

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Forças de Oscilador Ponderadas e Tempos de Vida para os Espectros de Si II, Si VIII e Si IX

INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN" – IFGW

Orientador: Prof. Dr. Antonio Gomes Trigueiros

Autora : Renata Villela Orloski

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À REDAÇÃO FINAL DA TESE DE MESTRADO DEFENDIDA POR RENATA VILLELA ORLOSKI E APROVADA PELA COMISSÃO JULGADORA.

21/09/00

Antonio Gomes Trigueiros

Comissão Julgadora da Tese de Mestrado:

Prof. Dr. Antonio Gomes Trigueiros – IFGW / UNICAMP

Prof. Dr. Maurício Antonio Algatti – DF/ UNESP / Guaratinguetá – SP

Prof. Dr. Roberto Antonio Clemente – IFGW / UNICAMP

Prof. Dr. Carlos Alberto Ferrari (Suplente) – IFGW / UNICAMP

Prof. Dr. César José Bonjuani Pagan (Suplente) – FEE / UNICAMP

Tese submetida ao Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas
como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

Campinas – São Paulo – Brasil

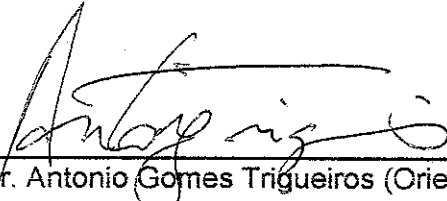
15 - setembro - 2000



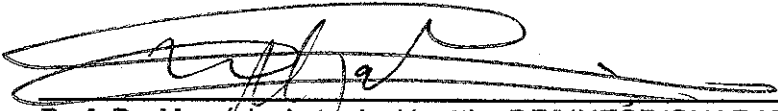
 UNICAMP		Instituto de Física Gleb Wataghin	C.P. 6165 CEP: 13083-970 Tel. (19) 788-5305 e-mail: secpes@ifi.unicamp.br
--	---	--	---

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE RENATA VILLELA ORLOSKI – RA 940937 APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 15/09/2000.

COMISSÃO JULGADORA:



Prof. Dr. Antonio Gomes Trigueiros (Orientador da Candidata) –
IFGW/UNICAMP



Prof. Dr. Mauricio Antonio Algatti – DF/UNESP/GUARATINGUETÁ-SP



Prof Dr. Roberto Antonio Clemente – IFGW/UNICAMP

Este trabalho foi desenvolvido no Laboratório de Física Atômica e Molecular do Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), com bolsa do CNPq e com apoio da Fapesp.

Aos meus pais, Lázaro e Ceima, que sempre estiveram presentes em todos os momentos incentivando-me e fazendo-me acreditar que todas as coisas são possíveis quando realmente as queremos. A minha irmã e cunhado, Susi e Paulo, pelo carinho e amizade que sempre demonstraram. Aos meus queridos sobrinhos, Thiago e Flávio que um dia entenderão os momentos de ausência de sua única tia. Por fim ao meu sempre amigo e companheiro, Adilson, pelo amor e cumplicidade demonstrados durante todos estes anos.

Embora esta seja uma simples tese de mestrado, muitas foram as pessoas envolvidas neste projeto. Há pessoas que aqui agradeço pelo direto envolvimento com a pesquisa realizada, mas não há como não lembrar as pessoas que indiretamente estiveram envolvidas proporcionando com seu carinho, amizade e dedicação a força necessária para que eu superasse todas as dúvidas, angústias e frustrações durante todos estes anos. A todos o meu eterno obrigado...

Agradeço ...

- Ao Prof. Dr. Antonio Gomes Trigueiros, pelo apoio, incentivo e amizade que sempre demonstrou durante estes anos de convivência.
- Aos professores Dr. Carlos Alberto Ferrari, Dr. Maurício Antonio Algatti e Dr. Roberto Antonio Clemente pelas valiosas sugestões nos seminários que deram forma a esta dissertação.
- Ao Prof. Dr. César José Bonjuani Pagan pela valiosa ajuda no entendimento do aplicativo computacional utilizado para o ajuste dos níveis de energia neste trabalho.
- A todos os professores e funcionários do Instituto de Física, que de alguma forma, contribuíram para a realização deste trabalho.
- Aos companheiros de laboratório Andres Callegari, Annette Siems, Fernando Luna, Ismael Costa, Newton Mansur e José Tomaselli (in memoriam) pela atenção e estímulos constantes.
- Ao Adilson pelos “softwares” criados especialmente para agilizar e tornar mais confiáveis tarefas específicas deste trabalho.

- As amigas Érika, Lúcia, Romarly e Scheila que sempre estiveram presentes demonstrando seu carinho e interesse, com quem sempre pude contar em todos os momentos.
- Ao pessoal da USP Andréa, Denise, Daichi, Helma, Keiko, Leila, Patrícia, Tânia e Zoezer pela amizade, carinho e pelos felizes momentos que compartilhamos durante os dois anos que passamos juntos.
- Aos demais colegas da graduação e da pós-graduação, a todos os amigos, aqui não citados nominalmente, que incentivaram e apoiaram a realização deste trabalho.
- Ao Sílvio por ter incentivado minha volta aos estudos e pelo apoio financeiro que foi tão importante para que eu concretizasse a graduação com segurança e tranquilidade.
- À FAPESP e ao CNPq, pelo suporte financeiro desde a graduação até este momento.
- Aos velhos amigos Carlos Alberto, Cristina, Débora, Rosemary e Wiston que não tenho a alegria de conviver diariamente, mas que sempre estiveram presentes nos momentos em que precisei de apoio e amizade.

- Aos amigos, que sempre considerei minha segunda família, Baptista, Maria, Selma e Walter. Fernando, Marta e André. Em especial ao Éder e à Ida, pessoas excepcionais que muito admiro e tenho a felicidade de chamar de amigos.
- A toda família Delanhese por ter me recebido com carinho, amizade e paciência. Entendo minha ausência em tantos momentos importantes.
- A toda a minha família, minha irmã, cunhado, sobrinhos, tios, primos e em especial a minha querida avó Sylvia pela compreensão incentivo e amor que sempre foi tão importante para que eu realizasse meu trabalho de forma tranqüila, serena e equilibrada. Gostaria ainda de lembrar pessoas especiais que estiveram comigo no início deste projeto, mas que infelizmente hoje não estão presentes para partilharmos a alegria desta pequena conquista, meus avós José, Elvira e Luiz, meus tios Carlos e Benedito e meu primo Marco.
- Por fim, agradeço mais uma vez aos meus pais, que me deram o dom da vida, me ensinaram a lutar, a buscar conquistas; que abriram as portas do futuro, iluminando meu caminho com a luz mais brilhante: o estudo. A vocês que revestiram minha existência de amor, carinho e dedicação; o meu eterno obrigado.

A todos vocês muito obrigada!

Resumo

O objetivo principal deste trabalho é apresentar as forças de oscilador ponderadas (gf) e os tempos de vida para todas as transições de dipolo elétrico conhecidas experimentalmente para os íons de Si II, Si VIII e Si IX. A interpretação do cálculo destas duas grandezas é de importância fundamental por exemplo na astrofísica, pois o silício nos seus vários graus de ionização é um dos elementos mais comuns observados em espectros de absorção e emissão de fontes astrofísicas.

Neste trabalho é feito para cada um dos íons uma compilação de todos os valores de energia e dos comprimentos de onda de todas as transições conhecidas experimentalmente, mediante estes valores calculamos os tempos de vida e as forças de oscilador ponderadas. Estes cálculos são realizados em uma aproximação relativística multiconfiguracional Hartree-Fock (HFR). Os parâmetros eletrostáticos foram otimizados por um procedimento de mínimos quadrados a fim de produzir um melhor ajuste com valores experimentais dos níveis energéticos. Este método produz valores de gf que estão em melhor acordo com as intensidades observadas bem como tempos de vida mais próximos dos experimentais.

Neste trabalho são apresentadas todas as linhas espectrais de dipolo elétrico conhecidas experimentalmente para cada um dos íons e que se resumem:

- Silício uma vez ionizado, Si II, onde foram observados 146 níveis energéticos e 405 transições de dipolo elétrico na faixa de 700-9500Å;
- Silício sete vezes ionizado, Si VIII, onde foram observados 73 níveis energéticos e 96 transições de dipolo elétrico na faixa de 50-1900Å e
- Silício oito vezes ionizado, Si IX, onde foram observados 56 níveis energéticos e 103 transições de dipolo elétrico na faixa de 45-450Å.

Abstract

The principal objective of this work is to present the weighed oscillator strengths (gf) and the lifetimes for all the electric dipole transitions experimentally known for the ions of Si II, Si VIII and Si IX. The interpretation of the calculation of these two values is of fundamental importance in the astrophysics, because the silicon in your several ionization degrees is one of the most common elements observed in absorption and emission spectra of astrophysical sources.

In this work it is done for each one of the ions a compilation of all the values of energy and of wavelengths for all the transitions experimentally known, with these values we calculated the lifetimes and the weighed oscillator strengths. These calculations are accomplished in a multiconfiguration Hartree-Fock relativistic (HFR) approach. The electrostatic parameters were optimized by a least-square procedure in order to produce a better adjustment with experimental values of energy levels. This method produces values of gf that are in better agreement with the observed intensities as well as lifetimes closer of the experimental ones.

In this work we presented all the spectral lines of electric dipole known experimentally for each one of the ions that are summarized:

- Silicon one time ionized, Si II, where 146 energy levels and 405 electric dipole transitions were observed in the range 700-9500 Å;
- Silicon seven times ionized, Si VIII, where 73 energy levels and 96 electric dipole transitions were observed in the range 50-1900 Å and
- Silicon eight times ionized, Si IX, where 56 energy levels and 103 electric dipole transitions were observed in the range 45-450 Å.

Sumário

1.Introdução.....	1
2 Teoria da Estrutura Atômica.....	7
2.1 Átomos com N-elétrons.....	8
2.2 Equação de Schrödinger.....	11
2.3 O Hamiltoniano para átomos com N-elétrons.....	12
2.4 O Modelo de Campo Central.....	16
2.5 Suposições da Aproximação de Hartree-Fock.....	19
2.5.1. Anti Simetria.....	20
2.5.2 Produtos de Spin-Orbitais.....	21
2.5.3 Ortonormalidade.....	23
2.5.4 Operadores de Momento Angular.....	24
2.6 Acoplamento de Momento Angular.....	25
2.6.1 Acoplamento LS.....	26
2.6.2 Acoplamento jj.....	29
2.6.3 Acoplamento em pares.....	31
2.6.3.1 Acoplamento jl ou jK.....	32
2.6.3.2 Acoplamento Ls ou LK.....	33
2.7 Transições Radiativas.....	34
2.8 Tempos de Vida.....	35
2.9 Forças de Oscilador.....	38
2.10 Como são medidas as Forças de Oscilador.....	40
2.11 Problemas nas Medidas das Forças de Oscilador.....	43
3 Cálculos Computacionais na Espectroscopia Atômica.....	45
3.1 Cálculo dos Níveis de Energia das Configurações.....	46
3.2 Cálculo dos Comprimentos de Onda.....	47

3.3 Cálculo das Funções de Onda.....	47
3.3.1 RCN.....	48
3.3.2RCN2.....	52
3.4 Cálculo das Probabilidades de Transição e Fatores Angulares.....	52
3.5 Ajuste dos Parâmetros.....	54
 4 Resultados para os Íons Si II, Si VIII e Si IX.....	59
4.1 Análise dos Íons.....	60
4.2 Si II – Silício uma vez ionizado.....	63
4.2.1 Dados e Resultados para o Si II.....	64
4.3 Si VIII – Silício sete vezes ionizado.....	99
4.3.1 Dados e Resultados para o Si VIII.....	100
4.4 Si IX – Silício oito vezes ionizado.....	114
4.4.1 Dados e Resultados para o Si IX.....	115
 5 Conclusões e Perspectivas Futuras.....	127
Referências.....	131
 6 Apêndice.....	137
6.1 A ₁ – Trabalho publicado.....	139
6.2 A ₂ – Trabalho aceito para publicação.....	147
6.3 A ₃ – Trabalho concluído.....	165

Lista de Tabelas

1 Configurações para o Si II.....	66
2 Parâmetros de Energia para a Paridade Ímpar do Si II.....	67
3 Parâmetros de Energia para a Paridade Par do Si II.....	72
4 Configurações para o Si VIII.....	101
5 Parâmetros de Energia para a Paridade Ímpar do Si VIII.....	102
6 Parâmetros de Energia para a Paridade Par do Si VIII.....	105
7 Integrais de Interação para a Paridade Ímpar do Si VIII.....	108
8 Integrais de Interação para a Paridade Par do Si VIII.....	110
9 Comparação dos Valores de gf para o Si VIII.....	112
10 Configurações para o Si IX.....	116
11 Parâmetros de Energia para a Paridade Ímpar do Si IX.....	117
12 Parâmetros de Energia para a Paridade Par do Si IX.....	119
13 Integrais de Interação para a Paridade Ímpar do Si IX.....	121
14 Integrais de Interação para a Paridade Par do Si IX.....	123
15 Comparação dos Valores de gf para o Si IX.....	125

Lista de Figuras

1 Representação Esquemática das Transições entre as Configurações do Si II.....	76
2 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s3p^2$ do Si II.....	77
3 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^24s$ do Si II.....	78
4 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^23d$ do Si II.....	79
5 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^25s$ do Si II.....	80
6 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^24d$ do Si II.....	81
7 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^26s$ do Si II.....	82
8 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^25d$ do Si II.....	83
9 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^25g$ do Si II.....	84
10 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^27s$ do Si II.....	85
11 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^26d$ do Si II.....	86
12 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^26g$ do Si II.....	87
13 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^28s$ do Si II.....	88
14 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^27d$ do Si II.....	89
15 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^27g$ do Si II.....	90
16 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^29s$ do Si II.....	91
17 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^28d$ do Si II.....	92
18 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^28g$ do Si II.....	93
19 Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^29g$ do Si II.....	94

20	Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^210g$ do Si II.....	95
21	Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s^211g$ do Si II.....	96
22	Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s3p4p$ do Si II.....	97
23	Representação das Transições possíveis com a Configuração $3s3p4f$ do Si II.....	98
24	Representação Esquemática das Transições entre as Configurações do Si VIII.....	113
25	Representação Esquemática das Transições entre as Configurações do Si IX.....	126

*É melhor tentar e falhar, que preocupar-se e
ver a vida passar.*

*É melhor tentar, ainda em vão, que sentar-se
fazendo nada até o final.*

*Eu prefiro na chuva caminhar, que em dias
tristes em casa me esconder, prefiro ser feliz
embora louco, que em conformidade viver...*

Martin Luther King

Capítulo 1

Introdução : - A Espectroscopia Atômica e Algumas de suas Aplicações

A espectroscopia atômica pode ser considerada uma importante ferramenta de trabalho e tem sido de grande interesse em várias áreas da física. Na física básica, a espectroscopia é importante no teste das teorias de estrutura atômica do espectro. Também tem sido de vital importância em vários processos observados em plasmas de laboratório, na determinação de impurezas presentes bem como em diagnósticos de temperaturas, densidades de elétrons, entre outros. Na física de lasers a espectroscopia auxilia na compreensão dos processos envolvidos na inversão de população dos lasers atômicos e iônicos [1]. Mas o melhor exemplo certamente é a astronomia; muito do que se conhece sobre as estrelas provém de medidas e análises de espectros óticos. A configuração das linhas espectrais observadas no espectro de

emissão é utilizada para identificar a composição de estrelas, a intensidade das linhas obtidas nos espectros de absorção é empregada na determinação da temperatura de superfícies estelares, o deslocamento Doppler das linha espectrais é utilizado para medir a velocidade das estrelas e o efeito Zeeman é o método de medida dos campos magnéticos produzidos pelas estrelas [2]. De fato na astrofísica o estudo dos objetos como o Sol, as estrelas e o espaço interestelar beneficiam-se do conhecimento de dados espectroscópicos, pois além dos dados atômicos básicos para determinações de abundância as necessidades da astrofísica também incluem um conhecimento sobre estrutura atômica e processos atômicos. Conhecimento da abundância de ingredientes químicos em uma estrela é uma valiosa contribuição para entender sua evolução, pois uma história verdadeira de uma determinada estrela pode ajudar a prever a existência e a abundância de várias espécies. A abundância de um elemento em uma atmosfera estelar pode ser determinada através do perfil de uma linha de absorção no espectro, contanto que a força de oscilador associada seja conhecida. Porém, muito poucos dados experimentais sobre forças de oscilador existem para comprimentos de onda abaixo de $2000\text{\AA}$ [3]. Então, a determinação da abundância de um elemento específico ou substância que deram origem às linhas observadas deve confiar em dados teoricamente calculados, ou seja, a determinação da abundância de um determinado elemento, a partir da observação das linhas emitidas, deve levar em conta as limitações impostas pela confiabilidade nos cálculos teóricos efetuados os quais possibilita tal determinação [3, 4].

Um elemento que tem provocado grande interesse e motivado amplas

investigações tanto experimental como teoricamente por muitos pesquisadores é o silício em seus vários graus de ionização, isto por que ele é um dos íons mais comuns observados em espectros de absorção e emissão de fontes astrofísicas, como meio interestelar, os quasares, as estrelas quentes e o sol. As forças de oscilador ponderadas para as transições dos íons de silício são utilizadas para inferir por exemplo, na abundância, temperatura e densidades dessas fontes astrofísicas, sendo que o gf é uma grandeza física que está relacionado com a intensidade da linha espectral e com a probabilidade de transição [5].

Este trabalho foi estimulado pelas aplicações descritas acima onde apresentamos as forças de oscilador ponderadas e os tempos de vida para:

- Silício uma vez ionizado, Si II, onde foram observadas 405 transições de dipolo elétrico na faixa de 700-9500Å e 146 níveis de energia foram medidos experimentalmente;
- Silício sete vezes ionizado, Si VIII, onde foram observadas 96 transições de dipolo elétrico na faixa de 50-1900Å e 73 níveis foram medidos experimentalmente e
- Silício oito vezes ionizado, Si IX, onde foram observadas 103 transições de dipolo elétrico na faixa de 45-450Å e 56 níveis foram medidos experimentalmente.

Estes resultados são importantes para satisfazer as necessidades por dados atômicos em silício ionizado, pois os espectros estelares de alta resolução recentemente observados produziram uma necessidade de alta qualidade em dados atômicos, porém hoje, só podem ser obtidos dados atômicos de maior confiabilidade através de experimentos orientados pelo cálculo teórico [4].

Embora as forças de oscilador possam ser medidas experimentalmente, a maneira mais usual de se obter estes valores é através de cálculos computacionais. O objetivo principal deste trabalho é através de métodos computacionais obter as forças de oscilador ponderadas e tempos de vida para os íons descritos acima.

Neste primeiro capítulo nos preocupamos em dar uma idéia ao leitor da área a que nossa pesquisa está submetida, colocando inclusive as aplicações mais importantes que conhecemos para este tema.

No segundo capítulo apresentamos de forma breve e sucinta o estudo da teoria quântica para átomos com N -elétrons, descrevendo resumidamente os métodos de aproximação envolvidos bem como chegaremos a definição das forças de oscilador ponderadas e tempos de vida.

No terceiro capítulo apresentamos uma breve explanação sobre os aplicativos computacionais utilizados em nosso laboratório para os cálculos necessários para se chegar as forças de oscilador e tempos de vida.

No quarto capítulo apresentamos os resultados encontrados neste trabalho para os ions de silicio uma vez, sete vezes e oito vezes ionizado, Si II, Si VIII e Si IX respectivamente.

No quinto e último capítulo apresentamos as conclusões e perspectivas futuras para os trabalhos desenvolvidos nesta tese. Esta dissertação é portanto constituída de cinco capítulos e um apêndice onde apresentamos cópias dos trabalhos: publicado (Si IX), aceito para publicação (Si VIII) e concluído (Si II). Sendo que este último em breve deve ser submetido para posterior publicação¹.

A revista escolhida para publicação de todos os trabalhos foi “Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer”.

¹ Este trabalho pode sofrer algumas modificações de acordo com a revisão final e ou exigência do editor científico.

Capítulo 2

Teoria da Estrutura Atômica

Neste capítulo apresentamos de forma sucinta os modelos teóricos utilizados na descrição dos átomos com N -elétrons lembrando que embora o átomo de hidrogênio que é um átomo monoelétrônico seja o sistema ligado mais simples na natureza, tem sua importância vital porque forneceu os fundamentos para o tratamento quântico dos átomos multieletrônicos. Para um tratamento satisfatório destes sistemas apresentamos o operador Hamiltoniano apropriado e discutiremos a relevância dos termos deste operador dependendo do número atômico do átomo que se quer tratar. Para resolver este Hamiltoniano apresentamos algumas aproximações que são feitas na prática, como o modelo de campo central e a aproximação de Hartree-Fock. Visto que estamos tratando de átomos com muitos elétrons descreveremos os diferentes tipos de acoplamento que são permitidos e quais suas

diferenças. Por fim discutiremos um pouco sobre as forças de oscilador, bem como o método mais usual de as determinar.

2.1 Átomos com N-elétrons

No estudo de átomos o caso mais simples é o átomo de elétron único, este é também o problema mais importante. Por exemplo, o átomo de hidrogênio tem uma importância histórica porque foi o primeiro sistema que Schrödinger tratou com sua teoria quântica. Existe muito mais na teoria de Schrödinger do átomo de elétron único do que a simples previsão dos autovalores porque ela prevê também as autofunções. Usando as autofunções poderemos obter informações sobre as seguintes propriedades do átomo: (a) as funções densidade de probabilidade que nos dão descrições detalhadas da estrutura do átomo e que não violam o princípio da incerteza; (b) os momentos angulares orbitais dos átomos; (c) o spin do elétron e outros efeitos relativísticos no átomo e (d) a rapidez com que o átomo transiciona de seus estados excitados para o estado fundamental que é uma grandeza mensurável [2].

Acima e além de sua importância histórica e intrínseca, a teoria de Schrödinger do átomo de elétron único é de grande importância prática porque fornece os fundamentos para o tratamento quântico dos átomos de muitos elétrons, bem como para as moléculas e núcleos. O átomo de elétron único é o sistema ligado

mais simples que existe na natureza, este sistema consiste em um único núcleo carregado positivamente e um elétron carregado negativamente, movendo-se sobre a influência da atração coulombiana mútua e ligados por atração. O simplificado modelo descrito anteriormente será o ponto de partida para estudarmos sistemas mais complicados representados por átomos com N -elétrons, que podem ir desde o hélio $Z=2$ até átomos pesados como o urânio $Z=92$, então precisamos descrever melhor este sistema.

Um átomo com N -elétrons de número atômico Z contém um núcleo de carga $+Ze$ envolto por Z elétrons, cada um com carga $-e$. Cada elétron move-se sobre a influência de uma interação coulombiana atrativa exercida pelo núcleo e de interações coulombianas repulsivas exercidas por todos os outros $(Z-1)$ elétrons, bem como de certas interações mais fracas envolvendo momentos angulares. O tratamento quântico deste sistema complicado é mais fácil do que se pode supor. Uma das razões para isto relaciona-se ao fato de que as várias interações envolvendo o elétron atômico têm diferentes intensidades, de modo que é possível considerá-las uma ou duas de cada vez, numa ordem de intensidade decrescente de energia, desenvolvendo-se uma descrição aproximada na qual somente as interações mais fortes são consideradas. A descrição torna-se cada vez mais exata ao levarmos em conta sucessivamente as interações mais fracas, com este procedimento podemos obter uma compreensão do comportamento dos átomos com N -elétrons.

O primeiro passo consiste em considerar somente as interações mais fortes sofridas pelos elétrons atômicos, na qual cada elétron é tratado como se estivesse movendo-se independentemente num potencial resultante esfericamente simétrico que

descreve a média de suas interações coulombianas com o núcleo e os demais elétrons. Nos próximos passos a descrição torna-se cada vez mais precisa levando-se sucessivamente em consideração as forças mais fracas sentidas pelos elétrons. As duas correções mais importantes são:

1. A interação coulombiana residual, uma interação elétrica que compensa o fato de que o potencial resultante $U(r_i)$ sobre cada elétron descreve somente o efeito médio das interações coulombianas entre esse elétron e todos os demais elétrons óticamente ativos².
2. A interação spin-órbita, uma interação magnética que acopla o momento angular de spin de cada elétron com seu próprio momento angular orbital.

Para a maioria dos átomos com valores pequenos ou intermediários de Z , entretanto, os efeitos da interação coulombiana residual são muito maiores do que os efeitos da interação de spin-órbita. Exceto para átomos com Z grande, a interação coulombiana residual é tratada em primeiro lugar, por ser mais importante, e a interação spin-órbita temporariamente ignorada como discutiremos mais à frente [2].

² Elétrons óticamente ativos são todos os elétrons da subcamada externa parcialmente cheia que podem participar em excitações óticas, de baixa energia, que acarretam a emissão no espectro ótico do átomo ou íon que se quer estudar [2].

2.2 Equação de Schrödinger

O problema principal restringe-se a encontrar os níveis de energia e correspondentes autofunções para o espectro discreto atômico (Iônico) em um determinado intervalo de energia. Matematicamente isto significa resolver a equação de Schrödinger:

$$H\Psi^k = E\Psi^k \quad (2.1)$$

obtendo assim as autofunções Ψ^k e a energia E^k do átomo (Íon) para todo o estado estacionário k de interesse. Consequentemente isto habilita-nos a calcular as probabilidades de transição de dipolos elétricos permitidas e os seus comprimentos de onda [3].

Porém, a função de onda é uma função de $4N$ variáveis (três coordenadas relacionadas ao espaço e uma coordenada relacionada ao spin para cada elétron), e o problema quântico é extremamente complexo. Para $N > 1$, não podemos calcular analiticamente as soluções exatas e aproximações de um tipo ou outro são requeridas [6]. A aproximação habitual é assumir alguma forma da função de onda que contém vários parâmetros ajustáveis, e variar os valores destes parâmetros para obter a melhor função possível, que deve ser julgada por algum critério apropriado, onde

deve-se levar em consideração o melhor ajuste dos níveis de energia entre outras coisas³ [7].

2.3 O Hamiltoniano para Átomos com N-elétrons

O tratamento teórico de um átomo que contém N elétrons ($N > 1$, mas não necessariamente igual ao número atômico Z do núcleo) requer o conhecimento do operador Hamiltoniano satisfatório em primeiro lugar. Um operador apropriado pode ser obtido somando o operador de um elétron sobre todos os N elétrons, e somando um termo para as interações eletrostáticas coulombianas entre os elétrons [6]. Então o Hamiltoniano aproximado para uma coleção de N pontos de massa idêntica (elétrons), cada um caracterizado por uma massa $m_0 > 0$, um spin S ($s=1/2$), e uma carga $e < 0$, movendo-se num campo coulombiano de uma carga fixa ($-Ze$) (o núcleo), é:

$$H = H_0 + H_1 + H_2 \quad (2.2)$$

onde

³ O recurso que dispomos no laboratório, que é um recurso computacional, utiliza o método de Hartree-Fock que baseado em uma única função derivada do determinante de Slater, constituído de funções spin-orbitais para um elétron, e no princípio variacional aplicado à equação de Schrödinger para N elétrons, resulta em um conjunto de equações integro-diferenciais não lineares acopladas para um elétron.

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_0} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) \quad (2.3)$$

$$H_1 = \sum_{j>i=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (2.4)$$

$$H_2 = \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i \quad (2.5)$$

Aqui o i -ésimo elétron tem vetor de posição $\mathbf{r}_i$ relativo ao núcleo (considerado fixo em um referencial inercial), momento linear $\mathbf{p}_i$, momento angular orbital $\mathbf{L}_i$, e o momento de spin $\mathbf{S}_i$. As notações $r_i = |\mathbf{r}_i|$ e $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ denotam, respectivamente, a distância do núcleo para o i -ésimo elétron e a distância mútua entre o i -ésimo e j -ésimo elétron. O primeiro termo no Hamiltoniano H_0 é a energia cinética adicionada da energia potencial coulombiana dos N elétrons que só interagem com o núcleo central; H_1 é a energia potencial coulombiana mútua entre os elétrons e H_2 é o termo de interação spin-órbita cuja forma está baseado na teoria de Pauli da interação de spin-órbita no átomo de hidrogênio [6].

O Hamiltoniano (2.2) é aproximado por isso não inclui condições que consideramos para: (a) o movimento do núcleo devido a sua massa finita; (b) movimentos relativísticos dos elétrons; (c) a interação magnética hiperfina (interação do momento magnético do núcleo com o campo magnético do núcleo produzido pelos elétrons) e (d) a interação magnética entre os spins dos elétrons. Os efeitos que produzem estes fenômenos podem ser tratados nos átomos como perturbações ; o

enfoque inicial está então em achar o autoestados de energia e as autofunções do Hamiltoniano (2.2) [6, 8].

Começamos nossa análise observando os efeitos relativos de H_1 e de H_2 que dependem do número atômico Z . Para átomos com Z pequeno ou intermediários, H_1 é dominante em relação a H_2 pois nestes casos as interações de spin-órbita são muito fracas frente à interação coulombiana residual e assim podem ser tratadas como perturbações. Para átomos com Z grande, a interação de spin-órbita é muito forte para ser tratada como perturbação. Isso complica a situação porque ambas as interações, coulombiana residual e spin-órbita, devem ser tratadas simultaneamente; mas para átomos de Z muito grande, a interação spin-órbita é dominante em relação à interação coulombiana residual e o tratamento é simplificado porque torna-se possível novamente um processo seqüencial onde em primeira análise tratamos a interação mais forte seguindo as demais como perturbações ou outros métodos aproximados [2].

Torna-se então útil reconhecermos dois casos limites, um para átomos com Z pequeno ou intermediário cujo Hamiltoniano é:

$$H_I = H_0 + H_1 \quad (2.6)$$

e outro para átomos com Z muito grande cujo Hamiltoniano é:

$$H_{II} = H_0 + H_2 \quad (2.7)$$

O caso mais freqüente em física atômica é o representado por H_I , onde os valores de Z são pequenos ou intermediários em átomos ou íons, e as interações de spin-órbita podem ser tratadas como perturbações ao sistema numa primeira aproximação.

O ponto de partida da maioria dos cálculos, de átomos com N -elétrons, é a aproximação de Hartree-Fock que é um método utilizado para obtenção aproximada das funções de onda total para sistemas com N -elétrons. Ele tem sido aplicado com grande sucesso em várias áreas da mecânica quântica incluindo os sistemas atômicos, moleculares e de estado sólido [7, 9]. O método está baseado no princípio variacional e na aproximação de campo central que detalharemos mais à frente.

Em se tratando das soluções da equação de Schrödinger verifica-se que para $N \geq 2$, faz-se necessário lançarmos mão de algum tipo de aproximação, uma vez que soluções exatas, analíticas, são inviáveis dentro do arcabouço teórico conhecido para a abordagem do problema. Neste caso buscaremos como solução da equação (2.1) resolver a Hamiltoniana não relativística, através do método de aproximação de Hartree-Fock:

$$\begin{aligned}
 H_I &= H_0 + H_1 \\
 &= (H_{\text{cinetica}} + H_{\text{eletron-nucleo}}) + H_{\text{eletron-eletron}} \\
 &= -\sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \frac{2Z}{r_i} + \sum_j \sum_{i>j} \frac{2}{r_{ij}}
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

nesta expressão assumimos que o núcleo pode ser tratado como uma carga puntual

com massa infinita. A discussão será restrita a sistemas para os quais o Hamiltoniano é determinado pela Eq. (2.8) [1, 9].

2.4 O Modelo de Campo Central

Iniciamos a abordagem do problema considerando o modelo de campo central no qual fazemos a aproximação de que qualquer elétron i move-se independentemente dos demais elétrons no campo eletrostático do núcleo o qual assumimos ser estacionário, isto é $m_{nucleo} = \infty$. O campo produzido pelos $N-1$ elétrons é obtido a partir da média temporal tomada sobre o movimento dos mesmos, assume-se que esta média produz uma contribuição esfericamente simétrica para o campo resultante [2, 6].

Uma teoria sistemática dos espectros de átomos, apresentando bom acordo quantitativo com experiência, pode então ser construída começando com a suposição que cada elétron move-se em um campo de energia potencial esfericamente simétrico $U(r_i)$, cujas contribuições foram descritas acima [2, 6]. Para podermos expressar o Hamiltoniano dos N -elétrons usamos a equação (2.8) e H_I da Eq. (2.6) para representar um novo Hamiltoniano com o potencial $U(r_i)$ esfericamente simétrico, então H_I pode ser rescrito (omitindo-se o índice) como:

$$H = H'_0 + H'_1 \quad (2.9)$$

sendo que os termos de (2.9) bem como o potencial $U(r_i)$ são definidos como segue:

$$\sum_{i=1}^N U(r_i) = -\sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} + \left\langle \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{r_{ij}} \right\rangle \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} H'_0 &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + U(r_i) \right) \\ &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \left\langle \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{r_{ij}} \right\rangle \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} H'_1 &= -\sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{r_{ij}} - \sum_{i=1}^N U(r_i) \\ &= \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{r_{ij}} - \left\langle \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{r_{ij}} \right\rangle \end{aligned} \quad (2.12)$$

nas expressões acima $\left\langle \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{r_{ij}} \right\rangle$ representa a média espacial, levando-se em consideração as coordenadas angulares sobre o potencial esfericamente simétrico produzido pelos N-1 elétrons. Devido a simetria esférica do problema o resultado independe das coordenadas angulares. Então H'_0 em (2.11) contém a energia cinética, energia potencial no campo do núcleo e a média da energia cinética da repulsão eletrônica. H'_1 em (2.12) torna-se o Hamiltoniano que contém a parte esférica da repulsão eletrônica e é considerado como uma perturbação que produz uma separação de energia de uma configuração. Já que esta mudança está contida em

$\sum_{i < j}^N \frac{e^2}{r_{ij}}$, é suficiente calcularmos os elementos de matriz deste operador. A energia da configuração é então separada em termos associados com valores específicos de L e de S . A degenerescência destes termos é removida quando levamos em consideração a interação spin-órbita, pois neste caso há uma nova separação dos níveis de acordo com os valores permitidos de J . Esta separação de níveis é conhecida como estrutura fina e o conjunto completo de níveis pertencentes a uma dada configuração eletrônica é um multiplete [6, 10].

A energia das interações de spin-órbita cresce rapidamente com o número atômico, varia com aproximadamente a quarta potência, enquanto a energia de repulsão entre os elétrons varia suavemente como função de Z ; assim ao avançarmos na tabela periódica, H_2 em (2.7) assume maior importância e eventualmente torna-se a perturbação dominante com relação a H_1 de (2.6), como já discutido anteriormente. Mesmo em elementos mais leves, a interação eletrostática é enfraquecida se o átomo está em um estado altamente excitado, desde que os elétrons envolvidos na excitação estão geralmente situados distantes da região que contém o núcleo e os demais elétrons [6].

Simplificando podemos dizer que na aproximação de campo central o problema principal é conhecer o potencial $U(r_i)$ e a correção do resultado aproximado. Para a determinação deste potencial são usados alguns métodos, um deles está baseado no modelo estatístico de Thomas e Fermi, um outro é baseado na

teoria de Hartree também conhecida como aproximação de Hartree⁴ [11]. Na prática o método mais usado é o de Hartree-Fock que é uma generalização do método de Hartree e que está baseado no modelo de campo central descrito anteriormente e no princípio variacional [9]. De fato a condição principal neste caso é a minimização da energia pelo cálculo variacional, ou seja, $\delta \langle \Psi | H | \Psi \rangle = 0$. Então o resultado do cálculo da energia total $E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ será um conjunto de equações integro-diferenciais acopladas que deverão ser resolvidas por técnicas de cálculo numérico [11].

2.5 Suposições da Aproximação de Hartree-Fock

O método de Hartree-Fock para obter uma aproximação das autofunções totais consiste de três fases. Na primeira, é selecionada uma forma funcional e definida em termos de certas funções. Então uma expressão para a energia total é derivada em termos destas funções. Finalmente o princípio variacional é aplicado e equações derivadas cujas soluções são as funções que tornam a energia total estacionária. Muitas variações, propostas alternativas, ao método de Hartree-Fock para obtenção de soluções aproximadas para o problema encontram-se descritas na literatura, elas diferem na forma pela qual a representação funcional está definida [7,9]. Porém para serem aproximações de Hartree-Fock, em lugar de simplesmente

⁴ Essa aproximação é um esquema variacional para obter uma solução autoconsistente em problemas com várias partículas interagindo entre si [7].

aproximações variacionais, elas têm que satisfazer certos critérios chamados suposições de Hartree-Fock básicas [9].

Se pertencer a alguma classe de aproximação de Hartree-Fock, então ela deve ter as seguintes propriedades obtidas a partir do estudo criterioso da Eq. (2.1) :

2.5.1 Anti-simetria

A função de onda Ψ deve ser anti-simétrica em relação à troca de coordenadas, uma vez que a mesma deve representar os autoestados de férmions. Mais formalmente se p_{ij} for um operador, que quando aplicado a uma autofunção de muitos elétrons, faz a troca das quatro coordenadas de elétron i com elétron j , então as soluções fisicamente significativas da Eq. (2.1) são aquelas nas quais:

$$p_{ij}\Psi = -\Psi \quad (2.13)$$

para todo o $i, j \leq N, i \neq j$. Estas são chamadas de “condições anti-simétricas” e numa aproximação de Hartree-Fock a função de onda Ψ tem que satisfazer as condições de anti-simetria.

2.5.2 Produtos de spin-orbitais

Uma função de onda total aproximada pode ser obtida substituindo o Hamiltoniano H por um outro para o qual a função de onda é solúvel. Suponha:

$$H \approx H = \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + U(r_i) \right\} \quad (2.14)$$

onde o efeito das interações com outros elétrons foi substituído pelo potencial de partícula única $U(r_i)$. Se:

$$H\Phi = E\Phi \quad (2.15)$$

e neste caso Φ será uma aproximação a Ψ , sendo que a equação para Φ é separável. Então:

$$\Phi = \phi(1) \phi(2) \dots \phi(i) \dots \phi(N) \quad (2.16)$$

e $\phi(i)$ é uma função de onda de elétron único para o elétron i . Substituindo na equação de onda resultará em uma equação que do mesmo modo como as equações hidrogênicas, são separáveis em coordenadas esféricas, em uma parte radial, uma parte angular e uma parte de spin. De fato podemos representá-la, como segue:

$$\phi(r, \theta, \varphi, \sigma) = \left(\frac{1}{r}\right) P(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \chi_{m_s} \quad (2.17)$$

onde $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ é um harmônico esférico e χ_{ms} uma função de spin.

Como resultado as funções elétron único podem ser especificadas completamente em termos dos quatro números quânticos $\{n, l, m_l, m_s\}$. Tais funções são chamadas de funções de “spin-orbitais” e são representadas na forma:

$$\begin{aligned} \Phi &= \mathcal{A} \{ \Phi = \phi(1) \phi(2) \dots \phi(N) \} \\ &= \left(\frac{1}{N!}\right)^{1/2} \sum_P (-1)^p \mathcal{P} \{ \Phi = \phi(1) \phi(2) \dots \phi(N) \} \end{aligned} \quad (2.18)$$

onde o operador de antisimetização $\mathcal{A}$ foi aplicado para satisfazer a exigência (1), visto que Φ é uma solução do problema separável mas não satisfaz a condição de anti-simetria, $\mathcal{P}$ é o operador que permuta as coordenadas dos elétrons, p é a paridade da permutação e a soma é sobre as $N!$ permutações possíveis. A função anterior pode ser representada convenientemente na forma de determinante como segue:

$$\Phi = \left(\frac{1}{N!}\right)^{1/2} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \phi_1(2) & \dots & \phi_1(N) \\ \phi_2(1) & \phi_2(2) & \dots & \phi_2(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(1) & \phi_N(2) & \dots & \phi_N(N) \end{vmatrix} \quad (2.19)$$

Esta representação é chamada de “determinante de Slater” para um conjunto de spin-orbitais. É fácil de se ver nesta aproximação a condição de anti-simetria que implica no princípio de exclusão de Pauli. Se qualquer dois conjuntos dos quatro números quânticos que definem os orbitais for idêntico, então duas linhas do determinante também seriam idênticas, fazendo com que $\Phi \equiv 0$.

2.5.3 Ortonormalidade

Desde que as funções radiais para um determinado valor de l sejam todas autofunções da mesma equação radial, elas serão ortogonais. Porém as condições de Hartree-Fock não impõem esta condição. Ao invés normalmente é requerido que o spin-orbital forme um conjunto ortonormal da seguinte forma:

$$\int \phi_{n l m_l m_s}(1) \phi_{n' l' m_l' m_s'}(1) d\tau_1 = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{m_l m_l'} \delta_{m_s m_s'} \quad (2.20)$$

onde $d\tau_1$ representa integração sobre todas as coordenadas de espaço e a soma sobre todas as coordenadas de spin do elétron 1. O função delta de Kronecker, δ_{ij} , está definida como:

$$\begin{aligned} \delta_{ij} &= 0, \quad i \neq j \\ &= 1, \quad i = j \end{aligned} \quad (2.21)$$

2.5.4 Operadores de momento angular

Considerando que nosso Hamiltoniano é independente do spin, está claro que os operadores de momento angular total de spin, S^2 e S_z , comutam com o Hamiltoniano. Contudo pode também ser mostrado que os operadores de momento angular orbital total L^2 e L_z comutam com H . Isto implica que a solução exata de Eq. (1-1) também é uma autofunção destes operadores que nos conduzem à última exigência: A função de onda Ψ deve ser uma autofunção dos operadores de momento angular orbital total L^2 e L_z como também dos operadores de momento total de spin S^2 e S_z , tal que:

$$\begin{aligned} L^2\Psi &= L(L+1)\Psi & S^2\Psi &= S(S+1)\Psi \\ L_z\Psi &= M_L\Psi & S_z\Psi &= M_S\Psi \end{aligned} \quad (2.22)$$

Funções que satisfazem (4) também podem ser obtidas do acoplamento dos estados de momento angular. Façamos J representar o operador de momento angular total, então J satisfaz todas as relações de comutação habituais de um operador de momento angular e será referido como tal. Na notação de Dirac comum, $|JM\rangle$ é uma autofunção de J^2 e J_z , sendo que:

$$J^2|JM\rangle = J(J+1)|JM\rangle \quad (2.23)$$

$$J_z|JM\rangle = M|JM\rangle \quad (2.24)$$

Assim dependendo do tipo de acoplamento em questão pode ser usado o número quântico ligado ao momento angular total, que é o único número quântico a se conserva em todas as representações de momento angular (LS, jj...) que veremos mais a frente.

Finalizando nossas considerações devemos salientar que o sucesso do método de Hartree-Fock na determinação de níveis eletrônicos depende da intensidade da interações desprezadas no Hamiltoniano considerado e da validade da hipótese inicial de se usar orbitais de partícula única na construção da função de onda aproximada [1, 6].

2.6 Acoplamento de Momento Angular

Num átomo contendo N elétrons com $N > 1$ há mais que dois momentos angulares, de fato há N momentos angulares orbitais l_i , e há N momentos de spin s_i , então o momento angular total deste átomo é:

$$\mathbf{J} = \sum_{i=1}^N (\mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i) \quad (2.25)$$

Evidentemente a ordem na qual os momentos são acoplados pode ser escolhida de muitos modos diferentes; qualquer escolha específica é conhecida como um esquema de acoplamento [6]. As funções de onda individuais corresponderão de

perto aos vários estados físicos do átomo se o esquema de acoplamento escolhido corresponder ao acoplamento de momentos sucessivos na ordem de força decrescente das várias interações, (a) órbita-órbita (l_i, l_j); (b) spin-spin ou interação de troca (s_i, s_j); (c) interação spin-órbita (l_i, s_i); (d) spin-outra-órbita (s_i, l_j). As interações do tipo (a) e (b) são devido quase que exclusivamente às forças eletrostáticas, enquanto que as do tipo (c) são de natureza magnética e as interações do tipo (d) são praticamente desprezíveis no contexto [6, 8].

Os esquemas de acoplamento mais utilizados em espectroscopia atômica são: o acoplamento Ls , o acoplamento jj , o acoplamento em pares que apresenta duas variações o acoplamento jl ou jK e o acoplamento Ls ou LK [2,6]. A seguir descrevemos cada um deles em separado.

2.6.1 Acoplamento LS

Em átomos cujo número atômico Z é pequeno, átomos leves, a interação spin-órbita é pequena e as interações mais fortes entre os elétrons de um átomo são as suas forças repulsivas coulombianas, como estas repulsões afetam somente o momento angular orbital e não os spins, torna-se muito mais apropriado primeiro acoplar todos os momentos angulares orbitais para dar as autofunções de L^2 e L_z :

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^N \mathbf{l}_i \quad (2.26)$$

onde L é o momento angular orbital total do átomo. Similarmente para o acoplamento de todos os “spins”, para dar as autofunções de S^2 e S_z , temos :

$$\mathbf{S} = \sum_{i=1}^N \mathbf{s}_i \quad (2.27)$$

onde S é o momento angular total de spin. Então L e S são acoplados para dar as autofunções de J^2 e J_z :

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (2.28)$$

este esquema é conhecido como esquema LS ou esquema de acoplamento Russell-Saunders⁵.

Para configurações de dois elétrons, este esquema de acoplamento pode ser descrito pela notação condensada:

$$[(l_1, l_2)L, (s_1, s_2)S]JM \quad (2.29)$$

e a notação para os estados correspondentes é:

$$^{(2S+1)}L_J \quad (2.30)$$

⁵ Leva este nome em homenagem aos dois astrônomos que o usaram pela primeira vez no estudo de espectros atômicos emitidos pelas estrelas.

onde $(2S+1)$ é a multiplicidade, S é o momento total de spin, L é o momento orbital total e j é a projeção do momento angular total J [6].

Se as condições de acoplamento físicas que existem no átomo com camada fechada aproximam-se do acoplamento LS, então os momentos l_i individuais estarão pressionando rapidamente em alguma complicada (mas não especificada) maneira sobre a resultante L , e analogamente os momentos s_i individuais precessionando sobre a sua resultante S . Se todas as interações diferentes das coulombianas são negligenciadas, então L e S são constantes de movimento e podem ser descritas as autofunções e os estados quânticos em termos dos quatro bons números quânticos L, S, M_L, M_S .

É interessante notar que o nome do acoplamento LS acaba sendo uma fonte de confusão, pois ele parece implicar que o acoplamento entre os vetores L e S é o mais importante, na verdade ocorre exatamente o oposto. No acoplamento LS, o acoplamento dos vetores l_i individuais para formar o vetor L total, bem como o acoplamento dos vetores individuais s_i para formar o vetor S total, são os mais importantes porque tem maior efeito de energia. O acoplamento do vetor L total com o vetor S total é menos importante por ter menor efeito de energia [2].

