

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN
DEPARTAMENTO DE ELETRÔNICA QUÂNTICA

**“NÍVEIS ENERGÉTICOS
E TRANSIÇÕES ATÔMICAS
NO ESPECTRO DO AR III”**

por

Fernando Remigio Tamariz Luna

Orientador: Antônio G. Trigueiros

Tese apresentada no Instituto de Física Gleb Wataghin,
como parte dos requisitos para a obtenção do título
de Mestrado em Física.

Campinas
julho de 1994

ESTA É A VERSÃO FINAL
DA TESE DE MESTRADO DO
D. FERNANDO REMIGIO TAMARIZ
LUNA, DEFENDIDA E APROVADA
PELA COMISSÃO JULGADORA.
10/08/94
Antônio G. Trigueiros

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP

T15n

Tamariz Luna, Fernando Remigio

Níveis energéticos e transições atômicas no
Ar III / Fernando Remigio Tamariz Luna. -- Cam-
pinas, SP : [s.n.], 1994.

Orientador: Antônio G. Trigueiros.

Dissertação (mestrado) - Universidade Esta-
dual de Campinas. Instituto de Física "Gleb
Wataghin".

1. Espectros atômicos. 2. Espectroscopia de
emissão atômica. 3.*Transições atômicas. I.
Trigueiros, Antônio Gomes. II. Universidade
Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb
Wataghin". III. Título.

Dedicatória

A mis Padres
e
Claudia.

Agradecimentos

Ao Dr. Antônio Gomes Trigueiros, por sua orientação segura, amizade e confiança.

Ao Dr. Cesar Pagan, pelas discussões esclarecedoras.

Aos amigos e companheiros de trabalho: Gildo de Holanda Cavalcante, Roberto Yzumi Honda, Douglas Cioban, Luiz Angelo Berni e Antônio Jamil Mania, pelo esforço, dedicação e interesse, que ajudaram a tornar menos árdua a tarefa experimental realizada.

Aos companheiros de sala: Joãa Victor, José Luis, Miriam Batista, Eunice, pela amizade e boa companhia.

Ao pessoal do Centro de Investigações Óticas de La Plata (Argentina), em particular ao Dr. Fausto Bredice e Dr. Jorge Reyna Almandos, pelo fornecimento de importantes dados espectroscópicos e valiosas discussões.

Ao Dr. Munemasa Machida pela colaboração, e empréstimo de equipamentos.

Ao Dr. Edison Shibuia do Departamento de Raios Cósmicos pelo uso do microdensitômetro (Processo FAPESP 88.3885.0).

Ao pessoal das secretarias de Pós-Graduação e do DEQ, em particular à Cristina por seu interesse, dedicação e ajuda com a burocracia.

Aos professores do grupo de plasma da UNICAMP: Dr. Roberto Clemente, Dr. P.H.Sakanaka e Dr. J.Busnardo Neto, pelo incentivo, apoio e amizade.

A todos os colegas do curso de Pós-Graduação, em particular à meus compatriotas pelos apoios e momentos agradáveis.

Às amigas da biblioteca: Nilza, Rita, M. José, Célia e Tânia.

Ao pessoal dos serviços de apoio: oficina mecânica, vácuo, desenho e vidraria.

Aos órgãos financiadores: CNPq e FAPESP, pelo suporte financeiro a este trabalho.

E finalmente aos amigos anônimos.

A todos, muito obrigado.

Neste trabalho analisamos o espectro de emissão do argônio duas vezes ionizado (Ar III), obtido no laboratório de Espectroscopia Atômica de UNICAMP por intermédio de um Theta-Pinch, e em colaboração com o Centro de Investigaciones Ópticas (CIOp) de La Plata-Argentina, que forneceu dados produzidos em Tubo de Descarga Capilar (TDC).

Os cálculos teóricos de estrutura eletrônica são feitos utilizando os programas desenvolvidos pelo professor Robert D. Cowan do Los Alamos Scientific Laboratory. Realizamos uma revisão substancial das configurações que são conhecidas e produzimos dados espectroscópicos completamente novos sobre as configurações $3s^23p^4$, $3s^13p^5$, $3s^03p^6$, $3s^23p^33d$, $3s^23p^34s$, $3s^23p^34p$, $3s^23p^34d$, $3s^23p^35s$.

Na parte da revisão das configurações obtivemos 447 transições, sendo que destas 248 já observadas também por outros autores, e as restantes 199 transições são classificadas pela primeira vez.

Os cálculos teóricos fornecem informações sobre a energia média das configurações, os parâmetros energéticos de Slater, o parâmetro de acoplamento spin-órbita, as integrais de interação entre as configurações, o acoplamento que melhor se adapta aos cálculos, os níveis de energia, os comprimentos de onda e a probabilidade de transição. Há uma serie de outros programas utilizados no trabalho de análise dos dados experimentais, sendo que o mais importante é o que permite o ajuste dos níveis energeticos através do método

dos minimos quadrados, usando como entrada para os cálculos os valores experimentais.

Abstract

In this work we analyse the emission spectrum of twice ionized Argon (Ar III), obtained in the Atomic Spectroscopy Laboratory at UNICAMP through the use of a theta-pinch and also in collaboration with Centro de Investigaciones Opticas (CIOp) at La Plata (Argentina), who furnished data from a Capillary discharge tube (TDC).

The theoretical calculations of electronic structure are done using the programs developed by Robert D. Cowan from Los Alamos National Laboratory. We made a substantial revision of already known configurations and we found completely new spectroscopic data for the configurations $3s^23p^4$, $3s^13p^5$, $3s^03p^6$, $3s^23p^33d$, $3s^23p^34s$, $3s^23p^34p$, $3s^23p^34d$, $3s^23p^35s$.

Regarding the revision of the configurations, we obtained 447 transitions, from which 248 were already observed by other authors and the remaining 199 were classified as new.

The theoretical calculations give information about the median energy of the configuration, the Slater energetic parameters, the spin - orbit coupling parameter, the integrals of interaction among configurations, the coupling that better fits the calculations, the energy levels, the wavelengths and the transition probability. There is also a series of other programs used in the experimental data analysis, the most important being that allowing the fitting of energy levels through the least square method, using the experimental data as entry for the calculation.

Conteúdo

1	Introdução	5
2	Teoria geral da estrutura atômica	7
2.1	Formulação Hartree - Fock	7
2.1.1	O Hamiltoniano	7
2.1.2	Aproximação de campo central	8
2.1.3	Equações de Hartree - Fock	10
2.2	Acoplamento de Momento Angular	12
2.2.1	Acoplamento LS	14
2.2.2	Acoplamento jj	17
2.2.3	Acoplamento jK	18
2.3	Transições Radiativas	20
2.3.1	Radiação de dipolo elétrico	21
2.3.2	Radiação do multipolo	22
3	Parte experimental	26
3.1	O Theta - Pinch	26
3.1.1	Fonte de alta tensão	27
3.1.2	Banco de capacitores	27
3.1.3	Placas do Theta-Pinch	28
3.1.4	Tubo de descarga	28
3.1.5	Chaves de segurança	29
3.2	O espectrógrafo	30
3.2.1	Fenda do espectrógrafo	31
3.2.2	Rede de difração	31
3.2.3	Sistema de alinhamento	33
3.2.4	Placa de emulsão fotográfica	34
3.2.5	Revelação das placas de emulsão fotográfica	35
3.2.6	Sistema de vácuo do espectrógrafo	35

3.3	Tubo de descarga capilar - TDC	37
3.3.1	Experimento no vácuo ultra violeta (VUV)	38
3.3.2	Experimento no visível e UV	39
3.3.3	Processo experimental	39
3.4	Modificações no sistema de vácuo, e Theta - Pinch	40
3.5	Obtenção dos espectros e leitura de dados	44
3.5.1	Procedimentos experimentais	44
3.5.2	Modo de operação	45
3.5.3	Obtenção dos espectrogramas	46
3.5.4	Leitura de dados e obtenção de tabela	47
4	Análise dos Níveis	50
4.1	Programas Computacionais	50
4.1.1	Cálculo das funções de onda	50
4.1.2	Cálculo da probabilidade de transição e fator angular	52
4.1.3	Determinação dos níveis de energia das configurações	52
4.1.4	Determinação dos parâmetros	53
4.2	Análise do Ar III	54
4.2.1	Obtenção das transições	54
4.2.2	Análise computacional	60
4.3	Apresentação das tabelas	61
5	Conclusões gerais e perspectivas futuras	79
5.1	Conclusões	79
5.2	Perspectivas futuras	80
5.3	Trabalhos publicados	80
	Referências	84

Lista de Figuras

2.1	Esquema dos estados atômicos da energia em acoplamento LS e as degenerescências.	9
2.2	Desdobramento do termo (2P), da configuração np^1 devido ao acoplamento spin-órbita	16
2.3	correlação entre esquemas de acoplamento LS e jj	18
2.4	Níveis de energia da configuração $2p^54f$ em S VII	20
3.1	Diagrama básico de Theta-Pinch.	27
3.2	Circuito elétrico principal para a descarga do Theta-Pinch.	29
3.3	Chave de segurança	30
3.4	Rede à incidência normal	32
3.5	Sistema de alinhamentodo espectrógrafo.	34
3.6	Esquema de vácuo do espectrógrafo	36
3.7	Esquema do circuito elétrico do TDC	38
3.8	Sistema de alinhamento	39
3.9	Eficiência experimental de transferência em função do número de espiras	41
3.10	Circuito de malha única representando a descarga em Theta-Pinch	41
3.11	Evolução temporal de corrente de descarga no Theta-Pinch	42
3.12	Theta - Pinch	45
3.13	Placa fotográfica com espectrogramas	47
3.14	Microdensitômetro.	48
4.1	Representação esquemática das diversas transições entre configurações	56

Lista de Tabelas

2.1	Níveis de Energia de $2p^5 4f$ em S VII	19
3.1	Alguns parâmetros do theta pinch	43
3.2	Dados que caracterizam os espectrogramas no experimento	46
4.1	Tabela de transições entre as configurações $3s3p^5$ e $3s^2 3p^4$	57
4.2	Níveis de energia das configurações pares de Ar III	62
4.3	Níveis de energia das configurações ímpares de Ar III.	63
4.4	Níveis de energia das configurações ímpares de Ar III.	64
4.5	Níveis de energia das configurações ímpares de Ar III.	65
4.6	Transições de Ar III.	66
4.7	Transições de Ar III.	67
4.8	Transições de Ar III.	68
4.9	Transições de Ar III.	69
4.10	Transições de Ar III.	70
4.11	Transições de Ar III.	71
4.12	Transições de Ar III.	72
4.13	Transições de Ar III.	73
4.14	Transições de Ar III.	74
4.15	Transições de Ar III.	75
4.16	Transições de Ar III.	76
4.17	Transições de Ar III.	77
4.18	Transições de Ar III.	78

Capítulo 1

Introdução

O objetivo deste trabalho é fazer uma análise revisada do espectro de argônio duas vezes ionizado. Usando as configurações conhecidas $3s^2 3p^4$, $3s^1 3p^5$, $3s^0 3p^6$, $3s^2 3p^3 3d$, $3s^2 3p^3 4s$, $3s^2 3p^3 4p$, $3s^2 3p^3 4d$, $3s^2 3p^3 5s$, obtivemos as transições que nos permitiu ajustar os níveis de energia de cada configuração e a classificação das transições, que são listadas no final do capítulo. Na análise deste ion foram utilizados dados espectroscópicos (tabelas de comprimento de onda, classificação iônica, incerteza, característica das linhas, etc) relativos a este gás nobre.

Para a classificação das linhas usamos programas computacionais desenvolvidos pelo professor Robert D. Cowan, permitindo uma análise mais completa das transições.

O que nos motivou a estudar o argônio duas vezes ionizado foi sua vasta aplicação em diferentes ramos da física, entre elas:

- Nas aplicações em vários experimentos de colisões [1].
- Na interpretação dos espectros Auger das capas internas de argônio neutro, por espectros óticos de baixa ionização [2].
- No espectro Auger, onde os singletos obtidos por espectroscopia ótica são usados [3].
- E na astrofísica, onde as transições obtidas em cada ion são importantes.

A tese está dividida em 5 capítulos. No capítulo 2, descrevemos os conceitos teóricos partindo da solução do Hamiltoniano não relativístico via formulação Hartree - Fock, usando a aproximação de campo central. Discutiremos

os tipos de acoplamentos de momentos angulares, a interação de átomos com a radiação e as transições de dipolo elétrico.

No capítulo 3, apresentamos uma descrição detalhada dos equipamentos usados em nosso laboratório de espectroscopia, da fonte de radiação em tubo de descarga capilar (TDC), que se encontra no Centro de Investigaciones Ópticas (CIOp) de La Plata - Argentina e as modificações realizadas no sistema de vácuo e no tubo de theta-pinch de nosso laboratório. Também especificamos o modo de operação do novo sistema e os processos de leitura de dados e de obtenção da tabela para sua classificação iônica.

No capítulo 4, apresentamos a análise do espectro do Argônio duas vezes ionizado usando as regras de seleção especificadas no capítulo 2. As classificações e ajustes foram feitos com os programas computacionais que se encontram instalados na rede de computação do UNICAMP. No final deste capítulo apresentamos um resumo das transições obtidas neste trabalho.

No capítulo 5, fazemos um resumo de todos os trabalhos publicados e apresentados em congressos e das perspectivas futuras.

Este trabalho foi desenvolvido no laboratório de Física Atômica do grupo de Plasma-UNICAMP, em colaboração com o Centro de Investigaciones Ópticas (CIOp) La Plata - Argentina. As fontes de radiação usadas são: o theta-pinch que se encontra no laboratório de Física Atômica (UNICAMP) e o tubo de descarga capilar (Argentina) que forneceram dados para o análise do argônio duas vezes ionizado.

Capítulo 2

Teoria geral da estrutura atômica

2.1 Formulação Hartree - Fock

2.1.1 O Hamiltoniano

A equação de Schrödinger para átomos com um elétron é estendida para átomos multi-eletrônicos, seguindo alguns passos.

1. Todos os operadores usados para átomos com um elétron, são também usados para átomos com N elétrons.
2. Adiciona-se ao hamiltoniano de um elétron um novo hamiltoniano correspondente à interação coulombiana elétron-elétron, somando-se sobre todos os pares de elétrons.

O hamiltoniano para átomos com N-elétrons, sem a presença de campos externos é dado pela seguinte expressão:

$$H = H_0 + H_1 + H_2 \quad (2.1)$$

onde

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right] \quad (2.2)$$

$$H_1 = \sum_{\text{pares}} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (2.3)$$

$$H_2 = \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i \quad (2.4)$$

O H_0 representa a energia cinética e a energia potencial dos elétrons no campo do núcleo, H_1 a repulsão coulombiana elétron-elétron, e H_2 a interação spin-órbita, onde r_i é a distância do núcleo de carga Ze até o i -ésimo elétron com massa m , carga e , momento $\vec{p}$, e r_{ij} a distância entre os elétrons i e j .

O hamiltoniano apresenta dois casos, os quais dependem do número atômico Z . Para um átomo com um número atômico baixo, o hamiltoniano da eq(2.1) é representada como H_I , sendo $H_I = H_0 + H_1$, e H_2 será considerado como uma pequena perturbação. Para átomos com Z alto o hamiltoniano será representado como H_{II} , sendo $H_{II} = H_0 + H_2$, e H_1 será considerado como uma perturbação.

Destes dois casos, o mais frequente em física atômica é achado o H_I , sendo para átomos (íons) com valores pequenos e intermedios de Z (átomos livianos), são examinados as propriedades de simetria em H_I . Para partículas indistinguíveis qualquer hamiltoniano de N -partículas é invariável baixo a troca de coordenadas (espacial e spin) de qualquer duas partículas, sendo a função de onda antisimétrica com respeito a troca de duas partículas. É invariável na inversão (reflexão na origem), originando uma paridade definida para a função de onda (paridade é um bom número quântico). Neste hamiltoniano H_I aparece a interação spin-órbita, e é explicado muito bem por o esquema de acoplamento LS denominado Russell-Saunders.

2.1.2 Aproximação de campo central

Utilizaremos H_I para representar um novo hamiltoniano com um certo potencial esfericamente simétrico dado por [4].

$$H'_0 = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + U(r_i) \right] \quad (2.5)$$

onde

$$\sum_{i=1}^N U(r_i) = - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} + \left\langle \sum_{i(j)} \frac{e^2}{r_{ij}} \right\rangle \quad (2.6)$$

$$H'_1 = \sum_{i(j)} \frac{e^2}{r_{ij}} - \left\langle \sum_{i(j)} \frac{e^2}{r_{ij}} \right\rangle \quad (2.7)$$

Sendo $\langle \sum_{i(j)} \frac{e^2}{r_{ij}} \rangle$ a média sobre uma esfera da repulsão eletrônica, H_1' é o hamiltoniano que contém a parte esférica da repulsão eletrônica, H_0' contém a energia cinética média da repulsão eletrônica, portanto a aproximação de campo central é representado como:

$$H_0' = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right] + \left\langle \sum_{i(j)} \frac{e^2}{r_{ij}} \right\rangle \quad (2.8)$$

O H_1' é considerado como uma perturbação que produz uma mudança na energia (desdobramento) de uma configuração. Uma vez que a mudança está contida em $\sum_{i(j)} \frac{e^2}{r_{ij}}$, é suficiente calcular os elementos de matriz deste operador.

A energia dos níveis numa dada configuração depende das interações eletrostáticas - que são função de L e S - sendo que para cada par destes valores definimos um "termo". A degenerescência desses termos é quebrada quando levamos em conta a interação spin-órbita eq(2.4), onde o valor de J passa a especificar os $2J + 1$ novos níveis. É convencional chamar ao conjunto dos níveis pertencentes ao mesmo termo de "multiplete".

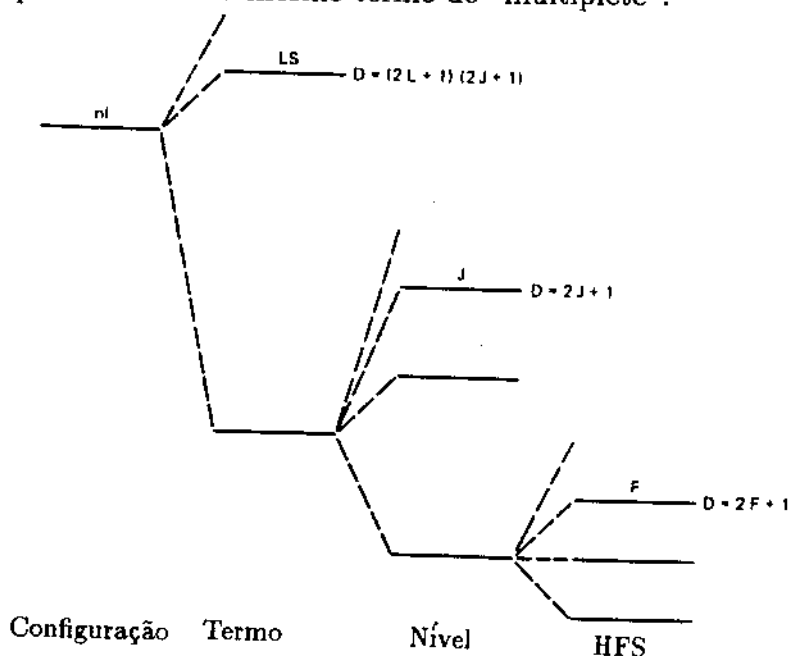


Figura 2.1: Esquema dos estados atômicos da energia em acoplamento LS e as degenerescências.

2.1.3 Equações de Hartree - Fock

Começamos à tratar as soluções das equações de Hartree - Fock tendo em consideração o seguinte hamiltoniano, eq(2.1)

$$H = \sum_i H_0(i) + \sum_{i(j)} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (2.9)$$

$$H_0(i) = \frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \quad (2.10)$$

O método de Hartree-Fock (HF) é baseado no princípio variacional e na aproximação de campo central. Segundo a aproximação do campo central, cada elétron interage com o campo médio $U(r_i)$ dos demais elétrons e do núcleo, movendo-se como se só ele existisse. A função de onda do sistema é construída a partir das funções de onda de partícula única (spin-orbitais) tendo a seguinte forma

$$\psi_i(\lambda_i) = \frac{1}{r_i} P_{n_i l_i} Y_{n_i l_i}(\theta, \phi) \chi(m_{s_i}) \quad (2.11)$$

λ_i representa as coordenadas de espaço e spin do i -ésimo elétron onde um estado será aproximado por um só determinante de Slater [4], que podemos escrever em forma abreviada

$$\Psi(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \dots \lambda_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\psi_1(\lambda_1), \psi_2(\lambda_2), \psi_3(\lambda_3) \dots \psi_N(\lambda_N)) \quad (2.12)$$

com a condição de que os $\psi_i(\lambda_i)$ satisfazem as condições de ortogonalidade.

$$\langle \psi_i(\lambda_j) | \psi_k(\lambda_j) \rangle = \delta_{ik} \quad (2.13)$$

e a condição principal é que satisfaz o princípio variacional:

$$\delta \langle \Psi | H | \Psi \rangle = 0 \quad (2.14)$$

sendo isto a aproximação de Hartree-Fock. Agora uma grandeza bastante útil é a energia total do sistema de N -elétrons, E .

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle \quad (2.15)$$

Esta quantidade pode ser escrita em função das integrais de Slater.

$$E = \sum_i I_i + \sum_{i(j)} [J(i, j) - K(i, j)] \quad (2.16)$$

onde:

$$I_i = \langle \psi | H_0 | \psi \rangle \quad (2.17)$$

$$J_{i,j} = \langle \psi_i(1)\psi_j(2) | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi_i(1)\psi_j(2) \rangle \quad (2.18)$$

$$K_{i,j} = \langle \psi_i(1)\psi_j(2) | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi_j(1)\psi_i(2) \rangle. \quad (2.19)$$

Outra grandeza muito importante em Física Atômica é a energia média de uma configuração, a qual pode ser calculada da eq(2.16):

$$E_{av} = I_{nl} + \langle \sum_{i(j)} \frac{e^2}{r_{ij}} \rangle \quad (2.20)$$

onde I_{nl} é a energia cinética mais a energia de interação eletrostática com o núcleo, para um elétron numa sub-camada nl , e $\langle \sum_{i(j)} \frac{e^2}{r_{ij}} \rangle$ é a soma das energias de interação entre pares de elétrons pertencentes a mesma sub-camada nl ou de camadas diferentes (como exemplo temos a configuração $1s^2 2s^2 2p$: $\Sigma I_{nl} = 2I(1s) + 2I(2s) + I(2p)$, e $\Sigma_{par} \text{interação} = E_c(1s, 1s) + E_c(2s, 2s) + 4E_c(1s, 2s) + 2E_c(1s, 2p) + 2E_c(2s, 2p)$), aqui E_c é conhecido como a energia de repulsão de Coulomb, e se expressa como:

$$E_c \equiv \langle LSM_L M_S | \frac{e^2}{r_{12}} | LSM_L M_S \rangle \quad (2.21)$$

A avaliação da expressão anterior é feita levando-se em conta que $|LSM_L M_S\rangle$ pode ser expresso como uma soma de determinantes de Slater. A expressão e^2/r_{12} pode ser expresso em função dos harmônicos esféricos e o teorema de adição. Então a expressão geral para E_c é [4].

$$E_c = \langle l_1 l_2 LS | e^2/r_{12} | l_1 l_2 LS \rangle \quad (2.22)$$

$$E_c = \sum_k (f_k F^k \pm g_k G^k) \quad (2.23)$$

$$E_c = \sum_{k=0}^{\infty} (2l_1 + 1)(2l_2 + 1) [(-1)^L$$

$$\begin{pmatrix} l_1 & k & l_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & k & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \left\{ \begin{matrix} l_1 & l_2 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right\} F^k - \frac{1}{2} (1 + 4(\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2)) \begin{pmatrix} l_1 & k & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left\{ \begin{matrix} l_1 & l_2 & L \\ l_1 & l_2 & K \end{matrix} \right\} G^k]$$

Sendo aqui:

$$F^k = e^2 \int \frac{r_{ij}^k}{r_{ij}^{k+1}} P_{n_1 l_1}^2(r_1) P_{n_2 l_2}^2(r_2) dr_1 dr_2 \quad (2.24)$$

$$G^k = e^2 \int \frac{r_{ij}^k}{r_{ij}^{k+1}} P_{n_1 l_1}(r_1) P_{n_2 l_2}(r_2) P_{n_2 l_2}(r_1) P_{n_1 l_1}(r_2) dr_1 dr_2 \quad (2.25)$$

O F^k representa a interação direta, e G^k a interação de troca, o produto escalar do tipo $\vec{Y}^k \cdot \vec{Y}^k$ pode ser representado numa forma mais conhecida e fácil de calcular usando o teorema de Wigner - Eckart e os símbolos $3 - j$ e $6 - j$. Com E_c calculado de acordo com os valores conhecidos de momento angular orbital ($\vec{l}$) e momento angular de spin [5], os que compõem a função de onda "spin-orbitais", expressados como $\psi_i(\lambda_i)$.

O resultado da avaliação da eq(2.14) é um conjunto de equações integro - diferenciais acopladas e que devem ser resolvidas por técnicas de cálculo numérico¹.

2.2 Acoplamento de Momento Angular

Devido à importância do operador de momento angular no estudo de átomos, moléculas, etc, faz-se necessário tratar alguns tipos de acoplamentos, sua importância e ordem de magnitude das interações.

Trataremos rapidamente este tema já que a teoria de momento angular é desenvolvido nos textos de Mecânica Quântica².

