

## Parâmetros energéticos de Slater-Condon-Löwdin ajustados para o espectro P XIII

Antônio Jamil Mania

Universidade Estadual de Santa Cruz, DCET, 45662-900 Ilhéus, BA, Brasil

[mania@uesc.br](mailto:mania@uesc.br)

### Resumo

O espectro desse íon tem sido obtido e analisado por diversos autores, tendo seus níveis de energia estabelecidos através da identificação experimental das linhas que representam suas transições. As previsões teóricas são obtidas com o uso de códigos numéricos na forma multiconfiguracional. Os parâmetros energéticos de Slater-Condon-Löwdin que caracterizam o íon são ajustados aos níveis de energia conhecidos. O procedimento é usado até os valores estabelecidos experimentalmente serem reproduzidos. O íon simulado pode então ser usado para estudos, estando seus dados em acordo com as observações experimentais. Apresentamos esses parâmetros, ajustados para todas as configurações sob estudo desse espectro. Optamos por estudar esse íon do tipo He porque são aqueles mais utilizados para testes da teoria de soluções da hamiltoniana multielétrons.

**Palavras-chave:** parâmetros Slater-Condon-Löwdin, espectro P XIII, níveis de energia, transições atômicas.

### Abstract

The spectrum of this ion has been obtained and analyzed for several authors with their energy levels established by identifying lines that represent their transitions. The theoretical predictions are obtained with the use of numerical codes in multiconfiguration approach. The parameters of Condon-Slater-Löwdin that characterize the ion been adjusted to the known energy levels. The method is used until the values established experimentally be reproduced for the purposes of comparison. The ion simulated can then be used for studies being your data in accordance with the experimental observations. We present these parameters adjusted to all P XIII spectrum known. We chose to study Helium-like ion due to belong at class of the most commonly used for testing the solution theory of multi-electron Hamiltonian.

**Keywords:** Slater-Condon-Löwdin parameters, P XIII, energy levels, atomic transitions.

## 1. Introdução

O espectro do elemento fósforo doze vezes ionizado (P XIII) tem sido estudado por diversos autores ao longo de décadas passadas. Originalmente foi H. A. Robinson em 1948 quem o analisou determinando os níveis de energia mais baixos, e estes estudos foram usados na compilação de "Atomic Energy Levels" publicada por C. E. Moore[1]. Entretanto, as linhas espectrais obtidas experimentalmente, e representando as transições atômicas nunca foram publicadas, embora Moore as tenha recalculadas para sua inclusão. R. L. Kelly[2] incluiu algumas dessas linhas em sua compilação inicial. Mais tarde, em 1970, Fawcett[3] usando um theta-pinch como fonte de luz, mediu linhas espectrais no intervalo de comprimento de onda entre 22 - 41 Å e 278-594 Å, e também ainda Fawcett *et al.*[4] usando agora um plasma produzido por laser como fonte de radiação, embora com resolução espectral mais pobre, serviu-se para confirmar a identidade de muitas dessas linhas previamente classificadas. Goldsmith *et al.*[5] adicionou, revisou e estendeu as análises espectrais de Robinson e Fawcett, classificando 13 linhas no intervalo (23–39) Å com as transições  $2s - Np$ ,  $2p - 3s$ , e  $2p - nd$ . Kasyanov et al.[6] e Dere[7] realizaram experimentos para estudos específicos da transição  $1s^2 2p^2 P_{3/2}$  para o nível fundamental  $1s^2 2s^2 S_{1/2}$ , e Deschepper *et al.* [8] usando a técnica de absorção de tunelamento-Doppler de raio-X realizou experimentos para a determinação da transição  $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s 2s 2p^4 P_{1/2}$  e  $4P_{3/2}$ . Edlén[9] usando sua célebre técnica de fórmula de series forneceu resultados para o sistema  $1s^2 nl$  que em geral estão de acordo e dentro da tolerância de erros experimentais esperados. Comprimentos de onda observados por Fawcett e Ridgeley[10] e também por Goldsmith *et al.* [5] na região 102 - 111 Å foram utilizados na análise espectral que avaliou os níveis  $4p$  e  $4f$ , sendo que o nível  $4s$  ficou considerado como advindo de valores da separação  $2p - 4s$  ao longo da sequência isoeletrônica. Aglitskii *et al.* [11] e Boiko *et al.* [12], usando também um plasma produzido por laser como fonte de luz, deu importante contribuição para os aspectos que tem sido observados na transição dos termos dubletes das configurações atômicas  $1s 2s^2$ ,  $1s 2p^2$ ,  $1s 2s 2p$ ,  $1s 2s 3p$ ,  $1s 2s 4p$ ,  $1s 2p 3p$ ,  $1s 2p 4p$ , sendo que os níveis foram derivados das separações de energia, como calculados por Vainshtein and Safronova[13,14]. As publicações

dessas tabelas contendo os valores das linhas espectrais são arranjadas por espectros, contendo algumas do P XIII, as quais não estão em nenhuma outra fonte de dados[15,16]. Martin et al.[17] revisou todos os trabalhos anteriores desde Moore, compilando os níveis de energia de todos os íons do elemento fósforo. Hayes and Fawcett[18] deram ainda novas contribuições por reutilizar o mesmo espectro obtido no theta-pinch décadas atrás. Kelly[19] revisou as identificações das linhas do P XIII em sua atual compilação.

