT.EQ.NPHOTOUT)WODIFF=1-(NPHOTOUT-OUTJBXY) !FRACTION OF PHOTON
            INDB=0
            DO JT=1, NTRANS
              WTRUE(JT) = WODIFF*RATRUT(JT)
              WREF(JT) = WTRUE(JT)-WODIFF*RATOUT(JT)
            END DO
            * Assign random photon properties
            MIX = MAX !CURRENT SHELL OF PHOTON
            MIY = MAY !CURRENT SHELL OF PHOTON
            MIZ = MAZ !CURRENT SHELL OF PHOTON

            X = (MIX-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
            Y = (MIY-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
            Z = (MIZ-1+RND(SEED))*PIXELSIZE

            XSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.4
            YSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.4
            ZSTEP = RND(SEED)*PIXELSIZE*0.4
            xDS = SQRT(XSTEP**2 + YSTEP**2 + ZSTEP**2)
            DV = (RND(SEED)-0.5DO)*PASSE
            * Follow photon as it travels through region. Update r
            III=0
            DO WHILE((III.EQ.0).OR.(X.LT.XLO.AND.X.GT.O.AND.
              1                                     Y.LT.XLO.AND.Y.GT.O.AND.
              2                                     Z.LT.XLO.AND.Z.GT.O.))
!BEGIN PHOTON PATH LOOP
              iii=1
              X = X + XSTEP
              Y = Y + YSTEP
              Z = Z + ZSTEP

              IF(X.LT.O) X=0.
              IF(Y.LT.O) Y=0.
              IF(Z.LT.O) Z=0.
              IF(X.GT.XLO) X=XLO
              IF(Y.GT.XLO) Y=XLO
              IF(Z.GT.XLO) Z=XLO
```

```

      IIXX=(X*0.9998)/XLO*NX
      IIYY=(Y*0.9998)/XLO*NY
      IIZZ=(Z*0.9998)/XLO*NZ
      MIX = IIXX + 1
      MIY = IIYY + 1
      MIZ = IIZZ + 1

      V_DOT_U = (VX3D(MIX,MIY,MIZ)*XSTEP +
1          VY3D(MIX,MIY ,MIZ)*YSTEP +
2          VZ3D(MIX,MIY ,MIZ)*ZSTEP) / xDS

      AB = ((V_DOT_U+DV)*DWIDIN3D(MIX,MIY,MIZ))*2 !RELATIVE DOPPLER SHIFT
      IF(AB.LE.20.) THEN
BC = EXP(-AB)*DABS(xDS)
DO JT=1,NTRANS !UPDATE WEIGHTS
  EXTTRU=WTRUE(JT)*(1.DO-EXP(-BC*
1          CCONST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
  EXTREF=WREF(JT)*(1.DO-EXP(-BC*
1          CRFCST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
  WTRUE(JT)=WTRUE(JT)-EXTTRU
  WREF(JT)=WREF(JT)-EXTREF
  SSTIM3D(MIX,MIY,MIZ,JT)=
1          SSTIM3D(MIX,MIY,MIZ,JT)+
1          EXTTRU*DPNTRU3D(MIX,MIY,MIZ,JT)-
2          EXTREF*DPNREF3D(MIX,MIY,MIZ,JT)
END DO
      END IF
      END DO !END PHOTON PATH (ENDS WHILE)
END DO !END SENDING PHOTONS
      END DO !END SHELLS
ENDDO

      print*, 'emitting photons from face y=ny'
      MAY=ny
      DO MAZ=1,Nz
        DO MAX=1,NX
NPHOTOUT=INT(OUTJBXZ)+1 !NUMBER OF PHOTONS FROM CENTRAL SOURCE
DO IPHOTOUT=1,NPHOTOUT
  WODIFF=1
  IF(IPHOTOUT.EQ.NPHOTOUT)WODIFF=1-(NPHOTOUT-OUTJBXZ) !FRACTION OF PHOTON
  INDB=0
  DO JT=1,NTRANS
    WTRUE(JT) = WODIFF*RATRUT(JT)
    WREF(JT) = WTRUE(JT)-WODIFF*RATOUT(JT)
  END DO
* Assign random photon properties
  MIX = MAX !CURRENT SHELL OF PHOTON
  MIY = MAY !CURRENT SHELL OF PHOTON
  MIZ = MAZ !CURRENT SHELL OF PHOTON

```

