UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

*Mozé Roberto de
Antonio
Rudolph
Ezequiel Luiz Caldeira
Mário Patti*

FORMALISMO SEMI-CLÁSSICO CONVERGENTE PARA O CÁLCULO DE
ALARGAMENTO E DESLOCAMENTO DE LINHAS ESPECTRAIS DE
ÁTOMOS NEUTROS EM PLASMAS

VILMA SIDNEIA WALDER

Tese apresentada ao Instituto
de Física da Universidade de
São Paulo para obtenção do títu-
lo de Doutor em Ciências

SBI-IFUSP

305M810T0594

São Paulo

1982

A meus pais,
Walter e Maria Aparecida.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer às pessoas que colaboraram durante a realização deste trabalho, especialmente ao:

Prof. Dr. Mauro S.D. Cattani pela orientação segura e amiga.

Prof. Dr. José Maria F. Bassalo da Universidade Federal do Pará que muito colaborou auxiliando-nos na obtenção de resultados numéricos.

E a todas as pessoas que anonimamente contribuíram indiretamente para este trabalho.

Este trabalho foi parcialmente financiado pelo Conselho Nacional de Pesquisa.

Í N D I C E

	Página
RESUMO.....	i
ABSTRACT.....	ii
INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO I - FORMALISMO SEMI-CLÁSSICO CONVERGENTE	
I.1 - Introdução.....	7
I.2 - Teoria geral de forma de linha espectral isolada..	9
I.3 - Cálculo da matriz de espalhamento S na forma convergente.....	20
I.4 - Cálculo do alargamento e deslocamento eletrônico..	29
I.5 - Equações para o cálculo de alargamento e deslocamento de linhas espectrais do hélio neutro.....	41
I.6 - Alargamento e deslocamento provocado pelos íons...	44
CAPÍTULO II - CÁLCULO E ANÁLISE DOS RESULTADOS	
II.1 - Introdução.....	50
II.2 - Cálculo de alargamento e deslocamento de linhas espectrais do hélio neutro.....	52
II.3 - "Screening" de Debye.....	58
II.4 - Influência da trajetória eletrônica no cálculo de alargamentos e deslocamentos.....	65
II.5 - Cálculo da contribuição devido aos íons no alargamento e deslocamento.....	76
II.6 - Tabela para o cálculo de alargamentos e deslocamentos de linhas espectrais do hélio neutro.....	83

	Página
II.7 - Perfil de linha isolada.....	92
II.8 - Comparação entre os resultados da teoria convergente e outros.....	97
CAPÍTULO III - CONCLUSÕES.....	114
APÊNDICE I.....	117
APÊNDICE II.....	122
REFERÊNCIAS.....	129

RESUMO

Neste trabalho o formalismo semi-clássico convergente sugerido por Cattani é desenvolvido para calcular o alargamento e deslocamento provocado por colisões eletrônicas de linhas espectrais de átomos neutros em plasmas.

Para testar o referido formalismo calculamos a largura e o deslocamento de muitas linhas espectrais do hélio neutro em plasmas com temperaturas que vão desde 5000 até 40000K e densidades eletrônicas que variam de 10^{-15} até 10^{-18} cm^{-3} .

Efeitos de "screening" de Debye e trajetória não retilínea dos elétrons são levados em conta no formalismo. Um estudo sobre a contribuição das colisões iônicas para o alargamento e deslocamento é realizado utilizando-se o mesmo tratamento convergente desenvolvido para elétrons e as aproximações quase estática de Griem e adiabática de Barnard, Cooper e Smith, e Griem, Baranger, Kolb e Oertel.

Os alargamentos e deslocamentos calculados são comparados com resultados experimentais obtidos por Wulff, Berg e colaboradores, Kelleher e Diatta e teóricos previstos por Griem e Sahal-Bréchet.

ABSTRACT

In this work the semiclassical convergent formalism suggested by Cattani is developed to calculate the broadening and shift of spectral lines produced by electronic collisions of neutral atoms in plasmas.

To test this theory we calculate the widths and shifts of many spectral lines of neutral helium in plasmas with temperatures that goes from 5000 up to 40000 K and electronic densities in the range of 10^{15} to 10^{18} cm^{-3} .

Effects of Debye screening and non straight line trajectory are taken into account in our approach. To study the ionic collisional contribution to the widths and shifts we use the same convergent treatment developed for electrons and the quasi-static approximation of Griem and adiabatic approximation of Barnard, Cooper and Smith, and Griem, Baranger, Kolb and Oertel.

The calculated widths and shifts are compared with experimental results obtained by Wulff, Berg and collaborators, Kelleher and Diatta and theoretical predictions of Griem and Sahal-Brchot.

INTRODUÇÃO

O alargamento e deslocamento de linhas espectrais emitidas (ou absorvidas) por átomos, moléculas e íons em plasmas, em determinadas condições de temperatura e densidade, são devidos essencialmente às colisões dos emissores (ou absorvedores) com elétrons e íons do referido plasma.

Se a densidade eletrônica do plasma for relativamente baixa, as linhas espectrais são isoladas. Quando a densidade aumenta aparecem as linhas proibidas e há, então, uma superposição das linhas permitidas, que eram isoladas, com as proibidas.

Como o nosso intuito é desenvolver e testar um formalismo sugerido para calcular alargamentos e deslocamentos de linhas espectrais devido às colisões eletrônicas, iremos somente estudar o caso mais simples que é o da linha isolada emitida por um átomo neutro.

Muitos trabalhos teóricos e experimentais foram realizados para estudar a forma de linhas espectrais isoladas em plasmas e diversos formalismos foram sugeridos para explicar o fenômeno.

Basicamente existem dois formalismos para o estudo de linhas espectrais: o quântico e o semi-clássico.

O formalismo quântico foi desenvolvido por diversos autores como Baranger^(1,2), Kolb e Griem⁽³⁾, Fano⁽⁴⁾ e Di Giacomo⁽⁵⁾ e tem sido aplicado no cálculo de alargamentos e deslocamentos de linhas espectrais atômicas e moleculares por Cattani^(6,7,8) e no cálculo de alargamentos e deslocamentos de linhas espectrais provocados por colisões eletrônicas por Kivel⁽⁹⁾, Belly e Griem⁽¹⁰⁾, Barnes e Peach⁽¹¹⁾, Bassalo e Cattani^(12,13,14,15) e Dimitrijevic et al⁽¹⁶⁾.

Em alguns trabalhos^(12,13,14,15) a matriz de espalhamento é calculada na aproximação de Born até segunda ordem. Entretanto sabe-se^(17,18) que a segunda ordem de Born não é válida, quando temos temperaturas de plasma relativamente baixas, para descrever as colisões inelásticas.

Como o alargamento eletrônico é provocado principalmente por colisões inelásticas ele não pode ser calculado satisfatoriamente com essa aproximação. Por outro lado bons resultados são obtidos para os deslocamentos, pois estes dependem essencialmente das colisões elásticas. Por exemplo, o formalismo de Bassalo e Cattani^(12,13,14) que usa essa aproximação obtém alargamentos que são cerca de duas vezes maiores que os valores experimentais. Por outro lado suas previsões para os deslocamentos concordam razoavelmente bem com os valores medidos.

Outros tratamentos quânticos mais elaborados^(10,11,16) utilizam a aproximação de "close-coupling", que leva a sistemas de equações integro-diferenciais acopladas, cuja solução depende de cálculos computacionais extensos e portanto dispendiosos.

O cálculo quântico pode prever valores muito bons para os alargamentos e deslocamentos quando são consideradas todas as transições virtuais envolvidas no processo. Em geral, o número dessas transições é grande e como a dificuldade de cálculo aumenta rapidamente com o número de estados envolvidos⁽¹⁶⁾ a sua utilização torna-se na maioria dos casos, impraticável.

Assim, acreditamos que os alargamentos e deslocamentos de linhas espectrais provocados por colisões eletrônicas podem ser obtidos de uma maneira mais simples, com uma precisão semelhante a dos cálculos mais sofisticados, usando os formalismos semi-clássicos com aproximações convenientes para estimar os efeitos das colisões fortes, para as quais a teoria de perturbações não é válida.

Existem essencialmente dois tipos de formalismos de impacto semi-clássicos para calcular o efeito das colisões eletrônicas: uma teoria de impacto com cortes e uma teoria convergente.

A teoria de corte foi adotada por muitos autores⁽¹⁸⁾ e foi extensivamente usada por Griem^(19,20), Griem et al⁽¹⁷⁾ e por Sahal-Bréchet^(20,21,22).

O formalismo convergente foi desenvolvido por Vainshtein e Sobel'man⁽²³⁾ na aproximação de dois níveis e aplicado com algumas modificações por Dyne e O'Mara⁽²⁴⁾ para calcular alargamentos e deslocamentos de algumas linhas do hélio neutro. Mas observamos que, de modo geral, é necessário considerar a aproximação de muitos níveis^(17,18,20), em vez de dois níveis⁽²⁴⁾.

Todos os cálculos feitos para sistemas de muitos níveis eram efetuados utilizando aproximações de cortes.

Cattani⁽²⁵⁾ desenvolveu para os casos de muitos níveis um formalismo convergente geral para obter os alargamentos e deslocamentos.

Nesse tratamento Cattani⁽²⁵⁾ utiliza as equações, que definem alargamentos e deslocamentos de uma linha espectral, contidos nos trabalhos de Baranger^(1,2) e Kolb e Griem⁽³⁾ e o cálculo da matriz de espalhamento desenvolvido por Murphy e Boggs⁽²⁶⁾ para obter equações gerais para os alargamentos e deslocamentos, em que os estados envolvidos na transição aparecem correlacionados.

No tratamento convergente de Murphy e Boggs eles erroneamente não consideraram as correlações dos estados inicial e final, sendo conseqüentemente não satisfatórias as previsões para os alargamentos e resultando em deslocamentos nulos.

O formalismo semi-clássico convergente foi aplicado por Yamamoto⁽²⁷⁾ e Yamamoto e Cattani^(28,29,30) para obtenção de alargamentos e deslocamentos de linhas emitidos devido a transições puramente rotacionais da molécula de amônia perturbada por gases inertes.

Esses trabalhos mostram que os valores calculados não são satisfatórios, apesar de serem melhores que aqueles obtidos por Murphy e Boggs⁽³¹⁾.

Cattani e Yamamoto⁽³²⁾ analisando o problema verificaram que o insucesso não se devia a inconsistências internas do formalismo convergente, mas sim a não adequação do mesmo e de outros formalismos convergentes ou de cortes para tratar a molécula de amônia.

O cálculo de alargamentos e deslocamentos de li-

nhas espectrais emitidos ou absorvidos por átomos e íons em um plasma em equilíbrio é um assunto ainda em aberto e diversas teorias foram desenvolvidas para estudar esse problema.

Como as previsões de cada uma delas apresentam discrepâncias em relação aos resultados experimentais resolvemos utilizar o formalismo convergente para esse tipo de cálculo.

Portanto, o presente trabalho tem como objetivo o desenvolvimento e verificação da validade do formalismo semi-clássico convergente proposto por Cattani⁽²⁴⁾.

Equações explícitas para o alargamento e deslocamento eletrônicos são obtidas e um estudo sobre o efeito de "screening" de Debye, trajetória dos perturbadores (elétrons) é feita, introduzindo as correções e devidas aproximações no formalismo, resultando em formas modificadas das equações iniciais.

Um estudo sobre a contribuição das colisões iônicas para o alargamento e deslocamento da linha espectral foi realizado, considerando o mesmo formalismo convergente utilizado para elétrons e outras aproximações, propostas na literatura^(20,34), sendo feita também uma análise das condições de aplicabilidade das mesmas.

Em particular, escolhemos o átomo de hélio neutro para a realização desse estudo, por ser o elemento de estrutura atômica mais simples, sem degenerescência dos níveis de energia e também por ser muito bem estudado teórica e experimentalmente.

O plasma a ser analisado é constituído de átomos neutros de hélio, elétrons e íons H_e^+ no intervalo de temperatura que vai de 5000 K a 40000 K e densidade eletrônica varian-

do entre 10^{15} cm^{-3} a 10^{17} cm^{-3} , onde as linhas espectrais podem ser consideradas isoladas.

Cálculo de perfil de linha considerando o íon nas aproximações quase estática de GBKO e adiabática de Barnard et al⁽³⁴⁾ foi realizado utilizando os alargamentos e deslocamentos eletrônicos obtidos na teoria convergente.

Uma tabela para 42 linhas do hélio neutro foi elaborada, contendo os alargamentos e deslocamentos eletrônicos e parâmetros Stark A e R calculados pela teoria convergente, para as temperaturas 5000 K, 10000 K, 20000 K e 40000 K e densidade eletrônica 10^{16} cm^{-3} . Esta tabela é semelhante aquela existente na literatura⁽¹⁹⁾ calculada pela teoria semi-clássica de corte desenvolvida por GBKO⁽¹⁷⁾ e permite a obtenção de alargamentos e deslocamentos de linhas isoladas no intervalo de temperatura entre 5000 K e 40000 K e qualquer densidade eletrônica.

Finalmente, os resultados são comparados com resultados experimentais obtidos por diversos autores^(35,36,37,38) e resultados teóricos calculados por Griem⁽¹⁹⁾ e Sahal-Bréchet^(20,21).

CAPÍTULO I

FORMALISMO SEMI-CLÁSSICO CONVERGENTE

I.1. INTRODUÇÃO

O alargamento e deslocamento de linhas espectrais emitidas (ou absorvidas) por átomos neutros e íons em plasmas são causados por numerosos processos^(19,24).

Nossos estudos limitam-se a plasmas localmente homogêneos e em equilíbrio termodinâmico e temos sempre em vista a análise de linhas espectrais isoladas do hélio neutro. Nesse caso podemos descrever o plasma como constituído de átomos neutros e íons de hélio e elétrons.

Para as condições de temperatura e pressão do plasma e para as transições que consideramos nesse trabalho, os alargamentos e deslocamentos das linhas são provocados principalmente por colisões e pelo efeito Doppler, sendo esse último processo cerca de uma dezena de vezes menos importante que o primeiro.

A forma da linha devido ao efeito Doppler é descrito por uma gaussiana⁽²⁴⁾ dada por

$$F_D = (\pi^{1/2} \omega_D)^{-1} \exp -(\omega - \omega_0)^2 / \omega_D^2$$

onde a largura Doppler da linha é $\omega_D = \omega_0 v/c$ sendo ω_0 e v , respectivamente a frequência da linha e a velocidade média das partículas emissoras.

O efeito provocado pelas colisões pode ser calculado quântica ou semi-classicamente, resultando em uma forma de linha $F(\omega)$ que contém todas as contribuições dos diferentes perturbadores constituintes do plasma.

A forma de linha observada $I(\omega)$ é, então, calculada como a convolução das curvas obtidas para cada um dos efeitos individualmente, isto é

$$I(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} F_D(\omega) F(\omega - \omega') d\omega'$$

Muitos resultados experimentais foram obtidos em diversos tipos de plasmas e simultaneamente diversas teorias foram desenvolvidas para explicar a contribuição das colisões na forma das linhas observadas.

Para densidades eletrônicas relativamente baixas as linhas observadas resultam de transições que obedecem as regras usuais que se verificam em átomos não submetidos a perturbações externas. Nessas condições as linhas observadas são isoladas e são denominadas permitidas. Quando a densidade de íons do plasma se torna relativamente alta, a perturbação iônica po-

de induzir transições que, nas condições anteriores, não eram permitidas. Estas novas transições são denominadas proibidas^(19,24,34).

Assim, ao lado de uma linha permitida pode surgir uma proibida ocorrendo a superposição das duas linhas.

O estudo da forma de linha neste último caso requer uma abordagem diferente daquela que é usada no caso das linhas isoladas.

Griem^(17,19) e Barnard⁽³⁴⁾, por exemplo, desenvolveram formalismos para tratar dos dois casos.

No presente trabalho utilizaremos uma teoria semi-clássica convergente apenas para estudar linhas isoladas.

Nos próximos parágrafos mostramos o formalismo geral para obtenção da forma de linhas espectrais em plasmas e as hipóteses feitas nesse formalismo, que dão origem à teoria semi-clássica convergente, objeto principal de estudo do nosso trabalho.

I.2. TEORIA GERAL DE FORMA DE LINHA ESPECTRAL ISOLADA

Nesse parágrafo estudamos a forma de linha isolada originada pelas colisões dos perturbadores com o emissor no plasma.

A forma de linha espectral $F(\omega)$ é calculada por meio da transformada de Fourier da função de correlação temporal de dipolo $\phi(t)$, usando a equação⁽²⁾

$$F(\omega) = \text{Re} \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} e^{i\omega t} \phi(t) dt .$$

Designando os estados inicial e final por ψ_I e ψ_F respectivamente da linha isolada $I \rightarrow F$, a função de correlação $\phi(t)$ é dada por⁽²⁾

$$\phi(t) = \rho_I \left[\langle \psi_I(0) | \vec{d} | \psi_F(0) \rangle \cdot \langle \psi_F(t) | \vec{d} | \psi_I(t) \rangle \right]_{Av}$$

onde ρ_I é a matriz densidade para o estado inicial, $\vec{d}$ o operador momento de dipolo elétrico que define a interação da onda eletromagnética emitida com o emissor, t o intervalo de tempo da correlação e $[]_{Av}$ indica que deve ser feita a média sobre os estados internos dos perturbadores, média sobre os estados translacionais dos emissores e perturbadores e média sobre as orientações relativas entre os sistemas emissores e perturbadores.

A evolução temporal do sistema é descrito pelo operador unitário $T(t)$, que transforma a função de onda de acordo com a relação

$$T(t) |\psi(0)\rangle = |\psi(t)\rangle$$

Se introduzirmos o operador evolução na função de correlação temporal, podemos escrevê-la como

$$\phi_{IF}(t) = \rho_I |\langle \psi_F | \vec{d} | \psi_I \rangle|^2 \left[\langle \psi_F | T^\dagger(t) | \psi_F \rangle \cdot \langle \psi_I | T(t) | \psi_I \rangle \right]_{Av}$$

O operador hamiltoniano do sistema átomos neutros (emissores), íons e elétrons representamos por

$$H = H_0 + V_e(t) + V_i(t)$$

onde H_0 é o hamiltoniano do sistema na ausência de perturbadores, $V_e(t)$ e $V_i(t)$ são, respectivamente, as interações dependentes do tempo do emissor com todos os elêtrons e íons do plasma.

A interação entre os átomos neutros não é levada em conta porque é desprezível comparada com $V_e(t)$ e $V_i(t)$.

O operador evolução temporal $T(t)$ obedece a equação diferencial

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} T(t) = [H_0 + V_e(t) + V_i(t)] T(t) .$$

Vamos agora definir o operador $T(t)$, que leva em conta as perturbações eletrônica e iônica, como um produto de operadores $U_e(t)$ e $U_i(t)$, ou seja,

$$T(t) = U_e(t) U_i(t)$$

e substituindo-o na equação diferencial acima resulta, consequentemente, nas equações diferenciais para $U_e(t)$ e $U_i(t)$ abaixo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_i(t) = [H_0 + V_i(t)] U_i(t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_e(t) = U_i^\dagger(t) V_e(t) U_e(t) .$$

Como os elêtrons se movem com velocidade muito maiores do que a dos íons, estes podem ser considerados parados durante cada colisão elêtron-emissor. Devido a isso consideramos

em nossos cálculos os íons estáticos^(17,19), isto é, poremos $V_i(t) = V_i$. Dessa forma o operador $U_i(t)$ fica escrito de modo muito mais simples

$$U_i(t) = \exp - \frac{i}{\hbar} [H_0 + V_i] t .$$

O efeito provocado pelos íons na dinâmica dos elétrons está contido no pequeno deslocamento ΔE do nível, que eles produzem, mas como $\tau_c \Delta E \ll 1$ (onde τ_c é o tempo de colisão elétron-emissor) e ΔE é pequeno comparado com o espaçamento entre os níveis, podemos desprezar esse efeito, isto é, $H_0 + V_i = H_0$.

Assim a equação diferencial acima para o operador $U_e(t)$ pode ser aproximada para

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_e(t) = V_e^*(t) U_e(t) \quad (1.2-1)$$

onde $V_e^*(t) = \exp \frac{i}{\hbar} H_0 t V_e(t) \exp - \frac{i}{\hbar} H_0 t$.

Esta aproximação permite que os efeitos de colisões eletrônicas e iônicas sejam desacopladas e estudadas separadamente, como passamos a fazê-lo.

Assim, temos para a função de correlação

$$\phi_{IF}(t) = \rho_I |\langle \psi_F | \vec{d} | \psi_I \rangle|^2 \left[\langle \psi_F | U_e^+(t) U_i^+(t) | \psi_F \rangle \cdot \langle \psi_I | U_e(t) U_i(t) | \psi_I \rangle \right]_{Av}$$

que se torna, introduzindo os projetores $\sum_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m|$ e $\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$

$$\phi_{IF}(t) = \rho_I |\langle \psi_F | \vec{d} | \psi_I \rangle|^2 \sum_{mn} \left[\langle \psi_F | U_e^+(t) | \psi_m \rangle \langle \psi_m | U_i^+(t) | \psi_F \rangle \cdot \right. \\ \left. \cdot \langle \psi_I | U_e(t) | \psi_n \rangle \langle \psi_n | U_i(t) | \psi_I \rangle \right]_{Av}$$

e a média indicada pode ser feita separadamente para os elétrons e íons como indicamos abaixo

$$\phi_{IF}(t) = \rho_I |\langle \psi_F | \vec{d} | \psi_I \rangle|^2 \sum_{mn} \left[\langle \psi_F | U_e^+(t) | \psi_m \rangle \langle \psi_n | U_e(t) | \psi_I \rangle \right]_{Av}^{\text{elétrons}} \cdot \\ \cdot \left[\langle \psi_m | U_i^+(t) | \psi_F \rangle \langle \psi_I | U_i(t) | \psi_n \rangle \right]_{Av}^{\text{íons}}$$

Para calcular as médias indicadas acima precisamos definir como são as perturbações geradas pelos elétrons e íons.

Como dissemos acima os íons são considerados estáticos durante as colisões eletrônicas. Assim podemos dizer⁽¹⁷⁾ que as colisões eletrônicas ocorrem na presença de um campo elétrico estático $\vec{F}$ criado instantaneamente pelos íons, dado pela distribuição de Holtsmark $W(F)$ ⁽²⁴⁾, sendo esta aproximação chamada quase estática.