## 2. Metodologia e Resultados

Para enfatizar a importância dos parâmetros eletrostáticos emergindo da solução da Hamiltoniana que está sendo manipulada na obtenção dos autovalores de nossa matriz energia, uma breve revisão teórica do assunto é apresentada.

Em um átomo multi-elétrons, a Hamiltoniana provê as predições teóricas para os valores dos níveis de energia, e são obtidos por resolver

$$H = \frac{-h^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}} + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{\ell} \cdot \vec{s} \quad (1)$$

Soluções podem somente serem encontradas com métodos de aproximações, como a teoria de perturbação, método variacional, método de campo auto-consistente, modelo estatístico de Thomas- Fermi (HXR), modelo relativístico Hartree-Fock (HFR).

Para comparar as energias dos termos envolvidos, a Hamiltoniana pode ser escrita como,

$$H = \left( \frac{-h^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}} \right)_C + \left[ \left( \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}} \right)_{NC} + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{\ell} \cdot \vec{s} \right] = H_C + H_{NC} + H_{SO} \quad (2)$$

onde  $H_C$  uma parte central,  $H_{NC}$  uma parte não-central, e  $H_{SO}$  é o termo associado com a energia das interações spin-órbita. Se  $H_{SO} \ll H_{NC}$  leva ao esquema de acoplamento Russell-Saunders, ou  $LS$ , o qual está em excelente acordo para elementos mais leves  $Z < 50$ . Se o oposto é o caso, então os momentos angulares devem ser acoplados de acordo com o esquema de acoplamento  $jj$ , o qual deve ser usado para elementos mais pesados (envolve camadas  $f$  de configurações eletrônicas). A porção não-central da energia de interação eletrostática entre os elétrons provê correções para a energia total requerida, e são determinadas diretamente pelos elementos de matriz do operador energia potencial de Coulomb. Esse arranjo de elementos energéticos pode ser computados em termos das integrais direta  $I$  e de troca  $K$ ,

$$\Delta E_{SL} = I \pm K = \sum_k (f_k F^k \pm g_k G^k) \quad (3)$$

As integrais  $I$  representando a energia positiva da repulso eletrostática mútua para a distribuição espacial dos elétrons, e as integrais  $K$  representando o decréscimo nesta energia que resulta quando se inclui a correlação posicional dos elétrons com spins paralelos (surge devido ao Princípio de Exclusão de Pauli). Os coeficientes  $f_k$  e  $g_k$  são expressos em termos dos elementos de matriz das funções esféricas, vindas da separação de variáveis para as funções de ondas,

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (4)$$

As integrais radiais  $F^k$  e  $G^k$  (frequentemente chamadas integrais de Slater), são essencialmente positivas, e seus cálculos são possíveis somente se algum dos métodos de aproximação, são usados.

Em nosso cálculo, os comprimentos de onda foram obtidos com a ajuda do pacote de códigos numéricos tipo Hartree-Fock relativístico (HFR) e com um programa de ajustes de parâmetros que usa o procedimento dos mínimos quadrados. Estes são conhecidos na literatura especializada da espectroscopia e da física atômica, como códigos Cowan[20]. São códigos de uso livre, e toda a documentação, inclusive manual de utilização, pode ser encontrada nesta referência. Com eles, se calcula os valores dos parâmetros energéticos introduzidos pela teoria de Slater-Condon[21, 22]  $EAV$ ,  $F^k$ ,  $G^k$  e Löwdin[23]  $R^k$ , que trata da energia de interação entre configurações distintas. Esses são parâmetros ajustáveis descrevendo a estrutura de níveis de uma configuração atômica. Com base na comparação com dados experimentais disponíveis, se confirma sua consistência com a identificação dos níveis de energia de cada configuração correspondente, seus valores devem ser determinados empiricamente, tal a dar o melhor ajuste possível entre os níveis de energia calculados e as transições observadas.

O processo de ajustes é feito por um procedimento iterativo automático até os valores dos parâmetros não produzirem mudanças de um ciclo de iteração para o próximo. O desvio padrão alcançado na paridade, para cada conjunto de configurações, está associado com os valores dos níveis de energia conseguidos. O ajuste fornece também uma estimativa de valores para aqueles conjunto de níveis que não são ainda conhecidos experimentalmente, indicados neste trabalho com asteriscos. Um grande número de configurações no espectro do íon sob estudo assegura uma tolerância menor na variação desses valores indicados. Dessa forma, os parâmetros energéticos, agora otimizados, substituem seus correspondentes valores teóricos, e são usados novamente para o cálculo na diagonalização da matriz energia, sendo a solução da hamiltoniana multi-elétrons. O procedimento fornece dados de simulação atômica cujos valores estão bem próximos daqueles que devem ser conseguidos em observação experimental.