O operador de momento angular $\vec{J}$ apresenta as seguintes propriedades:

1. O operador $\vec{J}$ pode expressar-se em suas componentes J_x, J_y, J_z
2. Existe um vetor de onda denotada por $|jm\rangle$ o qual é autovetor dos operadores J^2, J_z , e $J_{\pm}$.
3. O autovalor dos operadores J^2, J_z , e $J_{\pm}$ são:

$$J^2|jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle$$

$$J_z|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle$$

¹As equações de HF podem ser encontradas em varias referências como [6, 7], e outras

²Um tratamento completo da teoria de momento angular encontramos na referência[5]

$$J_{\pm}|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}|jm\rangle$$

4. se $|jm\rangle$ é composto por adição de 2 momentos angulares $\vec{J}_1$ e $\vec{J}_2$, se pode expressar $|jm\rangle$ como uma combinação linear dos autovetores $|j_1m_1\rangle$ e $|j_2m_2\rangle$ da forma:

$$|j_1j_2jm\rangle = \sum_{m_1m_2} |j_1j_2m_1m_2\rangle \langle j_1j_2m_1m_2|j_1j_2jm\rangle$$

sendo $|j_1j_2jm\rangle$ autovetor dos operadores J_z e J^2 . A quantidade $\langle j_1j_2m_1m_2|j_1j_2jm\rangle$ é chamado coeficiente de Clebsch-Gordan. Geralmente encontramos esta expressão nos livros textos da seguinte maneira.

$$|j_1j_2jm\rangle = (-1)^{j_2-j_1-m} \sum_{m_1m_2} \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} |j_1j_2m_1m_2\rangle$$

com $m = m_1 + m_2$, $j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$, o número quântico j pode tomar valores inteiros o semi- inteiros, $m = j, j-1, j-2, \dots, -j$, e $|j_1j_2jm\rangle$ é autofunção de J_1^2, J_2^2, J^2, J_z .

5. Quando são acoplados três ou mais operadores de momento angular, os valores possíveis de j tem o mesmo tratamento do esquema de acoplamento que para dois momentos angulares [4], as autofunções $|jm\rangle$ não são unicamente determinados por $|j_1m_1\rangle, |j_2m_2\rangle, |j_3m_3\rangle, \dots$, dependem dos detalhes do esquema de acoplamento. Em geral $|j_1j_2(j_{12})j_3;j\rangle \neq |j_1j_2j_3(j_{12});j\rangle$ ver [8]. Uma expressão geral para um sistema de acoplamentos de três operadores de momento angular é da seguinte forma:

$$|j_1j_2j_3(j_{12});j\rangle = \sum_{j_1j_2} |j_1j_2(j_{12})j_3;j\rangle \langle j_1j_2(j_{12})j_3;j||j_1j_2j_3(j_{12});j\rangle$$

onde

$$\langle j_1j_2(j_{12})j_3;j|j_1j_2j_3(j_{12});j\rangle = (-1)^{j_1+j_2+j_3+j} \sqrt{(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix}$$

A quantidade entre chaves é o simbolo 6-j e cuja definição é dada em [9]:

6. As autofunções obedecem as propriedades de ortogonalidade e a anti-simetria.

2.2.1 Acoplamento LS

Nos átomos com N elétrons expressos mediante o hamiltoniano da eq(2.1) pode-se observar que H_2 é muito pequeno e pode ser desprezado, ficando $H = H_0 + H_1$, isto assegura que H seja independente do spin, além disto é constante do movimento $[H, \vec{S}] = 0$.

Como H_1 é uma pequena perturbação, e a interação coulombiana só tem influência no momento angular orbital, podemos fazer a composição dos momentos angulares de L e S separadamente e obter as autofunções de L^2 e L_z . O momento angular orbital total é:

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i \quad (2.26)$$

Também fazemos a composição dos momentos angulares de spin do átomo para obter $\vec{S}$ e as autofunções de $\vec{S}^2$, S_z

$$\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i \quad (2.27)$$

$\vec{S}$ é o momento angular total do spin do elétron.

Com os valores obtidos nas eq(2.26) e (2.27), podemos fazer a composição e obter $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$; como $\vec{J}$ é constante, então $\vec{L} = \vec{J} - \vec{S}$ também será. Isto assegura que as autofunções de L^2 , S^2 são também de J^2 . Assim L , S , M_L e M_S são os quatro bons números quânticos. A aproximação feita acima permite a escolha dos quatro bons números quânticos e também a determinação das autofunções de $H_I = H_0 + H_1$ sendo expresso como $|LSM_L M_S\rangle$, incluindo termo de interação spin-orbita em H_I . A perturbação H_1 faz aparecer um desdobramento pequeno na estrutura de níveis (autovalores), que em comparação com a interação elétrica é muito pequena (estrutura fina)³.

No segundo caso limite $|H_1| \ll |H_2|$, o acoplamento mais adequado não é mais LS , e sim o acoplamento jj , que será tratado mais adiante. Existe a notação espectroscópica $^{2S+1}L, ^{2S+1}L_j$ introduzida por Russell - Saunders que especifica muito bem as configurações, e é particularmente importante quando consideramos, por exemplo, átomos com muitos elétrons. A notação Russell

³Alguns exemplos que mostram o incremento da energia da interação spin-órbita encontra-se na referência[10], página 114.

Saunders explica muito bem os possíveis termos de uma configuração multi-eletrônica, levando em conta as sub-camadas cheias ou semi-cheias, e também do número de elétrons que tem cada sub-camada⁴.

Parâmetros do acoplamento spin-órbita

Já vimos anteriormente que quando se considera o acoplamento spin-órbita, a degenerescência dos termos energéticos é quebrada e os estados energéticos se desdobram em dois ou mais níveis.

Um caso muito simples mostra isto com um exemplo: Tomando-se a configuração p^1 , que da origem ao termo 2P , por meio do acoplamento spin-órbita se origina $J = 3/2$, $J = 1/2$. A separação de energia entre eles pode ser expressada por meio do parâmetro de acoplamento spin-orbita $\langle \xi(r) \rangle$. O termo de spin-orbita é representada na eq (2.28)

$$H_2 = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (2.28)$$

$$H_2 = \xi(r) \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (2.29)$$

$$\Delta E_2 = \langle n l j m_j | \frac{1}{2} \xi(r) (J^2 - L^2 - S^2) | n l j m_j \rangle \quad (2.30)$$

$$\Delta E_2 = \frac{\hbar^2}{2} \langle \xi(r) \rangle [j(j+1) - l(l+1) - 3/4] \quad (2.31)$$

Logo, para configuração p^1

$$\Delta E_2(^2P_{3/2}) = \frac{1}{2} \xi(r) \quad (2.32)$$

$$\Delta E_2(^2P_{1/2}) = -\xi(r) \quad (2.33)$$

⁴Vários exemplos são apresentados explicando os termos de uma configuração para sub-camadas cheias ou semi-cheias na referência[10], usando a notação espectroscópica.

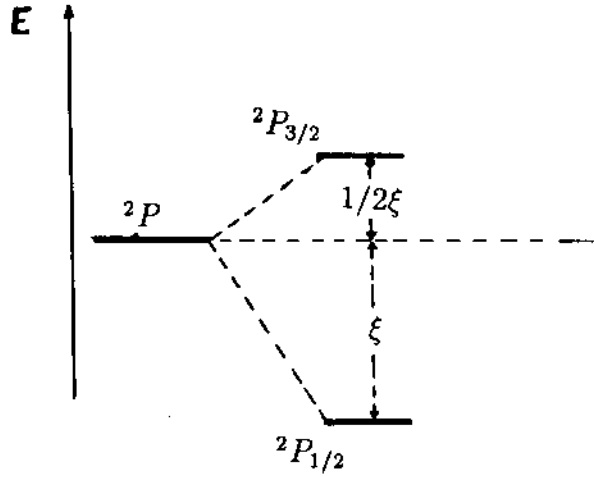


Figura 2.2: Desdobramento do termo (2P), da configuração np^1 devido ao acoplamento spin-órbita

Levando-se em conta um sistema de N elétrons, a interação spin-órbita é dada por:

$$H_2 = \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i \quad (2.34)$$

Tendo construído a autofunção $|\alpha L S J M_J\rangle$, e usando as regras conhecidas para o acoplamento do momento angular, obtemos a energia associada com a interação spin-órbita.

$$E_2 = \langle \alpha L S J M_J | \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i | \alpha L' S' J' M'_J \rangle \quad (2.35)$$

$$E_2 = \sum_{i=1}^N \langle \xi(r_i) \rangle \langle \alpha L S J M_J | \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i | \alpha L' S' J' M'_J \rangle \quad (2.36)$$

$$E_2 = \sum_{i=1}^N \langle \xi(r_i) \rangle (-1)^{J+S+L'} \delta(JJ') \delta(M_J M'_J) \left\{ \begin{matrix} L' & S' & J \\ S & L & 1 \end{matrix} \right\} \langle L || \vec{l}_i || L \rangle \langle S || \vec{s}_i || S' \rangle$$

Devem ser satisfeitas as condições triangulares $\Delta(L'L1)$ e $\Delta(S'S1)$ de símbolo $6-j$ e os elementos de matriz de $\vec{l}_i \cdot \vec{s}_i$ são diferentes de zero, para ⁵:

$$\Delta S = 0, \pm 1, \quad S' + S \geq 1 \quad (2.37)$$

$$\Delta L = 0, \pm 1, \quad L' + L \geq 1 \quad (2.38)$$

e

$$\Delta J = 0, \Delta M_j = 0 \quad (2.39)$$

onde $\langle \xi(r_i) \rangle$ é o valor esperado de $\xi(r_i)$ sobre a parte radial da função de onda, $\Delta S = S' - S$ e $\Delta L = L' - L$.

2.2.2 Acoplamento jj

O acoplamento jj começa a ter importância quando as interações entre o spin do elétron e seu próprio momento angular orbital já não é mais bem descrita pelo acoplamento LS (spin - órbita), ficando a interação spin - órbita cada vez maior. Conforme cresce Z chegando a ser no limite (Z alto) mais forte que o termo coulombiano (átomos pesados).

No esquema de acoplamento jj as funções básicas são formadas primeiro acoplando o spin de cada elétron com seu próprio momento angular orbital, acoplando juntamente os vários resultados obtidos, (j_i) de forma arbitrária para obter o momento angular total $\vec{J}$, isto é, $\vec{l}_i + \vec{s}_i = \vec{j}_i$ (para todo i), logo:

$$\begin{aligned} \vec{j}_1 + \vec{j}_2 &= \vec{J}_2 \\ \vec{J}_2 + \vec{j}_3 &= \vec{J}_3 \\ \vec{J}_3 + \vec{j}_4 &= \vec{J}_4 \\ \vec{J}_4 + \vec{j}_5 &= \vec{J}_5 \\ &\vdots \\ \vec{J}_{N-1} + \vec{j}_N &= \vec{J}_N = \vec{J} \end{aligned}$$

A notação usual do acoplamento jj é $(j_1, j_2)_J$. Encontramos que existem sub-camadas cheias e outras semi-cheias onde podemos determinar os diferentes estados pertencentes à uma certa configuração, baseado neste tipo de acoplamento. Para isto tomamos em conta dois casos, o que corresponde à elétrons

⁵Os símbolos $3-j, 6-j, 9-j$, as propriedades (condições triangulares de $6-j$), e as definições se encontram na referência [9].

equivalentes expressos por $(nl)^w$ e os que correspondem à elétrons não equivalentes.

Tomando a configuração $n p n'$ os níveis são representados por $(j_1, j_2)_J$ ou $(p_{j_1}, s_{j_2})_J$, sendo possível $j_i = l_i \pm 1/2$, ($l_i \neq 0$) então $J = j_1 + j_2, \dots, |j_1 - j_2|$; $(p_{1/2}, s_{1/2})_1, (p_{1/2}, s_{1/2})_0, (p_{3/2}, s_{1/2})_2, (p_{3/2}, s_{1/2})_1$. O número de níveis neste exemplo é idêntico ao obtido com o acoplamento LS .

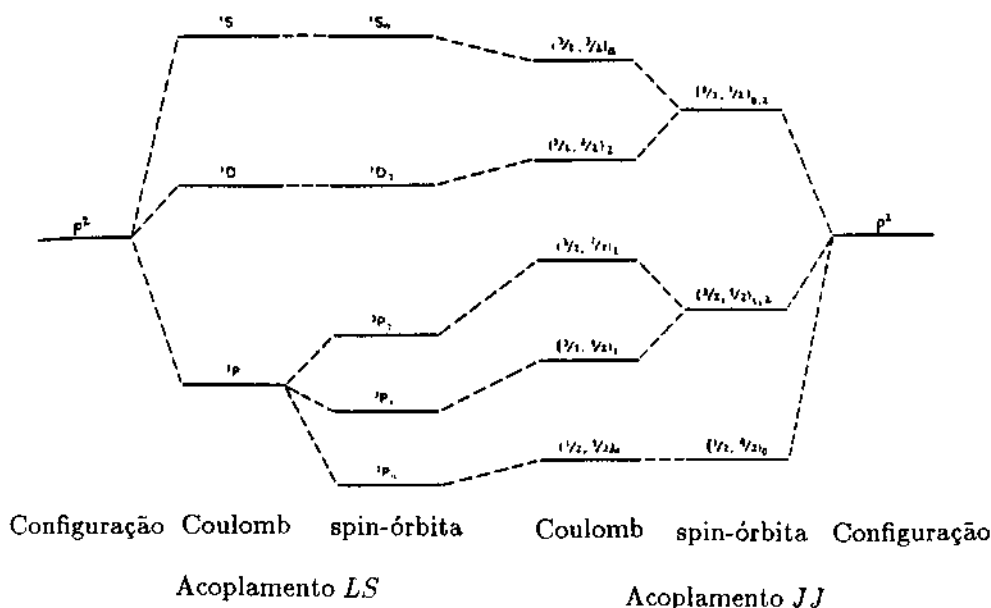


Figura 2.3: correlação entre esquemas de acoplamento LS e jj

2.2.3 Acoplamento jK

Este tipo de acoplamento ocorre quando a interação forte é a interação spin-órbita da ligação eletrônica mais fixa, e é próxima a interação coulombiana entre dois elétrons. O esquema de acoplamento correspondente é [6]:

$$\begin{aligned} \vec{l}_1 + \vec{s}_1 &= \vec{j}_1 \\ \vec{j}_1 + \vec{l}_2 &= \vec{K} \\ \vec{K} + \vec{s}_2 &= \vec{J} \end{aligned}$$

O acoplamento (jI) toma lugar quando a interação eletrostática é fraca comparada à interação spin-órbita do íon pai, porém é forte comparada ao

acoplamento de spin do elétron externo. Neste caso o momento angular $\vec{j}$ do íon pai e o momento orbital $\vec{l}$ do elétron externo são acoplados juntamente e tem como resultante $\vec{K}$. Então $\vec{K}$ é acoplado com o spin do segundo elétron, e a resultante final é $\vec{J}$ [11].

Existe uma notação padrão para os níveis de energia dada por:

$$j_1[K]J \quad (2.40)$$

Este tipo de acoplamento ocorre particularmente em configurações excitadas dos gases nobres (Ne, Ar, Kr, Xe, Rn). Este tipo de acoplamento é mostrado na transição das configurações $3d-4f$ do SVII, ver tabela (2.1) [12].

Mostramos os níveis de energia da configuração $2p^5 4f$ em S VII. Note a se-

Notação	J	Energia(cm^{-1})
(3/2)[9/2]	5	1928503
	4	1928572
(3/2)[7/2]	4	1929745
	3	1929698
(3/2)[5/2]	3	1928804
	2	1929017
(3/2)[3/2]	2	1927682
	1	1927537
(1/2)[7/2]	4	1939112
	3	1939064
(1/2)[5/2]	3	1938964
	2	1939101

Tabela 2.1: Níveis de Energia de $2p^5 4f$ em S VII

paração em escala entre os dois grupos de níveis separados pelo desdobramento do termo pai [ver fig(2.4)].

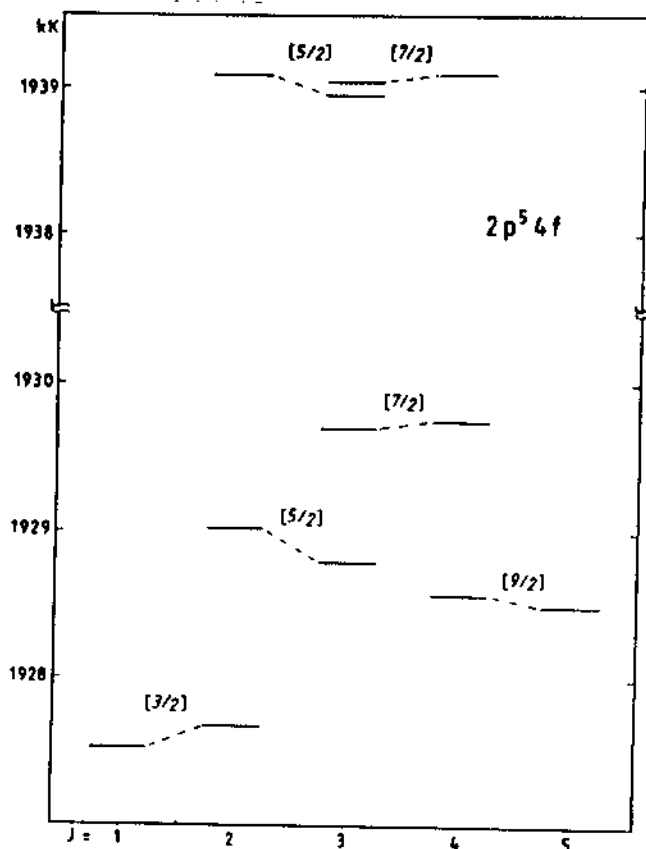


Figura 2.4: Níveis de energia da configuração $2p^5 4f$ em S VII

2.3 Transições Radiativas

Considerando um átomo no estado b com energia E_b , ele pode em geral fazer uma transição radiativa espontânea a um estado a de menor energia E_a , com emissão de um fóton de energia:

$$h\nu_{ba} = E_b - E_a \quad (2.41)$$

correspondendo a uma linha espectral de comprimento de onda

$$\lambda_{ba} = \frac{hc}{E_b - E_a} \quad (2.42)$$

neste caso, a interação que tem o átomo é com as ondas eletromagnéticas a qual pode ser escrito com o potencial vetor, em forma de ondas planas.

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_k \sum_{\lambda=1,2} \vec{e}_{k\lambda} (\mathbf{A}_{k\lambda} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + (\mathbf{A}_{k\lambda}^* e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}})) \quad (2.43)$$

onde $\mathbf{A}_{k\lambda}$ é proporcional a $e^{-i\omega t}$. O hamiltoniano de interação é descrito em função do potencial vetor⁶

$$H_{int} = \frac{e}{2mc} \vec{p} \cdot \vec{A} + \frac{e^2}{2mc} A^2 + \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (2.44)$$

o primeiro termo do hamiltoniano é dominante, então se pode obter a partir desta primeira expressão a probabilidade de transição espontânea do estado b a um estado a para um fóton polarizado $\vec{e}_{k\lambda}$ com um vetor de onda $\vec{k}$, no intervalo $\vec{k}$, $\vec{k} + d\vec{k}$ como:

$$dW_\lambda = \frac{e^2 w}{2\pi \hbar c^3 m^2} |\vec{e}_{k\lambda} \cdot \langle b | \vec{p} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} | a \rangle|^2 d\Omega \quad (2.45)$$

onde e é a carga do elétron, w a frequência angular, $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$, e $d\Omega$ é o elemento de ângulo sólido. Integrando sobre todos os ângulos e somando sobre λ temos a probabilidade de transição total $W(a,b)$ entre os estados b e a que generalizando para transições entre níveis degenerados γJ e $\gamma' J'$, a probabilidade total de transição será fazendo a média sobre todos os estados iniciais b e somando sobre todos os estados finais a como:

$$W(\gamma J, \gamma' J') = \frac{1}{2J_b + 1} \sum_{M' M} W(\gamma J M, \gamma' J' M') \quad (2.46)$$

2.3.1 Radiação de dipolo elétrico

Quando o comprimento de onda $\lambda = \frac{2\pi c}{w}$ é muito maior que as dimensões do sistema, ou seja, $\lambda \gg a$, os elementos de matriz do tipo $\langle b | \vec{e}_{k\lambda} \cdot \vec{p} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} | a \rangle = \vec{e}_{k\lambda} \cdot \langle b | \vec{p} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} | a \rangle$, podem ser simplificados se $\vec{k} \cdot \vec{r} \ll 1$, assim se $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \approx 1$, se pode escrever em forma aproximada:

$$\langle a | \vec{p} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | b \rangle \equiv m \langle a | \vec{v} | b \rangle \simeq -i\omega m \langle a | \vec{r} | b \rangle. \quad (2.47)$$

⁶ ver I.I Sobelman página 200

Como o momento de dipolo é dado por $e\vec{r} = \vec{D}$, então a probabilidade de transição é dada pela eq(2.48) [13]

$$dW = \frac{w^3}{2\pi c^3 \hbar} |\vec{e}_{k\lambda} \cdot \langle \gamma JM | \vec{D} | \gamma' J' M' \rangle|^2 d\Omega \quad (2.48)$$

onde $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \simeq 1$ no potencial vetor corresponde a aproximação na qual todos os termos na expansão multipolar são desprezados exceto aquele que corresponde ao dipolo elétrico (E_1). A transição dipolo elétrico (E_1) ocorre só quando os elementos da matriz $\langle \gamma JM | \vec{D} | \gamma' J' M' \rangle$ são diferentes de zero. Sabemos que $e\vec{r} = \vec{D}$ é conhecido como o momento de dipolo elétrico, mediante o uso de teorema de adição dos harmônicos esféricos pode-se escrever $\vec{e}_\lambda \cdot \langle \gamma JM | \vec{D} | \gamma' J' M' \rangle = \sum_q e_q^* \langle \gamma JM | D_q | \gamma' J' M' \rangle$, e seguidamente pode-se usar o teorema de “Wigner-Eckart”.

$$\langle \gamma JM | D_q | \gamma' J' M' \rangle = (-1)^{J-M} \langle \gamma J || D || \gamma' J' \rangle \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}$$

usamos as propriedades dos símbolos $3-j$ para achar as regras de seleção para a radiação do dipolo elétrico, os elementos de matriz de $\langle \gamma JM | D_q | \gamma' J' M' \rangle$ são diferentes de zero para:

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1$$

$$J + J' \geq 1$$

$$\Delta M = M - M' = 0, \pm 1$$

Outra regra de seleção é que a transição dipolo elétrico só será possível para estados de paridades diferentes. Agora usando a equação (2.46) obtemos

$$W(\gamma JM, \gamma' J' M') = \frac{4w^3}{3\hbar c^3} \frac{1}{2J+1} |\langle \gamma J || D || \gamma' J' \rangle|^2 \quad (2.49)$$

2.3.2 Radiação do multipolo

Temos uma solução geral para as transições elétricas e magnéticas, a partir da solução da eq(2.50)

$$\nabla^2 G + k^2 \vec{G} = 0 \quad (2.50)$$

Sendo que esta equação é satisfeita pelo potencial vetor $\vec{A}$, a solução desta equação pode ser obtida pela ação do operador de momento angular $\vec{L} = -i[\vec{r}, \vec{\nabla}]$ sobre a função Φ que satisfaz a equação de onda, ver eq(2.51)

$$\nabla^2 \Phi + k^2 \Phi = 0 \quad (2.51)$$

como $\vec{L}Y_{lm} = \vec{Y}_{lm}$ e $\vec{G}_{kq} = \vec{L}\Phi_{kq}$, então:

$$\vec{G}_{kq} = \begin{cases} (-i)l \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{r} Y_k^q \vec{L} & , \quad kr \gg 1 \\ \frac{(2l-1)!!}{2^{l-1}k^l} \frac{1}{r^{l+1}} Y_k^q \vec{L} & , \quad kr \ll 1 \end{cases}$$

daqui podemos determinar $\vec{E}$, $\vec{H}$ de duas formas diferentes:

$$H_{kq} = -a_{kq} G_{kq} \text{ e } E_{kq} = -a_{kq} \frac{i}{k} \nabla \times G_{kq}$$

$$E_{kq} = a_{kq} G_{kq} \text{ e } H_{kq} = -a_{kq} \frac{i}{k} \nabla \times G_{kq}$$

Onde a_{kq} são constantes que tem relação com os momentos multipolares. No caso geral o campo de radiação de um certo sistema de cargas pode ser apresentada em forma de superposição dos campos E_{kq}^E , E_{kq}^M e H_{kq}^E , H_{kq}^M . Portanto quanticamente a probabilidade de transição radiativa pode ser expressa pelas eq(2.52,2.53) ⁷:

$$W_k^E(\gamma JM, \gamma' J' M') = \frac{2(2k+1)(k+1)}{[(2k+1)!!]^2 k} \left(\frac{w}{c}\right)^{2k+1} \frac{1}{\hbar(2J+1)} \sum_{qMM'} |\langle \gamma JM | Q_{kq} | \gamma' J' M' \rangle|^2 \quad (2.52)$$

$$W_k^M(\gamma JM, \gamma' J' M') = \frac{2(2k+1)(k+1)}{[(2k+1)!!]^2 k} \left(\frac{w}{c}\right)^{2k+1} \frac{1}{\hbar(2J+1)} \sum_{qMM'} |\langle \gamma JM | M_{kq} | \gamma' J' M' \rangle|^2 \quad (2.53)$$

Onde

$$Q_{kq} = -e \sum_i r_i^k C_{kq}(i) \quad (2.54)$$

e

$$M_{kq} = \frac{-e\hbar}{mc(k+1)} \sum_i [\vec{\nabla}(r_i^k C_{kq}(i)) \cdot \vec{l}_i] \quad (2.55)$$

⁷Um tratamento mais rigoroso pode-se encontrar na página 217 da referência [13]

O sub-índice i que aparece nas equações anteriores, indicam que se tem que somar para todos os elétrons pertencentes ao átomo. A regra de seleção aparece, como no caso anterior (dipolo elétrico) tendo em consideração que os elementos de matriz da eq(2.52,2.53) não podem ser zeros, e das propriedades de simbolo $3-j$, também a condição triangular $(JJ'K)$, e $M - M' = q$, assim a radiação multipolar de ordem k , q satisfaz a seguinte regra de seleção:

$$|\Delta J| = |J - J'| = k, k-1, k-2, \dots, 0; J + j' \geq k$$

$$\Delta M = M' - M = q = -k, -k+1, \dots, k$$

Transições de quadrupolo elétrico (E_2)

Substituindo na equação (2.52), para $k=2$ obtemos:

$$W_2^E = \frac{1}{15\hbar} \left(\frac{w}{c}\right)^5 \frac{1}{\hbar(2J+1)} \sum_{qMM'} |\langle \gamma JM | Q_{2q} | \gamma' J' M' \rangle|^2 \quad (2.56)$$

$$W_2^E = \frac{1}{15\hbar} \left(\frac{w}{c}\right)^5 \frac{1}{\hbar(2J+1)} |\langle \gamma J || Q_2 || \gamma' J' \rangle|^2 \quad (2.57)$$

Onde:

$$Q_{2q} = -e \sum_i r_i^2 C_{2q}(i) \quad (2.58)$$

e a regra de seleção para este caso é: $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$ e $J + J' \geq 2$.