As funções de onda ψ_n do sistema são auto funções do operador H_0 , com auto valores E_n^0 , isto é:

$$H_0 |\psi_n\rangle = E_n^0 |\psi_n\rangle \quad .$$

Admitindo que o campo elétrico estático $\vec{F}$ provoca no emissor um efeito Stark de segunda ordem, temos

$$U_i(t)|\psi_n\rangle \cong e^{\frac{i}{\hbar} E_n^0 t - \frac{i}{\hbar} \alpha_n F^2 t} \left[|\psi_n\rangle + \sum_{j \neq n} |\psi_j\rangle \langle \psi_j | V_i | \psi_n \rangle + \dots \right]$$

que dá, portanto

$$\langle \psi_I | U_i(t) | \psi_n \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} E_I^0 t - \frac{i}{\hbar} \alpha_I F^2 t} \delta_{In}$$

Assim o termo correspondente a perturbação iônica fica

$$\left[\langle \psi_m | U_i^+(t) | \psi_F \rangle \langle \psi_I | U_i(t) | \psi_n \rangle \right]_{Av}^{\text{ions}} = e^{-i w_{IF} t} \left[e^{\frac{i}{\hbar} (\alpha_I - \alpha_F) F^2 t} \delta_{In} \delta_{mF} \right]_{Av}^{\text{ions}}$$

onde $w_{IF} = (E_F^0 - E_I^0)/\hbar$ e, conseqüentemente, a função de correlação se reduz a

$$\begin{aligned} \phi_{IF}(t) &= \rho_I |\langle \psi_F | \vec{d} | \psi_I \rangle|^2 \left[\langle \psi_F | U_e^+(t) | \psi_F \rangle \langle \psi_I | U_e(t) | \psi_I \rangle \right]_{Av}^{\text{elétrons}} \times \\ &\times e^{-i w_{IF} t} \left[e^{\frac{i}{\hbar} (\alpha_I - \alpha_F) F^2 t} \right]_{Av}^{\text{ions}} \end{aligned} \quad (I.2-2)$$

A contribuição das colisões eletrônicas na função de correlação pode ser calculada a partir da equação diferencial (I.2-1) para o operador $U_e(t)$. Dessa equação temos que $U_e(t)$ é dado por

$$U_e(t) = \tau \exp \left[- \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_e^*(t') dt' \right]$$

sendo τ operador ordenação temporal. A perturbação criada pe

las colisões entre os elétrons e o emissor está contida no operador $V_e^*(t)$, sendo que as colisões devem ser consideradas na ordem em que ocorrem.

O problema da ordenação temporal das colisões é extremamente complicado, pois devido ao longo alcance das forças eletromagnéticas, o emissor está interagindo, num mesmo instante t , com muitos perturbadores e, além disso, a perturbação criada por uma colisão num instante $t + \Delta t$ encontra o emissor perturbado pela colisão ocorrida no instante t , o que gera um efeito cumulativo das colisões. Além disso devemos considerar as interações entre os perturbadores.

Para resolver esse problema Baranger^(1,2) introduz duas aproximações: na primeira os perturbadores são considerados estatisticamente independentes, isto é, não existe correlação entre eles e a segunda supõe válida a aproximação de impacto.

A aproximação de impacto permite resolver o problema da ordenação temporal das colisões e constitui a hipótese fundamental da teoria geral de forma de linha espectral.

Aproximação de impacto e condições de validade

Fundamentalmente a aproximação de impacto consiste em supor que duas ou mais colisões fortes não ocorrem simultaneamente e que o intervalo de tempo entre duas colisões fortes é muito maior que o tempo de colisão τ_c .

Esta hipótese leva à conclusão de que a interação média entre o emissor e perturbadores é fraca.

A aproximação de impacto é válida quando estive-

rem satisfeitas as condições acima, o que quer dizer que o alargamento ω_e e o deslocamento S_e provocados pelas colisões com um dado perturbador, geralmente elétrons, devem ser menores que o inverso do tempo de colisão. Como ω_e e S_e são da mesma ordem de grandeza podemos escrever que

$$\omega_e \ll \tau_c^{-1} \quad ; \quad \tau_c \equiv \frac{\rho_m}{v} \quad \text{e} \quad \sigma^* = \frac{\omega_e \rho_m}{v} \ll 1 \quad (1.2-3)$$

onde ρ_m é a distância média entre os emissores e v a velocidade do perturbador.

Baranger^(1,2) mostra que como consequência dessas aproximações a interação dependente do tempo entre os elétrons e o emissor pode ser substituída por uma interação efetiva constante representada pelo operador não hermiteano $\mathcal{H}_{IF}$, calculado a partir dos elementos de matriz S_{II} e S_{FF} da matriz de espalhamento S dos estados inicial e final.

Ou seja,

$$\left[\langle \psi_F | U_e^+(t) | \psi_F \rangle \langle \psi_I | U_e(t) | \psi_I \rangle \right]_{Av} \cong e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_{IF} t} = e^{-(\omega_e + i S_e) t} \quad (1.2-4)$$

onde

$$\mathcal{H}_{IF} = -i \left[1 - S_{II} S_{FF}^+ \right]_{Av}, \quad S_{kk} = \langle \psi_k | S | \psi_k \rangle$$

($k = I$ ou F) são os elementos diagonais da matriz S de espalhamento entre o elétron e o emissor. A semi-largura ω_e e o deslocamento S_e , devido às colisões eletrônicas são dados por:

$$\omega_e = - \operatorname{Im} \mathcal{G}_{IF} \quad (\text{I.2-5})$$

$$S_e = R_e \mathcal{G}_{IF} \quad (\text{I.2-6})$$

Escrevendo explicitamente a média $[1 - S_{II} S_{FF}^+]_{av}$ para um perturbador qualquer, temos:

$$\mathcal{G}_{IF} = -i 2\pi N \int_0^\infty db b \int_0^\infty dv v F(v) \sum_n \rho_n \langle n | (1 - S_{II} S_{FF}^+) | n \rangle \quad (\text{I.2-7})$$

onde N é a densidade de perturbadores, b o parâmetro de impacto da colisão, v a velocidade relativa entre emissor e perturbador, $F(v)$ é a distribuição de velocidades de Maxwell - Boltzmann, $|n\rangle$ os estados internos dos perturbadores e ρ_n a probabilidade de encontrar um perturbador no estado $|n\rangle$.

Uma análise da equação (I.2-7) mostra que existe uma correlação entre os estados final e inicial dos perturbadores, pois

$$\langle n | S_{II} S_{FF}^+ | n \rangle = \sum_{n'} \langle n | S_{II} | n' \rangle \langle n' | S_{FF}^+ | n \rangle$$

Quando não há mudança do estado do perturbador durante a colisão, o que corresponde a considerar apenas $n = n'$, mostramos no parágrafo seguinte (I.3) que a matriz de espalhamento S pode ser escrita na forma exponencial, definindo o que denominamos de formalismo semi-clássico convergente.

No caso em que há mudança de estado dos perturbadores todos os termos $n \neq n'$ devem ser levados em conta e, conseqüentemente, a matriz de espalhamento não pode ser calculada na forma exponencial, sendo necessário utilizar o tratamento de

Anderson⁽³⁹⁾.

Como os perturbadores no nosso caso são os elétrons e portanto não possuem estados internos, podemos escrever $\mathcal{H}_{IF}$ como:

$$\mathcal{H}_{IF} = -i 2\pi N \int_0^\infty dbb \int_0^\infty dvvF(v) [1 - S_{II} S_{FF}^+] \quad (I.2-8)$$

Agora podemos voltar a equação (I.2-2) para a função de correlação $\phi_{IF}(t)$ e calcular o termo correspondente às colisões eletrônicas.

Então, substituindo a equação (I.2-4) na equação (I.2-2) de $\phi_{IF}(t)$ e fazendo a média sobre a contribuição iônica, temos:

$$\phi_{IF}(t) = |\langle \psi_F | \vec{d} | \psi_I \rangle|^2 \int_0^\infty w(F) dF \int_0^\infty dt' e^{-i(w_{IF} - i\omega_e + S_e + \frac{2\pi}{e^2} C_4 F^2)t'} \quad (I.2-9)$$

Finalmente podemos calcular a forma da linha, que leva em conta os efeitos dos íons e elétrons, resultando em

$$F(w) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^\infty dt e^{iwt} \int_0^\infty w(F) dF e^{-i(w_{IF} - i\omega_e + S_e + \frac{2\pi}{e^2} C_4 F^2)t}$$

onde foi usada a notação de GBK⁽¹⁷⁾, quando escrevemos $\alpha_I - \alpha_F = \frac{2\pi}{e^4} C_4$, sendo C_4 o parâmetro Stark quadrático.

Portanto, integrando no tempo a equação acima, temos:

$$F(w) = \frac{\omega_e}{\pi} \int_0^\infty \frac{w(F) dF}{\omega_e^2 + \left[w - w_{IF} - S_e - \frac{2\pi}{e^2} C_4 F^2 \right]^2} \quad (I.2-10)$$

Novamente introduzindo a notação adotada por GBKO⁽¹⁷⁾, obtemos a forma reduzida da linha $j(x, \alpha)$ em unidades adimensionais

$$j(x, \alpha) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{w_H(\beta) d\beta}{1 + (x - \alpha^{4/3} \beta^2)^2} \quad (I.2-11)$$

onde

$$x = \frac{w - w_{IF} - S_e}{\omega_e}$$

$$\alpha = \left(\frac{2\pi C_4}{\omega_e \rho_m} \right)^{1/4}$$

$$\rho_m = \left(\frac{3}{4\pi N} \right)^{1/3}$$

$$e \quad w_H(\beta) = w_H(F/F_0) \quad , \quad F_0 = 2.61 \quad e \quad N^{2/3} .$$

O alargamento ω_e e o deslocamento S_e eletrônicos dados pelas equações (I.2-5) e (I.2-6) dependem do operador $\mathcal{H}_{IF}$ que por sua vez é calculado a partir dos elementos de matriz S_{II} e S_{FF}^+ , que passamos a calcular no próximo parágrafo.

Outras equações para o alargamento e deslocamento devido às colisões iônicas, são discutidas e mostradas no parágrafo (I.6), além desta exposta.

I.3. CÁLCULO DA MATRIZ DE ESPALHAMENTO S NA FORMA CONVERGENTE

Nesse parágrafo mostramos como calcular o elemento da matriz $\langle n|S|n \rangle$ da matriz de espalhamento S e como esta pode ser escrita na forma convergente.

Como o hamiltoniano do emissor é dado por $H=H_0+V(t)$, podemos obter a evolução temporal do sistema utilizando o operador unitário $T(t)$ na representação de Heisenberg.

$$T(t) = U_0^{-1} U$$

sendo

$$U_0 = e^{-i \frac{H_0}{\hbar} t} \quad e \quad U = e^{-i \frac{H}{\hbar} t}$$

A matriz densidade não perturbada $\rho(-\infty)$, em presença da perturbação $V(t)$ evolue no tempo segundo a equação

$$\rho(t) = e^{-i \frac{H_0}{\hbar} t} T(t) \rho(-\infty) T^{-1}(t) e^{i \frac{H_0}{\hbar} t}$$

O operador $T(t)$ satisfaz a equação diferencial

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} T(t) = e^{i \frac{H_0}{\hbar} t} V(t) e^{-i \frac{H_0}{\hbar} t} T(t)$$

com a condição inicial $T(-\infty) = I$, sendo I a matriz unitária.

No instante inicial ($t = -\infty$) o emissor está no estado n e não sofre interação, portanto $V(-\infty) = 0$.

Nesse caso a matriz densidade $\bar{\rho}$ é escrita como

$$\rho_{nn}(-\infty) = 1 \quad \text{e} \quad \rho_{mn}(-\infty) = 0 \quad \text{para} \quad m \neq n.$$

A probabilidade do emissor estar no estado n a pós a colisão ($t = \infty$) é proporcional a matriz densidade $\rho_{nn}(+\infty)$, dada por:

$$\rho_{nn}(+\infty) = \langle n | \rho(+\infty) | n \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle n | \rho(t) | n \rangle.$$

Substituindo $\rho(t)$ temos:

$$\begin{aligned} \rho_{nn}(+\infty) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \langle n | e^{-i \frac{H_0}{\hbar} t} T(t) \rho(-\infty) T^{-1}(t) e^{i \frac{H_0}{\hbar} t} | n \rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{\ell, m} \langle n | T(t) | \ell \rangle \langle \ell | \rho(-\infty) | m \rangle \langle m | T^{-1}(t) | n \rangle \end{aligned}$$

mas

$$\langle \ell | \rho(-\infty) | m \rangle = 1 \quad \text{se} \quad \ell = m$$

$$\langle \ell | \rho(-\infty) | m \rangle = 0 \quad \text{se} \quad \ell \neq m$$

Portanto

$$\rho_{nn}(+\infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_m \langle n | T(t) | m \rangle \langle m | T^{-1}(t) | n \rangle.$$

Se quisermos apenas o termo $n = m$ temos

$$\rho_{nn}(+\infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle n | I(t) | n \rangle \langle n | T^{-1}(t) | n \rangle =$$

$$\begin{aligned}
 &= \langle n | T(+\infty) | n \rangle \langle n | T^{-1}(+\infty) | n \rangle \\
 &= |T_{nn}(+\infty)|^2 .
 \end{aligned}$$

A probabilidade de ocorrer transição fora dessa é portanto P_n

$$P_n = 1 - |T_{nn}(+\infty)|^2 .$$

Portanto a probabilidade de transição é dado em função do módulo ao quadrado do elemento diagonal do operador e evolução temporal, cujos elementos de matriz estão relacionados com a matriz de espalhamento $S(t)$ por meio da equação⁽⁴⁰⁾

$$T_{mn}(t) = S_{mn}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_{mn}(t')} . \quad (I.3-1)$$

Os elementos de matriz do operador $T(t)$ satisfazem a equação diferencial

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} T_{mn}(t) = \langle m | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} T(t) | n \rangle = \sum_k \langle m | e^{i \frac{H_0}{\hbar} t} V(t) e^{-i \frac{H_0}{\hbar} t} | k \rangle \langle k | T(t) | n \rangle$$

ou seja

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{mn}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_k V_{mk}(t) T_{kn}(t) e^{i\omega_{mk}t} \quad (I.3-2)$$

onde

$$V_{mk}(t) = \langle m | V(t) | k \rangle$$

$$T_{kn}(t) = \langle k | T(t) | n \rangle$$

$$\omega_{mk} = (E_m - E_k) / \hbar$$

A partir da equação (I.3-1) podemos verificar que

$$|T_{mn}|^2 = |S_{mn}|^2$$

Portanto a probabilidade de transição será dada em função da matriz de espalhamento e a partir da equação (I.3-1) temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} T_{mn}(t) &= \frac{\partial}{\partial t} S_{mn}(t) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_{mm}(t') \right] - \\ &- \frac{i}{\hbar} V_{mm}(t) S_{mn}(t) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_{mm}(t') \right] \quad (I.3-3) \end{aligned}$$

Substituindo (I.3-3) em (I.3-2) temos para um elemento de matriz qualquer S_{mn} a equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} S_{mn}(t) = \frac{i}{\hbar} V_{mm}(t) S_{mn}(t) - \frac{i}{\hbar} \sum_k V_{mk}(t) S_{kn} \exp \left[i \omega_{mk} t + i \eta_{mk}(t) \right] \quad (I.3-4)$$

onde achamos

$$\eta_{km}(t) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \left[V_{mm}(t') - V_{kk}(t') \right]$$

O elemento de matriz diagonal $S_{nn}(t)$ obedece a equação diferencial

$$\frac{\partial}{\partial t} S_{nn}(t) = \frac{i}{\hbar} V_{nn}(t) S_{nn}(t) - \frac{i}{\hbar} \sum_k V_{nk}(t) S_{kn}(t) \exp \left[i\omega_{nk} + i\eta_{nk}(t) \right]$$

mas

$$\begin{aligned} \sum_k V_{nk}(t) S_{kn}(t) \exp \left[i\omega_{nk} t + i\eta_{nk}(t) \right] &= V_{nn}(t) S_{nn}(t) \exp \left[i\omega_{nn}(t) + i\eta_{nn}(t) \right] \\ &+ \sum_k' V_{nk}(t) S_{kn}(t) \exp \left[i\omega_{nk} t + i\eta_{nk}(t) \right] \end{aligned}$$

onde o símbolo $\sum_k'$ indica a soma sobre todos os possíveis valores de k exceto $k=n$ e como $\exp \left[i\omega_{nn} t + i\eta_{nn}(t) \right] = 1$ segue que a equação (1.3-4) para o elemento de matriz diagonal fica:

$$\frac{\partial}{\partial t} S_{nn}(t) = - \frac{i}{\hbar} \sum_k' V_{nk}^*(t) S_{kn}(t) \quad (1.3-5)$$

onde
$$V_{nk}^*(t) = V_{nk}(t) \exp \left[i\omega_{nk} + i\eta_{nk}(t) \right] .$$

Para resolver essa equação precisamos conhecer o elemento de matriz não diagonal $S_{kn}(t)$ da matriz de espalhamento que é obtido por meio da equação (1.3-4)

$$\frac{\partial}{\partial t} S_{kn}(t) = - \frac{i}{\hbar} V_{kn}^*(t) S_{nn}(t) - \frac{i}{\hbar} \sum_{m \neq k} V_{km}^*(t) S_{mn}(t) .$$

Integrando essa equação temos:

$$S_{kn}(t) = - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 V_{kn}^*(t_1) S_{nn}(t_1) - \frac{i}{\hbar} \sum_{m \neq k}' \int_{-\infty}^t dt_1 V_{km}^*(t_1) S_{mn}(t_1) .$$

Substituindo na equação (1.3-5) temos para o ele

mento diagonal

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} S_{nn}(t) = & - \frac{1}{\hbar^2} \sum_k' \int_{-\infty}^t dt_1 V_{nk}^*(t_1) V_{kn}^*(t_1) S_{nn}(t_1) - \\ & - \frac{1}{\hbar^2} \sum_k' \sum_{m \neq k}' \int_{-\infty}^t dt_1 V_{nk}^*(t) V_{km}^*(t_1) S_{mn}(t_1) \quad . \end{aligned}$$

Substituindo continuamente o elemento não diagonal na equação diferencial para $S_{nn}(t)$ obteremos $\frac{\partial}{\partial t} S_{nn}(t)$ como uma série de potência de $(i\hbar)^{-1}$ que contém apenas o elemento diagonal. Assim⁽²⁷⁾

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} S_{nn}(t) = & - \frac{1}{\hbar^2} \sum_k' \int_{-\infty}^t dt_1 V_{nk}^*(t) V_{kn}^*(t_1) S_{nn}(t_1) + \\ & + \frac{i}{\hbar^3} \sum_k' \sum_{m \neq k}' \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 V_{nk}^*(t) V_{km}^*(t_1) V_{mn}^*(t_2) S_{nn}(t_2) + \dots \end{aligned}$$

Usando a relação

$$S_{nn}(t_1) = S_{nn}(t) + \int_t^{t_1} dt' \frac{\partial}{\partial t} S_{nn}(t')$$

na equação acima temos:

$$S_{nn}(t_1) = S_{nn}(t) + \frac{1}{\hbar^2} \sum_k' \int_{t_1}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt_1' V_{nk}^*(t') V_{kn}^*(t_1') S_{nn}(t_1') + \dots$$

Desenvolvendo continuamente essas equações colocando $\frac{\partial}{\partial t} S_{nn}(t)$ escrito em função apenas de $S_{nn}(t)$ teremos finalmente^(27,28)

$$\frac{\partial}{\partial t} S_{nn}(t) = \left[-\frac{1}{\hbar^2} \sum_k' \int_{-\infty}^t dt_1 V_{nk}^*(t) V_{kn}^*(t_1) + \right. \\ \left. + \frac{i}{\hbar^3} \sum_k' \sum_{m \neq k}' \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 V_{nk}^*(t) V_{km}^*(t_1) V_{kn}^*(t_2) + \dots \right] S_{nn}(t) .$$

Integrando temos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial S_{nn}(t)}{S_{nn}(t)} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[-\frac{1}{\hbar^2} \sum_k' \int_{-\infty}^t dt_1 V_{nk}^*(t) V_{kn}^*(t_1) + \right. \\ \left. + \frac{i}{\hbar^3} \sum_k' \sum_{m \neq k}' \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 V_{nk}^*(t) V_{km}^*(t_1) V_{kn}^*(t_2) + \dots \right] .$$

Portanto chamando

$$A_n(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_k' \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t dt_1 V_{nk}^*(t) V_{kn}^*(t_1) + \\ + \frac{i}{\hbar^3} \sum_k' \sum_{m \neq k}' \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 V_{nk}^*(t) V_{km}^*(t_1) V_{kn}^*(t_2) + \dots$$

temos:

$$S_{nn}(+\infty) = S_{nn}(-\infty) e^{-A_n(t)}$$

onde n pode indicar o estado inicial I ou final F .

A matriz de espalhamento escrito na forma exponencial acima define o que chamamos de formalismo convergente. Nesse caso podemos descrever continuamente as interações para

qualquer parâmetro de impacto, resultando na convergência natural da matriz de espalhamento quando atingimos a região de interações fortes, ou seja pequenos parâmetros de impacto.

Na expressão de $A_n(t)$ podemos considerar apenas o primeiro termo da expansão, pois a maior contribuição para a probabilidade de transição é dada quando $V(t)$ é grande suficiente para provocar transições entre os níveis de energia do emissor.

Como a dependência da probabilidade de transição em $V(t)$ é exponencial, quando $V(t)$ é grande os termos de ordem superior são pequenos comparados com o primeiro termo e portanto podem ser desprezados. Assim⁽²⁷⁾

$$A_n(t) \cong \frac{1}{\hbar^2} \sum_k' \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^t dt_1 V_{nk}^*(t) V_{kn}^*(t_1)$$

e como podemos fazer $\eta_{nk}(t) - \eta_{kn}(t) \cong 0$, cometendo um erro desprezível, temos:

$$A_n(t) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_k' \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t dt_1 V_{nk}(t) V_{kn}(t_1) e^{i\omega_{nk}(t-t_1)} .$$

A integração em t_1 pode ser feita considerando $t - t_1 = \tau$, assim

$$A_n(t) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_k' \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{\infty} d\tau V_{nk}(t) V_{kn}(t-\tau) e^{i\omega_{nk}\tau} .$$

Como os operadores $V_{nk}(t)$ e $V_{kn}(t-\tau)$ são hermiteanos e o potencial de interação pode ser escrito como a transformada de Fourier de uma função $G(\omega)$ que descreve a interação

no espaço de energia temos:

$$V_{kn}(t-\tau) = V_{nk}^+(t-\tau)$$

$$G(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt V(t) e^{i\omega t} \quad (I.3-6)$$

e portanto $A_n(t)$ fica

$$A_n(t) = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^2 \sum_k \int_0^\infty d\tau e^{i\omega_{nk}\tau} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle n | \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G(\omega) e^{-i\omega t} | k \rangle \times$$

$$\times \langle n | \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' G(\omega') e^{-i\omega'(t-\tau)} | k \rangle^+$$

Essa integral tem como resultado (27)

$$A_n(t) = \frac{(2\pi)^2}{\hbar^2} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\pi \delta(\omega_{nk} - \omega) + iP \frac{1}{\omega_{nk} - \omega} \right] |\langle n | G(\omega) | k \rangle|^2$$

onde P indica a parte principal.

Introduzindo funções Γ_k e ϕ_k podemos escrever

$$A_n(t) = \frac{1}{2} \Gamma_k + i\phi_k$$

e portanto

$$\Gamma_k = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^2 \sum_k |\langle n | G(\omega) | k \rangle|^2 \quad (I.3-7)$$

$$\phi_k = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_k' P \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{|\langle n | G(\omega) | k \rangle|^2}{\omega_{nk} - \omega} \quad (I.3-8)$$

Portanto temos que a matriz de espalhamento $S_{KK}(+\infty)$ é dada por

$$S_{KK}(+\infty) = e^{-\frac{1}{2} \Gamma_k - i\phi_k}$$

onde tomamos no instante inicial $S_{kk}(-\infty) = 1$.

As expressões acima para Γ_k e ϕ_k mostram que essas funções dependem dos elementos de matriz das transições virtuais do nível considerado na presença da perturbação eletrônica.

I.4. CÁLCULO DO ALARGAMENTO E DESLOCAMENTO ELETRÔNICO

Agora estamos em condições de calcular o alargamento e deslocamento eletrônicos de uma linha isolada $I \rightarrow F$ da das pelas equações (I.2-5) e (I.2-6), que dependem do produto dos elementos de matriz S_{II} e S_{FF}^+ da matriz de espalhamento S .