O tratamento descrito acima é válido, exceto para átomos com valores grandes de Z e podemos afirmar que fisicamente este é o esquema de acoplamento mais importante por isso o mais conveniente se ser usado em cálculos práticos [2, 6].

2.6.2 Acoplamento jj

Quando o número atômico Z é incrementado as interações spin-órbita ficam crescentemente mais importantes; no limite no qual estas interações tornam-se muito mais fortes que as interações coulombianas, as condições de acoplamento aproximam-se do acoplamento jj puro. Este método de acoplamento trata em primeiro lugar o acoplamento relativamente forte entre os momentos angulares de spin e orbital de cada elétron do átomo com grande valor de Z , para formar seu momento angular total para cada elétron i , em seguida leva em conta o acoplamento fraco desses momentos angulares para formar o momento angular total de todos os elétrons. Então no esquema de acoplamento jj , funções de base são formadas acoplando-se o spin de cada elétron primeiro a seu próprio momento angular orbital, e depois acoplando os vários j_i das resultantes em alguma ordem arbitrária para obter o momento angular total J :

$$l_i + s_i = j_i, \text{ (para cada } i\text{);} \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} j_1 + j_2 &= J_2, \\ J_2 + j_3 &= J_3, \\ &\vdots \\ J_{N-1} + j_N &= J_N \equiv J. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Para configurações de dois elétrons, este esquema de acoplamento pode ser descrito pela notação condensada:

$$[(l_1, s_1)j_1, (l_2, s_2)j_2]JM \quad (2.33)$$

e a notação habitual do acoplamento jj para os níveis de energia é:

$$(j_1 j_2)_J \quad (2.34)$$

No acoplamento jj , o princípio de Pauli leva a forma que nenhum dos dois elétrons podem ter o mesmo conjunto de números quânticos n, l, j, m_j . Partículas equivalentes cuja base dos estados são formadas pelo acoplamento jj são extensivamente usadas em física nuclear. Em física atômica o esquema de acoplamento jj é raramente considerado exceto para muito poucos casos em que Z é muito alto como $_{82}\text{Pb } 6p^2$, $_{83}\text{Bi } 6p^3$, e $_{84}\text{Po } 6p^4$ ou em configurações excitadas onde o acoplamento do elétron excitado com o caroço está freqüentemente perto de jj , isto porque o elétron excitado é automaticamente afastado das imediações dos outros elétrons, reduzindo a força coulombiana entre ele e os elétrons do caroço [6].

Resumindo podemos dizer que o primeiro tipo de acoplamento citado, LS, é satisfatório para um grande número de configurações, principalmente na primeira parte da tabela periódica, átomos leves ($Z \leq 30$). Contudo, a interação spin-órbita varia aproximadamente com a quarta potência da carga nuclear efetiva, enquanto que as interações órbita-órbita e spin-spin tem um aumento linear. Assim pode ser

esperado uma gradual transição do acoplamento LS para o acoplamento jj com o aumento do número atômico Z [6, 8]. Esse esquema de acoplamento privilegia o termo spin-órbita, o qual será diagonal nesta representação [1,6].

2.6.3 Acoplamento em Pares

Mais comum que o acoplamento jj, entretanto bem menos conhecido, são as condições de acoplamento através das quais os níveis de energia tendem a aparecer em pares. Estas condições acontecem para configurações excitadas nas quais a energia depende apenas ligeiramente do spin s do elétron excitado; os pares de níveis correspondem aos dois possíveis valores de J que são obtidos quando s é acrescentado a resultante K , de todos os outros momentos angulares.

As condições para o acoplamento em pares acontecem principalmente quando o elétron excitado tiver momento angular grande (por exemplo um elétron da camada f ou g) pois tais elétrons tendem a não penetrar no caroço e assim experimentam apenas um pequeno spin (troca) dependente da interação coulombiana e sua interação de spin-órbita é igualmente pequena [6].

Por simplicidade, discutimos casos especiais de acoplamento em pares para configurações que contem apenas dois elétrons fora da subcamada fechada.

2.6.3.1 Acoplamento j_l ou j_K

O tipo mais comum de acoplamento em pares, acoplamento j_K , acontece quando a interação mais forte for a interação spin-órbita do elétron mais ligado, e a próxima interação mais forte é a porção independente do spin resultante da interação coulombiana (direta) entre dois elétrons. O esquema de acoplamento de momento angular correspondente é:

$$\begin{aligned} l_1 + s_1 &= j_1, \\ j_1 + l_2 &= K, \\ K + s_2 &= J \end{aligned} \tag{2.35}$$

Este esquema de acoplamento pode ser descrito pela notação condensada:

$$\{(l_1, s_1)j_1, l_2\}K, s_2\}JM \tag{2.36}$$

e a notação usual para os níveis de energia é:

$$j_1[K]_l \tag{2.37}$$

Este tipo de acoplamento acontece particularmente em configurações excitadas dos gases nobres (Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) e dos elementos do grupo do carbono (C, Si, Ge, Sn, Pb), mas também em muitos outros casos [6].

2.6.3.2 Acoplamento Ls ou LK

A outra forma que limita o acoplamento em pares é chamada acoplamento LK (ou Ls). Nas configurações de dois elétrons, corresponde ao caso no qual o termo direto da interação coulombiana é maior que a interação spin-órbita de qualquer elétron, e a interação spin-órbita do elétron interno é a próxima mais importante. O esquema de acoplamento é:

$$\begin{aligned} l_1 + l_2 &= L, \\ L + s_1 &= K, \\ K + s_2 &= J, \end{aligned} \tag{2.38}$$

Este esquema de acoplamento pode ser descrito pela notação condensada:

$$\{[(l_1, l_2)L, s_1]K, s_2\}JM, \tag{2.39}$$

e a notação usual para os níveis de energia é:

$$L[K]_J, \tag{2.40}$$

onde L é o símbolo habitual (S, P, D, F,...). Condições de acoplamento LK acontecem bastante frequentemente dentro das configurações N II 2p4f e P II 3p4f [6].

2.7 Transições Radiativas

Passamos agora a discutir as forças de oscilador, o embasamento teórico pode ser encontrado em Cowan [6], que desenvolve toda a teoria para transições radiativas, enquanto a teoria da radiação eletromagnética é amplamente discutida por Jackson [12].

Mostraremos de forma resumida como calculamos os tempos de vida e as forças de oscilador, discutindo posteriormente como estas grandezas são relacionadas e como são medidas experimentalmente. De fato, as forças de oscilador e as probabilidades de transição podem ser medidas por uma variedade de métodos diferentes envolvendo tanto absorção de um espectro contínuo, como medidas de intensidade de linhas de emissão, ou medidas de dispersão anômalas [6].

Informações úteis sobre probabilidades de transição também podem ser obtidas através de medidas dos tempos de vidas radiativos, a probabilidade de transição absoluta também pode ser encontrada se valores relativos conhecidos como "Branching Fractions" forem conhecidos de outras medidas experimentais ou de cálculos teóricos [6, 4].

O método que descreveremos utiliza como base as medidas dos tempos de vida e das "Branching Fractions" para se chegar as forças de oscilador.

2.8 Tempos de Vida

Podemos considerar os vários possíveis estados quânticos de um átomo isolado como sendo completamente estacionários. De fato esta é uma boa aproximação, pois o átomo interage fracamente com a radiação eletromagnética. Então podemos considerar que um átomo em um estado excitado $|j\rangle$ de maior energia E_j pode, em geral, fazer uma transição espontânea para um estado $|i\rangle$ de menor energia E_i , com emissão de um fóton de energia:

$$h\nu_{ji} = E_j - E_i \quad (2.41)$$

correspondendo a uma linha espectral. Neste caso a probabilidade por unidade de tempo de um átomo que está no estado $|j\rangle$ faça uma transição para o estado $|i\rangle$ é denotada por a_{ji} . Mas para um átomo com momento angular total J_i há:

$$g_i = 2J_i + 1 \quad (2.42)$$

estados quânticos degenerados de energia E_i , correspondendo aos $2J_i + 1$ possíveis valores do número quântico magnético M_i . Então definimos a taxa de probabilidade espontânea de Einstein como sendo a probabilidade total por unidade de tempo de um átomo em um estado $|j\rangle$ específico que faz uma transição para quaisquer dos

estados g_i do nível de energia mais baixo $|i\rangle$:

$$A_{ji} = \sum_{M_i} a_{ji} \quad (2.43)$$

A_{ij} é independente de M_i , fisicamente isto corresponde ao fato que a probabilidade de transição não pode depender de uma escolha arbitrária da orientação dos eixos de coordenadas [6].

Mas se considerarmos que no tempo t há $N_j(t)$ átomos no estado $|j\rangle$, a taxa de mudança, troca, de N_j devido a transições espontâneas para todos os estados do nível $|i\rangle$, que são todas as transições do estado $|j\rangle$ que dão origem à linha espectral, então:

$$\frac{dN_j(t)}{dt} = -A_{ji}N_j(t) \quad (2.44)$$

A quantidade:

$$g_j A_{ji} = g_j \sum_{M_i} a_{ji} = \sum_{M_j} \sum_{M_i} a_{ji} \quad (2.45)$$

é chamado de probabilidade de transição ponderada (emissão espontânea), e é evidentemente mais simétrica nos níveis de energia maiores e menores em energia do

que é a própria transição de probabilidade de Einstein.

A taxa total de mudança de N_j devido a todas as possíveis transições espontâneas é:

$$\frac{dN_j(t)}{dt} = -N_j(t) \sum_i A_{ji} \quad (2.46)$$

onde a soma é sobre todos os níveis do átomo que tem energia menor que E_j . Segue que se nenhuma outra excitação nem processos de “desexcitação” são envolvidos, então:

$$N_j(t) = N_j(0) e^{-t/\tau_j} \quad (2.47)$$

Assim podemos definir o tempo de vida de uma transição como:

$$\tau_j = \left(\sum_i A_{ji} \right)^{-1} \quad (2.48)$$

ou seja, este é o tempo de vida natural do átomo em qualquer um dos estados do nível mais alto j [6].

2.9 Forças de Oscilador

As características fundamentais de uma linha espectral são: frequência, força e forma. Elas refletem a estrutura do átomo (ou íon) produzindo o espectro e as interações com sua vizinhança. Estas características estão ligadas a três tipos de interações constantes atômicas que definem a estrutura: as energias de separação dos estados estacionários, que definem as frequências das transições (ou comprimentos de onda das linhas espectrais), as forças de oscilador que influenciam na intensidade das linhas espectrais e estão relacionadas a probabilidades de transição e os tempos de vida radiativos dos níveis energéticos que determinam a largura das linhas. A primeira vista pode parecer que as forças de oscilador estejam relacionadas apenas com as larguras naturais, mas na realidade são constantes importantes na maioria das interações experimentais já que as probabilidades para interações não lineares podem ser expressas em termos de forças de oscilador de transições atômicas ou moleculares [10].

Assim uma quantidade que é muito usada para a discussão de forças de linhas espectrais, particularmente ao lidarmos com absorção de um espectro contínuo, é a força de oscilador que é uma grandeza relacionada a intensidade da linha I e a probabilidade de transição pela expressão :

$$f_{ij} = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h(2J+1)} S = \frac{(E_j - E_i)}{3(2J+1)} S \quad (2.49)$$

onde $E_j - E_i$ é a energia de transição em Rydbergs e S é a intensidade de dipolo elétrico. É importante notar que esta quantidade recorre à probabilidade total de absorção de um estado específico do nível mais baixo $|i\rangle$ para todos os $(2J_i \pm 1)$ estados do nível superior $|j\rangle$. A quantidade correspondente para emissão (que normalmente é considerada negativa) é:

$$f_{ji} = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h(2J_i + 1)} S = \frac{(E_i - E_j)}{3(2J_i + 1)} S \quad (2.50)$$

Uma quantidade simétrica nos níveis superiores e inferiores da transição é a força de oscilador ponderada, definida por:

$$gf = (2J_i + 1)f_{ij} = -(2J_j + 1)f_{ji} \quad (2.51)$$

onde $(2J_i + 1)$ designa a degenerescência do nível mais baixo $|i\rangle$ e f_{ji} é a força de oscilador para absorção $|i\rangle \rightarrow |j\rangle$.

A força de oscilador é uma grandeza adimensional cujo significado físico corresponde ao número efetivo de elétrons clássicos, isto é osciladores harmônicos simples, que absorveriam radiação de um determinado número de onda tão fortemente quanto faz o átomo. Então para linhas espectrais intensas, f é da ordem da unidade [6]

2.10 Como são medidas as Forças de Oscilador

O método para medir forças de oscilador é mais facilmente descrito a partir da probabilidade de transição dada pela Eq.(2.43) sendo que para o método experimental ela é derivada da seguinte relação:

$$I = N_j g_j A_{ji} \quad (2.52)$$

onde I é a intensidade em fótons por segundo, N_j é a população do nível superior e g_j é o peso estatístico do nível superior, tal como definimos para o nível de menor energia na Eq. (2.42).

A população, N_j , é porém muito difícil determinar. Este problema pode ser eliminado introduzindo o que chamamos de "Branching Fractions", que são definidas como a intensidade de uma linha dividida pela soma das intensidades de todas as linhas do nível superior, isto é:

$$(BF)_k = \frac{I_k}{\sum I_j} \quad (2.53)$$

Combinando Eq. (2.52) com Eq. (2.53) temos:

$$(BF)_k = \frac{N_j g_j A_k}{\sum N_j g_j A_j} = \frac{A_k}{\sum A_j}$$

Mas o inverso da soma das probabilidades de transição fornecem o tempo de vida para o nível superior, τ , como pode ser visto pela Eq. (2.48) para o nível superior. Isto significa que podemos rescrever a Eq. (2.54) como:

$$(BF)_k = A_k \tau \quad (2.55)$$

que nos conduz a expressão final para a probabilidade de transição:

$$A_k = \frac{(BF)_k}{\tau} \quad (2.56)$$

A expressão acima contém algumas propriedades que podemos medir, como os tempo de vida por exemplo. Medidas das “Branching Fractions” são freqüentemente feitas e seus resultados são utilizados para o cálculo das probabilidades de transição [4].

A força de oscilador é o número de osciladores clássicos equivalentes para um átomo real para uma particular transição e é definida pela Eq. (2.50), ou mais simplesmente:

$$\eta = n_i f_{ij} \quad (2.57)$$

onde n_i é a densidade do número de átomos no nível superior (em emissão) e η é a densidade do número de osciladores clássicos equivalentes, como já vimos f será uma quantidade adimensional relacionada à probabilidade de transição, podemos

rescrevê-la pela seguinte relação:

$$f_{ji} = \frac{g_j}{g_i} \frac{\epsilon_0 \hbar c^3}{\pi e^2 \nu^2} A_{ji} \quad (2.58)$$

onde g_i e g_j são respectivamente os pesos estatísticos do nível inferior e superior. Substituindo todas as constantes pelos seus valores numéricos e frequência com comprimento de onda, a Eq. (2.58) pode ser rescrita como:

$$f_{ji} = 1.4992 \times 10^{-16} \lambda^2 \frac{g_j}{g_i} A_{ji} \quad (2.59)$$

geralmente esta é a expressão utilizada para calcular as forças de oscilador para as linhas espectrais [4].

A razão principal das forças de oscilador serem medidas é que elas são necessárias para se analisar dados astronômicos, elas são usadas em lugar das probabilidades de transição. Um espectro estelar não só dá informação sobre que elementos está presente naquele objeto espectral, mas as intensidades das linhas de emissão, ou a profundidade das linhas de absorção e ainda fornece uma medida da abundância de um certo elemento. Isto habilita-nos a calcular esta abundância, e podemos ajustar o espectro sintético ao observado. O espectro sintético usa geralmente os valores medidos gerados pelas "Branching Fractions", a população dos diferentes níveis superiores são estimadas e com isto estima-se por exemplo a

abundância para diferentes elementos. O espectro sintético é então ajustado ao espectro observado pela variação da abundância dos diferentes elementos [4]. Porém, imprecisões das forças de oscilador de um elemento resultarão em incertezas na abundância de todos os elementos, desde que uma força de oscilador incorreta afetará todas linhas espectrais nas vizinhanças. Então medidas precisas das forças de oscilador são muito importantes ao interpretar dados astronômicos [4, 6].

Outra razão para medir as forças de oscilador de elementos diferentes é compará-las com valores teóricos calculados. Comparando os valores medidos com os valores teóricos tem-se uma idéia de quão bom o cálculo teórico é.

Portanto concluímos que não há nenhum modo prático no laboratório de medir forças de oscilador diretamente. Ao invés, tentamos medir as “Branching Fractions”, medindo as intensidades de todas as linhas espectrais de um nível superior e dividindo cada um pela soma de todas as intensidades daquele nível superior. Se o tempo de vida do nível superior também for conhecido, a probabilidade de transição para as linhas espectrais pode ser encontrada e a força de oscilador calculada através das Eq. (2.56) e Eq. (2.59), portanto poderíamos dizer que as forças de oscilador são “medidas indiretamente” a partir de outras grandezas.

2.11 Problemas nas Medidas das Forças de Oscilador

Como vimos as forças de oscilador são medidas através da “Branching

Fraction” de uma linha que é definida como a intensidade da linha dividida pela soma de todas as intensidades da linha do mesmo nível superior, um erro em qualquer linha resultará em um erro na “Branching Fraction” para todas as linhas. Então, se qualquer linha é influenciada por exemplo por auto-absorção, o erro na “Branching Fraction” para aquela linha em particular acarretará um erro em todas as outras linhas. É então importante tentar medir todas as linhas com precisão tão boa quanto possível. A calibração do instrumento também pode dar origem a erros e deve-se escolher alguma forma confiável de calibrá-los, geralmente usa-se uma curva de calibração confiando-se em dados teoricamente calculados [4].

Com isto esperamos ter dado uma idéia de como são medidas e calculadas as forças de oscilador, bem como sua importância para determinadas áreas.

Capítulo 3

Cálculos Computacionais na Espectroscopia Atômica

Neste capítulo descreveremos resumidamente as funções básicas de um conjunto de programas entre eles alguns desenvolvidos pelo Prof. Robert D. Cowan do Laboratório Nacional de Los Álamos, que foi extensivamente utilizado neste trabalho. Com estes programas podemos obter informações detalhadas sobre a estrutura atômica, como a energia média da configurações, os parâmetros energéticos de Slater, o parâmetro de acoplamento spin-órbita, as integrais de interação, a pureza dos acoplamentos LS , jj ou outros que se façam necessários, os níveis de energia, os comprimentos de onda e intensidades, as probabilidades de transição, os tempos de vida de cada configuração e as forças de oscilador ponderadas para átomos com N -elétrons.

Os programas⁶ em questão são: Elcalc, Strans, Cowan1 (RCN e RCN2), Cowan2 (RCG) e RCE19 que estão instalados na rede de computação do IFGW, a linguagem utilizada em todos os programas e suas subrotinas é o fortran 77.

3.1 Cálculo dos Níveis de Energia das Configurações

Para o cálculo dos níveis de energia das várias configurações utilizamos o programa Elcalc. Este programa funciona mediante um arquivo de entrada onde devemos colocar todas as transições conhecidas experimentalmente, seus comprimentos de onda e respectivas incertezas. Os níveis de energia são então calculados a partir de um processo iterativo que procura as transições correspondentes a todas as combinações possíveis de um nível que se queira determinar com todos os demais. Como os valores que utilizamos na entrada do programa são provenientes de diferentes trabalhos experimentais, este programa coloca diferentes pesos para cada transição de acordo com a incerteza do experimento utilizado em sua obtenção. Como resultado o programa apresenta um arquivo contendo o valor de cada nível, o desvio padrão e o número de transições que participaram para sua determinação, este processo é repetido para todos os níveis inseridos (pares e ímpares). Estes valores ajustados de energia serão a base de nosso trabalho daqui em diante.

⁶ Os programas desenvolvidos pelo Prof. Dr. Robert Cowan são RCN, RCN2, RCG e RCE19 [6].

3.2 Cálculo dos Comprimentos de Onda

Como os valores dos níveis de energia estão diretamente ligados aos valores dos comprimentos de onda então torna-se necessário calcularmos estes valores para os níveis energéticos que foram ajustados pelo programa Elcalc.

Para estes cálculos utilizamos o programa Strans que a partir dos níveis energéticos ajustados das configurações envolvidas, obtém os comprimentos de onda que estão em melhor acordo com os novos níveis de energia calculados, onde levou-se em consideração para o seu cálculo os diferentes pesos dependendo da incerteza do experimento utilizado para sua obtenção. Os comprimentos de onda das transições apresentados para cada íon em estudo foram obtidos a partir deste aplicativo.

3.3 Cálculo das Funções de Onda

As funções de onda radiais são calculadas pelos programas RCN e RCN2. Na rede de computação estes dois programas são chamados por Cowan1, mas a descrição deles deve ser feita em separado. Os programas podem ser usados por um dos quatro métodos de aproximação apresentados no livro de Cowan: Hartree (H), Hartree-Slater (HS), Hartree-Plus-Statistical-Exchange (HX) e Hartree-Fock-Slater (HFS) [6]. O método de solução utilizado pelo programa para resolver as equações multiconfiguracionais de Hartree-Fock está baseado na

aproximação de campo central autoconsistente.

O RCN calcula as funções de onda radial $[P_i(r)]$ que correspondem à energia do centro de gravidade $[E_{av}]$ para cada configuração especificada num arquivo de entrada, calcula também as integrais de Coulomb radial direta e de troca $[F^k \text{ e } G^k]$ e as integrais de spin-órbita $[\zeta_i(r)]$ para um átomo esfericamente simétrico, sendo estes valores fundamentais para o cálculo de níveis de energia de cada configuração envolvida. Este programa gera um arquivo de saída que será utilizado pelo RCN2.

O RCN2 usa as funções de onda geradas pelo RCN para calcular as integrais de interação de configuração de Coulomb entre cada par de configurações que interagem $[R^k]$, calcula também as integrais radiais de dipolo e quadrupolo elétrico $[E_1 \text{ e } E_2]$ para cada par de configurações, por fim gera um arquivo de saída com todos os parâmetros que serão usados pelo programa RCG.

3.3.1 RCN

O arquivo de entrada deste programa contém as configurações do átomo ou íon a ser analisado, entre outros parâmetros temos, seu número atômico Z , seu grau de ionização, o rótulo de cada configuração [ex. $1s^2 2s^2 2p^3$ Si VIII], a especificação dos orbitais e suas respectivas ocupações eletrônicas.

Em primeiro lugar o programa calcula o número de elétrons no átomo ou íon

que se quer estudar. Em seguida inicia o processo de obtenção das configurações, isto é feito tomando-se como base a configuração fundamental do gás nobre cujo número atômico Z seja o mais próximo do número de elétrons N do átomo ou íon, obedecendo a condição que $Z \leq N$. Esta configuração é modificada adicionando-se a ela o número de elétrons necessários para que seja obtida a configuração desejada. Por exemplo a configuração do estado fundamental do Si VIII, $1s^2 2s^2 2p^3$, é obtida a partir da configuração fundamental do hélio neutro, $1s^2$, adicionando-se a ela mais 5 elétrons, além disso, estima-se o autovalor para cada orbital. O potencial inicial será estimado a partir das funções radiais $-2z/r$ para pequenos valores de r e $-2(Z - N + 1)/r$ para grandes valores de r . Com isto tem-se um potencial inicial $U^1(r)$ que pode ser usado para calcular as funções de prova $P_i^1(r)$ para os orbitais n_l no primeiro ciclo de iteração ($m=1$). Para os ciclos seguintes o cálculo pode ser efetuado com o método desejado, que pode ser Hartree (H), Hartree-Slater (HS), Hartree-Plus-Statistical-Exchange (HX) e Hartree-Fock-Slater (HFS), onde as funções $P_j(r)$ obtidas no ciclo anterior são utilizadas. Para que a convergência ocorra mais rápido, cada função de prova $P_i(r)$ usada para calcular $U^i(r)$ a partir do terceiro ciclo será uma combinação linear da função de-prova de entrada e da integral da equação diferencial do ciclo imediatamente anterior. Usando as funções de onda radiais finais $[P_i(r)]$ várias integrais radiais de um elétron (como energia cinética, energia potencial eletro-nuclear, entre outras) são computadas. O arquivo de saída é utilizado como entrada do programa RCN2, e basicamente consiste dos valores da

energia do centro de gravidade [E_{av}], o valor esperado de r^n , as integrais radiais de Coulomb [F^k e G^k] e integrais de spin-órbita [zeta ou $\zeta_i(r)$] necessárias para o cálculo das autofunções e autovalores de energia para cada configuração em questão. Estes parâmetros são definidos como segue:

Integrais radiais de Coulomb F^k e G^k :

$$F^k(ij) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_<^k}{r_>^{k+1}} P_i^*(r_1) P_j^*(r_2) P_i(r_1) P_j(r_2) dr_1 dr_2 \equiv R^k(ij, ji) \quad (3.1)$$

$$F^k(ij) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_<^k}{r_>^{k+1}} |P_i(r_1)|^2 |P_j(r_2)|^2 dr_1 dr_2 \equiv R^k(ij, ij) \quad (3.2)$$

Integrais de spin-órbita $\zeta_i(r)$ - Zeta:

$$\zeta_i = \int_0^\infty \xi(r) |P_i(r)|^2 dr = \frac{\alpha^2}{2} \int_0^\infty \frac{1}{r} \left(\frac{dV}{dr} \right) |P_i(r)|^2 dr \quad (3.3)$$

O valor esperado de r^n :

$$\langle r^n \rangle = \int_0^\infty |P_i(r)|^2 r^n dr \quad (3.4)$$

A energia média E_{av} :

$$E_{av} = \sum_{i=1}^N \left(E^i - \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} E^{ij} \right) \quad (3.5)$$

onde E^i é a energia média de uma configuração e E^{ij} é a energia média de ligação elétron-elétron.

Para que o cálculo do espectro e níveis de energia seja realizado satisfatoriamente devemos seguir algumas regras para o arquivo de entrada do RCN:

- As configurações eletrônicas devem ser arranjadas em uma ordem específica. A primeira configuração deve ser a do nível fundamental, ou seja, de menor energia para uma dada paridade, seguida de todas as outras de mesma paridade e depois as de paridade oposta.
- Dentro de uma mesma paridade, todas as configurações que sejam membros de uma série de Rydberg simples devem ser colocadas consecutivamente para agilizar o cálculo [como exemplo no Si II-: $-3s^2 4p$, $3s^2 5p$, $3s^2 6p$,], em muitos casos quando as séries são muito longas, se este procedimento não for observado os cálculos serão feitos de maneira inadequada de forma que esta regra não só serve para agilizar mas para tornar mais confiáveis os cálculos realizados por este programa.

- Cada configuração deve ser colocada de modo que cada orbital seja arranjado em ordem crescente de n e na ordem crescente de l .

3.3.2 RCN2

O RCN2 é um programa que usa as funções de onda obtidas pelo RCN para calcular as integrais de Coulomb [R^t] entre cada par de configurações que interagem, bem como as integrais radiais de dipolo elétrico [E_1] e quadrupolo elétrico [E_2] entre cada par de configurações.

Este programa gera um arquivo completo de saída com todos os parâmetros que serão utilizados pelo programa Cowan2 (RCG) que fará o cálculo final teórico das autofunções e autovalores de energia, entre outras coisas.

3.4 Cálculo das Probabilidades de Transição e Fatores Angulares

As probabilidades de transição e os fatores angulares dos elementos de matriz da teoria de estrutura e espectro atômico são calculados pelo programa RCG que na rede de computação do IFGW é chamado por Cowan2. Estes cálculos são feitos empregando-se as técnicas da álgebra de Racah, resolvendo as matrizes de energia e apresentando como resultado as autofunções e os autovalores de energia do

átomo ou íon em questão. Os fatores angulares apresentados são:

- A energia do centro de gravidade E_{av} de cada uma das configurações;
- Os coeficientes angulares f^k e g^k das integrais radiais F^k e G^k das interações de Coulomb direta e de troca;
- As integrais de spin-órbita ζ_i ;
- Os coeficientes r_d^k e r_e^k das interações de configuração de Coulomb direta e de troca e da integrais radiais mais gerais R^k . Estes coeficientes são utilizados no cálculo dos elementos de matriz do Hamiltoniano;
- Os elementos de matriz de dipolo magnético;
- Os coeficientes angulares dos elementos de matriz reduzida de dipolo e quadrupolo elétrico e
- Valores correspondentes a operadores efetivos de interação de Coulomb $\alpha, \beta, \gamma, T, T_1$ e T_2 que podem ser utilizados nas interações de configurações como spin-spin, órbita-órbita e spin-outras-órbita.

O programa calcula ainda a probabilidade de transição entre níveis de configuração de paridades opostas, o autovalor, autovetor e a respectiva pureza de cada nível além disto apresenta em sua saída outros resultados como as forças de oscilador ponderadas, gf , que estão relacionadas a intensidade das transições, para todas as transições possíveis de dipolo elétrico e os tempos de vida, τ , para cada

nível que são os valores que mais interessam em nosso trabalho.

Com isto temos entre outras coisas os níveis de energia calculados teóricos e para sabermos se seus cálculos foram feitos de maneira correta podemos utilizar alguns conhecimentos empíricos, sabe-se que os níveis de energia teóricos, concordarão melhor com o experimento se os parâmetros de Coulomb R^k , F^k , G^k e ζ_i utilizados forem de 5% a 30% menores que o previsto no cálculo puramente teórico. A opção da porcentagem adequada pode ser utilizada pelo usuário no arquivo de entrada para o programa de ajuste dos níveis de energia, o RCE19. Para a maioria dos átomos neutros os parâmetros devem ser cerca de 80% do valor previsto teoricamente e para átomos altamente ionizados devem estar na faixa de 92% a 95% dos valores previstos teoricamente.

3.5 Ajuste dos Parâmetros

A proposta de nosso trabalho é apresentar valores de gf e tempos de vida τ que estejam em melhor acordo possível com dados observados experimentalmente, assim o programa RCE19 é utilizado para ajustar os valores dos parâmetros radiais e energéticos $[E_w, F^k, G^k, R^k, \zeta_i, \alpha, \beta, \gamma]$ à um conjunto de níveis experimentais, mediante um processo iterativo a partir de aproximação adequadas e do método dos mínimos quadrados não lineares [6], a finalidade básica deste programa é então ajustar os vários parâmetros teóricos citados acima para produzir níveis energéticos

que estejam em melhor acordo com os níveis experimentais conhecidos. Durante o processo de ajuste o usuário tem a possibilidade de excluir níveis de energia ainda não conhecidos, manter qualquer parâmetro fixo em valores específicos, ou grupos de parâmetros podem ser forçados a variar de tal modo que as razões dos valores no grupo permaneçam fixas umas em relação as outras.

O ajuste é feito por um procedimento iterativo até que os valores dos parâmetros a serem ajustados não variem mais de um ciclo para outro, ou por um número máximo de ciclos especificados; a iteração pode ser feita em quaisquer dos esquemas de acoplamento disponíveis no RCG (LS, jj, jK,...). Neste programa as integrais radiais são consideradas simplesmente como parâmetros ajustáveis cujos valores serão determinados para que se obtenha o melhor ajuste entre os autovalores de energia calculados pelo programa RCG e os valores experimentais que foram ajustados pelo programa Elcalc. A precisão do ajuste é dada pelo desvio padrão:

$$S = \left[\frac{\sum_k (E^k - T^k)^2}{N_k - N_p} \right]^{1/2} \quad (3.6)$$

onde E^k são as energias teóricas calculadas pelo programa RCG, T^k são as energias experimentais que foram ajustadas no programa Elcalc, N_k é o número de níveis envolvidos no ajuste e N_p é o número de parâmetros envolvidos no ajuste.

O ajuste pode ser considerado satisfatório se o desvio padrão for menor que

1% do valor médio das energias das configurações envolvidas no ajuste, assim o desvio padrão serve como critério auxiliar para a confirmação de que o conjunto de novos níveis propostos é correto.

Os parâmetros ajustados podem ser usados para um novo cálculo do espectro atômico utilizando novamente o programa RCG que refaz os cálculos chegando a valores mais condizentes às medidas experimentais e podem ser utilizados como um indicador de transições e níveis que ainda estejam faltando. Estes cálculos podem ser feito sem muito trabalho já que o programa RCE19 gera um arquivo de saída, chamado Parvals, que está formatado de maneira adequada para ser utilizado como entrada para o programa RCG.

Neste caso há também uma importante regra a ser observada⁷, que só podem ser ajustadas no máximo 20 configurações de cada paridade ao mesmo tempo, se houver um número superior de configurações o programa é abortado. Portanto se temos mais que o número máximo permitido em alguma das paridades todos os programas descritos anteriormente terão que ser utilizados em fases limitadas pôr este número. Sendo que cada grupo de configurações deverá ser combinado com todos os outros para que todas as combinações possíveis entre as configurações sejam calculadas e seus ajustes serão feitos separadamente por grupos.

Através dos programas que foram descritos anteriormente obtivemos as forças de oscilador ponderadas, gf - values , e os tempos de vida, Lifetimes, para todas as

⁷ Na verdade trata-se de uma limitação do programa disponível na rede de computação do IFGW . Esta limitação poderá ser contornada se o programa fonte for modificado, ou seja, a variável definida para o número de configurações for aumentada. Esta modificação deverá levar em conta a capacidade de memória da máquina a ser utilizada.

transições dos íons de Si II, Si VIII e Si IX que são tema deste projeto. Estes valores são apresentados nas cópias dos trabalhos, tabelas 1 e 2, que encontram-se no apêndice ao final desta tese.

Capítulo 4

Resultados para os Íons de Si II, Si VIII e Si IX

O objetivo principal deste trabalho é apresentar as forças de oscilador ponderadas (gf) e os tempos de vida (τ) para os íons de silício uma vez, sete vezes e oito vezes ionizado, Si II, Si VIII e Si IX respectivamente. A interpretação do cálculo destas duas grandezas é de importância fundamental por exemplo na astrofísica pois o silício nos seus vários graus de ionização é um dos elementos mais comuns observados em espectros de absorção e emissão de fontes astrofísicas como o meio interestelar, “os quasares”, as estrelas quentes e o próprio sol. O gf é uma quantidade física que está relacionado com a intensidade da linha espectral (I) e com a probabilidade de transição e é utilizado para determinar entre outras coisas a abundância, temperaturas e densidade dessas fontes astrofísicas.

Neste capítulo apresentaremos uma breve descrição de como estas grandezas foram obtidas e posteriormente colocamos os resultados obtidos para cada íon com todos os dados relevantes para sua caracterização.

4.1 Análise dos Íons

Para o cálculo das forças de oscilador ponderadas e dos tempos de vida dos espectros do Si II, Si VIII e Si IX foram coletados vários dados de trabalhos experimentais, como níveis energéticos, comprimentos de onda de transições de dipolo elétrico e as incertezas atribuídas a cada comprimento de onda, que geralmente estão ligadas a precisão do experimento. A partir destes dados experimentais todos os cálculos foram realizados através do pacote computacional composto pelos programas Elcalc, Strans, Cowan1 (RCN e RCN2), Cowan2 (RCG) e o RCE19 que foram descritos no capítulo anterior. Podemos dividir nosso trabalho em várias etapas interligadas como veremos.

Na primeira etapa construímos um arquivo num formato pré determinado com todos os valores de energia das configurações, comprimentos de onda e suas respectivas incertezas. Este arquivo serve como entrada para o programa Elcalc que irá “calcular” os valores de energia gerando resultados que estejam em melhor acordo com as incertezas dos vários trabalhos utilizados como fonte. Uma vez que temos

“novos níveis” provenientes do ajuste feito pelo programa Elcalc, precisamos recalcular os comprimentos de onda de acordo com estes níveis e para isto utilizamos o programa Strans, que toma como base para este cálculo os níveis ajustados pelo programa Elcalc, bem como as transições experimentais e suas respectivas incertezas. Com isto finalizamos a primeira etapa de nosso trabalho tendo como resultado os níveis energéticos experimentais ajustados mediante a incerteza dada pelo experimento e os comprimentos de onda gerados por estes níveis ajustados.

Na segunda etapa de nosso trabalho temos que calcular as funções de onda e para isto utilizamos o programa Cowan1 composto pelos sub-programas RCN e RCN2. Uma vez que este programa tenha gerado um arquivo de saída com todos os parâmetros energéticos teóricos como os valores das funções de onda, integrais de Coulomb, integrais radiais de dipolo e quadrupolo elétrico, utilizamos este arquivo como entrada para o programa Cowan2 (RCG) que irá calcular entre outras coisas as forças de oscilador ponderadas, os tempos de vida, as probabilidades de transição, os fatores angulares, os níveis de energia e a composição de cada nível, sendo que os valores de gf e tempos de vida aqui previstos são teóricos. Para que estes valores estejam em melhor acordo com dados observados experimentalmente, utilizamos os resultados obtidos dos níveis de energia ajustados pelo programa Elcalc para otimizar os parâmetros eletrostáticos mediante o procedimento dos mínimos quadrados usando o programa RCE19.

A terceira etapa consiste de fazer o ajuste entre os parâmetros mediante o

programa RCE19 até obtermos o menor desvio quadrático possível. Nesta etapa temos a liberdade de interagir no processo de cálculo e a qualidade dos resultados finais dependerão diretamente das “escolhas” feitas durante o ajuste.

A quarta e última etapa consiste de utilizarmos os novos valores ajustados dos parâmetros eletrostáticos como entrada para o programa Cowan2 (RCG) que será “rodado” novamente produzindo agora valores de gf e tempos de vida que estão em maior consonância com os resultados experimentais. Este procedimento foi repetido para os três íons estudados, a seguir apresentamos a análise de cada um deles separadamente.

Todos os resultados aqui descritos como: níveis de energia, comprimentos de onda calculados e observados, forças de oscilador e tempos de vida de um determinado nível, são apresentadas nas cópias dos trabalhos que encontram-se no apêndice ao final desta tese

4.2 Si II - Silício uma vez ionizado

O espectro do Si II foi analisado pela primeira vez por Fowler (1925) [13], que classificou as linhas desde o vermelho até 2000Å. Posteriormente novas observações do espectro do Si II na faixa de 700Å a 9500Å foram descritas por Shenstone (1961) [14], neste trabalho 300 novas linhas foram listadas em adição aos trabalhos anteriores apresentados para o espectro deste íon. Edlén (1963) [15] apresentou uma compilação de um conjunto de dados calculados para comprimentos de onda no extremo ultravioleta dando uma explanação sobre sua natureza e origem. Kaufman (1966) [16] usando os valores de Shenstone [14] acima de 2000Å, apresentou um conjunto de níveis de energia confirmando ou modificando os comprimentos de onda calculados para o espectro deste íon. Moore (1971) [17] resumiu os níveis de energia apresentados anteriormente por Fowler [13]. Como os trabalhos até este ponto apresentavam uma resolução limitada, Beyer (1973) [18] decidiu repetir as medidas espectrais na faixa entre 500Å - 1200Å com melhor resolução espectral, utilizando uma técnica de feixe de gás, obtendo então o espectro do Si em vários graus de ionização na região do VUV. Mais tarde Martin e Zalubas (1983) [19] apresentaram todos os níveis de energia para o Si II e Kelly (1987) [20] resumiu todos os comprimentos de onda para os Si II abaixo de 3400Å. Com isto podemos notar que o Si II tem sido amplamente investigado tanto teoricamente como experimentalmente, isto porque ele é um dos mais comuns íons observado em espectros de absorção e emissão de fontes astrofísicas como o sol por exemplo [5].

4.2.1 Dados e Resultados para o Si II

- A configuração para o estado fundamental é $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$ com o termo 2P .
- Pertence a sequência isoeletrônica do Al I.
- Potencial de ionização é $131\,838,4\text{ cm}^{-1}$ (16,346 eV).
- Possui 146 níveis medidos experimentalmente, dos quais 64 níveis são de paridade par e 82 de paridade ímpar.
- Possui 45 configurações no total, das quais 22 configurações são de paridade par e 23 configurações são de paridade ímpar que são apresentadas na tabela 1.
- Foram observadas experimentalmente 405 transições de dipolo elétrico. Uma representação esquemática das transições entre as configurações para o Si II será apresentada junto dos demais resultados tabelados (Figura 1). Somente para este íon apresentaremos uma representação individual para cada configuração de paridade par com todas as demais configurações de paridade ímpar (Figura 2-23). Tomamos esta opção visto que o diagrama representado na figura 1 ficou um pouco confuso dado o grande número de transições entre algumas configurações.

- Foram calculados os tempos de vida para os 146 níveis experimentais que podem ser vistos na cópia do trabalho que encontra-se no apêndice ao final desta tese (parte A₃).
- Foram calculadas as forças de oscilador ponderadas para as 405 transições de dipolo elétrico medidas experimentalmente, os valores finais de gf encontram-se na cópia do trabalho no apêndice ao final desta tese (parte A₃).
- As tabelas 2 e 3 apresentam os parâmetros eletrostáticos de paridade ímpar e de paridade par respectivamente. As integrais de interação, que somavam mais de 400 entre as duas paridades, foram omitidas pelo número excessivo de tabelas que acarretariam se fossem apresentadas. Mas uma informação relevante que podemos dar é que todas as integrais de interação ficaram fixas em seu valor HFR.
- No ajuste dos mínimos quadrados foram obtidos os seguintes valores para os desvios padrão:

Paridade Ímpar 435cm^{-1}

Paridade Par 460cm^{-1}

TABELA 1 – CONFIGURAÇÕES PARA O Si II

Configurações de Paridade Par

$1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p^2$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 4s$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3d$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 5s$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 4d$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 6s$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 5d$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 5g$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 7s$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 6d$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 6g$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 8s$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 7d$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 7g$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 9s$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 8d$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 8g$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 9g$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 10g$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 11g$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p 4p$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p 4f$

Configurações de Paridade Ímpar

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^{(a)}$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 4p$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 4f$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 5p$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p 3d$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 5f$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 6p$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p 4s$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 7p$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 6f$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 7f$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3p^3$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 8p$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 8f$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 9p$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 9f$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 10p$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 10f$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 11f$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p 4d$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p 5s$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p 6s$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p 5d$

^(a) Configuração do estado fundamental.

TABELA 2 – PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE ÍMPAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão VA HFR
3s ² 3p	E _{av}	0	9051 (411)	-
	ζ _{3p}	170 ^c		
3s ² 4p	E _{av}	82532	82808 (398)	1,003
	ζ _{4p}	35 ^c		
3s ² 5p	E _{av}	105198	104539 (563)	0,994
	ζ _{5p}	14 ^c		
3s ² 6p	E _{av}	115220	117770 (455)	1,022
	ζ _{6p}	7 ^c		
3s ² 7p	E _{av}	120602	124706 (832)	1,034
	ζ _{7p}	4 ^c		
3s ² 8p	E _{av}	123834	124622 (759)	1,006
	ζ _{8p}	3 ^c		
3s ² 9p	E _{av}	125928	126208 (433)	1,002
	ζ _{9p}	2 ^c		
3s ² 10p	E _{av}	127363	126470 (431)	0,993
	ζ _{10p}	1 ^c		

TABELA 2 – PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE ÍMPAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão VA HFR
3s ² 4f	E _{av}	104518	115597 (1108)	1,106
	ζ _{4f}	0 ^c		
3s ² 5f	E _{av}	114780 ^c		
	ζ _{5f}	0 ^c		
3s ² 6f	E _{av}	123323	123949 (468)	1,005
	ζ _{6f}	0 ^c		
3s ² 7f	E _{av}	123649	124712 (576)	1,009
	ζ _{7f}	0 ^c		
3s ² 8f	E _{av}	125801	124883 (511)	0,993
3s ² 9f	E _{av}	127272	126401 (398)	0,993
	ζ _{9f}	0 ^c		
3s ² 10f	E _{av}	128322	127439 (397)	0,993
	ζ _{10f}	0 ^c		
3s ² 11f	E _{av}	129096	131860 (390)	
	ζ _{11f}	0 ^c		

TABELA 2 – PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE ÍMPAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão VA HFR
3s3p3d	E _{av}	125237	127799 (177)	1,021
	ζ _{3p}	196 ^c		
	ζ _{3d}	1 ^c		
	F ² (3p3d)	27518	19705 (1343)	0,716
	G ¹ (3s3p)	60585	45494 (1018)	0,751
	G ² (3s3d)	20947	16542 (1161)	0,790
	G ¹ (3p3d)	32519	32810 (1079)	1,009
	G ³ (3p3d)	19258	14173 (2246)	0,736
3s3p4d	E _{av}	155236	161478 (231)	1,040
	ζ _{3p}	210 ^c		
	ζ _{4d}	1 ^c		
	F ² (3p4d)	7635 ^c		
	G ¹ (3s3p)	62606	47012 (1052)	0,751
	G ² (3s4d)	5649 ^c		
	G ¹ (3p4d)	7210 ^c		
	G ³ (3p4d)	4578 ^c		
3s3p5d	E _{av}	167489	172660 (364)	1,031
	ζ _{3p}	213 ^c		
	ζ _{5d}	0 ^c		
	F ² (3p5d)	3290 ^c		

TABELA 2 – PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE ÍMPAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão VA HFR
3s3p5d	G ¹ (3s3p)	62927	47253 (1058)	0,751
	G ² (3s5d)	2438 ^c		
	G ¹ (3p5d)	2934 ^c		
	G ³ (3p5d)	1912 ^c		
3s3p4s	E _{av}	120674	125664 (266)	1,041
	ζ _{3p}	206 ^c		
	G ¹ (3s3p)	61969	52161 (936)	0,842
	G ⁰ (3s4s)	3163 ^c		
	G ¹ (3p4s)	4373 ^c		
3s3p5s	E _{av}	153559	160219 (288)	1,043
	ζ _{3p}	212 ^c		
	G ¹ (3s3p)	62804	52864 (948)	0,842
	G ⁰ (3s5s)	944 ^c		
	G ¹ (3p5s)	1236 ^c		
3s3p6s	E _{av}	166717	173848 (976)	1,043
	ζ _{3p}	214 ^c		
	G ¹ (3s3p)	63006	53033 (951)	0,842
	G ⁰ (3s6s)	418 ^c		
	G ¹ (3p6s)	545 ^c		

TABELA 2 – PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE ÍMPAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão VA HFR
3p ³	E _{av}	130457	138871 (475)	1,064
	F ² (3p3p)	41942 ^c		
	α _{3p}	0 ^c		
	ζ _{3p}	177 ^c		

^a Parâmetros usados no ajuste dos mínimos quadrados para as configurações de paridade ímpar. O método usado foi Hartree-Fock Relativístico (HFR).

^b O desvio padrão para os parâmetros são dados entre parênteses.

^c Estes parâmetros foram mantidos fixos durante o ajuste dos mínimos quadrados.