Outros dados de interesse, em pesquisas na astrofísica, ficam à disposição advindos do procedimento, como as intensidades de osciladores para cada transição, e os tempos de vida para cada nível de energia[24].

Cabe ressaltar que o formato das tabelas, é aquele há muito padronizado na Espectroscopia Atômica para apresentação e comparação de dados, onde devem constar, não somente os valores das linhas espectrais, mas sendo acompanhada de quais transições atômicas ela perfaz. Dessa forma, nas Tabelas 1 e 2 são mostrados os valores dos parâmetros energéticos otimizados para as paridades par e ímpar, respectivamente, e na Tabela 3 os comprimentos de onda como conseguidos pelo método empregado, e comparados aos experimentais existentes na literatura. Todos os dados disponíveis foram utilizados, inclusive advindos de buscas de trabalhos mais recentes para este íon.

Valores para os comprimentos de onda no vácuo foram convertidos para seus respectivos valores no ar atmosférico pela relação[25]  $\lambda_{\text{vácuo}} = n\lambda_{\text{ar}}$ , onde o índice de refração  $n$  do ar padrão (contendo 0.03% de  $CO_2$  por volume à pressão normal de 1 atm, e  $T = 15^\circ C$ ), sendo dado por

$$n = 1. + 8342.13 \times 10^{-8} + \frac{24406030}{130. \times 10^8 - \sigma^2} + \frac{15997.}{3.89 \times 10^8 - \sigma^2} \quad (5)$$

### 3. Conclusão

Transições no espectro do íon P XIII tem sido de particular importância, especialmente para uso na densa sequência espectral do nitrogênio na qual o fósforo é um elemento da sequência isoeletrônica ligando aqueles elementos aos mais leves, onde a análise espectral é mais abundante. Também se deve salientar que esse íon sendo da classe "helium-like" o caracteriza como útil nos estudos da física atômica, como testes da teoria de Dirac para átomos com carga nuclear mais elevada. Os parâmetros eletrostáticos conforme fornecidos neste trabalho, devem ser tratados como valores experimentais, e quando comparados aos que devem advir de trabalhos teóricos, tem grande importância para efeitos de comparação e comprovação de dados. O fósforo ocupa o décimo-quinto lugar com respeito a distribuição cósmica elementar[26].

### References

- [1] Moore, C. E. Atomic Energy Levels Volume 1. Published by Circular of the National Bureau of Standards (1949).
- [2] Kelly, R. L.; Palumbo, L. J. Atomic and Ionic Emission Lines Below 2000 Angstroms: Hydrogen Through Krypton. **NRL Report 7599** (June 1973).
- [3] Fawcett, B. Classification of Highly Ionized Emission Lines Due to Transitions from Singly and Doubly Excited Levels in Sodium, Magnesium, Aluminum, Silicon, Phosphorus, Sulphur, and Chlorine. *J Phys B* **3** (1970) 1152-1163.
- [4] Fawcett, B. C.; Hardcastle, R. A.; Tondello G. New Classifications of Emission Lines of Highly Ionized Phosphorus and Sulphur. *J Phys B* **3** (1970) 564-571.
- [5] Goldsmith, S.; Oren, L., Cohen, L. Spectra of P XII and P XIII in the Extreme Vacuum Ultraviolet. *J Opt Soc Am* **63** (1973) 352-358.
- [6] Kasyanov, Yu. S.; Konomov, E. Ya.; Korobkin, V. V.; Koshelev, K. N.; Serov, R. V. Intrashell Transitions in the spectra multicharged phosphorus ions. *Opt Spectrosc (URSS)* **35** (1973) 586-589.
- [7] Dere, K. P. Spectral lines observed in solar flares between 171 and 630 angstroms, *Astrophysics J* **221** (1978) 1062-1067.
- [8] Deschepper, P.; Lebrun P.; Palffy, L.; Pellegrin, P. Energy and Lifetime Measurements in Heliumlike and Lithium-like Phosphorus. *Phys Rev A* **26** (1982) 1271-1277.