```
X = (MIX-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
Y = (MIY-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
Z = (MIZ-1+RND(SEED))*PIXELSIZE

XSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.1
YSTEP = -RND(SEED)*PIXELSIZE*0.1
zSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.1
xDS = SQRT(XSTEP**2 + YSTEP**2 + ZSTEP**2)
DV = (RND(SEED)-0.5D0)*PASSB
```

```
* Follow photon as it travels through region. Update r
```

$$III=0$$

DO WHILE((III.EQ.0).OR.(X.LT.XLO.AND.X.GT.0.AND.

1 Y.LT.XLO.AND.Y.GT.O.AND.

2 Z.LT.XLO.AND.Z.GT.O.))

```
!BEGIN PHOTON PATH LOOP
```

$$iii=1$$

```
X = X + XSTEP
```

$$Y = Y + YSTEP$$
$$Z = Z + ZSTEP$$

```
IF(X.LT.0) X=0.
```

```
IF(Y.LT.0) Y=0.
```

```
IF(Z.LT.0) Z=0.
```

```
IF(X.GT.XLO) X=XLO
```

```
IF(Y.GT.XLO) Y=XLO
```

```
IF(Z.GT.XLO) Z=XLO
```

$$IIXX=(X*0.9998)/XLO*NX$$
$$IIYY=(Y*0.9998)/XLO*NY$$
$$IIZZ=(Z*0.9998)/XLO*NZ$$
$$\text{MIX} = \text{IIXX} + 1$$
$$MIY = IIYY + 1$$
$$MIZ = IIZZ + 1$$

```
V_DOT_U = (VX3D(MIX,MIY,MIZ)*XSTEP +
```

```
1      VY3D(MIX,MIY ,MIZ)*YSTEP +
```

```
2      VZ3D(MIX,MIY,MIZ)*ZSTEP) / xDS
```

```
AB = ((V_DOT_U+DV)*DWIDIN3D(MIX,MIY,MIZ))**2 !RELATIVE DOPPLER SHIFT
```

IF(AB.LE.20.) THEN

$$BC = \exp(-AB) * DABS(xDS)$$

DO JT=1,NTRANS !UPDATE WEIGHTS

$$\text{EXTTRU} = \text{WTRUE}(\text{JT}) * (1.00 - \text{EXP}(-\text{BC} * \text{TIME}))$$

```
1 CCONST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
```

```
EXTREF=WREF(JT)*(1.DO-EXP(-BC*
```

```
1 CRFCST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
```

WTRUE(JT)=WTRUE(JT)-EXTTRU

```
WREF(JT)=WREF(JT)-EXTREF
```

$$\text{SSTIM3D}(\text{MIX}, \text{MIY}, \text{MIZ}, \text{JT}) =$$

```
1 SSTIM3D(MIX,MIY,MIZ,JT)+
```

```

1                                EXTTRU*DPNTRU3D(MIX,MIY,MIZ,JT)-
2                                EXTREF*DPNREF3D(MIX,MIY,MIZ,JT)
END DO
    END IF
END DO !END PHOTON PATH (ENDS WHILE)
END DO !END SENDING PHOTONS
    END DO !END SHELLS
ENDDO

print*, 'emitting photons from face y=1'
MAY = 1
DO MAZ=1,NZ
    DO MAX=1,NX
NPHOTOUT=INT(OUTJBXZ)+1 !NUMBER OF PHOTONS FROM CENTRAL SOURCE
DO IPHOTOUT=1,NPHOTOUT
    WODIFF=1
    IF(IPHOTOUT.EQ.NPHOTOUT)WODIFF=1-(NPHOTOUT-OUTJBXZ) !FRACTION OF PHOTON
    INDB=0
    DO JT=1,NTRANS
        WTRUE(JT) = WODIFF*RATRUT(JT)
        WREF(JT) = WTRUE(JT)-WODIFF*RATOUT(JT)
    END DO
* Assign random photon properties
    MIX = MAX !CURRENT SHELL OF PHOTON
    MIY = MAY !CURRENT SHELL OF PHOTON
    MIZ = MAZ !CURRENT SHELL OF PHOTON