Os elementos de matriz podem ser escritos usando os resultados do parágrafo anterior (I.3), na seguinte forma:

$$\langle \psi_I | S | \psi_I \rangle = S_{II} = e^{-\frac{1}{2} \Gamma_I - i\phi_I}$$

$$\langle \psi_F | S^+ | \psi_F \rangle = S_{FF}^+ = e^{-\frac{1}{2} \Gamma_F + i\phi_F}$$

e, por conseguinte

$$\langle \psi_I | S | \psi_I \rangle \langle \psi_F | S^+ | \psi_F \rangle = e^{-\frac{1}{2} \Gamma_{IF} - i \phi_{IF}}$$

onde

$$\Gamma_{IF} = \Gamma_I + \Gamma_F$$

$$\phi_{IF} = \phi_I - \phi_F$$

Como estamos interessados no cálculo de alargamentos e deslocamentos de linhas emitidas por átomos neutros do plasma, sendo os perturbadores elétrons, podemos escrever o operador $\mathcal{H}_{IF}$ dado pela equação (I.2-8) como:

$$\mathcal{H}_{IF} = -i2\pi N \int_0^\infty dbb \int_0^\infty dv v F(v) \left[1 - e^{-\frac{1}{2} \Gamma_{IF} - i \phi_{IF}} \right]$$

A semi-largura ω_e e o deslocamento S_e eletrônicos, medidos em hertz, são dados por:

$$\omega_e = N \int_0^\infty dbb \int_0^\infty dv v F(v) \left[1 - \cos(\phi_{IF}) e^{-\frac{1}{2} \Gamma_{IF}} \right] \quad (I.4-1)$$

$$S_e = -N \int_0^\infty dbb \int_0^\infty dv v F(v) \left[\sin(\phi_{IF}) e^{-\frac{1}{2} \Gamma_{IF}} \right] \quad (I.4-2)$$

Para calcular as funções Γ_{IF} e ϕ_{IF} precisamos calcular a transformada de Fourier $G(\omega)$ do potencial de interação $V(t)$ entre o elétron e o átomo emissor, que faremos a seguir.

(A) Cálculo de $G(\omega)$

A função $G(\omega)$ já foi definida anteriormente na equação (I.3-6).

O potencial $V(t)$ entre um elétron e átomo neutro escrito como uma expansão multipolar é dado por

$$V(t) = -e \sum_{\ell m} \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} \frac{Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)}{r^{\ell+1}} T_{\ell}^m$$

onde r é a posição do elétron em relação ao centro de massa do átomo, T_{ℓ}^m o multipolo de ordem ℓ definido como:

$$T_{\ell}^m = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} r'^{\ell} Y_{\ell}^m(\theta', \varphi') \quad (\text{I.4-3})$$

e r' , θ' , φ' são as coordenadas das partículas constituintes do átomo medidas no centro de massa do mesmo.

Desse modo a função $G(\omega)$ fica escrita na seguinte forma:

$$G(\omega) = -\frac{e}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \sum_{\ell m} \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} \frac{Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)}{r^{\ell+1}} T_{\ell}^m$$

ou seja,

$$G(\omega) = G_{\text{dipolo}}(\omega) + G_{\text{quadrupolo}}(\omega) + \dots \quad (\text{I.4-})$$

Considerando a trajetória do elétron como sendo uma reta contida no plano (ZY), conforme a figura abaixo,

vemos que a distância entre o elétron e o átomo é

$$r(t) = (z^2 + y^2)^{1/2} = (b^2 + v^2 t^2)^{1/2}$$

onde b é o parâmetro de impacto da colisão,

$$\cos \theta = \frac{b}{(b^2 + v^2 t^2)^{1/2}} \quad \text{e} \quad \sin \theta = \frac{vt}{(b^2 + v^2 t^2)^{1/2}}$$

(a) Interação dipolar

O termo $\ell = 1$ na expansão do potencial corresponde a interação dipolar

$$\begin{aligned} V_{\text{dipolo}}(t) &= -e \sqrt{\frac{4}{3}} \sum_m \frac{Y_1^m(\theta, \pi/2)}{r^2} T_1^m = \\ &= -e \left[T_1^0 \frac{\cos \theta}{r^2} + \frac{i}{2} (T_1^1 + T_1^{-1}) \frac{\sin \theta}{r^2} \right] \end{aligned}$$

Portanto

$$G_{\text{dipolo}}(\omega) = - \frac{2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[\frac{T_1^0 b e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{3/2}} + \frac{i}{\sqrt{2}} (T_1^1 + T_1^{-1}) \frac{e^{i\omega t} v t}{(b^2 + v^2 t^2)^{3/2}} \right]$$

que dá, efetuando as integrais (vide Apêndice I)

$$G_{\text{dipolo}}(\omega) = - \frac{2e\omega}{2\pi v^2} \left[T_1^0 K_1\left(\frac{\omega b}{v}\right) - \frac{\sqrt{2}}{2} (T_1^1 + T_1^{-1}) K_0\left(\frac{\omega b}{v}\right) \right]$$

ou mudando de variável ω para $Z = \omega b/v$

$$G_{\text{dipolo}}(Z) = G_1^d(Z) T_1^0 + G_2^d(Z) \frac{\sqrt{2}}{2} i (T_1^1 + T_1^{-1}) \quad (\text{I.4-5})$$

onde achamos

$$G_1^d(Z) = - \frac{e}{\pi v b} Z K_1(Z)$$

$$G_2^d(Z) = - \frac{ei}{\pi v b} Z K_0(Z) \quad .$$

(b) Interação quadrupolar

O termo de quadrupolo corresponde a $\ell = 2$ na expansão do potencial

$$\begin{aligned} V_{\text{quadrupolo}}(t) &= - e \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \sum_m \frac{1}{r^3} Y_2^m(\theta, \pi/2) T_2^m \\ &= - e \left[T_2^0 \frac{1}{r^3} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right) - i \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\sin \theta \cos \theta}{r^3} (T_2^1 + T_2^{-1}) \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\sin^2 \theta}{r^3} (T_2^2 + T_2^{-2}) \right] \end{aligned}$$

Assim $G_{\text{quadrupolo}}(\omega)$ fica

$$G_{\text{quadrupolo}}(\omega) = -\frac{e}{2\pi} \left\{ T_2^0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{3/2}} \left[\frac{3b^2}{2} \frac{1}{(b^2 + v^2 t^2)} - \frac{1}{2} \right] - \right. \\ \left. - i\sqrt{\frac{3}{2}} bv (T_2^1 + T_2^{-1}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt t e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{5/2}} - \frac{\sqrt{6}}{4} v^2 (T_2^2 + T_2^{-2}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt t^2 e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{5/2}} \right\}$$

Efetuada as integrais (vide Apêndice I) e mudando de variável ω para z , temos:

$$G_{\text{quadrupolo}}(\omega) = G_1^q(z) T_2^0 + G_2^q(z) (T_2^1 + T_2^{-1}) + G_3^q(z) (T_2^2 + T_2^{-2}) \quad (\text{I.4-6})$$

onde

$$G_1^q(z) = -\frac{e}{2\pi v b^2} \left[z^2 K_2(z) - z K_1(z) \right]$$

$$G_2^q(z) = -\frac{e}{2\pi v b^2} \sqrt{\frac{2}{3}} z^2 K_1(z)$$

$$G_3^q(z) = \frac{e}{4\pi v b^2} \sqrt{\frac{2}{3}} \left[z^2 K_0(z) + z K_1(z) \right]$$

(B) Cálculo das funções Γ_{IF} e ϕ_{IF}

As funções Γ_K e ϕ_K (com $K=I, F$) como já vimos no parágrafo (I.3) dependem dos elementos de matriz $|\langle n|G(\omega)|k\rangle|^2$, de acordo com as equações (I.3-7) e (I.3-8), dados por:

$$\begin{aligned}
| \langle n | G(\omega) | k \rangle |^2 &= | \langle n | G_{\text{dipolo}}(\omega) + G_{\text{quadrupolo}}(\omega) + \dots | k \rangle |^2 = \\
&= \langle n | G_d(\omega) + G_q(\omega) | k \rangle \langle k | G_d^+(\omega) + G_q^+(\omega) | n \rangle = \\
&= \langle n | G_d(\omega) | k \rangle \langle k | G_d^+(\omega) | n \rangle + \langle n | G_d(\omega) | k \rangle \langle k | G_q^+(\omega) | n \rangle + \\
&+ \langle n | G_q(\omega) | k \rangle \langle k | G_d^+(\omega) | n \rangle + \langle n | G_q(\omega) | k \rangle \langle k | G_q^+(\omega) | n \rangle . \quad (I.4-7)
\end{aligned}$$

Os estados $|n\rangle$ e $|k\rangle$ escritos explicitamente em função do momento angular total j e de sua projeção m são

$$|n\rangle = |n_\alpha, j_\alpha, m_\alpha\rangle$$

$$|k\rangle = |n_k, j_k, m_k\rangle$$

Fazendo uma média sobre as projeções m do estado $|k\rangle$ as funções Γ_K e ϕ_K tomam as seguintes expressões:

$$\Gamma_K = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{2j_\alpha + 1} \sum_{n_k, j_k, m_k} | \langle n_\alpha, j_\alpha, m_\alpha | G(\omega) | n_k, j_k, m_k \rangle |^2 \quad (I.4-8)$$

$$\phi_K = \frac{2\pi}{2j_\alpha + 1} \sum_{n_k, j_k, m_k} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{| \langle n_\alpha, j_\alpha, m_\alpha | G(\omega) | n_k, j_k, m_k \rangle |^2}{\omega_{\alpha k} - \omega} \quad (I.4-9)$$

Os elementos de matriz de $G(\omega)$ que aparecem nas expressões acima são calculados a seguir, utilizando-se as equações (I.4-4), (I.4-5) e (I.4-6) que são dadas em função do operador momento multipolar T_ℓ^m .

Vamos agora deduzir uma equação auxiliar no cálculo desses elementos de matriz, considerando os operadores T_ℓ^m

e $T_{\ell}^{m'}$ e calculando a seguinte somatória

$$\sum_{m_{\alpha} m_k} \langle n_{\alpha} j_{\alpha} m_{\alpha} | T_{\ell}^m | n_k j_k m_k \rangle \langle n_k j_k m_k | (T_{\ell}^{m'})^{\dagger} | n_{\alpha} j_{\alpha} m_{\alpha} \rangle$$

como $(T_{\ell}^{m'})^{\dagger} = (-1)^{m'} T_{\ell}^{-m'}$ temos:

$$\sum_{m_{\alpha} m_k} (-1)^{m'} \langle n_{\alpha} j_{\alpha} m_{\alpha} | T_{\ell}^m | n_k j_k m_k \rangle \langle n_k j_k m_k | T_{\ell}^{-m'} | n_{\alpha} j_{\alpha} m_{\alpha} \rangle =$$

$$= \sum_{m_{\alpha} m_k} (-1)^{m'} \langle j_k \ell m_k m | j_{\alpha} m_{\alpha} \rangle \langle j_{\alpha} \ell' m_{\alpha} - m' | j_k m_k \rangle \times$$

$$\times \langle n_{\alpha} j_{\alpha} || T_{\ell} || n_k j_k \rangle \langle n_k j_k || T_{\ell'} || n_{\alpha} j_{\alpha} \rangle$$

$$= \sum_{m_{\alpha} m_k} (-1)^{m'} (-1)^{\ell' - m'} \sqrt{\frac{2j_k + 1}{2j_{\alpha} + 1}} \langle j_k \ell m_k m | j_{\alpha} m_{\alpha} \rangle \langle j_k \ell' m_k - m' | j_{\alpha} m_{\alpha} \rangle$$

$$\times \langle n_{\alpha} j_{\alpha} || T_{\ell} || n_k j_k \rangle \langle n_k j_k || T_{\ell'} || n_{\alpha} j_{\alpha} \rangle$$

$$= \sqrt{\frac{2j_k + 1}{2j_{\alpha} + 1}} (-1)^{\ell'} (-1)^{j_k + \ell' - j_{\alpha}} \sum_{m_{\alpha} m_k} \langle j_k \ell m_k m | j_{\alpha} m_{\alpha} \rangle \langle j_k \ell' m_k m' | j_{\alpha} m_{\alpha} \rangle$$

$$\times \langle n_{\alpha} j_{\alpha} || T_{\ell} || n_k j_k \rangle \langle n_k j_k || T_{\ell'} || n_{\alpha} j_{\alpha} \rangle$$

Finalmente escrevemos

$$\sum_{m_{\alpha} m_k} \langle n_{\alpha} j_{\alpha} m_{\alpha} | T_{\ell}^m | n_k j_k m_k \rangle \langle n_k j_k m_k | (T_{\ell}^{m'})^{\dagger} | n_{\alpha} j_{\alpha} m_{\alpha} \rangle =$$

$$= A(j_k, j_{\alpha}, \ell') \langle n_{\alpha} j_{\alpha} || T_{\ell} || n_k j_k \rangle \langle n_k j_k || T_{\ell'} || n_{\alpha} j_{\alpha} \rangle \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'}$$

Portanto somente os termos $\ell = \ell'$ e $m = m'$ dão con

tribuição não nula.

Quando $\ell=\ell'$ e $m=m'$ a equação acima é escrita na forma

$$\begin{aligned} \sum_{m_\alpha m_k} \langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | T_\ell^m | n_k j_k m_k \rangle \langle n_k j_k m_k | (T_{\ell'}^m)^\dagger | n_\alpha j_\alpha m_\alpha \rangle &= \\ &= \sum_{m_\alpha m_k} |\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | T_\ell^m | n_k j_k m_k \rangle|^2 = \sum_{m_\alpha m_k} |\langle j_k m_k m | j_\alpha m_\alpha \rangle \langle n_\alpha j_\alpha || T_\ell || n_k j_k \rangle|^2 \\ &= \sum_{m_\alpha m_k} |\langle j_k \ell m_k m | j_\alpha m_\alpha \rangle|^2 |\langle n_\alpha j_\alpha || T_\ell || n_k j_k \rangle|^2 = \frac{2j_\alpha+1}{3} |\langle n_\alpha j_\alpha || T_\ell || n_k j_k \rangle|^2 \end{aligned}$$

Quando aplicamos essas relações na equação (I.4-7) verificamos que:

$$\sum_{n_k j_k m_k m_\alpha} \langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | G_d(\omega) | n_k j_k m_k \rangle \langle n_k j_k m_k | G_q^+(\omega) | n_\alpha j_\alpha m_\alpha \rangle = 0$$

$$\sum_{n_k j_k m_k m_\alpha} \langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | G_q(\omega) | n_k j_k m_k \rangle \langle n_k j_k m_k | G_d^+(\omega) | n_\alpha j_\alpha m_\alpha \rangle = 0$$

Portanto sobram apenas os termos $G_d(\omega)G_d^+(\omega)$ e $G_q(\omega)G_q^+(\omega)$ da equação (I.4-7) que passamos a calculá-los, substituindo $G_d(\omega)$ e $G_q(\omega)$

$$\begin{aligned} \sum_{n_k j_k m_k m} |\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | G_d(\omega) | n_k j_k m_k \rangle|^2 &= \sum_{n_k j_k m_k m} |\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | G_1^d(Z) T_1^0 + \\ &+ G_2^d(Z) \frac{\sqrt{2}}{2} i (T_1^1 + T_1^{-1}) | n_k j_k m_k \rangle|^2 \end{aligned}$$

Os termos $\ell \neq \ell'$ e $m \neq m'$ são nulos restando apenas os termos só de dipolo e quadrupolo.

$$\begin{aligned}
\sum_{n_k j_k m_k m_\alpha} |\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | G_d(\omega) | n_k j_k m_k \rangle|^2 &= \sum_{n_k j_k m_k m} \left\{ \left[G_1^d(Z) \right]^2 |\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | T_1^0 | n_k j_k m_k \rangle|^2 \right. \\
&+ \frac{1}{2} \left[G_2^d(Z) \right]^2 \left[|\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | T_1^1 | n_k j_k m_k \rangle|^2 + |\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | T_1^{-1} | n_k j_k m_k \rangle|^2 \right] \Big\} = \\
&= \frac{2j_\alpha + 1}{3} \left(\frac{e}{\pi v b} \right)^2 \sum_{n_k j_k} A(Z) |\langle n_\alpha j_\alpha || T_1 || n_k j_k \rangle|^2
\end{aligned}$$

onde

$$A(Z) = Z^2 \left[K_1^2(Z) + K_0^2(Z) \right]$$

e

$$\begin{aligned}
\sum_{n_k j_k m_k m_\alpha} |\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | G_q(\omega) | n_k j_k m_k \rangle|^2 &= \sum_{n_k j_k m_k m} |\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | G_1^q(Z) T_2^0 + \\
&+ G_2^q(Z) [T_2^1 + T_2^{-1}] + G_3^q(Z) [T_2^2 + T_2^{-2}] | n_k j_k m_k \rangle|^2 = \\
&= \sum_{n_k j_k m_k m_\alpha} G_1^q(Z)^2 |\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | T_2^0 | n_k j_k m_k \rangle|^2 + G_2^q(Z)^2 \left[|\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | T_2^1 | n_k j_k m_k \rangle|^2 + |\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | T_2^{-1} | n_k j_k m_k \rangle|^2 \right] + \\
&+ G_3^q(Z)^2 \left[|\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | T_2^2 | n_k j_k m_k \rangle|^2 + |\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | T_2^{-2} | n_k j_k m_k \rangle|^2 \right] = \\
&= \frac{2j_\alpha + 1}{15} \left(\frac{e}{\pi v b^2} \right) \sum_{n_k j_k} A_q(Z) |\langle n_\alpha j_\alpha || T_2 || n_k j_k \rangle|^2
\end{aligned}$$

onde

$$A_q(Z) = \frac{Z^4}{4} \left[K_2^2(Z) + 4K_1^2(Z) + 3K_0^2(Z) \right]$$

Portanto obtemos finalmente a soma dos elementos de matriz $G(\omega)$ como:

$$\sum_{n_k j_k m_k} |\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | G(\omega) | n_k j_k m_k \rangle|^2 = \frac{2j_\alpha + 1}{3} \left[\left(\frac{e}{\pi v b} \right)^2 \sum_{n_k j_k} A(Z) \times \right. \\ \left. \times |\langle n_\alpha j_\alpha || T_1 || n_k j_k \rangle|^2 + \frac{2j_\alpha + 1}{15} \left(\frac{e}{v b^2} \right)^2 \sum_{n_k j_k} A_q(Z) |\langle n_\alpha j_\alpha || T_2 || n_k j_k \rangle|^2 \right]$$

Substituindo esse resultado nas equações (I.3-7) e (I.3-8) obtemos Γ_K diretamente e ϕ_K após o cálculo da parte principal da integral

$$P \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{|\langle n_\alpha j_\alpha m_\alpha | G(\omega) | n_k j_k m_k \rangle|^2}{\omega_{nk} - \omega} = \frac{2j_\alpha + 1}{3} \left(\frac{e}{v b} \right)^2 |\langle n_\alpha j_\alpha || T_1 || n_k j_k \rangle|^2 \times \\ \times P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dZ}{Z_{nk} - Z} A(Z) + \frac{2j_\alpha + 1}{15} \left(\frac{e}{\pi v b^2} \right)^2 |\langle n_\alpha j_\alpha || T_2 || n_k j_k \rangle|^2 P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dZ}{Z_{nk} - Z} A_q(Z) .$$

Assim a parte principal da integral correspondente a contribuição de dipolo e quadrupolo são dados por^(17,41,42)

$$\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dZ}{Z_{nk} - Z} A(Z) = \pi Z^2 \left[K_0(Z) I_0(Z) - K_1(Z) I_1(Z) \right] = B(Z)$$

$$\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dZ}{Z_{nk} - Z} A_q(Z) = Z^2 \left[B(Z) + b(Z) - \pi K_1(Z) I_1(Z) \right] = B_q(Z)$$

onde

$$b(Z) = \frac{1}{2} \pi - \pi Z K_0(Z) I_1(Z)$$

Dessa forma são obtidas as equações finais para

as funções Γ_K e ϕ_K como:

$$\Gamma_K = \frac{4}{3} \left(\frac{e^2 a_0}{\hbar b v} \right)^2 \sum_{n_k j_k} | \langle n_\alpha j_\alpha | T_2^* | n_k j_k \rangle |^2 A(Z) +$$

$$+ \frac{4}{15} \left(\frac{e^2 a_0^2}{\hbar b^2 v} \right)^2 \sum_{n_k j_k} | \langle n_\alpha j_\alpha | T_2^* | n_k j_k \rangle |^2 A_q(Z) \quad (I.4-10)$$

e

$$\phi_K = \frac{2}{3} \left(\frac{e^2 a_0}{\hbar b v} \right)^2 \sum_{n_k j_k} | \langle n_\alpha j_\alpha | T_1^* | n_k j_k \rangle |^2 B(Z) +$$

$$+ \frac{2}{15} \left(\frac{e^2 a_0^2}{\hbar b^2 v} \right)^2 \sum_{n_k j_k} | \langle n_\alpha j_\alpha | T_2^* | n_k j_k \rangle |^2 B_q(Z) \quad (I.4-11)$$

onde $T_1^* = T_1/a_0$ e $T_2^* = T_2/a_0^2$, sendo a_0 o raio de Bohr.

As funções $A(Z)$, $B(Z)$, $A_q(Z)$ e $B_q(Z)$ comportam-se de acordo com a figura abaixo⁽¹⁷⁾

As equações deduzidas acima para Γ_K e ϕ_K são válidas para qualquer emissor, que não apresenta mudança de estado durante a colisão.

Como vamos calcular os alargamentos e deslocamentos para as linhas emitidas pelo átomo de hélio neutro, passamos a obter as fórmulas específicas para esses cálculos.

I.5. EQUAÇÕES PARA O CÁLCULO DE ALARGAMENTO E DESLOCAMENTO DE LINHAS ESPECTRAIS DO HÉLIO NEUTRO

Quando o emissor é o átomo de hélio neutro os estados inicial I e final F envolvidos na transição chamaremos de:

$$|K\rangle = |n_k^a \ell_k m_k\rangle \quad \text{com} \quad K = I \text{ ou } F$$

onde $a=1$ para o caso do para-hélio e $a=3$ para o orto-hélio.

Os estados virtuais $|k\rangle$ envolvidos na determinação do alargamento e deslocamento são definidos por:

$$|k\rangle = |n'^a \ell' m'\rangle$$

Assim as funções Γ_K e ϕ_K , com $K=I$ ou F , são dadas para o caso do hélio neutro, omitindo-se por simplicidade o índice K , por

$$\begin{aligned} \Gamma_K &= \frac{4}{3} \left(\frac{e^2 a_0}{\hbar b v} \right)^2 \sum_{n', a, \ell'} \frac{|\langle n^a \ell || T_1 || n'^a \ell' \rangle|^2}{a_0^2} A(Z) + \\ &+ \frac{4}{15} \left(\frac{e^2 a_0^2}{\hbar b^2 v} \right)^2 \sum_{n', a, \ell'} \frac{|\langle n^a \ell || T_2 || n'^a \ell' \rangle|^2}{a_0^4} A_q(Z) \end{aligned}$$

$$\phi_K = \frac{2}{3} \left(\frac{e^2 a_0}{\hbar b v} \right)^2 \sum_{n', a_{\ell'}} \frac{| \langle n^a \ell || T_1 || n', a_{\ell'} \rangle |^2}{a_0^2} B(Z) +$$

$$+ \frac{2}{15} \left(\frac{e^2 a_0^2}{\hbar b^2 v} \right)^2 \sum_{n', a_{\ell'}} \frac{| \langle n^a \ell || T_2 || n', a_{\ell'} \rangle |^2}{a_0^4} B_q(Z)$$

onde $Z = \omega_{n^a \ell, n', a_{\ell'}} b/v$.