- [9] Edlén, B. Comparison of Theoretical and Experimental Level Values if the  $n = 2$  Complex in Ions Isoelectronic with Li, Be, O and F. *Phys Scr* **28** (1983) 51-67.
- [10] Fawcett, B. C.; Ridgeley, A. Analysis of  $n=3$  to  $n=4$  spectra for ions from Mg X to Fe XXIV and P XI, XII. *J Phys B: At Mol Phys* **14** (1981) 203-208.
- [11] Aglitskii, E. V.; Boiko, V. A.; Zakharov, S. M.; Pikuz, S. A., Faenov, A. Ya. Observation in Laser Plasmas and Identification of Dielectron Satellites of Spectral Lines of Hydrogen- and Helium-like Ions of Elements in the Na-V Range. *Kvantovaya Elektronika (USSR)* **4** (1974) 908-936(Russ) [*Sov J Quantum Electron* **4** (1974) 500-513].
- [12] Boiko, V. A.; Faenov, A. Ya.; Pikuz, S. A. X-ray Spectroscopy of Multiply-Charged Ions from Laser Plasmas. *J Quant Spectrosc Radiat Transfer* **19** (1978) 11-50.
- [13] Vainshtein, L. A.; Safronova, U. I. Wavelengths and transition probabilities for ions. I ISAN Report (Troitsk, Russia) **N6** (1975) 1-68.
- [14] Vainshtein, L. A.; Safronova, U. I. Wavelengths and transition probabilities of satellites to resonance lines of Hand He-like ions. *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **Vol. 21 Issue 1** (1978) 49-68.
- [15] Wavelengths and transition probabilities for atoms and atomic ions - Part 1: Wavelengths - Part 2: Transition probabilities. 1980;NSRDS-NBS 68, Washington.
- [16] Reader, J.; Corlis, C. H. Line Spectra of the Elements in CRC Handbook of Chemistry and Physics. **63rd edition** (1982) R C Weast ed(Boca Raton FL CRC Press).
- [17] Martin, W. C.; Zalubas, R.; Musgrove, A. Energy levels of Phosphorus, P I Through P XV. *J Phys Chem Ref Data* **Vol. 14 No. 3** (1985) 796-797.
- [18] Hayes, R. W., Fawcett, B. C. The Spectrum of Phosphorus VI to XIII Between 22 and 92 . *Phys Scr* **34** (1986) 337-341.
- [19] Kelly, R. L. Atomic and Ionic Spectrum Lines Below 2000 Angstroms: Hydrogen Through Krypton. *J Phys Chem Ref Data* **16 Suppl. 1** (1987) 1-1698.
- [20] Cowan, R. D. The theory of atomic structure and spectra. Berkeley CA: University of California Press, 1981.
- [21] Slater, J. C. (1929). The Theory of Complex Spectra. **34** *Phys. Rev.* **34 (10)** (1929) 1293-1322.
- [22] Condon, E. U. The Theory of Complex Spectra. *Phys. Rev.* **36 (7)** (1930) 11211133.
- [23] Löwdin, Per-O. Quantum Theory of Many-Particle Systems. I. Physical Interpretations by Means of Density Matrices, Natural Spin-Orbitals, and Convergence Problems in the Method of Configurational Interaction. *Phys. Rev.* **97 (6)** (1955) 14741489.
- [24] Mania, A. J., Luna, F. R. T. Oscillator Strengths and Lifetimes for the P XIII Spectrum. *Spectral Analysis Reviews*, **4** (2016) 1-10. Published Online January 2016.
- [25] Owens, J. C. Optical refractive index of air: dependence on pressure, temperature and composition. *Appl Opt* **6** (1967) 51-9.
- [26] Aller, L. H. Distribution of the chemical elements, Moscow:Foreign Literature Press, 1963.