    X = (MIX-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
    Y = (MIY-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
    Z = (MIZ-1+RND(SEED))*PIXELSIZE

    XSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.1
    YSTEP = RND(SEED)*PIXELSIZE*0.1
    ZSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.1
    xDS = SQRT(XSTEP**2 + YSTEP**2 + ZSTEP**2)

    DV = (RND(SEED)-0.5D0)*PASSB
* Follow photon as it travels through region. Update r
    III=0
    DO WHILE((III.EQ.0).OR.(X.LT.XLO.AND.X.GT.0.AND.
1                                Y.LT.XLO.AND.Y.GT.0.AND.
2                                Z.LT.XLO.AND.Z.GT.0.))
!BEGIN PHOTON PATH LOOP
        iii=1
        X = X + XSTEP
        Y = Y + YSTEP
        Z = Z + ZSTEP
        IF(X.LT.0) X=0.
        IF(Y.LT.0) Y=0.
        IF(Z.LT.0) Z=0.

```

```
IF(X.GT.XLO) X=XLO
IF(Y.GT.XLO) Y=XLO
IF(Z.GT.XLO) Z=XLO

IIXX=(X*0.9998)/XLO*NX
IIYY=(Y*0.9998)/XLO*NY
IIZZ=(Z*0.9998)/XLO*NZ
MIX = IIXX + 1
MIY = IIYY + 1
MIZ = IIZZ + 1

V_DOT_U = (VX3D(MIX,MIY,MIZ)*XSTEP +
1          VY3D(MIX,MIY ,MIZ)*YSTEP +
2          VZ3D(MIX,MIY ,MIZ)*ZSTEP) / xDS

AB = ((V_DOT_U+DV)*DWIDIN3D(MIX,MIY,MIZ))*2 !RELATIVE DOPPLER SHIFT
IF(AB.LE.20.) THEN
BC = EXP(-AB)*DABS(xDS)
DO JT=1,NTRANS !UPDATE WEIGTHS
EXTTRU=WTRUE(JT)*(1.DO-EXP(-BC*
1          CCONST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
EXTREF=WREF(JT)*(1.DO-EXP(-BC*
1          CRFCST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
WTRUE(JT)=WTRUE(JT)-EXTTRU
WREF(JT)=WREF(JT)-EXTREF
SSTIM3D(MIX,MIY,MIZ,JT)=
1          SSTIM3D(MIX,MIY,MIZ,JT)+
1          EXTTRU*DPNTRU3D(MIX,MIY,MIZ,JT)-
2          EXTREF*DPNREF3D(MIX,MIY,MIZ,JT)
END DO
END IF
END DO !END PHOTON PATH (ENDS WHILE)
END DO !END SENDING PHOTONS
END DO !END SHELLS
ENDDO

print*, 'emitting photons from face x=nx '
MAX=NX
DO MAZ=1,NZ
DO MAY=1,NY
NPHOTOUT=INT(OUTJBYZ)+1 !NUMBER OF PHOTONS FROM CENTRAL SOURCE
DO IPHOTOUT=1,NPHOTOUT
WODIFF=1
IF(IPHOTOUT.EQ.NPHOTOUT)WODIFF=1-(NPHOTOUT-OUTJBYZ) !FRACTION OF PHOTON
INDB=0
DO JT=1,NTRANS
WTRUE(JT) = WODIFF*RATRUT(JT)
WREF(JT) = WTRUE(JT)-WODIFF*RATOUT(JT)
END DO
* Assign random photon properties
```

```

MIX = MAX !CURRENT SHELL OF PHOTON
MIY = MAY !CURRENT SHELL OF PHOTON
MIZ = MAZ !CURRENT SHELL OF PHOTON

X = (MIX-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
Y = (MIY-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
Z = (MIZ-1+RND(SEED))*PIXELSIZE