Como um comentário, uma comparação entre as ordens de magnitude entre transições de dipolo elétrico e quadrupolo, se observa que para $\lambda = 5000\text{\AA}$ a transição quadripolo elétrico é oito ordens de magnitude menos provável que a transição dipolo elétrico.

Transições de dipolo magnético (M_1)

A transição dipolo magnético é obtido fazendo $k = 1$ na eq(2.55)

$$M_1 = \frac{-e\hbar}{2mc} (\vec{L} + g_s \vec{S}) \quad (2.59)$$

com $g_s = 2$, a probabilidade de transição é:

$$W_1^M = \frac{4}{3\hbar} \left(\frac{w}{c}\right)^3 \frac{1}{\hbar(2J+1)} \sum_{MM'} |\langle \gamma JM | M | \gamma' J' M' \rangle|^2 \quad (2.60)$$

$$W_1^M = \frac{4}{3\hbar} \left(\frac{w}{c}\right)^3 \frac{1}{\hbar(2J+1)} |\langle \gamma J || M || \gamma' J' \rangle|^2 \quad (2.61)$$

Logo a regra de seleção é:

$$\Delta J = 0, \pm 1$$

$$\Delta M = 0, \pm 1$$

ou

$$\Delta S = 0, \Delta L = 0$$

A magnitude desta transição em comparação com o dipolo elétrico é 5 ordens de magnitude menos provável.

Capítulo 3

Parte experimental

Neste capítulo, descrevemos os diversos aparelhos que foram usados. Apresentamos uma descrição do theta - pinch que foi construído no Instituto de Física da UNICAMP, e o espectrógrafo a vácuo acoplado a ele, aparelho que permite a obtenção dos espectros estudados.

Em seguida fazemos uma descrição da fonte de radiação em Tubo de Descarga Capilar - TDC, que se encontra em La Plata no Centro de Investigaciones Opticas - CIOp. Mencionamos também a forma de uso e as melhorias conseguidas com estas modificações. Fazemos uma descrição detalhada das modificações realizadas no tubo de descarga theta - pinch e no espectrógrafo (sistema de vácuo). Será possível conhecer as melhorias obtidas e o uso do aparelho.

3.1 O Theta - Pinch

O theta - pinch é uma máquina especialmente construída para produzir luz espectroscópica. Este tipo de luz é produzido por intermédio de uma descarga de tipo pinch ou “flashes”, com emissão radiante no eixo de simetria do solenóide, a qual é detectada no espectrógrafo através de uma fenda.

Este aparelho foi montado em nosso laboratório com a finalidade principal de fazer espectroscopia atômica de médios e altos graus de ionização. Escolheu-se este tipo de fonte porque permite um espectro mais puro em comparação com outras fontes, contudo temos que mencionar o choque das partículas com as paredes do tubo de descarga que arrancam átomos principalmente de oxigênio e silício, sendo registrados como impurezas.

O theta - pinch está constituído por uma fonte de alta tensão, banco de capacitores, tubo de descarga e chaves de segurança.

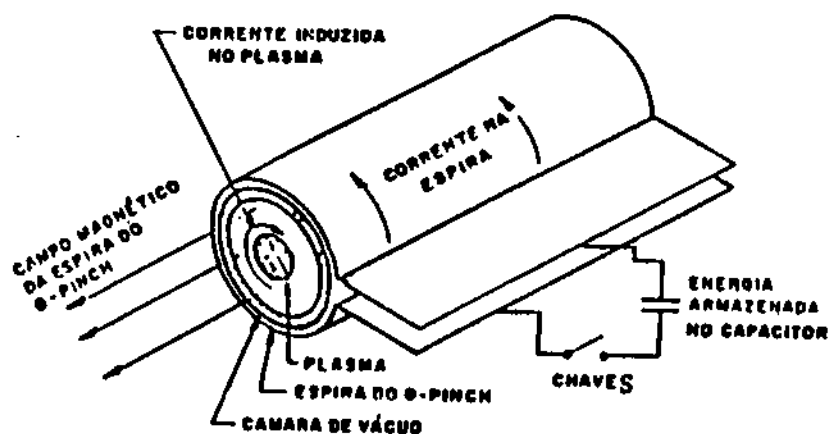


Figura 3.1: Diagrama básico de Theta-Pinch.

3.1.1 Fonte de alta tensão

A fonte de alta tensão é uma fonte de corrente contínua, de alimentação trifásica de 220 V, saída de 0 até 60 kV e uma corrente de 0 até 100mA. Contém dois cabos de 10 metros de comprimento e plug com 10 e 16 pinos, os quais permitem a ligação painel-fonte de alta tensão na parte de instrumentação e alimentação. Através de um disjuntor, energizamos todo o sistema, e que após o acionamento deverá acender a lâmpada piloto. Qualquer falha no circuito primário ou secundário reflete nele. O aparelho é construído por "Instrumentos Elétricos LTD" MULTI - TEST, modelo HT - 60.100 cc.

3.1.2 Banco de capacitores

O banco de capacitores está formado por quatro capacitores, ligados em paralelo, dando uma capacitância total de $7.29 \mu F$, e uma indutância menor que 20 nH por capacitor, tendo uma indutância total de 5 nH. A tensão

máxima é de 60 kV.

Existe uma ligação elétrica entre o banco de capacitores e as placas do theta - pinch, por intermédio de uma chave pressurizada, os capacitores foram fabricados pela firma Norte-Americana " Sangamo".

3.1.3 Placas do Theta-Pinch

Duas placas de alumínio paralelas espaçadas por seis folhas de Mylar (0.2 mm cada), estão unidas num dos extremos por um solenóide (espira multivoltas), no outro extremo encontra-se a chave pressurizada do tipo spark-gap e a conexão placa e banco de capacitores, duas válvulas magnéticas acionadas eletricamente controlam a entrada e saída de gás na chave, a válvula que permite a entrada do gás se encontra normalmente aberta, e a outra fechada. Uma mudança de gás acontece na chave pressurizada, quando a ordem do painel chega nas válvulas magnéticas, o banco de capacitores é descarregado e uma fonte de luz se observa no tubo. A pressão máxima das válvulas é de 9 kg/cm^2 com uma tensão de 120 V, os gases normalmente usados são: Argônio e Ar comprimido sob alta pressão.

3.1.4 Tubo de descarga

O tubo de descarga de theta-pinch encontra-se no interior de solenoide (bobina multivoltas, construído em nosso laboratório), é feito de um tubo de Quartzo com 30mm de diâmetro interno e 50cm de comprimento. Um dos extremos encontra-se acoplado numa válvula agulha. Sua função é de permitir a entrada do gás espectroscópico altamente puro; no outro extremo do tubo se acopla a um tubo flexível (bellows) e que por sua vez se une à entrada do espectrógrafo (posição da fenda).

O acoplamento bellows-espectrógrafo tem duas saídas; a primeira acopla um sensor de pressão (Barocel Pressure Sensor) com um intervalo na medida desde 0 – 10 mbar, no tubo de theta-pinch. A segunda é um vai-paz, que permite fazer vácuo simultaneamente no espectrógrafo e tubo de descarga theta-pinch, tendo acoplado no mesmo lugar uma válvula à pressão, que fechado se pode manter uma pressão diferencial entre espectrógrafo e o tubo de theta-pinch, isto é, no momento de tomada de espectros, se manter uma pressão de trabalho de 1 μbar , 5 μbar , 10 μbar , etc.

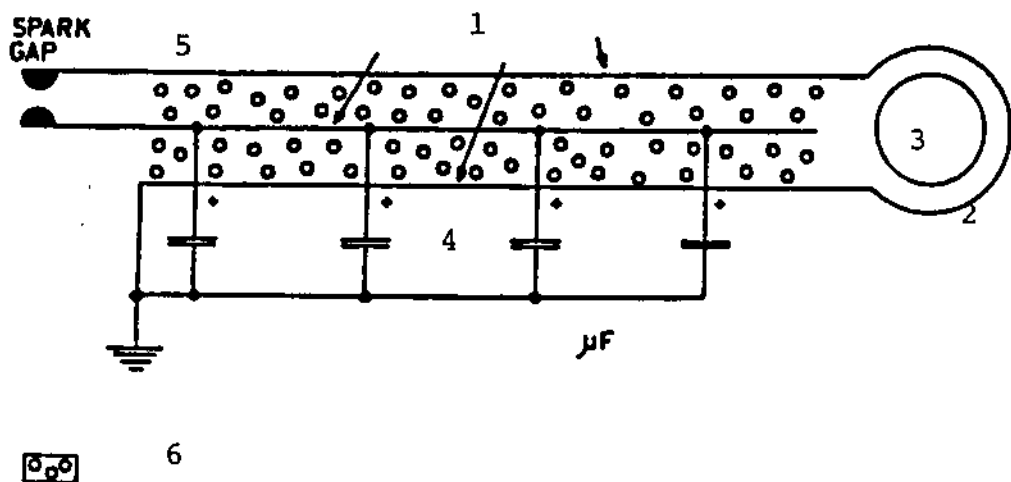


Figura 3.2: Circuito elétrico principal para a descarga do Theta-Pinch.

(1) Placas do Theta-Pinch, (2) Bobina multivoltas, (3) Tubo de descarga, (4) Banco de capacitores, (5) Chave spark gap, (6) Isolamento.

3.1.5 Chaves de segurança

As chaves de segurança, têm por finalidade evitar acidentes dentro do laboratório. Temos uma chave elétrica acionada por um relé, e fecha o circuito na ausência de corrente, isto é que um dos eletrodos está ligado à placa positiva do capacitor, e o outro eletrodo está ligado à terra através de um resistor de água de $\approx 10K \Omega$. Existe também uma chave manual, a qual consiste de uma chave tripla de acionamento simultâneo, as quais estão suspensos por um fio de Nylon deixando o circuito aberto, ao igual que o anterior, também encontra-se ligado a terra através de um resistor de água de $\approx 10K \Omega$, em caso de que as duas chaves anteriores não funcionem, então se tem como último recurso o bastão de segurança, que consiste de um bastão de PVC, com a ponta de cobre ligada ao resistor de água e a terra, para seu uso basta tocar com a ponta de cobre a parte carregada [14].

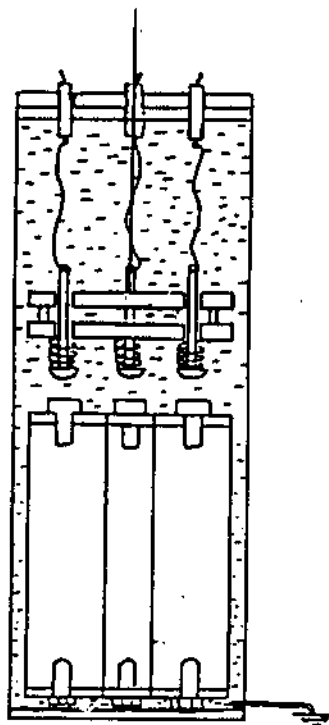


Figura 3.3: Chave de segurança

3.2 O espectrógrafo

Permite o registro dos espectros fotograficamente. Seus elementos fundamentais são: a fenda, o sistema dispersivo ou rede de difração, sistema de alinhamento, placa fotográfica, e o sistema de vácuo.

O espectrógrafo usado em nosso laboratório foi fabricado no "Research Physics Institute", Estocolmo, Suécia, no ano de 1963. É um espectrógrafo a vácuo de incidência normal, com fenda ajustável, e possui uma rede concava, de distância focal de 2m, uma rede de 1080 linhas/mm, permite a obtenção dos espectros na região de 300 - 2000 Å.

O espectrógrafo está acoplado a um sistema de vácuo. Os espectros obtidos são registrados sobre uma placa fotográfica.

3.2.1 Fenda do espectrógrafo

O espectrógrafo foi construído para detectar os espectros de emissão sobre uma placa fotográfica. A radiação produzida pelo efeito pinch penetra no espectrógrafo através de uma fenda regulável.

Existe uma relação a considerar para a largura linear d de difração na medição linear dada pela fórmula geral de difração sobre um instrumento ótico $d = f\lambda$, o valor de f é a razão da distância focal sobre abertura para uma rede côncava de largura efetiva W e raio de curvatura R , $f = R/W$; podemos dar um exemplo [15]. Onde $f = 30$, com um valor típico para d é $d = 0.003$ mm, para $\lambda = 1000 \text{ \AA}$, lembrando que d é uma medida aproximada da largura máxima da fenda e pode ser usado para obter a resolução, como o registro que se obtém numa placa fotográfica de largura 0.01 mm, o grão da placa é um fator limitante na resolução. Concluindo, a largura da fenda é de grande importância, pois se tiver-mos uma fenda muito aberta da uma intensidade relativa bastante grande, mais da mesma forma, o poder de resolução será muito baixo, em nosso laboratório nós usamos a fenda com uma largura de 10μ [16].

3.2.2 Rede de difração

O espectrógrafo utilizado para obtenção dos espectros, tem uma rede côncava; a rede é construída em um espelho esférico côncavo de metal, sua função é difratar e focalizar a radiação incidente (luz), ao mesmo tempo faz o papel de uma lente condensadora, focalizando no porta-placa que se encontra no raio de curvatura da rede, elimina a aberração cromática e tem uma grande vantagem com respeito a rede plana, pois se pode usar para as regiões do espectro no ultravioleta, a fig(3.5) apresenta as ubicações da fenda, rede, porta-placa.

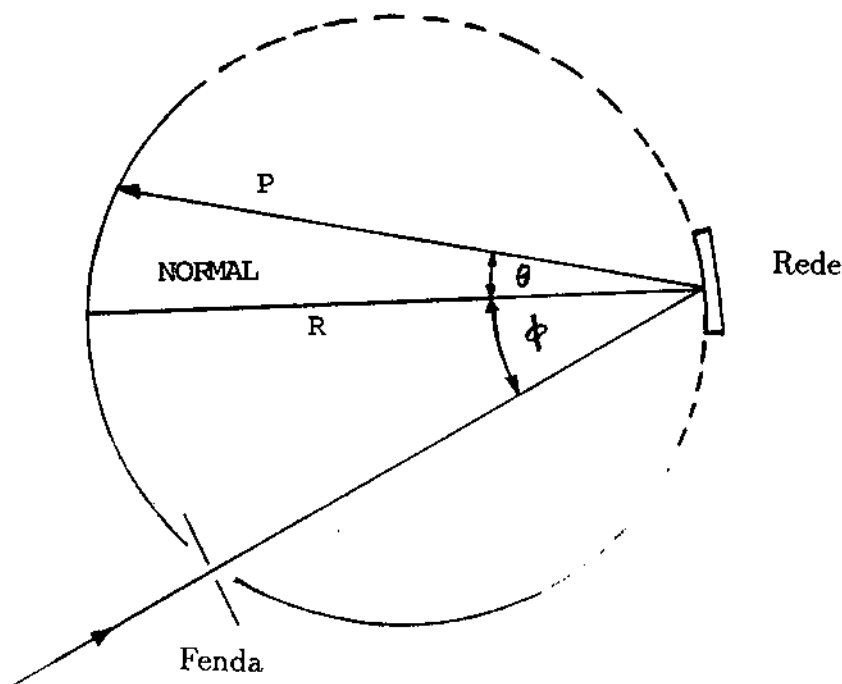


Figura 3.4: Rede à incidência normal

A radiação dispersa pela rede obedece a seguinte equação geral(3.1) [16, 17]

$$n\lambda = a(\sin(\theta) + \sin(\phi)) \quad (3.1)$$

onde n é um número inteiro que representa a ordem de difração, λ é o comprimento de onda da radiação, e a a constante da rede. A eq(3.1) permite também fazer os cálculos do poder de resolução teórico de acordo com o princípio de Rayleigh, obtendo-se uma expressão final como:

$$R_e = \frac{\lambda}{\delta\lambda} = \frac{\sigma}{\delta\sigma} = nN \quad (3.2)$$

onde n é a ordem de interferência, N o número de abertura e R_e é o poder de resolução, R_e também pode ser escrita como:

$$R_e = nN = \frac{a\sin(\theta)}{\lambda} \frac{W}{a} = \frac{W\sin(\theta)}{\lambda} \quad (3.3)$$

com W igual a largura da rede. Da mesma forma pode-se dar uma expressão para a dispersão $\frac{d\theta}{d\lambda} = \frac{\tan(\theta)}{\lambda}$ e que é conhecido como dispersão angular, e o

fator de placa como a dispersão linear inversa, é dado pela expressão:

$$\frac{d\lambda}{dl} = \frac{\lambda \cos(\theta)}{P(\sin(\theta) + \sin(\phi))} = \frac{a \cos(\theta)}{nP} \quad (3.4)$$

l é a distância desde uma referência arbitraria (incidência normal), a posição onde o comprimento de onda λ da radiação aparece, recordando que o caminho da luz (radiação) não é perpendicular no círculo de Rowland, se pode aproximar para incidência normal [16], ver fig(3.4).

$$\frac{d\lambda}{dl} = \frac{a \cos(\theta)}{nR} \quad (3.5)$$

Nossa rede possui 1080 ranhuras/mm e formato de $120 \times 80mm^2$ "blazed" a 1000 Å, tendo como fator de placa em primeira ordem $\frac{d\lambda}{dl} = 4.61 \text{ Å/mm}$, e uma rede côncava de 2 metros de diametro no círculo de Rowland, denomina-se espectrógrafo de 2 metros.

3.2.3 Sistema de alinhamento

O alinhamento do sistema ótico começa na bobina do theta-pinch, o eixo da bobina deve interceptar o plano que forma a fenda, a interseção deve ser perpendicular, a abertura da fenda deve estar paralela à abertura da rede.

1. Tomam três pontos no círculo de Rowland; a fenda, a rede, e o orifício de alinhamento.
2. Faz-se coincidir o feixe do laser de baixa potência com o eixo da bobina, e se recebe no orifício de alinhamento num anteparo.
3. O sinal no anteparo ficará claro e concentrado no meio, caso contrário está desalinhado. Se ocorre isso então a rede ou a bobina não estão alinhados, se sugere começar pela bobina, se o problema ainda existe então movimentar na parte de tras do espectrógrafo, isto é, a rede, até que o feixe atinga o centro orifício de alinhamento.

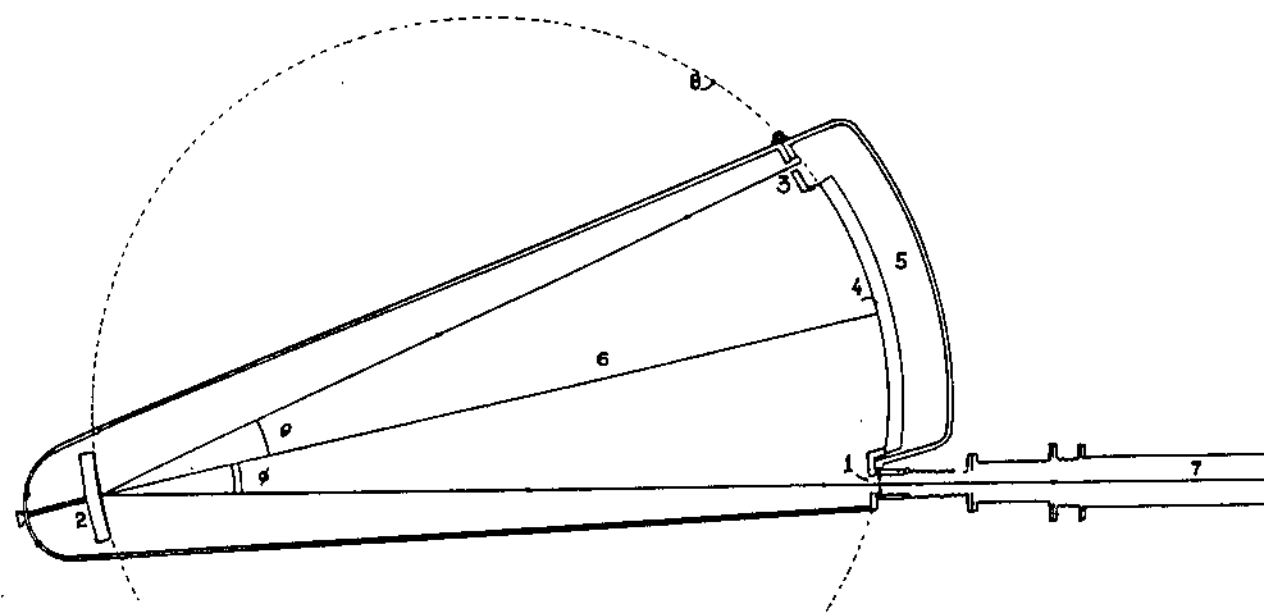


Figura 3.5: Sistema de alinhamento do espectrógrafo.

(1) Fenda, (2) Rede difração, (3) Orifício de alinhamento, (4) Posição da placa fotográfica, (5) Porta-placas, (6) Compartimento principal do espectrógrafo, (7) Fonte de radiação, (8) Círculo de Rowland.

3.2.4 Placa de emulsão fotográfica

As placas fotográficas usadas em um laboratório de espectroscopia não são únicas, elas se diferenciam pela sensibilidade que tem de acordo com o comprimento de onda que recebem. Qualquer emulsão é naturalmente sensível, desde os 2100 Å no ultravioleta, até os 5000 Å no visível, para comprimentos de ondas curtas a emulsão começa a absorver a radiação, então é necessário usar algum tipo de sensibilizador; a outra alternativa é de usar emulsões especiais.

As placas desenvolvidas comercialmente são feitas por "Eastman Kodak Company", "Ilford Q plates", "Schuman Emulsions", etc. O alto poder resolutivo das emulsões Short Wave Radiation (SWR) são altamente apreciadas por Compton and Boyce [17, 15]. As placas SWR, tem uma maior resolução no intervalo 500 - 600 Å, isto num instrumento de 2 metros à incidência normal.

As placas de emulsão fotográfica usadas em nosso laboratório são: “ Kodak SWR Plate, made in USA by Eastman Kodak Company ”, as placas são de vidro, tendo as seguintes dimensões (2×10) medidas em polegadas.

3.2.5 Revelação das placas de emulsão fotográfica

Para a revelação das placas de emulsão fotográfica, é de muita importância, levar em consideração as recomendações feitas pelo fabricante, ter cuidado em exposições adicionais de radiação, impressões digitais, e o tempo do processo da revelação.

Usamos:

1. Revelador: “ Kodak D-19 ” fabricado na França por EMB. Kodak- Pathé.
2. Interruptor: “ Kodak Indicator Stop Bath”, fabricado em England by Kodak Company.
3. Fixador: “Kodak UNIFIX ”, fabricado na França por EMB. Kodak-Pathé.

O tempo de revelado em ordem que se apresenta é:

- Revelador por 2 minutos.
- Interruptor por 30 segundos.
- Fixador por 10 minutos.

Após os doze minutos e trinta segundos, lava-se as placas com água destilada por um longo período de tempo.

3.2.6 Sistema de vácuo do espectrógrafo

O sistema de vácuo do espectrógrafo é composto de bomba mecânica e bomba Turbo Molecular. A bomba mecânica é uma Edwards, modelo E2M18, com uma velocidade de bombeamento de aproximadamente $20m^3/h$ a $10mtorr$, e à uma pressão final de $10^{-4}mbar$. O turbo molecular: “Turbo - V 450 Pumps ” modelo 962-9042 - Varian, com uma velocidade de bombeamento de aproximadamente $450 l/s$, permite obter uma pressão base de $5 \times 10^{-10}mb$ em

48 horas, temperatura de operação no ambiente de $+5^{\circ}\text{C}$ até 35°C , o aparelho é refrigerado com água à um fluxo de 30 l/h , de $+10^{\circ}\text{C}$ até 25°C em uma pressão de água de 2 à 4 bars.

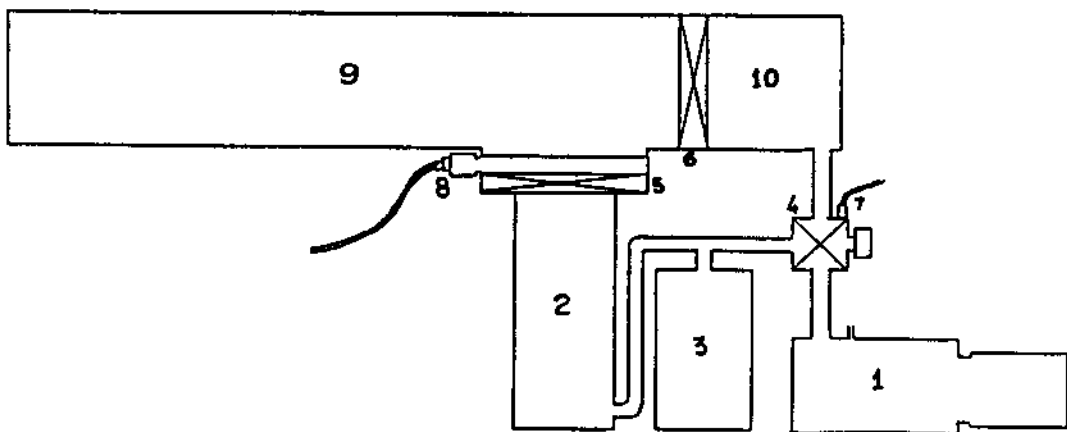


Figura 3.6: Esquema de vácuo do espectrógrafo

(1) Bomba Mecânica, (2) Turbo Molecular, (3) Reservatório, (4) Válvula tripla, (5) Válvula gaveta, (6) Válvula do portaplacas, (7) Pirani, (8) Penning, (9) Compartimento principal do espectrógrafo e (10) Portaplacas.