Podemos mostrar que a contribuição de quadrupolo nas funções Γ_K e ϕ_K são desprezíveis para o átomo de hélio neutro, calculando a razão entre os elementos reduzidos de matriz da contribuição dipolar e quadrupolar, a partir das equações acima, ou seja:

$$\frac{(\Gamma_K)_d}{(\Gamma_K)_q} = \frac{5b^2}{a_0^2} \frac{\sum_{n', a_{\ell'}} | \langle n^a \ell || T_1 || n', a_{\ell'} \rangle |^2 A(Z) / a_0^2}{\sum_{n', a_{\ell'}} | \langle n^a \ell || T_2 || n', a_{\ell'} \rangle |^2 A_q(Z) / a_0^4}$$

$$\frac{(\phi_K)_d}{(\phi_K)_q} = \frac{5b^2}{a_0^2} \frac{\sum_{n', a_{\ell'}} | \langle n^a \ell || T_1 || n', a_{\ell'} \rangle |^2 B(Z) / a_0^2}{\sum_{n', a_{\ell'}} | \langle n^a \ell || T_2 || n', a_{\ell'} \rangle |^2 B_q(Z) / a_0^4}$$

A razão das funções dipolares e quadrupolares va
riam de

$$\frac{A(Z)}{A_q(Z)} \geq \frac{1}{5} \quad \text{e} \quad \frac{B(Z)}{B_q(Z)} \geq \frac{1}{2}$$

e os elementos reduzidos de matriz de dipolo e quadrupolo são da
dos pelas expressões abaixo⁽⁴³⁾, quando as transições virtuais
ocorrem mantendo o número quântico principal n^a , ou seja $n', a = n^a = n$

$$| \langle n^a \ell | | \frac{T_1}{a_0} | | n^a \ell' \rangle |^2 = \begin{cases} \frac{9}{4} n^2 (n^2 - \ell^2) \frac{\ell}{2\ell+1} & \text{para } \ell' = \ell - 1 \\ \frac{9}{4} n^2 [n^2 - (\ell+1)^2] \frac{\ell+1}{2\ell+1} & \text{para } \ell' = \ell + 1 \end{cases}$$

$$| \langle n^a \ell | | \frac{T_2}{a_0} | | n^a \ell' \rangle |^2 = \begin{cases} \frac{25}{4} n^4 [(n^2 - \ell^2)(n^2 - (\ell-1)^2)] \frac{\ell(\ell-1)}{(2\ell-1)(2\ell-3)} & \text{para } \ell' = \ell - 2 \\ \frac{25}{4} n^4 [n^2 - (\ell+2)^2][n^2 - (\ell+1)^2] \frac{(\ell+2)(\ell+1)}{(2\ell+3)(2\ell+5)} & \text{para } \ell' = \ell + 2 \end{cases}$$

Das expressões acima podemos observar que quanto maior o valor de ℓ menores são os elementos reduzidos de matriz de dipolo e quadrupolo.

Substituindo os elementos reduzidos de matriz nas equações acima, passamos a analisar apenas a relação $(\Gamma_K)_d / (\Gamma_K)_q$ pois esta difere de $(\phi_K)_d / (\phi_K)_q$ apenas por um fator 5/2. Assim temos:

$$\frac{(\Gamma_K)_d}{(\Gamma_K)_q} \geq \frac{9}{25} \frac{b^2}{a_0^2}.$$

$$\frac{n^2(n^2 - \ell^2) \frac{\ell}{2\ell+1} + n^2 [n^2 - (\ell+1)^2] \frac{\ell+1}{2\ell+3}}{n^4 [(n^2 - \ell^2)(n^2 - (\ell-1)^2)] \frac{\ell(\ell-1)}{(2\ell-1)(2\ell-3)} + n^4 [n^2 - (\ell+2)^2][n^2 - (\ell+1)^2] \frac{(\ell+2)(\ell+1)}{(2\ell+3)(2\ell+5)}}$$

Uma estimativa pode ser feita, considerando os ca sos limites para ℓ , isto é $\ell = 0$ e $\ell = n-1$. Assim

$$\frac{(\Gamma_K)_d}{(\Gamma_K)_q} \geq \frac{9}{25} \frac{b^2}{a_0^2} \frac{1}{n^2(n^2-4)} \quad \text{para } \ell = 0$$

$$\frac{(\Gamma_K)_d}{(\Gamma_K)_q} \geq \frac{9}{25} \frac{b^2}{a_0^2} \frac{(2n-3)(2n-5)}{[n^2 - (n-2)^2](2n-1)(n-2)} \quad \text{para } \ell = n-1$$

Numericamente observamos que essa razão é da ordem de $\sim 10^2 b^2/a_0^2$ e como $b/a_0 \sim 1$ na região de forte interação, temos que

$$\frac{(\Gamma_K)_d}{(\Gamma_K)_q} \sim 10^2$$

e portanto podemos desprezar a contribuição de quadrupolo.

Portanto temos para o hélio neutro as expressões

$$\Gamma_K = \frac{4}{3} \left(\frac{e^2 a_0}{\hbar b v} \right)^2 \sum_{n', \ell'} |\langle n^a \ell || T_1^* || n'^a \ell' \rangle|^2 A(Z)$$

$$\phi_K = \frac{2}{3} \left(\frac{e^2 a_0}{\hbar b v} \right)^2 \sum_{n', \ell'} |\langle n^a \ell || T_1^* || n'^a \ell' \rangle|^2 B(Z)$$

O alargamento e deslocamento da linha é obtido, então, substituindo-se as funções Γ_K e ϕ_K nas equações (I.4-1) e (I.4-2).

I.6. ALARGAMENTO E DESLOCAMENTO PROVOCADOS PELOS ÍONS

O efeito dos íons na aproximação quase estática foi levado em conta na função de correlação temporal dada pela equação (I.2-9), resultando na forma de linha dada pela equação (I.2-10).

Griem^(19,20) mostra que, quando os íons são tratados na aproximação quase estática, como foi feito no parágrafo (I.2), o alargamento total ω e deslocamento total s da linha, assim obtida, são muito bem representados pelas equações a baixo, como a soma dos alargamentos ω_e e ω_i e deslocamentos S_e e S_i eletrônicos e iônicos, ou seja

$$\omega \cong \omega_e + \omega_i = \left[1 + 1.75A (1 - .75R) \right] \omega_e \quad (\text{I.6-1})$$

$$S \cong S_e + S_i = S_e \pm 2.0A (1 - .75R) \omega_e \quad (\text{I.6-2})$$

onde

$$A = \left(\frac{C_4 F_0^2}{e \omega_e} \right)^{3/4} \quad \text{e} \quad R = \frac{\rho_m}{\rho_0}$$

e ρ_0 é o raio de Debye.

As equações acima são válidas para valores de $R \leq 0.8$ e $.05 \leq A \leq 0.5$. A limitação no parâmetro A é feita inferiormente, pois para $A < .05$ a interação quadrupolar não é desprezível, isto é, essa condição implica em que a intensidade máxima F_0 do campo estático dos íons é pequena e portanto apesar do efeito de quadrupolo ser pequeno, esse começa a ficar da ordem de grandeza do efeito dipolar, não podendo ser desprezado. O limite superior de $A \cong .5$ ocorre quando a intensidade máxima F_0 do campo eletrostático dos íons é grande e portanto existe o efeito Stark linear, não sendo mais a linha isolada, começando a ser importante a superposição das linhas permitida e proibida.

Nas equações (I.6-1) e (I.6-2) o alargamento e o

deslocamento eletrônicos podem ser calculados pelas teorias existentes. Em particular nesse trabalho vamos usar a teoria semi-clássica convergente exposta anteriormente para obtenção da contribuição eletrônica.

A utilização das equações (I.6-1) e (I.6-2) para o cálculo de alargamento e deslocamento iônicos depende da condição de validade da aplicação da aproximação quase estática. Nessa aproximação deve estar satisfeita a condição de que o tempo de colisão iônica é muito maior que o tempo de colisão eletrônica, que pode ser verificada por meio do parâmetro $\sigma \gg 1$, definido como

$$\sigma = \frac{\omega_e \rho_m}{v_{ion}} \quad (I.6-3)$$

Assim, enquanto o elétron colide com o átomo (emissor) o íon está praticamente parado e, daí, utiliza-se a distribuição de Holtsmark, como feito no parágrafo (I.2).

Uma questão importante a ser observada é que a introdução da contribuição iônica, segundo a aproximação quase estática, provoca uma assimetria na forma da linha espectral, no mesmo sentido em que ocorre o deslocamento da mesma, quando é feita a convolução do efeito das colisões iônicas com a lorentziana que descreve a forma da linha gerada apenas pelas colisões eletrônicas.

Quando a condição de validade $\sigma \gg 1$ de utilização da aproximação quase estática não for preenchida, as equações (I.2-11), (I.6-1) e (I.6-2) de perfil, alargamento e deslocamento da linha espectral devem ser substituídos por equações que levam em conta o efeito da dinâmica dos íons.

Para $\sigma \lesssim 1$ GBKO⁽¹⁷⁾ e Barnard et al⁽³⁴⁾ propõem equações para o perfil da linha e seus respectivos alargamentos e deslocamentos que levam em conta o movimento dos íons.

Assim, GBKO obtêm um perfil reduzido, para o caso em que a velocidade do íon é grande, dado por

$$j(x, \alpha, \sigma) = \frac{1}{\pi} R_e \int_0^{\infty} dt \exp \left[ixt - i^{2/3} \frac{3}{4} \left(\frac{\pi}{2} \right)^{2/3} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \alpha^{8/9} \sigma^{-1/3} t \right]$$

onde x , α e σ foram definidos anteriormente a partir das equações (I.2-11) e (I.6-3).

Portanto o alargamento e deslocamento da linha nessa aproximação são obtidos por meio da equação do perfil reduzido, como⁽²⁰⁾:

$$\omega = \left[1 + 1.3 \alpha^{8/9} \sigma^{-1/3} \right] \omega_e \quad (\text{I.6-4})$$

$$S = S_e \pm 2.36 \alpha^{8/9} \sigma^{-1/3} \omega_e \quad (\text{I.6-5})$$

O perfil reduzido obtido por Barnard et al, usando a aproximação adiabática, é dado por:

$$j(x, \alpha, \sigma) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{(1+w)}{(x-d)^2 + (1+w)^2} \quad (\text{I.6-6})$$

onde

$$w = \frac{\omega_i}{\omega_e} = \alpha^{8/9} \sigma^{-1/3} W^I(k)$$

$$d = \frac{S_i}{\omega_e} = \pm \left[\alpha^{8/9} \sigma^{-1/3} D^I(k) - 3 \alpha^{4/3} \frac{\rho_m}{\rho_0} \right]$$

$$k = 1.03 \sigma^{4/3} \alpha^{4/9} x$$

e $W^I(k)$ e $D^I(k)$ são funções tabeladas⁽³⁴⁾.

Uma análise da equação (I.6-6) mostra que nas extremidades o perfil, efetuando o limite $\frac{x}{\alpha} \rightarrow +\infty$ e $\frac{x}{\alpha} \rightarrow -\infty$, comporta-se segundo as equações:

$$j(x, \alpha, \sigma) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} \frac{1}{x^2} + \frac{3}{4x^{7/4}}$$

$$j(x, \alpha, \sigma) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} \frac{1}{\pi x^2}$$

e no centro da linha, $x \rightarrow 0$ o perfil $j(x, \alpha, \sigma)$ se aproxima de uma lorentziana cuja largura e deslocamento são dados por:

$$\omega = \left[1 + 1.36 \alpha^{8/9} \sigma^{-1/3} \right] \omega_e \quad (\text{I.6-7})$$

$$S = S_e \pm \left[2.36 \alpha^{8/9} \sigma^{-1/3} - 3 \alpha^{4/3} \frac{\rho_m}{\rho_0} \right] \omega_e \quad (\text{I.6-8})$$

As duas aproximações expostas para o caso em que $\sigma \lesssim 1$, levam a equações idênticos para o alargamento, diferindo apenas no deslocamento da linha pelo termo $- 3 \alpha^{4/3} \frac{\rho_m}{\rho_0} \omega_e$ que corresponde a introdução de "screening" de Debye.

Uma outra forma de levar em conta o efeito dos íons é tratá-los na aproximação de impacto, válida quando estiverem satisfeitas as condições

$$\sigma \ll 1 \quad \text{e} \quad \frac{\omega_i \rho_m}{v_{\text{ion}}} \ll 1 \quad (\text{I.6-9})$$

Em geral, para ions , o que se observa é que $\sigma \lesssim 1$ e $\sigma < 1$. Nesse caso poder-se-ia pensar na validade da utilização da aproximação de impacto para os casos em que $\sigma \lesssim 1$.

Esse é um ponto ainda controvertido na literatura e pretendemos discutí-lo no capítulo II, quando utilizamos a teoria semi-clássica convergente, fundamentada na hipótese de validade da aproximação de impacto, para o cálculo dos alargamentos e deslocamentos das linhas espectrais do hélio neutro, provocados por colisões iônicas, tendo sempre em vista a região central e intermediária do perfil da linha espectral.

C A P Í T U L O I I

CÁLCULO E ANÁLISE DE RESULTADOS

II.1. INTRODUÇÃO

O estudo completo da aplicabilidade da teoria convergente para o cálculo de alargamento e deslocamento de linhas espectrais deveria constar de sua aplicação para os casos de átomos neutros e íons, leves ou pesados e perfil de linha.

Certamente uma abordagem deste tipo é impraticável num trabalho como este.

Assim, o que nos propomos a fazer é, utilizando o formalismo convergente descrito no capítulo I, calcular os alargamentos e deslocamentos para diversas linhas de um certo elemento em temperaturas e densidades eletrônicas que variam no intervalo de 5 000 K a 40 000 K e 10^{15} cm^{-3} a 10^{18} cm^{-3} .

Além do cálculo de alargamentos e deslocamentos, neste trabalho propomo-nos a estudar a contribuição de diferentes efeitos nos cálculos realizados com o formalismo convergen-

te, que serão descritos mais adiante.

O teste da teoria deve ser feito escolhendo-se para sua aplicação inicial um elemento simples, isto é, que possua níveis de energia bem determinados, não apresente degenerescência e portanto as suas linhas espectrais sejam isoladas.

Em princípio poderíamos pensar em escolher o elemento mais simples, quanto à estrutura, que seria o hidrogênio, uma vez que seus níveis de energia são bem determinados e suas funções de onda muito estudadas. Apesar de se ter um bom conhecimento do hidrogênio, ele possui estados degenerados e portanto as suas linhas espectrais em um plasma não se apresentam isoladas.

Este fato dá origem a complicações adicionais no estudo da forma de linhas espectrais, sendo até o presente estudado e medido, por existir muita controversia a respeito da forma de linha, por exemplo, no caso das linhas $H\alpha$ e $H\beta$ (43,44,45).

Pelo fato de duas linhas espectrais não serem simplesmente uma superposição das mesmas, mas existir uma correlação entre elas, o problema de linhas não isoladas é extremamente complicado (34,45,47,48,49).

Assim o elemento mais simples da tabela periódica é o hélio neutro, que é um bom elemento para testarmos a teoria convergente, pois seus níveis de energia que contribuem para transições desde o infravermelho até o ultravioleta, que serão objeto de nossos estudos, não são degenerados, sendo portanto suas linhas espectrais isoladas, pelo menos até densidades eletrônicas da ordem de 10^{17} cm^{-3} , quando começam a aparecer contribuições de transições proibidas. Neste caso o tratamento a ser

aplicado para a determinação de forma de linha já não é o de linha isolada, sendo necessário a introdução de um formalismo mais sofisticado^(19,34,50,51,52), o que tornaria muito mais difícil testar a validade da aproximação convergente que é nosso objetivo imediato.

Assim, escolhemos o hélio neutro para testar a teoria proposta, porque além de possuir linhas isoladas abaixo de uma determinada densidade eletrônica, a quantidade de resultados experimentais e teóricos permitem que façamos uma análise comparativa e, conseqüentemente, uma avaliação da teoria em questão.

Das linhas espectrais do hélio neutro, escolhemos um conjunto para a realização dos cálculos. Essa escolha recaiu sobre as linhas que possuíam valores de alargamento e deslocamento determinados experimental e teoricamente em diferentes temperaturas e densidades eletrônicas.

Assim, os cálculos são efetuados daqui em diante para as linhas 7281 Å, 7065 Å, 6678 Å, 5876 Å, 5048 Å, 5016 Å, 4713 Å, 4121 Å, 3965 Å, 3889 Å, 3188 Å e 2945 Å.

II.2. CÁLCULO DE ALARGAMENTO E DESLOCAMENTO DE LINHAS ESPECTRAIS DO HÉLIO NEUTRO

Os cálculos de alargamento e deslocamento dependem da determinação precisa das funções de onda do átomo emissor para obtenção dos elementos reduzidos de matriz de dipolo e quadrupolo.

Numa primeira aproximação consideramos as funções de onda do hélio como hidrogenóides e efetuamos os cálculos dos alargamentos e deslocamentos das linhas citadas, com objetivo de obter resultados preliminares, para uma análise da viabilidade da utilização da teoria.

Esses resultados mostraram-se bastante razoáveis quando comparados com os resultados experimentais, que serão mostrados mais adiante. Desta maneira partimos para efetuar os cálculos utilizando os melhores valores para os elementos reduzidos de matriz de dipolo, que são obtidos por meio dos "oscillators strength", calculados no Apêndice II.

Os alargamentos e deslocamentos para o conjunto escolhido de linhas espectrais do hélio neutro foram calculados nas mesmas condições em que foram realizados os cálculos preliminares.

Nas tabelas (II.2-1) e (II.2-2) encontram-se os resultados para alargamentos e deslocamentos eletrônicos obtidos pela teoria convergente a partir das equações (I.4-1) e (I.4-2), alargamentos e deslocamentos iônicos na aproximação quase estática de Griem⁽²⁰⁾, alargamentos e deslocamentos totais obtidos pelas equações (I.6-1) e (I.6-2), parâmetro σ^* e resultados experimentais.

Análise dos resultados

A condição de validade da aproximação de impacto para elétrons $\sigma^* = w_e \rho_m / v$ foi verificada, pois os valores de σ^* calculados estão entre 2.3×10^{-3} e 8.9×10^{-2} . Portanto os alargamentos e deslocamentos obtidos são resultados perfeitamente

λ (Å)	N (10^{16} cm^{-3})	T (10^3 K)	A L A R G A M E N T O				
			T E O R I A			E X P E R I M E N T A L	
			σ	ω_e (Å)	ω_i (Å)	ω (Å) ($\chi_w^2 = .56$)	ω (Å)
7281	1.03	20.9	.25	.36	.038	.80	.88 K
7065	1.03	20.9	.15	.21	.018	.46	.47 K
6678	1.03	20.9	.26	.32	.081	.80	.98 K
5876	16.0	49.0	.52	1.89	.41	4.60	5.5 B
	13.0	43.0	.49	1.57	.31	3.99	4.9 B
	4.1	20.0	.37	.55	.071	1.24	
	2.0	18.0	.24	.27	.030	.60	
	1.03	20.9	.14	.14	.014	.30	.39 K
5048	3.2	30.0	1.71	2.10	.50	5.20	4.6 W
	2.0	18.0	1.58	1.29	.26	3.09	3.4 D
	1.03	20.9	.95	.67	.12	1.59	1.68 K
5016	3.2	30.0	.78	.95	.32	2.55	1.9 W
	17.0	24.0	2.75	5.23	2.26	14.99	13.0 B
	4.1	20.0	1.19	1.29	.41	3.39	3.8 D
	2.0	18.0	.79	.64	.17	1.6	1.8 D
	1.03	20.9	.46	.32	.079	.80	.86 K
4713	3.2	30.0	1.16	1.24	.24	2.96	2.9 W
	13.0	20.0	3.5	4.91	1.14	12.11	14.0 B
	4.1	20.0	1.63	1.55	.29	3.69	4.6 D
	2.0	18.0	1.04	.74	.12	1.73	2.05 D
	1.03	20.9	.63	.39	.057	.89	.95 K
4121	3.2	30.0	3.89	3.20	.83	8.06	6.2 W
	2.9	18.0	4.54	2.79	.67	6.93	7.0 D
	1.03	20.9	2.15	1.01	.20	2.43	2.22 K
3965	1.4	18.0	2.54	1.13	.54	3.34	4.1 D
	1.03	20.9	1.87	.81	.38	2.38	2.30 K
3889	3.2	30.0	.43	.31	.044	.72	.73 W
	15.0	26.0	1.3	1.48	.27	3.50	4.5 B
	4.1	20.0	.62	.40	.055	.92	1.25 D
	2.0	18.0	.40	.20	.023	.44	.55 D
	1.03	20.9	.24	.10	.011	.22	.24 K
3188	15.0	29.0	5.40	4.38	1.52	11.79	13.4 B
	4.1	20.0	2.78	1.21	.30	3.04	3.0 D
	1.7	18.0	1.62	.50	.11	1.22	1.35 D
	1.03	20.9	1.08	.30	.059	.73	.78 K
2945	1.03	20.9	3.20	.77	.23	1.99	2.0 K

K - Kelleher⁽³⁷⁾ W - Wulff⁽³⁵⁾
 B - Berg et al⁽³⁶⁾ D - Diatta⁽³⁸⁾

Tabela - II.2-1 - Alargamentos eletrônicos, iônicos e totais teóricos e experimentais.

λ (Å)	N (10^{16} cm^{-3})	T (10^3 K)	D E S L O C A M E N T O			
			TEORIA		EXPERIMENTAL	
			$S_e(\text{Å})$	$S_i(\text{Å})$	$S(\text{Å})$ ($\chi^2_S = .23$)	$S(\text{Å})$
7281	1.03	20.9	.33	.043	.38	.473 K
7065	1.03	20.9	.22		.24	.302 K
6678	1.03	20.9	.13	.093	.23	.355 K
5876	16.0	49.0	-.84	-.47	-1.30	.7 B
	13.0	43.0	-.72	-.36	-1.08	.0 B
	4.1	20.0	-.31	-.081	-.39	-.30 D
	2.0	18.0	-.16	-.034	-.19	-.10 D
	1.03	20.9	-.077	-.016	-.093	-.074 W
5048	3.2	30.0	1.64	.57	2.21	2.0 D
	2.0	18.0	1.14	.29	1.44	.90 K
	1.03	20.9	.57	.14	.71	.89 W
5016	3.2	30.0	-.51	-.37	-.87	-.55 B
	17.0	24.0	-2.88	-2.58	-5.47	-4.8 D
	4.1	20.0	-.72	-.47	-1.19	-.85 D
	2.0	18.0	-.37	-.20	-.57	-.40 K
	1.03	20.9	-.18	-.090	-.27	-.283 W
4713	3.2	30.0	1.09	.27	1.36	1.4 B
	13.0	20.0	4.72	1.31	6.02	6.0 D
	4.1	20.0	1.49	.34	1.82	2.3 K
	2.0	18.0	.74	.14	.88	1.0 K
	1.03	20.9	.37	.065	.44	.538 K
4121	3.2	30.0	2.68	.95	3.63	2.8 W
	2.9	18.0	2.66	.77	3.43	
	1.03	20.9	.92	.22	1.14	1.124 K
3965	1.4	18.0	-.59	-.61	-1.21	-.73 D
	1.03	20.9	-.41	-.43	-.84	-.771 K
3889	3.2	30.0	.085	.050	.13	.3 B
	15.0	26.0	.43	.31	.74	1.2 B
	4.1	20.0	.13	.063	.19	.25 D
	2.0	18.0	.070	.026	.096	.10 D
	1.03	20.9	.033	.012	.045	.080 K
3188	15.0	29.0	1.68	1.73	3.42	4.2 B
	4.1	20.0	.52	.35	.86	.9 D
	1.7	18.0	.23	.12	.35	.30 D
	1.03	20.9	.13	.067	.19	.258 K
2945	1.03	20.9	.24	.26	.50	.683 K

K - Kelleher⁽³⁷⁾ W - Wulff⁽³⁵⁾
 B - Berg et al⁽³⁶⁾ D - Diatta⁽³⁸⁾

Tabela - II.2-2 - Deslocamentos eletrônicos, iônicos e totais teóricos e experimentais.

coerentes com a estrutura do formalismo de impacto.