TABELA 3. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE PAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
3s 3p ²	E _{av}	56068	62325 (192)	1,116
	F ² (3p3p)	41756	36346 (856)	0,870
	α	600 ^c		
	ζ_{3p}	230 ^c		
	G ¹ (3s3p)	57369	42411 (428)	0,739
3s ² 3d	E _{av}	73343	67615 (673)	0,922
	ζ_{3d}	1		
3s ² 4d	E _{av}	101443	99646 (352)	0,982
	ζ_{4d}	0 ^c		
3s ² 5d	E _{av}	113276	112085 (333)	0,989
	ζ_{5d}	0 ^c		
3s ² 6d	E _{av}	119472	118437 (329)	0,991
	ζ_{6d}	0 ^c		
3s ² 7d	E _{av}	123121	122144 (328)	0,992
	ζ_{7d}	0 ^c		
3s ² 8d	E _{av}	125451	133104 (330)	1,061
	ζ_{8d}	0 ^c		

TABELA 3. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE PAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
3s ² 4s	E _{av}	66604	67325 (469)	1,011
3s ² 5s	E _{av}	99152	98052 (461)	9,936
3s ² 6s	E _{av}	112244	111222 (461)	0,991
3s ² 7s	E _{av}	118917	117941 (460)	0,992
3s ² 8s	E _{av}	122778	121835 (460)	0,992
3s ² 9s	E _{av}	125235	132607 (460)	1,059
3s ² 5g	E _{av}	115129 ^c		
	ζ _{5g}	0 ^c		
3s ² 6g	E _{av}	120.510 ^c		
	ζ _{6g}	0 ^c		
3s ² 7g	E _{av}	123.763 ^c		
	ζ _{7g}	0 ^c		
3s ² 8g	E _{av}	125.875 ^c		
	ζ _{8g}	0 ^c		

TABELA 3. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE PAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
3s ² 9g	E _{av}	127.323 ^c		
	ζ _{9g}	0 ^c		
3s ² 10g	E _{av}	128.358 ^c		
	ζ _{10g}	0 ^c		
3s ² 11g	E _{av}	129.124 ^c		
	ζ _{11g}	0 ^c		
3s 3p 4p	E _{av}	136075	139664 (149)	1,026
	ζ _{3p}	232 ^c		
	ζ _{4p}	35 ^c		
	F ² (3p4p)	8572 ^c		
	G ¹ (3s3p)	50167 ^c		
	G ¹ (3s4p)	4813 ^d	8832 (234)	1,835
	G ⁰ (3p4p)	3580 ^d	6571 (171)	1,835
	G ² (3p4p)	3600 ^d	6607 (175)	1,835
3s 3p 4f	E _{av}	158769	164950 (109)	1,039
	ζ _{3p}	0.214 ^c		
	ζ _{4f}	0 ^c		
	F ² (3p4f)	4.364 ^c		
	G ¹ (3s3p)	50.408 ^c		

TABELA 3. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE PAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
3s 3p 4f	G ³ (3s4f)	0.464 ^c		
	G ² (3p4f)	1.083 ^c		
	G ⁴ (3p4f)	0.710 ^c		

^a Parâmetros usados no ajuste dos mínimos quadrados para as configurações de paridade par. O método usado foi Hartree-Fock Relativístico (HFR).

^b O desvio padrão para os parâmetros são dados entre parênteses.

^c Estes parâmetros foram mantidos fixos durante o ajuste dos mínimos quadrados.

^d Estes parâmetros variaram na mesma proporção durante o ajuste dos mínimos quadrados.

Figura 1 Representação Esquemática das Transições entre as Configurações do Si II

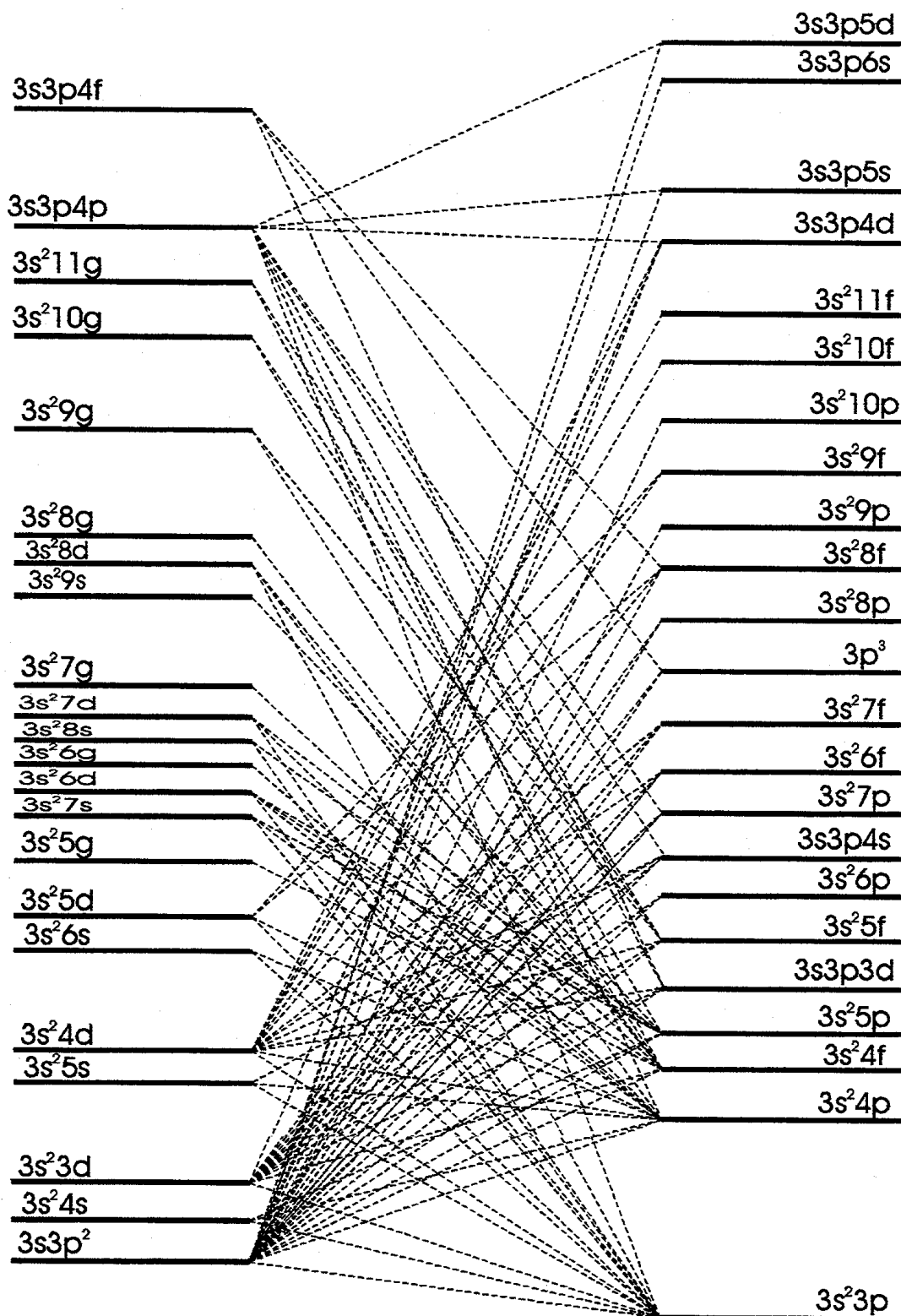


Figura 2 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s3p^2$ do Si II

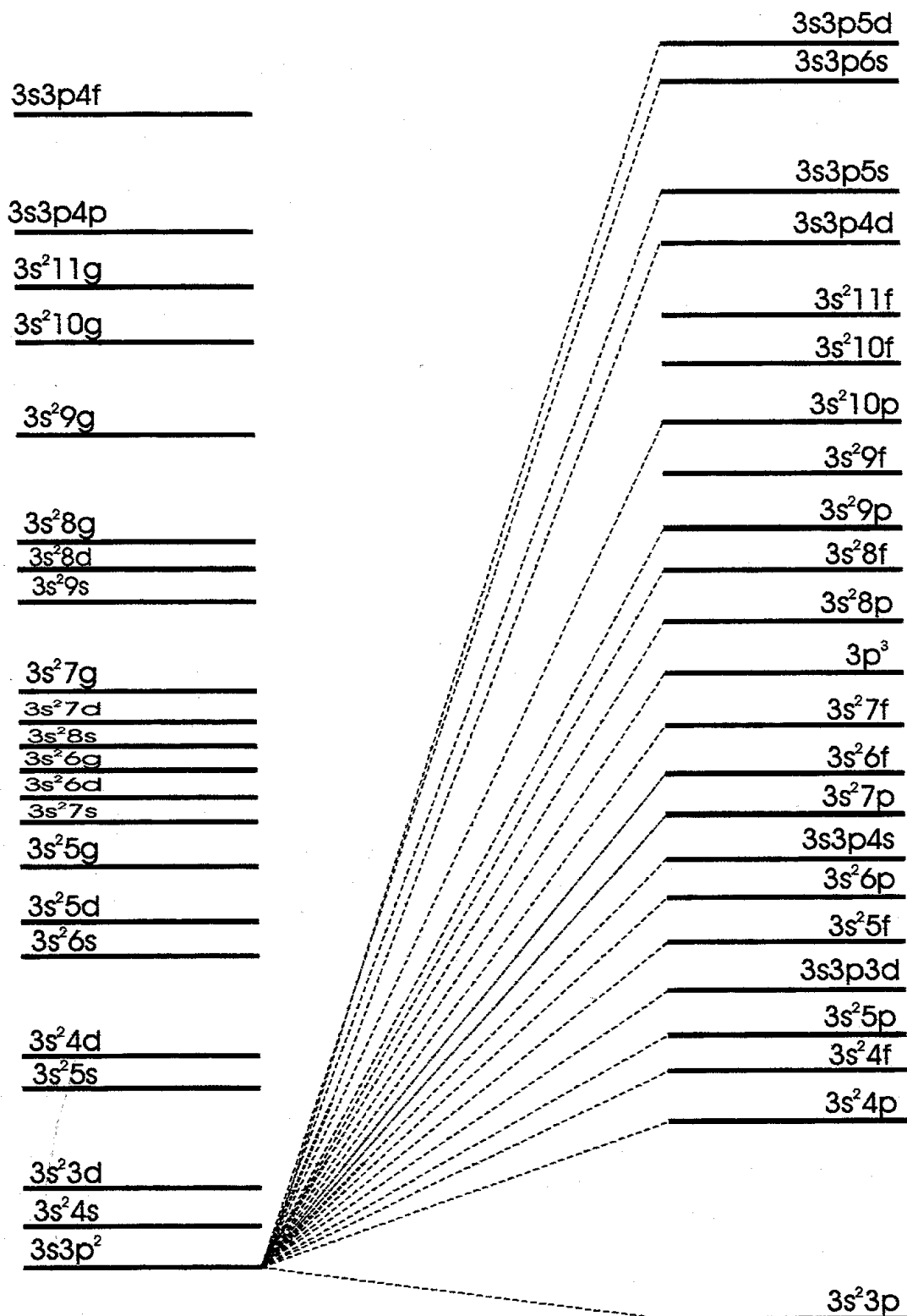


Figura 3 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^2 4s$ do Si II

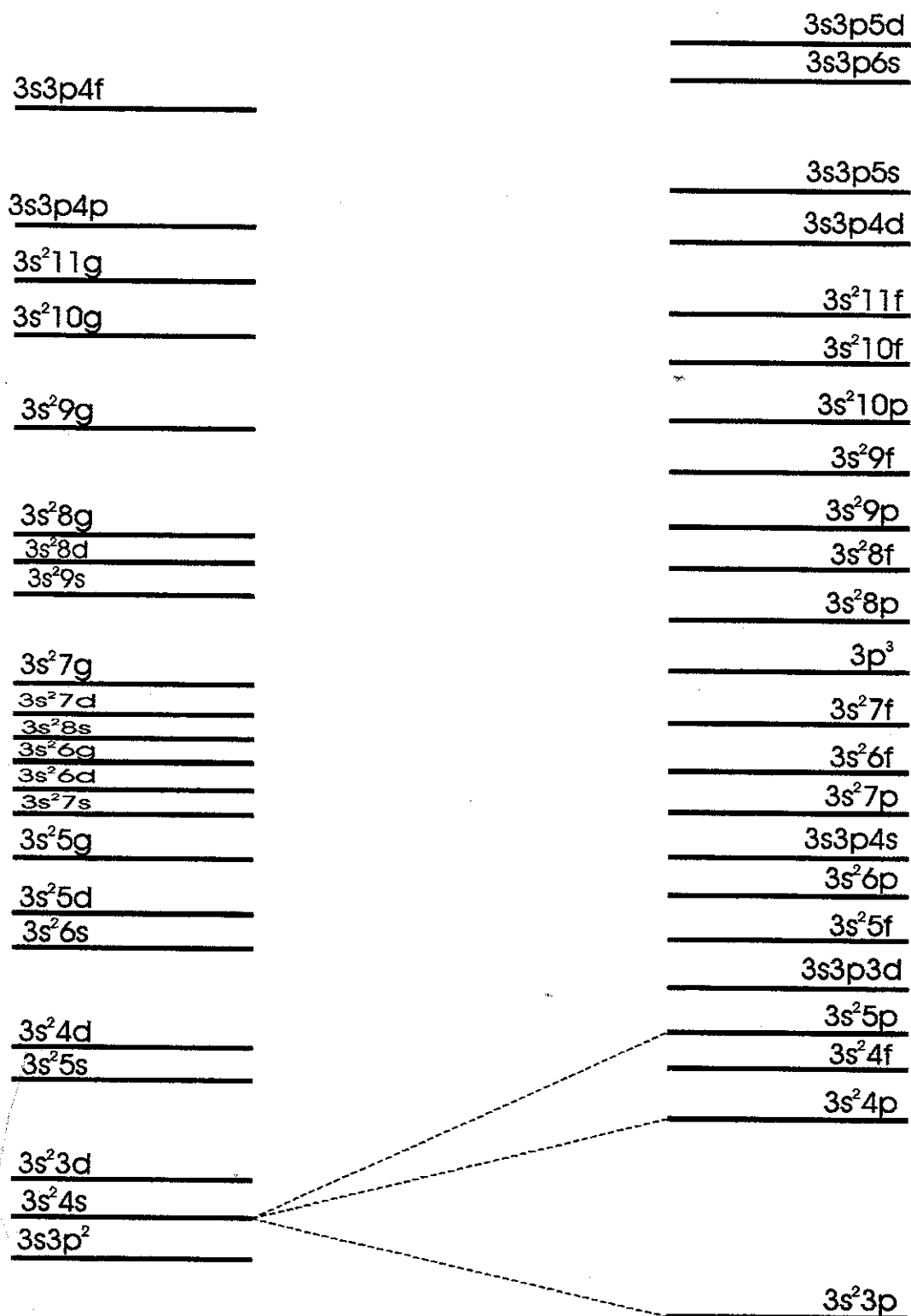


Figura 4 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^23d$ do Si II

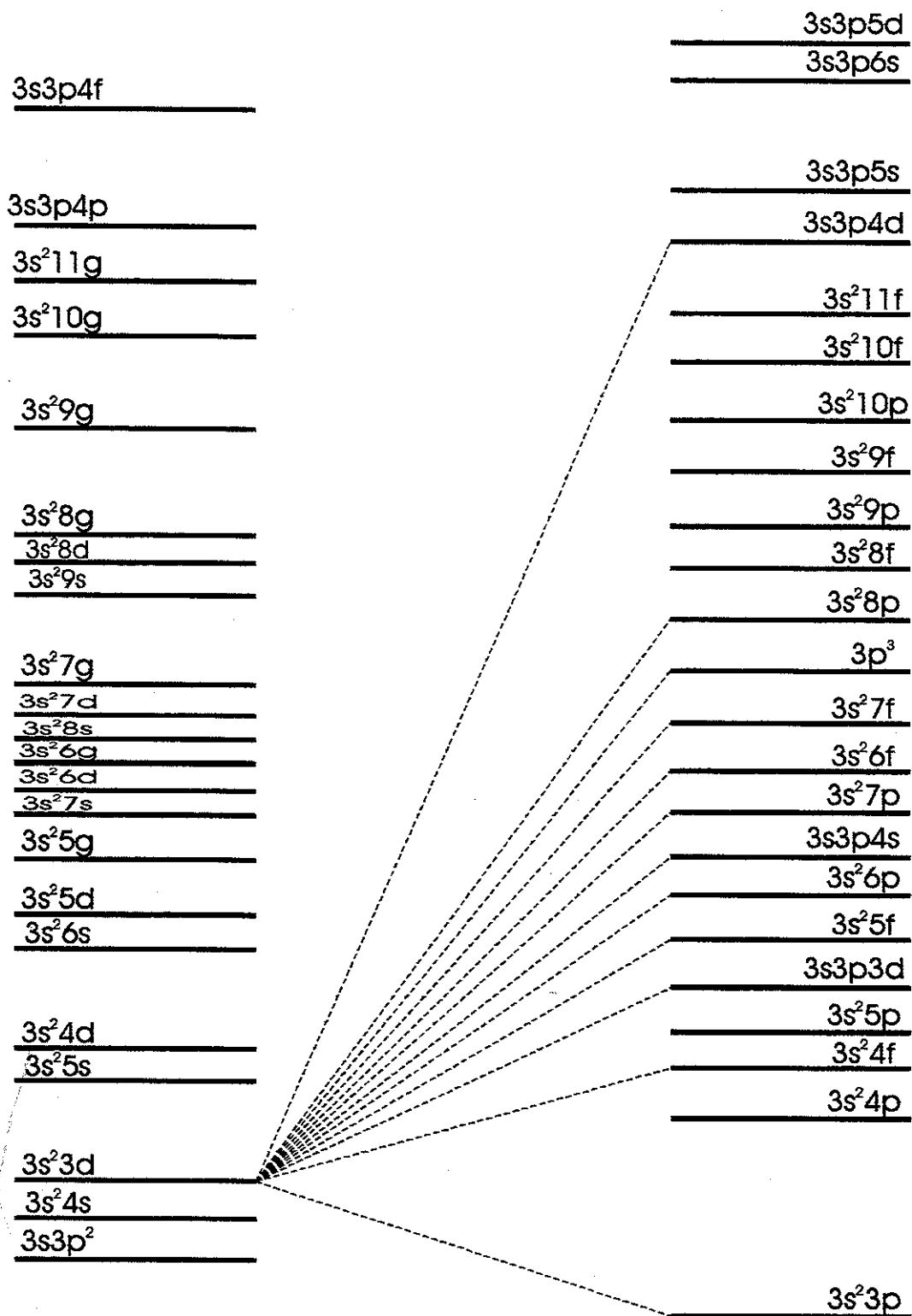


Figura 5 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^25s$ do Si II

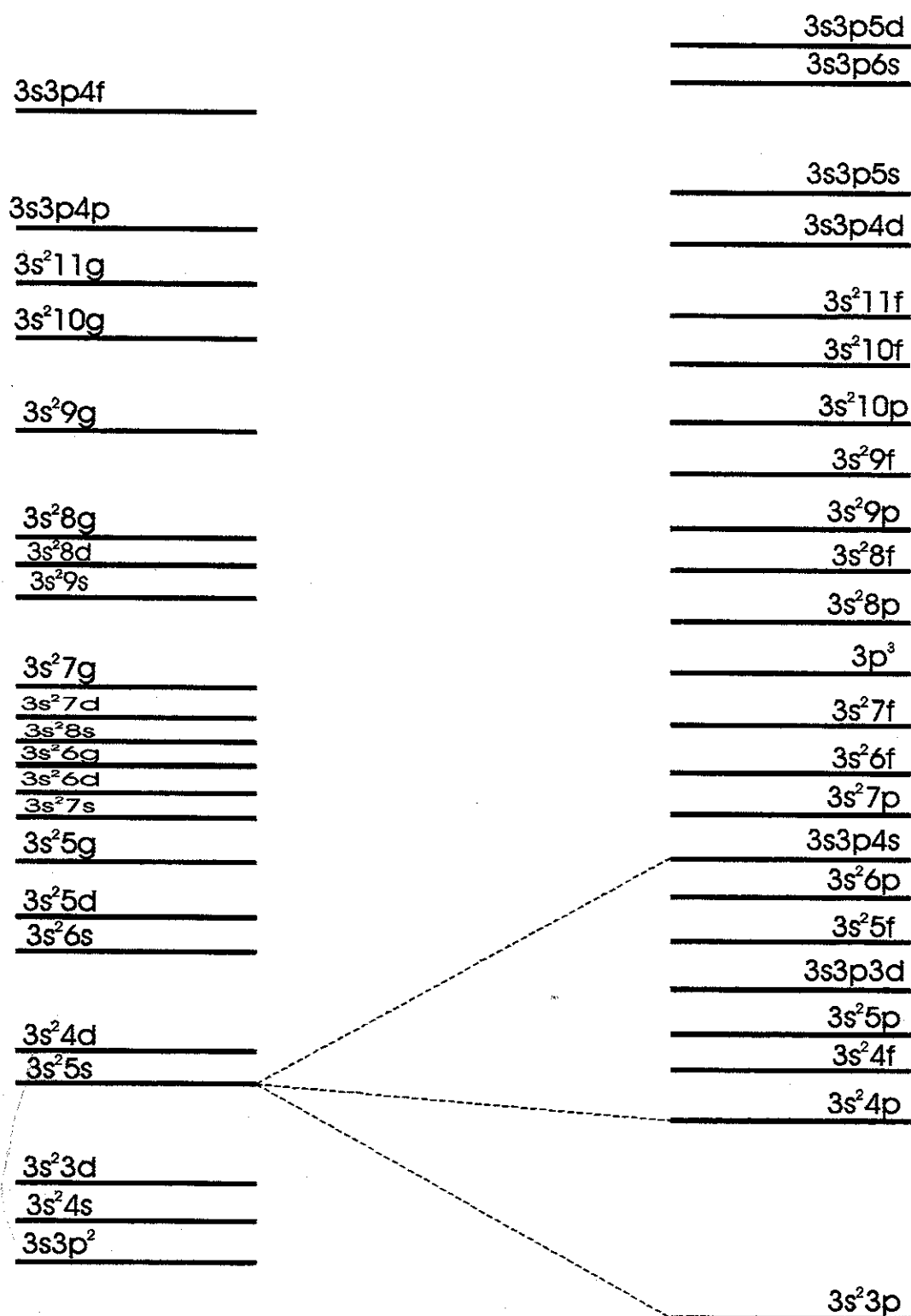


Figura 6 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^24d$ do Si II

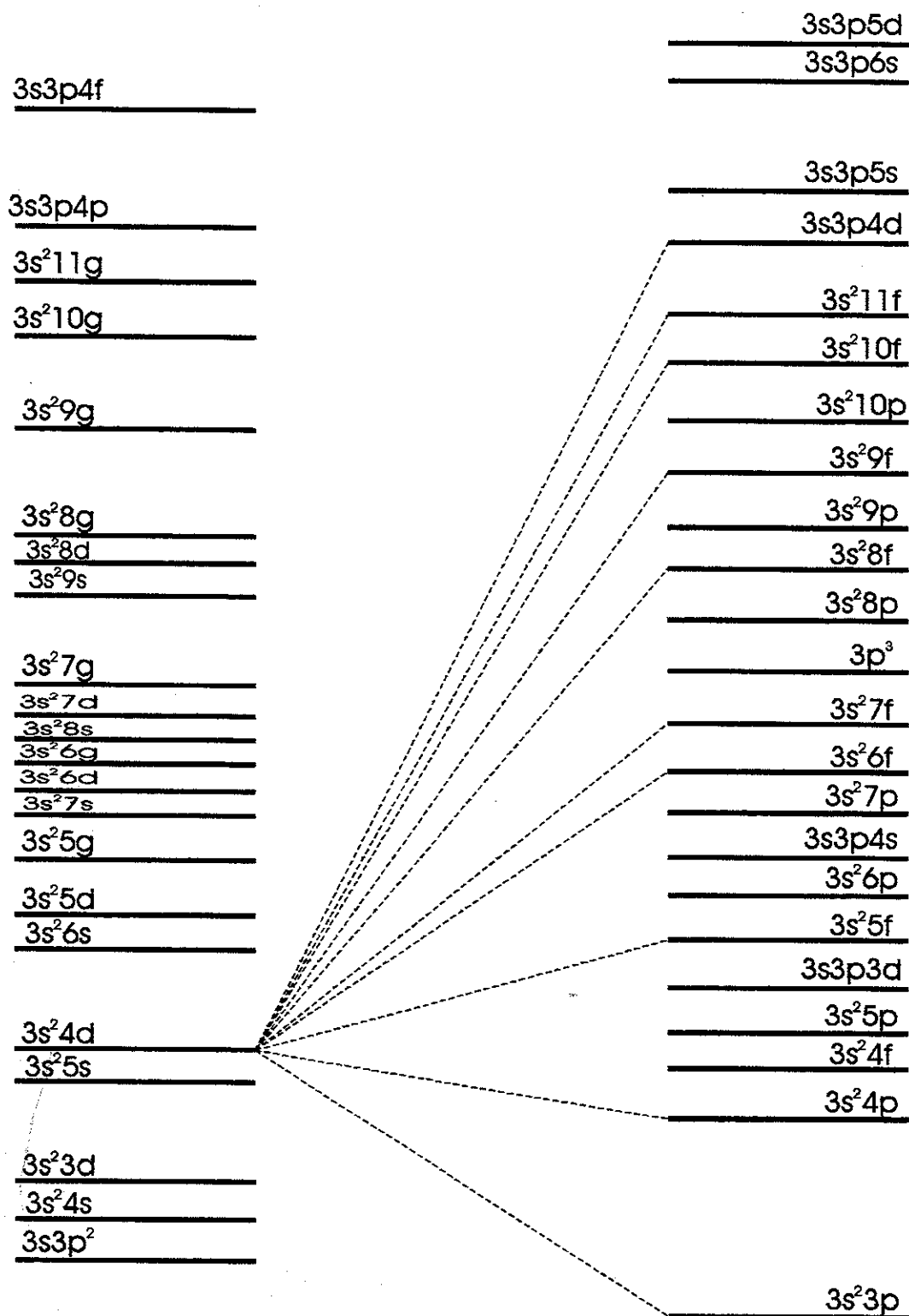


Figura 7 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^26s$ do Si II

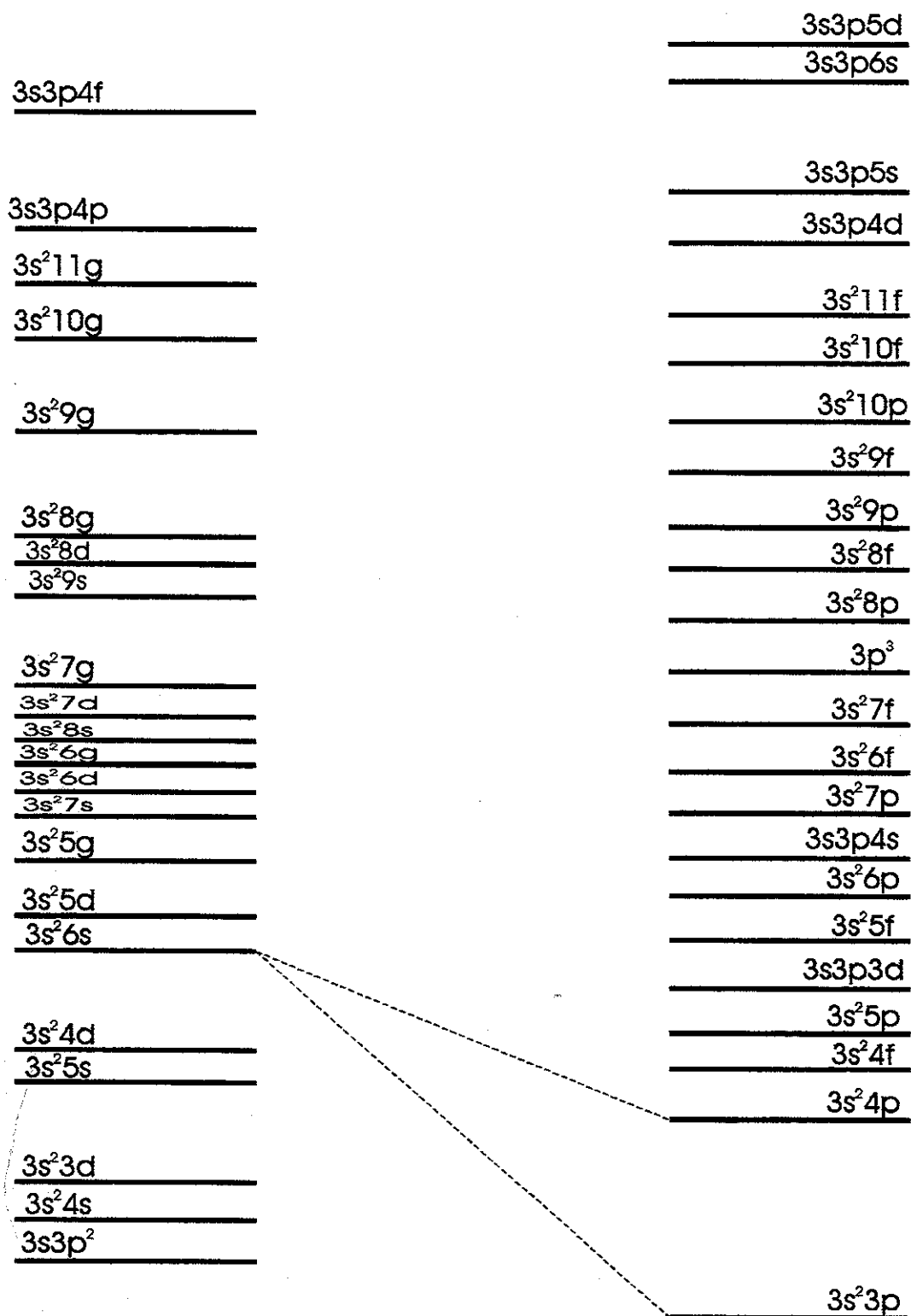


Figura 8 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^25d$ do Si II

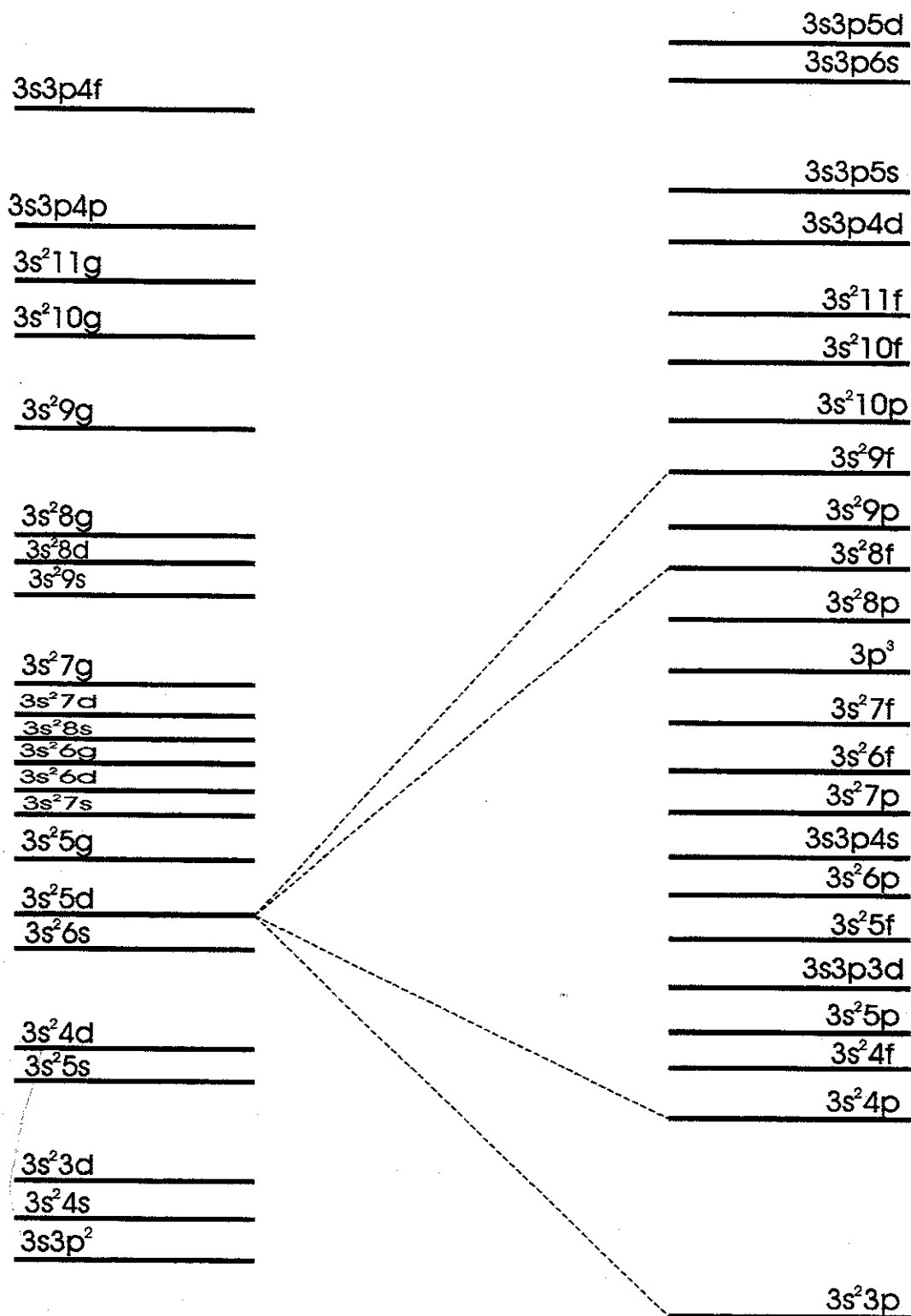


Figura 9 Representação Esquemática da Transição possível com a Configuração $3s^25g$ do Si II

		<u>3s3p5d</u>
		<u>3s3p6s</u>
<u>3s3p4f</u>		
		<u>3s3p5s</u>
<u>3s3p4p</u>		<u>3s3p4d</u>
<u>3s²11g</u>		<u>3s²11f</u>
<u>3s²10g</u>		<u>3s²10f</u>
		<u>3s²10p</u>
<u>3s²9g</u>		<u>3s²9f</u>
		<u>3s²9p</u>
<u>3s²8g</u>		<u>3s²8f</u>
<u>3s²8d</u>		<u>3s²8p</u>
<u>3s²9s</u>		<u>3p³</u>
<u>3s²7g</u>		<u>3s²7f</u>
<u>3s²7d</u>		<u>3s²6f</u>
<u>3s²8s</u>		<u>3s²7p</u>
<u>3s²6g</u>		<u>3s3p4s</u>
<u>3s²6d</u>		<u>3s²6p</u>
<u>3s²7s</u>		<u>3s²5f</u>
<u>3s²5g</u>		<u>3s3p3d</u>
<u>3s²5d</u>		<u>3s²5p</u>
<u>3s²6s</u>		<u>3s²4f</u>
		<u>3s²4p</u>
<u>3s²4d</u>		
<u>3s²5s</u>		
<u>3s²3d</u>		
<u>3s²4s</u>		
<u>3s3p²</u>		
		<u>3s²3p</u>

Figura 10 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^27s$ do Si II

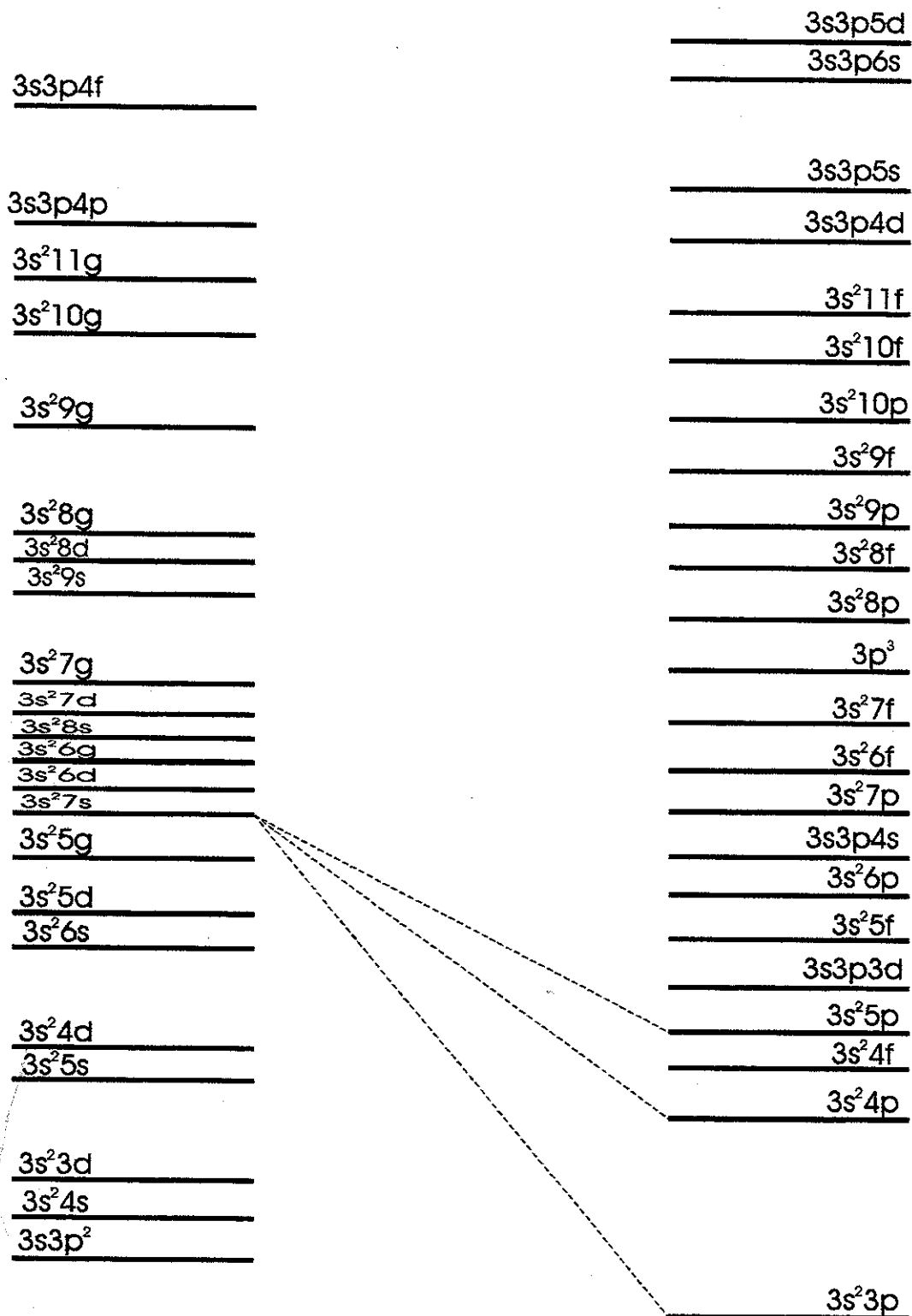


Figura 11 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^26d$ do Si II

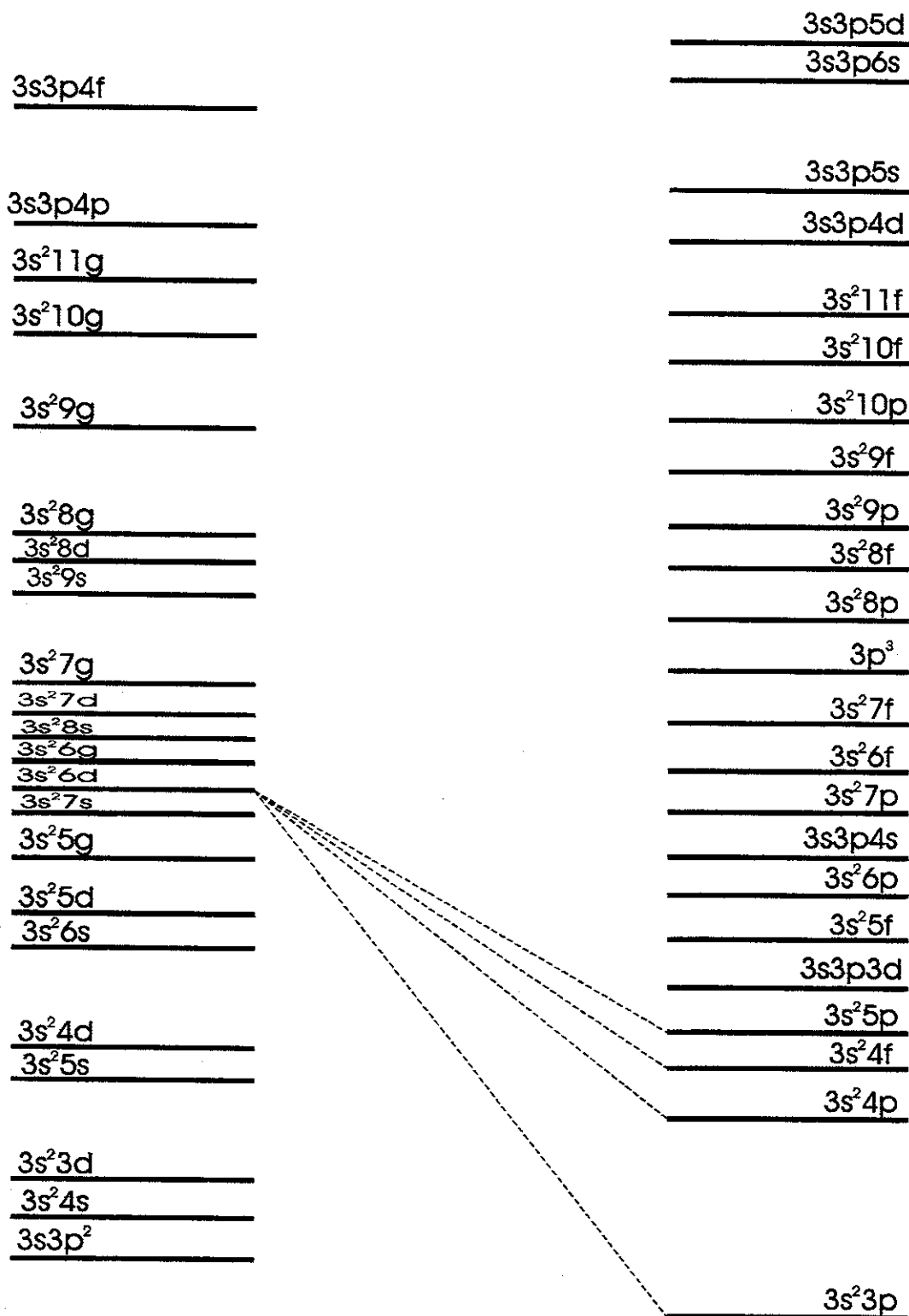


Figura 12 Representação Esquemática da Transição possível com a Configuração $3s^26g$ do Si II