As válvulas (4), (5), e (6) são consideradas de grande importância quando o sistema se encontra fazendo vácuo, porque permite ter acesso à certos compartimentos sem necessidade de quebrar o vácuo. Se pode resumir em três passos, ver também [14].

1. Para pôr ou tirar a placa fotográfica do porta cassete, é necessario que a válvula (4) se encontre na posição "air admittance cassette", a válvula (6) totalmente fechada e a válvula (5) aberta. Neste caso o turbo molecular fica fazendo vácuo na camera principal, e o compartimento do porta-placas se encontra a pressão atmosférica.
2. Uma vez posto ou tirado a placa fotográfica se procede a fechar o porta cassete, desta vez pondo a válvula (4) na posição "vacuum cassette",

a válvula (6) totalmente fechada, e a válvula (5) aberta. Neste caso, a bomba mecânica continua fazendo vácuo no porta-placas (10), e durante esse período o reservatório (3) ajudará a turbo molecular manter o bombeamento do espectrógrafo. Quando a pressão for menor que 500mtorr, colocamos a válvula (4) na posição "back diffusion pump" e logo deixamos aberto a válvula (6).

3. Uma vez posto a placa fotográfica, como seguinte passo é fazer vácuo no sistema todo, para isso a válvula (4) deverá estar na posição "back diffusion pump" e as válvulas (5) e (6) devem ficar abertas.

Os três passos seguidos anteriormente são feitos quando se consideram que o sistema todo se encontra limpo, mais na verdade sempre existiram partículas de impurezas procedentes da interação (choque) entre as paredes do tubo de descarga, isto é existiram átomos de silício após cada descarga, mas é possível eliminar a maior parte das impurezas de nitrogênio.

3.3 Tubo de descarga capilar - TDC

O tubo de descarga capilar - TDC, é uma fonte de radiação que produz espectros de gases medianamente ionizados. Consiste de um tubo capilar de pyrex com 3mm de diâmetro interno, em seus extremos tem os eletrôdos as quais permitem a descarga elétrica através do capilar, os eletrôdos são de tungstênio, revestidos com indio, encontrando-se distantes um do outro em 200mm.

A descarga no TDC é produzida por um capacitor de baixa indutância, se pode variar a capacitância de 2.5 à 100 nF, carregadas a uma tensão ajustável com um máximo de 22kV. O circuito elétrico é esquematizado na fig(3.7).

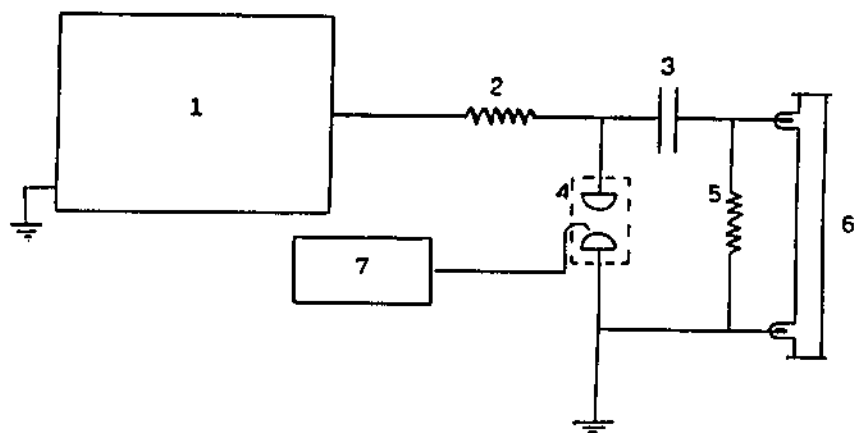


Figura 3.7: Esquema do circuito elétrico do TDC

(1) Fonte, (2) Resistor de carga, (3) Capacitor, (4) Chave de acionamento, (5) Resistor de polarização, (6) Tubo do TDC, (7) Gerador de pulsos.

Com esta montagem se pode fazer experiências nas regiões VUV e visível.

3.3.1 Experimento no vácuo ultra violeta (VUV)

Nesta região se usa um espectrógrafo à vácuo de incidência normal, com uma rede côncava, com uma distância focal de 3 m, 1200 linhas /mm e “blazed” a 1200 Å, com um fator de placa em primeira ordem de difração de 2.77 Å/mm, o espectrógrafo é fabricado por “Hilger e Watts”.

O tubo é fixado diretamente sobre a fenda, permitindo a entrada da luz diretamente ao espectrógrafo, o gás a ser usado no TDC entra por meio de uma válvula agulha, sendo regulado o fluxo do gás por esta agulha e a fenda, a condutância da fenda garantirá a pressão mais alta no capilar que no espectrógrafo.

3.3.2 Experimento no visível e UV

O espectrógrafo usado nesta região é de rede plana, de montagem Ebert, com 3.4m de distância focal, com fator de placa de 4.8 Å/mm e “blazed” à 5000 Å, de fabricação Japonesa.

Nesta região a montagem experimental não é mais fixado no espectrógrafo, e o gás é mantido fechado no tubo durante o experimento, também permite a instalação de uma ótica de enfoque, permitindo uma melhoria no registro

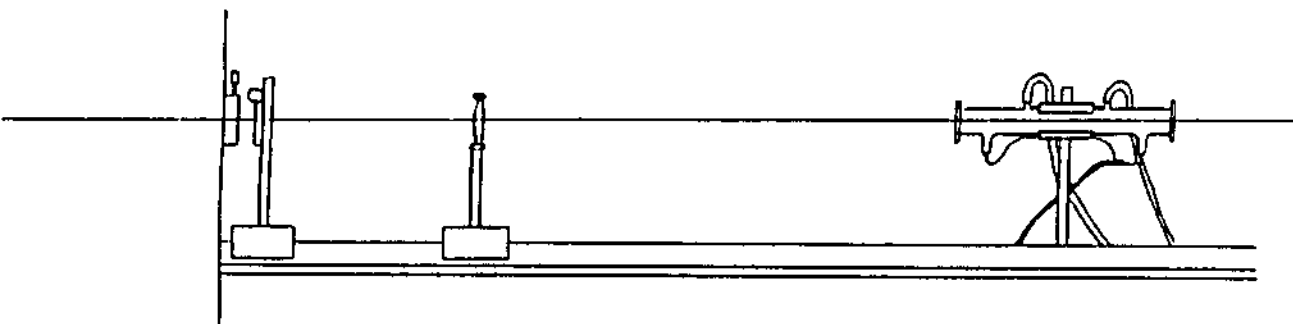


Figura 3.8: Sistema de alinhamento

3.3.3 Processo experimental

A emissão luminosa provocada por descargas elétricas no tubo TDC, começa quando o capacitor é carregado pela fonte até quando dispara a chave de acionamento, descarregando o capacitor através do tubo. A passagem da corrente pelo tubo capilar ioniza o gás, o qual passa a emitir radiação, que vai

entrar pela fenda do espectrógrafo de $20\mu\text{m}$.

O mecanismo de ionização é por colisão eletrônica, durante a descarga o plasma formado comprime-se em direção ao centro do tubo devido ao efeito pinch. Os maiores graus de ionização são observados no centro do tubo, os valores dos comprimentos de onda são obtidos dos espectrogramas, registra-se também o espectro de uma lâmpada de Tório que servirá de espectro padrão no momento de fazer as medidas (as linhas dessa lâmpada foram medidas com técnicas interferométricas).

Uma vez obtido as placas, se passam à fazer as medidas dos espectros, para isso se usa um comparador fotoelétrico semi-automatico tipo Grant, instalado no Observatorio Astronomico de la Plata, precisão de medida é $1\mu\text{m}$. Para as medidas e a classificação ionica se usam como padrão (caso visível) as linhas de Tório, e em VUV se usam padrões internos (linhas conhecidas). Além das medidas da posição da linha na placa, também se toma nota das características da linha, uma vez que se tem dado leitura das linhas com as características se faz a classificação ionica.

3.4 Modificações no sistema de vácuo, e Theta - Pinch

As mudanças no laboratório, foram feitas especificamente no tubo de theta-pinch e o sistema de vácuo.

No tubo de theta - pinch se fizeram duas modificações básicas, mudança de tubo de descarga e da bobina. A mudança de tubo de descarga, consiste de uma troca de tubo de pyrex de 80mm de diâmetro interno e 1m de comprimento, para outro tubo de Quartzo de 30 mm de diâmetro interno, e 50cm de comprimento. Se mandou construir na oficina mecânica da Universidade algumas peças de conexões à vácuo NW40 e NW10 (conexões para alto vácuo), para acoplar bellow tubo de descarga (NW40), tubo de descarga e gás ultrapuro (NW10).

Seguidamente a mudança na bobina, por uma construida de lâmina de cobre de 20cm de largura por 100cm, obtendo oito voltas, usando como isolante folha de mylar de 0.2 mm cada, esta mudança do tubo e a bobina é produto de um estudo feito em nosso laboratório em [18] “ Eficiência de transferência de

energia". Silverg [19] realizou algumas medidas de eficiência de transferência de energia, sob condições variadas de diâmetro de tubo, número de espiras e pressão, ele encontrou que a eficiência era sempre maior para configuração com várias espiras do que para uma única espira. Alguns de seus resultados são mostrados para tubos com 1"1/8 e 9/16" de diâmetro, com pressões de 2 e 5 mmHg, na figura(3.9).

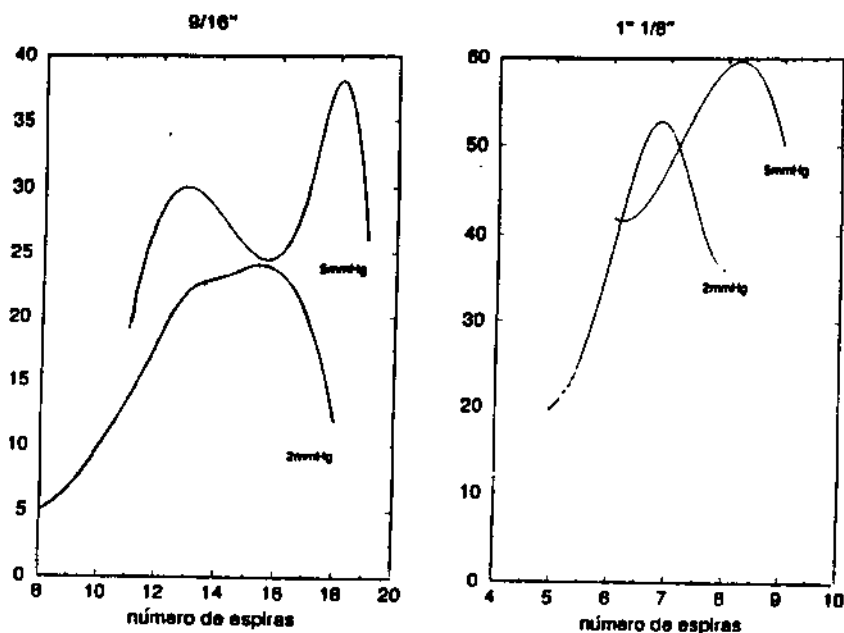


Figura 3.9: Eficiência experimental de transferência em função do número de espiras

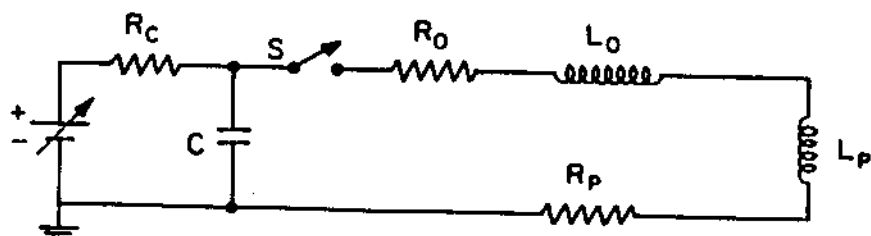


Figura 3.10: Circuito de malha única representando a descarga em Theta-Pinch

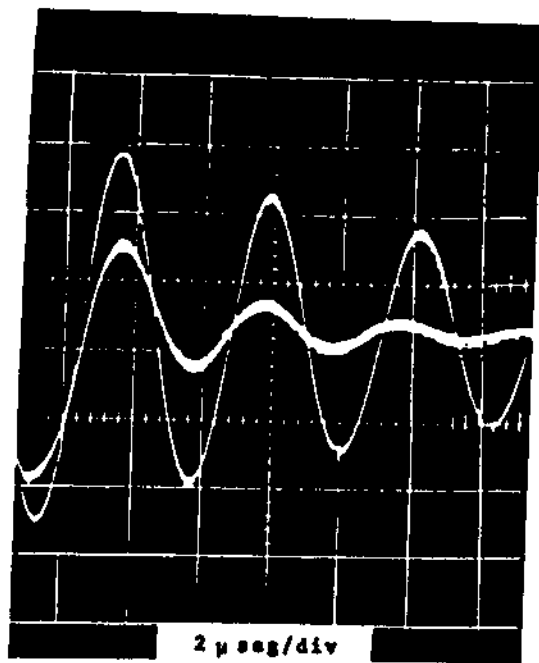


Figura 3.11: Evolução temporal de corrente de descarga no Theta-Pinch

Usando um modelo para o circuito de descarga como o descrito na fig(3.10), a equação que governa o descarga fica dada por:

$$(L_0 + L_p) \frac{di}{dt} + (R_0 + R_p)i + 1/C \int i dt = 0, \quad (3.6)$$

onde a absorção de energia pelo plasma é representado por uma resistência linear R_p . O sub-índice zero indica os parametros do sistema na ausência de plasma. A conhecida solução dessa equação é:

$$i = i_0 \exp[-\beta t/2] \sin(\Omega t), \quad (3.7)$$

onde $\Omega = \frac{1}{C(L_0+L_p)}$; $i_0 = \frac{V}{(L_0+L_p)\Omega}$; $\beta = \frac{R_0+R_p}{L_0+L_p}$ e V é a tensão no banco de capacitores (C).

A eficiência na transmissão (η), definida como a razão da energia dissipada no plasma pela energia total armazenada no capacitor é dada por:

$$\eta = \frac{\int i^2 R_p dt}{1/2 CV^2} = \frac{R_p}{R_0 + R_p}, \quad (3.8)$$

onde V representa a tensão no banco de capacitores. Nos obtivemos, a partir de algumas manipulações da equação anterior, uma representação para a

eficiência de utilidade prática um pouco maior, que usa diretamente a intensidade da corrente e o tempo medidos na curva de decaimento da corrente de descarga. Sua expressão é dada por:

$$\eta = 1 - \frac{T_p^3 \times \ln((I_1/I_2)_0)}{T_0^3 \times \ln((I_1/I_2)_p)}, \quad (3.9)$$

onde T é o tempo medido entre dois valores extremos de corrente I_1 e I_2 . A fig(3.11) mostra uma curva experimental típica, da evolução temporal da corrente no circuito de descarga do TPIII-UNICAMP. Curvas como esta foram utilizadas na confecção da tabela (3.1), que indica a eficiência para pressão de 1 microbar, e emprega a eq(3.9). A máxima eficiência, em regime de trabalho, foi de 58% para pressão de 30 microbar [20].

parâmetros	estágio 1	estágio 2	estágio 3	estágio 4
Indutância do sistema	176 nH	31,2 nH	31,2 nH	31,2 nH
Indutância das bobinas	32,2 nH	32,2 nH	532 nH	/
número de espiras	01	01	04	08
eficiência(η)	5%	22%	28%	/
diâmetro do tubo	100 mm	100 mm	100 mm	40 mm
B à 10kV	$2,1 \times 10^9$ G/s	$6,9 \times 10^9$ G/s	$1,2 \times 10^{10}$ G/s	/

Tabela 3.1: Alguns parâmetros do theta pinch

Outra das mudanças é o acoplamento de uma bomba Turbo Molecular no lugar da bomba difusora. A turbo molecular apresenta maiores vantagens que a bomba difusora; não permite o ingresso de vapor de óleo da bomba mecânica, permite obter vácuo até 5×10^{-10} mb, etc.

O fabricante recomenda que antes de ser ligado a turbo molecular, a câmara de vácuo tenha uma pressão menor que um milibar (1mb) e verificar se o óleo se encontra acima do valor mínimo.

Vantagens

- O sistema de vácuo no espectrógrafo e tubo de descarga theta-pinch é único, sendo acionado por uma “bomba mecânica” e o “Turbo - V450 Pumps”.
- Com uma pressão obtida no sistema de 4×10^{-6} milibar, se pode obter uma pressão de trabalho de 1 até 30 μ bar no tubo de descarga do theta-pinch, e de aproximadamente 8×10^{-6} até 2.0×10^{-6} mb no espectrógrafo

(a fenda permite manter a pressão diferencial com o gás ligado no tubo de descarga).

- Espectros mais puros e ricos na placa fotográfica (SWR) são obtidos. Não tendo impurezas de carbono nesse sistema, as impurezas de oxigênio e silício são menores.

Entre o acoplamento tubo de descarga do theta-pinch e o espectrógrafo se tem uma válvula e um sensor Edward tendo o primeiro a função de deixar aberto a válvula e fazer o vácuo em todo o sistema, fechado para o trabalho(gás no tubo). O segundo tem a função de controlar a pressão de gás no trabalho.

A turbo molecular apresenta um painel de controle, permitindo duas formas de operação; modo manual e modo automático, sendo instalado em nosso laboratório por medidas de segurança o modo manual.

3.5 Obtenção dos espectros e leitura de dados

3.5.1 Procedimentos experimentais

O theta-pinch UNICAMP é um aparelho que consiste de um pequeno eletrodo de descarga gasosa, formado por espiras multivoltas, ao redor do tubo de descarga que mantém o gás a ser ionizado e pincheado. As espiras são energizadas pelo banco de capacitores que descarrega através destas, incrementando rapidamente a corrente nas espiras e induzindo um campo magnético. A indução do campo produz um confinamento e aquecimento do plasma para o eixo do tubo, produzindo o pinch. Durante o pinch um pulso de intensidade alta de radiação eletromagnética é emitido, tendo um alto conteúdo de linhas espectrais, devido a presença dos estados de alta energia gerados por colisões de elétrons de alta energia com átomos neutros, registrando-se numa placa fotográfica, para posterior leitura e a produção de tabela.

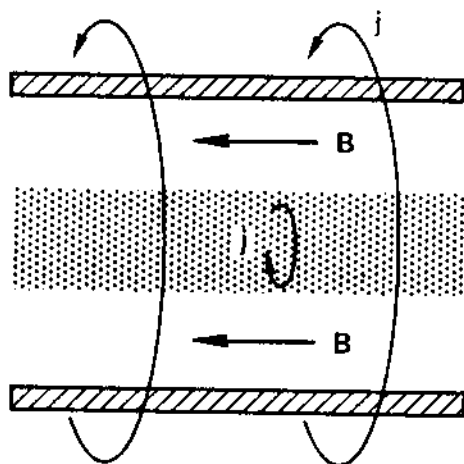


Figura 3.12: Theta - Pinch

3.5.2 Modo de operação

1. Começamos o experimento ligando primeiramente o painel de controle do turbo molecular, com a finalidade de que a válvula "Varian Modelo 969-9832" acoplado ao turbo molecular seja fechada automaticamente, ficando o sistema em condições de fazer vácuo (vácuo de limpeza).
2. Se liga a bomba mecânica com a válvula mais perto dela fechada , e deixando aberto o botão para a entrada de ar na bomba, por 30 minutos, com a finalidade de eliminar vapor de água e óleo.
3. Deixar a chave tripla na posição " Baking diff pump" e a válvula gaveta fechada, por 30 minutos, deixar aberto a válvula gaveta.
4. O medidor de pressão " Autovac Gauge" Type 3294 ubicado no painel do espectrógrafo tem uma lâmpada piloto de cor vermelho, como o câmbio de escala no medidor ela desliga (0.75 torr), momento que pode ser ligado o turbo molecular.

5. Se deve manter a válvula “ Pipeline Valvule” model PV10 - Edwards, aberta, para fazer vácuo mais rápido no tubo de descarga de theta-pinch.
6. Fechando a válvula do porta placas e pondo a chave tripla na posição “ Air admittance cassette”, se pode abrir o porta cassette, pegar a placa de emulsão fotográfica em um ambiente completamente escuro e pôr no porta-placas, fechar e deixar que a pressão no porta cassette seja a mesma que em todo o sistema, logo abrir a válvula do porta-placas.
7. Deixar que a pressão no espectrógrafo seja aproximadamente de 8×10^{-6} mbar, fechar a válvula pipeline e começar fazer vácuo por intermedio da fenda do espectrógrafo.
8. Abrir a válvula de gás ultra puro e deixar o fluxo de gás com as pressões de trabalho que pode ser: $5\mu\text{bar}$, $10\mu\text{bar}$, $15\mu\text{bar}$, $20\mu\text{bar}$, $25\mu\text{bar}$, $30\mu\text{bar}$, ou outros, segúndo a quantidade de gás que se quer ter no tubo.
9. Ligar a chave da fonte de alta tensão, escolher a tensão de trabalho, a qual é controlada por meio da chave presurizada com argônio e ar comprimido.

3.5.3 Obtenção dos espectrogramas

Apresentamos a continuação cinco experimentos do mesmo gás. A uma

Nº	Tenssão	Disparo	Pressão
1	12kV	200	05 μbar
3	10kV	170	10 μbar
4	08kV	150	15 μbar
5	06kV	130	20 μbar
6	04kV	100	25 μbar

Tabela 3.2: Dados que caraterizam os espectrogramas no experimemto

taxa de repetição de doze disparos/minuto, com uma pressão na chave presurizada de $2.5\text{Kg}/\text{cm}^2$ de argônio, e $2.0\text{Kg}/\text{cm}^2$ de ar comprimido, com uma pressão no tubo de $3 \times 10^{-5}\text{mbar}$, e a pressão no espectrógrafo de $8 \times 10^{-6}\text{mbar}$. Os tempos de revelação e a temperatura são:

- Reyelador - 2 minutos.

- Interruptor - 30 segundos.
- Fixador - 10 minutos.
- Temperatura - $20^{\circ}C$.

Producto final, placas com cinco espectrogramas.

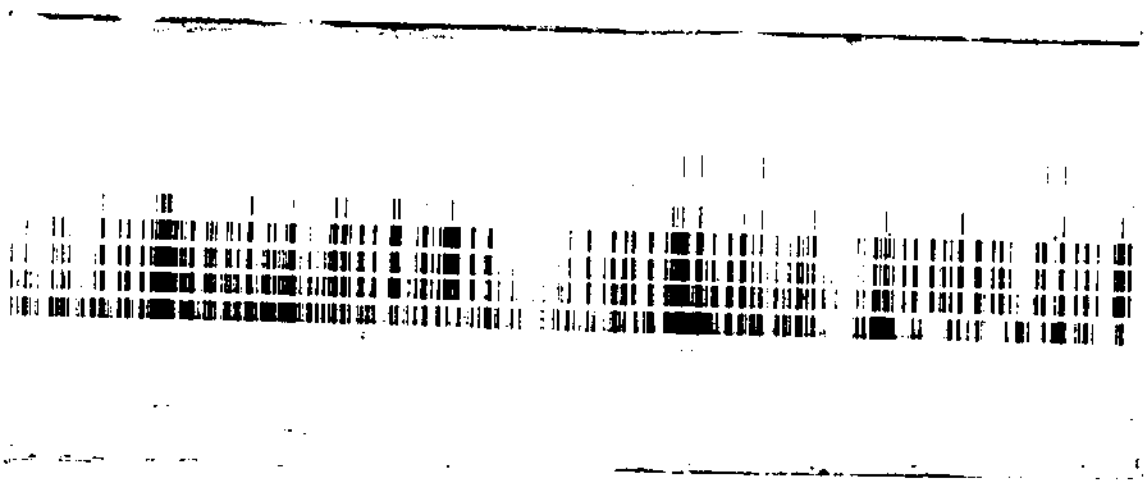


Figura 3.13: Placa fotográfica com espectrogramas

3.5.4 Leitura de dados e obtenção de tabela

Uma vez obtido o espectrograma, procedemos à sua leitura e obtenção da tabela.

Leitura de dados

Para fazer a leitura de dados usamos o Micro Densitrômetro do Departamento de Raios Cósmicos, "MICRO PHOTOMETER" NGD 20x20 Fabricado por MIKATA KOHKI Co. LTD. e acoplado num "TV MONITOR" C1846-03, monitor ajustado para uso com HAMAMATSU C1000 TV CAMERA e um microcomputador, que se encarga de dar leitura e armazenar os dados num

diskete, usando um programa LPE90B.BAS. Se faz uma seleção da janelas, de $0.5 \times 0.5 \text{ mm}^2$ e um objetiva de IC-10 [21].

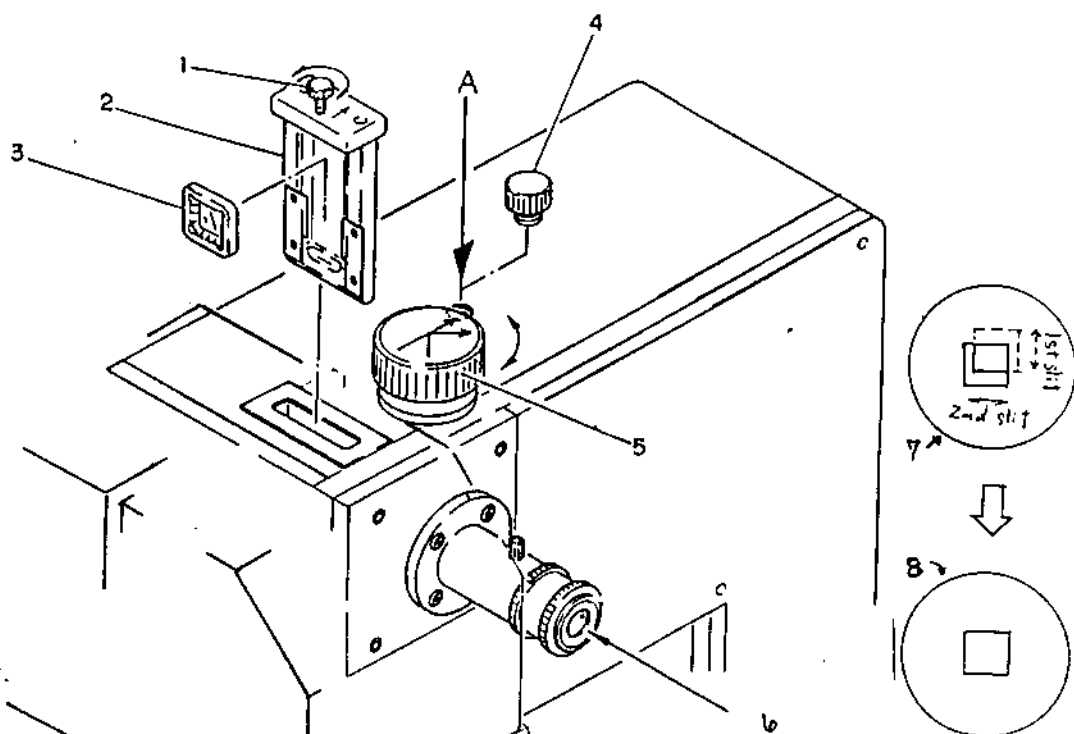


Figura 3.14: Microdensitômetro.