XSTEP = -RND(SEED)*PIXELSIZE*0.1
ZSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.1
YSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.1
xDS = SQRT(XSTEP**2 + YSTEP**2 + ZSTEP**2)
DV = (RND(SEED)-0.5D0)*PASSB
* Follow photon as it travels through region. Update r
  III=0
  DO WHILE((III.EQ.0).OR.(X.LT.XL0.AND.X.GT.0.AND.
    1                                     Y.LT.XL0.AND.Y.GT.0.AND.
    2                                     Z.LT.XL0.AND.Z.GT.0.))
!BEGIN PHOTON PATH LOOP
  iii=1
  X = X + XSTEP
  Y = Y + YSTEP
  Z = Z + ZSTEP
  IF(X.LT.0) X=0.
  IF(Y.LT.0) Y=0.
  IF(Z.LT.0) Z=0.
  IF(X.GT.XL0) X=XL0
  IF(Y.GT.XL0) Y=XL0
  IF(Z.GT.XL0) Z=XL0

  IIXX=(X*0.9998)/XL0*NX
  IIYY=(Y*0.9998)/XL0*NY
  IIZZ=(Z*0.9998)/XL0*NZ
  MIX = IIXX + 1
  MIY = IIYY + 1
  MIZ = IIZZ + 1
  V_DOT_U = (VX3D(MIX,MIY,MIZ)*XSTEP +
    1                                     VY3D(MIX,MIY,MIZ)*YSTEP +
    2                                     VZ3D(MIX,MIY,MIZ)*ZSTEP) / xDS

  AB = ((V_DOT_U+DV)*DWIDIN3D(MIX,MIY,MIZ))*2 !RELATIVE DOPPLER SHIFT
  IF(AB.LE.20.) THEN
BC = EXP(-AB)*DABS(xDS)
DO JT=1,NTRANS !UPDATE WEIGTHS
  EXTTRU=WTRUE(JT)*(1.D0-EXP(-BC*
    1                                     CCONST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
  EXTREF=WREF(JT)*(1.D0-EXP(-BC*
    1                                     CRFCST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
  WTRUE(JT)=WTRUE(JT)-EXTTRU
  WREF(JT)=WREF(JT)-EXTREF

```

```

      SSTIM3D(MIX,MIY,MIZ,JT)=
      1                      SSTIM3D(MIX,MIY,MIZ,JT)+
      1                      EXTTRU*DPNTRU3D(MIX,MIY,MIZ,JT)-
      2                      EXTREF*DPNREF3D(MIX,MIY,MIZ,JT)
END DO
      END IF
      END DO !END PHOTON PATH (ENDS WHILE)
END DO !END SENDING PHOTONS
      END DO !END SHELLS
ENDDO

      print*, 'emitting photons from face x=1'
      MAX=1
      DO MAZ=1,NZ
        DO MAY=1,NY
          NPHOTOUT=INT(OUTJBYZ)+1 !NUMBER OF PHOTONS FROM CENTRAL SOURCE
          DO IPHOTOUT=1,NPHOTOUT
            WODIFF=1
            IF(IPHOTOUT.EQ.NPHOTOUT)WODIFF=1-(NPHOTOUT-OUTJBYZ) !FRACTION OF PHOTON
            INDB=0
            DO JT=1,NTRANS
              WTRUE(JT) = WODIFF*RATRUT(JT)
              WREF(JT)  = WTRUE(JT)-WODIFF*RATOUT(JT)
            END DO

* Assign random photon properties
            MIX = MAX !CURRENT SHELL OF PHOTON
            MIY = MAY !CURRENT SHELL OF PHOTON
            MIZ = MAZ !CURRENT SHELL OF PHOTON

            X = (MIX-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
            Y = (MIY-1+RND(SEED))*PIXELSIZE
            Z = (MIZ-1+RND(SEED))*PIXELSIZE

            XSTEP = RND(SEED)*PIXELSIZE*0.1
            YSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.1
            ZSTEP = DSIN(TPI*RND(SEED))*PIXELSIZE*0.1
            xDS = SQRT(XSTEP**2 + YSTEP**2 + ZSTEP**2)
            DV = (RND(SEED)-0.5D0)*PASSB

* Follow photon as it travels through region. Update r
            III=0
            DO WHILE((III.EQ.0).OR.(X.LT.XLO.AND.X.GT.O.AND.
              1                      Y.LT.XLO.AND.Y.GT.O.AND.
              2                      Z.LT.XLO.AND.Z.GT.O.))
!BEGIN PHOTON PATH LOOP
              iii=1
              X = X + XSTEP
              Y = Y + YSTEP
              Z = Z + ZSTEP
              IF(X.LT.O) X=0.

```