Disso resulta que a forma da linha que leva em conta apenas o efeito das colisões eletrônicas é uma lorentziana de semi-largura ω_e centrada na frequência $\omega_0 + s_e$.

Uma outra questão a ser analisada é o cálculo da contribuição iônica, utilizando a aproximação quase estática e as condições de validade de utilização da mesma, isto é $\sigma \gg 1$ e os parâmetros A e R das equações (I.6-1) e (I.6-2).

Como podemos ver na tabela (II.1), a condição de utilização da aproximação quase estática não está satisfeita pois $\sigma \approx 1$, enquanto que os parâmetros A e R satisfazem as condições necessárias, pois foram calculados e variam nos intervalos $.06 \leq A \leq .40$ e $.29 \leq R \leq .45$.

Apesar de $\sigma \approx 1$, vamos utilizar esta aproximação, pois nem sempre essa condição é rigorosamente obedecida nos cálculos, como podemos observar na literatura.

Mais adiante no parágrafo (II.5) dedicaremos uma maior atenção para este aspecto do problema, utilizando diversas aproximações e realizando um estudo sobre condições de validade das mesmas.

Em linhas gerais podemos dizer que há uma boa concordância dos nossos resultados com os valores experimentais das tabelas (II.1) e (II.2), mostrando que o formalismo convergente é bastante adequado para descrever as colisões eletrônicas.

As discrepâncias observadas tanto para os alargamentos quanto para os deslocamentos calculados estão em geral

dentro dos erros experimentais, que normalmente são da ordem de 20%.

Também as previsões de outros formalismos semi-clássicos (19,21,22) para os alargamentos e deslocamentos apresentam discrepâncias da mesma ordem de grandeza em relação aos valores experimentais. Mais adiante no parágrafo (II.8) faremos uma comparação mais detalhada.

Uma tentativa para modificar e talvez melhorar os resultados obtidos é introduzir uma série de modificações, levando em conta no formalismo alguns aspectos que não foram abordados no capítulo I, quando deduzimos as equações para alargamento e deslocamento.

Em uma análise mais detalhada do problema podemos realizar um estudo sobre:

- (a) introdução de um "screening" de Debye no cálculo dos alargamentos e deslocamentos provocados pelas colisões eletrônicas;
- (b) influência da trajetória nos resultados, considerando que o elétron ao se aproximar do átomo sofre um desvio de sua trajetória, inicialmente considerada retilínea;
- (c) contribuição iônica no alargamento e deslocamento, utilizando o tratamento convergente para esse cálculo, assim como outras aproximações existentes na literatura.

Em princípio podemos dizer que essas modificações introduzem correções que no máximo são da ordem de 10% a 15% nos alargamentos e deslocamentos. Apesar disso a sua introdução

poderá mostrar uma melhora dos resultados, de uma maneira geral, ou ficar estabelecido que não são importantes e portanto desnecessária a sua introdução.

A seguir passamos a efetuar uma análise levando em conta os efeitos citados.

II.3. "SCREENING" DE DEBYE

A presença de "screening" no plasma e sua descrição é um assunto complicado e requer uma análise sob o ponto de vista da teoria cinética do plasma, que leva em conta na função de correlação para os campos elétricos do mesmo⁽¹⁹⁾ os efeitos dos perturbadores, elétrons e íons, e suas correlações.

Por isso introdução do "screening" de Debye no cálculo de alargamento e deslocamento de linhas espectrais emitidas em um plasma em equilíbrio é um ponto bastante controvertido na literatura, tendo sido abordado através de diferentes tratamentos^(19,49).

Uma forma de introduzirmos o "screening" de Debye no formalismo convergente é por meio de um corte nas integrações no parâmetro de impacto nas equações (I.4-1) e (I.4-2) para alargamento e deslocamento. Este corte significa considerar que apenas as colisões, que contribuem para perturbar os níveis de energia envolvidos na transição, são aquelas que ocorrem dentro da esfera de Debye de raio ρ_D definido por

$$\rho_D = (kT/4\pi Ne^2)^{1/2}$$

quando não consideramos correlações entre os perturbadores; on-

de N é a densidade eletrônica do plasma.

Usando esse procedimento calculamos os alargamentos e deslocamentos para o conjunto de linhas estudadas, obtendo os resultados das tabelas (II.3-1) e (II.3-2).

Uma análise comparativa entre os resultados obtidos com "screening", tabelas (II.3-1) e (II.3-2), e sem "screening" de Debye, tabelas (II.2-1) e (II.2-2), mostra que a correção introduzida nos alargamentos e deslocamentos é pequena e no sentido de diminuí-los.

Como o alargamento depende principalmente das colisões fortes e o deslocamento das colisões fracas é bastante razoável o resultado obtido pois mostra que quando introduzimos o "screening" de Debye o alargamento praticamente não sofre variações, enquanto que o deslocamento tem seus valores alterados de até 6%.

A introdução ou não de um "screening" afeta apenas a contribuição de colisões de parâmetros de impacto maiores que o raio de Debye isto é colisões fracas. Assim, observando as funções que descrevem o alargamento e deslocamento, verificamos que para $b > \rho_D$ a função para o alargamento é praticamente nula, enquanto que para o deslocamento ela decresce menos rapidamente definindo a importância da contribuição das colisões fracas nesse caso.

Para melhor visualização da ordem de grandeza desse efeito foram escolhidas duas linhas 5016 Å e 5876 Å para as quais calculamos os alargamentos e deslocamentos com e sem o efeito do "screening" de Debye, para o intervalo de densidade eletrônica entre 10^{15} cm^{-3} a 10^{18} cm^{-3} à temperatura de 20 000 K.

λ (Å)	N (10^{16} cm^{-3})	T (10^3 K)	ALARGAMENTO COM "SCREENING" DE DEBYE		
			ω_e (Å)	ω_i (Å)	$\omega(\text{Å})$ ($\chi^2 = .56$)
7281	1.03	20.9	.36	.038	.80
7065	1.03	20.9	.21	.018	.46
6678	1.03	20.9	.32	.081	.80
5876	16.0	49.0	1.89	.41	4.60
	13.0	43.0	1.57	.31	3.77
	4.1	20.0	.54	.071	1.23
	2.0	18.0	.27	.030	.60
	1.03	20.9	.14	.014	.30
5048	3.2	30.0	2.12	.50	5.24
	2.0	18.0	1.29	.26	3.11
	1.03	20.9	.67	.12	1.59
5016	3.2	30.0	.92	.32	2.48
	17.0	24.0	4.58	2.19	13.54
	4.1	20.0	1.24	.40	3.28
	2.0	18.0	.63	.17	1.59
	1.03	20.9	.32	.079	.80
4713	3.2	30.0	1.25	.24	2.98
	13.0	20.0	4.90	1.14	12.09
	4.1	20.0	1.55	.29	3.68
	2.0	18.0	.75	.12	1.74
	1.03	20.9	.39	.057	.90
4121	3.02	30.0	3.23	.83	8.12
	2.9	18.0	2.81	.67	6.97
	1.03	20.9	1.01	.20	2.43
3965	1.4	18.0	1.05	.52	3.15
	1.03	20.9	.77	.37	2.28
3889	3.2	30.0	.31	.044	.72
	15.0	26.0	1.47	.27	3.48
	4.1	20.0	.40	.055	.92
	2.0	18.0	.20	.023	.44
	1.03	20.9	.10	.011	.22
3188	15.0	29.0	4.27	1.51	11.55
	4.1	20.0	1.21	.30	3.04
	1.7	18.0	.51	.10	1.22
	1.03	20.9	.31	.059	.73
2945	1.03	20.9	.76	.23	1.99

Tabela II.3-1 - Alargamento eletrônico, iônico e total considerando "screening" de Debye.

λ (Å)	N (10^{16} cm^{-3})	T (10^3 K)	DESLOCAMENTO		
			COM "SCREENING" DE DEBYE		
			$s_e(\text{Å})$	$s_i(\text{Å})$	$s(\text{Å})$ ($\chi^2 = .26$)
7281	1.03	20.9	.32	.043	.37
7065	1.03	20.9	.22	.020	.24
6678	1.03	20.9	.11	.093	.20
5876	16.0	49.0	-.69	-.47	-1.16
	13.0	43.0	-.61	-.36	-.97
	4.1	20.0	-.28	-.081	-.37
	2.0	18.0	-.15	-.034	-.18
	1.03	20.9	-.074	-.016	-.090
5048	3.2	30.0	1.48	.57	2.06
	2.0	18.0	1.05	.30	1.35
	1.03	20.9	.54	.14	.68
5016	3.2	30.0	-.38	-.36	-.75
	17.0	24.0	-1.60	-2.50	-4.10
	4.1	20.0	-.52	-.46	-.99
	2.0	18.0	-.29	-.19	-.49
	1.03	20.9	-.15	-0.90	-.24
4713	3.2	30.0	1.02	.27	1.29
	13.0	20.0	4.08	1.31	5.39
	4.1	20.0	1.38	.34	1.71
	2.0	18.0	.70	.14	.84
	1.03	20.9	.36	.065	.42
4121	3.2	30.0	2.36	.95	3.31
	2.9	18.0	2.32	.77	3.10
	1.03	20.9	.86	.23	1.09
3965	1.4	18.0	-.37	-.60	-.97
	1.03	20.9	-.28	-.42	-.70
3889	3.2	30.0	.071	.050	.12
	15.0	26.0	.30	.31	.61
	4.1	20.0	.11	.063	.18
	2.0	18.0	.063	.026	.089
	1.03	20.9	.030	.012	.043
3188	15.0	29.0	.88	1.72	2.60
	4.1	20.0	.37	.35	.73
	1.7	18.0	.19	.12	.31
	1.03	20.9	.11	.067	.18
2945	1.03	20.9	.17	.26	.43

Tabela II-3-2 - Deslocamento eletrônico, iônico e total considerando "screening" de Debye.

Acima desse limite de densidade eletrônica não foram realizados cálculos, pois começa a aparecer contribuição de linhas proibidas.

A escolha dessas duas linhas representa, pelo menos, observando-se os resultados das tabelas (II.2-1), (II.2-2) e (II.3-1), (II.3-2) para 5016 Å um dos casos em que observamos mais contribuição desse efeito e para 5876 Å uma contribuição muito pequena para o alargamento e significativo para o deslocamento.

As figuras (II.3-1) e (II.3-2) mostram os resultados obtidos para essas linhas, onde observamos que o alargamento é praticamente insensível a consideração do "screening" até 10^{17} cm^{-3} , enquanto que para o deslocamento já são observadas variações significativas. Acima dessa densidade também o alargamento da linha 5016 Å começa a ser sensível ao efeito de "screening", enquanto que para 5876 Å é desprezível.

As variações percentuais observadas no alargamento e deslocamentos foram 0% a 2% para a linha 5876 Å e 4% a 6% para a linha 5016 Å.

Uma comparação entre os resultados obtidos com e sem o "screening" foi realizada, para verificar qual o melhor acordo com os resultados experimentais, baseada na média dos desvios quadráticos para os alargamentos e deslocamentos. Os valores obtidos foram

$$\chi_{\omega}^2 = .56 \quad \chi_S^2 = .23 \quad \text{sem "screening"}$$

$$\chi_{\omega}^2 = .56 \quad \chi_S^2 = .26 \quad \text{com "screening"}$$

Figura II.3.1- Alargamento e deslocamento com e sem "screening".

Figura II.3-2 - Alargamento e deslocamento com e sem "screening".

Portanto, a partir dos resultados encontrados neste parágrafo, podemos concluir que primeiro o "screening" de Debye não tem papel relevante nos cálculos de alargamento e deslocamento e segundo, observando os valores de χ_{ω}^2 e χ_S^2 , o melhor acordo com os resultados experimentais ocorre quando não consideramos o efeito de "screening".

II.4. INFLUÊNCIA DA TRAJETÓRIA ELETRÔNICA NO CÁLCULO DE ALARGAMENTOS E DESLOCAMENTOS

As equações obtidas para o alargamento e deslocamento eletrônicas supõem trajetória retilínea para o elétron com parâmetro de impacto b e velocidade v .

Esta é a hipótese mais simplificada que pode ser feita a respeito da trajetória eletrônica.

A introdução de trajetória não retilínea tem sido feito em diversas teorias por meio de diferentes informes^(21,22,53,54,55) e os resultados encontrados mostram que os efeitos introduzidos são da ordem de no máximo 15%.

Uma avaliação do efeito de trajetória nos alargamentos e deslocamentos, como estudo da teoria convergente é feita neste parágrafo, onde adotamos o tratamento feito por Robert e Bonamy⁽⁵⁴⁾ e abandonamos em princípio outros tratamentos que incluem expressões explícitas de trajetória, que levam a desenvolvimentos muito elaborados.

Assim, não vamos investir num cálculo muito sofisticado se verificarmos que as correções obtidas num formalismo mais simples são desprezíveis.

Tratamento de Robert e Bonamy para trajetória eletrônica

Robert e Bonamy⁽⁵⁴⁾ desenvolveram um modelo com trajetória parabólica determinada pela parte isotrópica do potencial de interação entre o emissor e perturbador, para introduzir em sua teoria semi-clássica para determinação de alargamento e deslocamento.

Em nosso trabalho vamos considerar o mesmo modelo de trajetória de Robert e Bonamy para descrever o percurso eletrônico durante a colisão com o átomo de hélio neutro.

Este tratamento consiste em considerar a influência do potencial de interação entre o elétron e emissor no processo de colisão, provocando um desvio na trajetória aproximando-a do emissor (potencial atrativo).

Tipping e Herman⁽⁵³⁾ já haviam desenvolvido um modelo em que consideravam o potencial de interação $V_0(r)$ no processo de colisão, levando-o em conta quando escreviam as equações de conservação de energia e momento angular, aplicando-as para determinar a distância de máxima aproximação entre o perturbador e emissor, ou seja

$$\frac{1}{2} mv^2 = \frac{1}{2} mv_c^2 + V_0(r_c)$$

$$vb = v_c r_c$$

onde v_c e r_c definem a velocidade e posição do elétron no ponto de máxima aproximação, sendo r_c determinado pela equação

$$\left(\frac{b}{r_c}\right)^2 = 1 - \frac{2V_0(r_c)}{mv^2}$$

Desse tratamento resulta que o elétron descreve na região de interesse uma trajetória retilínea definida pelos parâmetros r_c e v_c , não sendo considerada a força que atua sobre o perturbador na região de máxima aproximação, originada pelo gradiente do potencial $V_0(r)$.

Robert e Bonamy fazem uma modificação desse tratamento introduzindo essa força na equação de trajetória.

O potencial de interação é calculado a partir da expressão multipolar do potencial criado pelo átomo de hélio neutro mais os termos correspondentes a expansão do potencial induzido devido a presença do elétron na vizinhança do átomo de hélio, ou seja

$$V(r) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{r^{\ell+1}} \langle i | r^{\ell} \rho_{\ell}(\cos\theta) | r \rangle - \frac{\alpha}{2r^4}$$

onde α é a polarizabilidade efetiva do átomo, dada por⁽⁵³⁾

$$\alpha = 2 \sum_n \frac{|\langle i | r | n \rangle|^2}{3(E_n - E_i)} \quad \text{onde} \quad E_n - E_i > \frac{1}{2} m v^2$$

Como para átomo de hélio apenas os termos $\ell \geq 2$ vão contribuir na expansão multipolar do potencial e estes termos são muito pequenos, podemos escrever o potencial de interação apenas como sendo devido a polarizabilidade efetiva, isto é

$$V(r) = - \frac{\alpha}{2r^4}$$

Portanto, podemos determinar a força F_c que atua sobre o elétron, como

$$\vec{F}_c = 2 \frac{\alpha}{r_c^6} \vec{r}_c$$

Introduzindo esses resultados na equação da posição, podemos calcular o módulo do mesmo como

$$[\vec{r}(t)]^2 \approx r_c^2 + v_c^2 t^2 + \frac{\vec{r}_c \cdot \vec{F}_c}{m} t^2$$

onde foram desprezados termos de ordem superior a t^2 , pois os tempos de interesse são muito pequenos.

Chamando

$$v_c'^2 = v_c^2 + \frac{\vec{r}_c \cdot \vec{F}_c}{m}$$

temos

$$[r(t)]^2 \approx r_c^2 + v_c'^2 t^2$$

Introduzindo essa equação na expressão do potencial dipolar temos:

$$V(t) = -e \vec{d} \cdot \frac{(\vec{r}_c + \vec{v}_c t + \frac{1}{2} \frac{\vec{F}_c}{m} t^2)}{(r_c^2 + v_c'^2 t^2)^{3/2}}$$

Considerando, por simplicidade, o movimento do elétron e o momento de dipolo no plano yz temos:

$$V(t) = -e \frac{(\vec{T}_1^0 \vec{k} + \frac{\sqrt{2}}{2} i (\vec{T}_1^1 + \vec{T}_1^{-1}) \vec{j}) \cdot (\vec{r}_c \vec{k} + v_c t \vec{j} - \frac{F_c}{2m} t^2 \vec{k})}{(r_c^2 + v_c'^2 t^2)^{3/2}}$$

Portanto $G(\omega)$ fica

$$G(\omega) = -\frac{e}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\left[\frac{\sqrt{2}}{2} i (\vec{T}_1^1 + \vec{T}_1^{-1}) v_c t + \vec{T}_1^0 \left(r_c - \frac{F_c}{2m} t^2 \right) \right] e^{i\omega t}}{(r_c^2 + v_c'^2 t^2)^{3/2}}$$

Integrando a equação, utilizando os resultados do Apêndice I, temos:

$$G(\omega) = -\frac{e}{2\pi} \frac{2\omega}{v_c'^2} \left[\vec{T}_1^0 K_1\left(\frac{\omega r_c}{v_c'}\right) - \frac{\sqrt{2}}{2} (\vec{T}_1^1 + \vec{T}_1^{-1}) K_0\left(\frac{\omega r_c}{v_c'}\right) \frac{v_c}{v_c'} \right] +$$

$$\frac{e}{2\pi} \frac{F_c}{m v_c'^3} \vec{T}_1^0 \left[\frac{\omega r_c}{v_c'} K_1\left(\frac{\omega r_c}{v_c'}\right) + K_0\left(\frac{\omega r_c}{v_c'}\right) \right]$$

ou seja, introduzindo a variável $z' = \frac{\omega r_c}{v_c'}$ temos

$$G(\omega) = G_1'(z') \vec{T}_1^0 + G_2'(z') \frac{\sqrt{2}}{2} i (\vec{T}_1^1 + \vec{T}_1^{-1})$$

onde

$$\beta = \left[\frac{2m v_c'^2}{r_c F_c} - 1 \right] \text{ e } \theta = F_c / m v_c'$$

$$G_1'(z') = -\frac{e \theta}{2\pi v_c'^2} \left[\beta z' K_1(z') - K_0(z') \right]$$

$$G_2'(z') = -i \frac{e v_c}{\pi r_c v_c'^2} z' K_0(z')$$

Comparando-se $G(\omega)$ acima com a equação (I.4-5) verificamos que as duas tem a mesma forma.

Assim podemos utilizar os resultados obtidos na seção B do parágrafo (I.4), para calcular as funções r_K e ϕ_K definidos pelas equações (I.3-7) e (I.3-8).

Portanto temos:

$$r_K = \frac{1}{3} \left(\frac{ea_0}{\hbar v_c} \right)^2 \sum_{n_k j_k} |\langle n_{\alpha} j_{\alpha} || T_1^* || n_k j_k \rangle|^2 A'(z')$$

e

$$\phi_K = \frac{1}{6\pi} \left(\frac{ea_0}{\hbar v_c} \right)^2 \sum'_{n_k j_k} |\langle n_{\alpha} j_{\alpha} || T_1^* || n_k j_k \rangle|^2 B'(z')$$

onde

$$A'(z') = \left[\theta^2 + \left(\frac{2z'v_c}{r_c} \right)^2 \right] K_0^2(z') + \theta^2 \beta z' \left[\beta z' K_1^2(z') - 2K_1(z')k_0(z') \right]$$

$$B'(z') = P \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \frac{A'(z')}{z'_{nk} - z'}$$

Como podemos ver a inclusão de um desvio na trajetória do elétron, provocado pela força atrativa $\vec{F}_c$ devido ao potencial de polarização, leva a cálculos extremamente elaborados.

Podemos efetuar uma simplificação não considerando a força atrativa $\vec{F}_c$, isto é, recaindo no tratamento de Tipping e Herman para uma avaliação da ordem de grandeza do efeito pro-

vocado no alargamento e deslocamento devido a introdução do potencial de polarização.

Essa aproximação é válida quando estamos considerando colisões tais que $b < r_c$ ⁽⁵⁴⁾.

Nesse caso podemos adotar as mesmas equações colocando $F_c=0$, resultando para as funções $G_1(z')$ e $G_2(z')$ as seguintes expressões:

$$G_1(z_c) = - \frac{e}{\pi r_c v_c} z K_1(z_c)$$

$$G_2(z_c) = - i \frac{e}{\pi r_c v_c} z K_0(z_c)$$

onde

$$z_c = \frac{\omega r_c}{v_c}$$

A função $G(\omega)$ fica então determinada, nesse caso, como:

$$G(\omega) = G_1(z_c) T_1^0 + G_2(z_c) \frac{\sqrt{2}}{2} i (T_1^1 + T_1^{-1})$$

Comparando-se a expressão obtida acima para $G(\omega)$ com a expressão (I.4-5), observamos que as funções são as mesmas, mas com variáveis corrigidas, isto é, r_c e v_c no lugar de b e v .