(1) Botão de ajuste da janela na direção x , (2) porta janelas (fenda), (3) Janela (fenda), (4) Janela que permite o passo de luz, (5) Botão de mudança de luz, (6) Objetiva do microscópio, (7) Observação da janela desalinhada, (8) Janelas alinhadas.

- Se faz um alinhamento ótico das janelas que foram trocadas, primeiro movimentamos a perilha número (5) da figura (3.14) mudando a direção da luz. Por intermedio da ocular se observar a fenda (6) de baixo (branca) e a de cima (vermelha), voltando agora na posição da segunda fenda, se observar as duas fendas, na maioria dos casos encontram-se desalinhadas, devemos fazer com que apareçam uma sobreposta a outra na ocular como podemos observar na fig(3.14).

- Em seguida se põe na mesa do aparelho a placa fotográfica à ser lido, se escolhe um dos espectrogramas, e no meio de duas linhas o contraste é muito menor. Neste ponto se ubica o objetiva até encontrar maior nitidez no monitor, se ajusta o zero (medida da densidade) neste caso a medida será a menor possível, isso é nosso fundo ou zero.
- Usando o controle manual se marcam os pontos inicial e final da placa para sua leitura, a leitura de dados é realizado cada $2\mu m$, isto é possível, já que o programa LPE90B.BAS permite dentro das opções que tem a mudança dos passos na leitura. Os resultados são guardados num arquivo, para ser usados na produção da tabela.

Confeção de tabela

Após a leitura das placas, outro passo a seguir é saber os valores de cada uma das linhas, isto é o comprimento de onda. Para isso tomamos as posições relativas das linhas que foram lidas no microdensitômetro, um software gráfico desenvolvido na Suécia (GRAFED 87) da leitura dos dados de LPE90B.BAS, para fazer uma representação grafica versus intensidade, mostrando um comprimento real da placa na tela do micro.

O programa calcula a intensidade de fundo, busca os picos das linhas, registrando em alguns arquivos. A intensidade lida e as características das linhas. O programa GRAFED 87 é de uso fácil, possui um "Help" que permite observar todas as opções de trabalho.

Como ponto de partida, se tem que procurar na placa algumas das linhas que sejam conhecidas, podem ser impurezas ou alguma linha do gás em estudo que sejam evidentes. Estas linhas serão linhas padrões para nosso trabalho.

Os resultados de GRAFED 87 são lidos por um outro programa de nome LINED, que gera os coeficientes de um polinômio que se ajusta melhor à estas linhas de referências referidas, pode-se eleger o grau de aproximação.

A partir deste polinômio, são interpolados os demais comprimentos de onda contidos no espectro, se o valor da referência e o interpolado for menor o igual à $0.03\text{\AA}$, então o resultado é considerado satisfatório.

Capítulo 4

Análise dos Níveis

4.1 Programas Computacionais

Os programas computacionais que são usados para a análise de níveis do espectro atômico são feitos em Fortran 77 que foram instalados na rede de computação da UNICAMP. Estes programas são: Cowan, RCG10, RCE19 e ELCALC. Que foram desenvolvidos pelo professor R. D. Cowan de los Alamos Scientific Laboratory, em los Alamos Novo México.

Estes programas permitem uma análise mais completa dos espectros atômicos. Obtendo-se informação sobre a energia média das configurações, os parâmetros energéticos de Slater, o parâmetro de acoplamento spin-órbita, as integrais de interação entre as configurações, o acoplamento LS , o acoplamento jj , os acoplamentos intermedios se for o caso, os níveis de energia, os comprimentos de onda e a probabilidade de transição. Há uma série de outros programas utilizados no trabalho de análise dos dados experimentais, sendo que o mais importante é o que permite o ajuste dos níveis energéticos através do método dos mínimos quadrados, usando como entrada para os cálculos os valores experimentais.

4.1.1 Cálculo das funções de onda

O programa Cowan se encarrega dos cálculos das funções de onda radial de um átomo esfericamente simétrico mediante dois programas internos denominados RCN e RCN2. O RCN por sua vez usa um programa RCN33, para calcular as funções de onda radiais ($P_i(r)$) que corresponde à energia do centro de gravidade (E_{av}), calcula as integrais de Coulomb F^k eq(4.1) e G^k eq(4.2),

e as integrais spin-orbitais, através da fórmula para o potencial central eq(4.3).

$$F_{ij}^k = R^k(ij, ij) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_1^k}{r_1^{k+1}} |P_i(r_1)|^2 |P_j(r_2)|^2 dr_1 dr_2 \quad (4.1)$$

$$G_{ij}^k = R^k(ij, ji) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_1^k}{r_1^{k+1}} P_i^*(r_1) P_j^*(r_2) P_j(r_1) P_i(r_2) dr_1 dr_2 \quad (4.2)$$

Consta neste programa também os cálculos das integrais da parte radial do operador spin-orbital eq(4.3).

$$\xi_i \equiv \int_0^\infty \xi(r) |P_i(r)|^2 dr = \frac{\alpha^2}{2} \int_0^\infty \frac{1}{r} \left(\frac{dV}{dr} \right) |P_i(r)|^2 dr \quad (4.3)$$

outras integrais de interesse tais como r^n , E_k^i , E_n^i

$$\langle r^n \rangle_i \equiv \int_0^\infty r^n |P_i(r)|^2 dr \quad (4.4)$$

$$E_k^i = \int_0^\infty P_{n_i l_i}^*(r) \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} \right] P_{n_i l_i}(r) dr \quad (4.5)$$

$$E_n^i = \int_0^\infty (-2Z/r) |P_i(r)|^2 dr \quad (4.6)$$

o cálculo da energia de interação de Coulomb, média da configuração E^{ij} , e da energia total E_{av}

$$E^{ij} = F^0(ii) - \frac{2l_i + 1}{4l_i + 1} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k(ii)$$

$$E^{ij} = F^0(ij) - \frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^k(ij)$$

e:

$$E_{av} = \sum_{i=1}^N (E^i + 1/2 \sum_j E^{ij})$$

O RCN2 recebe as funções de onda radiais, calculadas pelo programa RCN33, e calcula as varias integrais de configuração R^k , integrais spin-orbitais ξ_{ij} , integrais de dipolo e quadrupolo elétrico. E calcula todas as quantidades necessarias para o cálculo da energia dos níveis.

Este programa RCN2 cria um arquivo de saída com todos os valores mencionados acima, sendo este mesmo arquivo, o de entrada para o programa RCG10.

4.1.2 Cálculo da probabilidade de transição e fator angular

O programa RCG10 tem como propósito calcular a probabilidade de transição, o fator angular de elementos de matriz da teoria de estrutura atômica e espectro atômico, empregando a técnica de álgebra de Racah, resolve a matriz de energia e apresenta como resultado final os autovalores de energia (níveis) e as autofunções do íon ou átomo. O programa também calcula valores de gf para todas as possíveis transições de tipo dipolo elétrico.

Os fatores angulares são:

- A energia centro de gravidade E_{av} de cada uma das configurações.
- Os coeficientes f_k , g_k e d das integrais F^k , G^k e $\xi(r)$.
- Os elementos de matriz de dipolo magnético.
- Coeficientes angulares do dipolo elétrico, e elementos de matriz reduzida de quadrupolo elétrico.
- Valores correspondentes à certos operadores de interação de coulomb como são α , β , γ , T , T_1 , T_2 , que pode ser usado em interação de configuração (spin-spin, órbita-órbita, e spin-outros-órbita).

O programa calcula a probabilidade de transição entre os níveis de configurações de paridades diferentes, calcula também o autovalor, o autovetor e as respectivas purezas de cada nível.

Este programa cria dois arquivos de saída, um deles com todos os parâmetros convencionais de Slater incluindo os autovalores para serem usados no programa RCE19.

4.1.3 Determinação dos níveis de energia das configurações

O programa ELCALC permite determinar os níveis de energia das diferentes configurações à partir das transições. As diversas transições obtidas experimentalmente são introduzidas no programa ELCALC, que de acordo com um processo iterativo procura as transições que correspondem a todas as combinações possíveis de um nível que se quer determinar com os demais. Feito isso, o programa apresenta no arquivo de saída o valor do nível, o desvio padrão e o número de transições que contribuíram para a determinação do

nível. Este mesmo processo é feito para todos os níveis presentes, das diferentes configurações (pares e ímpares).

Os valores obtidos são usados no programa RCE19 para obter os parâmetros convencionais de Slater.

4.1.4 Determinação dos parâmetros

Com o espírito de dar uma boa interpretação dos espectros de linha obtidos no laboratório, se usa um programa de ajuste RCE19 desenvolvido pelo professor R. D. Cowan. O programa usa o método dos mínimos quadrados mediante um processo iterativo, para encontrar os parâmetros radiais e da energia (E_{av} , F^k , G^k , ξ , R^k , α , β , γ). O cálculo considera a matriz do hamiltoniano como:

$$H = \sum_l c^l x_l \quad (4.7)$$

onde x_l é escrito em forma de vetor coluna e corresponde aos parâmetros ajustáveis (exemplo $x_l = F^k$), e c^l é o coeficiente de matriz f^k . A equação de autovalores pode ser escrita por:

$$HY^k = E^k Y^k \quad (4.8)$$

com os autovalores dados em forma de matrizes como:

$$E = VX \quad (4.9)$$

onde V é matriz de $N_k \times N_p$, cujos elementos de matriz são representados:

$$V_{kl} = \sum_i \sum_j Y_i^k c_{ij}^l Y_j^k \quad (4.10)$$

o problema central é minimizar

$$R = \sum_k (E^k - T^k)^2 \quad (4.11)$$

onde T^k são os níveis de energia observados, E^k são os autovalores calculados, N_k o número de níveis que participam no ajuste, e N_p o número de parâmetros. O desvio padrão do ajuste resultante é dado pela fórmula:

$$s = \sqrt{\frac{\sum_k (E^k - T^k)^2}{N_k - N_p}} \quad (4.12)$$

o ajuste dos níveis de energia é bom quando a desvio padrão s é menor que 1% do intervalo de energia ΔE coberto pelo ajuste de níveis. Nesta tese se da a conhecer os cálculos de ajuste.

4.2 Análise do Ar III

As linhas espectrais identificadas do Ar III foram obtidas por exposição ao theta-pinch e tubo de descarga capilar (TDC), do laboratório de espectroscopia atômica de UNICAMP e do laboratório de CIOp - La Plata, Argentina.

Uma série de tabelas são montadas para a determinação das transições de configurações conhecidas. Durante os anos 1933-37, T.L. de Bruin começa com a análise do espectro de argônio no ultravioleta, também no mesmo ano aparece V. Keussler [22] e J.C. Boyce [23] fazendo estudos sobre argônio duas vezes ionizado, no ultravioleta vácuo.

Os termos das configurações foram publicados em " Atomic Energy Level " [24], e as transições no intervalo de 382.26 Å até 1973.78 Å (ultravioleta vácuo) são publicados por Kelly [25].

Em 1987 Willy Persson [26] faz um análise deste íon. Confirmando os termos que foram encontrados anteriormente, e alguns termos novos encontrados pela primeira vez.

Neste trabalho nos observamos linhas que já foram observadas anteriormente e classificamos novas linhas que foram encontradas em nosso laboratório.

4.2.1 Obtenção das transições

Para a análise das diferentes transições usamos algumas regras de seleção que foram especificados anteriormente no capítulo 2, o tipo de acoplamento usado neste trabalho é o acoplamento LS , que também foi tratado na formulação de Hartree - Fock.

Tratamos os multipletos principais pelo acoplamento LS e a interação elétrica existente, pela teoria quântica de radiação. As transições mais evidentes são aquelas associadas à radiação de dipolo elétrico, que são permitidas apenas quando o número quântico dos diferentes níveis que participam da transição obedecem a seguinte regra de seleção [6].

$$\Delta J = 0, \pm 1$$

$$\Delta L = 0, \pm 1$$

$$\Delta S = 0$$

as transições proibidas são de $J = 0$ para $J' = 0$.

As duas últimas condições são válidas ($\Delta L = 0, \pm 1$ e $\Delta S = 0$) para o acoplamento LS . Consequentemente L e S como bons números quânticos para os níveis participantes. Em geral pode-se dizer que o ΔJ é usado em qualquer tipo de acoplamento. Como regra adicional temos que as transições só podem ocorrer para configurações dos elétrons que tenham paridades diferentes. Uma forma fácil de obter a paridade é somar os momentos angulares orbitais ($\sum l_i = \text{par ou ímpar}$).

As linhas mais intensas podem ser reconhecidas de imediato, por ter maior valor de J . Podemos também, obter informação importante sobre os multipletos usando algumas regras qualitativas, tomamos como exemplo o triplete [27].

- Os intervalos do 3P são maiores que o correspondente intervalo para o 3D .
- Os intervalos do 3D são maiores que o correspondente intervalo para o 3F .
- Os intervalos correspondentes à vários elementos cresce com o número atômico.
- A separação entre as transições devem ser, aproximadamente, iguais em energia.
- A largura das transições tem que ter as mesmas características.

Também, existem transições que podem ser de triplete para singlete, quinteto para triplete, etc, estas transições são conhecidas por linhas de intercombinação. A identificação das linhas de argônio são feitas em experimentos realizados no theta-pinch e no tubo de descarga capilar (TDC). apresentamos aqui todas as diferentes transições que são estudadas.

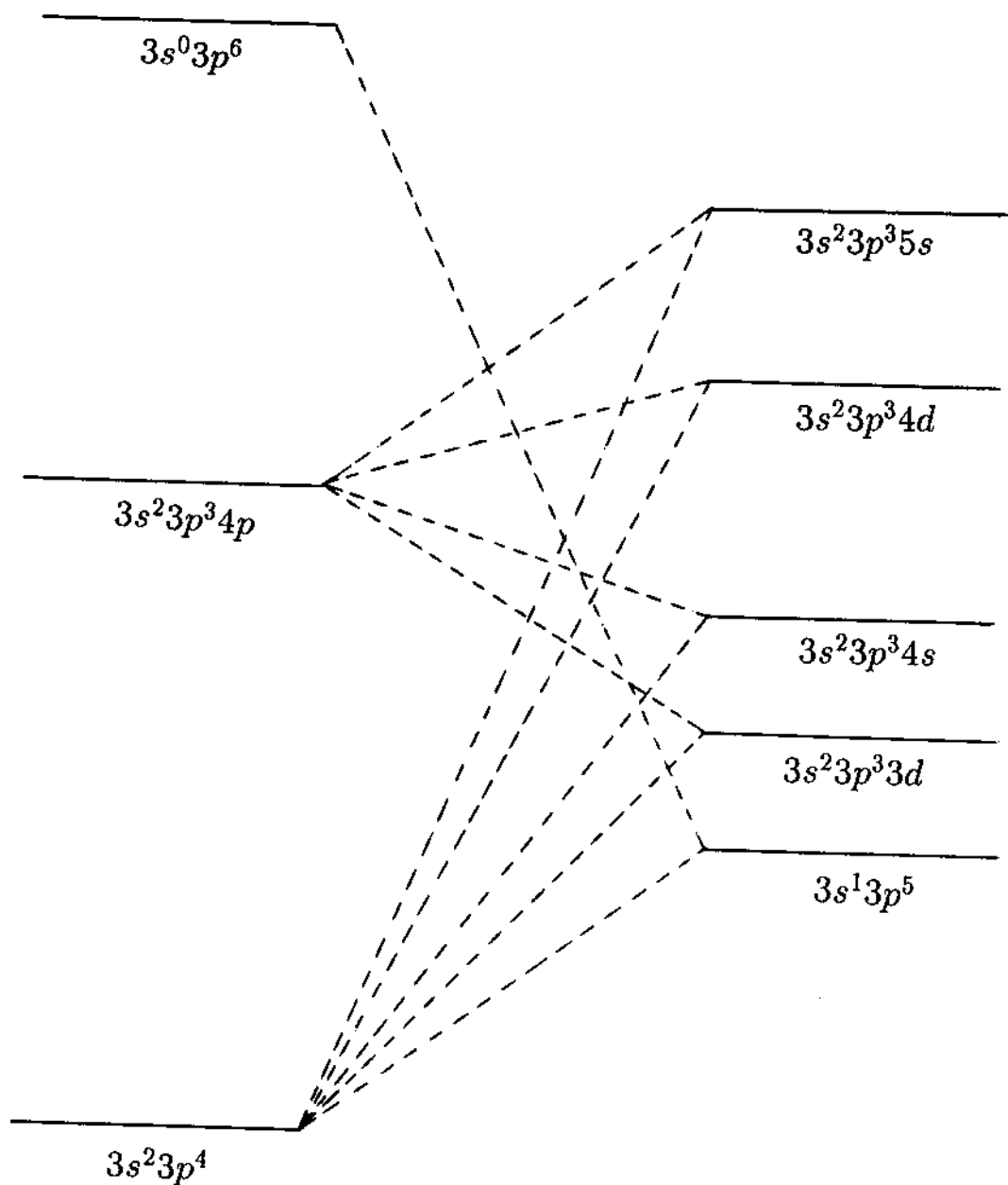


Figura 4.1: Representação esquemática das diversas transições entre configurações

Uma vez construída as tabelas de linhas experimentais conforme descrita na seção (3.5.4) deste trabalho, procedemos a montar a tabela de transições para cada um das combinações possíveis das configurações pares e ímpares, como se pode ver na tabela (4.1)

$3s3p^5$	3P_2 113800.2	3P_1 114797.4	3P_0 115328.8	1P_1 144022.0
$3s^23p^4$				
3P_2 0.0	A 878.71 0.03 15	A 871.10 0.02 10	-	NO
3P_1 1112.1	A 887.40 0.02 15, J.C.B	A 879.60 0.03 15, J.C.B.	A 875.52 0.02 9	NO
2P_0 1570.2	-	A 883.16 0.01 15, J.C.B.	-	623.767 0.01 J.C.B. *
1D_2 14010.0	K 1002.10 0.02 3, J.C.B.	NO	-	A 769.13 0.02 12
1S_0 33265.7	-	1205.95 0.02 J.C.B. *	-	NO

Tabela 4.1: Tabela de transições entre as configurações $3s3p^5$ e $3s^23p^4$.

Os valores das energias dos níveis expressos são experimentais e medidas em cm^{-1} , o comprimento de onda das transições estão em Å. Valores de cada transição são expressos considerando: (A) tabela de dados usados, comprimento de onda, resolução do aparelho, intensidade, outros autores e * não pertencem à essa transição. (NO) não observada e (-) transição proibida.

Uma vez montada as tabelas de transições, tendo todas as considerações do caso como: uso das regras de seleção, transições mais importantes entre multipletos com $\Delta S = 0$, condições do tipo de acoplamento, etc. Usa-se também os programas teóricos descritos na seção anterior, que nos permite observar as diversas transições existentes entre cada um das configurações em estudo, e suas respectivas probabilidades.

Obtemos as transições experimentais, usando as tabelas de comprimento de onda, geradas na seção(3.5.4). Compara-se estes valores com os valores conhecidos e publicados anteriormente, linha por linha.

Nas transições do $3s^23p^35s$, $3s^23p^34d$, $3s^23p^34s$, $3s^23p^33d$, $3s^13p^5$ para a configuração fundamental $3s^23p^4$, todas as linhas se encontram na região do ultra violeta vácuo. Nesta região temos os trabalhos publicados por J.C. Boyce [23, 28] usando para isso um espectrógrafo à vácuo de 2 metros à incidência normal, cubrindo sobre a placa desde zero até 2500 Å correspondendo a primeira ordem, com 30000 linhas/polg, e uma dispersão de 4.27 Å/mm, obtendo bons espectros no comprimento de onda curta (300 Å) [17]. A resolução das linhas obtidas por J.C. Boyce dependem basicamente do número de decimais com que é apresentada, para os que tem três decimais a resolução é menor que 0.01Å, para aquelas que são apresentadas com duas decimais a resolução é de 0.02Å. Algumas linhas foram também publicadas por V. Keussler [22], observando algumas transições principais em $3p-4s$.

Entre as transições que nós especificamos acima, se confirmaram um total de 91 transições para a configuração fundamental ($3s^23p^4$), sendo que destas 30 são novas, ou seja, foram observadas pela primeira vez. Uma linha que corresponde à transição do $3s^13p^5 \ ^1P_1-3s^23p^4 \ ^1D_2$ foi observada também por J. C. Boyce, sendo que a designação feita por ele é errada, o comprimento de onda desta transição é $\lambda = 769.13\text{\AA}$. Outras duas transições observadas segundo Boyce, com comprimento de onda de: $\lambda = 623.767\text{\AA}$ e $\lambda = 1205.95\text{\AA}$, não foram observadas em nosso trabalho, aliás não pertencem as transições entre as configurações $3s^13p^5 - 3s^23p^4$ [29].

A partir da configuração $3s^23p^33d$ para a fundamental foram observadas 44 transições. Se encontrou que as transições correspondentes do $3d(^4S)^5D_{1,2,3} - p^4 \ ^3P_2$ não foram observadas, nós assinalamos aqui um valor de comprimento de onda para esta transição, mais isso é de acordo com o maior J , a qual tem uma probabilidade maior de existir e sua intensidade também é maior. Um

tratamento análogo é feito também para a transição $3d(4S)^5D_{0,1,2} - p^4\ ^3P_1$, estas transições e as outras são listadas no final deste capítulo. A outra transição correspondente à $4d(2D)^3D_{3,2,1} - 3p^4\ ^3P_1$, também é o mesmo, sendo que este tipo de linha toma certa característica, são linhas largas.

Temos uma transição que corresponde à $3s^03p^6 - 3s^13p^5$. A configuração $3s^03p^6$ é amplamente estudada na referência [30], que confirma a identificação do nível $3s^03p^6\ ^1S_0$, achado usando espectroscopia Auger, nas investigações de McGuire [3]. No estudo da composição das funções de onda do nível Dyll and Larkins [31] calculam o conteúdo do $3s^03p^6$, sendo que só é de 37%. Mais adiante vai ser mostrado que o 1S_0 é um nível perturbado.

Nas transições das configurações $3s^23p^35s$, $3s^23p^34d$ para a configuração $3s^23p^34p$, os comprimentos de onda das transições se encontram na região do ultravioleta. A maior quantidade das linhas foram observadas por T.L. de Bruin [32, 33, 34], usando um espectrógrafo Hilger Quartz Spectrograph E.I. de 3 metros, dispersão de $5.5\text{\AA}/\text{mm}$, o intervalo dos espectros observados são de 1900 - 7000 $\text{\AA}$, poucas linhas nesta região foram observados por V. Keusler [22]. Nestas configurações observamos 128 transições, sendo que 47 delas são observadas pela primeira vez e classificadas. As correspondentes transições $4p^3P_{0,2,1} - 5s^3S_1$ e $4p^5P_{3,2,1} - 5s^5S_2$, não foram observadas em nosso laboratório, já que existe uma certa dificuldade na região onde termina o ultravioleta vácuo, e começa o ultravioleta (meio ar). Os dados fornecidos para esta região são do tubo de descarga capilar, características que foram dadas no capítulo terceiro deste trabalho.

Nas transições da configuração $3s^23p^34p$ para as configurações $3s^23p^34s$ e $3s^23p^33d$ parte delas estão no ultravioleta vácuo e parte no ultravioleta, os dados são obtidos a partir de tubo de descarga capilar e do theta-pinch, nestas transições são confirmadas os valores dos comprimentos de onda das transições conhecidas referencia [23, 28] e [35]. Nestas configurações observamos um total de 227 transições, sendo que 122 delas são observadas pela primeira vez, e classificadas.

Resumindo, neste trabalho observamos um total de 447 transições correspondentes à todas as combinações das configurações pares e ímpares, sendo que 199 são novas transições, que são classificadas para sua posterior publicação. Nós apresentamos ao final deste capítulo todas as transições observadas, especificando as que são novas, também se especifica as referencias para todas as

linhas observadas.

4.2.2 Análise computacional

Todas as transições obtidas do íon argônio duas vezes ionizado, são levadas para o programa ELCALC, mediante um arquivo de entrada contendo os níveis de energia de todas as configurações e as transições que foram observadas. O programa ELCALC apresenta dois arquivos como resultado, o primeiro contendo todos os níveis de energia e as transições que determinam cada nível, também apresenta a diferença existente entre a transição observada e a calculada, sendo que esta diferença deve ser menor ou igual que a resolução de nosso trabalho. O segundo contendo todos os níveis ajustados. Se revisa cada uma das transições observando a diferença existente entre as transições e o desvio padrão, encontramos 37 transições acima da resolução, sendo retiradas do cálculo, finalmente ficaram 447 transições as quais são listados no final deste capítulo.

Um outro programa denominado STRANS permite classificar as transições observadas tendo em consideração a incerteza, para isso usa como arquivo de entrada os níveis de energia dos termos de cada uma das configurações conhecidas e os comprimentos de onda obtidos no laboratório. O programa calcula os comprimentos de onda e compara com os experimentais, se for menor que a incerteza a transição é selecionada, caso contrario é retirada automaticamente. Com isto verificamos novamente nossos resultados já obtidos, agora podemos dizer que nossos resultados experimentais obtidos são bons.