```

      IF(Y.LT.0) Y=0.
      IF(Z.LT.0) Z=0.
      IF(X.GT.XLO) X=XLO
      IF(Y.GT.XLO) Y=XLO
      IF(Z.GT.XLO) Z=XLO

      IIXX=(X*0.9998)/XLO*NX
      IIYY=(Y*0.9998)/XLO*NY
      IIZZ=(Z*0.9998)/XLO*NZ
      MIX = IIXX + 1
      MIY = IIYY + 1
      MIZ = IIZZ + 1

      V_DOT_U = (VX3D(MIX,MIY,MIZ)*XSTEP +
1          VY3D(MIX,MIY ,MIZ)*YSTEP +
2          VZ3D(MIX,MIY ,MIZ)*ZSTEP) / xDS

      AB = ((V_DOT_U+DV)*DWIDIN3D(MIX,MIY,MIZ))*2 !RELATIVE DOPPLER SHIFT
      IF(AB.LE.20.) THEN
BC = EXP(-AB)*DABS(xDS)
DO JT=1,NTRANS !UPDATE WEIGTHS
  EXTTRU=WTRUE(JT)*(1.DO-EXP(-BC*
1          CCONST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
  EXTREF=WREF(JT)*(1.DO-EXP(-BC*
1          CRFCST3D(MIX,MIY,MIZ,JT)))
  WTRUE(JT)=WTRUE(JT)-EXTTRU
  WREF(JT)=WREF(JT)-EXTREF
  SSTIM3D(MIX,MIY,MIZ,JT)=
1          SSTIM3D(MIX,MIY,MIZ,JT)+
1          EXTTRU*DPNTRU3D(MIX,MIY,MIZ,JT)-
2          EXTREF*DPNREF3D(MIX,MIY,MIZ,JT)
END DO
  END IF
END DO !END PHOTON PATH (ENDS WHILE)
END DO !END SENDING PHOTONS
  END DO !END SHELLS
ENDDO
end if !End photons outside.

9999 continue

RETURN
END

SUBROUTINE ADJUST

INCLUDE 'montecarlo.inc'
REAL*8 TEX(NTRANS*MAX)

```

```
* --- JITER IS THE NUMBER OF ITERATIONS SINCE THE SSTIM COUNTERS WERE EMPTIED
JITER=ITER
IF(NEMPTY.NE.0) THEN
  DO J=1,NEMPTY
    IF(ITER.GT.NITEMP(J)) JITER=ITER-NITEMP(J)
  END DO
END IF

DO MZ=1,NZ
  DO MY=1,NY
    DO MX=1,NX

* --- INITIALIZE ARRAYS TO INVERT THE STAT. EQ. EQUATIONS IN EACH SHELL.
    DO J=1,NLEVEL
      DO K=1,NLEVEL
        A(J,K)=C3D(MX,MY,MZ,J,K)
      END DO
    END DO
    FA=1.DO/(VOL*JITER)
    DO JT=1,NTRANS
      RUL = SSTIM3D(MX,MY,MZ,JT)*F(JT)*FA
      LLOW = LTRANS(JT,1)
      LUP = LTRANS(JT,2)
      A(LLOW,LLOW)= A(LLOW,LLOW)-RUL*GG(JT)
      A(LLOW,LUP) = A(LLOW,LUP)+RUL
      IF(LUP.NE.NLEVEL) THEN
        A(LUP,LUP) = A(LUP,LUP)-RUL
        A(LUP,LLOW) = A(LUP,LLOW)+RUL*GG(JT)
      END IF
    END DO

    IM=1
    DO K=1,NLEVEL
      DO J=1,NLEVEL
        B(IM)= A(J,K)
        IM = IM+1
      END DO
    END DO

    DO J=1,NLEVEL-1
      PN3D(MX,MY,MZ,J)=0.DO
    END DO
    PN3D(MX,MY,MZ,NLEVEL)=DENS3D(MX,MY,MZ)*
      1                                FRAC3D(MX,MY,MZ)