Portanto as expressões para o alargamento e deslocamento, nessa aproximação, são formalmente as mesmas que obtidas para trajetória retilínea, ou seja

$$\omega_e = N \int_0^\infty dv \, v \, F(v) \int_0^\infty db \, b \left[1 - \cos [\phi_{IF}(r_c, v_c)] \right] e^{-\frac{1}{2} \Gamma_{IF}(r_c, v_c)}$$

$$S = - N \int_0^\infty dv \, v \, F(v) \int_0^\infty db \, b \, \sin [\phi_{IF}(r_c, v_c)] e^{-\frac{1}{2} \Gamma_{IF}(r_c, v_c)}$$

onde

$$\Gamma_{IF} = \Gamma_I + \Gamma_F$$

$$\phi_{IF} = \phi_F - \phi_I$$

se

$$K = I \quad \text{ou} \quad F$$

$$\Gamma_K = \frac{4}{3} \left(\frac{e^2 a_0}{\hbar r_c v_c} \right)^2 \sum_{n, a_{\ell'}} K n^a_{\ell} \left| \langle T_1^* | n, a_{\ell'} \rangle \right|^2 A(z_c)$$

$$\phi_K = \frac{2}{3} \left(\frac{e^2 a_0}{\hbar r_c v_c} \right)^2 \sum_{n, a_{\ell'}} | \langle n^a | T_2^* | n, a_{\ell'} \rangle |^2 B(z_c)$$

onde

$$A(z_c) = z_c^2 \left[K_1^2(z_c) + K_0^2(z_0) \right]$$

$$B(z_c) = \pi z_c^2 \left[K_0(z_c) I_0(z_c) - K_1(z_c) I_1(z_c) \right].$$

Uma análise dessas equações mostra que quando a polarizabilidade efetiva do átomo é nula $\alpha=0$, as expressões acima reduzem-se no caso em que não há desvio da trajetória inicial do elétron.

A partir dessas aproximações foram calculados os alargamentos e deslocamentos da linha 4713 Å.

Avaliação da contribuição da trajetória para linha 4713 Å

O efeito da trajetória no alargamento e deslocamento depende da polarizabilidade efetiva do átomo. Quanto maior for a polarizabilidade maior é a aproximação do elétron em relação ao átomo e portanto maior o módulo da velocidade na posição de máxima aproximação. Assim o argumento das funções que descrevem os alargamentos e deslocamentos, dados por $\frac{\omega r_c}{v_c}$, podem sofrer variações significativas.

Assim escolhemos para a realização dos cálculos a linha 4713 Å que possui de acordo com o critério de Dimitrijevic⁽⁵⁵⁾ o máximo valor de polarizabilidade $\alpha = 1,003 \times 10^{-20} \text{ cm}^3$.

Na tabela II.4-1 são vistos os resultados obtidos utilizando o tratamento de Tipping e Herman, justamente com os valores calculados com trajetória retilínea normal, para densidades eletrônicas entre 10^{16} e 10^{18} cm^{-3} e temperaturas entre 5000 K e 40000 K.

Os resultados encontrados mostram que:

- (a) o maior desvio observado é de 7,9% para o deslocamento e 1,5% para o alargamento, ocorrendo esse máximo para a menor temperatura 5000 K;
- (b) o comportamento do alargamento e deslocamento é regular com a temperatura, isto é observa-se um aumento no alargamento de 1,5% a 0,4% e uma diminuição no deslocamento de 7,9% a 3,4%, quando a temperatura passa de 5000 K a 40000 K.

N (10^{17} cm^{-3})	T (10^3 K)	ALARGAMENTOS E DESLOCAMENTOS			
		TRAJETÓRIA COM DESVIO		TRAJETÓRIA	RETILÍNEA
		$\omega(\text{\AA})$	$s(\text{\AA})$	$\omega(\text{\AA})$	$s(\text{\AA})$
.10	5.0	.333	.397	.328	.431
	10.0	.389	.416	.385	.441
	20.0	.434	.405	.432	.423
	40.0	.459	.370	.456	.383
.50	5.0	1.66	1.99	1.64	2.16
	10.0	1.95	2.08	1.93	2.21
	20.0	2.17	2.02	2.16	2.12
	40.0	2.30	1.85	2.28	1.92
1.0	5.0	3.33	3.97	3.28	4.31
	10.0	3.89	4.16	3.85	4.41
	20.0	4.34	4.05	4.32	4.23
	40.0	4.59	3.70	4.56	3.83
10.0	5.0	33.3	39.7	32.5	43.1
	10.0	38.9	41.6	38.5	44.1
	20.0	43.4	40.4	43.2	42.3
	40.0	45.9	37.0	45.6	38.3

Tabela II.4-1 - Efeito de trajetória sobre alargamento e deslocamento.

Esse fato mostra que o deslocamento e o parâmetro mais sensível à introdução de uma modificação na trajetória, enquanto que o alargamento praticamente não sofre alterações.

Como a linha estudada é a que possui maior polarizabilidade efetiva, fica portanto estabelecido o limite máximo de variação que pode ocorrer nos alargamentos e deslocamentos das linhas espectrais do hélio, no tratamento de trajetória segundo Tipping e Herman.

Para o conjunto de linhas estudadas, que tem temperaturas superiores a 18000 K, o efeito de se considerar esse tipo de trajetória é no máximo de 4,5% para os deslocamentos e 1% para os alargamentos.

Esses resultados mostram que as correções introduzidas são muito pequenas e que uma sofisticação de cálculo não se justifica no presente trabalho. Assim não levaremos adiante os cálculos que consideram $F_c \neq 0$, cujas equações apresentamos neste parágrafo.

II.5. CÁLCULO DA CONTRIBUIÇÃO DEVIDO AOS ÍONS NO ALARGAMENTO E DESLOCAMENTO

No parágrafo I.6 discutimos os diferentes tratamentos para levar em conta a contribuição das colisões iônicas e suas condições de validade.

Adotamos até esse ponto em nossos cálculos a aproximação quase estática de Griem⁽²⁰⁾ para tratar as colisões iônicas.

Como vimos no parágrafo (II.2) a condição de validade de utilização da aproximação quase estática não está satisfeita rigorosamente.

Assim neste parágrafo realizamos um estudo sobre as diferentes aproximações, calculando a contribuição iônica para o alargamento e deslocamento da linha, para o mesmo conjunto de linhas espectrais do hélio neutro dos cálculos anteriores e fazemos também uma discussão sobre as condições de validade e melhor aproximação a ser utilizada.

O tratamento convergente desenvolvido no capítulo I é aplicado para o cálculo da contribuição das colisões iônicas, onde supomos que os íons são partículas estatisticamente independentes no plasma e que seu efeito seja aditivo.

Assim o alargamento e deslocamento da linha é dado como a soma da contribuição eletrônica e iônica.

Como sabemos a forma de linha resultante na aproximação de impacto é uma lorentziana. Nesse caso tanto a contribuição eletrônica como iônica são, então, descritos por lorentzianas.

Como os nossos cálculos referem-se a obtenção de alargamento e deslocamento, podemos dizer que para a região do pico e intermediária da linha, esta pode ser aproximada por uma lorentziana que é a convolução dos efeitos eletrônicos e iônicos e, daí, utilizarmos as equações (I.4-1) e (I.4-2) para a obtenção também do efeito iônico.

Os alargamentos e deslocamentos totais das linhas foram calculados, usando a teoria semi clássica convergente para obter os alargamentos e deslocamentos eletrônicos e as três

diferentes aproximações para calcular a contribuição eletrônica, a saber:

- (a) aproximação quase estática do Griem, dada pelas equações (I.6-1) e (I.6-2);
- (b) aproximação adiabática de Barnard et al, equações (I.6-7) e (I.6-8);
- (c) a mesma aproximação de impacto convergente usada nos cálculos de ω_e e S_e , equações (I.4-1) e (I.4-2).

Nas tabelas (II.5-1) e (II.5-2) encontram-se os alargamentos e deslocamentos devido as colisões iônicas, calculadas utilizando as aproximações acima.

Os alargamentos e deslocamentos totais encontram-se nas tabelas (II.5-3) e (II.5-4), juntamente com o parâmetro σ e resultados experimentais.

Como podemos observar o parâmetro σ varia desde .15 até 5.42, mas apesar disso os resultados para ω e S são da ordem de grandeza dos valores experimentais.

Também os resultados obtidos pela teoria convergente mostram ser tão razoáveis quanto os resultados obtidos pelas outras duas aproximações, apesar de não estar satisfeita a condição $\sigma \ll 1$.

Calculando-se os valores de $\chi^2 = \sum_i (x_i - x_{i \text{ exp}})^2 / N$ para os alargamentos e deslocamentos nas diferentes aproximações, que podem ser vistos nas tabelas (II.5-3) e (II.5-4), concluímos que o melhor ajuste é feito quando utilizamos a aproximação quase estática de Griem⁽²⁰⁾.

λ (Å)	N (10^{16} cm^{-3})	T (10^3 K)	ALARGAMENTOS IÔNICOS		
			GBK0 Quase Estática	Barnard et al Adiabática	Aproximação de Impacto
7281	1.03	20.9	.038	.080	.078
7065	1.03	20.9	.020	.050	.045
6678	1.03	20.9	.081	.15	.15
5876	16.0	49.0	.41	.63	.68
	13.0	43.0	.31	.50	.54
	4.1	20.0	.071	.15	.15
	2.0	18.0	.030	.070	.072
	1.03	20.9	.014	.030	.038
5048	3.2	30.0	.50	.50	.49
	2.0	18.0	.26	.29	.28
	1.03	20.9	.12	.16	.15
5016	3.2	30.0	.32	.41	.42
	17.0	24.0	2.26	2.03	2.14
	4.1	20.0	.41	.48	.50
	2.0	18.0	.17	.23	.24
	1.03	20.9	.079	.13	.13
4713	3.2	30.0	.23	.27	.27
	13.0	20.0	1.14	1.07	1.05
	4.1	20.0	.29	.34	.33
	2.0	18.0	.12	.15	.16
	1.03	20.9	.057	.090	.083
4121	3.2	30.0	.80	.60	.72
	2.9	18.0	.67	.51	.60
	1.03	20.9	.19	.20	.22
3965	1.4	18.0	.54	.46	.45
	1.03	20.9	.38	.35	.34
3889	3.2	30.0	.044	.080	.069
	15.0	26.0	.27	.35	.32
	4.1	20.0	.055	.095	.083
	2.0	18.0	.023	.040	.040
	1.03	20.9	.011	.010	.021
3188	15.0	29.0	1.52	1.06	1.06
	4.1	20.0	.30	.28	.27
	1.7	18.0	.10	.12	.11
	1.03	20.9	.059	.075	.069
2945	1.03	20.9	.23	.18	.17

Tabela II.5-1 - Alargamentos iônicos.

λ (Å)	N (10^{16} cm^{-3})	T (10^3 K)	DESLOCAMENTOS IÔNICOS		
			GBKO Quase Estática	Barnard et al. Adiabática	Aproximação de Impacto
7281	1.03	20.9	.043	.090	.13
7065	1.03	20.9	.020	.050	.077
6678	1.03	20.9	.093	.19	.26
5876	16.0	49.0	-.47	-.65	-1.20
	13.0	43.0	-.36	-.51	-.94
	4.1	20.0	-.081	-.13	-.26
	2.0	18.0	-.034	-.10	-.12
	1.03	20.9	-.016	-.043	-.066
5048	3.2	30.0	.57	.40	.85
	2.0	18.0	.29	.17	.49
	1.03	20.9	.14	.14	.26
5016	3.2	30.0	-.37	-.42	-.72
	17.0	24.0	-2.58	-.50	-3.69
	4.1	20.0	-.47	-.32	-.86
	2.0	18.0	-.20	-.20	-.41
	1.03	20.9	-.090	-.090	-.22
4713	3.2	30.0	.27	.28	.47
	13.0	20.0	1.31	.17	1.81
	4.1	20.0	.34	.16	.57
	2.0	18.0	.14	.11	.27
	1.03	20.9	.065	.080	.14
4121	3.2	30.0	.97	.37	1.24
	2.9	18.0	.77	.020	1.03
	1.03	20.9	.22	.13	.38
3965	1.4	18.0	-.61	-.29	-.77
	1.03	20.9	-.43	-.28	-.58
3889	3.2	30.0	.050	.080	.12
	15.0	26.0	.31	.18	.55
	4.1	20.0	.063	.070	.14
	2.0	18.0	.026	.042	.069
	1.03	20.9	.012	.027	.036
3188	15.0	29.0	1.73	.020	1.82
	4.1	20.0	.35	.080	.47
	1.7	18.0	.12	.070	.19
	1.03	20.9	.067	.060	.12
2945	1.03	20.9	.26	.10	.29

Tabela II.5-2 - Deslocamentos iônicos.

λ ($\text{\AA}$)	N (10^{16}cm^{-3})	T (10^3K)	σ	A L A R G A M E N T O			
				C A L C U L A D O			EXPERIMENTAL
				ELETRON - T. CONVERGENTE			
				GRIEM ($\chi^2_{\omega} = 0.56$)	BARNARD ($\chi^2_{\omega} = 0.58$)	IMPACTO ($\chi^2_{\omega} = .82$)	
7281	1.03	20.9	0.25	0.80	0.88	0.88	0.88 K
7065	1.03	20.9	0.15	0.46	0.51	0.52	0.47 K
6678	1.93	20.9	0.26	0.80	0.94	0.94	0.98 K
5876	16.0	49.0	0.52	4.60	5.03	5.14	5.5 B
	13.0	43.0	0.49	3.99	4.13	2.24	4.9 B
	4.1	20.0	0.37	1.24	1.37	1.39	4.9 B
	2.0	18.0	0.24	0.60	0.67	0.68	
	1.03	20.9	0.14	0.30	0.34	0.35	0.39 K
5048	3.2	30.0	1.71	5.20	5.22	5.22	4.6 W
	2.0	18.0	1.58	3.09	3.15	3.16	3.4 D
	1.03	20.9	0.95	1.59	1.65	1.65	1.68 K
5016	3.2	30.0	0.78	2.55	2.72	2.74	1.9 W
	17.0	24.0	2.75	14.99	14.60	14.82	13.0 B
	4.1	20.0	1.19	3.39	3.54	3.58	3.8 D
	2.0	18.0	0.79	1.61	1.74	1.75	1.8 D
	1.03	20.9	0.46	0.80	0.89	0.90	0.86 K
4713	3.2	30.0	1.16	2.96	3.04	3.06	2.9 W
	13.0	20.0	3.51	12.11	11.94	11.90	14.0 B
	4.1	20.0	1.63	3.69	3.77	3.76	4.6 D
	2.0	18.0	1.04	1.73	1.80	1.81	2.05 D
	1.03	20.9	0.63	0.89	0.95	0.95	0.95 K
4121	3.2	30.0	3.89	8.06	7.66	7.90	6.2 W
	2.9	18.0	4.54	6.93	6.64	6.82	7.0 D
	1.03	20.9	2.06	2.32	2.41	2.47	2.22 K
3965	1.4	18.0	2.54	3.34	3.18	3.17	4.1 D
	1.03	20.9	1.87	2.38	2.31	2.32	2.30 K
3889	3.2	30.0	0.43	0.72	0.78	0.77	0.73 W
	15.0	26.0	1.30	3.49	3.64	3.58	4.5 B
	4.1	20.0	0.62	0.92	0.99	0.97	1.25 D
	2.0	18.0	0.40	0.44	0.48	0.47	0.55 D
	1.03	20.9	0.24	0.22	0.25	0.25	0.24 K
3188	15.0	29.0	5.42	11.79	10.93	10.92	13.4 B
	4.1	20.0	2.78	3.03	2.98	2.96	3.0 D
	1.7	18.0	1.62	1.21	1.23	1.26	1.35 D
	1.03	20.9	1.08	0.73	0.75	0.75	0.78 K
2945	1.03	20.9	3.20	1.99	1.90	1.87	2.0 K

Tabela II.5-3 - Alargamentos totais

λ (Å)	N (10^6 cm^{-3})	T (10^3 K)	σ	D E S L O C A M E N T O			
				C A L C U L A D O			EXPERIMENTAL
				ELETRON - T. CONVERGENTE			
				GRIEM ($\chi_S^2 = 0.23$)	BARNARD ($\chi_S^2 = 0.37$)	IMPACTO ($\chi_S^2 = 0.50$)	
7281	1.03	20.9	0.25	0.38	0.46	0.47	+0.473 ^K
7065	1.03	20.9	0.15	0.24	0.29	0.30	+0.302 ^K
6678	1.03	20.9	0.26	0.23	0.37	0.40	+0.355 ^K
5876	16.0	49.0	0.52	-1.30	-1.77	-2.04	+0.7 ^B
	13.0	43.0	0.49	-1.08	-1.47	-1.66	0.0 ^B
	4.1	20.0	0.37	-0.39	-0.52	-0.57	-0.30 ^D
	2.0	18.0	0.24	-0.19	-0.26	-0.28	-0.10 ^D
	1.03	20.9	0.14	-0.093	-0.13	-0.14	-0.074 ^K
5048	3.2	30.0	1.71	2.21	2.34	2.47	+2.0 ^W
	2.0	18.0	1.58	1.44	1.53	1.62	+0.90 ^D
	1.03	20.9	0.95	0.71	0.83	0.83	+0.891 ^K
5016	3.2	30.0	0.78	-0.87	-1.08	-1.22	-0.55 ^W
	17.0	24.0	2.75	-5.47	-4.72	-6.49	-4.8 ^B
	4.1	20.0	1.19	-1.19	-1.34	-1.59	-0.85 ^D
	2.0	18.0	0.79	-0.57	-0.65	-0.78	-0.40 ^D
	1.03	20.9	0.46	-0.27	-0.36	-0.40	-0.283 ^K
4713	3.2	30.0	1.16	1.36	1.49	1.56	+1.4 ^W
	13.0	20.0	3.51	6.02	5.77	6.53	+6.0 ^B
	4.1	20.0	1.65	1.82	1.93	2.06	+2.3 ^D
	2.0	18.0	1.04	0.88	0.96	1.01	+1.0 ^D
	1.03	20.9	0.63	0.44	0.50	0.51	+0.538 ^K
4121	3.2	30.0	3.89	3.63	3.47	3.90	+2.8 ^W
	2.9	18.0	4.54	3.43	3.23	3.69	
	1.03	20.9	2.06	1.14	1.19	1.30	+1.124 ^K
3965	1.4	18.0	2.54	-1.21	-1.10	-1.36	-0.73 ^D
	1.03	20.9	1.87	-0.84	-0.84	-0.99	-0.771 ^K
3889	3.2	30.0	0.43	0.13	0.20	0.20	+0.3 ^B
	15.0	26.0	1.30	0.74	0.88	0.96	+1.2 ^B
	4.1	20.0	0.62	0.19	0.26	0.28	+0.25 ^D
	2.0	18.0	0.40	0.096	0.14	0.14	+0.10 ^D
	1.03	20.9	0.24	0.045	0.069	0.069	+0.080 ^K
3188	15.0	29.0	5.42	3.42	2.65	3.49	+4.1 ^B
	4.1	20.0	2.78	0.86	0.84	0.99	+0.9 ^D
	1.7	18.0	1.62	0.35	0.38	0.41	+0.30 ^D
	1.03	20.9	1.08	0.20	0.23	0.25	+0.258 ^K
2945	1.03	20.9	3.20	0.50	0.47	0.53	+0.683 ^K

Tabela II.5-4 - Deslocamentos totais

Consideramos também uma forma diferente e mais rigorosa de descrever os resultados levando em conta as condições de validade das diferentes aproximações, isto é quando $\sigma > 1$ usamos a teoria de Griem⁽²⁰⁾ e para $\sigma \leq 1$ utilizamos duas possibilidades: (1) apenas aproximação quase estática de Barnard et al e (2) apenas a aproximação de impacto.

Nessas condições obtivemos para χ^2 os seguintes resultados

$$\chi_{\omega}^2 = .54 \quad \chi_S^2 = .27 \quad \text{para o caso (1)}$$

$$\chi_{\omega}^2 = .73 \quad \chi_S^2 = .39 \quad \text{para o caso (2)}$$

Assim esses resultados mostram que o melhor ajuste aos resultados experimentais ainda é utilizando-se somente a aproximação quase estática de Griem⁽²⁰⁾ para $\sigma > 1$ e $\sigma \leq 1$.

Apesar disso podemos dizer que a aproximação de impacto prevê resultados que explicam razoavelmente os valores experimentais.

II.6. TABELA PARA O CÁLCULO DE ALARGAMENTOS E DESLOCAMENTOS DE LINHAS ESPECTRAIS DO HÉLIO NEUTRO

Uma vez que estabelecemos a validade da teoria convergente para os cálculos de alargamentos e deslocamentos de linhas espectrais do hélio neutro, decidimos construir com esse tratamento uma tabela semelhante à existente na literatura⁽¹⁹⁾ que é calculada pela teoria semi-clássica de corte de Griem^(17,19).

Nessa tabela são encontrados os alargamentos e deslocamentos eletrônicos para densidade $N = 1.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ e

temperaturas 5000 K, 10000 K, 20000 K e 40000 K, por meio da qual podemos obter os alargamentos e deslocamentos eletrônicos, no intervalo de temperatura acima, por interpolação e para qualquer densidade eletrônica.

A dependência dos alargamentos e deslocamentos eletrônicos deve ser linear com a densidade eletrônica, como pode ser visto pelas equações (I.4-1) e (I.4-2).

Um teste de linearidade foi efetuado, calculando-se alargamentos e deslocamentos eletrônicos para a linha 4713 Å, no intervalo de densidade entre 10^{15} cm^{-3} para temperaturas 5000 K e 40000 K. Os resultados obtidos confirmam a linearidade esperada com a densidade eletrônica.

Assim a teoria convergente foi utilizada para calcular os valores de alargamentos e deslocamentos eletrônicos, para a obtenção da tabela (II.6.1) onde encontram-se também os parâmetros α e R necessários para o cálculo de alargamentos e deslocamentos iônicos em qualquer aproximação.

A tabela (II.6-1) pode ser utilizada apenas na região de densidade eletrônica em que a linha espectral é considerada isolada. Em geral isso ocorre para densidades eletrônicas menores que 10^{18} cm^{-3} .

Acima dessa densidade a presença de linhas proibidas já é significativa e portanto o tratamento deve ser modificado ou adotados as abordagens existentes na literatura.

Comparação entre resultados de Griem e teoria convergente

Uma análise comparativa entre os resultados obtidos pela teoria convergente e Griem⁽¹⁹⁾ foi realizada.