Como passo seguinte temos o ajuste dos parâmetros energéticos através dos níveis experimentais. Os parâmetros podem ser calculados partindo dos níveis de energia ajustados no ELCALC, esse trabalho pode ser feito mediante o programa RCE19 denominado também como MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS. Neste processo as integrais radiais da matriz de energia são tomados como parâmetros e determinados desde os níveis de energia experimental, a equação a ser minimizado é (4.11).

Começamos a obtenção dos parâmetros, fazendo um cálculo teórico dos parâmetros das configurações pares e ímpares separadamente usando a aproximação de Hartree-Fock com correção relativista (HFR), das configurações $3s^23p^4$, $3s^03p^6$, $3s^23p^34p$, $3s^23p^34f$, $3s^13p^43d$, $3s^23p^23d^2$, são conhecidas $3s^23p^4$, $3s^03p^6$, $3s^23p^34p$, as outras são incluídas para o cálculo, de maneira que po-

demons dar uma visão real, podemos notar uma forte influência da integral de configuração (IC) sobre a distribuição dos níveis, e as perturbações existentes entre as configurações pares, estudadas na referência [31], observa-se também que entre as configurações $3s^23p^34f$ e $3s^13p^43d$ muitos dos níveis são fortemente misturadas, se conclue que a aproximação dos parâmetros energéticos das configurações pares fica sem solução no presente momento pois necessitamos a inclusão de novos parâmetros, chamados parâmetros ortogonais, e introduzidos por Hansen e Persson [26].

Para este fato nós pegamos os níveis ajustados das configurações pares, e introduzimos no programa RCE19, que de acordo à um processo iterativo, mostra os parâmetros correspondentes de Hartree-Fock. Neste processo se observou a forte interação existente entre a configuração $3s^03p^6$ com as outras configurações, observa-se também que o nível $3s^03p^6\ ^1S_0$ se mistura fortemente com os níveis $3s^23p^4\ ^1S_0$ e $(^2P)4p\ ^1S_0$, neste trabalho o nível $3s^03p^6\ ^1S_0$ e $(^2P)4p\ ^1S_0$ foram fixados no ajuste, a configuração $3s^03p^6$ y os parâmetros correspondentes as configurações $3s^23p^34f$, $3s^13p^43d$, $3s^23p^43d^2$ são fixadas. Com estas considerações são obtidos os parâmetros de Hartree - Fock para as configurações $3s^23p^4$, $3s^03p^6$ e $3s^23p^34p$.

Para as configurações $3s^13p^5$, $3s^23p^33d$, $3s^23p^34s$, $3s^23p^34d$ e $3s^23p^35s$, uma análise similar é feita. Observa-se que a configuração $3s^23p^33d$ não é completamente analisada, sendo que nela existem níveis perturbados e fortemente misturados, fazendo difícil sua interpretação, tem uma forte interação com a configuração $3s^13p^5$, e com $3s^23p^34s$, $3s^23p^34d$ e $3s^23p^35d$ mais fracamente. Todos os níveis desta paridade foram usados para a determinação dos parâmetros de Hartree - Fock. Os parâmetros obtidos anteriormente são agora levados para o programa Cowan, obtendo-se como resultado final deste trabalho a composição das autofunções e os autovetores, obten-se também a probabilidade de transição, os níveis de energia, também calcula valores de gf para todas as possíveis transições de tipo dipolo elétrico.

4.3 Apresentação das tabelas

Nível	J	Energia cm^{-1}	$\Delta E cm^{-1}$	N° Tran.
$3s^2 3p^4 \ ^3P_2$	2.0	0.000	1.488	27
$p^4 \ ^3P_1$	1.0	1110.481	1.307	28
$p^4 \ ^3P_0$	0.0	1570.008	1.456	13
$p^4 \ ^1D_2$	2.0	14009.057	1.593	18
$p^4 \ ^1S_0$	0.0	33266.284	2.427	5
$3s^2 3p^3 (^4S)4p \ ^5P_3$	3.0	204796.098	0.178	9
$(^4S)4p \ ^5P_2$	2.0	204648.290	0.169	8
$(^4S)4p \ ^5P_1$	1.0	204562.549	0.201	7
$(^4S)4p \ ^3P_2$	2.0	209149.139	0.096	13
$(^4S)4p \ ^3P_1$	1.0	209124.110	0.204	9
$(^4S)4p \ ^3P_0$	0.0	209163.661	0.174	4
$(^2D)4p \ ^3F_4$	4.0	226645.206	0.095	14
$(^2D)4p \ ^3F_3$	3.0	226502.457	0.069	22
$(^2D)4p \ ^3F_2$	2.0	226355.281	0.084	16
$(^2D)4p \ ^3D_3$	3.0	225402.511	0.083	21
$(^2D)4p \ ^3D_2$	2.0	225147.516	0.072	26
$(^2D)4p \ ^3D_1$	1.0	225154.893	0.078	19
$(^2D)4p \ ^3P_2$	2.0	231340.521	0.093	19
$(^2D)4p \ ^3P_1$	1.0	231625.763	0.068	23
$(^2D)4p \ ^3P_0$	0.0	231753.284	0.084	13
$(^2D)4p \ ^1F_3$	3.0	227243.411	0.141	8
$(^2D)4p \ ^1D_2$	2.0	236063.796	0.160	8
$(^2D)4p \ ^1P_1$	1.0	223662.297	0.108	6
$(^2P)4p \ ^3D_3$	3.0	240290.672	0.140	11
$(^2P)4p \ ^3D_2$	2.0	240256.813	0.081	18
$(^2P)4p \ ^3D_1$	1.0	240150.451	0.080	14
$(^2P)4p \ ^3P_2$	2.0	243424.294	0.080	14
$(^2P)4p \ ^3P_1$	1.0	243145.617	0.094	10
$(^2P)4p \ ^3P_0$	0.0	242923.166	0.173	5
$(^2P)4p \ ^3S_1$	1.0	239192.423	0.083	14
$(^2P)4p \ ^1D_2$	2.0	244357.151	0.088	13
$(^2P)4p \ ^1P_1$	1.0	241806.392	0.097	9
$(^2P)4p \ ^1S_0$	0.0	255106.787	0.201	2
$3s^0 3p^6 \ ^1S_0$	0.0	249819.317	4.354	1

Tabela 4.2: Níveis de energia das configurações pares de Ar III

Nível	J	Energia cm^{-1}	$\Delta E cm^{-1}$	N^0 Tran.
$3s^1 3p^5 \ ^3P_2$	2.0	113800.043	1.855	3
$3p^5 \ ^3P_1$	1.0	114799.005	1.641	3
$3p^5 \ ^3P_0$	0.0	115328.318	2.918	1
$3p^5 \ ^1P_1$	1.0	144026.095	3.737	2
$3s^2 3p^3 (^4S) 4s \ ^5S_2$	2.0	174371.254	0.159	5
$(^4S) 4s \ ^3S_1$	1.0	180676.446	0.145	9
$(^2D) 4s \ ^3D_3$	3.0	196679.345	0.119	9
$(^2D) 4s \ ^3D_2$	2.0	196613.708	0.083	13
$(^2D) 4s \ ^3D_1$	1.0	196589.123	0.146	9
$(^2D) 4s \ ^1D_2$	2.0	199762.636	0.104	10
$(^2P) 4s \ ^3P_2$	2.0	207231.431	0.116	7
$(^2P) 4s \ ^3P_1$	1.0	207530.832	0.113	8
$(^2P) 4s \ ^3P_0$	0.0	207672.743	0.117	5
$(^2P) 4s \ ^1P_1$	1.0	211063.019	0.132	7
$3s^2 3p^3 (^4S) 3d \ ^5D_4$	4.0	144903.748	0.406	2
$(^4S) 3d \ ^5D_3$	3.0	144890.189	0.538	5
$(^4S) 3d \ ^5D_2$	2.0	144883.447	0.439	8
$(^4S) 3d \ ^5D_1$	1.0	144880.636	0.471	5
$(^4S) 3d \ ^3D_3$	3.0	188713.346	0.129	7
$(^4S) 3d \ ^3D_2$	2.0	187822.369	0.092	10
$(^4S) 3d \ ^3D_1$	1.0	187170.360	0.115	10
$(^2D) 3d \ ^3G_5$	5.0	172189.954	0.895	1
$(^2D) 3d \ ^3G_4$	4.0	172135.312	0.465	3
$(^2D) 3d \ ^3G_3$	3.0	172098.221	0.423	2
$(^2D) 3d \ ^3F_4$	4.0	163475.388	0.266	4
$(^2D) 3d \ ^3F_3$	3.0	163074.396	0.230	7
$(^2D) 3d \ ^3F_2$	2.0	162755.065	0.253	7
$(^2D) 3d \ ^3D_3$	3.0	156913.952	0.249	7
$(^2D) 3d \ ^3D_2$	2.0	156920.553	0.326	13
$(^2D) 3d \ ^3D_1$	1.0	157028.120	0.198	16
$(^2D) 3d \ ^3P_2$	2.0	213950.355	0.119	5
$(^2D) 3d \ ^3P_1$	1.0	214346.067	0.080	11
$(^2D) 3d \ ^3P_0$	0.0	214568.153	0.142	4

Tabela 4.3: Níveis de energia das configurações ímpares de Ar III.

Nível	J	Energia cm^{-1}	$\Delta E \text{cm}^{-1}$	N^0 Tran.
$3s^2 3p^3(^2D)3d\ ^3S_1$	1.0	204726.798	0.099	8
$(^2D)3d\ ^1G_4$	4.0	175664.854	0.550	1
$(^2D)3d\ ^1F_3$	3.0	224333.165	0.200	2
$(^2D)3d\ ^1D_2$	2.0	219336.699	0.148	3
$(^2D)3d\ ^1P_1$	1.0	219907.756	0.122	5
$(^2D)3d\ ^1S_0$	0.0	161848.364	0.400	2
$(^2P)3d\ ^3F_4$	4.0	186401.339	0.126	4
$(^2P)3d\ ^3F_3$	3.0	186656.879	0.154	6
$(^2P)3d\ ^3F_2$	2.0	186902.410	0.117	8
$(^2P)3d\ ^3D_3$	3.0	210211.100	0.102	6
$(^2P)3d\ ^3D_2$	2.0	211003.896	0.106	6
$(^2P)3d\ ^3D_1$	1.0	211562.370	0.200	5
$(^2P)3d\ ^3P_2$	2.0	189379.504	0.233	9
$(^2P)3d\ ^3P_1$	1.0	188516.284	0.238	7
$(^2P)3d\ ^3P_0$	0.0	188143.407	0.257	3
$(^2P)3d\ ^1F_3$	3.0	200317.238	0.232	4
$(^2P)3d\ ^1D_2$	2.0	179528.848	0.303	6
$(^2P)3d\ ^1P_1$	1.0	237252.173	12.717	1
$3s^2 3p^3(^4S)4d\ ^5D_1$	1.0	246026.457	0.279	3
$(^4S)4d\ ^5D_2$	2.0	246029.511	0.295	3
$(^4S)4d\ ^5D_3$	3.0	246033.122	0.276	2
$(^4S)4d\ ^5D_4$	4.0	246038.828	0.384	1
$(^4S)4d\ ^3D_2$	2.0	252253.085	0.114	7
$(^4S)4d\ ^3D_1$	1.0	252272.407	0.106	7
$(^4S)4d\ ^3D_3$	3.0	252288.411	0.179	3
$(^2D)4d\ ^3F_2$	2.0	266722.362	0.125	5
$(^2D)4d\ ^3F_3$	3.0	266877.308	0.187	5
$(^2D)4d\ ^3F_4$	4.0	267070.458	0.125	4
$(^2D)4d\ ^3G_3$	3.0	267781.303	0.133	3
$(^2D)4d\ ^3G_4$	4.0	267832.101	0.135	3
$(^2D)4d\ ^3G_5$	5.0	267894.911	0.353	1
$(^2D)4d\ ^3D_1$	1.0	268977.793	0.120	6
$(^2D)4d\ ^3D_3$	3.0	269000.174	0.239	6
$(^2D)4d\ ^3D_2$	2.0	269011.751	0.264	7
$(^2D)4d\ ^3P_2$	2.0	271507.569	0.177	5

Tabela 4.4: Níveis de energia das configurações ímpares de Ar III.
Continuação.

Nível	J	Energia cm^{-1}	$\Delta E cm^{-1}$	N^0 Tran.
$3s^2 3p^3 ({}^2D) 4d \ {}^3P_1$	1.0	271671.248	0.184	7
$({}^2D) 4d \ {}^3P_0$	0.0	271696.140	0.294	2
$({}^2D) 4d \ {}^3S_1$	1.0	272068.163	0.252	4
$({}^2D) 4d \ {}^1D_2$	2.0	272092.908	0.258	2
$({}^2D) 4d \ {}^1P_1$	1.0	270756.509	0.289	2
$({}^2D) 4d \ {}^1F_3$	3.0	275371.443	0.200	2
$({}^2P) 4d \ {}^3F_2$	2.0	281461.429	0.169	3
$({}^2P) 4d \ {}^3F_3$	3.0	281473.196	0.200	1
$({}^2P) 4d \ {}^3P_0$	0.0	281947.979	0.145	2
$({}^2P) 4d \ {}^3P_1$	1.0	282000.437	0.141	3
$({}^2P) 4d \ {}^3P_2$	2.0	282099.309	0.135	3
$({}^2P) 4d \ {}^3D_3$	3.0	283919.507	0.217	3
$({}^2P) 4d \ {}^3D_2$	2.0	284094.501	1.142	1
$({}^2P) 4d \ {}^3D_1$	1.0	284118.154	0.242	1
$3s^2 3p^3 ({}^4S) 5s \ {}^5S_2$	2.0	250711.958	0.384	6
$({}^4S) 5s \ {}^3S_1$	1.0	252574.836	0.130	8
$({}^2D) 5s \ {}^3D_1$	1.0	272127.311	0.202	5
$({}^2D) 5s \ {}^3D_2$	2.0	272187.316	0.205	6
$({}^2D) 5s \ {}^3D_3$	3.0	272250.070	0.270	3
$({}^2P) 5s \ {}^3P_0$	0.0	285831.391	0.443	1
$({}^2P) 5s \ {}^3P_1$	1.0	285882.307	0.401	2
$({}^2P) 5s \ {}^3P_2$	2.0	286008.766	0.169	4

Tabela 4.5: Níveis de energia das configurações ímpares de Ar III.
Continuação.

Int.	λ Observada.(Å)	Transição	log(gf)	Observações	Ref
3	368.300	$(^2D)4d\ ^3P_2 - p^4\ ^3P_2$	-0.621	N	[37]
3	371.750	$(^2D)4d\ ^3D_3 - p^4\ ^3P_2$	-0.318	N,T	[37]
1	382.630	$(^2D)4d\ ^1F_3 - p^4\ ^1D_2$	-0.171		[35]
1	387.470	$(^2D)4d\ ^1D_2 - p^4\ ^1D_2$	-1.765		[35]
1	389.490	$(^2D)4d\ ^1P_1 - p^4\ ^1D_2$	-0.736		[35]
1	395.920	$(^4S)5s\ ^3S_1 - p^4\ ^3P_2$	-1.098		[23]
6	396.370	$(^4S)4d\ ^3D_3 - p^4\ ^3P_2$	-0.239		[23, 35]
1	397.670	$(^4S)5s\ ^3S_1 - p^4\ ^3P_1$	-1.344		[23]
3	398.170	$(^4S)4d\ ^3D_1 - p^4\ ^3P_1$	-0.962		[35]
3	398.170	$(^4S)4d\ ^3D_2 - p^4\ ^3P_1$	-0.504		[35]
1	398.860	$(^4S)5s\ ^5S_2 - p^4\ ^3P_2$	-4.362		[23]
1	400.630	$(^4S)5s\ ^5S_2 - p^4\ ^3P_1$	-5.044	Difusa,N	[36]
1	409.080	$(^4S)4d\ ^5D_1 - p^4\ ^3P_0$	-4.983	N	[36]
1	422.490	$(^4S)5s\ ^5S_2 - p^4\ ^1D_2$	-7.337	Difusa,N	[36]
3	466.560	$(^2D)3d\ ^3P_1 - p^4\ ^3P_2$	-0.416		[23]
6	467.400	$(^2D)3d\ ^3P_2 - p^4\ ^3P_2$	-0.214		[23]
4	468.470	$(^2D)3d\ ^3P_0 - p^4\ ^3P_1$	-0.366		[23]
6	468.980	$(^2D)3d\ ^3P_1 - p^4\ ^3P_1$	-0.007		[23]
4	469.830	$(^2D)3d\ ^3P_2 - p^4\ ^3P_1$	0.063		[23]
4	469.970	$(^2D)3d\ ^3P_1 - p^4\ ^3P_0$	-0.123		[23]
5	472.660	$(^2P)3d\ ^3D_1 - p^4\ ^3P_2$	-0.751	N	[36]
9	473.930	$(^2P)3d\ ^3D_2 - p^4\ ^3P_2$	0.272		[23]
3	475.160	$(^2P)3d\ ^3D_1 - p^4\ ^3P_1$	0.187	N	[37]
6	475.460	$(^2D)3d\ ^1F_3 - p^4\ ^1D_2$	0.952	N	[37]
3	476.200	$(^2P)3d\ ^3D_1 - p^4\ ^3P_0$	0.158	Superposta,N	[37]
3	476.420	$(^2P)3d\ ^3D_2 - p^4\ ^3P_1$	0.518		[23]
3	477.340	$(^2P)4s\ ^1P_1 - p^4\ ^3P_0$	-4.098	N	[37]
6	481.870	$(^2P)4s\ ^3P_1 - p^4\ ^3P_2$	-0.012		[23]
6	482.550	$(^2P)4s\ ^3P_2 - p^4\ ^3P_2$	0.539		[23]
3	484.120	$(^2P)4s\ ^3P_0 - p^4\ ^3P_1$	-0.082		[23]
3	484.460	$(^2P)4s\ ^3P_1 - p^4\ ^3P_1$	-0.157		[23]
6	485.160	$(^2P)4s\ ^3P_2 - p^4\ ^3P_1$	0.079		[23]
6	485.540	$(^2P)4s\ ^3P_1 - p^4\ ^3P_0$	-0.030		[23]
6	485.680	$(^2D)3d\ ^1P_1 - p^4\ ^1D_2$	0.192	Superposta,N	[37]
7	487.020	$(^2D)3d\ ^1D_2 - p^4\ ^1D_2$	0.645		[23]

Tabela 4.6: Transições de Ar III.

Int.	λ Observada.(Å)	Transição	log(gf)	Observações	Ref
6	488.450	$(^2D)3d\ ^3S_1 - p^4\ ^3P_2$	0.196		[23]
3	490.230	$(^2P)3d\ ^1P_1 - p^4\ ^1S_0$	0.539	N	[36]
4	491.120	$(^2D)3d\ ^3S_1 - p^4\ ^3P_1$	-0.082		[23]
3	492.230	$(^2D)3d\ ^3S_1 - p^4\ ^3P_0$	-0.586		[23]
3	503.390	$(^2D)4s\ ^1D_2 - p^4\ ^3P_1$	-2.232	N	[37]
3	506.200	$(^2P)3d\ ^3D_1 - p^4\ ^1D_2$	-3.094	N	[37]
6	507.480	$(^2P)4s\ ^1P_1 - p^4\ ^1D_2$	0.325	Assimétrica,N	[36]
6	508.440	$(^2D)4s\ ^3D_3 - p^4\ ^3P_2$	0.112		[23, 22]
6	508.620	$(^2D)4s\ ^3D_2 - p^4\ ^3P_2$	-0.507		[23, 22]
3	508.680	$(^2D)4s\ ^3D_1 - p^4\ ^3P_2$	-1.622		[22]
8	511.510	$(^2D)4s\ ^3D_2 - p^4\ ^3P_1$	-0.229		[23, 22]
7	511.570	$(^2D)4s\ ^3D_1 - p^4\ ^3P_1$	-0.607		[23, 22]
6	512.770	$(^2D)4s\ ^3D_1 - p^4\ ^3P_0$	-0.589		[23, 22]
6	517.560	$(^2P)4s\ ^3P_2 - p^4\ ^1D_2$	-1.485	N	[36]
6	528.040	$(^2P)3d\ ^3P_2 - p^4\ ^3P_2$	-1.604	N	[37]
9	529.900	$(^4S)3d\ ^3D_3 - p^4\ ^3P_2$			[23]
6	530.460	$(^2P)3d\ ^3P_1 - p^4\ ^3P_2$	-1.853	Larga,N	[37]
6	531.160	$(^2P)3d\ ^3P_2 - p^4\ ^3P_1$	-1.998	N	[37]
9	532.410	$(^4S)3d\ ^3D_2 - p^4\ ^3P_2$			[23]
3	533.630	$(^2P)3d\ ^3P_1 - p^4\ ^3P_1$	-4.378	N	[36]
6	534.290	$(^4S)3d\ ^3D_1 - p^4\ ^3P_2$			[23]
3	534.920	$(^2P)3d\ ^3P_1 - p^4\ ^3P_0$	-2.845	N	[37]
9	535.590	$(^4S)3d\ ^3D_2 - p^4\ ^3P_1$			[23]
6	535.790	$(^2D)3d\ ^1P_1 - p^4\ ^1S_0$	-0.833	N	[37]
6	536.750	$(^2P)3d\ ^1F_3 - p^4\ ^1D_2$	-1.759		[23]
6	537.450	$(^4S)3d\ ^3D_1 - p^4\ ^3P_1$			[23]
6	538.350	$(^2D)4s\ ^1D_2 - p^4\ ^1D_2$	0.303	N	[36]
6	538.810	$(^4S)3d\ ^3D_1 - p^4\ ^3P_0$			[23]
6	547.450	$(^2D)4s\ ^3D_3 - p^4\ ^1D_2$	-2.465	Assimétrica,N	[37]
1	552.240	$(^2D)3d\ ^3P_1 - p^4\ ^1S_0$	-2.839	Superposta,N	[37]
6	553.470	$(^4S)4s\ ^3S_1 - p^4\ ^3P_2$	-0.081		[23, 22]
9	556.890	$(^4S)4s\ ^3S_1 - p^4\ ^3P_1$	-0.327		[23, 22]
6	558.330	$(^4S)4s\ ^3S_1 - p^4\ ^3P_0$	-0.810		[23, 22]
6	562.440	$(^2P)4s\ ^1P_1 - p^4\ ^1S_0$	-0.608	N	[37]
3	573.470	$(^4S)4s\ ^5S_2 - p^4\ ^3P_2$	-3.227		[23]

Tabela 4.7: Transições de Ar III.
Continuação.

Int.	λ Observada.(Å)	Transição	log(gf)	Observações	Ref
3	573.840	$(^2P)4s\ ^3P_1 - p^4\ ^1S_0$	-3.449	N	[37]
3	577.150	$(^4S)4s\ ^5S_2 - p^4\ ^3P_1$	-3.795		[23]
3	578.390	$(^2P)3d\ ^3F_2 - p^4\ ^1D_2$	-3.237		[28]
3	579.200	$(^2P)3d\ ^3F_3 - p^4\ ^1D_2$	-3.472		[28]
10	604.150	$(^2P)3d\ ^1D_2 - p^4\ ^1D_2$	-0.859		[23]
3	636.820	$(^2D)3d\ ^3D_1 - p^4\ ^3P_2$	-3.481		[23]
12	637.260	$(^2D)3d\ ^3D_2 - p^4\ ^3P_2$	-2.445		[23]
5	641.360	$(^2D)3d\ ^3D_1 - p^4\ ^3P_1$	-2.521		[23]
9	641.810	$(^2D)3d\ ^3D_2 - p^4\ ^3P_1$	-2.230		[23]
9	643.250	$(^2D)3d\ ^3D_1 - p^4\ ^3P_0$	-2.518		[23]
6	690.170	$(^4S)3d\ ^5D_3 - p^4\ ^3P_2$	-3.813	T	[23]
6	695.540	$(^4S)3d\ ^5D_2 - p^4\ ^3P_1$	-5.553	T	[23]
1	697.770	$(^4S)3d\ ^5D_1 - p^4\ ^3P_0$	-4.641		[23]
12	769.130	$3p^5\ ^1P_1 - p^4\ ^1D_2$	-0.743		[23]
10	871.100	$3p^5\ ^3P_1 - p^4\ ^3P_2$	-1.356		[23]
9	875.520	$3p^5\ ^3P_0 - p^4\ ^3P_1$	-1.451		[23]
15	878.710	$3p^5\ ^3P_2 - p^4\ ^3P_2$	-0.878		[23]
15	879.600	$3p^5\ ^3P_1 - p^4\ ^3P_1$	-1.572		[23]
15	883.160	$3p^5\ ^3P_1 - p^4\ ^3P_0$	-1.448		[23]
15	887.400	$3p^5\ ^3P_2 - p^4\ ^3P_1$	-1.351		[23]
6	945.240	$3p^6\ ^1S_0 - 3p^5\ ^1P_1$		Assimetrica	[37]
3	1002.100	$3p^5\ ^3P_2 - p^4\ ^1D_2$	-3.379		[28]
9	1005.270	$(^2P)4p\ ^1D_2 - (^4S)3d\ ^5D_2$	-4.901	N	[37]
9	1014.780	$(^2P)4p\ ^3P_2 - (^4S)3d\ ^5D_1$	-4.299	N	[37]
12	1017.660	$(^2P)4p\ ^3P_1 - (^4S)3d\ ^5D_1$	4.195	N	[37]
12	1048.200	$(^2P)4p\ ^3D_3 - (^4S)3d\ ^5D_3$	-3.670	N	[37]
15	1048.380	$(^2P)4p\ ^3D_3 - (^4S)3d\ ^5D_4$	-3.199	Superposta,N	[37]
6	1049.690	$(^2P)4p\ ^3D_1 - (^4S)3d\ ^5D_2$	-6.434	Larga,N	[37]
1	1157.470	$(^2P)4p\ ^3P_2 - (^2D)3d\ ^3D_1$	-3.487	Difusa,N	[37]
6	1159.770	$(^2P)4p\ ^3P_1 - (^2D)3d\ ^3D_2$	-4.306	N	[37]
12	1199.370	$(^2P)4p\ ^3D_3 - (^2D)3d\ ^3D_3$	-1.446	N	[37]
12	1199.950	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2D)3d\ ^3D_2$	-1.673	Larga,N	[37]
6	1201.490	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2D)3d\ ^3D_1$	-2.202	N	[37]
9	1203.030	$(^2P)4p\ ^3D_1 - (^2D)3d\ ^3D_1$		N	[37]
9	1245.760	$(^2D)4p\ ^3D_1 - (^4S)3d\ ^5D_2$	-5.209	N	[37]

Tabela 4.8: Transições de Ar III.
Continuação.