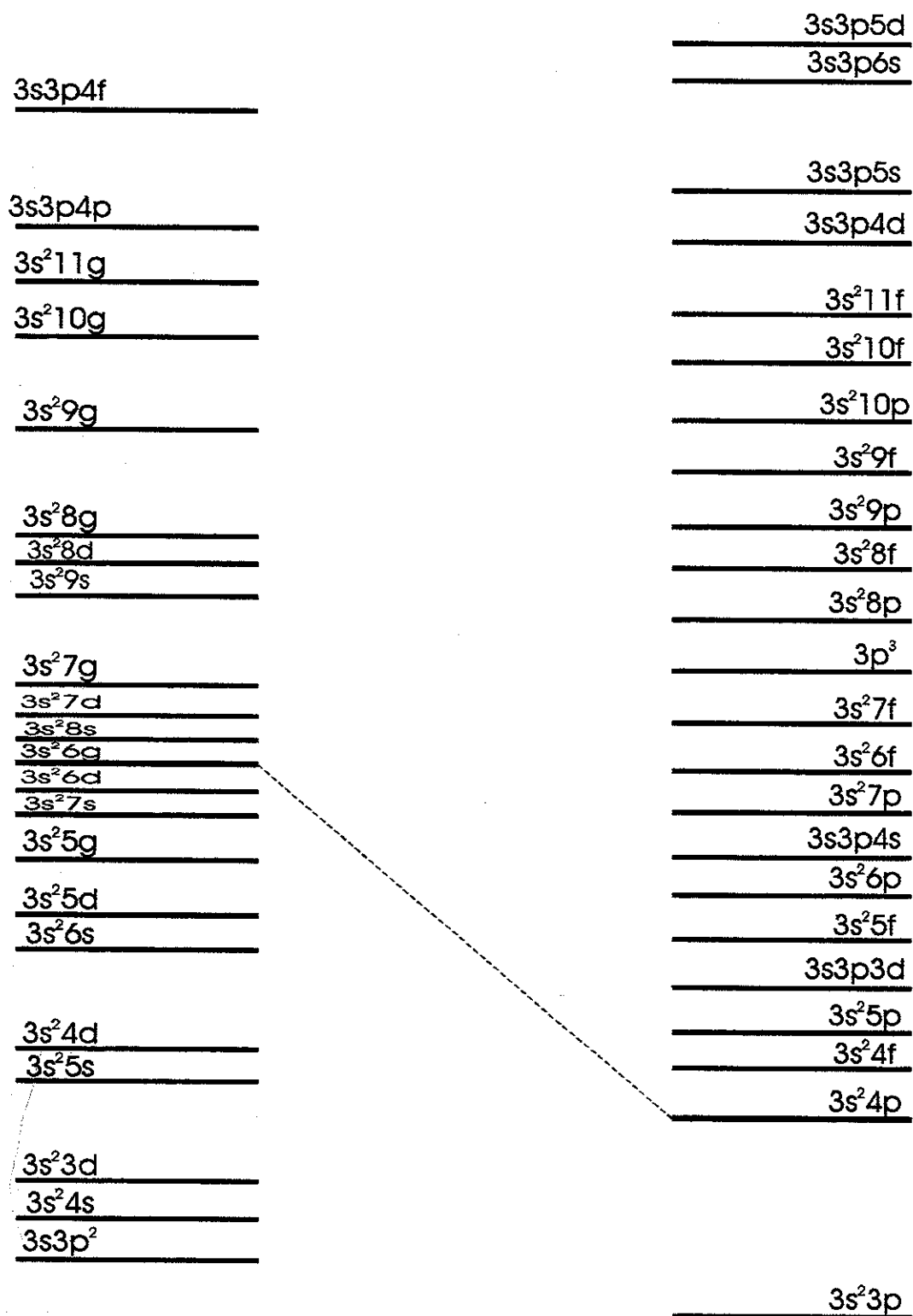


Figura 13 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^28s$ do Si II

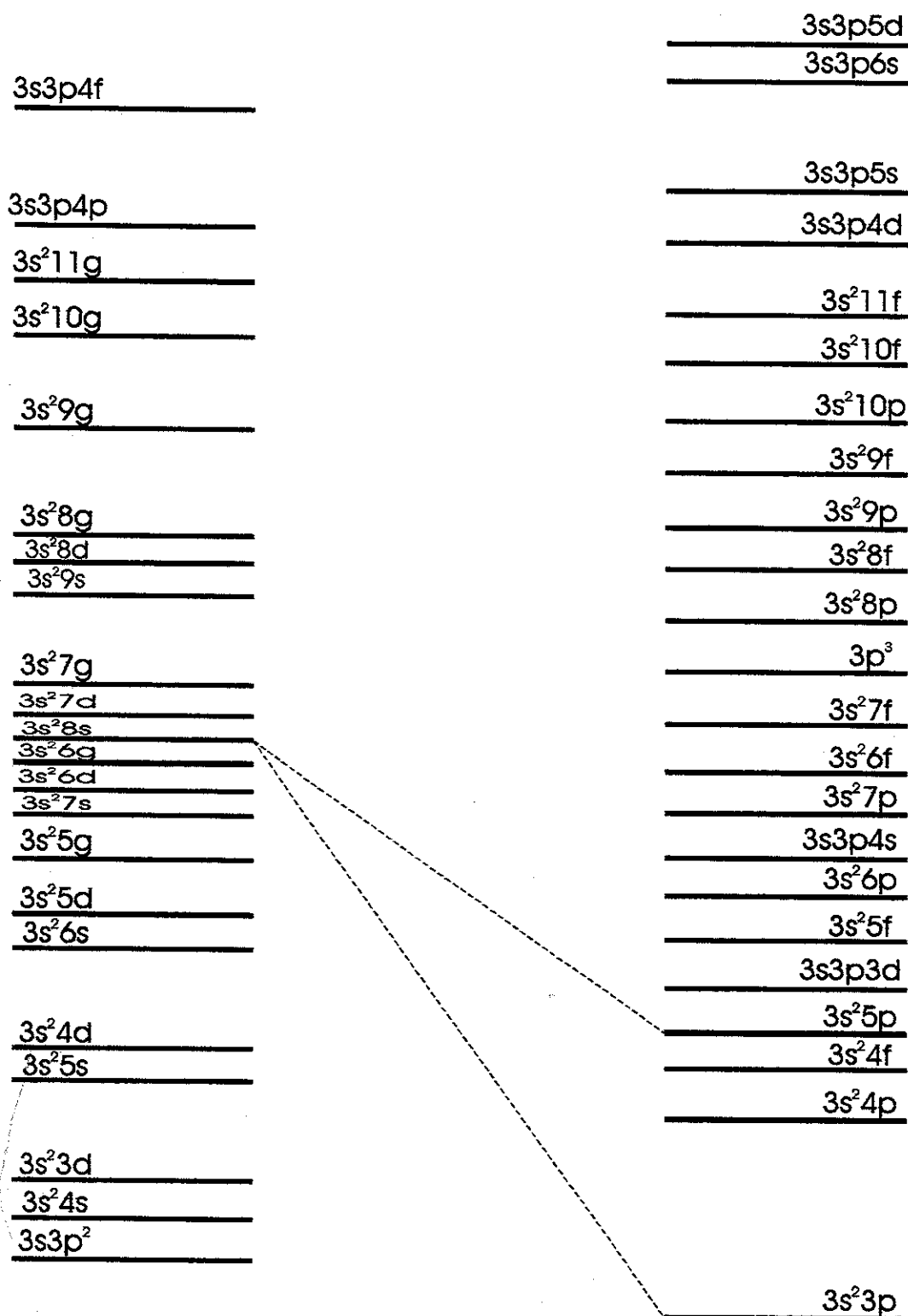


Figura 14 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^27d$ do Si II

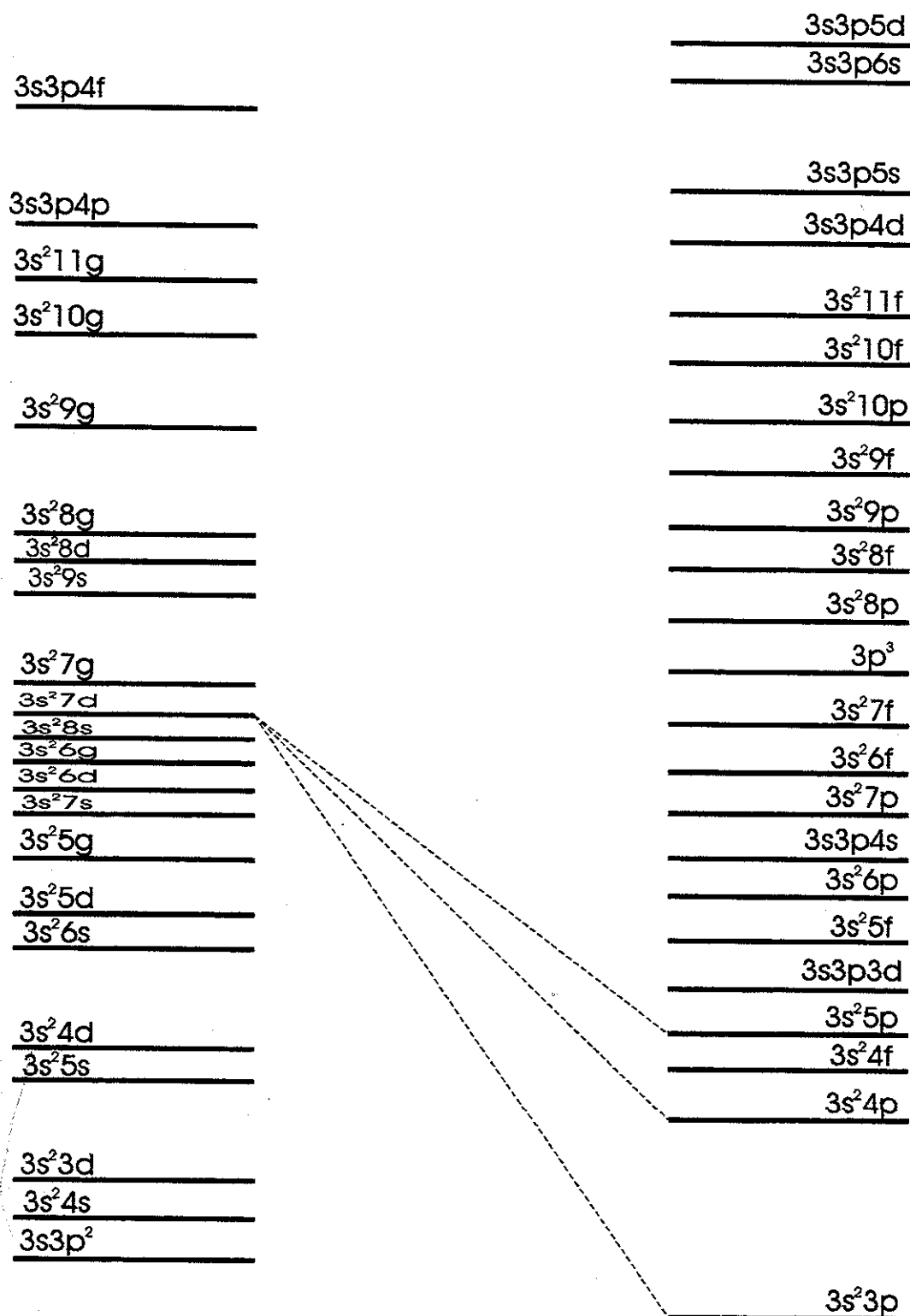


Figura 15 Representação Esquemática da Transição possível com a Configuração $3s^27g$ do Si II

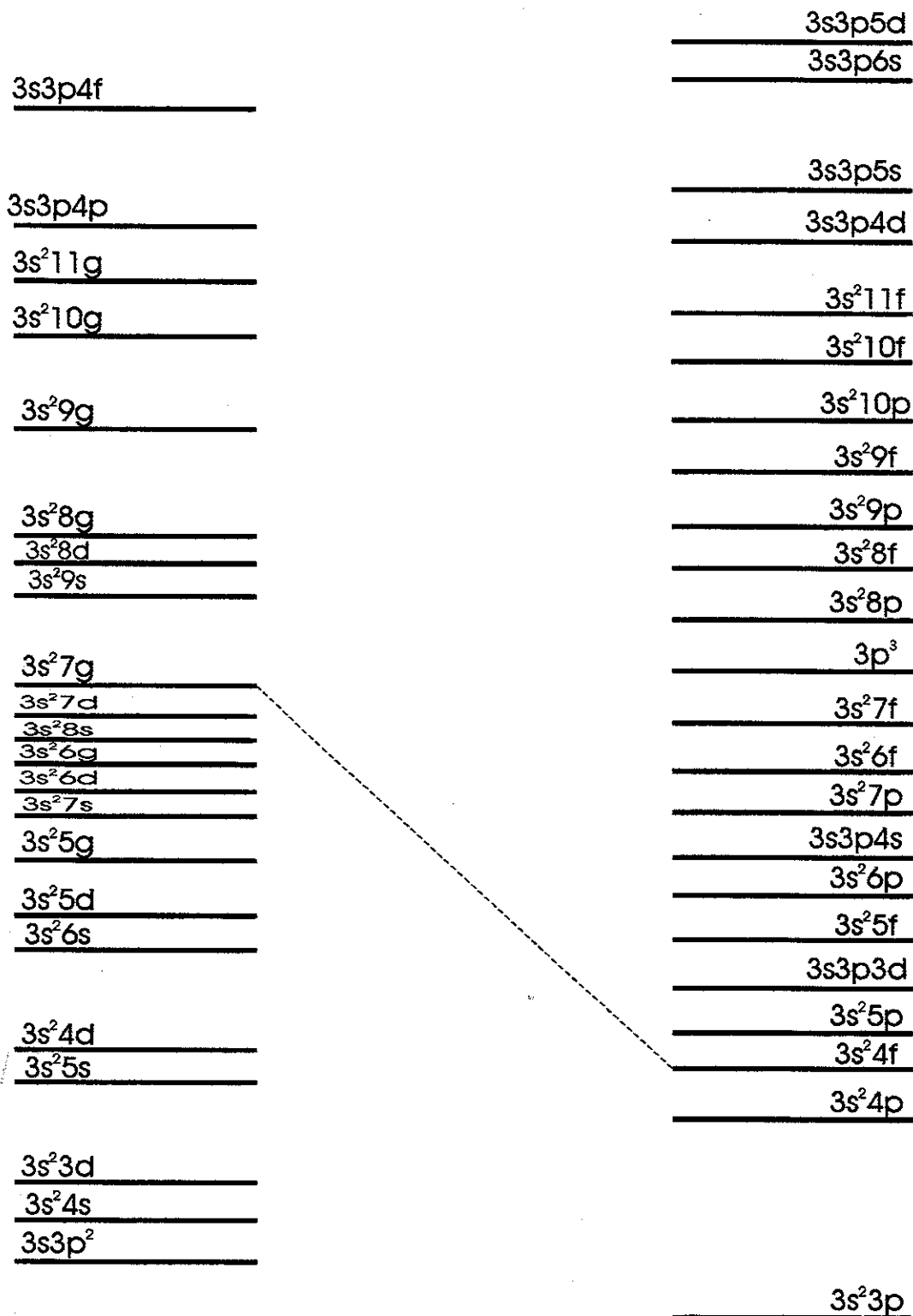


Figura 16 Representação Esquemática da Transição possível
com a Configuração $3s^29s$ do Si II

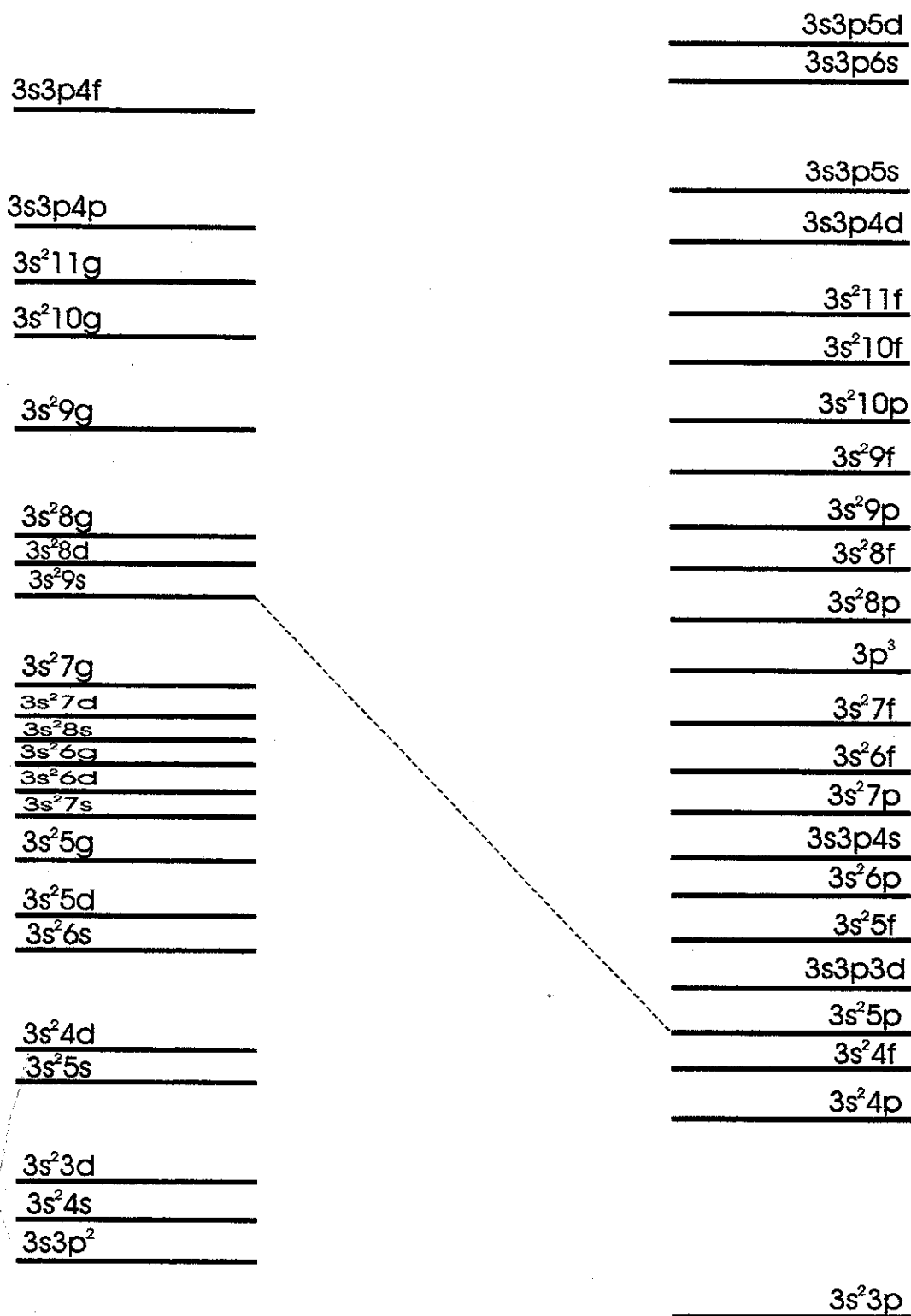


Figura 17 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^28d$ do Si II

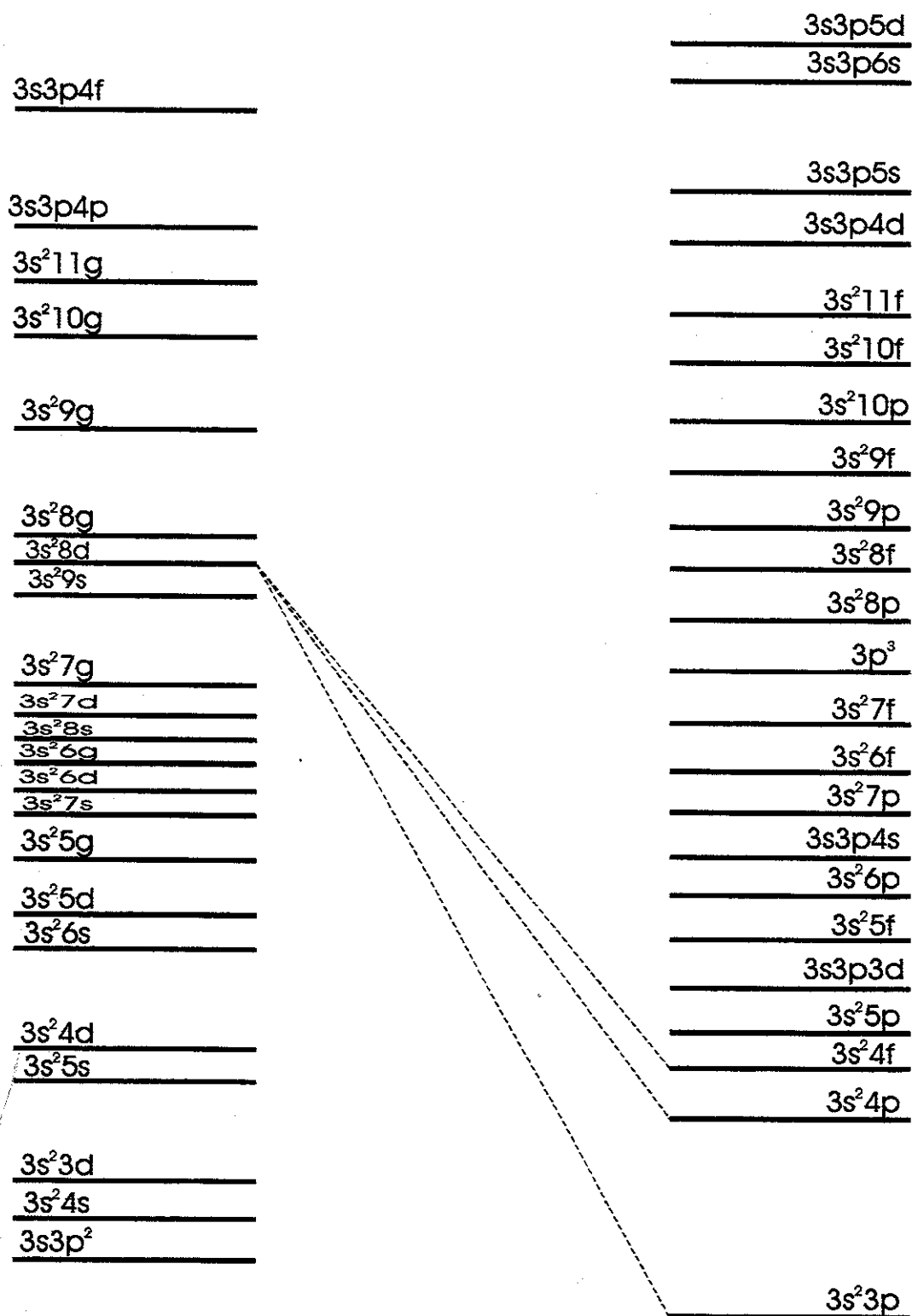


Figura 18 Representação Esquemática da Transição possível
com a Configuração $3s^28g$ do Si II

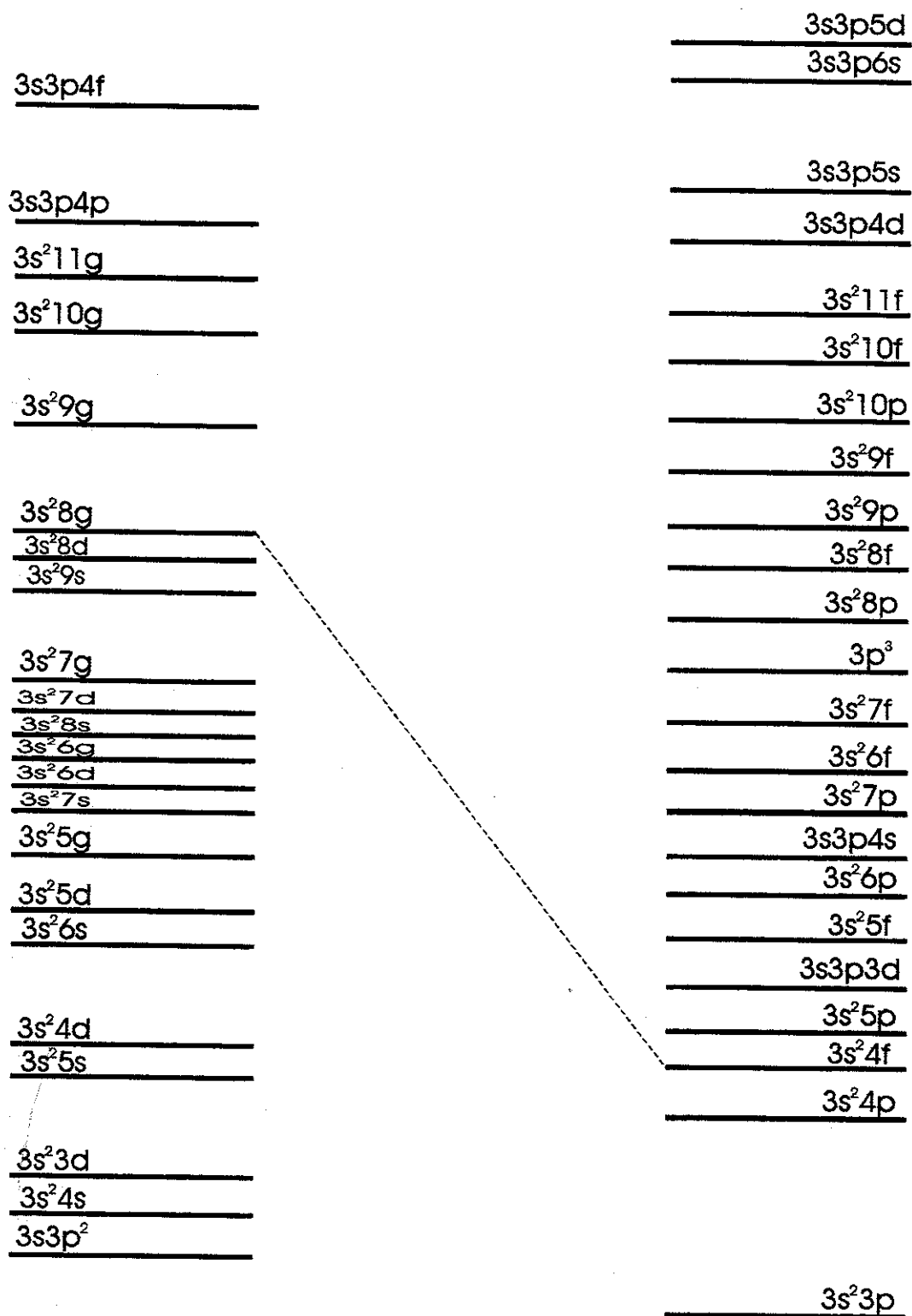


Figura 19 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^2 9g$ do Si II

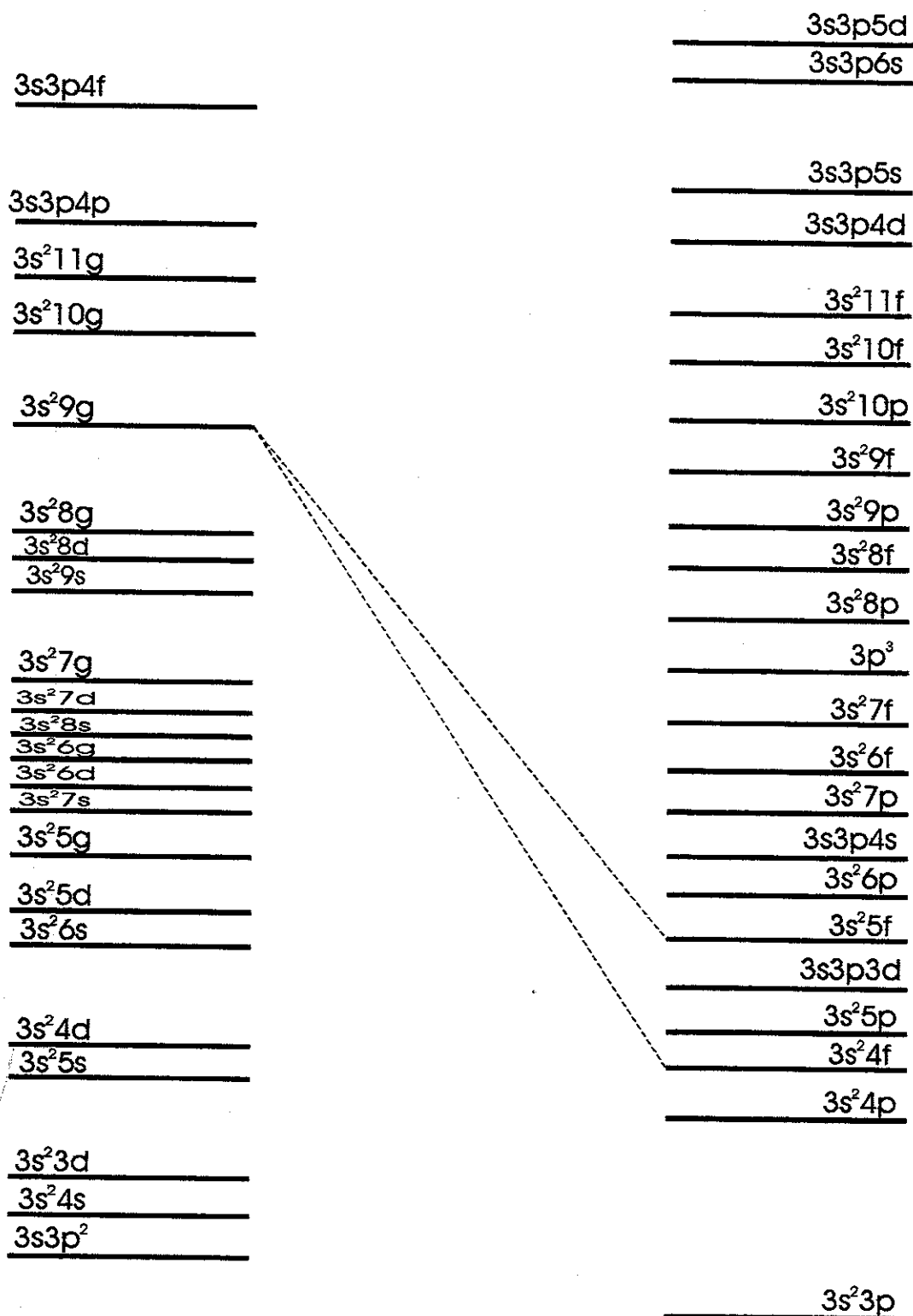


Figura 20 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^210g$ do Si II

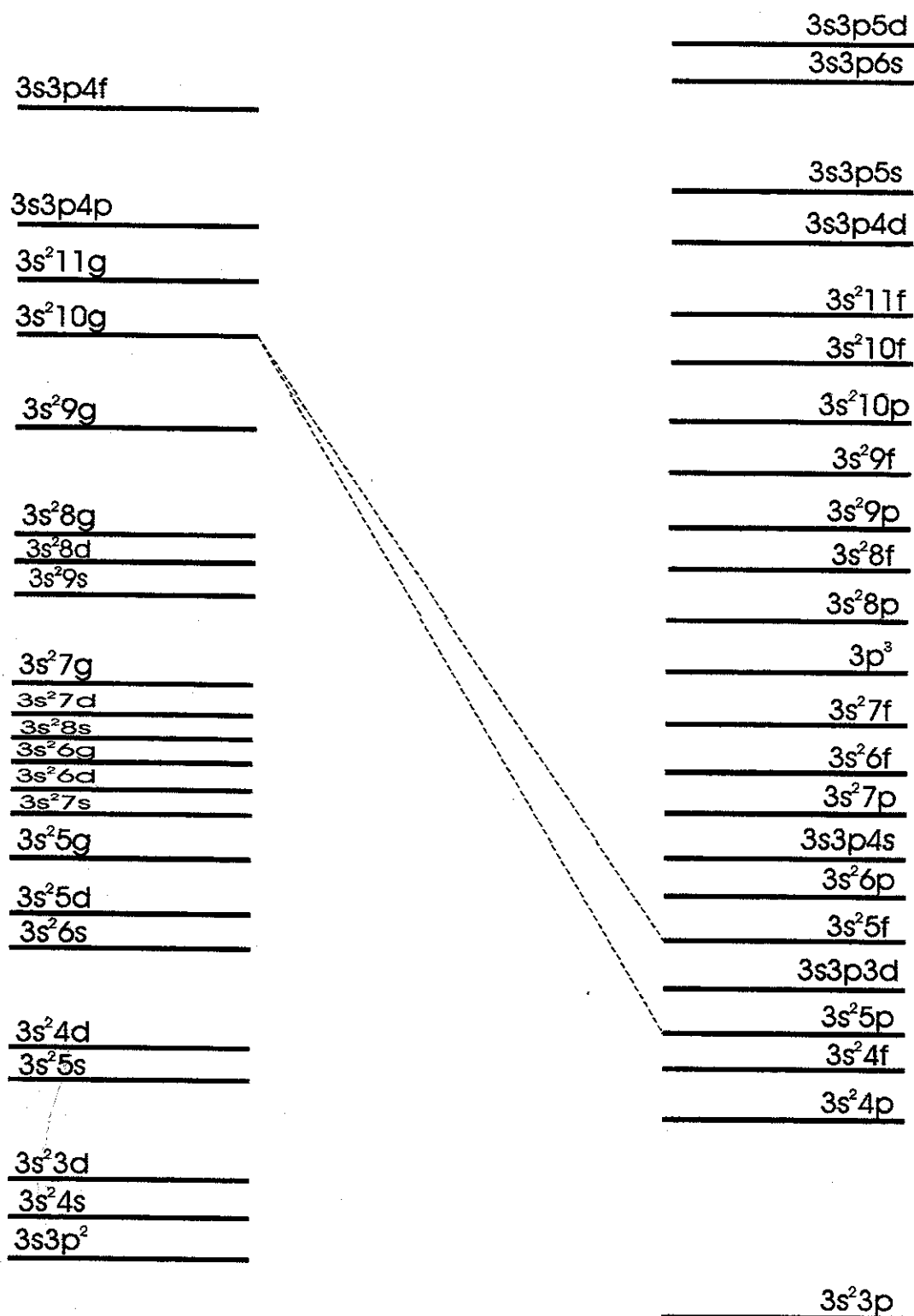


Figura 21 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração $3s^211g$ do Si II

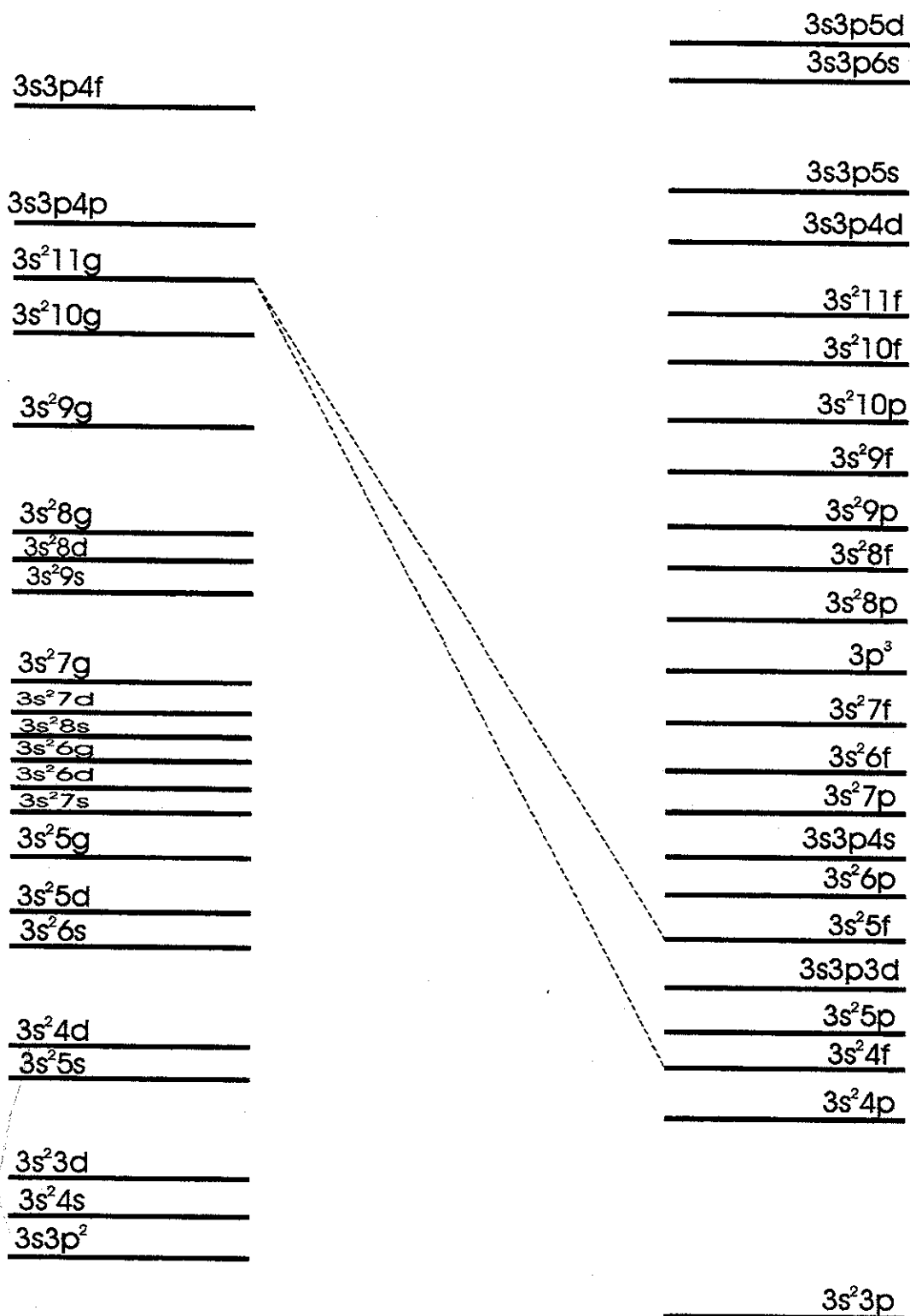


Figura 22 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração 3s3p4p do Si II

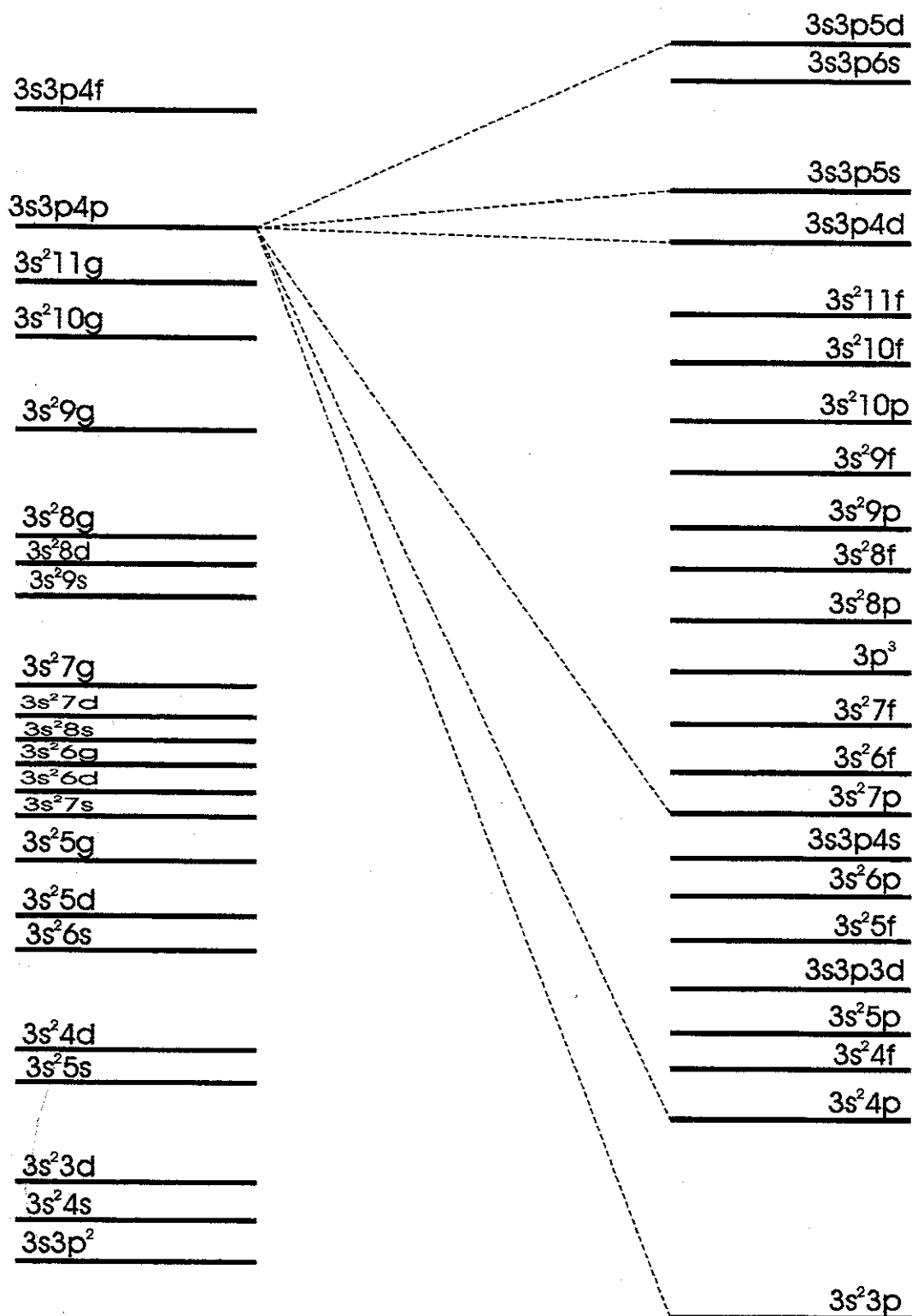
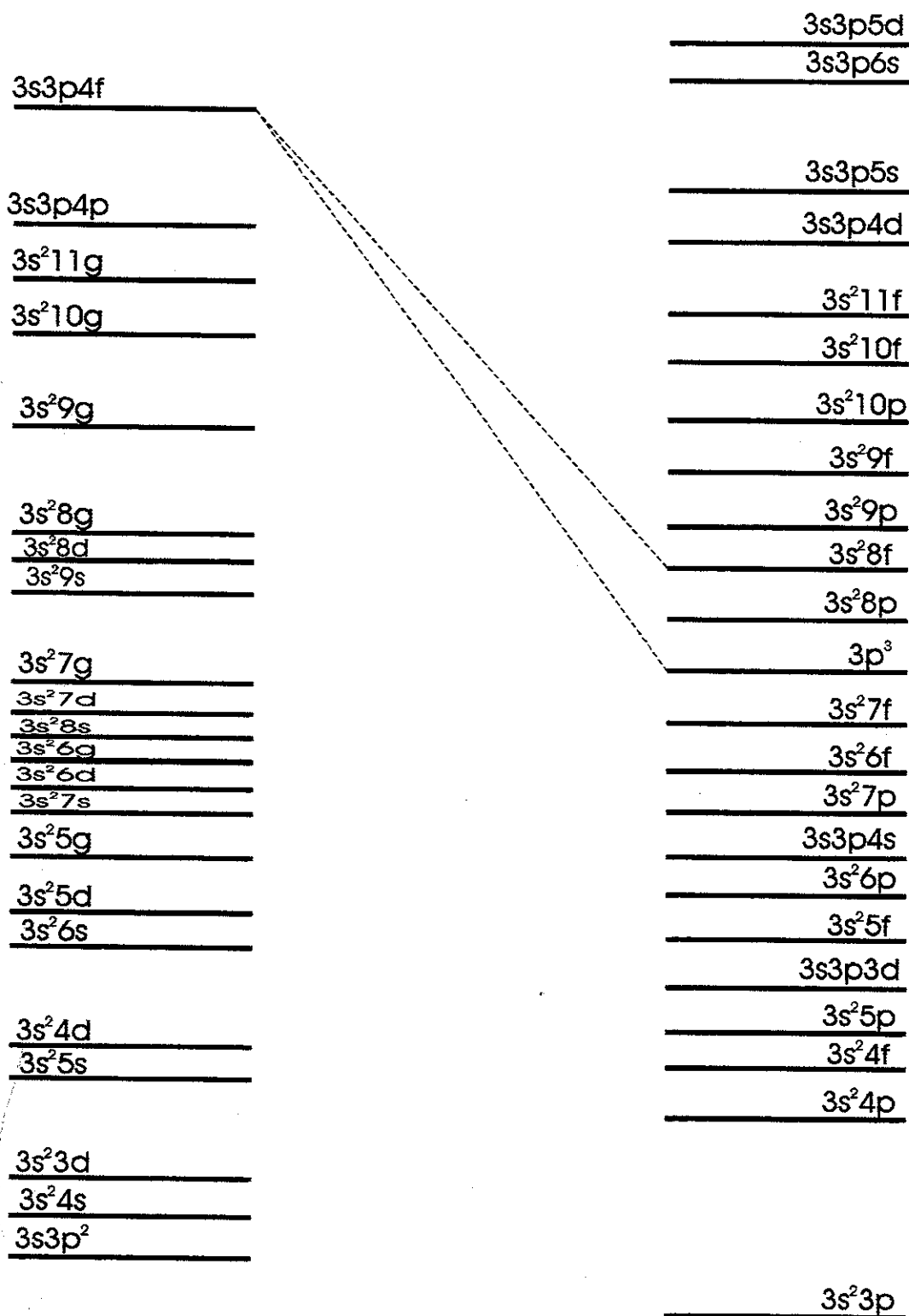


Figura 23 Representação Esquemática de todas as possíveis Transições com a Configuração 3s3p4f do Si II



4.3 Si VIII - Silício sete vezes ionizado

O espectro do Si VIII foi analisado pela primeira vez por Söderqvist (1934) [21] e Ferner (1941, 1948) [22, 23] na região de incidência rasante. Em 1965 Tousey, Austin e Purcell [24] relataram a linha de 314,31 Å. Fawcett (1970) [25] e Fawcett, Gabriel e Paget (1971) [26] classificaram transições do Si VIII obtidas por laser produzido por plasma. Moore (1971) [17] resumiu os valores dos níveis energéticos para o espectro do Si VIII. Trabert, Heckmann, Buttlar e Brand (1976) [27] e Griffin, Pegg e Sellin [28] estudaram espectros de íons de silício altamente ionizados com a técnica de beam-foil no extremo ultra violeta e algumas linhas do Si VIII foram identificadas. Kastner, Bhatia e Cohen (1977) [29] também identificaram algumas linhas do espectro do Si VIII. Martin e Zalubas (1983) [19] publicaram os valores dos níveis de energia para todos os íons de silício. Kelly (1987) [20] resumiu todos os comprimentos de onda publicados para o Si VIII. Mais recentemente Kink e Engström (1999) [30] e Kink, Engström e Feldman (1999) [31] identificaram novas linhas que estão presentes no espectro da coroa solar.

O trabalho que aqui apresentamos foi estimulado pelo desejo de determinar as forças de oscilador ponderadas e tempos de vida para o espectro de Si VIII, pois ambos os parâmetros são importantes no estudo de laboratório e espectros solares uma vez que o silício é um elemento astrofisicamente importante.

4.3.1 Dados e Resultados para o Si VIII

- A configuração para o estado fundamental é $1s^2 2s^2 2p^3$ com o termo 4S .
- Pertence a sequência isoeletrônica do N I.
- Potencial de ionização é $2\,445\,300\text{ cm}^{-1}$ (303,18 eV).
- Possui 73 níveis medidos experimentalmente, dos quais 47 níveis são de paridade par e 26 de paridade ímpar.
- Possui 11 configurações no total, das quais 6 configurações são de paridade par e 5 configurações são de paridade ímpar que são apresentadas na tabela 4.
- Foram observadas experimentalmente 96 transições de dipolo elétrico. Um representação esquemática das transições entre as configurações para o Si VIII será apresentada junto dos demais resultados tabelados (Figura 24).
- Foram calculados os tempos de vida para os 73 níveis experimentais que podem ser vistos na cópia do trabalho que encontra-se no apêndice ao final desta tese (parte A₂).
- Foram calculadas as forças de oscilador ponderadas para as 96 transições de dipolo elétrico medidas experimentalmente, os valores finais de gf encontram-se na cópia do trabalho no apêndice ao final desta tese (parte A₂).

- As tabelas 5 e 6 apresentam os parâmetros eletrostáticos de paridade ímpar e de paridade par respectivamente. As integrais de interação são apresentadas nas tabelas 7 e 8 para paridade ímpar e par respectivamente.
- No ajuste dos mínimos quadrados foram obtidos os seguintes valores para os desvios padrão:

Paridade Ímpar 353cm^{-1}

Paridade Par 609cm^{-1}

- Como não encontramos trabalhos experimentais para compararmos os valores de gf e os tempos de vida aqui calculados, fizemos uma comparação com valores teóricos publicados por Verner , Verner e Ferland (1996) [32] estes resultados encontram-se na tabela 9.

TABELA 4 – CONFIGURAÇÕES PARA O Si VIII

Configurações de Paridade Par	Configurações de Paridade Ímpar
$1s^2 2s 2p^4$	$1s^2 2s^2 2p^3^{(a)}$
$1s^2 2s^2 2p^2 3s$	$1s^2 2p^5$
$1s^2 2s^2 2p^2 3d$	$1s^2 2s^2 2p^2 3p$
$1s^2 2s 2p^3 3p$	$1s^2 2s 2p^3 3s$
$1s^2 2s^2 2p^2 4s$	$1s^2 2s 2p^3 3d$
$1s^2 2s^2 2p^2 4d$	

^(a) Configuração do estado fundamental.