Tabela II.6-1 - Alargamentos e deslocamentos eletrônicos e parâmetros Stark A para linhas do hélio neutro para $N=10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

$L (\text{\AA})$	T (K)	$\omega_e (\text{\AA})$	$S_e (\text{\AA})$	A
584 $1^1s \rightarrow 2^1p$	5000	0.1108E-03	-0.1371E-03	0.0126
	10000	0.1290E-03	-0.1328E-03	0.0112
	20000	0.1472E-03	-0.1202E-03	0.0102
	40000	0.1709E-03	-0.1019E-03	0.0091
537 $1^1s \rightarrow 3^1p$	5000	0.4066E-02	-0.2887E-02	0.1604
	10000	0.3863E-02	-0.2383E-02	0.1667
	20000	0.3548E-02	-0.1904E-02	0.1777
	40000	0.3169E-02	-0.1474E-02	0.1934
522 $1^1s \rightarrow 4^1p$	5000	0.1624E-01	-0.1089E-01	0.2965
	10000	0.1519E-01	-0.8826E-02	0.3118
	20000	0.1373E-01	-0.6924E-02	0.3363
	40000	0.1205E-01	-0.5269E-02	0.3710
20581 $2^1s \rightarrow 2^1p$	5000	0.3066E+00	-0.4131E+00	0.0428
	10000	0.3724E+00	-0.4121E+00	0.0370
	20000	0.4524E+00	-0.3812E+00	0.0320
	40000	0.5427E+00	-0.3258E+00	0.0279
5016 $2^1s \rightarrow 3^1p$	5000	0.3562E+00	-0.2587E+00	0.1610
	10000	0.3394E+00	-0.2168E+00	0.1670
	20000	0.3138E+00	-0.1770E+00	0.1771
	40000	0.2832E+00	-0.1406E+00	0.1913
3965 $2^1s \rightarrow 4^1p$	5000	0.9373E+00	-0.6303E+00	0.2958
	10000	0.8769E+00	-0.5122E+00	0.3110
	20000	0.7932E+00	-0.4035E+00	0.3353
	40000	0.6968E+00	-0.3090E+00	0.3695

$L (\text{\AA})$	$T (K)$	$\omega_e (\text{\AA})$	$S_e (\text{\AA})$	A
7281 $2^1p \rightarrow 3^1s$	5000	0.2754E+00	0.3595E+00	0.0905
	10000	0.3178E+00	0.3546E+00	0.0813
	20000	0.3519E+00	0.3278E+00	0.0753
	40000	0.3698E+00	0.2838E+00	0.0725
5048 $2^1p \rightarrow 4^1s$	5000	0.5347E+00	0.6515E+00	0.1517
	10000	0.6064E+00	0.6235E+00	0.1380
	20000	0.6528E+00	0.5578E+00	0.1306
	40000	0.6622E+00	0.4684E+00	0.1292
4438 $2^1p \rightarrow 5^1s$	5000	0.1265E+01	0.1460E+01	0.2171
	10000	0.1406E+01	0.1371E+01	0.1995
	20000	0.1488E+01	0.1203E+01	0.1912
	40000	0.1481E+01	0.9927E+00	0.1918
6678 $2^1p \rightarrow 3^1d$	5000	0.3954E+00	0.2332E+00	0.1539
	10000	0.3576E+00	0.1801E+00	0.1659
	20000	0.3128E+00	0.1362E+00	0.1835
	40000	0.2683E+00	0.1014E+00	0.2059
4922 $2^1p \rightarrow 4^1d$	5000	0.2254E+01	0.8776E+00	0.6947
	10000	0.1923E+01	0.6398E+00	0.7827
	20000	0.1598E+01	0.4526E+00	0.8991
	40000	0.1300E+01	0.3120E+00	1.0497
4388 $2^1p \rightarrow 5^1d$	5000	0.5443E+01	0.1915E+01	1.2667
	10000	0.4620E+01	0.1350E+01	1.4325
	20000	0.3810E+01	0.9213E+00	1.6552
	40000	0.3069E+01	0.6133E+00	1.9468
15084 $3^1s \rightarrow 4^1p$	5000	0.1375E+02	-0.9741E+01	0.2973
	10000	0.1300E+02	-0.8162E+01	0.3101
	20000	0.1196E+02	-0.6658E+01	0.3301
	40000	0.1073E+02	-0.5272E+01	0.3581
11013 $3^1s \rightarrow 5^1p$	5000	0.2121E+02	-0.1340E+02	0.4571
	10000	0.1970E+02	-0.1091E+02	0.4830
	20000	0.1773E+02	-0.8620E+01	0.5227
	40000	0.1552E+02	-0.6613E+01	0.5775

L (Å)	T (K)	ω_e (Å)	S_e (Å)	A
9603 $3^1_s \rightarrow 6^1_p$	5000	0.3777E+02	-0.2138E+02	0.6497
	10000	0.3471E+02	-0.1707E+02	0.6922
	20000	0.3086E+02	-0.1321E+02	0.7560
	40000	0.2666E+02	-0.9903E+01	0.8436
19089 $3^1_p \rightarrow 4^1_d$	5000	0.3630E+02	0.1588E+02	0.6707
	10000	0.3156E+02	0.1200E+02	0.7449
	20000	0.2675E+02	0.8817E+01	0.8434
	40000	0.2217E+02	0.6311E+01	0.9709
12968 $3^1_p \rightarrow 5^1_d$	5000	0.4826E+02	0.1774E+02	1.2556
	10000	0.4122E+02	0.1273E+02	1.4132
	20000	0.3423E+02	0.8873E+01	1.6246
	40000	0.2777E+02	0.6044E+01	1.9006
11045 $3^1_p \rightarrow 6^1_d$	5000	0.8128E+02	0.2582E+02	1.9498
	10000	0.6844E+02	0.1763E+02	2.2182
	20000	0.5611E+02	0.1178E+02	2.5744
	40000	0.4502E+02	0.7753E+01	3.0369
18697 $3^1_d \rightarrow 4^1_f$	5000	0.1873E+02	-0.5803E+01	0.7524
	10000	0.1555E+02	-0.4125E+01	0.8651
	20000	0.1266E+02	-0.2834E+01	1.0094
	40000	0.1013E+02	-0.1882E+01	1.1928
10830 $2^3_s \rightarrow 2^3_p$	5000	0.4046E-01	-0.5627E-01	0.0321
	10000	0.5128E-01	-0.5718E-01	0.0269
	20000	0.6718E-01	-0.5449E-01	0.0219
	40000	0.8896E-01	-0.4849E-01	0.0178
3889 $2^3_s \rightarrow 3^3_p$	5000	0.8537E-01	0.5968E-01	0.0848
	10000	0.9425E-01	0.4610E-01	0.0788
	20000	0.9863E-01	0.3230E-01	0.0761
	40000	0.9836E-01	0.2075E-01	0.0763
3188 $2^3_s \rightarrow 4^3_p$	5000	0.2672E+00	0.1983E+00	0.1511
	10000	0.2891E+00	0.1620E+00	0.1424
	20000	0.2959E+00	0.1261E+00	0.1400
	40000	0.2871E+00	0.9512E-01	0.1431

$L (^{\circ})$	T (K)	$\omega_e (^{\circ})$	$S_e (^{\circ})$	A
2945 $2^3_s \rightarrow 5^3_p$	5000	0.6823E+00	0.4261E+00	0.2314
	10000	0.7357E+00	0.3268E+00	0.2187
	20000	0.7458E+00	0.2355E+00	0.2164
	40000	0.7139E+00	0.1630E+00	0.2236
2829 $2^3_s \rightarrow 6^3_p$	5000	0.1563E+01	0.9212E+00	0.3157
	10000	0.1649E+01	0.6955E+00	0.3032
	20000	0.1639E+01	0.4868E+00	0.3046
	40000	0.1542E+01	0.3433E+00	0.3188
7065 $2^3_p \rightarrow 3^3_s$	5000	0.1532E+00	0.2170E+00	0.0758
	10000	0.1798E+00	0.2222E+00	0.0672
	20000	0.2055E+00	0.2144E+00	0.0608
	40000	0.2253E+00	0.1935E+00	0.0567
4713 $2^3_p \rightarrow 4^3_s$	5000	0.2923E+00	0.3904E+00	0.1284
	10000	0.3391E+00	0.3888E+00	0.1149
	20000	0.3780E+00	0.3630E+00	0.1059
	40000	0.3989E+00	0.3170E+00	0.1017
4121 $2^3_p \rightarrow 5^3_s$	5000	0.7728E+00	0.9994E+00	0.1726
	10000	0.8905E+00	0.9817E+00	0.1552
	20000	0.9807E+00	0.9020E+00	0.1444
	40000	0.1018E+01	0.7755E+00	0.1404
5876 $2^3_p \rightarrow 3^3_d$	5000	0.1343E+00	-0.1157E+00	0.0722
	10000	0.1377E+00	-0.9678E-01	0.0709
	20000	0.1338E+00	-0.7615E-01	0.0725
	40000	0.1253E+00	-0.5715E-01	0.0761
4472 $2^3_p \rightarrow 4^3_d$	5000	0.1360E+01	0.7900E-01	0.6144
	10000	0.1188E+01	0.6972E-02	0.6802
	20000	0.1015E+01	-0.2754E-01	0.7653
	40000	0.8495E+00	-0.4055E-01	0.8746
4026 $2^3_p \rightarrow 5^3_d$	5000	0.3605E+01	0.2518E+00	1.0564
	10000	0.3129E+01	0.4626E-01	1.1749
	20000	0.2649E+01	-0.6152E-01	1.3312
	40000	0.2187E+01	-0.1074E+00	1.5370

$L (\text{\AA})$	$T (K)$	$\omega_e (\text{\AA})$	$S_e (\text{\AA})$	A
12528 $3^3s \rightarrow 4^3p$	5000	0.4110E+01	0.2645E+01	0.1468
	10000	0.4495E+01	0.1980E+01	0.1373
	20000	0.4657E+01	0.1333E+01	0.1337
	40000	0.4585E+01	0.8161E+00	0.1353
9464 $3^3s \rightarrow 5^3p$	5000	0.7176E+01	0.4400E+01	0.2274
	10000	0.7716E+01	0.3319E+01	0.2153
	20000	0.7818E+01	0.2324E+01	0.2132
	40000	0.7501E+01	0.1539E+01	0.2199
8362 $3^3s \rightarrow 6^3p$	5000	0.1365E+02	0.8007E+01	0.3151
	10000	0.1441E+02	0.6021E+01	0.3026
	20000	0.1433E+02	0.4266E+01	0.3038
	40000	0.1350E+02	0.2904E+01	0.3177
21120 $3^3p \rightarrow 4^3s$	5000	0.6076E+01	0.6114E+01	0.1009
	10000	0.7482E+01	0.6236E+01	0.0864
	20000	0.8654E+01	0.6011E+01	0.0774
	40000	0.9331E+01	0.5416E+01	0.0732
12846 $3^3p \rightarrow 5^3s$	5000	0.7423E+01	0.9304E+01	0.1682
	10000	0.8674E+01	0.9117E+01	0.1496
	20000	0.9679E+01	0.8383E+01	0.1378
	40000	0.1016E+02	0.7229E+01	0.1329
10668 $3^3p \rightarrow 6^3s$	5000	0.1243E+02	0.1528E+02	0.2454
	10000	0.1422E+02	0.1472E+02	0.2217
	20000	0.1549E+02	0.1325E+02	0.2080
	40000	0.1587E+02	0.1665E+02	0.2042
17002 $3^3p \rightarrow 4^3d$	5000	0.2007E+02	0.4487E+00	0.6020
	10000	0.1778E+02	-0.5750E+00	0.6593
	20000	0.1548E+02	-0.9799E+00	0.7313
	40000	0.1323E+02	-0.1040E+01	0.8228
11969 $3^3p \rightarrow 5^3d$	5000	0.3195E+02	0.1987E+01	1.0529
	10000	0.2781E+02	0.1455E+00	1.1683
	20000	0.2366E+02	-0.7953E+00	1.3191
	40000	0.1965E+02	-0.1160E+01	1.5161

L (Å)	T (K)	ω_e (Å)	S_e (Å)	A
19543 $3^3d \rightarrow 4^3p$	5000	0.1034E+02	0.7777E+01	0.1546
	10000	0.1126E+02	0.6317E+01	0.1451
	20000	0.1157E+02	0.4818E+01	0.1422
	40000	0.1123E+02	0.3518E+01	0.1454
12985 $3^3d \rightarrow 5^3p$	5000	0.1357E+02	0.8659E+01	0.2295
	10000	0.1460E+02	0.6698E+01	0.2172
	20000	0.1480E+02	0.4883E+01	0.2151
	40000	0.1418E+02	0.3430E+01	0.2221
10997 $3^3d \rightarrow 6^3p$	5000	0.2363E+02	0.1403E+02	0.3162
	10000	0.2496E+02	0.1064E+02	0.3035
	20000	0.2483E+02	0.7652E+01	0.3046
	40000	0.2340E+02	0.5329E+01	0.3186
18686 $3^3d \rightarrow 4^3f$	5000	0.1102E+02	-0.1924E+01	0.8650
	10000	0.9227E+01	-0.1120E+01	0.9884
	20000	0.7622E+01	-0.6090E+00	1.1408
	40000	0.6219E+01	-0.2951E+00	1.3289

PARÂMETRO R

Temperatura (K)	R
5000	.5893
10000	.4167
20000	.2946
30000	.2083

De um modo geral observamos que os alargamentos previstos pela teoria convergente são ligeiramente menores que os obtidos pela teoria de cortes de Griem⁽¹⁹⁾, enquanto o deslocamento ora é menor, ora maior.

Esse fato pode ser explicado, pois as teorias diferem quanto à introdução ou não de cortes para descrever as regiões de diferentes colisões (fortes e fracas).

Esses cortes são utilizados no tratamento de Griem para separar as colisões fracas, que podem ser tratadas pelo método perturbativo, das fortes, definindo assim parâmetros de impacto críticos, que podem ser diferentes para o alargamento e deslocamento.

Desta maneira a introdução desse corte faz com que as regiões de interação média e forte não sejam bem determinadas, pois o corte introduz uma descontinuidade nas funções que descrevem as interações.

Dyne e O'Mara⁽²⁵⁾ fazem uma discussão comparando os tratamentos convergente e com corte, mostrando o comportamento da função $1-S_I S_F$ através das curvas abaixo, proporcionais ao deslocamento e alargamento.

Como podemos ver a utilização de corte leva no caso do alargamento uma superestimação dos resultados, enquanto que para o deslocamento os valores podem super ou sub estimar os resultados dependendo de onde é adotado o corte.

II.7. PERFIL DE LINHA ISOLADA

Um cálculo do perfil de linha isolada foi realizado, utilizando os tratamentos de Barnard et al⁽³⁴⁾ e GBKO⁽¹⁷⁾, a partir do alargamento e deslocamento eletrônicos obtidos pela teoria convergente.

O perfil da linha depende explicitamente, em ambos os casos, do alargamento e deslocamento eletrônicos, sendo a contribuição das colisões iônicas calculada em cada caso, utilizando-

do aproximações diferentes, isto é, aproximação quase estática de Griem⁽²⁰⁾ e adiabática de Barnard et al⁽³⁴⁾.

As expressões para o perfil reduzido são dadas pelas equações (I.2-11) e (I.6-6) do capítulo I, assim como os parâmetros envolvidos em cada caso.

A linha 5016 Å foi escolhida para o cálculo, uma vez que já existem medidas de seu perfil^(56,57).

Perfil da linha 5016 Å do hélio neutro

O cálculo do perfil da linha 5016 Å foi realizado para temperatura 11.590 K e densidade eletrônica $1.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, utilizando-se o alargamento e deslocamento eletrônicos e o parâmetro Stark A calculados pela teoria convergente cujos valores são:

$$\omega_e = 3.33 \text{ Å} \quad S_e = -2.01 \text{ Å} \quad A = .3015$$

Os perfis obtidos segundo GBKO e Barnard et al encontram-se na figura (II.7-1). Como pode ser visto as duas curvas diferem muito quanto à intensidade. Esse fato é explicado pois a equação de perfil de Barnard é normalizada, enquanto que a de GBKO apenas é normalizada a função de Holtsmark e o perfil como é dado na forma integral não o é.

As curvas calculadas foram comparadas com os resultados experimentais obtidos por Chiang et al⁽⁵⁷⁾, após terem sido normalizadas as intensidades, para os valores de intensidades experimentais, obtendo-se as curvas da figura (II.7-2).

Como podemos observar existe uma concordância razoável entre os resultados teóricos e experimentais, sendo que as

Figura II.7.1 - Perfil reduzido da linha 5016⁰Å.

Figura II.7-2 - Perfil da linha 5016 $\text{\AA}$.

previsões teóricas para o deslocamento diferem uma da outra de aproximadamente $1 \text{ \AA}$, resultando em curvas deslocadas entre si.

Efetuada um teste para verificar a melhor concordância entre os resultados experimentais e teóricos, calculando a média dos desvios quadráticos χ^2 das intensidades para ambas as curvas, obtendo-se

$$\chi^2_{\text{GBK0}} = .36 \qquad \chi^2_{\text{BARNARD}} = .41$$

Portanto o acordo com os resultados experimentais é ligeiramente melhor usando o tratamento de GBK0.

As diferenças obtidas entre as curvas teóricas está no tratamento que se dá à contribuição devido as colisões dos íons.

O fato de que o perfil calculado por GBK0 explica melhor os resultados experimentais, mostra que a aproximação quase estática utilizada para descrever o efeito dos íons é mais adequada, confirmando as conclusões que obtivemos no parágrafo (II.5) a respeito das aproximações utilizadas para calcular a sua contribuição nos alargamentos e deslocamentos.

Também podemos afirmar que o alargamento e deslocamento eletrônicos calculados pelo tratamento convergente explicam muito bem a curva do perfil da linha $5016 \text{ \AA}$.

II.8. COMPARAÇÃO ENTRE RESULTADOS DA TEORIA CONVERGENTE E OUTROS

Os alargamentos e deslocamentos de algumas linhas do hélio neutro foram calculadas pela teoria convergente em função da densidade eletrônica, resultando em retas.

As linhas 5048 Å, 3889 Å, 5016 Å, 3965 Å e 3188 Å foram escolhidas porque já existem resultados experimentais⁽³⁸⁾ e teóricos calculados pelas teorias de corte de Griem⁽¹⁹⁾ e Sahal-Brechot^(21,22) reunidas no trabalho de tese de Diatta⁽³⁸⁾.

As temperaturas em que foram calculadas as retas de variação dos alargamentos e deslocamentos com a densidade eletrônica para as linhas acima, foram determinadas a partir das retas calculadas pela teoria de Griem do trabalho de Diatta.

Os valores calculados para os alargamentos e deslocamentos para essas linhas encontram-se nas figuras (II.6-1) a (II.6-15) juntamente com os resultados experimentais de Diatta⁽³⁸⁾.

Uma análise dos resultados mostra que os valores de alargamentos encontrados pela teoria convergente explica dentro de 10% os resultados experimentais de Diatta até determinada densidade eletrônica, a saber: pelas linhas: 5048 Å até $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; 3889 Å até $2,6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; 5016 Å até $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; 3965 Å até $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ e 3188 Å até $1,5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Acima de cada uma dessas densidades eletrônicas para cada linha os resultados para o alargamento calculados com a teoria convergente diferem mais que 10% dos resultados experimentais.

Para os deslocamentos os desvios são bem maiores, sendo que apenas para as linhas 5048 Å e 5016 Å existe uma concordância quase razoável com os resultados experimentais.

Figura II.8-1 - Alargamento da linha 5048Å em função da densidade eletrônica: —●— Diatta (experimental), — GBK0 (teoria), Sahal-Bréchet (teoria) e --- teoria convergente.

Figura II.8-2 - Deslocamento da linha $5048 \text{ \AA}$ em função da densidade eletrônica: —●— Diatta (experimental), — GBK0 (teoria, Sahal-Bréchet (teoria) e --- teoria convergente.

Figura II.8-3 - Alargamento da linha 5016Å em função da densidade eletrônica: —●— Diatta (experimental), — GBK0 (teoria), Sahal-Bréchet (teoria) e --- teoria convergente.

Figura II.8-4 - Alargamento da linha 5016 $\text{\AA}$ em função da densidade eletrônica:
 —●— Diatta (experimental), — GBK0 (teoria), Sahal-Bréchet (teoria) e --- teoria convergente.

Figura II.8-5 - Deslocamento da linha 5016 $\text{\AA}$ em função da densidade eletrônica:
 —●— Diatta (experimental), ——— GBK0 (teoria), Sahal-Bréchet (teoria) e --- teoria convergente.

Figura II.8-6 - Alargamento da linha 3965Å em função da densidade eletrônica: —●— Diatta (experimental), — GBK0 (teoria), Sahal-Bréchet (teoria) e --- teoria convergente.

Figura II.8-7 - Deslocamento da linha 3965 $\text{\AA}$ em função da densidade eletrônica:
 —●— Diatta (experimental), — GBK0 (teoria), Sahal-Bréchet (teoria) e --- teoria convergente.

Figura II.8-8 - Alargamento da linha 3889Å em função da densidade eletrônica:
 —●— Diatta (experimental), — GBK0 (teoria), Sahal-Bréchot (teoria) e --- teoria convergente.

Figura II.8-9 - Alargamento da linha 3889Å em função da densidade eletrônica:
 —●— Diatta (experimental), — GBK0 (teoria), Sahal-Bréchet (teoria) e --- teoria convergente.

Figura II.8-10 - Deslocamento da linha 3889 $\text{\AA}$ em função da densidade eletrônica: $\bullet$ Diatta (experimental), — GBK0 (teoria), Sahal-Bréchet (teoria) e --- teoria convergente.

Figura II.8-11 - Deslocamento da linha 3889 $\text{\AA}$ em função da densidade eletrônica:
 —●— Diatta (experimental), — GBK0 (teoria), Sahal-
 Bréchet (teoria) e --- teoria convergente.

Figura II.8-12 - Alargamento da linha 3188Å em função da densidade eletrônica:
 —●— Diatta (experimental), — GBK0 (teoria), Sahal-
 Bréchot (teoria) e --- teoria convergente.

Figura II.8-13 - Deslocamento da linha 3188 $\text{\AA}$ em função da densidade eletrônica: —●— Diatta (experimental), — GBKO (teoria), Sahal-Bréchet (teoria) e --- teoria convergente.

Uma comparação entre os valores encontrados com a teoria convergente e teorias de Griem e Sahal-Bréchet mostra que as discrepâncias em relação aos valores experimentais existem e são da mesma ordem de grandeza.

Para melhorar a comparação calculamos usando a teoria de Griem uma tabela de alargamentos eletrônicos, iônicos e totais para o conjunto de linhas que estudamos nos parágrafos anteriores. Esses resultados podem ser vistos nas tabelas (II.8-1) e (II.8-2).

Analizando os resultados dessa tabela observamos que os valores obtidos para os alargamentos e deslocamentos totais das linhas com a teoria convergente (vide tabelas (II.2-1) e (II.2-2) são ligeiramente menores daqueles obtidos pela teoria de Griem, como pode ser também observado nas retas dos gráficos expostos.

Outra observação importante é que as retas, que descrevem os alargamentos e deslocamentos em função da densidade eletrônica, calculados com a teoria convergente estão, para as linhas medidas por Diatta, entre as retas calculadas pelos tratamentos de corte de Griem e Sahal-Bréchet.

Todos esses fatos mostram que as previsões da teoria convergente são tão boas quanto às desses dois formalismos, com a vantagem de não ser necessário fazer hipóteses para separar as diferentes espécies de colisões dos perturbadores com o emissor.

λ (Å)	N (10^{16} cm^{-3})	T (10^3 K)	ALARGAMENTOS		
			TEORIA DE CORTE DE GRIEM		
			ω_e (Å)	ω_i (Å)	ω (Å)
7281	1.03	20.9	.41	.039	.91
7065	1.03	20.9	.24	.018	.52
6678	1.03	20.9	.35	.084	.88
5876	16.0	49.0	2.84	.46	6.59
	13.0	43.0	2.30	.35	5.29
	4.1	20.0	.72	.076	1.59
	2.0	18.0	.35	.032	.76
	1.03	20.9	.18	.015	.39
5048	3.2	30.0	2.42	.52	5.88
	2.0	18.0	1.49	.27	3.52
	1.03	20.9	.78	.12	1.81
5016	3.2	30.0	1.02	.33	2.70
	17.0	24.0	5.58	2.30	15.76
	4.1	20.0	1.37	.41	3.57
	2.0	18.0	.68	.17	1.70
	1.03	20.9	.34	.080	.84
4713	3.2	30.0	1.43	2.45	3.36
	13.0	20.0	5.68	1.18	13.73
	4.1	20.0	1.79	.30	4.19
	2.0	18.0	.86	.13	1.97
	1.03	20.9	.45	.059	1.02
4121	3.2	30.0	3.19	.83	8.04
	2.9	18.0	2.80	.67	6.96
	1.03	20.9	1.01	.20	2.43
3965	1.4	18.0	1.25	.55	3.61
	1.03	20.9	.90	.39	2.57
3889	3.2	30.0	.37	.046	.84
	15.0	26.0	1.75	.28	4.07
	4.1	20.0	.48	.058	1.07
	2.0	18.0	.23	.024	.51
	1.03	20.9	.12	.011	.26
3188	15.0	29.0	5.08	1.57	13.30
	4.1	20.0	1.41	.32	3.45
	1.7	18.0	.58	.11	1.38
	1.03	20.9	.35	.061	.83
2945	1.03	20.9	.88	.24	2.23

Tabela II.8-1 - Alargamentos calculados pela teoria de Griem.