**Tabela 1. Parâmetros energéticos de Condon-Slater-Löwdin otimizados para as configurações pares do íon P XIII.**

Parâmetro	Valor ( $\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ )	Valores das interações energéticas $R^k$ entre configurações* ( $\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ ).	
$E_{AV}(1s^2 2s)$	0.2934	$1s^2 2s - 1s 2s^2$	$R(1s,1s) = 64.6300$
$E_{AV}(1s^2 3s)$	27.88.6580		$R(2s,2s) = 6.0210$
$E_{AV}(1s^2 3d)$	28.71.1736	$1s^2 3s - 1s 2s^2$	$R(1s,1s) = 10.6980$
$\zeta_{3d}$	0.3960	$1s^2 3d - 1s 2p^2$	$R(1s,1s) = 54.7290$
$E_{AV}(1s^2 4s)$	37.40.0436	$1s^2 3d - 1s 2p 3p$	$R(3d,3p) = 24.1410$
$E_{AV}(1s^2 4d)$	37.73.8169	$1s^2 3d - 1s 2p 4p$	$R(1s,1s) = 14.6450$
$\zeta_{4d}$	0.2000	$1s^2 4s - 1s 2s^2$	$R(1s,1s) = 6.9190$
$E_{AV}(1s^2 5s)$	4181.2989	$1s^2 4d - 1s 2p^2$	$R(1s,1s) = 35.4340$
$E_{AV}(1s^2 5d)$	4192.3087	$1s^2 4d - 1s 2p 3p$	$R(1s,1s) = 6.8130$
$\zeta_{5d}$	0.0001		$R(4d,3p) = 15.9130$
$E_{AV}(1s^2 5g)$	4199.3039	$1s^2 4d - 1s 2p 4p$	$R(4d,4p) = 9.6950$
$\zeta_{5g}$	s 0.0136	$1s^2 5s - 1s 2s^2$	$R(1s,1s) = 4.9260$
$E_{AV}(1s^2 6s)$	4415.6421	$1s^2 5d - 1s 2p^2$	$R(1s,1s) = 25.1710$
$E_{AV}(1s^2 6d)$	4419.3551		$R(5d,3p) = 11.3860$
$\zeta_{6d}$	0.0000	$1s^2 5d - 1s 2p 4p$	$R(1s,1s) = 0.9650$
$E_{AV}(1s^2 6g)$	4425.9950		$R(5d,4p) = 6.9490$
$\zeta_{6g}$	0.0080	$1s^2 6s - 1s 2s^2$	$R(1s,1s) = 3.7330$
$E_{AV}(1s^2 7s)$	4556.1987	$1s^2 6d - 1s 2p^2$	$R(1s,1s) = 19.0540$
$E_{AV}(1s^2 7d)$	4562.4076	$1s^2 6d - 1s 2p 3p$	$R(1s,1s) = 5.4720$
$\zeta_{7d}$	0.0296		$R(6d,3p) = 8.6510$
$E_{AV}(1s^2 8s)$	4647.0775	$1s^2 6d - 1s 2p 4p$	$R(1s,1s) = 1.5000$
$E_{AV}(1s^2 8d)$	4651.2256		$R(6d,4p) = 5.2850$
$\zeta_{8d}$	0.0196	$1s^2 7s - 1s 2s^2$	$R(1s,1s) = 2.9540$
$E_{AV}(1s 2s^2)$	17014.8129	$1s^2 7d - 1s 2p^2$	$R(1s,1s) (1s,1s) = 15.0700$
$E_{AV}(1s 2p^2)$	17327.4582	$1s^2 7d - 1s 2p 3p$	$R(1s,1s) (1s,1s) = 4.5490$
$F^2(2p,2p)$	258.0461		$R(7d,3p) = 6.8580$
$\alpha$	-1.1887	$1s^2 7d - 1s 2p 4p$	$R(1s,1s) (1s,1s) = 1.4780$
$\zeta_{2p}$	8.3257		$R(7d,4p) = 4.1910$
$G^1(1s,2p)$	130.9498	$1s^2 8s - 1s 2s 2$	$R(1s,1s) (1s,1s) = 2.4130$
$E_{AV}(1s 2p 3p)$	20104.1972	$1s^2 8d - 1s 2p^2$	$R(1s,1s) = 12.3070$
$\zeta_{2p}$	8.8262	$1s^2 8d - 1s 2p 3p$	$R(1s,1s) = 3.8240$
$\zeta_{3p}$	2.3702		$R(8d,3p) = 5.6080$
$F^1(2p,3p)$	-0.0339	$1s^2 8d - 1s 2p 4p$	$R(1s,1s) = 1.3440$
$F^2(2p,3p)$	67.5600		$R(8d,4p) = 3.4290$
$G^1(1s,2p)$	132.7684	$1s 2s^2 - 1s 2p^2$	$R(1s,1s) = 251.9250$
$G^1(1s,3p)$	32.8753	$1s 2s^2 - 1s 2p 3p$	$R(1s,1s) = 5.0200$
$G^0(2p,3p)$	27.2580	$1s 2p^2 - 1s 2p 3p$	$R(1s,1s) = 10.6790$
$G^1(2p,3p)$	-0.0326		$R(2p,2p) = 64.0600$
$G^2(2p,3p)$	29.7994		$R(2p,3p) = 10.3940$
$E_{AV}(1s 2p 4p)$	21049.7971	$1s 2p^2 - 1s 2p 4p$	$R(1s,1s) = 6.7720$
$\zeta_{2p}$	8.9024		$R(2p,2p) = 40.6210$
$\zeta_{4p}$	0.9861		$R(2p,4p) = 5.1700$
$F^1(2p,4p)$	-0.0194		$R(2p,4p) = 22.3210$
$F^2(2p,4p)$	25.3947	$1s 2p 3p - 1s 2p 4p$	$R(2p,2p) = 20.8900$
$G^1(1s,2p)$	133.6843		$R(3p,3p) = 31.7100$
$G^1(1s,4p)$	13.2912		$R(3p,4p) = 15.2390$
$G^0(2p,4p)$	8.7369		
$G^1(2p,4p)$	-0.0217		
$G^2(2p,4p)$	10.5081		

(\*) Valores dos parâmetros que se situam abaixo de  $0.0001 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$  foram omitidos.