TABELA 5. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE ÍMPAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão VA HFR
2s ² 2p ³	E _{av}	0	72828 (160)	-
	F ² (2p2p)	203367	194147 (728)	0,995
	α _{2p}	-100 ^c		
	ζ _{2p}	4041 ^d		
2p ⁵	E _{av}	759518	815513 (256)	1,074
	ζ _{2p}	3893 ^d		
2s ² 2p ² 3p	E _{av}	1493100	1558769 (107)	1,044
	F ² (2p2p)	211505		
	α _{2p}	-500 ^c		
	ζ _{2p}	4369 ^d		
	ζ _{3p}	808 ^d		
	F ² (2p2p)	46482	40270 (746)	0,866
	G ⁰ (2p3p)	19805	16455 (129)	0,831
	G ² (2p3p)	20222 ^e		
2s 2p ³ 3s	E _{av}	1704348	1787997 (266)	1,049
	F ² (2p2p)	209544 ^c		
	α _{2p}	-100 ^c		
	ζ _{2p}	4279 ^d		
	G ¹ (2s2p)	241817 ^c		

TABELA 5. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE ÍMPAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
2s 2p ³ 3s	G ⁰ (2s3s)	15141 ^c		
	G ¹ (2p3s)	18740 ^c		
2s ² 2p ³	E _{av}	0	72828 (160)	-
	F ² (2p2p)	203367	194147 (728)	0,995
	α_{2p}	-100 ^c		
	ζ_{2p}	4041 ^d		
2p ⁵	E _{av}	759518	815513 (256)	1,074
	ζ_{2p}	3893 ^d		
2s ² 2p ² 3p	E _{av}	1493100	1558769 (107)	1,044
	F ² (2p2p)	211505		
	α_{2p}	-500 ^c		
	ζ_{2p}	4369 ^d		
	ζ_{3p}	808 ^d		
	F ² (2p2p)	46482	40270 (746)	0,866
	G ⁰ (2p3p)	19805	16455 (129)	0,831
	G ² (2p3p)	20222 ^e		
2s 2p ³ 3s	E _{av}	1704348	1787997 (266)	1,049
	F ² (2p2p)	209544 ^c		

TABELA 5. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE ÍMPAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão VA HFR
2s 2p ³ 3s	α_{2p}	-100 ^c		
	ζ_{2p}	4279 ^d		
	G ¹ (2s2p)	241817 ^c		
	G ⁰ (2s3s)	15141 ^c		
	G ¹ (2p3s)	18740 ^c		
2s 2p ³ 3d	E _{av}	1890181	19744921 (204)	1,045
	F ² (2p2p)	209378 ^c		
	α_{2p}	-100 ^c		
	ζ_{2p}	4288 ^d		
	ζ_{3d}	81 ^d		
	F ² (2p3d)	55572 ^c		
	G ¹ (2s2p)	241147 ^c		
	G ² (2s3d)	42749 ^c		
	G ¹ (2p3d)	47604 ^c		
	G ³ (2p3d)	27364		

^a Parâmetros usados no ajuste dos mínimos quadrados para as configurações de paridade ímpar. O método usado foi Hartree-Fock Relativístico (HFR).

^b O desvio padrão para os parâmetros são dados entre parênteses.

^c Estes parâmetros foram mantidos fixos durante o ajuste dos mínimos quadrados.

^d Estes parâmetros foram mantidos fixos a 95% de seus valores teóricos durante o ajuste de mínimos quadrados.

^e Estes parâmetros foram mantidos fixos a 85% de seus valores teóricos durante o ajuste de mínimos quadrados.

TABELA 6. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE PAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
2s 2p ⁴	E _{av}	344623	412267 (217)	1,196
	F ² (2p2p)	201603	195072 (1077)	0,968
	α_{2p}	-668 ^c		
	ζ_{2p}	3964 ^d		
	G ¹ (2s2p)	236746		
2s ² 2p ² 3s	E _{av}	1401255	1468282 (219)	1,048
	F ² (2p2p)	211374	207012 (1083)	0,979
	α_{2p}	-525 ^c		
	ζ_{2p}	4366 ^d		
	G ¹ (2p3s)	18255		
2s 2p ³ 4s	E _{av}	1884615	1948683 (620)	1,034
	F ² (2p2p)	212122 ^c		
	α_{2p}	-525 ^c		
	ζ_{2p}	4394 ^d		
	G ¹ (2p4s)	5963 ^d		
2s 2p ³ 3p	E _{av}	1791239	1861796 (338)	1,039
	F ² (2p2p)	209656 ^c		
	α_{2p}	-590 ^c		
	ζ_{2p}	4281 ^d		

TABELA 6. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE PAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
2s 2p ³ 3p	ζ_{3p}	837 ^d		
	F ² (2p3p)	46318 ^c		
	G ¹ (2s2p)	241185 ^c		
	G ¹ (2s3p)	14574 ^c		
	G ⁰ (2p3p)	19300 ^c		
	G ² (2p3p)	20034 ^c		
2s ² 2p ² 3d	E _{av}	1593062	1658386 (147)	1,041
	F ² (2p2p)	211220	197595 (1051)	0,935
	α_{2p}	100 ^c		
	ζ_{2p}	4376 ^d		
	ζ_{3p}	83		
	F ² (2p3d)	55454	51967 (975)	0,937
	G ¹ (2p3d)	47261	44676 (538)	0,945
	G ³ (2p3d)	27173 ^e		
2s ² 2p ² 4d	E _{av}	1957032	2021016 (308)	1,033
	F ² (2p2p)	212061 ^c		
	α_{2p}	100 ^c		
	ζ_{2p}	4397 ^d		
	ζ_{4d}	36 ^d		
	F ² (2p4d)	19855 ^c		

TABELA 6. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE PAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
2s ² 2p ² 4d	G ¹ (2p4d)	17860 ^c		
	G ³ (2p4d)	10560 ^c		

^a Parâmetros usados no ajuste dos mínimos quadrados para as configurações de paridade par. O método usado foi Hartree-Fock Relativístico (HFR).

^b O desvio padrão para os parâmetros são dados entre parênteses.

^c Estes parâmetros foram mantidos fixos durante o ajuste dos mínimos quadrados.

^d Estes parâmetros foram mantidos fixos a 95% de seus valores teóricos durante o ajuste de mínimos quadrados.

^e Estes parâmetros foram mantidos fixos a 85% de seus valores teóricos durante o ajuste de mínimos quadrados.

TABELA 7 – CONFIGURAÇÃO DAS INTEGRAIS DE
INTERAÇÃO PARA PARIDADE ÍMPAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock</i> <i>Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado (cm ⁻¹)	Razão VA HFR
$2s^2 2p^3 - 2p^5$	$R^1(2s2s2p2p)$	236576		
$2s^2 2p^3 - 2s^2 2p^2 3p$	$R^0(2p2p2p3p)$	8650		
	$R^2(2p2p2p3p)$	38935		
$2s^2 2p^3 - 2s 2p^3 3s$	$R^0(2s2s2s3s)$	13355		
	$R^1(2s2p2p3s)$	42661		
	$R^0(2s2p3s2p)$	7263		
$2s^2 2p^3 - 2s 2p^3 3d$	$R^1(2s2p2p3d)$	-100163		
	$R^2(2s2p3d2p)$	-76119		
$2p^5 - 2s 2p^3 3s$	$R^1(2p2p2s3s)$	41186		
$2p^5 - 2s 2p^3 3d$	$R^1(2p2p2s3d)$	102016		
$2s 2p^3 3p - 2s 2p^3 3s$	$R^1(2s3p2p3s)$	78047		
	$R^0(2s3p3s2p)$	16527		
$2s 2p^3 3p - 2s 2p^3 3d$	$R^1(2s3p2p3d)$	51433		
	$R^2(2s3p3d2p)$	-1246		

**TABELA 7 – CONFIGURAÇÃO DAS INTEGRAIS DE
INTERAÇÃO PARA PARIDADE ÍMPAR^a**

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock</i> <i>Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
2s 2p ³ 3s - 2s 2p ³ 3d	R ² (2p3s2p3d)	15406		
	R ¹ (2p3s3d2p)	-10322		

^a As integrais de interação de paridade ímpar foram mantidas fixas a 85% de seu valor HFR.

TABELA 8 – CONFIGURAÇÃO DAS INTEGRAIS DE
INTERAÇÃO PARA PARIDADE PAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock</i> <i>Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
2s 2p ⁴ - 2s ² 2p ² 4d	R ¹ (2p2p2s4d)	-64218		
2s ² 2p ² 3s - 2s ² 2p ² 4s	R ⁰ (2p3s2p4s)	0		
	R ¹ (2p3s4s2p)	10322		
2s ² 2p ² 3s - 2s 2p ³ 3p	R ¹ (2s3s2p3p)	78192		
	R ¹ (2s3s3p2p)	15532		
2s ² 2p ² 3s - 2s ² 2p ² 3d	R ² (2p3s2p3d)	16986		
	R ¹ (2p3s3d2p)	-9765		
2s ² 2p ² 3s - 2s ² 2p ² 4d	R ² (2p3s2p4d)	-758		
	R ¹ (2p3s4d2p)	-7858		
2s ² 2p ² 4s - 2s 2p ³ 3p	R ¹ (2s4s2p3p)	27703		
	R ¹ (2s4s3p2p)	8996		
2s ² 2p ² 4s - 2s ² 2p ² 3d	R ² (2p4s2p3d)	6232		
	R ¹ (2p4s3d2p)	-4484		
2s ² 2p ² 4s - 2s ² 2p ² 4d	R ² (2p4s2p4d)	4620		

TABELA 8 – CONFIGURAÇÃO DAS INTEGRAIS DE
INTERAÇÃO PARA PARIDADE PAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock</i> <i>Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
2s ² 2p ² 4s - 2s ² 2p ² 4d	R ¹ (2p4s4d2p)	-3738		
2s 2p ³ 3p - 2s ² 2p ² 3d	R ¹ (2p3p3d2p)	51100		
	R ¹ (2p3p2p3d)	-321		
2s 2p ³ 3p - 2s ² 2p ² 4d	R ¹ (2p3p2p4d)	4101		
	R ¹ (2p3p4d2p)	-1997		
2s ² 2p ² 3d - 2s ² 2p ² 4d	R ⁰ (2p3d2p4d)	0		
	R ² (2p3d2p4d)	26786		
	R ¹ (2p3d4d2p)	28780		
	R ³ (2p3d4d2p)	16734		

^a As integrais de interação de paridade par foram mantidas fixas a 85% de seu valor HFR.

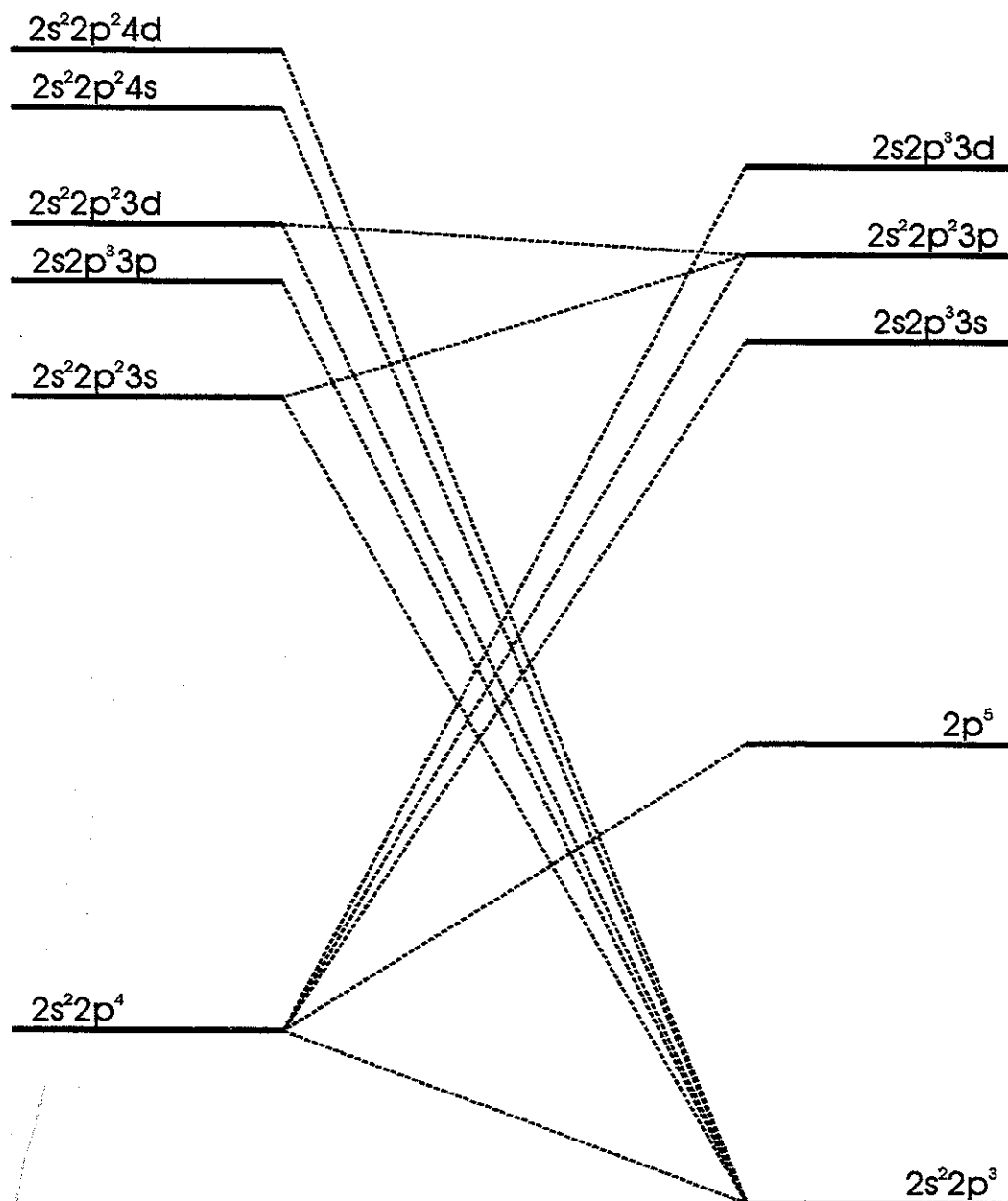
TABELA 9 – COMPARAÇÃO DOS VALORES DE gf

Transição	Termo J-J	$(N_R)^a$	$(R_V)^b$	$\frac{N_R}{R_V}$
$2s^2 2p^3 - 2p^2 (^3P) 3d$	$^4S_{3/2}^0 - ^4P_{5/2}$	$3,00 \times 10^0$	$3,01 \times 10^0$	1,00
	$^4S_{3/2}^0 - ^4P_{3/2}$	$2,07 \times 10^0$	$2,04 \times 10^0$	0,99
	$^4S_{3/2}^0 - ^4P_{1/2}$	$1,05 \times 10^0$	$1,02 \times 10^0$	0,97
$2s^2 2p^3 - 2p^2 (^3P) 4d$	$^4S_{3/2}^0 - ^4P_{5/2}$	$5,50 \times 10^{-1}$	$6,28 \times 10^{-1}$	1,14
	$^4S_{3/2}^0 - ^4P_{3/2}$	$4,32 \times 10^{-1}$	$4,20 \times 10^{-1}$	0,97
$2s^2 2p^3 - 2p^2 (^3P) 3s$	$^4S_{3/2}^0 - ^4P_{5/2}$	$9,26 \times 10^{-2}$	$7,96 \times 10^{-2}$	0,86
	$^4S_{3/2}^0 - ^4P_{3/2}$	$1,86 \times 10^{-1}$	$1,59 \times 10^{-1}$	0,85
	$^4S_{3/2}^0 - ^4P_{1/2}$	$2,82 \times 10^{-1}$	$2,39 \times 10^{-1}$	0,85
$2s^2 2p^3 - 2s 2p^4$	$^4S_{3/2}^0 - ^4P_{5/2}$	$4,00 \times 10^{-1}$	$3,53 \times 10^{-1}$	0,88
	$^4S_{3/2}^0 - ^4P_{3/2}$	$2,69 \times 10^{-1}$	$2,38 \times 10^{-1}$	0,88
	$^4S_{3/2}^0 - ^4P_{1/2}$	$1,36 \times 10^{-1}$	$1,20 \times 10^{-1}$	0,88
$2s^2 2p^3 - 2p^2 (^3P) 3s$	$^4S_{3/2}^0 - ^4P_{5/2}$	$3,84 \times 10^{-1}$	$3,50 \times 10^{-1}$	0,91

^a Designa os valores de gf calculados neste trabalho que encontram-se no apêndice A₂.

^b Designa os valores de gf calculados por Verner, Verner e Ferland (1996) [32].

Figura 24 Representação Esquemática das Transições entre as Configurações do Si VIII



4.4 Si IX - Silício oito vezes ionizado

O espectro do Si IX foi estudado pela primeira vez por Ferner (1941) [22] para pequenos comprimentos de onda, na faixa de $44\text{\AA}$ - $67\text{\AA}$. Mais tarde Fawcett (1971) [26] identificou novas linhas utilizando laser de plasma como fonte, as linhas identificadas ficaram na faixa espectral de $227\text{\AA}$ - $441\text{\AA}$. Duas novas linhas foram identificadas por Griffin (1976) [28], $209,800\text{\AA}$ e $360,900\text{\AA}$. Muitas das linhas mostradas na tabela 1 do trabalho publicado, cuja cópia encontra-se no apêndice ao final desta tese parte A₁, foram identificadas no espectro solar por vários trabalhos como o de Tousey (1965) [24], Doschek (1972) [33], Behring (1972) [34], Sandlin (1976) [35] e Dere (1962) [36]. O espectro do Si IX tem sido o centro de muitos cálculos teóricos. Muitos destes cálculos são feitos para se obter as probabilidades de transição teóricas, colisões, razões de decaimento, forças de oscilador, entre outros [37-41].

O propósito deste trabalho é apresentar uma revisão de todas as transições de dipolo elétricas conhecidas para o Si IX, suas forças de oscilador e os tempos de vida, calculados através de valores ajustados dos parâmetros de energia. Este cálculo será realizado para todos os níveis de energia experimentais conhecidos.

4.4.1 Dados e Resultados para o Si IX

- A configuração para o estado fundamental é $1s^2 2s^2 2p^2$ com o termo 3P .
- Pertence a sequência isoeletrônica do C I.
- Potencial de ionização é $2\,832\,000\text{cm}^{-1}$ (351,13 eV).
- Possui 56 níveis medidos experimentalmente, dos quais 26 níveis são de paridade par e 30 de paridade ímpar.
- Possui 9 configurações no total, das quais 4 configurações são de paridade par e 5 configurações são de paridade ímpar que são apresentadas na tabela 10.
- Foram observadas experimentalmente 103 transições de dipolo elétrico. Uma representação esquemática das transições entre as configurações para o Si IX será apresentada junto dos demais resultados tabelados (Figura 25).
- Foram calculados os tempos de vida para os 56 níveis experimentais, mas apresentamos apenas 50 níveis que são de interesse prático (os níveis com a configuração do estado fundamental foram omitidos). Estes valores podem ser vistos na cópia do trabalho que encontra-se no apêndice ao final desta tese (parte A₁).

- Foram calculadas as forças de oscilador ponderadas para as 103 transições de dipolo elétrico medidas experimentalmente, os valores finais de gf encontram-se na cópia do trabalho no apêndice ao final desta tese (parte A₁).
- As tabelas 11 e 12 apresentam os parâmetros eletrostáticos de paridade ímpar e de paridade par respectivamente. As integrais de interação para paridade ímpar e para par são apresentadas nas tabelas 13 e 14 respectivamente.
- Como não encontramos trabalhos experimentais para compararmos nossos valores de gf e os tempos de vida, fizemos uma comparação com valores teóricos publicados por Verner , Verner e Ferland (1996) [32]. Estes resultados encontram-se na tabela 15.

TABELA 10 – CONFIGURAÇÕES PARA O Si IX

Configurações de Paridade Par	Configurações de Paridade Ímpar
$1s^2 2s^2 2p^2$ ^(a)	$1s^2 2s 2p^3$
$1s^2 2p^4$	$1s^2 2s^2 2p 3s$
$1s^2 2s 2p^2 3s$	$1s^2 2s^2 2p 3d$
$1s^2 2s 2p^2 3d$	$1s^2 2s 2p^2 3p$
	$1s^2 2s^2 2p 4d$

^(a) Configuração do estado fundamental.

TABELA 11. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE ÍMPAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
2s 2p ³	E _{av}	296153	335227	1,132
	F ² (2p2p)	210699	206313	1,021
	ζ _{2p}	4322 ^b		
	G ¹ (2s2p)	242100	222787	0,920
2s ² 2p 3s	E _{av}	1611307	1637495	1,016
	ζ _{2p}	4735 ^b		
	G ¹ (2s2p)	20055	17755	0,8853
2s ² 2p 3d	E _{av}	1788036	1807429	1,108
	ζ _{2p}	4742 ^b		
	ζ _{3d}	124 ^b		
	F ² (2p3d)	65789	67475	1,026
	G ¹ (2s3d)	58621 ^b		
2s 2p ² 3p	E _{av}	1945946	1983090	1,019
	F ² (2p2p)	218597 ^b		
	ζ _{2p}	4660 ^b		
	ζ _{3p}	1014 ^b	1014	
	F ² (2p3p)	51988 ^b	39239	
	G ¹ (2s2p)	246148	252230	1,025
	G ¹ (2s3p)	16299 ^b		

TABELA 11. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE ÍMPAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado ^b (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
2s 2p ² 3p	G ⁰ (2p3p)	21862 ^b		
	G ² (2p3p)	22744	23304	1,025
2s ² 2p 4d	E _{av}	2244254	2264728	1,009
	α_{2p}	4769 ^b		
	ζ_{4d}	53 ^b		
	F ² (2p4d)	23323 ^b		
	F ¹ (2p4d)	21296 ^b		
	G ³ (2p4d)	12699 ^b		

^a Parâmetros usados no ajuste dos mínimos quadrados para as configurações de paridade ímpar. O método usado foi Hartree-Fock Relativístico (HFR).

^b Estes parâmetros foram mantidos fixos durante o ajuste dos mínimos quadrados.

TABELA 12. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE PAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado (cm ⁻¹)	Razão VA HFR
2s ² 2p ²	E _{av}	0	38791	-
	F ² (2p2p)	212522	203468	0,957
	ζ _{2p}	4410 ^b		
2p ⁴	E _{av}	665387	696132	1,046
	F ² (2p2p)	208956	200055	0,957
	ζ _{2p}	4241 ^b		
2s 2p ² 3s	E _{av}	1861522	1904019	1,022
	F ² (2p2p)	218524	209215	1,044
	ζ _{2p}	4658 ^b		
	G ¹ (2s2p)	246881 ^b		
	G ⁰ (2s3s)	16532 ^b		
	G ¹ (2p3s)	20582 ^b		
2s 2p ² 3d	E _{av}	2032030	2071325	1,019
	F ² (2p2p)	218193	194006	1,125
	ζ _{2p}	4664 ^c		
	ζ _{3d}	121 ^c		
	F ² (2p3d)	65773	61067	0,9285
	G ¹ (2s2p)	246066 ^c		
	G ¹ (2s3d)	54133 ^b		

TABELA 12. PARÂMETROS DE ENERGIA PARA PARIDADE PAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
2s 2p ² 3d	G ³ (2p3s)	33957 ^c	38791	

^a Parâmetros usados no ajuste dos mínimos quadrados para as configurações de paridade par. O método usado foi Hartree-Fock Relativístico (HFR).

^b Estes parâmetros foram mantidos fixos durante o ajuste dos mínimos quadrados.

^c Estes parâmetros foram feitos variar na mesma razão.

TABELA 13 – CONFIGURAÇÃO DAS INTEGRAIS DE
INTERAÇÃO PARA PARIDADE ÍMPAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock</i> <i>Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
2s 2p ³ – 2s ² 2p 3s	R ¹ (2p2p2s3s)	43254		
2s 2p ³ – 2s ² 2p 3d	R ¹ (2p2p2s3d)	-116005		
2s 2p ³ – 2s 2p ² 3p	R ⁰ (2s2p2s3p)	3202		
	R ¹ (2s2p3p3s)	18260		
	R ⁰ (2p2p2p3p)	9116		
	R ² (2p2p2p3p)	41176		
2s 2p ³ – 2s 2p 4d	R ¹ (2s2s2s3s)	-71524		
2s ² 2p 3s – 2s ² 2p 3d	R ² (2p3s2p3d)	15083		
	R ¹ (2p3s3d2p)	-12996		
2s ² 2p 3s – 2s 2p ² 3p	R ¹ (2s3s2p3p)	84495		
	R ¹ (2s3s3p2p)	16782		
2s ² 2p 3s – 2s 2p 4d	R ² (2p3s2p4d)	-4073		
	R ¹ (2p3s4d2p)	-10201		
2s ² 2p 3d – 2s 2p ² 3p	R ¹ (2s3d2p3p)	54196		
	R ¹ (2s3d3p2p)	293		

TABELA 13 – CONFIGURAÇÃO DAS INTEGRAIS DE
INTERAÇÃO PARA PARIDADE ÍMPAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock</i> <i>Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
2s ² 2p 3d – 2s 2p 4d	R ⁰ (2p3d2p4d)	0		
	R ² (2p3d2p4d)	31040		
	R ¹ (2p3d4d2p)	34922		
	R ³ (2p3d4d2p)	20417		
2s 2p ² 3p – 2s 2p 4d	R ¹ (2p3p2s4d)	111		
	R ¹ (2p3p4d2s)	-2221		

^a As integrais de interação de paridade ímpar foram mantidas fixas durante o ajuste.

TABELA 14 – CONFIGURAÇÃO DAS INTEGRAIS DE
INTERAÇÃO PARA PARIDADE PAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock</i> <i>Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
$2s^2 2p^2 - 2p^4$	$R^1(2s2s2p2p)$	242144		
$2s^2 2p^2 - 2s 2p^2 3s$	$R^0(2s2s2s3s)$	13498		
	$R^1(2s2p2p3s)$	46227		
	$R^1(2s2p3s2p)$	7857		
$2s^2 2p^2 - 2s 2p^2 3d$	$R^1(2s2p2p3d)$	-113667		
	$R^1(2s2p3d2p)$	-87815		
$2p^4 - 2s 2p^2 3s$	$R^2(2p2p2s3s)$	44740		
$2p^4 - 2s 2p^2 3d$	$R^2(2p2p2s3d)$	-115840		
$2s 2p^2 3s - 2s 2p^2 3d$	$R^2(2p3s2p4d)$	14454		
	$R^1(2p3s4d2p)$	-13579		
$2s 2p^3 3p - 2s^2 2p^2 4d$	$R^1(2p3p2p4d)$	4101		
	$R^1(2p3p4d2p)$	-1997		
$2s^2 2p2 3d - 2s^2 2p^2 4d$	$R^0(2p3d2p4d)$	0		

TABELA 14 – CONFIGURAÇÃO DAS INTEGRAIS DE
INTERAÇÃO PARA PARIDADE PAR^a

Configuração	Parâmetros	Valor HFR <i>Hartree-Fock</i> <i>Relativístico</i> (cm ⁻¹)	VA Valor Ajustado (cm ⁻¹)	Razão $\frac{VA}{HFR}$
2s ² 2p ² 3d - 2s ² 2p ² 4d	R ² (2p3d2p4d)	26786		
	R ¹ (2p3d4d2p)	28780		
	R ³ (2p3d4d2p)	16734		

^a As integrais de interação de paridade par foram mantidas fixas durante o ajuste.

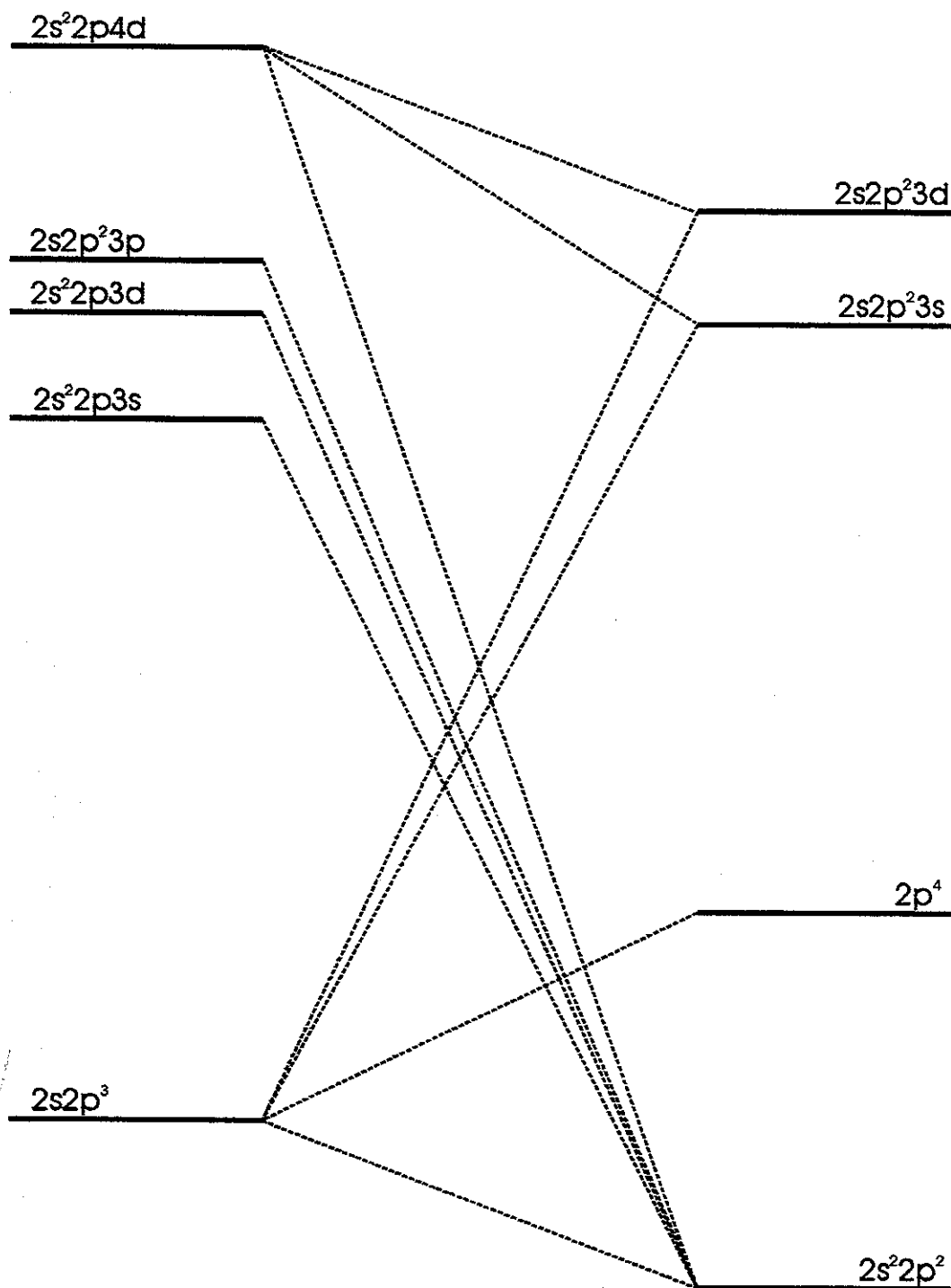
TABELA 15 – COMPARAÇÃO DOS VALORES DE gf

Transição	Termo J-J	Nossos Resultados ^a (N _R)	Resultados de Verner ^b (R _V)	$\frac{N_R}{R_V}$
$2s^2 2p^2 - 2s 2p^3$	$^3P_1 - ^3P_0^0$	0,082	0,079	1,038
	$^3P_1 - ^3P_2^0$	0,081	0,099	0,818
	$^3P_0 - ^3P_1^0$	0,077	0,080	0,963
$2s^2 2p^2 - 2s 2p^3$	$^3P_2 - ^3S_1^0$	0,508	0,467	1,088
	$^3P_1 - ^3S_1^0$	0,290	0,282	1,028
	$^3P_0 - ^3S_1^0$	0,095	0,095	1,000
$2s^2 2p^2 - 2s 2p 3d$	$^3P_2 - ^3P_1^0$	0,404	0,347	1,164
	$^3P_1 - ^3P_0^0$	0,298	0,279	1,068
	$^3P_0 - ^3P_1^0$	0,297	0,278	1,068

^a Designa os valores de gf calculados neste trabalho que encontram-se no apêndice A₁.

^b Designa os valores de gf calculados por Verner, Verner e Ferland (1996) [32].

Figura 25 Representação Esquemática das Transições entre as configurações do Si IX



Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas Futuras

O objetivo do trabalho era apresentar as forças de oscilador e tempos de vida para os espectros atômicos dos íons de silício uma, sete e oito vezes ionizado, respectivamente, Si II , Si VIII e Si IX, objetivos estes que foram totalmente cumpridos, visto que já temos um trabalho publicado, um trabalho aceito para publicação e um terceiro trabalho concluído que deverá ser submetido em breve, estes trabalhos encontram-se no apêndice ao final desta tese que foi subdividido em trabalho publicado (A_1), trabalho aceito para publicação (A_2) e trabalho concluído (A_3).

Sobre os íons podemos dizer que estes apresentaram graus de dificuldade bastante diferentes durante sua análise. O íon de Si IX foi o primeiro a ser estudado e não

tivemos muito problema para chegar aos resultados que são apresentados, todos os ajustes foram relativamente rápidos. O íon de Si VIII foi o segundo íon a ser estudado e apresentou problemas pois muitos níveis apresentavam mistura de acoplamentos e quando já estávamos terminando os ajustes ficamos sabendo que novas medidas estavam sendo produzidas na Suécia, por achar que elas melhorariam nosso trabalho este ficou parado por alguns meses até que estas medidas foram publicadas. Com estes novos valores o trabalho ficou mais completo, mas ainda assim permaneceu a dificuldade durante o ajuste dos níveis experimentais. Quanto ao Si II que foi o último íon a ser estudado, os níveis ajustaram-se bem aos conhecidos experimentalmente, mas o trabalho ficou um pouco “emperrado” quando não conseguíamos utilizar o programa RCE19 para o ajuste dos parâmetros, por muito tempo ficamos procurando o erro que poderia estar gerando este problema, quando estávamos certos de que todos os procedimentos estavam corretos, recorremos ao Prof. Dr. César Pagan, que fez muitas das modificações nos aplicativos para que estes pudessem ser utilizados tal como hoje conhecemos e descobrimos que o programa RCE19 tinha uma limitação quanto ao número de configurações. Como até então ninguém havia trabalhado com mais de vinte configurações não se conhecia esta limitação do programa, digamos que de certa forma esta foi uma importante colaboração para futuros trabalhos. Após solucionado este problema técnico passamos ao ajuste final dos parâmetros, como o íon apresentava poucos parâmetros por configuração o ajuste ficou limitado a esta característica. Neste caso tínhamos uma alternativa, tentar colocar outras configurações para interagirem com as conhecidas experimentalmente o que nos levaria a ter que fazer vários ajustes por grupos de

configurações, mas como o tempo que tínhamos para apresentar este projeto era restrito esta alternativa foi descartada. Assim ficamos com o melhor resultado que pudemos obter para apenas um ajuste de todas as configurações.

Por se tratar de um método “semi-empírico” ele nos coloca tanto diante da parte experimental quanto da parte teórica, o que nos dá uma visão que a meu ver é muito importante, não há como dizer que trabalhos experimentais são mais importante que trabalhos teóricos, como o contrário também não pode ser tomado como verdade absoluta. Na verdade as duas coisas estão profundamente relacionadas e elas revezam-se como indicadores de novos caminhos nas pesquisas.

Além dos trabalhos publicados devemos considerar a perspectiva futura de que estes íons façam parte de uma série que reúna todas as forças de oscilador ponderadas, tempos de vida e níveis experimentais ajustados para todos os íons de Silício (Si I – Si XIV). Este é um antigo projeto do Laboratório de Física Atômica e Molecular do IFGW que já estudou doze dos quatorze íons do elemento Silício (Si II – Si XIII), faltando agora apenas dois íons (Si I e Si XIV). O primeiro íon dos dois últimos citados, o Si I, deve ser estudado em breve pois já existem muitos dados experimentais sobre ele, porém para o estudo do íon de Si XIV ainda temos que esperar por dados experimentais, pois estes ainda não existem, isto se deve a grande dificuldade em montar experimentos para um íon tão altamente ionizado. As dificuldades são muitas podemos citar por exemplo a dificuldade em conseguir o alto potencial de ionização entre outras coisas. Contudo sabemos que já existem pesquisas neste sentido e assim que forem conhecidos os níveis experimentais este íon também poderá ser estudado, finalizando assim o estudo do elemento Silício que é de grande

interesse em várias áreas, essencialmente na astrofísica como temos colocado durante a apresentação de nosso trabalho.

Referências

- [1] Pagan C J B. – Estudo Espectroscópico de Gases Medianamente Ionizados, Tese de Doutorado – Unicamp, IFGW, 1991.
- [2] Eisberg R. – Física Quântica - Átomos Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas, Editora Campos, 1974.
- [3] Joueizadeh A. – Calculation of Oscillator Strenghts in Hg III, 1991.
- [4] Sikström C M. – Measurements of Branching Fractions Using Fourier Transform Spectroscopy, Method Applied on Zn II, Master Thesis 20p., Lund, Sweden.
- [5] Nahar S N. – Atomic Data and Nucl Data Tables 1998; 68:183-201.
- [6] Cowan R D. – The Theory of Atomic Structure and Spectra, Berkeley: Univ California Press. 1981.
- [7] Castro A R B. e Leite R C C. – Física do Estado Sólido, Editora Edgard Blücher Ltda., 1978.

- [8] Cavalcanti G H. – Níveis Energéticos e transições Atômicas no Kr VI, Ar V e Xe VIII. Tese de Doutorado – Unicamp, IFGW, 1994.
- [9] Fisher C F. – The Hartree-Fock Method for Atoms, John Wiley & Sons, 1977.
- [10] Coutinho LH. – Forças de Osciladores Ponderadas e Tempos de Vida para os Espectros de Si VI e Si VII. Tese de Mestrado – Unicamp, IFGW, 1998.
- [11] Luna F R T. – Espectroscopia Atômica de Emissão de Gases e Metais, Tese de Doutorado – Unicamp, IFGW, 1998.
- [12] Jackson J D. – Classical Eletrodynamics, Jonh Wiley & Sons, New York, 1962.
- [13] Fowler A. – Phil. Trans. 1925; 225A: 1.
- [14] Shenstone A G. – Proc. Roy. Soc. 1961; 261A: 153-174.
- [15] Edlén B. – Rept. Progr. Phys. 1963; 26:181.
- [16] Kaufman V and Ward J F. – J. Opt. Soc. Am. 1966; 56 vol 11:1591-1597.

- [17] Moore C E. – Nat Stand Ref Data Ser, Nat Bur Stand (US) 1971;35/V.I:156-157.
- [18] Beyer L M, Maddox W E, Bridwell L B, Duncan D D, Bigham L L and Abell J C. – Optical Spectra, Nuclear Instruments and Methods 1973; 110: 61-67.
- [19] Martin W C and Zalubas R. – J Phys Chem Ref Data 1983; 12: 364-367.
- [20] Kelly R L. – J Phys Chem Ref Data 1987; 16: 285-287.
- [21] Söderqvist J. – Nova Acta Reg Soc Sci Uppsala (IV) 1934; 9: 5-102.
- [22] Ferner E. – Ark. Mat. Astr. Fys., 1941; 28 A: 1.
- [23] Ferner E. – Ark. Mat. Astr. Fys., 1948; 36A: 14-986.
- [24] Tousey R, Austin W E, Purcell J D and Widing K G. – Ann. Astrophys. 1965; 28: 755.
- [25] Fawcett B C. – J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 1970; 3: 1152.

- [26] Fawcett B C, Gabriel A H and Paget T M. – J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 1971,4:986-994.
- [27] Trabert E, Heckmann PH, Buttlar Hv and Brand K. – U.V. Z Physik A 1976; 279:127-133.
- [28] Griffin, P M, Pegg D J and Sellin I A. – Plenum-Press, New York, 1, 321, 1976.
- [29] Kastner SO, Bhatia AK and Cohen L. – Phys Scr 1977; 15: 259-267.
- [30] Kink I and Engström L. – Phys Scr 1999; 59: 355-360.
- [31] Kink I, Engström L and Feldman U. – ApJ 1999; 512: 496-499.
- [32] Verner D A, Verner E M and Ferland G F. – Atomic Data Nucl Data 1996; 64: 1-180.
- [33] Doschek G A. – Space Sci. Rev. 1972; 13: 765.
- [34] Behring, W. E., Cohen, L. and Feldman, V. – Astrophys. J. 1972; 175: 493.

- [35] Sandlin G D, Brueckner G E and Tousey R. – *Astrophys. J.* 1977; 214: 898.
- [36] Dere K P. – *Astrophys. J.* 1978; 221:1062.
- [37] Cheng K T, Kim Y K and Desclaux J P. – *Atomic Data Nucl. Data Tables* 1979; 24:111.
- [38] Mason H E and Bhatia A K. – *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 1978; 184: 423.
- [39] Aggarwal K M and Baluja K L. – *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* 1983; 16:107.
- [40] Aggarwal K M and Kingston A E. – *Astron. Astrophys.* 1986; 162: 333.
- [41] Bhatia A K and Doschek G A. – *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 1993; 55: 281.
- [42] Radziemski U and Kaufman V. – *J. Opt. Soc. Am.* 1969; 59: 424-443.
- [43] Sobelman I. – *Atomic Transitions and Radiative Transitions.* Springer, Berlin, 1979.

- [44] Coen-Tanouddji, B Diu and F Laloe. – Quantum Mechanics, John Wiley & Sons, New York, 1997.
- [45] Messiah A. – Quantum Mechanics, North-Holland, Amsterdam, 1968.
- [46] Sakurai J J. – Modern Quantum Mechanics, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1985.
- [47] Slater J C. – Quantum Theory of Atomic Structure, MacGraw-Hill, New York, 1960.
- [48] Herzber G. – Atomic Spectra and Atomic Structure, Dover Publications, New York, 1945.
- [49] Svanberg S. – Atomic and Molecular Spectroscopy, Springer-Verlag, 1992.
- [50] Thorne A, Litzén U. and Johansson S. – Spectrophysics Principles and Applications, Springer-Verlag, 1999.
- [51] Callegari F. – Espectroscopia Atômica de Emissão do Silício, Xenônio e Argônio. Tese de Doutorado – Unicamp, IFGW, 2000.

Apêndice

A₁ – Trabalho publicado

Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si IX Spectrum

J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer Vol. 61, Nº 5, pp. 665 – 669, 1999.

A₂ – Trabalho aceito para publicação⁸

Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si VIII Spectrum.

A₃ – Trabalho concluído⁹

Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si II Spectrum.

⁸ A prova final para este trabalho já foi concluída e enviada, aguardamos a publicação deste artigo nos primeiros meses de 2001.

⁹ Este trabalho poderá sofrer algumas modificações de acordo com a revisão final e ou exigência do editor científico.

A₁ – Trabalho Publicado

Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si IX Spectrum

J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer Vol. 61, N° 5, pp. 665 – 669, 1999.



Pergamon

J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer Vol. 61, No. 5, pp. 665–669, 1999

© 1999 Elsevier Science Ltd. All rights reserved

Printed in Great Britain

PII: S0022-4073(98)00054-5

0022-4073/99 \$—see front matter

WEIGHTED OSCILLATOR STRENGTHS AND LIFETIMES FOR THE Si IX SPECTRUM

R. V. ORLOSKI,[†] A. G. TRIGUEIROS^{†‡§} and G. H. CAVALCANTI[¶][†]Instituto de Física “Gleb Wataghin”, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, 13083-970Campinas, São Paulo, Brazil, [‡]Instituto de Física, Universidade do Estado de Rio de Janeiro, UERJ,20550-013 Maracará, Rio de Janeiro, RJ, Brazil and [¶]Instituto de Física, Universidade Federal

Fluminense, Campus da Praia Vermelha - Gragoatá 24210-310 Niterói, Rio de Janeiro, Brazil

(Received 22 December 1997)

Abstract—The weighted oscillator strengths (gf) and the lifetimes presented in this work were carried out in a multiconfiguration Hartree–Fock relativistic (HFR) approach. In this calculation, the electrostatic parameters were optimized by a least-squares procedure, in order to improve the adjustment to experimental energy levels. This method produces gf values that are in better agreement with intensity observations and lifetimes values that are closer to the experimental ones. In this work we revised all the experimentally known electric dipole Si IX spectrum lines. © 1999 Elsevier Science Ltd. All rights reserved.

1. INTRODUCTION

The ground state configuration of eight times ionized silicon, Si IX, is $1s^2 2s^2 2p^2$ with the terms 1S , 3P and 1D . Si IX belongs to the CI isoelectronic sequence. The ionization potential for Si IX is 2832000 cm^{-1} (351.13 eV). The Si IX spectrum was studied for the first time by Ferner,^{1,2} in the short-wavelength range, 44–67 Å. Fawcett³ and Fawcett et al⁴ by means of laser produced plasmas as a light source identified transitions in the 227–441 Å spectral range. Griffin et al⁵ classified two lines at 209.800 and 360.900 Å. Most of the lines shown in the Table 1 have been identified in the solar spectrum.^{6–12} The Si IX spectrum has been the center of many theoretical calculations. Most of the calculations have been carried out to obtain theoretical transition probabilities, Ref. 13 collision strengths, Refs. 14–16, oscillator strengths, decay rates and collision strengths, Bhatia and Doschek.¹⁷

The purpose of this work is to present a review of all known dipole transitions of Si IX, their oscillator strengths calculated from fitted values of the energy parameters and the lifetimes, calculated by the same method, for all known experimental energy levels. Both parameters are important in the study of laboratory and astrophysical spectra. As silicon is an element of great astrophysical interest.

2. CALCULATION

The oscillator strength $f(\gamma\gamma')$ is a physical quantity related to line intensity I and transition probability $W(\gamma\gamma')$, as given by Sobelman:¹⁸

$$W(\gamma\gamma') = \frac{2\omega^2 e^2}{mc^3} |f(\gamma\gamma')|, \quad (1)$$

with

$$I \propto gW(\gamma\gamma') \propto g|f(\gamma\gamma')| = gf.$$

Here m is the electron mass, e the electron charge, γ the initial quantum state, $\omega = (E(\gamma) - E(\gamma'))/\hbar$, with $E(\gamma)$ the initial state energy, and $g = (2J + 1)$ is the number of degenerate quantum states with

§To whom all correspondence should be addressed.

angular momentum J (in the formula for the initial state). Quantities with primes refer to the final state.

In the above equation, the weighted oscillator strength, gf , is given by Cowan:¹⁹

$$gf = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h} S, \quad (2)$$

where $\sigma = |E(\gamma) - E(\gamma')|/hc$ with h being Planck's constant, c the velocity of light, and a_0 the Bohr radius. The electric dipole line strength is defined by

$$S = |\langle \lambda J \| \mathbf{P}^1 \| \gamma' J' \rangle|^2. \quad (3)$$

This quantity is a measure of the total strength of the spectrum line, including all possible transitions between M and M' . The tensorial operator $\mathbf{P}^1$ (first order) in the reduced matrix element is the classical dipole moment for the atom in units of $-ea_0$.

To obtain gf , we need to calculate S first, or its square root:

$$S_{\gamma\gamma'}^{1/2} = \langle \gamma J \| \mathbf{P}^1 \| \gamma' J' \rangle. \quad (4)$$

In a multiconfiguration calculation we have to expand the wavefunction $|\gamma J\rangle$ in terms of single configuration wavefunctions, $|\beta J\rangle$, for both upper and lower levels

$$|\gamma J\rangle = \sum_{\beta} y_{\beta J} |\beta J\rangle. \quad (5)$$

Therefore, we can have the multiconfigurational expression for $S_{\gamma\gamma'}^{1/2}$:

$$S_{\gamma\gamma'}^{1/2} = \sum_{\beta} \sum_{\beta'} y_{\beta J} \langle \beta J \| \mathbf{P}^1 \| \beta' J' \rangle y_{\beta' J'}. \quad (6)$$

The probability per unit time of an atom in a specific state γJ to make a spontaneous transition to any state with lower energy is

$$P(\gamma J) = \sum A(\gamma J, \gamma' J'), \quad (7)$$

where $A(\gamma J, \gamma' J')$ is the Einstein spontaneous emission transition probability rate, for a transition from γJ to $\gamma' J'$ state. The sum is over all $\gamma' J'$ states with $E(\gamma' J') < E(\gamma J)$.