* --- SOLVE THE STATISTICAL EQUILIBRIUM EQUATIONS FOR SHELL M
    CALL INVERT(MX,MY,MZ,IER)

900    FORMAT(1X,'*****CUIDADO, IER = ' ,I3,3X,'ITERACION NO.',
      1          I6,4X,'CAPA NO.',I4)
```

```

DO JT=1,NTRANS
  LLOW  = LTRANS(JT,1)
  LUP   = LTRANS(JT,2)
  TEX(JT)= 0.DO
  IF(PN3D(MX,MY,MZ,LUP).GT.0..AND.
    1      PN3D(MX,MY,MZ,LLOW).GT.0.)
    2      TEX(JT) = -HK*FREQ(JT)/
    3      (DLOG(PN3D(MX,MY,MZ,LUP)/
    4      (GG(JT)*PN3D(MX,MY,MZ,LLOW))))
END DO
IF (NEMPTY.NE.0) THEN
  DO JY=1,NEMPTY
    IF (ITER.EQ.NITEMP(JY)) THEN
      DO JT=1,NTRANS
        SSTIM3D(MX,MY,MZ,JT)=0.DO
      END DO
    END IF
  END DO
END IF

      END DO !END LOOP OVER SHELLS
ENDDO
ENDDO

RETURN
END

```


Bibliografía

- Alves, J. F., Lada, C. J., & Lada, E. A. 2001, *Nature*, 409, 159
- Ballesteros-Paredes, J., Hartmann, L., & Vázquez-Semadeni, E. 1999a, *ApJ*, 527, 285
- Ballesteros-Paredes, J., Klessen, R. S., & Vázquez-Semadeni, E. 2003, *ApJ*, 592, 188
- Ballesteros-Paredes, J., & Mac Low, M. 2002, *ApJ*, 570, 734
- Ballesteros-Paredes, J., & Vázquez-Semadeni, E. 1997, in *American Institute of Physics Conference Series*, 81–+
- Ballesteros-Paredes, J., Vázquez-Semadeni, E., & Scalo, J. 1999b, *ApJ*, 515, 286
- Ballesteros-Paredes, J., & Vázquez-Semadeni, E. 1995, in *Revista Mexicana de Astronomía y Astrofísica Conference Series*, 105–+
- Barranco, J. A., & Goodman, A. A. 1998, *ApJ*, 504, 207
- Bernes, C. 1978, A Monte Carlo approach to non-LTE radiative transfer problems, Tech. rep.
- . 1979, *A& A*, 73, 67
- Bertoldi, F., & McKee, C. F. 1992, *ApJ*, 395, 140
- Blitz, L., & Shu, F. H. 1980, *ApJ*, 238, 148
- Bonazzola, S., Heyvaerts, J., Falgarone, E., Perault, M., & Puget, J. L. 1987, *A& A*, 172, 293
- Bonnor, W. B. 1956, *MNRAS*, 116, 351
- Brunt, C. M. 2003, *ApJ*, 583, 280

- Carr, J. S. 1987, *ApJ*, 323, 170
- Caselli, P., & Myers, P. C. 1995, *ApJ*, 446, 665
- Chandrasekhar, S. 1951, *Proceedings of the Royal Society of London*, 210, 26
- Chandrasekhar, S., & Fermi, E. 1953, *ApJ*, 118, 116
- Chieze, J. P. 1987, *A& A*, 171, 225
- Ebert, R. 1955, *Zeitschrift für Astrophysics*, 36, 222
- Elmegreen, B. G. 1993, *ApJL*, 419, L29+
- Evans, N. 2002, in *Chemistry as a Diagnostic of Star Formation*, 27–+
- Falgarone, E., Panis, J.-F., Heithausen, A., Perault, M., Stutzki, J., Puget, J.-L., & Bensc, F. 1998, *A& A*, 331, 669
- Fuller, G. A., & Myers, P. C. 1992, *ApJ*, 384, 523
- Goldreich, P., & Kwan, J. 1974, *ApJ*, 189, 441
- Goodman, A. A., Barranco, J. A., Wilner, D. J., & Heyer, M. H. 1998, *ApJ*, 504, 223
- Hartmann, L., Ballesteros-Paredes, J., & Bergin, E. A. 2001, *ApJ*, 562, 852