**Tabela 2. Parâmetros energéticos de Condon-Slater-Löwdin otimizados para as configurações ímpares do íon P XIII.**

Parâmetro	Valor ( $\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ )	Valores das interações energéticas $R^k$ entre configurações* ( $\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ )	
$E_{AV}(1s^2 2p)$	216.0059	$1s^2 2p - 1s 2s 2p$	$R(1s, 1s) = 64.7870$
$\zeta_{2p}$	37.4840		$R(1s, 1s) = -17.2870$
$E_{AV}(1s^2 3p)$	2848.8314	$1s^2 2p - 1s 2s 3p$	$R(1s, 1s) = 9.5470$
$\zeta_{3p}$	2.2200		$R(1s, 1s) = -47.0100$
$E_{AV}(1s^2 4p)$	3764.5516	$1s^2 2p - 1s 2s 4p$	$R(1s, 1s) = 6.1310$
$\zeta_{4p}$	1.0200	$1s^2 3p - 1s 2s 2p$	$R(1s, 1s) = 9.9800$
$E_{AV}(1s^2 4f)$	377.4320		$R(1s, 1s) = -19.1510$
$\zeta_{4f}$	0.0400	$1s^2 3p - 1s 2s 3p$	$R(1s, 1s) = 65.4730$
$E_{AV}(1s^2 5p)$	4193.7683		$R(1s, 1s) = -1.4450$
$\zeta_{5p}$	0.4313		$R(1s, 1s) = -9.5390$
$E_{AV}(1s^2 5f)$	4199.0713	$1s^2 3p - 1s 2s 4p$	$R(1s, 1s) = 3.0410$
$\zeta_{5f}$	0.0291		$R(1s, 1s) = -5.9420$
$E_{AV}(1s^2 6p)$	4422.8000	$1s^2 4p - 1s 2s 2p$	$R(1s, 1s) = 6.4620$
$\zeta_{6p}$	0.2487		$R(1s, 1s) = -8.1800$
$E_{AV}(1s^2 6f)$	4425.8577	$1s^2 4p - 1s 2s 3p$	$R(1s, 1s) = 2.9970$
$\zeta_{6f}$	0.0169	$1s^2 4p - 1s 2s 4p$	$R(1s, 1s) = 65.6610$
$E_{AV}(1s^2 6h)$	4426.0386		$R(1s, 1s) = -0.4000$
$\zeta_{6h}$	0.0045		$R(1s, 1s) = -2.7100$
$E_{AV}(1s^2 7p)$	4560.6831	$1s^2 5p - 1s 2s 2p$	$R(1s, 1s) = 4.6030$
$\zeta_{7p}$	0.1560		$R(1s, 1s) = -4.6990$
$E_{AV}(1s^2 8p)$	4650.0710	$1s^2 5p - 1s 2s 3p$	$R(1s, 1s) = 2.1990$
$\zeta_{8p}$	0.1047		$R(1s, 1s) = -2.5570$
$E_{AV}(1s 2s 2p)$	17128.8145	$1s^2 5p - 1s 2s 4p$	$R(1s, 1s) = 1.2350$
$\zeta_{2p}$	8.0467		$R(1s, 1s) = -1.6220$
$G^0(1s, 2s)$	63.3627	$1s^2 6p - 1s 2s 2p$	$R(1s, 1s) = 3.4910$
$G^I(1s, 2p)$	135.3646		$R(1s, 1s) = -3.1400$
$G^I(2s, 2p)$	261.2526	$1s^2 6p - 1s 2s 3p$	$R(1s, 1s) = 1.6870$
$E_{AV}(1s 2s 3p)$	19975.3313		$R(1s, 1s) = -1.7470$
$\zeta_{3p}$	2.3989	$1s^2 6p - 1s 2s 4p$	$R(1s, 1s) = 0.9840$
$G^0(1s, 2s)$	61.9328		$R(1s, 1s) = -1.1130$
$G^I(1s, 3p)$	32.9620	$1s^2 7p - 1s 2s 2p$	$R(1s, 1s) = 2.7640$
$G^I(2p, 3p)$	217.420		$R(1s, 1s) = -2.2940$
$E_{AV}(1s 2s 4p)$	20925.0362	$1s^2 7p - 1s 2s 3p$	$R(1s, 1s) = 1.3440$
$\zeta_{4p}$	4.9988		$R(1s, 1s) = -1.2960$
$G^0(1s, 2s)$	62.4815	$1s^2 7p - 1s 2s 4p$	$R(1s, 1s) = 0.7950$
$G^I(1s, 4p)$	34.8626		$R(1s, 1s) = 0.8280$
$G^I(2s, 4p)$	3.3096	$1s^2 8p - 1s 2s 2p$	$R(1s, 1s) = 2.2590$
		$1s^2 8p - 1s 2s 3p$	$R(1s, 1s) = 1.1020$
			$R(1s, 1s) = -1.0140$
		$1s^2 8p - 1s 2s 4p$	$R(1s, 1s) = 0.6570$
			$R(1s, 1s) = -0.6490$
		$1s 2s 2p - 1s 2s 3p$	$R(1s, 1s) = 10.8330$
			$R(1s, 1s) = 64.9860$
			$R(1s, 1s) = 0.7950$
			$R(1s, 1s) = 4.0350$
		$1s 2s 2p - 1s 2s 4p$	$R(1s, 1s) = 6.8540$
			$R(1s, 1s) = 41.1090$
			$R(1s, 1s) = -0.9870$
			$R(1s, 1s) = -6.4150$
		$1s 2s 3p - 1s 2s 4p$	$R(1s, 1s) = 21.0410$
			$R(1s, 1s) = 11.9840$

(\*) Valores dos parâmetros que se situam abaixo de  $0.0001 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$  foram omitidos.