Int.	λ Observada.(Å)	Transição	log(gf)	Observações	Ref
15	1250.630	$(^2P)4p\ ^1P_1 - (^2D)3d\ ^1S_0$	-1.733	N	[37]
3	1265.250	$(^2D)4p\ ^1D_2 - (^2D)3d\ ^3D_1$	-3.676	Difusa,N	[37]
3	1290.310	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2D)3d\ ^3F_2$	-2.766	N	[37]
9	1292.070	$(^2P)4p\ ^3D_1 - (^2D)3d\ ^3F_2$	-1.509	N	[37]
3	1295.060	$(^2P)4p\ ^3D_3 - (^2D)3d\ ^3F_3$	-2.920	N	[37]
12	1295.630	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2D)3d\ ^3F_3$	-1.257	N	[37]
15	1301.820	$(^2P)4p\ ^3D_3 - (^2D)3d\ ^3F_4$	-1.035	N	[37]
6	1333.860	$(^2P)4d\ ^3D_2 - (^4S)4p\ ^3P_1$	-4.914	N	[37]
6	1337.420	$(^2P)4d\ ^3D_3 - (^4S)4p\ ^3P_2$	-4.636	N	[37]
9	1338.240	$(^2D)4p\ ^3P_0 - (^2D)3d\ ^3D_1$	-1.851	N	[37]
12	1338.620	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^2D)3d\ ^3D_2$	-1.528	N	[37]
9	1340.520	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^2D)3d\ ^3D_1$	-1.954	N	[37]
12	1343.710	$(^2D)4p\ ^3P_2 - (^2D)3d\ ^3D_2$	-1.831	Assimétrica,N	[37]
3	1345.680	$(^2D)4p\ ^3P_2 - (^2D)3d\ ^3D_1$	-2.969	N	[37]
9	1422.000	$(^2D)4p\ ^1F_3 - (^2D)3d\ ^3D_2$	-2.616	N	[37]
12	1434.070	$(^2D)4p\ ^3F_4 - (^2D)3d\ ^3D_3$	-1.407	N	[37]
15	1437.020	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^2D)3d\ ^3D_3$	-1.166	N	[37]
12	1437.170	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^2D)3d\ ^3D_2$	-2.126	N	[37]
3	1440.070	$(^2D)4p\ ^3F_2 - (^2D)3d\ ^3D_3$	-2.187	N	[37]
12	1440.210	$(^2D)4p\ ^3F_2 - (^2D)3d\ ^3D_2$	-1.530	N	[37]
9	1442.440	$(^2D)4p\ ^3F_2 - (^2D)3d\ ^3D_1$	-2.076	N	[37]
15	1460.110	$(^2D)4p\ ^3D_3 - (^2D)3d\ ^3D_3$	-0.863		[23]
12	1460.240	$(^2D)4p\ ^3D_3 - (^2D)3d\ ^3D_2$	-1.383		[23]
15	1465.560	$(^2D)4p\ ^3D_2 - (^2D)3d\ ^3D_3$	-1.442		[23]
15	1465.700	$(^2D)4p\ ^3D_2 - (^2D)3d\ ^3D_2$	-1.104		[23]
15	1467.850	$(^2D)4p\ ^3D_1 - (^2D)3d\ ^3D_1$	-1.281		[23]
15	1468.010	$(^2D)4p\ ^3D_2 - (^2D)3d\ ^3D_1$	-1.464		[23]
9	1500.740	$(^2D)4p\ ^1P_1 - (^2D)3d\ ^3D_1$	-1.704	N	[37]
9	1542.540	$(^2P)4p\ ^1D_2 - (^2P)3d\ ^1D_2$	-0.987	Superposta,N	[37]
1	1556.220	$(^4S)4p\ ^3P_2 - (^4S)3d\ ^5D_3$	-3.006	Assimétrica,Difusa,N	[37]
1	1556.630	$(^4S)4p\ ^3P_1 - (^4S)3d\ ^5D_2$	-4.072	Superposta,N	[37]
9	1568.690	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^2D)3d\ ^3F_2$	-0.967	N	[37]
3	1571.920	$(^2P)4p\ ^3P_1 - (^2P)3d\ ^1D_2$	-1.418	N	[37]
12	1572.320	$(^2D)4p\ ^3F_2 - (^2D)3d\ ^3F_2$	-0.967	N	[37]
1	1573.050	$(^2D)4p\ ^3F_4 - (^2D)3d\ ^3F_3$	-1.587	Superposta,N	[37]

Tabela 4.9: Transições de Ar III.
Continuação.

Int.	λ Observada. (Å)	Transição	log(gf)	Observações	Ref
12	1576.590	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^2D)3d\ ^3F_3$	-0.908	Assimétrica,N	[37]
9	1580.260	$(^2D)4p\ ^3F_2 - (^2D)3d\ ^3F_3$	-1.151	N	[37]
15	1583.040	$(^2D)4p\ ^3F_4 - (^2D)3d\ ^3F_4$	-0.480	N	[37]
1	1586.330	$(^2D)5s\ ^3D_2 - (^4S)4p\ ^3P_2$	-1.148	N	[37]
1	1586.620	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^2D)3d\ ^3F_4$	-0.843	N	[37]
1	1588.740	$(^2D)4d\ ^3S_1 - (^4S)4p\ ^3P_1$	-1.311	N	[37]
6	1596.210	$(^2D)4p\ ^3D_3 - (^2D)3d\ ^3F_2$	-1.914	N	[37]
9	1602.570	$(^2D)4p\ ^3D_1 - (^2D)3d\ ^3F_2$	-0.581	N	[37]
9	1602.790	$(^2D)4p\ ^3D_2 - (^2D)3d\ ^3F_2$	-0.836	Assimétrica,N	[37]
9	1604.410	$(^2D)4p\ ^3D_3 - (^2D)3d\ ^3F_3$	-0.692	N	[37]
12	1605.710	$(^2P)4p\ ^1P_1 - (^2P)3d\ ^1D_2$	-0.801	N	[37]
15	1611.000	$(^2D)4p\ ^3D_2 - (^2D)3d\ ^3F_3$	-0.343	Assimétrica,N	[37]
15	1614.790	$(^2D)4p\ ^3D_3 - (^2D)3d\ ^3F_4$	-0.201	Assimétrica,N	[37]
9	1617.760	$(^2D)4p\ ^1P_1 - (^2D)3d\ ^1S_0$	-1.070	N	[37]
1	1649.570	$(^2P)4p\ ^3D_1 - (^2P)3d\ ^1D_2$	-1.919	N	[37]
0	1650.020	$(^2P)5s\ ^3P_2 - (^2D)4p\ ^3D_3$	-1.352	N	[37]
12	1669.110	$(^4S)4p\ ^5P_3 - (^4S)3d\ ^5D_2$	-1.357		[23, 22]
12	1669.280	$(^4S)4p\ ^5P_3 - (^4S)3d\ ^5D_3$	-0.512		[23, 22]
7	1669.660	$(^4S)4p\ ^5P_3 - (^4S)3d\ ^5D_4$	0.074		[23, 22]
1	1673.140	$(^4S)4p\ ^5P_2 - (^4S)3d\ ^5D_1$	-1.007		[23, 22]
3	1673.240	$(^4S)4p\ ^5P_2 - (^4S)3d\ ^5D_2$	-0.417		[23, 22]
7	1673.430	$(^4S)4p\ ^5P_2 - (^4S)3d\ ^5D_3$	0.212		[23, 22]
3	1675.540	$(^4S)4p\ ^5P_1 - (^4S)3d\ ^5D_1$	-0.529	D	[23, 22]
4	1675.640	$(^4S)4p\ ^5P_1 - (^4S)3d\ ^5D_2$	-0.638		[23, 22]
6	1768.830	$(^2D)4p\ ^1D_2 - (^2P)3d\ ^1D_2$	-1.065	N	[37]
6	1768.830	$(^2P)4p\ ^1D_2 - (^4S)3d\ ^3D_2$		N	[37]
1	1786.520	$(^2P)4p\ ^3P_1 - (^4S)3d\ ^3D_1$		N	[37]
3	1793.640	$(^2P)4p\ ^3P_0 - (^4S)3d\ ^3D_1$		N	[37]
6	1798.500	$(^2P)4p\ ^3P_2 - (^4S)3d\ ^3D_2$		N	[37]
1	1814.630	$(^2D)4p\ ^1F_3 - (^2D)3d\ ^3G_4$	-3.263	N	[36]
6	1827.800	$(^2P)4p\ ^3P_2 - (^4S)3d\ ^3D_3$		N	[37]
3	1834.530	$(^2D)4p\ ^3F_4 - (^2D)3d\ ^3G_4$	-1.262	N	[37]
12	1836.370	$(^2D)4p\ ^3F_4 - (^2D)3d\ ^3G_5$	0.167	N	[22]
3	1838.090	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^2D)3d\ ^3G_3$	-1.266	N	[37]
12	1839.330	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^2D)3d\ ^3G_4$	0.012		[22]

Tabela 4.10: Transições de Ar III.
Continuação.

Int.	λ Observada.(Å)	Transição	log(gf)	Observações	Ref
9	1843.080	$(^2D)4p\ ^3F_2 - (^2D)3d\ ^3G_3$	-0.083		[22]
6	1850.320	$(^2P)4p\ ^3P_2 - (^2P)3d\ ^3P_2$	-0.822	N	[37]
9	1855.660	$(^2P)4p\ ^3D_3 - (^2P)3d\ ^3F_4$	0.034	N	[37]
3	1859.890	$(^2P)4p\ ^3P_1 - (^2P)3d\ ^3P_2$	-1.280	N	[37]
1	1864.500	$(^2P)4p\ ^3D_3 - (^2P)3d\ ^3F_3$	-1.048	N	[37]
6	1865.670	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2P)3d\ ^3F_3$	-0.127	N	[37]
1	1874.270	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2P)3d\ ^3F_2$	-1.113	N	[37]
6	1878.000	$(^2P)4p\ ^3D_1 - (^2P)3d\ ^3F_2$	-0.310	N	[37]
0	1907.140	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^4S)3d\ ^3D_2$		N	[37]
9	1914.420	$(^4S)4p\ ^3P_2 - (^2D)3d\ ^3D_3$	-0.258		[23]
6	1914.670	$(^4S)4p\ ^3P_2 - (^2D)3d\ ^3D_2$	-1.005		[23]
9	1915.550	$(^4S)4p\ ^3P_1 - (^2D)3d\ ^3D_2$	-0.522		[23]
6	1918.070	$(^4S)4p\ ^3P_0 - (^2D)3d\ ^3D_1$	-0.876		[23]
6	1919.520	$(^4S)4p\ ^3P_1 - (^2D)3d\ ^3D_1$	-1.009		[23]
9	1938.790	$(^2D)4p\ ^1F_3 - (^2D)3d\ ^1G_4$	0.081	Assimetrica,N	[37]
1	1957.840	$(^2D)4p\ ^3P_0 - (^4S)4s\ ^3S_1$	-1.519		[23]
5	1958.890	$(^2P)4p\ ^3S_1 - (^2P)3d\ ^3P_0$	-1.240	N	[36]
3	1962.740	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^4S)4s\ ^3S_1$	-1.006		[23]
6	1965.490	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2P)3d\ ^3P_2$	-1.813	N	[36]
3	1973.300	$(^2P)4p\ ^3S_1 - (^2P)3d\ ^3P_1$	-0.762	N	[37]
6	1973.760	$(^2D)4p\ ^3P_2 - (^4S)4s\ ^3S_1$	-0.745		[23]
6	2006.890	$(^2P)4p\ ^3S_1 - (^2P)3d\ ^3P_2$	-0.500	N	[37]
1	2064.150	$(^2D)4d\ ^1D_2 - (^2D)4p\ ^1P_1$	0.133	Superposta,N	[37]
4	2082.150	$(^4S)5s\ ^3S_1 - (^4S)4p\ ^5P_1$	-3.209	N	[36]
1	2106.510	$(^4S)4d\ ^3D_2 - (^4S)4p\ ^5P_3$	-4.385	N	[37]
8	2122.340	$(^2D)5s\ ^3D_3 - (^2D)4p\ ^3D_2$	-0.608		[33]
10	2125.160	$(^2D)5s\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3D_2$	0.094		[33]
3	2127.890	$(^2D)5s\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^3D_2$	-1.268		[33]
6	2128.220	$(^2D)5s\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^3D_1$	-0.164		[33]
5	2135.330	$(^2P)5s\ ^3P_2 - (^2P)4p\ ^3S_1$	-0.283	N	[36]
4	2141.120	$(^2P)5s\ ^3P_1 - (^2P)4p\ ^3S_1$	-0.618	N	[36]
1	2143.450	$(^2P)5s\ ^3P_0 - (^2P)4p\ ^3S_1$	-1.079	N	[36]
6	2147.950	$(^2D)4d\ ^3P_0 - (^2D)4p\ ^3D_1$	-2.213		[32, 34]
8	2148.730	$(^2D)4d\ ^3P_1 - (^2D)4p\ ^3D_2$	-0.404		[32, 34]
3	2149.070	$(^2D)4d\ ^3P_1 - (^2D)4p\ ^3D_1$	-0.955		[32, 34]

Tabela 4.11: Transições de Ar III.
Continuação.

Int.	λ Observada.(Å)	Transição	log(gf)	Observações	Ref
3	2156.380	$(^2D)4d\ ^3P_2 - (^2D)4p\ ^3D_2$	-2.666		[32, 34]
15	2166.190	$(^4S)5s\ ^5S_2 - (^4S)4p\ ^5P_1$	-0.227		[32, 34, 22]
10	2168.260	$(^2D)4d\ ^3P_2 - (^2D)4p\ ^3D_3$	-0.176		[32, 34]
20	2170.230	$(^4S)5s\ ^5S_2 - (^4S)4p\ ^5P_2$	-0.006		[32, 34, 22]
25	2177.220	$(^4S)5s\ ^5S_2 - (^4S)4p\ ^5P_3$	0.140		[32, 34, 22]
8	2184.070	$(^2D)5s\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^3F_2$	-0.140		[32, 34, 22]
1	2186.620	$(^2P)5s\ ^3P_2 - (^2P)4p\ ^3D_3$	0.113	N	[37]
10	2188.230	$(^2D)5s\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3F_3$	-0.120		[33]
1	2191.050	$(^2P)5s\ ^3P_1 - (^2P)4p\ ^3D_2$	-0.126	N	[37]
15	2192.060	$(^2D)5s\ ^3D_3 - (^2D)4p\ ^3F_4$	0.086		[33]
2	2241.760	$(^2P)4p\ ^1D_2 - (^2D)4s\ ^1D_2$	-0.797	N	[37]
6	2242.290	$(^2D)4p\ ^3P_0 - (^4S)3d\ ^3D_1$			[33]
7	2248.730	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^4S)3d\ ^3D_1$	-1.973		[33]
1	2269.750	$(^2P)4p\ ^1S_0 - (^2P)4s\ ^1P_1$	-0.417	N	[37]
10	2279.100	$(^2D)4d\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3D_2$	-0.197		[32, 34]
3	2279.470	$(^2D)4d\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3D_1$	-0.919		[32, 34]
4	2279.680	$(^2D)4d\ ^3D_3 - (^2D)4p\ ^3D_2$	-0.780		[32, 34]
5	2280.850	$(^2D)4d\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^3D_2$	-0.534		[32, 34]
7	2281.220	$(^2D)4d\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^3D_1$	-0.470		[32, 34]
7	2282.210	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^4S)3d\ ^3D_2$			[33]
2	2288.830	$(^2P)4p\ ^3D_3 - (^2D)4s\ ^3D_2$	-2.818		[32, 34]
6	2290.600	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2D)4s\ ^3D_2$	-1.356		[32, 34]
2	2292.270	$(^2P)4p\ ^3D_3 - (^2D)4s\ ^3D_3$	-1.066		[32, 34]
5	2292.390	$(^2D)4d\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3D_3$	-0.003		[32, 34]
12	2293.020	$(^2D)4d\ ^3D_3 - (^2D)4p\ ^3D_3$	-0.003		[32, 34]
1	2299.060	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^2P)3d\ ^3P_0$	-1.545	Difusa,N	[37]
3	2300.750	$(^4S)5s\ ^3S_1 - (^4S)4p\ ^3P_1$	-0.356		[32, 34, 22]
10	2302.070	$(^4S)5s\ ^3S_1 - (^4S)4p\ ^3P_2$	-0.132		[32, 34, 22]
2	2302.830	$(^4S)5s\ ^3S_1 - (^4S)4p\ ^3P_0$	-0.818		[32, 34, 22]
1	2312.120	$(^2D)4p\ ^3P_0 - (^2P)3d\ ^3P_1$	-1.660	Difusa,N	[37]
4	2316.880	$(^4S)4d\ ^3D_1 - (^4S)4p\ ^3P_1$	-0.119		[32, 34]
7	2317.360	$(^4S)4d\ ^3D_3 - (^4S)4p\ ^3P_2$	0.630		[32, 34]
7	2317.910	$(^4S)4d\ ^3D_2 - (^4S)4p\ ^3P_1$	0.362		[32, 34]
1	2318.230	$(^4S)4d\ ^3D_1 - (^4S)4p\ ^3P_2$	-1.314		[32, 34]
5	2319.000	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^2P)3d\ ^3P_1$	-1.453		[32, 34]

Tabela 4.12: Transições de Ar III.
Continuação.

Int.	λ Observada.(Å)	Transição	log(gf)	Observações	Ref
5	2319.000	$(^4S)4d\ ^3D_1 - (^4S)4p\ ^3P_0$	0.007		[32, 34]
4	2319.250	$(^4S)4d\ ^3D_2 - (^4S)4p\ ^3P_2$	-0.121		[32, 34]
4	2329.900	$(^2P)4d\ ^3P_2 - (^2P)4p\ ^3S_1$	0.221	N	[37]
3	2335.290	$(^2P)4d\ ^3P_1 - (^2P)4p\ ^3S_1$	0.067	N	[37]
2	2338.160	$(^2P)4d\ ^3P_0 - (^2P)4p\ ^3S_1$	-0.372	N	[37]
2	2343.560	$(^2D)4d\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3F_2$	-0.632		[32, 34]
4	2345.180	$(^2D)4p\ ^3P_2 - (^4S)3d\ ^3D_3$			[33]
1	2345.440	$(^2D)4d\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^3F_2$	-0.690		[32, 34]
3	2347.560	$(^2P)5s\ ^3P_2 - (^2P)4p\ ^3P_2$	-0.299	N	[37]
2	2351.670	$(^2D)4d\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3F_3$	-0.557		[32, 34]
5	2352.330	$(^2D)4d\ ^3D_3 - (^2D)4p\ ^3F_3$	-0.328		[32, 34]
1	2356.120	$(^2D)4d\ ^3G_4 - (^2D)4p\ ^3D_3$	-0.501	N	[37]
9	2360.260	$(^2D)4d\ ^3D_3 - (^2D)4p\ ^3F_4$	-0.103		[32, 34]
1	2366.320	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^2P)3d\ ^3P_2$	-2.556	N	[37]
5	2377.750	$(^2P)4p\ ^1P_1 - (^2D)4s\ ^1D_2$	-0.929	N	[37]
4	2382.400	$(^2D)4p\ ^3P_2 - (^2P)3d\ ^3P_2$	-1.445	N	[37]
10	2395.640	$(^2D)4d\ ^3F_3 - (^2D)4p\ ^3D_2$	0.447		[32, 34]
10	2399.190	$(^2D)4d\ ^3F_5 - (^2D)4p\ ^3D_3$	0.593		[32, 34]
7	2404.560	$(^2D)4d\ ^3F_2 - (^2D)4p\ ^3D_2$	-0.109		[32, 34]
9	2405.720	$(^2D)4d\ ^3F_2 - (^2D)4p\ ^3D_1$	0.180		[32, 34]
7	2410.380	$(^2D)4d\ ^3F_3 - (^2D)4p\ ^3D_3$	0.035		[32, 34, 22]
4	2410.800	$(^4S)4d\ ^5D_2 - (^4S)4p\ ^5P_1$	0.116		[32, 34, 22]
5	2411.010	$(^4S)4d\ ^5D_1 - (^4S)4p\ ^5P_1$	0.225		[32, 34, 22]
10	2413.210	$(^2D)4d\ ^3G_3 - (^2D)4p\ ^3F_2$	0.676		[32, 34]
7	2415.610	$(^4S)4d\ ^5D_3 - (^4S)4p\ ^5P_2$	0.541		[32, 34, 22]
4	2415.840	$(^4S)4d\ ^5D_2 - (^4S)4p\ ^5P_2$	0.337		[32, 34, 22]
3	2416.000	$(^4S)4d\ ^5D_1 - (^4S)4p\ ^5P_2$	-0.254		[32, 34, 22]
10	2418.830	$(^2D)4d\ ^3G_4 - (^2D)4p\ ^3F_3$	0.783		[32, 34]
2	2419.410	$(^2D)4d\ ^3F_2 - (^2D)4p\ ^3D_3$	-1.253	N	[37]
8	2419.910	$(^2P)4d\ ^3F_2 - (^2P)4p\ ^3D_1$	0.478	Assimetrica,N	[37]
4	2421.810	$(^2D)4d\ ^3G_3 - (^2D)4p\ ^3F_3$	-0.676		[32, 34]
11	2423.520	$(^2D)4d\ ^3G_5 - (^2D)4p\ ^3F_4$	0.901		[32, 34]
12	2423.930	$(^4S)4d\ ^5D_4 - (^4S)4p\ ^5P_3$	0.826		[32, 34, 22]
11	2424.270	$(^4S)4d\ ^5D_3 - (^4S)4p\ ^5P_3$	0.239		[32, 34, 22]
7	2424.490	$(^4S)4d\ ^5D_2 - (^4S)4p\ ^5P_3$	-0.606		[32, 34, 22]

Tabela 4.13: Transições de Ar III.
Continuação.

Int.	λ Observada.(Å)	Transição	log(gf)	Observações	Ref
8	2425.480	$(^2P)4d\ ^3F_3 - (^2P)4p\ ^3D_2$	0.657	N	[37]
4	2426.170	$(^2P)4d\ ^3F_2 - (^2P)4p\ ^3D_2$	-0.325	N	[37]
3	2426.740	$(^2P)4d\ ^3D_1 - (^2P)4p\ ^3P_0$	-0.092	N	[37]
5	2427.220	$(^2D)4d\ ^3G_4 - (^2D)4p\ ^3F_4$	-0.898		[32, 34]
6	2443.690	$(^2D)5s\ ^3D_3 - (^2D)4p\ ^3P_2$	-0.686		[32, 34]
2	2447.430	$(^2D)5s\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3P_2$	-0.547		[32, 34]
9	2454.570	$(^2D)4d\ ^3S_1 - (^2D)4p\ ^3P_2$	-0.072		[32, 34]
5	2464.250	$(^2D)4d\ ^3F_4 - (^2D)4p\ ^3F_3$	-0.359		[32, 34]
5	2464.620	$(^2D)5s\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3P_1$	-1.961		[32, 34]
1	2466.080	$(^2D)4d\ ^3G_3 - (^2D)4p\ ^1F_3$	-3.562	N	[37]
5	2467.030	$(^2D)4d\ ^3F_3 - (^2D)4p\ ^3F_2$	-0.595		[32, 34]
2	2468.300	$(^2D)5s\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^3P_1$	-1.289		[32, 34]
8	2468.670	$(^2P)4d\ ^3D_3 - (^2P)4p\ ^3P_2$	0.508	N	[37]
7	2471.890	$(^2D)4d\ ^3S_1 - (^2D)4p\ ^3P_1$	-0.198		[32, 34]
9	2472.950	$(^2D)4d\ ^3F_4 - (^2D)4p\ ^3F_4$	0.351		[32, 34]
2	2475.210	$(^2P)4p\ ^3D_1 - (^2D)4s\ ^1D_2$	-2.987	N	[37]
9	2476.050	$(^2D)4d\ ^3F_3 - (^2D)4p\ ^3F_3$	-0.051		[32, 34]
7	2476.100	$(^2D)5s\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^3P_0$	-1.468		[32, 34]
9	2476.520	$(^2D)4d\ ^3F_2 - (^2D)4p\ ^3F_2$	-0.163		[32, 34]
9	2478.750	$(^2D)4d\ ^3P_1 - (^2D)4p\ ^3P_2$	-0.193		[32, 34]
3	2479.760	$(^2D)4d\ ^3S_1 - (^2D)4p\ ^3P_0$	-0.623		[32, 34]
5	2484.100	$(^2D)4p\ ^3F_4 - (^2P)3d\ ^3F_4$	-1.279		[32, 34]
4	2484.830	$(^2D)4d\ ^3F_3 - (^2D)4p\ ^3F_4$	-0.879		[32, 34]
3	2485.590	$(^2D)4d\ ^3F_2 - (^2D)4p\ ^3F_3$	-1.066		[32, 34]
9	2488.850	$(^2D)4d\ ^3P_2 - (^2D)4p\ ^3P_2$	0.120		[32, 34]
4	2492.950	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^2P)3d\ ^3F_4$	-1.578		[32, 34]
7	2494.860	$(^2D)4d\ ^3P_0 - (^2D)4p\ ^3P_1$	-0.360		[32, 34]
6	2496.420	$(^2D)4d\ ^3P_1 - (^2D)4p\ ^3P_1$	-0.592		[32, 34]
1	2499.980	$(^2D)4p\ ^3F_4 - (^2P)3d\ ^3F_3$	-2.774		[32, 34]
1	2503.020	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2P)3d\ ^1F_3$	-2.049	Difusa,N	[37]
6	2504.380	$(^2D)4d\ ^3P_1 - (^2D)4p\ ^3P_0$	-0.401		[32, 34]
7	2506.650	$(^2D)4d\ ^3P_2 - (^2D)4p\ ^3P_1$	-0.226		[32, 34]
8	2508.940	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^2P)3d\ ^3F_3$	-1.792		[32, 34]
1	2510.100	$(^2D)4d\ ^3F_4 - (^2D)4p\ ^1F_3$	-2.407	N	[37]
2	2524.500	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^2P)3d\ ^3F_2$	-5.786		[32, 34]

Tabela 4.14: Transições de Ar III.
Continuação.