The Einstein probability rate is related to gf by the following relation given by Cowan:¹⁹

$$gA = \frac{8\pi^2 e^2 \sigma^2}{mc} gf. \quad (8)$$

Natural lifetime $\tau(\gamma J)$ is the inverse of the probability $P(\gamma J)$, then

$$\tau(\gamma J) = \left(\sum A(\gamma J, \gamma' J') \right)^{-1} \quad (9)$$

The natural lifetime is applicable to an isolated atom. Interaction with matter or radiation will reduce the lifetime of a state.

The gf and natural lifetimes values given in Tables 1 and 2, respectively, were calculated according to the above equations.

In order to obtain best values for oscillator strengths, we calculated the reduced matrix elements $\mathbf{P}^1$ by using optimized values $y_{\beta J}$ and $y_{\beta' J'}$, which were obtained using as input to the matrix calculation, Coman's code, RCG Mod, and energy parameters which were adjusted from a least-squares calculation. RCE Mod 20. In this adjustment, the code tries to fit the experimental energy values by varying the electrostatic parameters. This procedure improved σ values used in Eq. (2). The energy parameters for this calculation are given by Orloski et al.²⁰

3. DISCUSSION

The theoretical predictions for the energy levels of the configurations were obtained by diagonalizing the energy matrices with appropriate Hartree-Fock relativistic (HFR) values for the energy

Weighted oscillator strengths, lifetimes, solar spectrum

667

Table 1. Weighted oscillator strengths and spectral lines for the Si IX spectrum

g/f	Int	Wavelengths (Å)		Levels (cm ⁻¹)		Configurations	Terms	J J	Ref.
		Observed	Calculated	Lower	Upper				
0.438	10	44.215	44.216	2481–2264122	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)4d	3P–3D ^o	1–2	1	
0.823	10	44.249	44.247	6402–2266450	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)4d	3P–3D ^o	2–3	1	
0.688	50	51.113	51.113	52884–2009334	2s ² 2p ² –2s2p ² (2D)3p	1D–1D ^o	2–2	1	
0.830	100	51.362	51.362	52884–1999849	2s ² 2p ² –2s2p ² (2D)3p	1D–1F ^o	2–3	1	
0.632	10	52.671	52.670	292126–2190727	2s2p ³ –2s2p ² (2P)3d	3D ^o –3F	3–4	2	
0.405	20	52.810	52.810	2481–1896070	2s ² 2p ² –2s2p ² (4P)3p	3P–3D ^o	1–2	1	
0.676	50	52.838	52.838	6402–1898989	2s ² 2p ² –2s2p ² (4P)3p	3P–3D ^o	2–3	1	
0.154	10	53.992	53.992	6402–1858538	2s ² 2p ² –2s2p ² (4P)3p	3P–3S ^o	2–1	1	
0.001	50	54.403	54.395	0–1838406	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3d	3P–1P ^o	0–1	1	
1.619	100	54.841	54.840	150275–1973758	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3d	5S ^o –5P	2–1	1	
2.525	100	54.870	54.869	150275–1972794	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3d	5S ^o –5P	2–2	1	
3.689	100	54.907	54.906	150275–1971566	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3d	5S ^o –5P	2–3	1	
0.298	50	55.094	55.094	2481–1817569	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3d	3P–3P ^o	1–0	1	
0.388	50	55.116	55.115	2481–1816867	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3d	3P–3P ^o	1–1	1	
0.404	50	55.234	55.234	6402–1816867	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3d	3P–3P ^o	2–1	1	
1.534	150	55.272	55.272	6402–1815646	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3d	3P–3P ^o	2–2	1	
1.066	50	55.305	55.305	0–1808155	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3d	3P–3D ^o	0–1	1	
2.327	100	55.356	55.356	2481–1808978	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3d	3P–3D ^o	1–2	1	
3.714	100	55.401	55.401	6402–1811433	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3d	3P–3D ^o	2–3	1	
1.717	50	55.511	55.501	292126–2093892	2s2p ³ –2s2p ² (2D)3d	3D ^o –3D	3–3	1,2	
4.196	150	55.781	55.780	292126–2084874	2s2p ³ –2s2p ² (2D)3d	3D ^o –3F	3–4	1,2	
4.442	150	56.027	56.027	52884–1837739	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3d	1D–1F ^o	2–3	1	
1.326	50	57.157	57.148	344063–2093892	2s2p ³ –2s2p ² (2D)3d	3P ^o –3D	2–3	1,2	
0.949	50	57.434	57.434	52884–1794014	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3d	1D–1D ^o	2–2	1	
0.121	50	57.589	57.589	52884–1789328	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3d	1D–3F ^o	2–2	2	
1.134	100	57.778	57.785	107838–1640793	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3d	1S–1P ^o	0–1	1	
0.799	50	58.150	58.152	292126–1898989	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3d	3D ^o –3D	3–3	1	
2.502	50	58.906	58.905	292126–1989769	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3d	3D ^o –3F	3–4	1	
1.759	100	59.004	59.003	292200–1987040	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3d	3D ^o –3F	2–3	1	
1.175	50	59.077	59.087	291926–1984355	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3d	3D ^o –3F	1–2	1	
1.766	100	59.966	59.963	344063–2011745	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3d	3P ^o –3D	2–3	1,2	
0.001	20	60.459	60.478	440407–2093892	2s2p ³ –2s2p ² (2D)3d	1D ^o –3D	2–3	1	
0.302	100	60.989	60.990	150275–1789895	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3s	5S ^o –5P	2–3	1	
0.213	50	61.109	61.109	150275–1836704	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3s	5S ^o –5P	2–2	1	
0.127	50	61.190	61.189	150275–1784559	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3s	5S ^o –5P	2–1	1	
0.573	50	61.355	61.383	344031–1972794	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3d	3P ^o –3P	2–2	1	
0.104	50	61.502	61.504	2481–1628391	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3s	3P–3P ^o	1–2	1	
0.418	100	61.546	61.550	292126–1916829	2s2p ³ –2s2p ² (2D)3s	3D ^o –3D	3–3	1,2	
0.081	50	61.600	61.604	0–1623275	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3s	3P–3P ^o	0–1	1	
0.306	100	61.649	61.653	6402–1628391	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3s	3P–3P ^o	2–2	1	
0.102	100	61.852	61.848	6402–1623275	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3s	3P–3P ^o	2–1	2	
0	20	62.454	62.455	492832–2093979	2s2p ³ –2s2p ² (2D)3d	1P ^o –3D	1–2	1	
0.301	50	62.974	62.976	52884–1640793	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3s	1D–1P ^o	2–1	1	
0.001	20	63.478	63.472	52884–1628391	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3s	1D–3P ^o	2–2	1,2	
0.182	100	63.586	63.582	344031–1916829	2s2p ³ –2s2p ² (2D)3s	3P ^o –3D	2–3	1	
0.062	10	65.236	65.234	107838–1640793	2s ² 2p ² –2s ² 2p(2P ^o)3s	1S–1P ^o	0–1	1	
0	100	66.912	66.912	292200–1786704	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3s	3D ^o –5P	2–2	1	
0.001	50	67.574	67.569	492832–1973180	2s2p ³ –2s2p ² (4P)3d	1P ^o –3P	1–2	1	
0	50	209.800	209.840	1789895–2266450	2s2p ² (4P)3s–2s ² 2p(2P ^o)4d	5P–3D ^o	3–3	5	
0.095	80	223.700	223.789	0–446849	2s ² 2p ² –2s2p ³	3P–3S ^o	0–1	6	
0.290	800	225.080	225.039	2481–446849	2s ² 2p ² –2s2p ³	3P–3S ^o	1–1	6	
0.508	800	227.060	227.042	6402–446849	2s ² 2p ² –2s2p ³	3P–3S ^o	2–1	6	
0.568		227.300	227.299	52884–492832	2s ² 2p ² –2s2p ³	1D–1P ^o	2–1	4	
0.158	50	257.255	257.097	291926–680884	2s2p ³ –2p ⁴	3D ^o –3P	1–0	4	
0.923	20	258.073	258.049	52884–440407	2s ² 2p ² –2s2p ³	1D–1D ^o	2–2	8	
0.351		258.360	258.382	292200–679225	2s2p ³ –2p ⁴	3D ^o –3P	2–1	4	
0.180		259.750	259.744	107838–492832	2s ² 2p ² –2s2p ³	1S–1P ^o	0–1	4	
0.700		261.410	261.421	292126–674651	2s2p ³ –2p ⁴	3D ^o –3P	3–2	4	
0.077	20	290.680	290.673	0–344031	2s ² 2p ² –2s2p ³	3P–3P ^o	0–1	6	
0.081	80	292.790	292.755	2481–344063	2s ² 2p ² –2s2p ³	3P–3P ^o	1–2	6	
0.076	80	292.790	292.785	2481–344029	2s ² 2p ² –2s2p ³	3P–3P ^o	1–1	6	
0.082	80	292.790	292.783	2481–344031	2s ² 2p ² –2s2p ³	3P–3P ^o	1–0	6	
0.327	150	296.170	296.155	6402–344063	2s ² 2p ² –2s2p ³	3P–3P ^o	2–2	6	
0.028		298.320	298.333	344029–679225	2s2p ³ –2p ⁴	3P ^o –3P	1–1	3	
0.181		302.510	302.492	344063–674651	2s2p ³ –2p ⁴	3P ^o –3P	2–2	3	

continued

668

R. V. Orloski et al

Table 1—continued

gf	Int	Wavelengths (Å)		Levels (cm ⁻¹)		Configurations	Terms	J-J	Ref.
		Observed	Calculated	Lower	Upper				
0.382		305.850	305.880	492832–819758		2s2p ³ –2p ⁴	¹ P ^o – ¹ S	1–0	4
0.081		342.970	342.552	0–291926		2s ² 2p ² –2s2p ³	³ P– ³ D ^o	0–1	3
0.179	20	345.070	345.162	2481–292200		2s ² 2p ² –2s2p ³	³ P– ³ D ^o	1–2	6
0.294	50	349.930	349.989	6402–292126		2s ² 2p ² –2s2p ³	³ P– ³ D ^o	2–3	6
1.049		358.290	358.248	440407–719543		2s2p ³ –2p ⁴	¹ D ^o – ¹ D	2–2	4
0	50	360.900	360.904	1987040–2264122		2s2p ² (⁴ P)3d–2s ² 2p(² P ^o)4d	³ F– ³ D ^o	3–2	5
0.080		427.100	427.286	446849–680884		2s2p ³ –2p ⁴	³ S ^o – ³ P	1–0	3
0.233		430.370	430.337	446849–679225		2s2p ³ –2p ⁴	³ S ^o – ³ P	1–1	3
0.367		438.940	438.978	446849–674651		2s2p ³ –2p ⁴	³ S ^o – ³ P	1–2	3
0.177		441.030	441.091	492832–719543		2s2p ³ –2p ⁴	¹ P ^o – ¹ D	1–2	3

Note: 1) weighted oscillator strengths for atomic transitions obtained by the method described in Sect. 2.

Int: Observed line intensities.

Wavelengths

(Å) calculated: Wavelength corresponding to the energy levels difference between the experimental adjusted energy level values.

Levels (cm⁻¹): The numerical values of the energy levels are the obtained by a optimized procedure using the program ELCALC.

Configurations

Terms and J-J: Level designations for the transition, including configuration, parentage, term and total angular momentum.

For practical purposes we show them in three separate columns.

Ref.: Reference used in this work. 1 and 2 refer to the work of Ferner published in 1941 and 1948, respectively. See references.

Lifetimes (ps): The lifetimes for the energy level obtained by the method described in Sect. 2.

Table 2. Lifetimes for the Si IX spectrum

Configuration	Terms	Energy(cm ⁻¹)	Lifetimes (ps)	Configuration	Terms	Energy (cm ⁻¹)	Lifetimes (ps)
2p ⁴	³ P ₂	674651	43	2s2p ³	³ P ₁	344029	157
	³ P ₁	679225	43		³ P ₀	344031	156
	³ P ₀	680884	43		¹ D ₂	440407	54
	¹ D ₂	719543	82		³ S ₁	446849	26
	¹ S ₀	819758	36		¹ P ₁	492832	33
2s2p ² (⁴ P)3s	⁵ P ₁	1784559	13	2s ² 2p(² P ^o)3s	³ P ₁	1623275	7
	⁵ P ₂	1786704	13		³ P ₂	1628391	7
	⁵ P ₃	1789895	13		¹ P ₁	1640793	5
2s2p ² (² D)3s	³ D ₃	1916829	6	2s ² 2p(² P ^o)3d	³ F ₂	1789328	19
2s2p ² (⁴ P)3d	⁵ P ₃	1971566	1		¹ D ₂	1794014	3
	⁵ P ₂	1972794	1		³ D ₁	1808155	1
	⁵ P ₁	1973758	1		³ D ₂	1808978	1
	³ P ₂	1972794	2		³ D ₃	1811433	1
	³ F ₂	1984355	2		³ P ₂	1815646	1
	³ F ₃	1987040	2		³ P ₁	1816867	1
	³ F ₄	1989769	2		³ P ₀	1817569	2
	³ D ₃	1898989	1		¹ F ₃	1837739	1
	³ F ₄	2084874	1	2s2p ² (⁴ P ^o)3p	¹ P ₁	1838406	1
2s2p ² (² D)3d	³ D ₃	2093892	1		³ S ₁	1858538	4
	³ D ₂	2093979	1		³ D ₂	1896070	4
2s2p ² (² P)3d	³ F ₄	2190727	5		³ D ₃	1898989	4
2s2p ³	³ D ₃	292126	436	2s2p ² (² D)3p	¹ F ₃	1999849	3
	³ D ₂	292200	418	2s2p ² (² D)3p	¹ D ₂	2009334	3
	³ D ₁	291926	408	2s ² 2p(² P ^o)4d	³ D ₂	2264122	3
	³ P ₂	344063	160	2s ² 2p(² P ^o)4d	³ D ₃	2266450	2

parameters. For this purpose the computer code developed by Cowan¹⁹ was used. The interpretation of the configuration level structures were made by a least-squares fit of the observed levels. More details of the calculations and the tables with the theoretical Hartree Fock parameters and their fitting values can be found in Ref. 20. The energy level values were determined from the

observed wavelengths by an interactive optimization procedure using the program ELCALC,²¹ in which the individual wavelengths are weighted according to their uncertainties. The energy levels adjusted by this method were used to optimize the electrostatic parameters by a least-squares procedure and finally these optimized parameters were used again to calculate the *gf* and lifetimes values. This method produces *gf* values that are in better agreement with line intensity observations and lifetimes values that are closer to the experimental ones.

We have thus presented all known electric dipole transitions in Si IX, their oscillator strengths and lifetimes values for experimental known energy levels. The present work is part of an ongoing program for obtaining weighted oscillator strength, *gf*, and lifetimes for elements of interest for astrophysical importance. The work for Si V and Si VII were concluded by Trigueiros and Jupén,²² and Coutinho and Trigueiros.²³ In this particular work on Si IX, the results are part of the Orloski's diploma work that is in progress.

Acknowledgements – The authors wish to thank Dr C. J. B. Pagan for valuable discussions and advice. This work was financially supported by the Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), Brazil and Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Brazil. Computations were carried out at the Prof. John David Rogers Computational Center, UNICAMP.

REFERENCES

1. Ferner, E., *Ark. Mat. Astr. Fys.*, 1941, **28A**, 1.
2. Ferner, E., *Ark. Mat. Astr. Fys.*, 1948, **36A**, 1.
3. Fawcett, B. C., *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.*, 1970, **3**, 1152.
4. Fawcett, B. C., Gabriel, A. H. and Paget, T. M., *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.*, 1971, **4**, 986.
5. Griffin, P. M., Pegg, D. J. and Sellin, I. A., in *Beam-Foil Spectroscopy*, eds A. Sellin and D. J. Pegg. Plenum Press, New York, Vol. 1, 1976, 321pp.
6. Tousey, R., Austin, W. E., Purcell, J. D. and Widing, K. G., *Ann. Astrophys.*, 1965, **28**, 755.
7. Doschek, G. A., *Space Sci. Rev.*, 1972, **13**, 765.
8. Behring, W. E., Cohen, L. and Feldman, V., *Astrophys. J.*, 1972, **175**, 493.
9. Firth, J. G., Freeman, F. F., Gabriel, A. H., Jones, B. B., Jordan, C., Negus, C. R., Shenton, D. B. and Turner, R. F., *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 1974, **66**, 543.
10. Behring, W. E., Cohen, L., Feldman, W. E. and Doschek, G. A., *Astrophys. J.*, 1976, **203**, 521.
11. Sandlin, G. D., Brueckner, G. E. and Tousey, R., *Astrophys. J.*, 1977, **214**, 898.
12. Dere, K. P., *Astrophys. J.*, 1978, **221**, 1062.
13. Cheng, K. T., Kim, Y.-K. and Desclaux, J. P., *Atomic Data Nucl. Data Tables*, 1979, **24**, 111.
14. Mason, H. E. and Bhatia, A. K., *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 1978, **184**, 423.
15. Aggarwal, K. M. and Baluja, K. L., *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.*, 1983, **16**, 107.
16. Aggarwal, K. M. and Kingston, A. E., *Astron. Astrophys.*, 1986, **162**, 333.
17. Bhatia, A. K. and Doschek, G. A., *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 1993, **55**, 281.
18. Sobelman, I., *Atomic Transitions and Radiative Transitions*. Springer, Berlin, 1979.
19. Cowan, R. D., *The Theory of Atomic Structure and Spectra*. Univ. California Press, Berkeley, 1981.
20. Orloski, R. V., Cavalcanti, G. H. and Trigueiros, A. G., *UNICAMP Reports on Atomic and Molecular Physics*, "Hartree-Fock and Fit Parametric for Si IX Spectrum", URAMP, 1987.
21. Radziemski, L. J. and Kaufman, V., *J. Opt. Soc. Am.*, 1969, **59**, 42.
22. Trigueiros, A. G. and Jupén, C., *JQSRT*, 1996, **56**, 7.
23. Coutinho, L. H. and Trigueiros, A. G., *Astrophys. J.*, 1998, (in press).

A₂ – Trabalho Aceito para Publicação

Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si VIII Spectrum¹⁰

¹⁰ A prova, revisão final, para este trabalho já foi concluída e enviada para JQSRT. Aguardamos, segundo informação do editor científico, a publicação deste artigo para os primeiros meses do ano de 2001.

PROFESSOR P. VARANASI *Editor*
149 Dana Hall
Marine Sciences Research Center
State University of New York
Stony Brook, NY 11794-5000, USA
Tel (516) 632-8313. Fax (516) 632-9389
e-mail: jqsr@notes.cc.sunysb.edu

19 May 2000

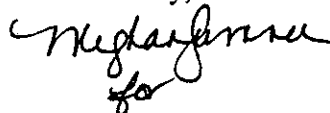
Dr. Renata Orloski
Instituto de Física
UNICAMP
13083-970
Campinas SP Brazil

Dear Dr. Orloski:

Please follow the instructions for each item marked concerning the publication of your paper:
Ms. 99-125: "*Weighted oscillator strengths and lifetimes for the Si VIII spectrum*" by Orloski & Trigueiros (23 December 1999).

- ☒ Your paper has been accepted for publication.
- ☐ Your paper will be accepted for publication when it is resubmitted in proper form according to the enclosed guidelines and the referee's recommendations. All of the referee's remarks and questions must be answered in detail.
- ☐ Your paper has not been submitted in acceptable form. Please follow the enclosed guidelines carefully.
- ☐ The entire list of referees should be carefully retyped according to the enclosed guidelines.
- ☒ Electronic and hard copy versions of your manuscript should be sent to me. Please follow the instructions given in the enclosed pamphlet in preparing the electronic version. All further correspondence regarding this paper should be sent along with your Fax No. to: N. Gledhill, JQSRT, Elsevier Science Ltd., Bampfylde Street, Exeter EX1 2AH, UK. Her e-mail address is n.gledhill@elsevier.co.uk.

Sincerely,



Prasad Varanasi
Editor

PV/ms
cc: Production Editor



ELSEVIER
SCIENCE

Dr. R.V. Orloski
Universidade do Estado
Instituto de Quimica
Inst de Fisica "Gleb Wataghin"
UNICAMP
13083 970 Campinas Sao Paulo
Brazil

Phone: not available
Fax: +55 19 788 5427
E-mail:
renata@ifi.unicamp.br

Elsevier Science Ltd

Bampfylde Street
Exeter EX1 2AH
England

Tel (+44) (0) 1392 251558
Fax (+44) (0) 1392 425370
Fax (+44) (0) 1392 426436

Exeter, 01 September 2000

Re: Weighted oscillator strengths and lifetimes for the Si VIII spectrum

Journal: *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*

Editorial reference: Our reference: JQSRT 1218

Dear Dr. Orloski,

Corrected proofs of the above paper are very urgently required for inclusion in the next issue of the journal. Attached is a faxed copy of your proof, please read and correct the attached proof and fax/e-mail your corrections by return. Please respond immediately as the issue containing your article is going to press within the next 10 days.

Please note that, so as not to delay the issue, if your corrections are not received at this office within 10 days of the date of this letter your paper will have to be published as it appears in the attached proofs (i.e. no further corrections will be incorporated).

Thank you for your cooperation in this matter. I look forward to hearing from you.

Yours sincerely,

Elsevier Science
Ms Lucy Stobbs
Administrator
Fax: +44 (0) 1392 425370
E-mail: l.stobbs@elsevier.co.uk

WEIGHTED OSCILLATOR STRENGTHS AND LIFETIMES FOR THE Si VIII SPECTRUM

R. V. Orloski^{a,*} and A. G. Trigueiros^{a,b}

^aInstituto de Física “Gleb Wataghin”, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP
13083-970 Campinas, São Paulo, Brazil; ^bInstituto de Química, Universidade do Estado
do Rio de Janeiro, UERJ, 20550-013 Maracanã, Rio de Janeiro, RJ, Brazil.

*Corresponding author Fax: +55 19 788 5427; E-mail: renata@ifi.unicamp.br,
agtri@ifi.unicamp.br, and tri@uerj.br

Received: _____; Accepted: _____

Abstract

The weighted oscillator strengths (gf) and the lifetimes for Si VIII presented in this work were carried out in a multiconfiguration Hartree-Fock relativistic (HFR) approach. In this calculation, the electrostatic parameters were optimized by a least-squares procedure, in order to improve the adjustment to experimental energy levels. This method produces gf -values that are in better agreement with intensity observations and lifetime values that are closer to the experimental ones. In this work we present all the experimentally known electric dipole Si VIII spectral lines.

Subject heading: atomic data

1. INTRODUCTION

The ground state configuration of seven times ionized silicon, Si VIII, is $1s^2 2s^2 2p^3$ with the term 4S . Si VIII belongs to the N I isoelectronic sequence and its ionization potential is $2\,445\,300\text{ cm}^{-1}$ (303.18 eV). The spectrum was analyzed for the first time by Söderqvist [1] and Ferner [2,3] in the grating incidence region. Tousey et al [4] reported a Si VIII line at 314.31 Å. Fawcett [5] and Fawcett et al. [6] classified Si VIII transitions obtained by laser produced plasmas. Moore [7] summarized the energy level values of Si VIII spectrum. Träbert et al. [8] and Griffin et al. [9], using the beam-foil technique studied the spectra of highly ionized stripped silicon ions in the extreme ultraviolet and some Si VIII transitions were classified. Kastner et al. [10] identified some lines in the Si VIII spectrum. Martin and Zalubas [11] published energy level values for the atom and all positive ions of silicon. Kelly [12] summarized all the wavelengths published for Si VIII. More recently Kink and Engström [13] and Kink et al. [14] studied the Si VIII spectrum and identified new lines that are presented in the solar coronal spectrum.

The purpose of this work is to present a review of all known electric dipole transitions of Si VIII, their oscillator strengths calculated from fitted values of the energy parameters and the lifetimes, calculated by the same method, for all known experimental energy levels. The work we present here was stimulated by the desire to determine weighted oscillator strengths and lifetimes for the Si VIII spectrum. Both parameters are important in the study of laboratory and solar spectra, as silicon is an astrophysically important element.

2. CALCULATION

The oscillator strength $f(\gamma\gamma')$ is a physical quantity related to line intensity I and transition probability $W(\gamma\gamma')$, as given by Sobelman [15]:

$$W(\gamma\gamma') = \frac{2\omega^2 e^2}{mc^3} |f(\gamma\gamma')| \quad (1)$$

with,

$$I \propto gW(\gamma\gamma') \propto g |f(\gamma\gamma')| = gf.$$

Here m = electron mass, e = electron charge, γ = initial quantum state, $\omega = (E(\gamma) - E(\gamma'))/\hbar$, $E(\gamma)$ = initial state energy, $g = (2J + 1)$ is the number of degenerate quantum states with angular momentum J (in the formula for the initial state). Quantities with primes refer to the final state.

In the equation above, the weighted oscillator strength, gf , is given by Cowan [16]:

$$gf = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h} S, \quad (2)$$

where $\sigma = |E(\gamma) - E(\gamma')|/hc$, h = Planck's constant, c = light velocity, and a_0 = Bohr radius, and the electric dipole line strength is defined by:

$$S = \left| \langle \gamma J \| \mathbf{P}^1 \| \gamma' J' \rangle \right|^2. \quad (3)$$

This quantity is a measure of the total strength of the spectral line, including all possible transitions between m, m' different J_z eigenstates. The tensor operator $\mathbf{P}^1$ (first order) in the reduced matrix element is the classical dipole moment for the atom in units of $-ea_0$.

To obtain gf , we need to calculate S first, or its square root:

$$S_{\gamma\gamma'}^{1/2} = \langle \gamma J \| \mathbf{P}^1 \| \gamma' J' \rangle. \quad (4)$$

In a multiconfiguration calculation we have to expand the wavefunction $|\gamma J\rangle$ in terms of single configuration wavefunctions, $|\beta J\rangle$, for both upper and lower levels:

$$|\gamma J\rangle = \sum_{\beta} y_{\beta J}^{\gamma} |\beta J\rangle. \quad (5)$$

Therefore, we can have the multiconfigurational expression for $S_{\gamma\gamma'}^{1/2}$:

$$S_{\gamma\gamma'}^{1/2} = \sum_{\beta} \sum_{\beta'} y_{\beta J}^{\gamma} \langle \beta J \| \mathbf{P}^1 \| \beta' J' \rangle y_{\beta' J'}^{\gamma'} \quad (6)$$

The probability per unit time of an atom in a specific state γJ to make a spontaneous transition to any state with lower energy is

$$P(\gamma J) = \sum A(\gamma J, \gamma' J'), \quad (7)$$

where: $A(\gamma J, \gamma' J')$ is the Einstein spontaneous emission transition probability rate for a transition from the γJ to the $\gamma' J'$ state. The sum is over all $\gamma' J'$ states with $E(\gamma' J') < E(\gamma J)$.

The Einstein probability rate is related to gf through the following relation given by Cowan [16]:

$$gA = \frac{8\pi^2 e^2 \sigma^2}{mc} gf \quad (8)$$

Since the natural lifetime $\tau(\gamma J)$ is the inverse of the probability $P(\gamma J)$, then:

$$\tau(\gamma J) = \left(\sum A(\gamma J, \gamma' J') \right)^{-1} \quad (9)$$

Natural lifetime is applicable to an isolated atom. Interaction with matter or radiation will reduce the lifetime of a state.

The values for gf and lifetime given in Tables 1 and 2 respectively were calculated according to these equations.

In order to obtain better values for oscillator strengths, we calculated the reduced matrix elements P^1 by using optimized values of energy parameters which were adjusted from a least-squares calculation. In this adjustment, the code tries to fit experimental energy values by varying the electrostatic parameters. This procedure improves σ values used in eq. (2) and $y_{\beta J}^\gamma$ and $y_{\beta J}^\gamma$ values used in eq. (6).

3. DISCUSSION

The theoretical predictions for the energy levels of the configurations were obtained by diagonalizing the energy matrices with appropriate Hartree-Fock relativistic (HFR) values for the energy parameters. For this purpose the computer code developed by Cowan [16] was used.

The program allowed us to calculate energy levels, wavelengths, lifetimes, and transition probabilities. For the odd-parity configurations we have the following picture: $2s^22p^3$, $2p^5$, $2s^22p^23p$, $2s2p^33s$, $2s2p^33d$. For the even-parity case we study the $2s2p^4$, $2s^22p^23s$, $2s^22p^24s$, $2s2p^33p$, $2s^22p^23d$, and $2s^22p^24d$ configurations. We have included in the calculation an effective electrostatic parameter $\alpha(2p-2p)$ (Trees [17], Racah [18] and Judd [19]) belonging to all the configurations except for $2p^5$. The value of α parameter is a fitted one. The introduction of the α parameter lowered the RMS deviation from 841cm^{-1} to 353cm^{-1} for the odd-parity configurations and from 1053cm^{-1} to 609cm^{-1} for the even-parity configurations.

The interpretation of the configuration level structures were made by a least-squares fit of the observed levels. The energy level values were determined from the observed wavelengths by an interactive optimization procedure using the program ELCALC, Radziemski and Kaufman [20], in which the individual wavelengths are weighted according to their uncertainties. The energy levels adjusted by this method were used to optimize the electrostatic parameters by a least-squares procedure, and finally these optimized parameters were used again to calculate the gf - and lifetime values. This method produces gf -values that are in

better agreement with line intensity observations and lifetime values that are closer to the experimental ones.

Our results for *gf*-values are in good agreement with Verner et al. [21] calculations. For the transitions $2s^2 2p^3 \ ^4S_{3/2,3/2,3/2}^o - 2p^2(^3P)3d \ ^4P_{5/2,3/2,1,2}$ our results are 3.00×10^0 , 2.07×10^0 and 1.05×10^0 ; Verner results are 3.01×10^0 , 2.04×10^0 and 1.02×10^0 . For the transitions $2s^2 2p^3 \ ^4S_{3/2,3/2}^o - 2p^2(^3P)4d \ ^4P_{5/2,3/2}$ our results are 5.50×10^{-1} and 4.32×10^{-1} ; Verner results are 6.28×10^{-1} and 4.20×10^{-1} . For the transitions $2s^2 2p^3 \ ^4S_{3/2,3/2,3/2}^o - 2p^2(^3P)3s \ ^4P_{1/2,3/2,5/2}$ our results are 9.26×10^{-2} , 1.86×10^{-1} and 2.82×10^{-1} ; Verner results are 7.96×10^{-2} , 1.59×10^{-1} and 2.39×10^{-1} . For the transitions $2s^2 2p^3 \ ^4S_{3/2,3/2,3/2}^o - 2s2p^4 \ ^4P_{5/2,3/2,1,2}$ our results are 4.00×10^{-1} , 2.69×10^{-1} and 1.36×10^{-1} ; Verner results are 3.53×10^{-1} , 2.38×10^{-1} and 1.20×10^{-1} . Finally for the transition $2s^2 2p^3 \ ^4S_{3/2}^o - 2p^3(^5S^o)3p \ ^4P_{5/2}$ our result is 3.84×10^{-1} and Verner result is 3.50×10^{-1} .

We have presented oscillator strengths and lifetimes for all known electric dipole transitions in Si VIII. The present work is part of an ongoing program, whose goal is to obtain weighted oscillator strengths, *gf*, and lifetimes for elements of astrophysical importance. The works for Si III, Si V, Si VI, Si VII and Si IX have been concluded, Callegari and Trigueiros [22], Trigueiros and Jupén [23], Coutinho and Trigueiros [24], Coutinho and Trigueiros [25] and Orloski et al. [26]. In this particular work on Si VIII, the results are part of Orloski's M. Sc. thesis that is in progress.

Acknowledgements - This work was financially supported by the Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), Brazil, and by Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Brazil. Computations were carried out at the Prof. John David Rogers Computational Center, UNICAMP.

REFERENCES

1. Söderqvist J. Vakuumpunkenspektren Der Elemente Natrium, Magnesium, Aluminium und Silicium. Nova Acta Reg Soc Sci Uppsala (IV) 1934;9:5-102.
2. Ferner E. Vakuumpunkenspektrum von Silicium im Extremen Ultraviolett. Ark Mat Astr Fys 1941;28A:4-21.
3. Ferner E. Die Spektren von Hochionisiertem Aluminium, Silicium und Schwefel. Ark Mat Astr Fys 1948;36A:1-65.
4. Tousey R, Austin WE, Purcell JD, Widing KG. The Extreme Ultraviolet Emission from the Sun Between the Lyman-Alpha Lines of H I and C VI. Ann Astrophys 1965;28:755-773.
5. Fawcett BC. Classification of Highly Ionized Emission Lines Due to Transitions from Singly and Doubly Excited Levels in Sodium, Magnesium, Aluminium, Silicon, Phosphorous, Sulphur and Chlorine. J Phys B: Atom Molec Phys 1970;3:1152-1163.
6. Fawcett BC, Gabriel AH, Paget TW. New Observations of the Spectra of Argon X to XV and of Isoelectronic Emission Lines in Silicon VII to X, Phosphorus X, Sulphur IX to XII and Chlorine X to XIV. J Phys B: Atom Molec Phys 1971;4:986-994.
7. Moore CE. Nat Stand Ref Data Ser, Nat Bur Stand (US) 1971;35/V.I:156-157.
8. Träbert E, Heckmann PH, Buttler Hv, Brand K. Beam-Foil Spectrum of Silicon in the Extreme U.V. Z Physik A 1976;279:127-133.
9. Griffin PM, Pegg DJ, Sellin IA. Extreme Ultraviolet Spectra of Highly Stripped Silicon Ions., In: Sellin Ivan A, Pegg David J. editors. Beam-foil spectroscopy, New York : Plenum Press. 1976;1:321-329.
10. Kastner SO, Bhatia AK, Cohen L. Prediction and Identification of Some Transitions Associated with $2p^k$ and $2p^{k-1}3l$ Configurations in Si X - Seven - and Eight - electron Ions. Phys Scr 1977;15:259-267.
11. Martin WC, Zalubas R. Energy Levels of Silicon, Si I through Si XIV. J Phys Chem Ref Data 1983;12:364-367.
12. Kelly RL. Atomic and Ionic Spectrum Lines of Hydrogen Through Krypton. J Phys Chem Ref Data 1987;16:285-287.
13. Kink I, Engström L. Spectroscopic Investigations of the $2p^23l$ Configurations in Si VIII and S X. Phys Scr 1999;59:355-360.
14. Kink I, Engström L, Feldman U. New Identifications of Si VIII and S X Lines in the Solar Coronal Spectrum Measured by SOHO/SUMER. ApJ 1999;512:496-499.
15. Sobelman I. Atomic Spectra and Radiative Transitions Berlin: Springer, 1979.
16. Cowan RD. The Theory of Atomic Structure and Spectra Berkeley: Univ California Press., 1981.
17. Trees RE. Configuration Interaction in Mn II. Phys Rev 1951;83:756-760.
18. Racah G. $L(L+1)$ Correction in the Spectra of the Iron Group. Phys Rev 1952;85:381-382.

19. Judd BR. Complex Atomic Spectra. Rep Prog Phys 1985;48:907-954.
20. Radziemski LJ, Kaufman V. Wavelengths, Energy Levels, and Analysis of Neutral Atomic Chlorine (Cl I). J Opt Soc Am 1969;59:424-443.
21. Verner DA, Verner EM, Ferland GF. Atomic Data for Permitted Resonance Lines of Atoms and Ions from H to Si, and S, Ar, Ca and Fe. Atomic Data Nucl Data 1996;64:1-180.
22. Callegari F, Trigueiros AG. Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si III Spectrum. ApJS 1998;119:181-188.
23. Trigueiros AG, Jupén C. Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for Si V Spectrum. J Quant Spectrosc Radiat Transfer 1996;56:713-723.
24. Coutinho LH, Trigueiros AG. Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si VI Spectrum. ApJS 1999;121:591-597.
25. Coutinho LH, Trigueiros AG. Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si VII Spectrum. ApJS 1998;115:315-319.
26. Orloski RV, Trigueiros AG, Cavalcanti GH. Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si IX Spectrum. J Quant Spectrosc Radiat Transfer 1999;61:665-669.

TABLE 1. WEIGHTED OSCILLATOR STRENGTHS AND SPECTRAL LINES FOR THE Si VIII SPECTRUM

gf-VALUE ^a	INT. ^b	WAVELENGTHS (Å) ^c		LEVELS(cm ⁻¹) ^d		CONFIGURATIONS ^e		TERMS ^e	J-J ^e	REF. ^f
		Observed	Calculated	Lower	Upper					
4.32×10 ⁻¹	10	49.987	49.987	0	2000519	1s ² 2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)4d	4s ^{0.4} P	3/2-3/2	2
5.50×10 ⁻¹	50	50.019	50.019	0	1999239	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)4d	4s ^{0.4} P	3/2-5/2	2
2.99×10 ⁻¹	50	50.524	50.524	69157	2048415	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)4d	2D ^{0.2} D	5/2-5/2	2
6.87×10 ⁻¹	20	51.718	51.718	69157	2002721	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)4d	2D ^{0.2} F	5/2-7/2	2
4.60×10 ⁻¹	20	51.819	51.819	68889	1998684	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)4d	2D ^{0.2} F	3/2-5/2	2
4.55×10 ⁻¹	20	52.554	52.554	105646	2008451	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)4d	2P ^{0.2} D	3/2-5/2	2
3.15×10 ⁻²	10	53.770	53.770	69157	1928931	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)4s	2D ^{0.2} P	5/2-3/2	2
3.84×10 ⁻¹	150	58.885	58.885	0	1698225	2s ² 2p ³	2s2p ³ (⁵ S ⁰)3p	4s ^{0.4} P	3/2-5/2	2
1.31×10 ⁰	100	60.673	60.673	105646	1753826	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ S)3d	2P ^{0.2} D	3/2-5/2	2,10
1.05×10 ⁰	100	60.989	60.989	0	1639639	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3d	4s ^{0.4} P	3/2-1/2	2
2.07×10 ⁰	100	61.019	61.019	0	1638833	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3d	4s ^{0.4} P	3/2-3/2	2
3.00×10 ⁰	200	61.070	61.070	0	1637464	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3d	4s ^{0.4} P	3/2-5/2	2
6.60×10 ⁻³	50	61.175	61.175	0	1634654	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3d	4s ^{0.4} D	3/2-1/2	2
1.51×10 ⁻¹	100	61.223	61.223	0	1633372	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3d	4s ^{0.4} D	3/2-5/2	2
3.51×10 ⁻¹	50	61.395	61.398	69157	1697874	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)3d	2D ^{0.2} P	5/2-3/2	2
1.86×10 ⁻²	100	61.446	61.446	68889	1696335	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)3d	2D ^{0.2} P	3/2-1/2	2
3.51×10 ⁻¹	100	61.798	61.801	69157	1687263	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)3d	2D ^{0.2} D	5/2-5/2	2
9.03×10 ⁻¹	100	61.852	61.851	68889	1685671	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)3d	2D ^{0.2} D	3/2-3/2	2,3
2.17×10 ⁰	150	61.895	61.895	68889	1684529	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)3d	2D ^{0.2} F	3/2-5/2	2
4.95×10 ⁰	150	61.914	61.914	69157	1684301	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)3d	2D ^{0.2} F	5/2-7/2	2
3.49×10 ⁻¹	50	62.586	62.563	105646	1703448	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)3d	2P ^{0.2} S	3/2-1/2	2
9.63×10 ⁻¹	100	62.808	62.805	105646	1697874	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)3d	2P ^{0.2} P	3/2-3/2	2
9.97×10 ⁻¹	150	62.849	62.850	69157	1660237	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3d	2D ^{0.2} D	5/2-5/2	2
4.60×10 ⁻¹	50	62.884	62.888	68889	1659026	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3d	2D ^{0.2} D	3/2-3/2	2
2.81×10 ⁻¹	150	63.229	63.226	105646	1687263	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)3d	2P ^{0.2} D	3/2-5/2	2
5.53×10 ⁻¹	50	63.266	63.267	105060	1685671	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)3d	2P ^{0.2} D	1/2-3/2	2
9.52×10 ⁻¹	150	63.732	63.732	69157	1638228	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3d	2D ^{0.2} F	5/2-7/2	2
4.99×10 ⁻⁵	50	63.879	63.892	0	1565129	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ S)3s	4s ^{0.2} S	3/2-1/2	2,12
6.61×10 ⁻¹	150	63.903	63.903	68889	1633761	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3d	2D ^{0.2} F	3/2-5/2	2
9.22×10 ⁻²	100	64.281	64.285	69157	1659026	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3d	2D ^{0.2} P	5/2-3/2	2
1.08×10 ⁰	150	64.327	64.326	105646	1660237	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3d	2P ^{0.2} D	3/2-5/2	2
7.36×10 ⁻¹	50	64.355	64.351	105060	1659026	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3d	2P ^{0.2} D	1/2-3/2	2
3.40×10 ⁻¹	50	65.833	65.829	105646	1624730	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3d	2P ^{0.2} P	3/2-3/2	2
2.14×10 ⁰	150	67.157	67.157	312666	1801714	2s2p ⁴	2s2p ³ (⁵ S ⁰)3d	4p ⁴ D ⁰	5/2-7/2	2
1.10×10 ⁰	100	67.318	67.318	316253	1801740	2s2p ⁴	2s2p ³ (⁵ S ⁰)3d	4p ⁴ D ⁰	3/2-5/2	2
5.81×10 ⁻²	150	67.408	67.408	318156	1801660	2s2p ⁴	2s2p ³ (⁵ S ⁰)3d	4p ⁴ D ⁰	1/2-3/2	2
6.67×10 ⁻²	50	68.497	68.490	105060	1565129	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ S)3s	2P ^{0.2} S	1/2-1/2	2,10
1.18×10 ⁻¹	50	68.522	68.517	105646	1565129	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ S)3s	2P ^{0.2} S	3/2-1/2	2,10
2.00×10 ⁻⁴	100	68.853	68.797	0	1453559	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3s	4s ^{0.2} P	3/2-3/2	2,12
2.82×10 ⁻¹	150	69.632	69.643	0	1435890	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3s	4s ^{0.4} P	3/2-5/2	2
1.86×10 ⁻¹	200	69.790	69.805	0	1432563	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3s	4s ^{0.4} P	3/2-3/2	2
9.26×10 ⁻²	50	69.905	69.919	0	1430236	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3s	4s ^{0.4} P	3/2-1/2	2
3.74×10 ⁻¹	100	70.458	70.461	69157	1488372	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)3s	2D ^{0.2} D	5/2-5/2	2
2.33×10 ⁻¹	100	70.473	70.475	68889	1487836	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)3s	2D ^{0.2} D	3/2-3/2	2
3.56×10 ⁻¹	200	72.228	72.233	69157	1453559	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3s	2D ^{0.2} P	5/2-3/2	2
4.28×10 ⁻²	300	72.324	72.321	105646	1488372	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (¹ D)3s	2P ^{0.2} D	3/2-5/2	2
2.09×10 ⁻¹	200	72.420	72.423	68889	1449663	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3s	2D ^{0.2} P	3/2-1/2	2
2.09×10 ⁻¹	100	74.186	74.189	105646	1453559	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3s	2P ^{0.2} P	3/2-3/2	2
7.89×10 ⁻²	20	74.371	74.371	105060	1449663	2s ² 2p ³	2s ² 2p ² (³ P)3s	2P ^{0.2} P	1/2-1/2	2
2.04×10 ⁻²	50	75.986	75.986	312666	1628660	2s2p ⁴	2s2p ³ (⁵ S ⁰)3s	4p ⁴ S ⁰	5/2-3/2	2

TABLE 1 - Continued

gf-VALUE ^a	INT. ^b	WAVELENGTHS(Å) ^c		LEVELS(cm ⁻¹) ^d		CONFIGURATIONS ^e		TERMS ^e	J-J ^c	REF. ^f
		Observed	Calculated	Lower	Upper					
1.66×10 ⁻²	20	76.198	76.196	316253	1628660	2s2p ⁴	2s2p ³ (⁶ S ⁰)3s	4P. ⁴ S ⁰	3/2-3/2	2
4.58×10 ⁻¹	100	214.756	214.761	68889	534524	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	2D ^{0.2} P	3/2-1/2	2
1.36×10 ⁻¹	20	216.800	216.788	68889	530168	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	2D ^{0.2} P	3/2-3/2	2
9.41×10 ⁻¹	100	216.918	216.914	69157	530168	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	2D ^{0.2} P	5/2-3/2	2
9.37×10 ⁻²	10	232.864	232.849	105060	534524	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	2P ^{0.2} P	1/2-1/2	2
1.43×10 ⁻¹	10	233.159	233.166	105646	534524	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	2P ^{0.2} P	3/2-1/2	2
6.34×10 ⁻²	10	235.221	235.234	105060	530168	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	2P ^{0.2} P	1/2-3/2	2
2.54×10 ⁻¹	20	235.563	235.559	105646	530168	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	2P ^{0.2} P	3/2-3/2	2
1.61×10 ⁻¹		250.600	250.600	105060	504102	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	2P ^{0.2} S	1/2-1/2	6
2.33×10 ⁻¹		250.970	250.969	105646	504102	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	2P ^{0.2} S	3/2-1/2	6
3.39×10 ⁻¹		252.790	252.799	430105	825677	2s2p ⁴	2p ⁵	2D. ² P ⁰	3/2-1/2	6
8.24×10 ⁻²		256.530	256.528	430105	819926	2s2p ⁴	2p ⁵	2D. ² P ⁰	3/2-3/2	6
4.44×10 ⁻¹	200	276.839	276.842	68889	430105	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	2D ^{0.2} D	3/2-3/2	2
6.52×10 ⁻¹	200	277.054	277.048	69157	430096	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	2D ^{0.2} D	5/2-5/2	2
7.04×10 ⁻²	20	307.650	307.649	105060	430105	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	2P ^{0.2} D	1/2-3/2	1
1.47×10 ⁻¹	50	308.260	308.213	105646	430096	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	2P ^{0.2} D	3/2-5/2	4
1.36×10 ⁻¹	50	314.310	314.311	0	318156	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	4S ^{0.4} P	3/2-1/2	4
2.69×10 ⁻¹	100	316.202	316.203	0	316253	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	4S ^{0.4} P	3/2-3/2	2
4.00×10 ⁻¹	100	319.829	319.830	0	312666	2s ² 2p ³	2s2p ⁴	4S ^{0.4} P	3/2-5/2	2
1.61×10 ⁻¹		338.430	338.400	530168	825677	2s2p ⁴	2p ⁵	2P. ² P ⁰	3/2-1/2	5
3.39×10 ⁻¹		343.490	343.462	534524	825677	2s2p ⁴	2p ⁵	2P. ² P ⁰	1/2-1/2	5
7.34×10 ⁻¹		345.100	345.116	530168	819926	2s2p ⁴	2p ⁵	2P. ² P ⁰	3/2-3/2	5
1.28×10 ⁻¹		350.380	350.383	534524	819926	2s2p ⁴	2p ⁵	2P. ² P ⁰	1/2-3/2	5
2.21×10 ⁻¹	10	703.480	703.484	1449663	1591812	2s ² 2p ² (³ P)3s	2s ² 2p ² (¹ D)3p	2P. ² D ⁰	1/2-3/2	13
3.92×10 ⁻¹	35	724.070	724.076	1453559	1591666	2s ² 2p ² (³ P)3s	2s ² 2p ² (¹ D)3p	2P. ² D ⁰	3/2-5/2	13
4.15×10 ⁻¹	32	961.750	961.762	1487836	1591812	2s ² 2p ² (¹ D)3s	2s ² 2p ² (¹ D)3p	2D. ² D ⁰	3/2-3/2	13
1.73×10 ⁰	170	974.530	974.524	1575854	1678469	2s ² 2p ² (¹ D)3p	2s ² 2p ² (¹ D)3d	2F ^{0.2} G	7/2-9/2	13
4.69×10 ⁻¹	60	982.180	982.172	1513603	1615418	2s ² 2p ² (³ P)3p	2s ² 2p ² (³ P)3d	4D ^{0.4} F	1/2-3/2	13
7.71×10 ⁻¹	100	983.560	983.553	1514803	1616475	2s ² 2p ² (³ P)3p	2s ² 2p ² (³ P)3d	4D ^{0.4} F	3/2-5/2	13
1.15×10 ⁰	125	988.250	988.242	1517022	1618212	2s ² 2p ² (³ P)3p	2s ² 2p ² (³ P)3d	4D ^{0.4} F	5/2-7/2	13
1.57×10 ⁰	170	994.590	994.582	1519957	1620502	2s ² 2p ² (³ P)3p	2s ² 2p ² (³ P)3d	4D ^{0.4} F	7/2-9/2	13
2.95×10 ⁻¹	30	1056.470	1056.477	1565129	1659784	2s ² 2p ² (¹ S)3s	2s ² 2p ² (¹ S)3p	2S. ² P ⁰	1/2-1/2	2,12,13
5.89×10 ⁻¹	45	1057.260	1057.267	1565129	1659713	2s ² 2p ² (¹ S)3s	2s ² 2p ² (¹ S)3p	2S. ² P ⁰	1/2-3/2	2,12,13
2.36×10 ⁻¹	35	1115.940	1115.950	1432563	1522173	2s ² 2p ² (³ P)3s	2s ² 2p ² (³ P)3p	4P. ⁴ P ⁰	3/2-1/2	13
6.69×10 ⁻¹	70	1123.560	1123.570	1435890	1524892	2s ² 2p ² (³ P)3s	2s ² 2p ² (³ P)3p	4P. ⁴ P ⁰	5/2-5/2	13
1.14×10 ⁰	170	1143.080	1143.089	1488372	1575854	2s ² 2p ² (¹ D)3s	2s ² 2p ² (¹ D)3p	2D. ² F ⁰	5/2-7/2	13
8.14×10 ⁻¹	60	1157.310	1157.324	1487836	1574243	2s ² 2p ² (¹ D)3s	2s ² 2p ² (¹ D)3p	2D. ² F ⁰	3/2-5/2	13
2.82×10 ⁻¹	50	1182.490	1182.501	1430236	1514803	2s ² 2p ² (³ P)3s	2s ² 2p ² (³ P)3p	4P. ⁴ D ⁰	1/2-3/2	13
6.51×10 ⁻¹	100	1183.990	1184.001	1432563	1517022	2s ² 2p ² (³ P)3s	2s ² 2p ² (³ P)3p	4P. ⁴ D ⁰	3/2-5/2	13
1.57×10 ⁰	160	1189.510	1189.522	1435890	1519957	2s ² 2p ² (³ P)3s	2s ² 2p ² (³ P)3p	4P. ⁴ D ⁰	5/2-7/2	13
6.03×10 ⁻¹	35	1197.730	1197.745	1453559	1537050	2s ² 2p ² (³ P)3s	2s ² 2p ² (³ P)3p	2P. ² D ⁰	3/2-5/2	13
2.26×10 ⁻¹	60	1199.500	1199.512	1430236	1513603	2s ² 2p ² (³ P)3s	2s ² 2p ² (³ P)3p	4P. ⁴ D ⁰	1/2-1/2	13
3.49×10 ⁻¹	30	1200.670	1200.686	1449663	1517022	2s ² 2p ² (³ P)3s	2s ² 2p ² (³ P)3p	2P. ² D ⁰	1/2-3/2	13
1.27×10 ⁻¹	75	1232.540	1232.552	1435890	1524896	2s ² 2p ² (³ P)3s	2s ² 2p ² (³ P)3p	4P. ⁴ D ⁰	5/2-5/2	13
6.59×10 ⁻²	700	1749.250	1749.314	1449663	1506828	2s ² 2p ² (³ P)3s	2s ² 2p ² (³ P)3p	2P. ² S ⁰	1/2-1/2	13
9.31×10 ⁻²	450	1877.300	1877.278	1453559	1506828	2s ² 2p ² (³ P)3s	2s ² 2p ² (³ P)3p	2P. ² S ⁰	3/2-1/2	13

^a Weighted oscillator strengths for atomic transition obtained by the method described in sect. 2.