**Tabela 3. Comprimentos de onda no vácuo das linhas espectrais para o íon P XIII obtidas pelo método.**

Ref. [ ]	Configurações		Estados		Níveis de energia (cm <sup>-1</sup> )		Comprimento de onda (Å)		Int. *
	Par	Ímpar	Par	Ímpar	Par	Ímpar	Observada	Calculada	
11	1s <sup>2</sup> 2s	1s(1S)2s4p(3P)	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	0.	- 20886130.	4.788	- 4.7878	
11	1s 2s	1s(1S)2s4p(1P)	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	0.	- 20886620.	4.788	- 4.7879	
11	1s (1S)2p4p(1P)	1s 2p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	*21027320.	- 208204.	4.807	- 4.8033	
11	1s (1S)2p4p(1P)	1s 2p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	*21027320.	- 219430.	4.807	- 4.8059	
11	1s (1S)2p 4p (3P)	1s 2p	(1P)2D <sub>3/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	*21018640.	- 208204.	4.807	- 4.8053	
11	1s (1S)2p 4p (3P)	1s 2p	(1P)2D <sub>5/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	*21019240.	- 219430.	4.807	- 4.8077	
11	1s 2(1S)2s	1s(1S)2s3p(3P)	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	0.	- 19949895.	5.0126	- 5.0126	
11	1s <sup>2</sup> 2s	1s(1S)2s3p(1P)	(3P)2S <sub>1/2</sub>	4P <sub>3/2</sub>	0.	- 19921845.	5.0199	- 5.0196	
11	1s <sup>2</sup> 2s	1s(1S)2s3p(1P)	(3P)2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	0.	- 19920720.	5.0199	- 5.0199	
11	1s(1S)2p3p(1P)	1s <sup>2</sup> 2p	(1P)2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	*20040625.	- 208204.	5.0395	- 5.0422	
11	1s(1S)2p3p(1P)	1s <sup>2</sup> 2p	(1P)2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	*20040625.	- 219430.	5.0395	- 5.0451	
11	1s2p <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2p	2S <sub>1/2</sub>	P <sub>1/2</sub>	*17498570.	- 208204.	5.7836	- 5.7836	
11	1s2p <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	*17498570.	- 219430.	5.7874	- 5.7873	
11	1s <sup>2</sup> 2s	1s(1S)2s2p(1P)	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	0.	- 17264350.	5.7923	- 5.7923	
11	1s <sup>2</sup> 2s	1s(1S)2s2p(1P)	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	0.	- 17261115.	5.7933	- 5.7934	
11	1s <sup>2</sup> 2s	1s(1S)2s2p(3P)	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	0.	- 17191815.	5.8169	- 5.8168	
11	1s <sup>2</sup> 2s	1s(2S)2s2p(3P)	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	0.	- 17186895.	5.8185	- 5.8184	
11	1s2p <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2p	2P <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	17378605.	- 208204.	5.8230	- 5.8240	
11	1s2p <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2p	2P <sub>3/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	17388180.	- 219430.	5.8230	- 5.8245	
11	1s2p <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>3/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	17353875.	- 208204.	5.8323	- 5.8323	
11	1s2p <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>3/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	17353875.	- 219430.	5.8361	- 5.8361	
11	1s2p <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>5/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	17355065.	- 219430.	5.8365	- 5.8358	
11	1s2p <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2p	4P <sub>3/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	17251290.	- 208204.	5.8673	- 5.8675	
11	1s2p <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2p	4P <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	17246905.	- 208204.	5.8689	- 5.8689	
11	1s2p <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2p	4P <sub>5/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	17257990.	- 219430.	5.8692	- 5.8692	
11	1s2p <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2p	4P <sub>3/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	17251290.	- 219430.	5.8711	- 5.8713	
11	1s2p <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2p	4P <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	17246905.	- 219430.	5.8728	- 5.8729	
7; 11	1s <sup>2</sup> 2s	1s(2S)2s2p(3P)	2S <sub>1/2</sub>	4P <sub>3/2</sub>	0.	- 17028110.	5.8728	- 5.8726	
7; 11	1s <sup>2</sup> 2s	1s(2S)2s2p(3P)	2S <sub>1/2</sub>	4P <sub>1/2</sub>	0.	- 17024200.	5.8739	- 5.8740	
4; 5	1s <sup>2</sup> 8d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>5/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	4633565.	- 219430.	22.64; 678	- 22.6545	1
4; 5	1s <sup>2</sup> 7d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>5/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	4553085.	- 219430.	23.08; 075	- 23.0752	1