- Herbig, G. H. 1978, *Can Post-T Tauri Stars Be Found? (Problems of Physics and Evolution of the Universe)*, 171–+
- Hotzel, S., Harju, J., & Juvela, M. 2002, *A& A*, 395, L5
- Hunter, J. H. 1979, *ApJ*, 233, 946
- Hunter, J. H., Sandford, M. T., Whitaker, R. W., & Klein, R. I. 1986, *ApJ*, 305, 309
- Jeans, J. H. 1902, *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A*, 199, 1
- Kegel, W. H. 1989, *A& A*, 225, 517
- Keto, E. R., & Myers, P. C. 1986, *ApJ*, 304, 466
- Klessen, R. S., Ballesteros-Paredes, J., Vázquez-Semadeni, E., & Durán-Rojas, C. 2004, *ApJ*, enviado
- Klessen, R. S., Heitsch, F., & Mac Low, M. 2000, *ApJ*, 535, 887

- Larson, R. B. 1981, *MNRAS*, 194, 809
- Leorat, J., Passot, T., & Pouquet, A. 1990, *MNRAS*, 243, 293
- Mac Low, M., & Klessen, R. S. 2004, *Reviews of Modern Physics*, 76, 125
- Maddalena, R. J., & Thaddeus, P. 1985, *ApJ*, 294, 231
- Maloney, P. 1988, *ApJ*, 334, 761
- McKee, C. F. 1999, in *NATO ASIC Proc. 540: The Origin of Stars and Planetary Systems*, 29–+
- McKee, C. F., & Zweibel, E. G. 1992, *ApJ*, 399, 551
- McLaughlin, D. E., & Pudritz, R. E. 1996, *ApJ*, 469, 194
- Myers, P. C. 1983, *ApJ*, 270, 105
- Myers, P. C., Evans, N. J., & Ohashi, N. 2000, *Protostars and Planets IV*, 217
- Myers, P. C., & Goodman, A. A. 1988, *ApJL*, 326, L27
- Ossenkopf, V., & Mac Low, M.-M. 2002, *A&A*, 390, 307
- Ostriker, E. C., Stone, J. M., & Gammie, C. F. 2001, *ApJ*, 546, 980
- Padoan, P., Juvela, M., Goodman, A. A., & Nordlund, Å. 2001, *ApJ*, 553, 227
- Parker, E.Ñ. 1979, *Cosmical magnetic fields: Their origin and their activity* (Oxford, Clarendon Press; New York, Oxford University Press, 1979, 858 p.)
- Passot, T., Vázquez-Semadeni, E., & Pouquet, A. 1995, *ApJ*, 455, 536
- Sasao, T. 1973, *PASJ*, 25, 1
- Scalo, J. 1990, in *ASSL Vol. 162: Physical Processes in Fragmentation and Star Formation*, 151–176
- Shu, F. H., Adams, F. C., & Lizano, S. 1987, *Ann. Rev. of Astron. and Astrophys.*, 25, 23
- Spitzer, L. 1978, *Physical processes in the interstellar medium* (New York Wiley-Interscience, 1978. 333 p.)

- Torrelles, J. M., Rodríguez, L. F., Canto, J., Carral, P., Marcaide, J., Moran, J. M., & Ho, P. T. P. 1983, *ApJ*, 274, 214
- Vázquez-Semadeni, E. 1999, in *ASSL Vol. 241: Millimeter-Wave Astronomy: Molecular Chemistry & Physics in Space.*, 161–+
- Vázquez-Semadeni, E., Ballesteros-Paredes, J., & Rodríguez, L. F. 1997, *ApJ*, 474, 292
- Vázquez-Semadeni, E., & Gazol, A. 1995, *A&A*, 303, 204
- Vázquez-Semadeni, E., Kim, J., Shadmehri, M., & Ballesteros-Paredes, J. 2004, *apJ*, enviado
- Yonekura, Y., Dobashi, K., Mizuno, A., Ogawa, H., & Fukui, Y. 1997, *ApJS*, 110, 21
- Zhou, S. 1992, *ApJ*, 394, 204
- Zuckerman, B., & Evans, N. J. 1974, *ApJL*, 192, L149