^b Observed line intensities.

^c Wavelength corresponding to the energy levels difference between the experimental adjusted energy level values.

^d Numerical values of the energy levels are those obtained by an optimized procedure using the program ELCALC.

^e Level designations for the transition, including configuration percentage, term, and total angular momentum. For practical purposes, we show them in three separate columns.

^f Ref.: Number of the references used in this work.

TABLE 2. LIFETIMES FOR THE SI VIII SPECTRUM

Configuration	Terms	Energy (cm ⁻¹)	Lifetimes (ps) ^a	Configuration	Terms	Energy (cm ⁻¹)	Lifetimes (ps) ^a
2s ² 2p ³	4S _{3/2}	0	-	2s ² 2p ² (³ P)3s	4P _{5/2}	1435890	15
	2D _{3/2}	68889	-		2P _{1/2}	1449663	5
	2D _{5/2}	69157	-		2P _{3/2}	1453559	12
	2P _{1/2}	105060	-	2s ² 2p ² (¹ D)3s	2D _{3/2}	1487836	9
	2P _{3/2}	105646	-		2D _{5/2}	1488372	8
2p ⁵	2P _{3/2}	819926	65	2s ² 2p ² (¹ S)3s	2S _{1/2}	1565129	8
	2P _{1/2}	825677	32	2s ² 2p ² (³ P)3d	4F _{3/2}	1615418	468
2s ² 2p ² (³ P)3p	2S _{1/2}	1506828	415		4F _{5/2}	1616475	396
	4D _{1/2}	1513603	1346		4F _{7/2}	1618212	456
	4D _{3/2}	1514803	1419		4F _{9/2}	1620502	943
	4D _{5/2}	1517022	1283		2P _{3/2}	1624730	5
	4D _{7/2}	1519957	1307		4D _{5/2}	1633372	21
	4P _{1/2}	1522173	540		2F _{5/2}	1633761	5
	4P _{5/2}	1524892	551		4D _{1/2}	1634654	12
	2D _{3/2}	1532948	1365		4P _{5/2}	1637464	1
	2D _{5/2}	1537050	1234		2F _{7/2}	1638228	5
	2F _{5/2}	1574243	1045		4P _{3/2}	1638833	1
2s ² 2p ² (¹ D)3p	2F _{7/2}	1575854	1040		4P _{1/2}	1639639	1
	2D _{5/2}	1591666	1433		2D _{3/2}	1659026	2
	2D _{3/2}	1591812	149		2D _{5/2}	1660237	1
2s2p ³ (⁵ S ⁰)3s	4S _{3/2}	1628660	16	2s ² 2p ² (¹ D)3d	2G _{9/2}	1678469	827
2s ² 2p ² (¹ S)3p	2P _{3/2}	1659713	569		2F _{7/2}	1684301	1
	2P _{1/2}	1659784	250		2D _{5/2}	1687263	1
2s2p ³ (⁵ S ⁰)3d	4D _{7/2}	1801714	3		2D _{3/2}	1685671	2
	4D _{5/2}	1801740	3		2F _{5/2}	1684529	1
	4D _{3/2}	1801660	3		2P _{1/2}	1696335	2
2s ² 2p ⁴	4P _{5/2}	312666	229		2P _{3/2}	1697874	2
	4P _{3/2}	316253	222	2s2p ³ (⁵ S ⁰)3p	4P _{5/2}	1698225	4
	4P _{1/2}	318156	219	2s ² 2p ² (¹ D)3d	2S _{1/2}	1703448	2
	2D _{5/2}	430096	86	2s ² 2p ² (¹ S)3d	2D _{5/2}	1753826	2
	2D _{3/2}	430105	91	2s ² 2p ² (³ P)4s	2P _{3/2}	1928931	58
	2S _{1/2}	504102	46	2s ² 2p ² (³ P)4d	2F _{5/2}	1998684	4
	2P _{3/2}	530168	70		4P _{5/2}	1999239	4
	2P _{1/2}	534524	21		4P _{3/2}	2000519	3
	4P _{1/2}	1430236	16		2F _{7/2}	2002721	4
	4P _{3/2}	1432563	16		2D _{5/2}	2008451	3
				2s ² 2p ² (¹ D)4d	2D _{5/2}	2048415	4

A₃ – Trabalho Concluído

Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si II Spectrum¹¹

¹¹ Este trabalho encontra-se em fase final de revisão, podendo sofrer algumas modificações antes de ser submetido, ou de acordo com as exigências do editor científico após prova final.

WEIGHTED OSCILLATOR STRENGTHS AND LIFETIMES FOR THE Si II SPECTRUM

R. V. Orloski^{a*} and A. G. Trigueiros^{a,b}

^aInstituto de Física “Gleb Wataghin”, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP
13083-970 Campinas, São Paulo, Brazil; ^bInstituto de Química, Universidade do Estado
do Rio de Janeiro, UERJ, 20550-013 Maracanã, Rio de Janeiro, RJ, Brazil.

*Corresponding author Fax: +55 19 788 5427; E-mail: renata@ifi.unicamp.br,
agtri@ifi.unicamp.br, and tri@uerj.br

Received: _____; Accepted: _____

Abstract

The weighted oscillator strengths (gf) and the lifetimes for Si II presented in this work were carried out in a multiconfiguration Hartree-Fock relativistic (HFR) approach. In this calculation, the electrostatic parameters were optimized by a least-squares procedure, in order to improve the adjustment to experimental energy levels. This method produces gf -values that are in better agreement with intensity observations and lifetime values that are closer to the experimental ones. In this work we present all the experimentally known electric dipole Si II spectral lines.

Subject heading: atomic data

1. INTRODUCTION

The ground state configuration of one time ionized silicon, Si II, is $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$ with the term 2P . Si II belongs to the Al I isoelectronic sequence and its ionization potential is $131\,834,4\text{ cm}^{-1}$ (16,346 eV). The spectrum was analyzed for the first time by Fowler [01] who classified lines from the red to 2000 Å. In 1960, new observations of the spectrum Si II from 700Å to 9500Å were described by Shenstone [02], and 300 lines being listed in addition to those previously assigned to this spectrum. Later a collection of most of the available calculated vacuum ultraviolet wavelengths is given by Edlén [03] with explanation of their nature and origin. Kaufman [04] presented some lines of Si II in a review work, and the measurement of these lines lead to an extension, modification, or confirmation of previously calculated wavelengths of these spectra. These transitions had been classified earlier by Shenstone [02]. In 1971, Moore [05] summarized the energy levels of Fowler [01]. Beyer [06] was decided to repeat the spectral measurements in the 500Å - 1200Å range with better spectral resolution, and the beam-gas technique has been used to obtain the VUV spectra of the ions Si. Martin & Zalubas [07] gave all known energy levels for the Si II spectrum. Kelly [08] summarized all the wavelengths published for Si II below 3400Å. Si II has been investigated both experimentally and theoretically by many workers because it is one of the most common ions observed in absorption and emission spectra from astrophysical sources, such as the interstellar medium, quasars, hot stars and the sun. The oscillator strengths for the transitions in Si II are used in the determination of abundances, temperatures, densities, and column densities (see, e.g., Ref. [09]).

The purpose of this work is to present a review of all known electric dipole transitions of

Si II, their oscillator strengths calculated from fitted values of the energy parameters and the lifetimes, calculated by the same method, for all known experimental energy levels. The work we present here was stimulated by the desire to determine weighted oscillator strengths and lifetimes for the Si VI spectrum. Both parameters are important in the study of laboratory and solar spectra, as silicon is an astrophysically important element. No extensive source of gf and lifetime values currently exists for this element.

2. CALCULATION

The oscillator strength $f(\gamma\gamma')$ is a physical quantity related to line intensity I and transition probability $W(\gamma\gamma')$, as given by Sobelman [10]:

$$W(\gamma\gamma') = \frac{2\omega^2 e^2}{mc^3} |f(\gamma\gamma')| \quad (1)$$

with,

$$I \propto gW(\gamma\gamma') \propto g |f(\gamma\gamma')| = gf.$$

Here m = electron mass, e = electron charge, γ = initial quantum state, $\omega = (E(\gamma) - E(\gamma'))/\hbar$, $E(\gamma)$ = initial state energy, $g = (2J + 1)$ is the number of degenerate quantum states with angular momentum J (in the formula for the initial state). Quantities with primes refer to the final state.

In the equation above, the weighted oscillator strength, gf , is given by Cowan [11]:

$$gf = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h} S, \quad (2)$$

where $\sigma = |E(\gamma) - E(\gamma')|/hc$, h = Planck's constant, c = light velocity, and a_0 = Bohr radius, and the electric dipole line strength is defined by:

$$S \equiv |\langle \gamma J \| \mathbf{P}^1 \| \gamma' J' \rangle|^2 \quad (3)$$

This quantity is a measure of the total strength of the spectral line, including all possible transitions between m, m' different J_z eigenstates. The tensor operator P^1 (first order) in the reduced matrix element is the classical dipole moment for the atom in units of $-ea_0$.

To obtain gf , we need to calculate S first, or its square root:

$$S_{\gamma\gamma'}^{1/2} = \langle \gamma J \| P^1 \| \gamma' J' \rangle. \quad (4)$$

In a multiconfiguration calculation we have to expand the wavefunction $|\gamma J\rangle$ in terms of single configuration wavefunctions, $|\beta J\rangle$, for both upper and lower levels:

$$|\gamma J\rangle = \sum_{\beta} y_{\beta J}^{\gamma} |\beta J\rangle. \quad (5)$$

Therefore, we can have the multiconfigurational expression for $S_{\gamma\gamma'}^{1/2}$:

$$S_{\gamma\gamma'}^{1/2} = \sum_{\beta} \sum_{\beta'} y_{\beta J}^{\gamma} \langle \beta J \| P^1 \| \beta' J' \rangle y_{\beta' J'}^{\gamma'}. \quad (6)$$

The probability per unit time of an atom in a specific state γJ to make a spontaneous transition to any state with lower energy is

$$P(\gamma J) = \sum A(\gamma J, \gamma' J'), \quad (7)$$

where: $A(\gamma J, \gamma' J')$ is the Einstein spontaneous emission transition probability rate for a transition from the γJ to the $\gamma' J'$ state. The sum is over all $\gamma' J'$ states with $E(\gamma' J') < E(\gamma J)$.

The Einstein probability rate is related to gf through the following relation given by Cowan [11]:

$$gA = \frac{8\pi^2 e^2 \sigma^2}{mc} gf \quad (8)$$

Since the natural lifetime $\tau(\gamma J)$ is the inverse of the probability $P(\gamma J)$, then:

$$\tau(\gamma J) = \left(\sum A(\gamma J, \gamma' J') \right)^{-1} \quad (9)$$

Natural lifetime is applicable to an isolated atom. Interaction with matter or radiation will reduce the lifetime of a state.

The values for gf and lifetime given in Tables 1 and 2 respectively were calculated according to these equations.

In order to obtain better values for oscillator strengths, we calculated the reduced matrix elements P^1 by using optimized values of energy parameters which were adjusted from a least-squares calculation. In this adjustment, the code tries to fit experimental energy values by varying the electrostatic parameters. This procedure improves σ values used in eq. (2) and $y_{\beta J}^{\gamma}$ and $y_{\beta J'}^{\gamma}$ values used in eq. (6).

3. DISCUSSION

The program allowed us to calculate energy levels, wavelengths, lifetimes, and transition probabilities. For the odd-parity The theoretical predictions for the energy levels of the configurations were obtained by diagonalizing the energy matrices with appropriate Hartree-Fock relativistic (HFR) values for the energy parameters. For this purpose the computer code developed by Cowan [11] was used. The interpretation of the configuration level structures were made by a least-squares fit of the observed levels. The energy level values were determined from the observed wavelengths by an interactive optimization procedure using the program ELCALC, Radziemski and Kaufman [12], in which the individual wavelengths are weighted according to their uncertainties. The energy levels adjusted by this method were used to optimize the electrostatic parameters by a least-squares procedure, and finally these optimized parameters were used again to calculate the gf - and lifetimes values. This method produces gf -values that are in better agreement with line intensity observations and

lifetimes values that are closer to the experimental ones.

We have presented oscillator strengths and lifetimes for all known electric dipole transitions in Si II. The present work is part of an ongoing program, whose goal is to obtain weighted oscillator strengths, gf , and lifetimes for elements of astrophysical importance. The works for Si III, Si V, Si VI, Si VII and Si IX have been concluded, Callegari and Trigueiros [13], Trigueiros and Jupén [14], Coutinho and Trigueiros [15], Coutinho and Trigueiros [16] and Orloski et al. [17]. In this particular work on Si II, the results are part of Orloski's M. Sc. thesis that is in preparation.

Acknowledgements - This work was financially supported by the Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), Brazil, and by Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Brazil. Computations were carried out at the Prof. John David Rogers Computational Center, UNICAMP.

REFERENCES

1. Fowler, A. Phil Trans, 1925; 1A:225
2. Shenstone AG. The second spectrum of silicon. Proc Roy Soc 1961;261A:153-174.
3. Edlén B. Rept Progr Physic. 1963; 26:181.
4. Kaufman V, Ward JF. Measurement and Calculation of Cu II, Ge II, Si II, and C I Vacuum-Ultraviolet Lines. J Opt Soc Am 1966;56:1591-1597.
5. Moore CE. Nat Stand Ref Data Ser, Nat Bur Stand (US) 1971;35/V.I:156-157.
6. Beyer LM, Maddox WE, Bridwell LB, Duncan DD, Bingham LL, Asbell JC. The Beam-Gas Spectra of Silicon, Sulfur and Oxygen. Nucl Instrum Meth 1973;110:61-67.
7. Martin WC, Zalubas R. Energy Levels of Silicon, Si I through Si XIV. J Phys Chem Ref Data 1983;12:364-367.
8. Kelly RL. Atomic and Ionic Spectrum Lines of Hydrogen Through Krypton. J Phys Chem Ref Data 1987;16:285-287.
9. Spitzer LJ and Fitzpatrick. Astrophys J. 1993, 409:299.
10. Sobelman I. Atomic Spectra and Radiative Transitions Berlin: Springer, 1979.
11. Cowan RD. The Theory of Atomic Structure and Spectra Berkeley: Univ California Press., 1981.

12. Radziemski LJ, Kaufman V. Wavelengths, Energy Levels, and Analysis of Neutral Atomic Chlorine (Cl I). *J Opt Soc Am* 1969;59:424-443.
13. Callegari F, Trigueiros AG. Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si III Spectrum. *ApJS* 1998;119:181-188.
14. Trigueiros AG, Jupén C. Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for Si V Spectrum. *J Quant Spectrosc Radiat Transfer* 1996;56:713-723.
15. Coutinho LH, Trigueiros AG. Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si VI Spectrum. *ApJS* 1999;121:591-597.
16. Coutinho LH, Trigueiros AG. Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si VII Spectrum. *ApJS* 1998;115:315-319.
17. Orloski RV, Trigueiros AG, Cavalcanti GH. Weighted Oscillator Strengths and Lifetimes for the Si IX Spectrum. *J Quant Spectrosc Radiat Transfer* 1999;61:665-669.

TABLE 1. WEIGHTED OSCILLATOR STRENGTHS AND SPECTRAL LINES FOR THE Si II SPECTRUM

gf-VALUE ^a	INT. ^b	WAVELENGTHS (Å) ^c		LEVELS(cm ⁻¹) ^d		CONFIGURATIONS ^e		TERMS ^e	J-J ^c	REF. ^f
		Observed	Calculated	Lower	Upper					
4.07×10 ⁻²	0	711.340	711.340	0	140580	3s ² (¹ S)3p	3s3p(³ P)4p	2P ^o . ² D	1/2-3/2	2
7.36×10 ⁻²	1	711.830	711.749	289	140788	3s ² (¹ S)3p	3s3p(³ P)4p	2P ^o . ² D	3/2-5/2	2
2.93×10 ⁻²	2	755.362	755.335	289	132680	3s ² (¹ S)3p	3s3p(³ P)4p	2P ^o . ² P	3/2-3/2	2
4.21×10 ⁻²	3	803.234	803.163	0	124508	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)8d	2P ^o . ² D	1/2-3/2	2
7.55×10 ⁻²	10	805.101	805.029	289	124508	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)8d	2P ^o . ² D	3/2-5/2	2
8.13×10 ⁻¹	2	818.590	818.492	0	122175	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)7d	2P ^o . ² D	1/2-3/2	2
1.00×10 ⁻⁴	0	819.490	819.471	42946	164976	3s3p ²	3s3p(³ P)5d	4P. ⁴ P ^o	3/2-5/2	2
1.46×10 ⁻¹	20	820.516	820.437	289	122175	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)7d	2P ^o . ² D	3/2-5/2	2
1.13×10 ⁻¹	3	820.630	820.649	43121	164976	3s3p ²	3s3p(³ P)5d	4P. ⁴ P ^o	5/2-5/2	2
1.14×10 ⁻²	3	820.918	820.846	0	121826	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)8s	2P ^o . ² S	1/2-1/2	2
1.42×10 ⁻¹	2	821.450	821.450	43121	164857	3s3p ²	3s3p(³ P)5d	4P. ⁴ D ^o	5/2-7/2	2
2.28×10 ⁻²	5	822.844	822.795	289	121826	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)8s	2P ^o . ² S	3/2-1/2	2
8.00×10 ⁻⁴	1	826.420	826.420	43121	164125	3s3p ²	3s3p(³ P)6s	4P. ⁴ P ^o	5/2-5/2	2
2.81×10 ⁰	20	843.718	843.646	0	118533	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)6d	2P ^o . ² D	1/2-3/2	2
5.03×10 ⁻⁰	40	845.774	845.706	289	118533	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)6d	2P ^o . ² D	3/2-5/2	2
2.19×10 ⁻²	5	848.074	847.997	0	117925	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)7s	2P ^o . ² S	1/2-1/2	2
4.37×10 ⁻²	10	850.142	850.078	289	117925	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)7s	2P ^o . ² S	3/2-1/2	2
1.16×10 ⁰	100	889.722	889.657	0	112403	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)5d	2P ^o . ² D	1/2-3/2	2
2.06×10 ⁰	200	891.999	891.944	289	112403	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)5d	2P ^o . ² D	3/2-5/2	2
4.98×10 ⁻²	10	899.405	899.339	0	111193	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)6s	2P ^o . ² S	1/2-1/2	2
9.96×10 ⁻²	20	901.735	901.680	289	111193	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)6s	2P ^o . ² S	3/2-1/2	2
4.20×10 ⁻³	0	905.710	905.673	42838	153254	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	4P. ⁴ P ^o	1/2-1/2	2
2.25×10 ⁻²	0	906.126	906.078	42838	153204	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	4P. ⁴ P ^o	1/2-3/2	2
5.90×10 ⁻²	1	906.586	906.557	42946	153254	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	4P. ⁴ P ^o	3/2-1/2	2
4.26×10 ⁻²	0	907.033	906.963	42946	153204	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	4P. ⁴ P ^o	3/2-3/2	2
3.90×10 ⁻²	0	907.762	907.710	42946	153113	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	4P. ⁴ P ^o	3/2-5/2	2
6.50×10 ⁻²	1	908.481	908.406	43121	153204	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	4P. ⁴ P ^o	5/2-3/2	2
1.98×10 ⁻¹	3	909.209	909.155	43121	153113	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	4P. ⁴ P ^o	5/2-5/2	2
1.19×10 ⁻¹	5	912.375	912.305	42838	152451	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	4P. ⁴ D ^o	1/2-3/2	2
1.63×10 ⁻¹	5	912.459	912.413	42838	152438	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	4P. ⁴ D ^o	1/2-1/2	2
4.48×10 ⁻¹	10	913.012	912.956	42946	152480	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	4P. ⁴ D ^o	3/2-5/2	2
1.18×10 ⁻¹	3	913.264	913.202	42946	152451	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	4P. ⁴ D ^o	3/2-3/2	2
7.65×10 ⁻¹	20	913.853	913.793	43121	152555	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	4P. ⁴ D ^o	5/2-7/2	2
9.99×10 ⁻²	2	914.476	914.418	43121	152480	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	4P. ⁴ D ^o	5/2-5/2	2
1.09×10 ⁻¹	5	928.297	928.246	42946	150676	3s3p ²	3s3p(³ P)5s	4P. ⁴ P ^o	3/2-5/2	2
9.76×10 ⁻²	1	929.206	929.172	42838	150461	3s3p ²	3s3p(³ P)5s	4P. ⁴ P ^o	1/2-3/2	2
2.45×10 ⁻¹	20	929.810	929.757	43121	150676	3s3p ²	3s3p(³ P)5s	4P. ⁴ P ^o	5/2-5/2	2
1.94×10 ⁻²	0	930.242	930.216	42838	150340	3s3p ²	3s3p(³ P)5s	4P. ⁴ P ^o	1/2-1/2	2
9.51×10 ⁻²	5	931.200	931.149	42946	150340	3s3p ²	3s3p(³ P)5s	4P. ⁴ P ^o	3/2-1/2	2
1.03×10 ⁻¹	5	931.667	931.619	43121	150461	3s3p ²	3s3p(³ P)5s	4P. ⁴ P ^o	5/2-3/2	2
6.12×10 ⁻¹	100	989.867	989.821	0	101028	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)4d	2P ^o . ² D	1/2-3/2	2
1.09×10 ⁰	200	992.675	992.644	289	101030	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)4d	2P ^o . ² D	3/2-5/2	2
2.10×10 ⁻¹	25	1020.699	1020.653	0	97976	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)5s	2P ^o . ² S	1/2-1/2	2
4.20×10 ⁻¹	50	1023.963	1023.670	289	97976	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)5s	2P ^o . ² S	3/2-1/2	2
2.00×10 ⁻¹	0	1034.967	1034.939	55325	151949	3s3p ²	3s3p(³ P)5s	2D. ² P ^o	5/2-3/2	2
4.15×10 ⁻¹	2	1056.899	1056.857	55307	149927	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	2D. ² D ^o	3/2-5/2	2
7.51×10 ⁻¹	30	1057.050	1057.058	55325	149927	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	2D. ² D ^o	5/2-5/2	2
4.82×10 ⁻¹	15	1057.503	1057.493	55307	149870	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	2D. ² D ^o	3/2-3/2	2
6.23×10 ⁻¹	2	1057.690	1057.693	55325	149870	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	2D. ² D ^o	5/2-3/2	2
3.91×10 ⁻¹	20	1127.442	1127.438	55307	144004	3s3p ²	3p ³	2D. ² P ^o	3/2-1/2	2

TABLE 1. - CONTINUED 4.99

gf-VALUE ^a	INT. ^b	WAVELENGTHS (Å) ^c		LEVELS (cm ⁻¹) ^d		C4.99 CONFIGURATIONS ^e		TERMS ^e	J-J ^e	REF. ^f
		Observed	Calculated	Lower	Upper 4.99					
6.77×10 ⁻¹	40	1127.907	1127.937	55325	143984.993	3s3p ²	3p ³	2D ² P ^o	5/2-3/2	2
1.38×10 ⁰	100	1190.418	1190.419	0	84004	3s ² (¹ S)3p	3s3p ²	2P ^o -2P	1/2-3/2	2
2.78×10 ⁰	200	1193.284	1193.294	0	83802	3s ² (¹ S)3p	3s3p ²	2P ^o -2P	1/2-1/2	2
7.11×10 ⁰	250	1194.496	1194.524	289	84004	3s ² (¹ S)3p	3s3p ²	2P ^o -2P	3/2-3/2	2
1.46×10 ⁰	100	1197.389	1197.419	289	83802	3s ² (¹ S)3p	3s3p ²	2P ^o -2P	3/2-1/2	2
1.13×10 ⁻¹	0	1222.288	1222.300	42838	124651	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4P ^o	1/2-1/2	2
6.21×10 ⁻¹	5	1222.635	1222.639	42838	124629	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4P ^o	1/2-3/2	2
5.64×10 ⁻¹	20	1223.907	1223.910	42946	124651	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4P ^o	3/2-1/2	2
1.15×10 ⁻¹	20	1224.252	1224.251	42946	124629	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4P ^o	3/2-3/2	2
6.95×10 ⁻¹	10	1224.972	1224.978	42946	124580	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4P ^o	3/2-5/2	2
1.44×10 ⁰	50	1226.814	1226.822	42838	124350	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4D ^o	1/2-1/2	2
5.96×10 ⁻¹	20	1226.887	1226.881	43121	124629	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4P ^o	5/2-3/2	2
1.39×10 ⁰	40	1226.986	1226.999	42838	124338	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4D ^o	1/2-3/2	2
1.31×10 ⁰	100	1227.604	1227.611	43121	124580	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4P ^o	5/2-5/2	2
3.05×10 ⁻¹	10	1228.437	1228.445	42946	124350	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4D ^o	3/2-1/2	2
1.90×10 ⁰	25	1228.617	1228.622	42946	124338	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4D ^o	3/2-3/2	2
3.57×10 ⁰	150	1228.746	1228.749	42946	124330	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4D ^o	3/2-5/2	2
6.97×10 ⁰	200	1229.388	1229.397	43121	124462	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4D ^o	5/2-7/2	2
1.67×10 ⁰	5	1231.406	1231.399	43121	124330	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	4P-4D ^o	5/2-5/2	2
7.47×10 ⁻¹	100	1246.738	1246.755	42838	123047	3s3p ²	3p ³	4P-4S ^o	1/2-3/2	2
1.50×10 ⁰	150	1248.426	1248.431	42946	123047	3s3p ²	3p ³	4P-4S ^o	3/2-3/2	2
2.00×10 ⁻³	100	1250.089	1250.067	55307	135304	3s3p ²	3p ³	2D ² D ^o	3/2-3/2	2
3.60×10 ⁻³	150	1250.433	1250.276	55325	135307	3s3p ²	3p ³	2D ² D ^o	5/2-5/2	2
2.24×10 ⁰	200	1251.164	1251.166	43121	123047	3s3p ²	3p ³	4P-4S ^o	5/2-3/2	2
7.99×10 ⁻¹	1000	1260.418	1260.439	0	79337	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)3d	2P ^o -2D	1/2-3/2	2
1.35×10 ⁰	2000	1264.730	1264.780	289	79354	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)3d	2P ^o -2D	3/2-5/2	2
1.12×10 ⁻¹	200	1265.023	1265.042	289	79337	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)3d	2P ^o -2D	3/2-3/2	2
3.01×10 ⁻¹	100	1304.369	1304.407	0	76663	3s ² (¹ S)3p	3s3p ²	2P ^o -2S	1/2-1/2	2
3.57×10 ⁰	50	1305.590	1305.370	55325	131932	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	2D ² F ^o	5/2-7/2	2
4.70×10 ⁻¹	200	1309.274	1309.337	289	76663	3s ² (¹ S)3p	3s3p ²	2P ^o -2S	3/2-1/2	2
2.51×10 ⁰	20	1309.453	1309.292	55307	131684	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	2D ² F ^o	3/2-5/2	2
1.18×10 ⁻¹	2	1309.770	1309.600	55325	131684	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	2D ² F ^o	5/2-5/2	2
6.69×10 ⁻¹	100	1346.373	1346.951	42946	117188	3s3p ²	3s3p(³ P)4s	4P-4P ^o	3/2-5/2	2
6.05×10 ⁻¹	100	1348.543	1348.621	42838	116988	3s3p ²	3s3p(³ P)4s	4P-4P ^o	1/2-3/2	2
1.53×10 ⁰	150	1350.057	1350.135	43121	117188	3s3p ²	3s3p(³ P)4s	4P-4P ^o	5/2-5/2	2
1.19×10 ⁻¹	20	1350.520	1350.582	42946	116988	3s3p ²	3S3P(3P0)4s	4P-4P ^o	3/2-3/2	2
1.20×10 ⁻¹	20	1350.658	1350.736	42838	116872	3s3p ²	3s3p(3P0)4s	4P-4P ^o	1/2-1/2	2
5.93×10 ⁻¹	100	1352.635	1352.703	42946	116872	3s3p ²	3s3p(³ P)4s	4P-4P ^o	3/2-1/2	2
6.46×10 ⁻¹	100	1353.718	1353.784	43121	116988	3s3p ²	3s3p(³ P)4s	4P-4P ^o	5/2-3/2	2
1.64×10 ⁻¹	5	1403.783	1403.780	55307	126543	3s3p ²	3s ² (¹ S)10p	2D ² P ^o	3/2-1/2	2
3.27×10 ⁻¹	1	1404.170	1404.151	55307	126525	3s3p ²	3s ² (¹ S)10p	2D ² P ^o	3/2-3/2	2
2.93×10 ⁻¹	6	1404.478	1404.505	55325	126525	3s3p ²	3s ² (¹ S)10p	2D ² P ^o	5/2-3/2	2
7.56×10 ⁻¹	10	1409.073	1408.767	55307	126291	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	2D ² P ^o	3/2-1/2	2
1.56×10 ⁻¹	2	1409.900	1409.625	55307	126248	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	2D ² P ^o	3/2-3/2	2
1.49×10 ⁰	20	1410.219	1409.981	55325	126248	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	2D ² P ^o	5/2-3/2	2
6.81×10 ⁻¹	10	1416.972	1416.963	79354	149927	3s ² (¹ S)3d	3s3p(³ P)4d	2D ² D ^o	5/2-5/2	2
3.61×10 ⁻¹	5	1417.731	1417.775	79337	149870	3s ² (¹ S)3d	3s3p(³ P)4d	2D ² D ^o	3/2-3/2	2
4.81×10 ⁻¹	0	1418.110	1418.105	79354	149870	3s ² (¹ S)3d	3s3p(³ P)4d	2D ² D ^o	5/2-3/2	2
3.60×10 ⁻¹	1	1434.400	1434.397	55307	125023	3s3p ²	3s ² (¹ S)9p	2D ² P ^o	3/2-1/2	2
4.60×10 ⁻¹	2	1434.542	1434.539	55325	125034	3s3p ²	3s ² (¹ S)9p	2D ² P ^o	5/2-3/2	2

TABLE 1. - CONTINUED

gf-VALUE ^a	INT. ^b	WAVELENGTHS (Å) ^c		LEVELS(cm ⁻¹) ^d		CONFIGURATIONS ^e		TERMS ^e	J-J ^c	REF. ^f
		Observed	Calculated	Lower	Upper					
9.00×10 ⁻⁴	2	1438.576	1438.291	55307	124834	3s3p ²	3s ² (¹ S)8f	² D- ² F ^o	3/2-5/2	2
1.10×10 ⁻³	4	1438.931	1438.659	55325	124834	3s3p ²	3s ² (¹ S)8f	² D- ² F ^o	5/2-7/2	2
1.58×10 ⁻¹	2	1471.775	1471.776	84004	151949	3s3p ²	3s3p(³ P)5s	² P- ² P ^o	3/2-3/2	2
3.01×10 ⁻²	1	1474.304	1473.991	55307	123150	3s3p ²	3s ² (¹ S)8p	² D- ² P ^o	3/2-3/2	2
2.72×10 ⁻¹	15	1474.649	1474.381	55325	123150	3s3p ²	3s ² (¹ S)8p	² D- ² P ^o	5/2-3/2	2
1.46×10 ⁻¹	5	1475.188	1474.880	55307	123109	3s3p ²	3s ² (¹ S)8p	² D- ² P ^o	3/2-1/2	2
2.07×10 ⁻¹	1	1476.928	1476.635	55325	123047	3s3p ²	3p ³	² D- ⁴ S ^o	5/2-3/2	2
1.30×10 ⁻¹	15	1484.873	1484.570	55307	122667	3s3p ²	3s ² (¹ S)7f	² D- ² F ^o	3/2-5/2	2
5.41×10 ⁻¹	90	1485.024	1484.988	76663	144004	3s3p ²	3p ³	² S- ² P ^o	1/2-1/2	2
1.19×10 ⁻¹	30	1485.224	1484.965	55325	122667	3s3p ²	3s ² (¹ S)7f	² D- ² F ^o	5/2-7/2	2
1.18×10 ⁰	100	1485.513	1485.457	76663	143983	3s3p ²	3p ³	² S- ² P ^o	1/2-3/2	2
3.64×10 ⁻¹	3	1508.741	1508.430	55307	121601	3s3p ²	3s3p(³ P)4s	² D- ² P ^o	3/2-3/2	2
3.37×10 ⁻¹	100	1509.101	1508.838	55325	121601	3s3p ²	3s3p(³ P)4s	² D- ² P ^o	5/2-3/2	2
2.14×10 ⁻¹	50	1512.072	1511.764	55307	121455	3s3p ²	3s3p(³ P)4s	² D- ² P ^o	3/2-1/2	2
1.44×10 ⁰	30	1513.570	1513.573	83802	149870	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	² P- ² D ^o	1/2-3/2	2
2.53×10 ⁰	60	1516.910	1516.915	84004	149927	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	² P- ² D ^o	3/2-5/2	2
2.79×10 ⁻¹	5	1518.221	1518.224	84004	149870	3s3p ²	3s3p(³ P)4d	² P- ² D ^o	3/2-3/2	2
6.93×10 ⁰	500	1526.719	1526.815	0	65496	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)4s	² P ^o - ² S	1/2-1/2	2
3.82×10 ¹	1000	1533.445	1533.575	289	65496	3s ² (¹ S)3p	3s ² (¹ S)4s	² P ^o - ² S	3/2-1/2	2
3.52×10 ⁻¹	10	1562.451	1562.142	55307	119322	3s3p ²	3s ² (¹ S)6f	² D- ² F ^o	3/2-5/2	2
4.91×10 ⁻¹	15	1562.845	1562.580	55325	119322	3s3p ²	3s ² (¹ S)6f	² D- ² F ^o	5/2-7/2	2
9.89×10 ⁻¹	10	1563.765	1563.501	55325	119284	3s3p ²	3s ² (¹ S)7p	² D- ² P ^o	5/2-3/2	2
5.95×10 ⁻¹	5	1564.066	1563.763	55307	119255	3s3p ²	3s ² (¹ S)7p	² D- ² P ^o	3/2-1/2	2
7.08×10 ⁻¹	3	1661.059	1661.070	83802	144004	3s3p ²	3p ³	² P- ² P ^o	1/2-1/2	2
2.80×10 ⁻¹	1	1661.633	1661.656	83802	143983	3s3p ²	3p ³	² P- ² P ^o	1/2-3/2	2
1.75×10 ⁰	0	1667.267	1667.264	84004	143983	3s3p ²	3p ³	² P- ² P ^o	3/2-3/2	2
1.03×10 ⁰	2	1704.967	1704.629	55307	113971	3s3p ²	3s ² (¹ S)6p	² D- ² P ^o	3/2-1/2	2
2.50×10 ⁻²	10	1710.826	1710.513	55307	113769	3s3p ²	3s ² (¹ S)5f	² D- ² F ^o	3/2-5/2	2
3.46×10 ⁻²	20	1711.296	1711.039	55325	113769	3s3p ²	3s ² (¹ S)5f	² D- ² F ^o	5/2-7/2	2
1.40×10 ⁻³	4	1736.817	1736.796	79337	135304	3s ² (¹ S)3d	3p ³	² D- ² D ^o	3/2-3/2	2
9.00×10 ⁻⁴	8	1737.538	1737.196	79354	135307	3s ² (¹ S)3d	3p ³	² D- ² D ^o	5/2-5/2	2
2.49×10 ⁻¹	150	1808.003	1808.084	0	55307	3s ² (¹ S)3p	3s3p ²	² P ^o - ² D	1/2-3/2	2
4.41×10 ⁻¹	200	1816.921	1816.979	289	55325	3s ² (¹ S)3p	3s3p ²	² P ^o - ² D	3/2-5/2	2
4.65×10 ⁻¹	10	1817.451	1817.571	289	55307	3s ² (¹ S)3p	3s3p ²	² P ^o - ² D	3/2-3/2	2
3.86×10 ⁻¹	1	1868.765	1868.481	55307	108827	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	² D- ² D ^o	3/2-5/2	2
5.41×10 ⁰	20	1869.317	1869.107	55325	108827	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	² D- ² D ^o	5/2-5/2	2
3.47×10 ⁰	15	1870.227	1870.464	55307	108770	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	² D- ² D ^o	3/2-3/2	2
3.87×10 ⁻¹	3	1870.782	1871.092	55325	108770	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	² D- ² D ^o	5/2-3/2	2
7.07×10 ⁻¹	100	1902.459	1901.939	79354	131932	3s ² (¹ S)3d	3s3p(³ P)3d	² D- ² F ^o	5/2-7/2	2
2.57×10 ⁻¹	5	1904.326	1904.321	101030	153542	3s ² (¹ S)4d	3s3p(³ P)4d	² D- ² P ^o	5/2-3/2	2
4.99×10 ⁻⁵	3	1905.878	1905.870	101028	153498	3s ² (¹ S)4d	3s3p(³ P)4d	² D- ² P ^o	3/2-1/2	2
4.99×10 ⁻¹	50	1910.621	1910.334	79337	131684	3s ² (¹ S)3d	3s3p(³ P)3d	² D- ² F ^o	3/2-5/2	2
3.40×10 ⁻²	0	1911.265	1910.932	79354	131684	3s ² (¹ S)3d	3s3p(³ P)3d	² D- ² F ^o	5/2-5/2	2
5.90×10 ⁻³	50	1941.667	1941.676	83802	135304	3s3p ²	3p ³	² P- ² D ^o	1/2-3/2	2
3.39×10 ⁰	15	1944.586	1944.419	81251	132680	3s ² (¹ S)4p	3s3p(³ P)4p	² P ^o - ² P	3/2-3/2	2
1.38×10 ⁰	3	1945.504	1945.218	81191	132599	3s ² (¹ S)4p	3s3p(³ P)4p	² P ^o - ² P	1/2-1/2	2
6.18×10 ⁻¹	1	1947.769	1947.492	81251	132599	3s ² (¹ S)4p	3s3p(³ P)4p	² P ^o - ² P	3/2-1/2	2
7.00×10 ⁻⁴	10	1949.331	1949.337	84004	135304	3s3p ²	3p ³	² P- ² D ^o	3/2-3/2	2
9.50×10 ⁻³	100	1949.564	1949.190	84004	135307	3s3p ²	3p ³	² P- ² D ^o	3/2-5/2	2
2.19×10 ⁻¹	0	2014.920	2014.339	76663	126291	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	² S- ² P ^o	1/2-1/2	2