5	1s <sup>2</sup> 6d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>3/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	4419350.	- 208204.	23.75	- 23.7465	50
5	1s <sup>2</sup> 6d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>5/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	4419350.	- 219430.	23.810	- 23.8100	3
5	1s <sup>2</sup> 6d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>3/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	4419350.	- 219430.	23.810	- 23.8100	3
5	1s <sup>2</sup> 5d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>3/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	4192300.	- 208204.	25.103	- 25.0998	3
5	1s <sup>2</sup> 5s	1s <sup>2</sup> 2p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	4181300.	- 208204.	25.169	- 25.1693	4
5	1s <sup>2</sup> 5d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>5/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	4192300.	- 219430.	25.169	- 25.1707	4
5	1s <sup>2</sup> 5d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>3/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	4192300.	- 219430.	25.169	- 25.1707	4
5	1s <sup>2</sup> 2s	1s <sup>2</sup> 4p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	0.	- 3764550.	26.608	- 26.5636	5
5	1s <sup>2</sup> 2s	1s <sup>2</sup> 4p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	0.	- 3763020.	26.608	- 26.5744	5
5	1s <sup>2</sup> 4d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>3/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	3773500.	- 208204.	28.044	- 28.0482	6
5	1s <sup>2</sup> 4d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>5/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	3774000.	- 219430.	28.128	- 28.1328	6
16; 17	1s <sup>2</sup> 4d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>3/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	3773500.	- 219430.	28.128	- 28.1368	6
5	1s <sup>2</sup> 4s	1s <sup>2</sup> 2p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	3740040.	- 208204.	28.337	- 28.3139	2
5	1s <sup>2</sup> 4s	1s <sup>2</sup> 2p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	3740040.	- 219430.	28.337	- 28.4042	2
5	1s <sup>2</sup> 2s	1s <sup>2</sup> 3p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	0.	- 2849410.	35.095	- 35.0950	5
5	1s <sup>2</sup> 2s	1s <sup>2</sup> 3p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	0.	- 2846080.	35.136	- 35.1361	7
5	1s <sup>2</sup> 3d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>3/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	2870540.	- 208204.	37.561	- 37.5610	7
5	1s <sup>2</sup> 3d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>5/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	2871530.	- 219430.	37.706	- 37.7060	8
5	1s <sup>2</sup> 3d	1s <sup>2</sup> 2p	2D <sub>3/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	2870540.	- 219430.	37.723	- 37.7201	0
5	1s <sup>2</sup> 3s	1s <sup>2</sup> 2p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	2788650.	- 208204.	38.754	- 38.7530	3
5	1s <sup>2</sup> 3s	1s <sup>2</sup> 2p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	2788650.	- 219430.	38.921	- 38.9223	3
5	1s <sup>2</sup> 5d	1s <sup>2</sup> 3p	2D <sub>3/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	4192300.	- 2846080.	74.357	- <u>74.2820</u>	1
5	1s <sup>2</sup> 5d	1s <sup>2</sup> 3p	2D <sub>3/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	4192300.	- 2849410.		- 74.4662	
5	1s <sup>2</sup> 5d	1s <sup>2</sup> 3p	2D <sub>5/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	4192300.	- 2849410.	74.563	- 74.4662	2
15; 16	1s <sup>2</sup> 2s	1s <sup>2</sup> 2p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	0.	- 219430.	455.67 ; .73	- 455.7256	10
15; 16	1s <sup>2</sup> 2s	1s <sup>2</sup> 2p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	0.	- 208204.	480.42 ; .298	- 480.2973	
15; 16	1s <sup>2</sup> 3s	1s <sup>2</sup> 3p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>3/2</sub>	2788650.	- 2849410.	1645.8	- 1645.8343	
15; 16	1s <sup>2</sup> 3s	1s <sup>2</sup> 3p	2S <sub>1/2</sub>	2P <sub>1/2</sub>	2788650.	- 2846080.	1741.3	- 1741.2672	

**Table 3. Continuação. No ar atmosférico.**

15; 16	$1s^24s$ - $1s^24p$	$^2S_{1/2}$ - $^2P_{3/2}$	3740040. - 3764550.	4087. - 4079.096
15; 16	$1s^23d$ - $1s^23p$	$^2D_{5/2}$ - $^2P_{3/2}$	2871530. - 2849410.	4520. - 4519.470
15; 16	$1s^23d$ - $1s^23p$	$^2D_{3/2}$ - $^2P_{3/2}$	2870540. - 2849410.	4731. - 4731.222

\* Valores das intensidades das raias espectrais conforme observadas e classificadas em seu trabalho de origem.