Int.	λ Observada.(Å)	Transição	log(gf)	Observações	Ref
2	2526.920	$(^2P)4d\ ^3D_3 - (^2P)4p\ ^1D_2$	-1.392	N	[37]
5	2533.900	$(^2D)4p\ ^3F_2 - (^2P)3d\ ^3F_2$	-1.982		[32, 34]
1	2538.300	$(^2D)4p\ ^1D_2 - (^2D)4s\ ^3D_3$	-2.047	Difusa,N	[37]
5	2558.250	$(^2P)4d\ ^3P_1 - (^2P)4p\ ^3P_0$	-0.464	Superposta,N	[37]
8	2563.250	$(^2D)4p\ ^3D_3 - (^2P)3d\ ^3F_4$	-1.667		[32, 34]
8	2566.390	$(^2P)4d\ ^3P_2 - (^2P)4p\ ^3P_1$	-0.330	N	[37]
5	2576.390	$(^2P)4d\ ^3P_0 - (^2P)4p\ ^3P_1$	-0.615	N	[37]
6	2580.160	$(^2D)4p\ ^3D_3 - (^2P)3d\ ^3F_3$	-1.610		[32, 34]
5	2583.380	$(^2P)4p\ ^3P_2 - (^2D)3d\ ^3S_1$	-1.536		[32, 34]
8	2584.880	$(^2P)4d\ ^3P_2 - (^2P)4p\ ^3P_2$	0.032	N	[37]
7	2591.500	$(^2P)4d\ ^3P_1 - (^2P)4p\ ^3P_2$	-0.404	N	[37]
4	2594.400	$(^2D)4p\ ^3F_2 - (^4S)3d\ ^3D_2$			[32, 34]
1	2596.630	$(^2D)4p\ ^3D_3 - (^2P)3d\ ^3F_2$	-2.395	N	[37]
3	2602.110	$(^2P)4p\ ^3P_1 - (^2D)3d\ ^3S_1$	-2.025		[32, 34]
5	2613.420	$(^2D)4p\ ^3D_1 - (^2P)3d\ ^3F_2$	-4.022		[32, 34]
6	2613.940	$(^2D)4p\ ^3D_2 - (^2P)3d\ ^3F_2$	-1.424		[32, 34]
1	2617.280	$(^2P)4p\ ^3P_0 - (^2D)3d\ ^3S_1$	-2.630		[32, 34]
9	2631.860	$(^2D)4p\ ^3D_1 - (^4S)3d\ ^3D_1$			[32, 34]
8	2632.380	$(^2D)4p\ ^3D_2 - (^4S)3d\ ^3D_1$			[32, 34]
7	2645.470	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^4S)3d\ ^3D_3$			[32, 34]
8	2653.730	$(^2D)4d\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3P_2$	-0.495		[32, 34]
10	2654.560	$(^2D)4d\ ^3D_3 - (^2D)4p\ ^3P_2$	0.288		[32, 34]
3	2656.150	$(^2D)4d\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^3P_2$	1.804		[32, 34]
7	2660.200	$(^2D)4p\ ^3D_3 - (^4S)3d\ ^3D_2$			[32, 34]
10	2673.980	$(^2D)4d\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3P_1$	0.049		[32, 34]
8	2676.430	$(^2D)4d\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^3P_1$	-0.474		[32, 34]
7	2677.830	$(^2D)4p\ ^3D_1 - (^4S)3d\ ^3D_2$			[32, 34]
9	2678.360	$(^2D)4p\ ^3D_2 - (^4S)3d\ ^3D_2$			[32, 34]
7	2685.600	$(^2D)4d\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^3P_0$	-0.308		[32, 34]
4	2692.750	$(^2P)4p\ ^1D_2 - (^2P)4s\ ^3P_2$	-1.099	Superposta,N	[37]
1	2694.320	$(^2P)4d\ ^3F_2 - (^2P)4p\ ^1D_2$	-2.904	Difusa,N	[37]
5	2701.080	$(^2D)4p\ ^3D_1 - (^2P)3d\ ^3P_0$	-2.157	N	[37]
9	2724.810	$(^2D)4p\ ^3D_3 - (^4S)3d\ ^3D_3$			[32, 34]
5	2728.560	$(^2D)4p\ ^3D_1 - (^2P)3d\ ^3P_1$	-2.104	N	[37]
8	2743.880	$(^2D)4p\ ^3D_2 - (^4S)3d\ ^3D_3$			[32, 34]

Tabela 4.15: Transições de Ar III.
Continuação.

Int.	λ Observada.(Å)	Transição	log(gf)	Observações	Ref
10	2753.940	$(^2D)4p\ ^1D_2 - (^2D)4s\ ^1D_2$	0.327	Superposta,N	[37]
8	2794.980	$(^2D)4p\ ^3D_2 - (^2P)3d\ ^3P_2$	-2.295	Assimétrica,N	[37]
10	2796.680	$(^2D)4p\ ^1D_2 - (^2P)3d\ ^1F_3$	-0.412	N	[37]
7	2807.610	$(^2D)4d\ ^3P_1 - (^2D)4p\ ^1D_2$	-1.870	N	[37]
6	2840.150	$(^2P)4p\ ^1S_0 - (^2D)3d\ ^1P_1$	-1.416	N	[37]
9	2843.000	$(^2D)4p\ ^3P_0 - (^2D)4s\ ^3D_1$	-0.367		[32, 34]
9	2853.330	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^2D)4s\ ^3D_1$	-0.492		[32, 34]
10	2855.350	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^2D)4s\ ^3D_2$	-0.019		[32, 34]
7	2876.760	$(^2D)4p\ ^3P_2 - (^2D)4s\ ^3D_1$	-1.803		[32, 34]
10	2878.800	$(^2D)4p\ ^3P_2 - (^2D)4s\ ^3D_2$	-0.510		[32, 34]
3	2881.600	$(^2D)4d\ ^1P_1 - (^2D)4p\ ^1D_2$	-0.461	Difusa,N	[37]
10	2884.250	$(^2D)4p\ ^3P_2 - (^2D)4s\ ^3D_3$	0.255		[32, 34]
2	2927.750	$(^2P)4p\ ^1D_2 - (^2P)3d\ ^3D_3$	-1.824	Difusa,N	[37]
8	2928.820	$(^2P)4p\ ^1P_1 - (^2P)4s\ ^3P_0$	-0.858	N	[37]
12	3002.670	$(^2P)4p\ ^1D_2 - (^2P)4s\ ^1P_1$	0.197	Larga,N	[37]
11	3010.000	$(^2P)4p\ ^3P_2 - (^2P)3d\ ^3D_3$	-0.688		[32, 34]
4	3027.100	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2P)4s\ ^3P_2$	-0.834		[32, 34]
9	3054.800	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2P)4s\ ^3P_1$	-0.053		[32, 34]
7	3064.740	$(^2P)4p\ ^3D_1 - (^2P)4s\ ^3P_1$	-0.619		[32, 34]
8	3078.140	$(^2P)4p\ ^3D_1 - (^2P)4s\ ^3P_0$	-0.424		[32, 34]
7	3110.320	$(^2P)4p\ ^3P_1 - (^2P)3d\ ^3D_2$	-0.787		[32, 34]
8	3127.900	$(^2P)4p\ ^3S_1 - (^2P)4s\ ^3P_2$	-0.606		[32, 34]
5	3171.690	$(^2P)4p\ ^3S_1 - (^2P)4s\ ^3P_0$	-1.711		[32, 34]
1	3223.390	$(^2D)4d\ ^1F_3 - (^2P)4p\ ^1D_2$	-0.958	N	[37]
9	3251.790	$(^2P)4p\ ^1P_1 - (^2P)4s\ ^1P_1$	-0.285	N	[37]
9	3263.880	$(^2D)4p\ ^1F_3 - (^2D)4s\ ^3D_2$	-2.795	N	[37]
25	3285.850	$(^4S)4p\ ^5P_3 - (^4S)4s\ ^5S_2$	0.424		[32]
5	3290.620	$(^2D)5s\ ^3D_2 - (^2P)4p\ ^1P_1$	-2.124	N	[37]
20	3301.880	$(^4S)4p\ ^5P_2 - (^4S)4s\ ^5S_2$	0.275		[32, 34, 22]
12	3311.250	$(^4S)4p\ ^5P_1 - (^4S)4s\ ^5S_2$	0.052		[32, 34, 22]
9	3323.550	$(^2P)4p\ ^3D_3 - (^2P)3d\ ^3D_3$	-0.919		[32, 34]
6	3327.300	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2P)3d\ ^3D_3$	-2.121		[32, 34]
2	3331.140	$(^2P)4p\ ^1D_2 - (^2D)3d\ ^3P_1$	-3.650	N	[37]
13	3336.160	$(^2D)4p\ ^3F_4 - (^2D)4s\ ^3D_3$	0.531		[32, 34, 22]
12	3344.770	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^2D)4s\ ^3D_2$	0.414		[32, 34, 22]

Tabela 4.16: Transições de Ar III.

Continuação.

Int.	λ Observada.(Å)	Transição	log(gf)	Observações	Ref
9	3352.140	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^2D)4s\ ^3D_3$	-2.804		[32, 34]
12	3358.540	$(^2D)4p\ ^3F_2 - (^2D)4s\ ^3D_1$	0.258		[32, 34, 22]
9	3361.320	$(^2D)4p\ ^3F_2 - (^2D)4s\ ^3D_2$	-1.298		[32, 34]
10	3391.850	$(^2P)4p\ ^3P_2 - (^2D)3d\ ^3P_2$	-0.166		[32, 34]
18	3417.480	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2P)3d\ ^3D_2$	-1.620		[32, 34]
9	3424.240	$(^2P)4p\ ^3P_1 - (^2D)3d\ ^3P_2$	-1.145		[32, 34]
6	3429.970	$(^2P)4p\ ^3D_1 - (^2P)3d\ ^3D_2$	-2.012		[32, 34]
6	3436.920	$(^2P)4p\ ^3D_1 - (^2P)4s\ ^1P_1$	-1.570	N	[37]
9	3438.020	$(^2P)4p\ ^3P_2 - (^2D)3d\ ^3P_1$	0.987		[32, 34]
8	3472.560	$(^2D)4p\ ^3D_3 - (^2D)4s\ ^3D_2$	-2.033		[32, 34]
12	3480.530	$(^2D)4p\ ^3D_3 - (^2D)4s\ ^3D_3$	0.362		[32, 34]
2	3494.270	$(^4S)4d\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^1P_1$	-1.604	N	[37]
9	3498.290	$(^2P)4p\ ^3P_0 - (^2D)3d\ ^3P_1$	-1.158		[32, 34]
10	3499.670	$(^2D)4p\ ^3D_1 - (^2D)4s\ ^3D_1$	-0.258		[32, 34]
9	3500.560	$(^2D)4p\ ^3D_2 - (^2D)4s\ ^3D_1$	-1.611		[32, 34]
9	3502.700	$(^2D)4p\ ^3D_1 - (^2D)4s\ ^3D_2$	-0.747		[32, 34]
10	3503.610	$(^2D)4p\ ^3D_2 - (^2D)4s\ ^3D_2$	0.143		[32, 34]
10	3509.240	$(^4S)4p\ ^3P_0 - (^4S)4s\ ^3S_1$	-0.459		[32, 34, 22]
11	3511.140	$(^4S)4p\ ^3P_2 - (^4S)4s\ ^3S_1$	0.238		[32, 34, 22]
11	3511.680	$(^2D)4p\ ^3D_2 - (^2D)4s\ ^3D_3$	-0.626		[32, 34]
11	3514.250	$(^4S)4p\ ^3P_1 - (^4S)4s\ ^3S_1$	0.016		[32, 34, 22]
3	3539.220	$(^2D)4d\ ^3P_1 - (^2P)4p\ ^3P_2$	-2.171	N	[37]
12	3637.880	$(^2D)4p\ ^1F_3 - (^2D)4s\ ^1D_2$	0.389	Larga,N	[37]
7	3670.270	$(^2P)4p\ ^1P_1 - (^2D)3d\ ^3P_0$	-1.215	N	[37]
6	3683.430	$(^4S)4d\ ^3D_3 - (^2D)4p\ ^3D_2$	-1.600	N	[37]
5	3685.600	$(^4S)4d\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^3D_2$	-1.532	N	[37]
6	3686.600	$(^4S)4d\ ^3D_1 - (^2D)4p\ ^3D_1$	-1.240	N	[37]
7	3688.230	$(^4S)4d\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3D_2$	-0.972	N	[37]
4	3689.250	$(^4S)4d\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3D_1$	-1.656	N	[37]
9	3695.990	$(^2D)4p\ ^1P_1 - (^2D)4s\ ^3D_2$	-1.198	N	[37]
10	3712.760	$(^2D)4p\ ^1F_3 - (^2P)3d\ ^1F_3$	-1.084	Assimetrica,N	[37]
8	3716.550	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^2D)3d\ ^3S_1$	-1.019	N	[37]
5	3723.250	$(^4S)4d\ ^3D_2 - (^2D)4p\ ^3D_3$	-1.506	N	[37]
8	3738.670	$(^2D)4p\ ^3F_3 - (^2D)4s\ ^1D_2$	-2.577	N	[37]
9	3756.380	$(^2D)4p\ ^3P_2 - (^2D)3d\ ^3S_1$	-0.749	N	[37]

Tabela 4.17: Transições de Ar III.
Continuação.

Int.	λ Observada.(Å)	Transição	log(gf)	Observações	Ref
9	3858.310	$(^2P)4p\ ^3D_2 - (^2D)3d\ ^3P_1$	-0.258	N	[32, 34]
4	3866.960	$(^2D)4p\ ^1D_2 - (^2P)3d\ ^3D_3$	-2.254		[37]
9	3874.210	$(^2P)4p\ ^3D_1 - (^2D)3d\ ^3P_1$	-0.690		[32, 34]
9	3907.860	$(^2P)4p\ ^3D_1 - (^2D)3d\ ^3P_0$	-0.635		[32, 34]
8	3937.080	$(^2D)4p\ ^3D_1 - (^2D)4s\ ^1D_2$	-0.636	N	[37]
8	3960.520	$(^2P)4p\ ^3S_1 - (^2D)3d\ ^3P_2$	-0.383		[32, 34]
8	3995.590	$(^2P)4p\ ^1D_2 - (^2D)3d\ ^1D_2$	-1.203		[37]
8	4023.600	$(^2P)4p\ ^3S_1 - (^2D)3d\ ^3P_1$	-0.642		[32, 34]
11	4059.850	$(^2P)4p\ ^3S_1 - (^2D)3d\ ^3P_0$	-1.068	Superposta,N	[32, 34]
7	4127.250	$(^2D)4p\ ^3P_0 - (^2P)4s\ ^3P_1$	-1.278		[32, 34]
8	4146.640	$(^2D)4p\ ^3P_2 - (^2P)4s\ ^3P_2$	-0.601		[32, 34]
7	4149.070	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^2P)4s\ ^3P_1$	-1.316		[32, 34]
6	4173.660	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^2P)4s\ ^3P_0$	-1.226	Larga,N	[32, 34]
9	4182.980	$(^2D)4p\ ^1P_1 - (^2D)4s\ ^1D_2$	-0.204		[37]
7	4449.200	$(^2P)4p\ ^1P_1 - (^2D)3d\ ^1D_2$	-0.828		[37]
2	4548.560	$(^4S)4p\ ^3P_2 - (^4S)3d\ ^3D_1$		N	[37]
8	4565.210	$(^2P)4p\ ^1P_1 - (^2D)3d\ ^1P_1$	-0.611	N	[37]
5	4687.620	$(^4S)4p\ ^3P_2 - (^4S)3d\ ^3D_2$		N	[37]
7	4731.390	$(^2D)4p\ ^3P_2 - (^2P)3d\ ^3D_3$	-0.851	N	[37]
4	4772.170	$(^4S)5s\ ^3S_1 - (^2D)4p\ ^3P_1$	-1.630	N	[37]
2	4801.370	$(^4S)5s\ ^3S_1 - (^2D)4p\ ^3P_0$	-2.131	N	[37]
11	4847.850	$(^2D)4p\ ^3P_1 - (^2P)3d\ ^3D_2$	-1.443	N	[37]
6	4891.980	$(^4S)4p\ ^3P_2 - (^4S)3d\ ^3D_3$		N	[37]
2	4938.670	$(^2P)4p\ ^3D_1 - (^2D)3d\ ^1P_1$	-1.998	Superposta,N	[37]
10	4951.340	$(^2D)4p\ ^3P_0 - (^2P)3d\ ^3D_1$	-1.841		[37]
10	4992.620	$(^2P)4p\ ^1D_2 - (^2D)3d\ ^1F_3$	-0.367		[37]
1	5743.150	$(^2D)4p\ ^3P_0 - (^2D)3d\ ^3P_1$	-1.621		[37]

Tabela 4.18: Transições de Ar III.

Continuação.

N=Nova transição

T=Triple classificação

D=Dupla classificação

Capítulo 5

Conclusões gerais e perspectivas futuras

5.1 Conclusões

Neste trabalho reúne-se os esforços realizados tanto nos trabalhos de laboratório, como também nas diversas análises. Por parte do trabalho de laboratório, foram realizadas mudanças tanto no espectrografo como também no tubo de descarga de theta-pinch. As observações baseadas sobre a evolução dos espectrogramas obtidas em estudos teóricos sobre as condições mínimas de energia para se obter o "breakdown" induzido e eficiência de transferência de energia culminam nas modificações do sistema de vácuo do espectrógrafo e as características elétricas do theta-pinch. Resultados destes esforços podem ser considerados motivadores, uma vez que aumentamos a eficiência de transferência de energia entre o banco de capacitores e theta-pinch em cerca de quatro vezes. Os resultados são detectados através dos oscilogramas de corrente de descarga do banco de capacitores e dos espectrogramas obtidas.

Considera-se também de grande importancia todos os passos a seguir, para a obtenção dos espectrogramas, desde um bom vácuo até o revelado do espectrograma.

Na parte das análises, foi feita uma revisão substancial do íon argônio duas vezes ionizado. Das 285 transições já conhecidas e publicadas, neste trabalho se confirmaram 247, as 38 transições que não foram observadas neste trabalho se deve que na região de comprimento de onda de 2166 até 2291 Å, nossos espectros de linha obtidos no laboratório não são de boa qualidade.

Em compensação, neste trabalho se obtiveram 199 novas transições, as quais também são classificadas, fazendo um total de 447 transições entre conhecidas e observadas pela primeira vez. Para chegar a estes resultados, tivemos que fazer uma série de revisões usando a teoria de estrutura atômica, os programas teóricos de Cowan e os dados fornecidos pelo (CfOp).

5.2 Perspectivas futuras

Os esforços realizados na análise revisado do íon argônio duas vezes ionizado, tem por finalidade preparar toda a ferramenta necessária para a determinação dos níveis de energia das configurações $3s^23p^35p$ e $3s^23p^35d$, baseados sobre o conhecimento das configurações $3s^23p^33d$, $3s^23p^33d$ e $3s^23p^34p$.

Pela parte experimental se espera produzir brevemente espectros de metais, a partir da utilização do theta-pinch, mediante um sistema de aquecimento vai-se produzir vapores de metais, para ser usados nesta máquina. Um trabalho específico tem-se já pensado, é o estudo sobre RbVI, RbVII e RbVIII.

Acreditamos que estas perspectivas se tornarão realidade.

5.3 Trabalhos publicados

- " The Atomic Spectroscopy in Brazil and Argentina "
A.G. Trigueiros, G.H. Cavalcanti, F.R.T. Luna and A.J. Mania
J.G.R. Almandos, F. Bredice, M. Gallardo and M. Raineri
25th EGAS (European Group for Atomic Spectroscopy)
Conference-Apresentação oral 13-18 Julho (1993)
- Lab. Spectro.Atom-CEAN França.
- " New Technique for ionic classification using a crowbar switch "
G.H. Cavalcanti, R.Y. Honda, F.R.T. Luna and A.G. Trigueiros
Rev. Bras. de Fis. Apl. e Inst. 8, 1 Março 1993.
- " Energy transfer efficiency measurement in a theta-pinch "
G.H. Cavalcanti, F.R.T. Luna and A.G. Trigueiros
Proceedings do 2º Enc. Bras. de Física dos Plasmas-FOURTH BRAZILIAN PLASMA ASTROPHYSICS WORKSHOP, 27-29 de OUT (1993).

- “ Ionic classification in a theta-pinch spectroscopy light source ”
G.H. Cavalcanti, F.R.T. Luna and A.G. Trigueiros
Proceedings do 2º Enc. Bras. de Física dos Plasmas-FOURTH BRAZILIAN PLASMA ASTROPHYSICS WORKSHOP, 27-29 de OUT (1993).
- “ The UNICAMP theta-pinch for spectroscopic study or plasma radiations ”
A.G. Trigueiros, G.H. Cavalcanti, F.R.T. Luna and A.J. Mania
Proceedings do 2º Enc. Bras. de Física dos Plasmas-FOURTH BRAZILIAN PLASMA ASTROPHYSICS WORKSHOP, 27-29 de OUT (1993).

Bibliografia

- [1] T. Puerta and B.A. Huber., J. Phys. B: At. Mol. Phys vol **18**, 4445-4453 (1985)
- [2] Werner L. O., Bergmark T., Siegbahn K., Phys. Scr. vol **8**, 149 - 58, (1973)
- [3] McGuire E. Phys. Rev. A11,1880-1888 (1975)
- [4] Weissbluth Mitchel., " Atoms and Molecules ", Academic Press (London) LTD, New York (1978)
- [5] Edmonds. A. R. " Angular Momentum in Quantum Mechanics " Princeton Univ. Press. Princeton. New Jersey.(1957)
- [6] Robert D. Cowan., "The Theory of Atomic Structure and Spectra"University of California Press, Berkeley and Los Angeles, California (1981)
- [7] Slater J. C., "Quantum Theory of Atomic Structure ",**I, II** , McGRAN HILL BOOK COMPANY, New York, Toronto, London (1960)
- [8] Sobelman I. I. " Theory of Atomic Spectra "Pergamon. Oxford.(1972)
- [9] Rotemberg M., Bivins. R., Metropolis. N., and Woten Jr., K. " The 3j and 6j Symbols " MIT Press. Cambridge, Massachusetts. (1959)
- [10] Woodgate. G. K., " Elementary Atomic Structure "Published in the United States by Oxford University Press. New York. (1975)
- [11] Racah Giulio, Phys Rev, vol **61**, 537 (1942)
- [12] Jupen C., Litxeén U., Trigueiros A., Phys Scr, 29 317-318 (1984)

- [13] Sobelman I. I. "Atomic Spectra and Radiative Transitions" Academy of Sciences of the USSR, P.N. Levedev Physical Institute, (1979)
- [14] Pagan B. C. J., "Estudo Espectroscopico de Gases Nobres Medianamente Ionizados", Tese de Doutor (1991)
- [15] B.Edlén, Rep.Prog.Phys., vol **26**, 181 (1963)
- [16] Sumner P. D., "Diffraction Grating Spectrographs", (1969), Berkeley, California.
- [17] K.T.Compton and J.C. Boyce., Rev Sci.Inst., vol **5**, 218 (1934)
- [18] G.H. Cavalcanti, F.R.T. Luna and A.G. Trigueiros. "Energy transfer efficiency measurement in a theta-pinch" Proceedings do 2º Enc. Bras. de Física dos Plasmas-FOURTH BRAZILIAN PLASMA ASTROPHYSICS WORKSHOP, 27-29 de OUT (1993).
- [19] Silberg P. A., Journal of Applied Physics vol **37**, 5, (1966)
- [20] Cavalcanti G. H., Honda R. Y., Luna F.R.T., and Trigueiros A.G., Rev. Bras. de Fís. Apl. e Inst. vol **3**, 1 Março, (1993)
- [21] Instruction Manual-Tv Monitor C1846-03.
- [22] von Keussler V., Zeit. f. Physck, vol **84**, 42 (1933)
- [23] Boyce J. C.,Phys. Rev. vol **48**, 396 (1935)
- [24] Moore C.E., Atomic Energy Levels, Natl. Bur. Std.(U.S.)Circ. 467 (U.S. Govt. Printing Office, Washington, D.C. 1949)
- [25] Kelly, J. Phys. Chem. Ref. Data, vol **16**, Suppl. 1, 397-398 (1987)
- [26] Willy Persson and Jorgen E. Hansen, J. Phys B: At. Mol. Phys. vol **20**, 693-706 (1987)
- [27] White H. E., " Introduction to Atomic Spectra ", McGRAN HILL BOOK COMPANY, Ney York, London (1934)
- [28] Boyce J. C.,Phys. Rev. vol **49**, 351 (1936)
- [29] Edlén B., Phys. Rev. vol **62**, 432 (1942)

- [30] Agentoft M., Andersen T., Hansen J. E., Persson W., and Pettersson S-G., Phys. Scr. vol **29**, 57-60, (1984)
- [31] Dyll K.G. and Larkins F.P., J. Phys B: At. Mol. Phys. vol **15**, 2793-2806 (1982)
- [32] de Bruin T. L., Proc. Amst. Acad., vol **36**, 724 (1933)
- [33] de Bruin T. L., Zeeman Verhandelingen, 413 (1935)
- [34] de Bruin T. L., Proc. Amst. Acad., vol **40**, 4, 343 (1937)
- [35] Fawcett B. C.; Precock N. J. and Cowan R. D., J. Phys B: At. Mol. Phys vol **1**, 295-306 (1968)
- [36] Tabela de Dados de Ar III, Laboratório de Física Atômica Unicamp, Brasil (1992)
- [37] Tabela de Dados de Ar III, La Plata Argentina (1992)