TABLE 1. - CONTINUED

gf-VALUE ^a	INT. ^b	WAVELENGTHS (Å) ^c		LEVELS(cm ⁻¹) ^d		CONFIGURATIONS ^e		TERMS ^e	J-J ^e	REF. ^f
		Observed	Calculated	Lower	Upper					
4.01×10 ⁻¹	3	2016.654	2016.095	76663	126248	3s3p ²	3s3p(³ P)3d	² S- ² P ^o	1/2-3/2	2
5.40×10 ⁻³		2057.965	2057.616	55307	103892	3s3p ²	3s ² (¹ S)5p	² D- ² P ^o	3/2-3/2	2
4.46×10 ⁻²	50	2058.646	2058.376	55325	103892	3s3p ²	3s ² (¹ S)5p	² D- ² P ^o	5/2-3/2	2
2.46×10 ⁻²	50	2059.014	2058.651	55307	103867	3s3p ²	3s ² (¹ S)5p	² D- ² P ^o	3/2-1/2	2
1.90×10 ⁻³	200	2072.016	2071.671	55307	103562	3s3p ²	3s ² (¹ S)4f	² D- ² F ^o	3/2-5/2	2
2.50×10 ⁻³	200	2072.701	2072.435	55325	103562	3s3p ²	3s ² (¹ S)4f	² D- ² F ^o	5/2-7/2	2
2.32×10 ⁻¹	10	2133.990	2133.296	108827	155638	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	² D ^o - ⁴ F	5/2-7/2	2
9.55×10 ⁻¹	30	2136.402	2135.796	108770	155576	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	² D ^o - ² F	3/2-5/2	2
1.44×10 ⁰	50	2136.560	2135.849	108827	155632	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	² D ^o - ² F	5/2-7/2	2
1.99×10 ⁻¹		2225.267	2224.593	76663	121601	3s3p ²	3s3p(³ P)4s	² S- ² P ^o	1/2-3/2	2
1.32×10 ⁻¹		2283.266	2282.590	79354	123150	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)8p	² D- ² P ^o	5/2-3/2	2
7.21×10 ⁻¹		2284.542	2283.868	79337	123109	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)8p	² D- ² P ^o	3/2-1/2	2
2.77×10 ⁻¹		2307.863	2307.196	79337	122667	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)7f	² D- ² F ^o	3/2-5/2	2
7.90×10 ⁰		2311.719	2311.067	81251	124508	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)8d	² P ^o - ² D	3/2-5/2	2
9.80×10 ⁻³		2313.100	2312.402	114275	157506	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ D	3/2-1/2	2
4.99×10 ⁻⁵	30	2334.404	2333.637	0	42838	3s ² (¹ S)3p	3s3p ²	² P ^o - ⁴ P	1/2-1/2	2
1.00×10 ⁻⁴	30	2334.606	2333.960	289	43121	3s ² (¹ S)3p	3s3p ²	² P ^o - ⁴ P	3/2-5/2	2
4.12×10 ⁻²	2	2336.730	2336.018	114538	157333	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ D	9/2-7/2	2
4.99×10 ⁻⁵	10	2344.203	2343.542	289	42946	3s ² (¹ S)3p	3s3p ²	² P ^o - ⁴ P	3/2-3/2	2
1.00×10 ⁻⁴	0	2346.234	2345.547	76663	119284	3s3p ²	3s ² (¹ S)7p	² S- ² P ^o	1/2-3/2	2
3.17×10 ⁻³	10	2349.540	2348.839	114424	156935	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ² G	7/2-9/2	2
4.99×10 ⁻⁵	20	2350.174	2349.472	289	42838	3s ² (¹ S)3p	3s3p ²	² P ^o - ⁴ P	3/2-1/2	2
2.46×10 ⁰	20	2353.090	2352.475	114336	156832	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ G	5/2-7/2	2
4.56×10 ⁰	100	2356.295	2355.177	114538	156978	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ G	9/2-11/2	2
1.88×10 ⁰	30	2357.180	2356.410	114275	156699	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ G	3/2-5/2	2
3.33×10 ⁰	50	2357.970	2357.243	114424	156833	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ G	7/2-9/2	2
2.89×10 ⁻²	10	2360.200	2359.476	114336	156706	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ² G	5/2-7/2	2
3.35×10 ⁻¹	5	2360.590	2360.599	114336	156899	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ G	5/2-5/2	2
3.94×10 ⁻¹	3	2364.330	2363.627	114538	156833	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ G	9/2-9/2	2
3.50×10 ⁻¹	2	2365.060	2364.352	114424	156706	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ² G	7/2-7/2	2
8.55×10 ⁻¹		2366.053	2365.367	79337	121601	3s ² (¹ S)3d	3s3p(³ P)4s	² D- ² P ^o	3/2-3/2	2
7.22×10 ⁰	5	2366.972	2366.284	79354	121601	3s ² (¹ S)3d	3s3p(³ P)4s	² D- ² P ^o	5/2-3/2	2
4.08×10 ⁰	5	2374.255	2373.579	79337	121455	3s ² (¹ S)3d	3s3p(³ P)4s	² D- ² P ^o	3/2-1/2	2
5.60×10 ⁻²	1	2418.600	2415.843	114275	155656	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ F	3/2-5/2	2
1.33×10 ⁻¹	2	2417.200	2416.474	114275	155645	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ F	3/2-3/2	2
1.12×10 ⁻¹	2	2418.290	2417.564	114336	155688	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ F	5/2-7/2	2
1.19×10 ⁻¹	3	2420.190	2419.442	114336	155656	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ F	5/2-5/2	2
1.63×10 ⁻¹	3	2421.720	2420.983	114424	155717	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ F	7/2-9/2	2
1.65×10 ⁻¹	3	2423.420	2422.684	114424	155688	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ F	7/2-7/2	2
3.02×10 ⁻¹	10	2428.450	2427.717	114538	155717	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ F ^o - ⁴ F	9/2-9/2	2
1.36×10 ⁻³	0	2439.953	2439.246	81191	122175	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)7d	² P ^o - ² D	1/2-3/2	2
2.32×10 ⁻¹	3	2500.928	2500.222	79337	119322	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)6f	² D- ² F ^o	3/2-5/2	2
1.36×10 ⁻¹	5	2501.970	2501.248	79354	119322	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)6f	² D- ² F ^o	5/2-7/2	2
2.62×10 ⁻¹	2	2504.331	2503.609	79354	119284	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)7p	² D- ² P ^o	5/2-3/2	2
1.54×10 ⁻¹	2	2505.091	2504.379	79337	119255	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)7p	² D- ² P ^o	3/2-1/2	2
3.00×10 ⁻⁴		2541.393	2540.627	83802	123150	3s3p ²	3s ² (¹ S)8p	² P- ² P ^o	1/2-3/2	2
5.00×10 ⁻⁴		2544.046	2543.270	83802	123109	3s3p ²	3s ² (¹ S)8p	² P- ² P ^o	1/2-1/2	2
1.10×10 ⁻³		2554.530	2553.764	84004	123150	3s3p ²	3s ² (¹ S)8p	² P- ² P ^o	3/2-3/2	2
4.00×10 ⁻⁴		2557.206	2556.435	84004	123109	3s3p ²	3s ² (¹ S)8p	² P- ² P ^o	3/2-1/2	2
9.50×10 ⁻¹		2604.422	2603.677	65496	103892	3s ² (¹ S)4s	3s ² (¹ S)5p	² S- ² P ^o	1/2-3/2	2

TABLE 1. - CONTINUED

gf-VALUE ^a	INT. ^b	WAVELENGTHS (Å) ^c		LEVELS (cm ⁻¹) ^d		CONFIGURATIONS ^e		TERMS ^e	J-J ^c	REF. ^f
		Observed	Calculated	Lower	Upper					
4.73×10 ⁻¹		2606.084	2605.335	65496	103867	3s ² (¹ S)4s	3s ² (¹ S)5p	2S-2P ^o	1/2-1/2	2
2.59×10 ⁻¹	0	2645.539	2644.742	33802	121601	3s3p ²	3s3p(³ P)4s	2P-2P ^o	1/2-3/2	2
5.75×10 ⁻¹	3	2655.803	2655.012	33802	121455	3s3p ²	3s3p(³ P)4s	2P-2P ^o	1/2-1/2	2
1.28×10 ⁰	5	2659.781	2658.981	84004	121601	3s3p ²	3s3p(³ P)4s	2P-2P ^o	3/2-3/2	2
3.21×10 ⁻¹	0	2670.153	2669.362	84004	121455	3s3p ²	3s3p(³ P)4s	2P-2P ^o	3/2-1/2	2
5.94×10 ⁻¹	3	2677.906	2677.145	81191	118533	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)6d	2P ^o -2D	1/2-3/2	2
1.07×10 ⁰	10	2682.210	2681.459	81251	118533	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)6d	2P ^o -2D	3/2-5/2	2
5.50×10 ⁻¹	2	2722.260	2721.474	81191	117925	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)7s	2P ^o -2S	1/2-1/2	2
1.09×10 ⁻¹	5	2726.702	2725.928	81251	117925	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)7s	2P ^o -2S	3/2-1/2	2
2.50×10 ⁻¹		2818.302	2817.462	83802	119284	3s3p ²	3s ² (¹ S)7p	2P-2P ^o	1/2-3/2	2
4.55×10 ⁻¹	2	2820.580	2819.740	83802	119255	3s3p ²	3s ² (¹ S)7p	2P-2P ^o	1/2-1/2	2
1.24×10 ⁻¹	3	2834.472	2833.627	84004	119284	3s3p ²	3s ² (¹ S)7p	2P-2P ^o	3/2-3/2	2
2.13×10 ⁻¹		2836.765	2835.931	84004	119255	3s3p ²	3s ² (¹ S)7p	2P-2P ^o	3/2-1/2	2
4.99×10 ⁻⁵		2851.456	2850.620	79354	114424	3s ² (¹ S)3d	3s3p(³ P)3d	2D-4F ^o	5/2-7/2	2
4.99×10 ⁻⁵		2857.231	2856.403	79337	114336	3s ² (¹ S)3d	3s3p(³ P)3d	2D-4F ^o	3/2-5/2	2
4.99×10 ⁻⁵		2858.514	2857.741	79354	114336	3s ² (¹ S)3d	3s3p(³ P)3d	2D-4F ^o	5/2-5/2	2
7.35×10 ⁰		2886.133	2885.290	79337	113986	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)6p	2D-2P ^o	3/2-3/2	2
3.53×10 ⁰	5	2887.358	2886.531	79337	113971	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)6p	2D-2P ^o	3/2-1/2	2
6.38×10 ⁰	10	2887.511	2886.655	79354	113986	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)6p	2D-2P ^o	5/2-3/2	2
7.50×10 ⁻²	300	2904.283	2903.449	79337	113769	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)5f	2D-2F ^o	3/2-5/2	2
1.08×10 ⁻¹	500	2905.692	2904.834	79354	113769	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)5f	2D-2F ^o	5/2-7/2	2
7.78×10 ⁻²		3014.920	3014.040	124338	157506	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4D	3/2-1/2	2
7.91×10 ⁻²		3015.980	3015.109	124350	157506	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4D	1/2-1/2	2
4.04×10 ⁻²	2	3018.040	3017.187	124350	157484	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4D	1/2-3/2	2
3.22×10 ⁻²	20	3021.550	3020.665	124338	157434	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4D	3/2-5/2	2
9.00×10 ⁻³	100	3030.000	3029.123	124330	157333	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4D	5/2-7/2	2
8.82×10 ⁻²	2	3032.350	3032.009	124462	157434	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4D	7/2-5/2	2
7.30×10 ⁻²	3	3039.210	3038.312	124580	157484	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4P ^o -4D	5/2-3/2	2
1.27×10 ⁻¹	20	3041.573	3040.682	124629	157506	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4P ^o -4D	3/2-1/2	2
5.67×10 ⁻¹	30	3042.191	3041.309	124462	157333	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4D	7/2-7/2	2
8.23×10 ⁻¹	100	3043.692	3042.796	124629	157484	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4P ^o -4D	3/2-3/2	2
6.70×10 ⁻¹	10	3043.850	3042.927	124580	157434	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4P ^o -4D	5/2-5/2	2
6.70×10 ⁻¹	10	3045.770	3044.904	124651	157484	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4P ^o -4D	1/2-3/2	2
1.66×10 ⁰	50	3048.300	3047.426	124629	157434	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4P ^o -4D	3/2-5/2	2
3.14×10 ⁰	150	3053.184	3052.295	124580	157333	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4P ^o -4D	5/2-7/2	2
4.99×10 ⁻⁵	1	3125.260	3124.335	124834	156832	3s ² (¹ S)8f	3s3p(³ P)4f	2F ^o -4G	5/2-7/2	2
3.68×10 ⁻²	1	3128.770	3127.900	108827	140788	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4p	2D ^o -2D	5/2-5/2	2
4.99×10 ⁻⁵		3138.210	3137.326	124834	156699	3s ² (¹ S)8f	3s3p(³ P)4f	2F ^o -4G	5/2-5/2	2
4.07×10 ⁻¹		3149.920	3149.004	132176	163923	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5d	4D-4F ^o	7/2-9/2	2
4.20×10 ⁰	1	3170.400	3170.035	121455	152991	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	2P ^o -2S	1/2-1/2	2
9.33×10 ⁰		3185.990	3184.801	121601	152991	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	2P ^o -2S	3/2-1/2	2
2.58×10 ⁰	150	3188.970	3188.060	124330	155688	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4F	5/2-7/2	2
4.60×10 ⁻¹	50	3192.250	3191.326	124330	155656	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4F	5/2-5/2	2
1.61×10 ⁰	150	3193.090	3192.185	124338	155656	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4F	3/2-5/2	2
4.65×10 ⁻¹	50	3194.210	3193.286	124338	155645	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4F	3/2-3/2	2
4.05×10 ⁻¹	50	3194.690	3193.765	124330	155632	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -2F	5/2-7/2	2
1.25×10 ⁰	100	3195.410	3194.486	124350	155645	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4F	1/2-3/2	2
4.30×10 ⁰	200	3199.514	3198.593	124462	155717	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4F	7/2-9/2	2
8.47×10 ⁻¹	20	3202.490	3201.562	124462	155688	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	4D ^o -4F	7/2-7/2	2
2.40×10 ⁻¹	100	3203.872	3202.987	81191	112403	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)5d	2P ^o -2D	1/2-3/2	2

TABLE 1. - CONTINUED

gf-VALUE ^a	INT. ^b	WAVELENGTHS (Å) ^c		LEVELS (cm ⁻¹) ^d		CONFIGURATIONS ^e	TERMS ^e	J-J ^e	REF. ^f	
		Observed	Calculated	Lower	Upper					
1.48×10 ⁻²		3205.770	3204.856	124462	155656	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ D ^o . ⁴ F	7/2-5/2	2
7.51×10 ⁻²		3208.250	3207.316	124462	155632	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ D ^o . ² F	7/2-7/2	2
4.35×10 ⁻¹	200	3210.025	3209.108	81251	112403	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)5d	² P ^o . ² D	3/2-5/2	2
4.18×10 ⁻¹	75	3214.660	3213.739	124580	155688	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ P ^o . ⁴ F	5/2-7/2	2
6.50×10 ⁻³	15	3217.990	3217.058	124580	155656	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ P ^o . ⁴ F	5/2-5/2	2
4.99×10 ⁻⁵	10	3220.440	3219.536	124580	155632	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ P ^o . ² F	5/2-7/2	2
1.63×10 ⁻²	20	3223.010	3222.086	124629	155656	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ P ^o . ⁴ F	3/2-5/2	2
4.00×10 ⁻³	1	3224.130	3223.208	124629	155645	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	⁴ P ^o . ⁴ F	3/2-3/2	2
3.94×10 ⁻²		3235.920	3235.104	101030	131932	3s ² (¹ S)4d	3s3p(³ P)3d	² D. ² F ^o	5/2-7/2	2
8.40×10 ⁻³	300	3333.139	3332.190	81191	111193	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)6s	² P ^o . ² S	1/2-1/2	2
1.67×10 ⁻²	500	3339.819	3338.869	81251	111193	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)6s	² P ^o . ² S	3/2-1/2	2
1.33×10 ⁻¹	2	3472.430	3472.582	103892	132680	3s ² (¹ S)5p	3s3p(³ P)4p	² P ^o . ² P	3/2-3/2	2
5.40×10 ⁻¹	2	3479.538	3479.435	103867	132599	3s ² (¹ S)5p	3s3p(³ P)4p	² P ^o . ² P	1/2-1/2	2
7.80×10 ⁻²		3685.950	3684.898	101028	128158	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)11f	² D. ² F ^o	3/2-5/2	2
1.10×10 ⁻²		3686.133	3685.079	101030	128158	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)11f	² D. ² F ^o	5/2-7/2	2
1.09×10 ⁻²		3795.362	3794.281	101028	127376	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)10f	² D. ² F ^o	3/2-5/2	2
1.50×10 ⁻²		3795.553	3794.471	101030	127376	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)10f	² D. ² F ^o	5/2-7/2	2
1.42×10 ⁻²	100	3853.664	3853.375	55307	81251	3s3p ²	3s ² (¹ S)4p	² D. ² P ^o	3/2-3/2	2
1.42×10 ⁻²	500	3856.017	3856.040	55325	81251	3s3p ²	3s ² (¹ S)4p	² D. ² P ^o	5/2-3/2	2
7.90×10 ⁻²	200	3862.595	3862.309	55307	81191	3s3p ²	3s ² (¹ S)4p	² D. ² P ^o	3/2-1/2	2
4.84×10 ⁻²	5	3919.000	3917.506	131684	157204	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	² F ^o . ² D	5/2-3/2	2
8.70×10 ⁻⁵		3954.296	3953.173	101028	126317	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)9f	² D. ² F ^o	3/2-5/2	2
1.22×10 ⁻²		3954.507	3953.388	101030	126317	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)9f	² D. ² F ^o	5/2-7/2	2
7.44×10 ⁻²	10	3955.740	3954.707	131932	157211	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	² F ^o . ² D	7/2-5/2	2
5.92×10 ⁻²	10	3977.460	3975.441	131684	156832	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	² F ^o . ⁴ G	5/2-7/2	2
6.48×10 ⁰	15	3991.770	3990.402	131932	156985	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	² F ^o . ² G	7/2-9/2	2
4.86×10 ⁰	10	3998.010	3995.473	131684	156706	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	² F ^o . ² G	5/2-7/2	2
5.27×10 ⁻²	5	4016.220	4014.718	131932	156833	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4f	² F ^o . ⁴ G	7/2-9/2	2
4.99×10 ⁻⁵		4056.993	4055.907	103562	128211	3s ² (¹ S)4f	3s ² (¹ S)11g	² F ^o . ² G	7/2-9/2	2
3.71×10 ⁻¹	3	4072.711	4071.487	79337	103892	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)5p	² D. ² P ^o	3/2-3/2	2
3.21×10 ⁰	20	4075.451	4074.205	79354	103892	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)5p	² D. ² P ^o	5/2-3/2	2
1.78×10 ⁰	15	4076.781	4075.543	79337	103867	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)5p	² D. ² P ^o	3/2-1/2	2
2.80×10 ⁻³	300	4128.067	4126.383	79337	103562	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)4f	² D. ² F ^o	3/2-5/2	2
4.10×10 ⁻³	500	4130.893	4129.647	79354	103562	3s ² (¹ S)3d	3s ² (¹ S)4f	² D. ² F ^o	5/2-7/2	2
2.55×10 ⁻²	10	4183.345	4181.085	108770	132680	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4p	² D ^o . ² P	3/2-3/2	2
2.00×10 ⁻⁴		4187.137	4185.970	103562	127445	3s ² (¹ S)4f	3s ² (¹ S)10g	² F ^o . ² G	7/2-9/2	2
2.42×10 ⁻¹	100	4190.724	4191.030	108827	132680	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4p	² D ^o . ² P	5/2-3/2	2
1.38×10 ⁻¹	50	4198.133	4195.322	108770	132599	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4p	² D ^o . ² P	3/2-1/2	2
1.83×10 ⁻²		4200.657	4199.477	101028	124834	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)8f	² D. ² F ^o	3/2-5/2	2
2.63×10 ⁻²		4200.898	4199.704	101030	124834	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)8f	² D. ² F ^o	5/2-7/2	2
2.37×10 ⁻¹		4232.864	4231.647	97976	121601	3s ² (¹ S)5s	3s3p(³ P)4s	² S. ² P ^o	1/2-3/2	2
1.13×10 ⁻¹		4259.202	4258.000	97976	121455	3s ² (¹ S)5s	3s3p(³ P)4s	² S. ² P ^o	1/2-1/2	2
4.99×10 ⁻⁵		4376.957	4375.740	103562	126409	3s ² (¹ S)4f	3s ² (¹ S)9g	² F ^o . ² G	7/2-9/2	2
4.85×10 ⁻¹		4621.418	4620.112	101028	122667	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)7f	² D. ² F ^o	3/2-5/2	2
6.92×10 ⁻¹		4621.721	4620.422	101030	122667	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)7f	² D. ² F ^o	5/2-7/2	2
1.90×10 ⁻³		4673.273	4672.001	103562	124960	3s ² (¹ S)4f	3s ² (¹ S)8g	² F ^o . ² G	7/2-9/2	2
3.81×10 ⁻¹	3	4776.200	4774.841	132176	153113	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ D. ⁴ P ^o	7/2-5/2	2
1.59×10 ⁻¹	3	4782.890	4783.670	132599	153498	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	² P. ² P ^o	1/2-1/2	2
3.89×10 ⁻¹	5	4792.290	4792.162	132680	153542	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	² P. ² P ^o	3/2-3/2	2
2.23×10 ⁻¹	2	4842.320	4840.801	131799	152451	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ D. ⁴ D ^o	1/2-3/2	2

TABLE 1. - CONTINUED

gf-VALUE ^a	INT. ^b	WAVELENGTHS (Å) ^c		LEVELS (cm ⁻¹) ^d		C2.780 CONFIGURATIONS ^e		TERMS ^e	J-J ^e	REF. ^f
		Observed	Calculated	Lower	Upper					
1.53×10 ⁰		4844.820	4843.474	103867	124503	3s ² (¹ S)5p	3s ² (¹ S)8d	² P ^o - ² D	1/2-3/2	2
2.82×10 ⁻¹	3	4845.260	4843.839	131799	152438	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ D- ⁴ D ^o	1/2-1/2	2
2.78×10 ⁰		4850.550	4849.179	103892	124508	3s ² (¹ S)5p	3s ² (¹ S)8d	² P ^o - ² D	3/2-5/2	2
2.64×10 ⁻¹	2	4853.350	4851.935	131876	152480	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ D- ⁴ D ^o	3/2-5/2	2
3.27×10 ⁻¹		4861.095	4859.737	101030	121601	3s ² (¹ S)4d	3s3p(³ P)4s	² D- ² P ^o	5/2-3/2	2
1.12×10 ⁰	15	4883.200	4881.822	132002	152480	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ D- ⁴ D ^o	5/2-5/2	2
2.99×10 ⁻¹	0	4890.250	4888.879	132002	152451	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ D- ⁴ D ^o	5/2-3/2	2
1.97×10 ⁻¹	0	4895.558	4894.180	101028	121455	3s ² (¹ S)4d	3s3p(³ P)4s	² D- ² P ^o	3/2-1/2	2
1.84×10 ⁻²		4902.650	4901.283	103892	124289	3s ² (¹ S)5p	3s ² (¹ S)9s	² P ^o - ² S	3/2-1/2	2
2.02×10 ⁰	20	4906.990	4905.353	132176	152555	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ D- ⁴ D ^o	7/2-7/2	2
2.32×10 ⁻¹	5	4908.180	4905.635	135307	155688	3p ³	3s3p(³ P)4f	² D ^o - ⁴ F	5/2-7/2	2
9.46×10 ⁻¹	20	4932.800	4931.418	135304	155576	3p ³	3s3p(³ P)4f	² D ^o - ² F	3/2-5/2	2
3.86×10 ⁻²	1000	5041.026	5039.616	81191	101028	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)4d	² P ^o - ² D	1/2-3/2	2
7.03×10 ⁻²	1000	5055.981	5054.542	81251	101030	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)4d	² P ^o - ² D	3/2-5/2	2
7.60×10 ⁻³		5056.314	5054.909	81251	101028	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)4d	² P ^o - ² D	3/2-3/2	2
3.16×10 ⁰	100	5181.900	5180.446	131799	151097	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ D- ⁴ F ^o	1/2-3/2	2
5.08×10 ⁰	100	5185.250	5183.791	131876	151161	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ D- ⁴ F ^o	3/2-5/2	2
8.70×10 ⁻³		5185.535	5184.135	103562	122846	3s ² (¹ S)4f	3s ² (¹ S)7g	² F ^o - ² G	7/2-9/2	2
7.72×10 ⁰	200	5192.860	5191.429	132002	151259	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ D- ⁴ F ^o	5/2-7/2	2
1.10×10 ⁰	500	5202.413	5200.954	132176	151398	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ D- ⁴ F ^o	7/2-9/2	2
1.69×10 ⁻¹	1	5215.670	5214.246	134031	153204	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ P- ⁴ P ^o	1/2-3/2	2
1.49×10 ⁰	10	5219.370	5217.920	132002	151161	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ D- ⁴ F ^o	5/2-5/2	2
2.70×10 ⁻¹	0	5232.760	5231.209	134093	153204	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ P- ⁴ P ^o	3/2-3/2	2
1.10×10 ⁰	5	5240.310	5238.812	132176	151259	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ D- ⁴ F ^o	7/2-7/2	2
4.00×10 ⁻¹	3	5257.640	5256.173	134093	153113	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ P- ⁴ P ^o	3/2-5/2	2
4.25×10 ⁰	3	5269.740	5268.348	134228	153204	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ P- ⁴ P ^o	5/2-3/2	2
1.24×10 ⁻¹	30	5295.190	5293.669	134228	153113	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ P- ⁴ P ^o	5/2-5/2	2
6.11×10 ⁻¹	5	5354.890	5353.487	132002	150676	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5s	⁴ D- ⁴ P ^o	5/2-5/2	2
7.47×10 ⁻¹	5	5380.480	5379.088	131876	150461	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5s	⁴ D- ⁴ P ^o	3/2-3/2	2
5.92×10 ⁻¹	3	5393.180	5391.830	131799	150340	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5s	⁴ D- ⁴ P ^o	1/2-1/2	2
2.82×10 ⁰	100	5405.340	5403.889	132176	150676	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5s	⁴ D- ⁴ P ^o	7/2-5/2	2
6.00×10 ⁻¹	5	5415.640	5414.302	131876	150340	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5s	⁴ D- ⁴ P ^o	3/2-1/2	2
1.50×10 ⁰	15	5417.340	5415.846	132002	150461	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5s	⁴ D- ⁴ P ^o	5/2-3/2	2
9.44×10 ⁻¹	15	5428.920	5427.497	134031	152451	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ P- ⁴ D ^o	1/2-3/2	2
8.09×10 ⁻¹	15	5432.890	5431.317	134031	152438	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ P- ⁴ D ^o	1/2-1/2	2
2.24×10 ⁰	100	5438.620	5437.123	134093	152480	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ P- ⁴ D ^o	3/2-5/2	2
8.63×10 ⁻¹	20	5447.260	5445.879	134093	152451	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ P- ⁴ D ^o	3/2-3/2	2
1.15×10 ⁻¹	0	5451.180	5449.724	134093	152438	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ P- ⁴ D ^o	3/2-1/2	2
1.24×10 ⁰	15	5454.490	5452.985	134920	153254	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ S- ⁴ P ^o	3/2-1/2	2
3.74×10 ⁰	100	5456.450	5454.910	134228	152555	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ P- ⁴ D ^o	5/2-7/2	2
6.40×10 ⁻¹		5462.146	5460.634	103867	122175	3s ² (¹ S)5p	3s ² (¹ S)7d	² P ^o - ² D	1/2-3/2	2
3.43×10 ⁻¹	500	5466.432	5464.899	101028	119322	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)6f	² D- ² F ^o	3/2-5/2	2
4.78×10 ⁻¹	500	5466.868	5465.333	101030	119322	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)6f	² D- ² F ^o	5/2-7/2	2
2.44×10 ⁰	100	5469.210	5467.701	134920	153204	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ S- ⁴ P ^o	3/2-3/2	2
1.16×10 ⁰		5469.450	5467.935	103892	122175	3s ² (¹ S)5p	3s ² (¹ S)7d	² P ^o - ² D	3/2-5/2	2
4.56×10 ⁻¹	5	5478.730	5477.255	134228	152480	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ P- ⁴ D ^o	5/2-5/2	2
3.60×10 ⁰	200	5496.450	5494.979	134920	153113	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	⁴ S- ⁴ P ^o	3/2-5/2	2
1.40×10 ⁻¹	100	5540.740	5539.273	116872	134920	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P ^o - ⁴ S	1/2-3/2	2
6.70×10 ⁻³		5568.355	5566.831	103867	121826	3s ² (¹ S)5p	3s ² (¹ S)8s	² P ^o - ² S	1/2-1/2	2
1.33×10 ⁻²		5575.973	5574.416	103892	121826	3s ² (¹ S)5p	3s ² (¹ S)8s	² P ^o - ² S	3/2-1/2	2

TABLE 1. - CONTINUED

gf-VALUE ^a	INT. ^b	WAVELENGTHS (Å) ^c		LEVELS (cm ⁻¹) ^d		CONFIGURATIONS ^e		TERMS ^f	J-J ^g	REF. ^h
		Observed	Calculated	Lower	Upper					
2.67×10 ⁻¹	150	5576.661	5575.138	116988	134920	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ S	3/2-3/2	2
7.40×10 ⁻³	3	5605.351	5603.850	114336	132176	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4p	⁴ F°- ⁴ D	5/2-7/2	2
1.50×10 ⁻¹	100	5632.973	5631.434	114424	132176	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4p	⁴ F°- ⁴ D	7/2-7/2	2
3.85×10 ⁻¹	200	5639.478	5637.902	117188	134920	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ S	5/2-3/2	2
1.04×10 ⁻²	2	5641.010	5639.455	114275	132002	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4p	⁴ F°- ⁴ D	3/2-5/2	2
1.91×10 ⁻¹	150	5660.656	5659.100	114336	132002	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4p	⁴ F°- ⁴ D	5/2-5/2	2
1.32×10 ⁻¹	1000	5669.562	5667.999	114538	132176	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4p	⁴ F°- ⁴ D	9/2-7/2	2
1.47×10 ⁻²	30	5681.440	5679.871	114275	131876	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4p	⁴ F°- ⁴ D	3/2-3/2	2
9.07×10 ⁻²	300	5688.811	5687.232	114424	132002	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4p	⁴ F°- ⁴ D	7/2-5/2	2
5.92×10 ⁻²	200	5701.374	5699.800	114336	131876	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4p	⁴ F°- ⁴ D	5/2-3/2	2
3.69×10 ⁻¹	100	5706.370	5704.813	114275	131799	3s3p(³ P)3d	3s3p(³ P)4p	⁴ F°- ⁴ D	3/2-1/2	2
1.11×10 ⁰	30	5785.730	5788.353	132599	149870	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	² P- ² D°	1/2-3/2	2
1.98×10 ⁰	30	5794.900	5796.508	132680	149927	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	² P- ² D°	3/2-5/2	2
1.16×10 ⁰	150	5800.468	5798.877	116988	134228	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ P	3/2-5/2	2
1.07×10 ⁰	200	5806.738	5805.146	116872	134093	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ P	1/2-3/2	2
2.11×10 ⁻¹	1	5813.990	5815.675	132680	149870	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)4d	² P- ² D°	3/2-3/2	2
1.16×10 ⁻¹	30	5827.801	5826.179	116872	134031	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ P	1/2-1/2	2
3.47×10 ⁻¹	50	5846.134	5844.549	116988	134093	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ P	3/2-3/2	2
1.09×10 ⁰	10	5867.483	5865.869	116988	134031	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ P	3/2-1/2	2
2.78×10 ⁰	300	5868.404	5866.811	117188	134228	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ P	5/2-5/2	2
1.21×10 ⁰	150	5915.220	5913.563	117188	134093	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ P	5/2-3/2	2
1.30×10 ⁻²	500	5957.561	5955.914	81191	97976	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)5s	² P°- ² S	1/2-1/2	2
2.59×10 ⁻²	500	5978.929	5977.286	81251	97976	3s ² (¹ S)4p	3s ² (¹ S)5s	² P°- ² S	3/2-1/2	2
5.58×10 ⁻¹	6	6030.270	6028.693	134093	150676	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5s	⁴ P- ⁴ P°	3/2-5/2	2
1.24×10 ⁰	20	6080.060	6078.072	134228	150676	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5s	⁴ P- ⁴ P°	5/2-5/2	2
4.90×10 ⁻¹	10	6086.670	6084.777	134031	150461	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5s	⁴ P- ⁴ P°	1/2-3/2	2
1.50×10 ⁻¹	4	6109.760	6107.890	134093	150461	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5s	⁴ P- ⁴ P°	3/2-3/2	2
9.50×10 ⁻²	4	6131.760	6129.875	134031	150340	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5s	⁴ P- ⁴ P°	1/2-1/2	2
4.62×10 ⁻¹	5	6155.170	6153.333	134093	150340	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5s	⁴ P- ⁴ P°	3/2-1/2	2
5.04×10 ⁻¹	5	6160.160	6158.580	134228	150461	3s3p(³ P)4p	3s3p(³ P)5s	⁴ P- ⁴ P°	5/2-3/2	2
1.00×10 ⁻³		6239.630	6237.967	103562	119589	3s ² (¹ S)4f	3s ² (¹ S)6g	² F°- ² G	7/2-9/2	2
1.05×10 ⁻¹	1000	6347.103	6345.325	65496	81251	3s ² (¹ S)4s	3s ² (¹ S)4p	² S- ² P°	1/2-3/2	2
5.21×10 ⁰	1000	6371.359	6369.589	65496	81191	3s ² (¹ S)4s	3s ² (¹ S)4p	² S- ² P°	1/2-1/2	2
1.12×10 ⁰	50	6660.520	6658.722	116988	132002	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ D	3/2-5/2	2
4.47×10 ⁻¹	15	6665.000	6663.178	116872	131876	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ D	1/2-3/2	2
2.11×10 ⁰	100	6671.880	6670.030	117188	132176	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ D	5/2-7/2	2
5.00×10 ⁻⁵		6679.650	6677.733	103562	118533	3s ² (¹ S)4f	3s ² (¹ S)6d	² F°- ² D	7/2-5/2	2
4.42×10 ⁻¹	20	6699.380	6697.529	116872	131799	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ D	1/2-1/2	2
5.56×10 ⁻¹	50	6717.040	6715.141	116988	131876	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ D	3/2-3/2	2
4.54×10 ⁻¹	20	6750.280	6748.451	117188	132002	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ D	5/2-5/2	2
8.56×10 ⁻²	5	6751.880	6750.032	116988	131799	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ D	3/2-1/2	2
4.88×10 ⁻²	2	6808.190	6806.408	117188	131876	3s3p(³ P)4s	3s3p(³ P)4p	⁴ P°- ⁴ D	5/2-3/2	2
3.93×10 ⁻¹		6818.450	6816.574	103867	118533	3s ² (¹ S)5p	3s ² (¹ S)6d	² P°- ² D	1/2-3/2	2
7.11×10 ⁻¹		6829.820	6827.977	103892	118533	3s ² (¹ S)5p	3s ² (¹ S)6d	² P°- ² D	3/2-5/2	2
1.30×10 ⁻³		6924.530	6922.801	113769	128211	3s ² (¹ S)5f	3s ² (¹ S)11g	² F°- ² G	7/2-9/2	2
8.70×10 ⁻³		7113.450	7111.497	103867	117925	3s ² (¹ S)5p	3s ² (¹ S)7s	² P°- ² S	1/2-1/2	2
1.72×10 ⁻²		7125.840	7123.882	103892	117925	3s ² (¹ S)5p	3s ² (¹ S)7s	² P°- ² S	3/2-1/2	2
7.25×10 ⁻²		7187.040	7185.042	112403	126317	3s ² (¹ S)5d	3s ² (¹ S)9f	² D- ² F°	5/2-7/2	2
7.50×10 ⁻³		7312.290	7310.274	113769	127445	3s ² (¹ S)5f	3s ² (¹ S)10g	² F°- ² G	7/2-9/2	2
1.00×10 ⁻⁴		7490.330	7492.099	119255	132599	3s ² (¹ S)7p	3s3p(³ P)4p	² P°- ² P	1/2-1/2	2

TABLE I. - CONTINUED

gf-VALUE ^a	INT. ^b	WAVELENGTHS (Å) ^c		LEVELS (cm ⁻¹) ^d		CONFIGURATIONS ^e		TERMS ^e	J-J ^e	REF. ^f
		Observed	Calculated	Lower	Upper					
2.00 × 10 ⁻⁴		7848.800	7846.624	101028	113769	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)5f	² D- ² F°	3/2-5/2	2
3.00 × 10 ⁻⁴		7849.720	7847.529	101030	113769	3s ² (¹ S)4d	3s ² (¹ S)5f	² D- ² F°	5/2-7/2	2
6.60 × 10 ⁻³		7911.470	7909.295	113769	126409	3s ² (¹ S)5f	3s ² (¹ S)9g	² F°- ² G	7/2-9/2	2
1.70 × 10 ⁻²		8044.500	8042.284	112403	124834	3s ² (¹ S)5d	3s ² (¹ S)8f	² D- ² F°	5/2-7/2	2
4.99 × 10 ⁻⁵		9412.720	9410.283	103562	114186	3s ² (¹ S)4f	3s ² (¹ S)5g	² F°- ² G	7/2-9/2	2

^aWeighted oscillator strengths for atomic transition obtained by the method described in § 2.

^bObserved line intensities.

^cWavelength corresponding to the energy levels difference between the experimental adjusted energy level values.

^dNumerical values of the energy levels are those obtained by an optimized procedure using the program ELCALC.

^eLevel designations for the transition, including configuration parentage, term, and total angular momentum. For practical purposes, we show them in three separate columns.

^fRef.- (1) Ferner 1941; (2) Artru and Brillet 1977; (3) Griffin et al. 1976; (4) Träbert et al. 1976; (5) Trigueiros et al. 1992; (6) Trigueiros et al. 1991.

TABLE 2. LIFETIMES FOR THE Si II SPECTRUM

Configuration	Terms	Energy (cm ⁻¹)	Lifetimes (s) ^a	Configuration	Terms	Energy (cm ⁻¹)	Lifetimes (s) ^a
3s ² (¹ S)3p	² P _{1/2}	0	-	3s3p(³ P)3d	⁴ P _{3/2}	124629	7.431×10 ⁻¹⁰
3s ² (¹ S)3p	² P _{3/2}	289	-	3s3p(³ P)3d	⁴ P _{1/2}	124651	7.335×10 ⁻¹⁰
3s ² (¹ S)4p	² P _{1/2}	81191	2.323×10 ⁻⁹	3s ² (¹ S)8f	² F _{7/2}	124834	5.672×10 ⁻⁸
3s ² (¹ S)4p	² P _{3/2}	81251	2.299×10 ⁻⁹	3s ² (¹ S)8f	² F _{5/2}	124834	5.633×10 ⁻⁸
3s ² (¹ S)4f	² F _{7/2}	103562	7.852×10 ⁻⁷	3s ² (¹ S)9p	² P _{1/2}	125023	4.254×10 ⁻⁸
3s ² (¹ S)4f	² F _{5/2}	103562	7.690×10 ⁻⁷	3s ² (¹ S)9p	² P _{3/2}	125034	4.646×10 ⁻⁸
3s ² (¹ S)5p	² P _{1/2}	103867	1.577×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)3d	² P _{3/2}	126248	1.059×10 ⁻¹⁰
3s ² (¹ S)5p	² P _{3/2}	103892	1.571×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)3d	² P _{1/2}	126291	1.091×10 ⁻¹⁰
3s3p(³ P)3d	² D _{3/2}	108770	2.150×10 ⁻¹⁰	3s ² (¹ S)9f	² F _{5/2}	126317	6.139×10 ⁻⁹
3s3p(³ P)3d	² D _{5/2}	108827	2.152×10 ⁻¹⁰	3s ² (¹ S)9f	² F _{7/2}	126317	5.901×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)5f	² F _{7/2}	113769	4.633×10 ⁻⁸	3s ² (¹ S)10p	² P _{3/2}	126525	2.213×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)5f	² F _{5/2}	113769	4.581×10 ⁻⁸	3s ² (¹ S)10p	² P _{1/2}	126543	2.197×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)6p	² P _{1/2}	113971	1.539×10 ⁻¹¹	3s ² (¹ S)10f	² F _{5/2}	127376	3.167×10 ⁻⁸
3s ² (¹ S)6p	² P _{3/2}	113986	1.530×10 ⁻¹¹	3s ² (¹ S)10f	² F _{7/2}	127376	2.547×10 ⁻⁸
3s3p(³ P)3d	⁴ F _{3/2}	114275	2.137×10 ⁻⁵	3s ² (¹ S)11f	² F _{5/2}	128158	3.282×10 ⁻⁹
3s3p(³ P)3d	⁴ F _{5/2}	114336	1.459×10 ⁻⁵	3s ² (¹ S)11f	² F _{7/2}	128158	3.253×10 ⁻⁹
3s3p(³ P)3d	⁴ F _{7/2}	114424	1.543×10 ⁻⁵	3s3p(³ P)3d	² F _{5/2}	131684	5.304×10 ⁻¹⁰
3s3p(³ P)3d	⁴ F _{9/2}	114538	-	3s3p(³ P)3d	² F _{7/2}	131932	4.018×10 ⁻¹⁰
3s3p(³ P)4s	⁴ P _{1/2}	116872	8.256×10 ⁻¹⁰	3p ³	² D _{3/2}	135304	3.928×10 ⁻⁷
3s3p(³ P)4s	⁴ P _{3/2}	116988	8.143×10 ⁻¹⁰	3p ³	² D _{5/2}	135307	6.336×10 ⁻⁷
3s3p(³ P)4s	⁴ P _{5/2}	117188	8.008×10 ⁻¹⁰	3p ³	² P _{3/2}	143983	3.725×10 ⁻¹¹
3s ² (¹ S)7p	² P _{1/2}	119255	7.994×10 ⁻¹⁰	3p ³	² P _{1/2}	144004	3.808×10 ⁻¹¹
3s ² (¹ S)7p	² P _{3/2}	119284	8.518×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4d	² D _{3/2}	149870	3.906×10 ⁻¹⁰
3s ² (¹ S)6f	² F _{7/2}	119322	3.743×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4d	² D _{5/2}	149927	3.923×10 ⁻¹⁰
3s ² (¹ S)6f	² F _{5/2}	119322	3.693×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)5s	⁴ P _{1/2}	150340	1.281×10 ⁻⁹
3s3p(³ P)4s	² P _{1/2}	121455	1.583×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)5s	⁴ P _{3/2}	150461	1.277×10 ⁻⁹
3s3p(³ P)4s	² P _{3/2}	121601	1.794×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)5s	⁴ P _{5/2}	150676	1.268×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)7f	² F _{7/2}	122667	4.722×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4d	⁴ F _{3/2}	151097	1.855×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)7f	² F _{5/2}	122667	4.747×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4d	⁴ F _{5/2}	151161	1.856×10 ⁻⁹
3p ³	⁴ S _{3/2}	123047	2.002×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4d	⁴ F _{7/2}	151259	1.862×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)8p	² P _{1/2}	123109	3.088×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4d	⁴ F _{9/2}	151398	1.878×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)8p	² P _{3/2}	123150	3.002×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)5s	² P _{3/2}	151949	2.612×10 ⁻⁹
3s3p(³ P)3d	⁴ D _{5/2}	124330	2.700×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4d	⁴ D _{1/2}	152438	9.808×10 ⁻¹⁰
3s3p(³ P)3d	⁴ D _{3/2}	124338	2.683×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4d	⁴ D _{3/2}	152451	9.821×10 ⁻¹⁰
3s3p(³ P)3d	⁴ D _{1/2}	124350	2.673×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4d	⁴ D _{5/2}	152480	9.963×10 ⁻¹⁰
3s3p(³ P)3d	⁴ D _{7/2}	124462	2.709×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4d	⁴ D _{7/2}	152555	9.748×10 ⁻¹⁰
3s3p(³ P)3d	⁴ P _{5/2}	124580	7.646×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4d	⁴ P _{5/2}	153113	1.478×10 ⁻⁹

TABLE 2. Continued

Configuration	Terms	Energy (cm ⁻¹)	Lifetimes (s) ^a	Configuration	Terms	Energy (cm ⁻¹)	Lifetimes (s) ^a
3s3p(³ P)4d	⁴ P _{3/2}	153204	1.493×10 ⁻⁹	3s ² (¹ S)8g	² G _{9/2}	124960	4.288×10 ⁻⁷
3s3p(³ P)4d	⁴ P _{1/2}	153254	1.503×10 ⁻⁹	3s ² (¹ S)9g	² G _{9/2}	126409	1.457×10 ⁻⁷
3s3p(³ P)4d	² P _{1/2}	153498	4.257×10 ⁻¹¹	3s ² (¹ S)10g	² G _{9/2}	127445	9.184×10 ⁻⁶
3s3p(³ P)4d	² P _{3/2}	153542	4.395×10 ⁻¹¹	3s ² (¹ S)11g	² G _{9/2}	128211	1.530×10 ⁻⁷
3s3p(³ P)5d	⁴ F _{9/2}	163923	2.171×10 ⁻⁸	3s3p(³ P)4p	⁴ D _{1/2}	131799	1.476×10 ⁻⁸
3s3p(³ P)6s	⁴ P _{5/2}	164125	7.491×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4p	⁴ D _{3/2}	131876	1.655×10 ⁻⁸
3s3p(³ P)5d	⁴ D _{7/2}	164976	4.581×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4p	⁴ D _{5/2}	132002	3.855×10 ⁻⁸
3s3p(³ P)5d	⁴ P _{5/2}	164976	-	3s3p(³ P)4p	⁴ D _{7/2}	132176	5.103×10 ⁻⁸
3s3p ²	⁴ P _{1/2}	42838	2.499×10 ⁻⁵	3s3p(³ P)4p	² P _{1/2}	132599	8.962×10 ⁻¹²
3s3p ²	⁴ P _{3/2}	42946	1.559×10 ⁻⁴	3s3p(³ P)4p	² P _{3/2}	132680	9.001×10 ⁻¹²
3s3p ²	⁴ P _{5/2}	43121	5.026×10 ⁻⁵	3s3p(³ P)4p	⁴ P _{1/2}	134031	4.462×10 ⁻⁹
3s3p ²	² D _{3/2}	55307	7.395×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4p	⁴ P _{3/2}	134093	4.260×10 ⁻⁹
3s3p ²	² D _{5/2}	55325	7.499×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4p	⁴ P _{5/2}	134228	5.110×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)4s	² S _{1/2}	65496	3.387×10 ⁻¹³	3s3p(³ P)4p	⁴ S _{3/2}	134920	2.617×10 ⁻⁸
3s3p ²	² S _{1/2}	76663	6.633×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4p	² D _{3/2}	140580	5.698×10 ⁻¹²
3s ² (¹ S)3d	² D _{3/2}	79337	1.047×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4p	² D _{5/2}	140788	5.728×10 ⁻¹²
3s ² (¹ S)3d	² D _{5/2}	79354	1.067×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4p	² S _{1/2}	152991	2.541×10 ⁻¹²
3s3p ²	² P _{1/2}	83802	1.011×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4f	² F _{5/2}	155576	2.151×10 ⁻⁹
3s3p ²	² P _{3/2}	84004	1.006×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4f	² F _{7/2}	155632	2.358×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)5s	² S _{1/2}	97976	4.964×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4f	⁴ F _{3/2}	155645	2.559×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)4d	² D _{3/2}	101028	7.945×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4f	⁴ F _{5/2}	155656	2.554×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)4d	² D _{5/2}	101030	8.049×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4f	⁴ F _{7/2}	155688	3.070×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)6s	² S _{1/2}	111193	1.608×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4f	⁴ F _{9/2}	155717	2.605×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)5d	² D _{3/2}	112403	3.380×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4f	⁴ G _{5/2}	156699	2.459×10 ⁻⁷
3s ² (¹ S)5d	² D _{5/2}	112403	3.416×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4f	² G _{7/2}	156706	5.866×10 ⁻⁸
3s ² (¹ S)5g	² G _{9/2}	114186	2.387×10 ⁻²	3s3p(³ P)4f	⁴ G _{7/2}	156832	1.026×10 ⁻⁸
3s ² (¹ S)7s	² S _{1/2}	117925	3.202×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4f	⁴ G _{9/2}	156833	1.678×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)6d	² D _{3/2}	118533	1.239×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4f	⁴ G _{11/2}	156978	1.678×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)6d	² D _{5/2}	118533	1.251×10 ⁻¹⁰	3s3p(³ P)4f	² G _{9/2}	156985	2.720×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)6g	² G _{9/2}	119589	5.478×10 ⁻⁵	3s3p(³ P)4f	² D _{3/2}	157204	2.372×10 ⁻¹⁰
3s ² (¹ S)8s	² S _{1/2}	121826	5.644×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4f	² D _{5/2}	157211	1.174×10 ⁻⁷
3s ² (¹ S)7d	² D _{3/2}	122175	4.042×10 ⁻¹¹	3s3p(³ P)4f	⁴ D _{7/2}	157333	2.579×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)7d	² D _{5/2}	122175	4.072×10 ⁻¹¹	3s3p(³ P)4f	⁴ D _{5/2}	157434	1.950×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)7g	² G _{9/2}	122846	1.173×10 ⁻⁶	3s3p(³ P)4f	⁴ D _{3/2}	157484	2.027×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)9s	² S _{1/2}	124289	7.431×10 ⁻⁹	3s3p(³ P)4f	⁴ D _{1/2}	157506	2.201×10 ⁻⁹
3s ² (¹ S)8d	² D _{3/2}	124508	6.522×10 ⁻¹²				
3s ² (¹ S)8d	² D _{5/2}	124508	6.639×10 ⁻¹²				

^a Lifetimes for the energy level obtained by the method describes in sect. 2