(Å)	N (10^{16}cm^{-3})	T (10^3K)	DESLOCAMENTOS		
			TEORIA DE CORTE DE GRIEM		
			$s_e(\text{Å})$	$s_i(\text{Å})$	$s(\text{Å})$
7281	1.03	20.9	.36	.044	.41
7065	1.03	20.9	.23	.021	.25
6678	1.03	20.9	.20	.096	.29
5876	16.0	49.0	-.037	-.52	-.56
	13.0	43.0	-.057	-.40	-.46
	4.1	20.0	-.10	-.087	-.19
	2.0	18.0	-.063	-.036	-.099
	1.03	20.9	-.025	-.017	-.042
5048	3.2	30.0	1.78	.59	2.37
	2.0	18.0	1.25	.31	1.56
	1.03	20.9	.62	.14	.77
5016	3.2	30.0	-.42	-.37	-.79
	17.0	24.0	-2.44	-2.62	-5.07
	4.1	20.0	-.62	-.47	-1.10
	2.0	18.0	-.32	-.20	-.52
	1.03	20.9	-.15	-.092	-.25
4713	3.2	30.0	1.16	.28	1.44
	13.0	20.0	5.07	1.35	6.42
	4.1	20.0	1.60	.35	1.95
	2.0	18.0	.79	.14	.93
	1.03	20.9	.40	.067	.47
4121	3.2	30.0	2.36	.95	3.31
	2.9	18.0	2.39	.77	3.16
	1.03	20.9	.82	.23	1.06
3965	1.4	18.0	-.56	-.63	-1.19
	1.03	20.9	-.38	-.44	-.82
3889	3.2	30.0	.13	.052	.18
	15.0	26.0	.64	.32	.96
	4.1	20.0	.19	.066	.26
	2.0	18.0	.098	.027	.12
	1.03	20.9	.047	.013	.060
3188	15.0	29.0	1.79	1.80	3.58
	4.1	20.0	.55	.36	.91
	1.7	18.0	.24	.12	.37
	1.03	20.9	.14	.070	.21
2945	1.03	20.9	.32	.27	.59

Tabela II.8-2 - Deslocamentos calculados pela teoria de Griem.

CAPÍTULO III

CONCLUSÕES

O tratamento semi-clássico convergente proposto por Cattani⁽²⁶⁾ foi desenvolvido neste trabalho para calcular a largamentos e deslocamentos provocados por colisões eletrônicas de linhas espectrais isoladas de átomos neutros em plasmas.

No capítulo II, para testar a teoria, efetuamos os cálculos dos alargamentos e deslocamentos de diversas linhas espectrais do hélio neutro. Para obter a contribuição dos íons usamos a aproximação quase estática de Griem⁽²⁰⁾.

Os nossos cálculos estão em bom acordo com os resultados experimentais existentes que foram obtidos por Wulff⁽³⁵⁾, Berg et al⁽³⁶⁾, Kelleher⁽³⁷⁾ e Diatta⁽³⁸⁾.

Quanto as previsões feitas pelas teorias semi-clássicas de cortes de Griem^(17,19) e Sahal-Bréchet^(21,22), verificamos no parágrafo (II.8) que os valores fornecidos pela teoria convergente são intermediários entre as duas aproximações de cortes citadas acima.

Portanto esses fatos levam-nos a conclusão de que: (1) as hipóteses e equações do formalismo convergente desenvolvidos no capítulo I para obtenção de alargamentos e deslocamentos eletrônicos são consistentes e perfeitamente válidas para o estudo de linhas espectrais isoladas; (2) a precisão de nossos resultados em relação às teorias semi-clássicas com cortes, mostram que esse formalismo pode ser encarado como uma forma alternativa para esse tipo de cálculo, com a vantagem de eliminar hipóteses arbitrárias para separar as colisões fortes e fracas.

Além disso a facilidade de cálculo envolvida no processo torna o formalismo de fácil acesso e utilização.

Quanto a utilização desse tratamento para o cálculo da contribuição das colisões iônicas, verificamos que este prevê resultados razoáveis para os alargamentos e deslocamentos iônicos, apesar das condições de sua aplicabilidade não estarem rigorosamente satisfeitas. O melhor acordo com os resultados experimentais é obtido quando os íons são tratados com uma aproximação quase-estática de Griem⁽²⁰⁾.

Estudos sobre efeitos de "screening" de Debye e trajetória dos elétrons mostraram que esses efeitos são de segunda ordem e podem contribuir para os alargamentos e deslocamentos em no máximo até 10%.

Apesar da alteração de trajetória retilínea ser um efeito relativamente pequeno acreditamos que seria interessante do ponto de vista teórico estudá-lo com modelos mais adequados. Nesse sentido propomos no parágrafo (II.4) equações para alargamento e deslocamento eletrônicos baseados no modelo de Robert e Bonamy⁽⁵⁴⁾.

No capítulo I calculamos as funções Γ_K (equação I.4-10) e ϕ_K (equação I.4-11) levando em conta as contribuições dipolares e quadrupolares que são usadas para obter os alargamentos e deslocamentos.

Para as linhas do hélio neutro mostramos no parágrafo (II.5) que a contribuição quadrupolar é desprezível. Assim, apenas a contribuição dipolar foi considerada no caso do hélio.

Finalmente, usando o formalismo convergente, calculamos no parágrafo (II.6) os alargamentos e deslocamentos eletrônicos e parâmetros Stark A para 42 linhas espectrais do hélio neutro. Estes valores mostrados na tabela (II.6-1) permitem a obtenção de alargamentos e deslocamentos totais de qualquer linha isolada no intervalo de temperatura entre 5000 K a 40000 K.

Essa tabela é uma proposta alternativa àquela elaborada por Griem⁽¹⁹⁾, com seu tratamento semi-clássico de cortes, para estimar alargamentos e deslocamentos eletrônicos das linhas do hélio neutro.

Futuramente utilizaremos o formalismo convergente exposto para estudar outros emissores neutros e iônicos para cumprir outras etapas que possam contribuir efetivamente para a confirmação de sua validade e também para o seu aprimoramento.

APÊNDICE I

CÁLCULO DE INTEGRAIS

Nesse apêndice são calculados as integrais que a parecem na dedução das fórmulas de $G(\omega)$, que podem ser escritas genericamente como:

$$a) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt(\cos\omega t + i\sin\omega t)}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}}.$$

Como a função $\frac{\sin\omega t}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}}$ é ímpar, a sua integral nos limites $-\infty$ a $+\infty$ é nula e portanto resta apenas a integral em $\cos\omega t$ que é uma função par. Portanto

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}} = 2 \int_0^{\infty} \frac{dt \cos\omega t}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}} = \frac{2}{v^{2n+1}} \int_0^{\infty} \frac{dt \cos\omega t}{\left|\left(\frac{b}{v}\right)^2 + t^2\right|^{n+1/2}}$$

Fazendo uma mudança de variável, chamando $z_0 = \frac{b}{v}$ temos

$$\frac{2}{v^{2n+1}} \int_0^{\infty} \frac{dt \cos\omega t}{\left|\left(\frac{b}{v}\right)^2 + t^2\right|^{n+1/2}} = \frac{2}{v^{2n+1}} \int_0^{\infty} \frac{dt \cos\omega t}{|z_0^2 + t^2|^{n+1/2}}$$

Sabendo que:

$$K_n(\omega Z) = \frac{\Gamma(n + \frac{1}{2})(2Z_0)^n}{\omega^n \Gamma(\frac{1}{2})} \int_0^\infty dt \frac{\cos \omega t}{(t^2 + Z_0^2)^{n+1/2}}$$

temos

$$\frac{2}{v^{2n+1}} \int_0^\infty \frac{dt \cos \omega t}{|Z_0^2 + t^2|^{n+1/2}} = \frac{2}{v^{2n+1}} \frac{\omega^n \Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(n + \frac{1}{2})(2Z_0)^n} K_n(\omega Z_0)$$

$$\frac{\Gamma(n + \frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2})} = \frac{(2n)!}{2^{2n} n!}$$

Portanto, introduzindo a variável $Z = \frac{\omega b}{v}$, temos:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}} &= \frac{2^{2n+1}}{v^{n+1}} \cdot \frac{\omega^n n!}{(2n)!(2b)^n} K_n\left(\frac{\omega b}{v}\right) \\ &= \frac{2^{n+1} n!}{v(2n)! b^{2n}} Z^n K_n(Z) \end{aligned}$$

Assim para

a) $n = 1$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{3/2}} = \frac{2}{vb^2} Z K_1(Z)$$

b) $n = 2$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{5/2}} = \frac{2}{3vb^4} Z^2 K_2(Z)$$

c) $n = 3$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{7/2}} = \frac{2}{15vb^6} Z^3 K_3\left(\frac{\omega b}{v}\right)$$

Além dessas integrais, aparecem outras integrais na forma:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt t^m e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}} \quad \text{com} \quad m = 1, 2$$

que passamos a calcular.

a) $m = 1$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt t e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}} &= \frac{1}{i} \frac{d}{d\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}} = \\ &= \frac{2^{2n+1} n!}{i v^{n+1} (2n)! (2b)^n} \frac{d}{d\omega} \left[\omega^n K_n\left(\frac{\omega b}{v}\right) \right] \end{aligned}$$

Introduzindo a variável $Z = \frac{\omega b}{v}$ temos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt t e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}} = \frac{2^{n+1} n!}{i v^2 b^{2n-1} (2n)!} \frac{d}{dZ} \left[Z^n K_n(Z) \right] \quad (C-1)$$

mas

$$\frac{d}{dZ} \left[Z^n K_n(Z) \right] = n Z^{n-1} K_n(Z) + Z^n K'_n(Z)$$

como

$$2K'_n(Z) = K_{n-1}(Z) + K_{n+1}(Z)$$

$$\frac{2n}{Z} K_n(Z) = -K_{n-1}(Z) + K_{n+1}(Z)$$

vem que

$$K'_n(Z) = -\frac{n}{Z} K_n(Z) + K_{n-1}(Z) \quad .$$

Portanto

$$\frac{d}{dZ} \left[Z^n K_n(Z) \right] = -Z^n K_{n-1}(Z) \quad (C-2)$$

Substituindo a equação (C-2) na equação (C-1) e usando a variável Z , temos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt \, t \, e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}} = -\frac{2^{n+1} n!}{i v^2 b^{2n-1} (2n)!} Z^n K_{n-1}(Z)$$

$$n = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt \, t \, e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{3/2}} = -\frac{2}{i v^2 b} Z K_0(Z)$$

$$n = 2$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt \, t \, e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{5/2}} = -\frac{2}{3 i v^2 b^3} Z^2 K_1(Z)$$

$$n = 3$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt \, t \, e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{7/2}} = -\frac{2}{15 i v^2 b^5} Z^3 K_2(Z)$$

Uma outra integral utilizada é

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt \, t^2 \, e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}} = - \frac{d^2}{d\omega^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt \, e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}} =$$

$$= - \frac{2^{2n+1} n!}{v^{n+1} (2n)! (2b)^n} \frac{d^2}{d\omega^2} \left[\omega^n K_n \left(\frac{\omega b}{v} \right) \right]$$

Mas usando a variável Z e equação (C-2) podemos escrever a integral acima como

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt \, t^2 \, e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}} = + \frac{2^{n+1} n!}{v^3 b^{2n-2} (2n)!} \frac{d}{dZ} \left[Z^n K_{n-1}(Z) \right]$$

como

$$\frac{d}{dZ} \left[Z^n K_{n-1}(Z) \right] = + Z^n K_{n-2}(Z) + Z^{n-1} K_{n-1}$$

então

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt \, t^2 \, e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{n+1/2}} = \frac{2^{n+1} n!}{v^3 b^{2n-2} (2n)!} \left[Z^n K_{n-2}(Z) + Z^{n-1} K_{n-1}(Z) \right]$$

Portanto para

$$n = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt \, t^2 \, e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{3/2}} = \frac{2}{v^3} \left[Z K_1(Z) + K_0(Z) \right]$$

$$n = 2$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt \, t^2 \, e^{i\omega t}}{(b^2 + v^2 t^2)^{5/2}} = \frac{2}{3v^3 b^2} \left[Z^2 K_0(Z) + Z K_1(Z) \right]$$

APÊNDICE II

LINHAS ESPECTRAIS DO HÉLIO NEUTRO E PARÂMETROS

O cálculo do alargamento e deslocamento das linhas espectrais do hélio depende de uma série de informações a respeito das mesmas tais como: comprimento de onda da transição, as transições virtuais que contribuem para alargar e deslocar os níveis inicial e final envolvido na transição, as frequências das transições virtuais e os elementos reduzidos de matriz das mesmas.

Assim nesse apêndice são tabeladas todas essas informações, para as 42 linhas espectrais do hélio neutro.

O elemento reduzido de matriz de dipolo para uma transição $n_{\alpha} \ell_{\alpha} \rightarrow n_k \ell_k$ está relacionado com o "oscillator strength" $f_{n_{\alpha} \ell_{\alpha}; n_k \ell_k}$ por meio da relação⁽²⁴⁾:

$$f_{n_{\alpha} \ell_{\alpha}; n_k \ell_k} = - \frac{2}{3} \frac{m a_0^2}{\hbar} \omega_{n_{\alpha} \ell_{\alpha}; n_k \ell_k} |\langle n_{\alpha} \ell_{\alpha} || T_1 || n_k \ell_k \rangle|^2$$

onde $\omega_{n_{\alpha} \ell_{\alpha}; n_k \ell_k}$ é a frequência da transição definida como:

$$\omega_{n_{\alpha} \ell_{\alpha}; n_k \ell_k} = \omega_{n_k \ell_k} - \omega_{n_{\alpha} \ell_{\alpha}}$$

Numericamente tem-se, então, para o quadrado do elemento reduzido de matriz de dipolo a equação:

$$|\langle n_{\alpha} \ell_{\alpha} || T_1 || n_k \ell_k \rangle|^2 = 2.1932 \times 10^5 \frac{f_{n_{\alpha} \ell_{\alpha}; n_k \ell_k}}{\omega_{n_{\alpha} \ell_{\alpha}; n_k \ell_k}} .$$

Neste trabalho os valores de $f_{n_{\alpha} \ell_{\alpha}; n_k \ell_k}$ e $\omega_{n_{\alpha} \ell_{\alpha}; n_k \ell_k}$ foram obtidos a partir da tabela obtida por Wiese et al⁽⁵⁸⁾.

Analisando essa tabela verificamos que para transições com número quântico principal $n \geq 5$, não existem valores para "oscillator strength".

Nesse caso adotamos funções de onda hidrogenóides para o cálculo. Essa aproximação torna-se satisfatória a medida que quanto maior for o número quântico principal do elétron mais livre o átomo se torna mais próximo de um hidrogenóide.

Os elementos reduzidos de matriz de dipolo foram calculados a partir da equação acima e uma tabela contendo as informações sobre as linhas espectrais do hélio neutro necessários para os cálculos que efetuamos é mostrada a seguir.

TRANSIÇÕES DE HÉLIO NEUTRO

Linha	Transição	Contribui- buições	f_{ik}	ω_{ak}	$\langle T_1 \rangle$
548Å	$1s^2 \rightarrow 1s2p$	$2'p \rightarrow 2's$	.3764	4857	8.5
537 ⁰ Å	$1s^2 \rightarrow 1s3p$	$3'p \rightarrow 3's$	.629	1345	51.3
		$3'p \rightarrow 3'd$	.0139	105	72.6
522 ⁰ Å	$1s^2 \rightarrow 1s4p$	$4'p \rightarrow 4's$	.853	553	169.2
		$4'p \rightarrow 4'd$	.0240	46	286.2
20581 ⁰ Å	$1s2s \rightarrow 1s2p$	$2'p \rightarrow 2's$	.3764	4857	8.5
		$2'p \rightarrow 3's$	.048	13730	1.15
		$2'p \rightarrow 3'd$	.711	14970	15.62
		$2's \rightarrow 2'p$	.3764	4857	25.49
		$2's \rightarrow 3'p$	.1514	19932	2.50
5016 ⁰ Å	$1s2s \rightarrow 1s3p$	$3'p \rightarrow 3's$	.629	1345	51.3
		$3'p \rightarrow 3'd$	.0139	105	72.6
		$2's \rightarrow 2'p$	.3764	4857	25.49
3965 ⁰ Å	$1s2s \rightarrow 1s4p$	$4'p \rightarrow 4's$	.853	553	169.2
		$4'p \rightarrow 4'd$	.0240	46	286.2
		$2's \rightarrow 2'p$	.3764	4857	25.49
7281 ⁰ Å	$1s2p \rightarrow 1s3s$	$3's \rightarrow 3'p$	.629	1345	153.9
		$2'p \rightarrow 2's$	.3764	4857	8.5
5048 ⁰ Å	$1s2p \rightarrow 1s4s$	$4's \rightarrow 4'p$	.853	553	507.5
		$2'p \rightarrow 2's$	.3764	4857	8.5
4438 ⁰ Å	$1s2p \rightarrow 1s5s$	$5's \rightarrow 5'p$	-	280	1350*
		$2'p \rightarrow 2's$	.3764	4857	8.5
6678 ⁰ Å	$1s2p \rightarrow 1s3d$	$3'd \rightarrow 3'p$	.0139	105	43.6
		$2'p \rightarrow 2's$	.3764	4857	8.5
4922 ⁰ Å	$1s2p \rightarrow 1s4d$	$4'd \rightarrow 4'p$	.0240	46	171.7
		$4'd \rightarrow 4'f$	.00253	5	166.5
		$2'p \rightarrow 2's$	.3764	4857	8.5

* Elemento de matriz hidrogenóide.

Linha	Transição	Contribuições	f_{ik}	$\omega_{\alpha k}$	$\langle T_1 \rangle$
4388 ⁰ Å	1s2p → 1s5d	5'd → 5'p	-	25	472.5*
		5'd → 5'f	-	3	540*
		2'p → 2's	.3764	4857	8.5
15084 ⁰ Å	1s3s → 1s4p	4'p → 4's	.853	553	169.2
		4'p → 4'd	.0240	46	286.2
		3's → 3'p	.629	1345	153.9
11013 ⁰ Å	1s3s → 1s5p	5'p → 5's	-	279	450*
		5'p → 5'd	-	25	787.5*
		3's → 3'd	.629	1345	153.9
9603 ⁰ Å	1s3s → 1s6p	6'p → 6's	-	160	945*
		6'p → 6'd	-	14	1728*
		3's → 3'd	.629	1345	153.9
19089 ⁰ Å	1s3p → 1s4d	4'd → 4'p	.0240	46	171.7
		4'd → 4'f	.00253	5	166.5
		3'p → 3's	.629	1345	51.3
		3'p → 3'd	.0139	105	72.6
12968 ⁰ Å	1s3p → 1s5d	5'd → 5'p	-	25	472.5*
		5'd → 5'f	-	3	540*
		3'p → 3's	.629	1345	51.3
		3'p → 3'd	.0139	105	72.6
11045 ⁰ Å	1s3p → 1s6d	6'd → 6'p	-	14	1036.8*
		6'd → 6'f	-	2	1312.2*
		3'p → 3's	.629	1345	51.3
		3'p → 3'd	.0139	105	72.6
18697 ⁰ Å	1s3d → 1s4f	4'f → 4'd	.00253	5	118.9
		3'd → 3'p	.0139	105	43.5
		4'f → 5'd	.00915	2466	1.22

Linha	Transição	Contribuições	f_{ik}	$\omega_{\alpha k}$	$\langle T_1 \rangle$
10830 ⁰ Å	1s2s → 1s2p	$2^2p \rightarrow 2^3s$	.5391	9231	6.4
		$2^3p \rightarrow 3^3s$	.0693	14150	1.61
		$2^3p \rightarrow 3^3d$	.609	17015	11.77
		$2^3s \rightarrow 2^3p$	.5391	9231	19.21
		$2^3s \rightarrow 3^3p$	.82	25709	.82
3889 ⁰ Å	1s2s → 1s ³ p	$3^3p \rightarrow 3^3s$	.896	2328	42.2
		$3^3p \rightarrow 3^3d$	.111	537	68.0
		$2^3s \rightarrow 2^3p$	.5391	9231	19.21
3188 ⁰ Å	1s2s → 1s4p	$4^3p \rightarrow 4^3s$	1.21	919	144.4
		$4^3p \rightarrow 4^3d$	.200	228	288.6
		$4^3p \rightarrow 5^3s$	.223	2130	34.44
		$4^3p \rightarrow 5^3d$	.442	2700	53.85
		$2^3s \rightarrow 2^3p$	.5391	9231	19.21
2945 ⁰ Å	1s2s → 1s5p	$5^3p \rightarrow 5^3s$	-	450	450*
		$5^3p \rightarrow 5^3d$	-	120	787.5*
		$2^3s \rightarrow 2^3p$	.5391	9231	19.21
2829 ⁰ Å	1s2s → 1s6p	$6^3p \rightarrow 6^3s$	-	257	945*
		$6^3p \rightarrow 6^3d$	-	67	1728*
		$2^3s \rightarrow 2^3p$	.5391	9231	19.21
7065 ⁰ Å	1s2p → 1s3s	$3^3s \rightarrow 3^3p$	.896	2328	126.6
		$2^3p \rightarrow 2^3s$	.5391	9231	6.4
4713 ⁰ Å	1s2p → 1s4s	$4^3s \rightarrow 4^3p$	1.21	919	433.2
		$4^3s \rightarrow 5^3p$	.0468	3503	4.39
		$2^3p \rightarrow 2^3s$	.5391	9231	6.4
4121 ⁰ Å	1s2p → 1s5s	$5^3s \rightarrow 5^3p$	-	450	1350*
		$2^3p \rightarrow 2^3s$	.5391	9231	6.4
5876 ⁰ Å	1s2p → 1s3d	$3^3d \rightarrow 3^3p$	.111	537	40.8
		$2^3p \rightarrow 2^3s$	.5391	9231	6.4

Linha	Transição	Contribuições	f_{ik}	$\omega_{\alpha k}$	$\langle T_1 \rangle$
4472 ⁰ Å	1s2p → 1s4d	4 ³ d → 4 ³ p	.200	228	173.2
		4 ³ d → 4 ³ f	.00331	7	155.6
		2 ³ p → 2 ³ s	.5391	9231	6.4
4026 ⁰ Å	1s2p → 1s5d	5 ³ d → 5 ³ p	-	116	472.5
		5 ³ d → 5 ³ p	-	4	540
		2 ³ p → 2 ³ s	.5391	9231	6.4
12528 ⁰ Å	1s3s → 1s4p	4 ³ p → 4 ³ s	1.21	919	144.4
		4 ³ p → 4 ³ d	.200	228	288.6
		3 ³ s → 3 ³ p	.896	2328	126.6
9464 ⁰ Å	1s3s → 1s5p	5 ³ p → 5 ³ d	-	454	450*
		5 ³ p → 5 ³ s	-	116	787.5*
		3 ³ s → 3 ³ p	.896	2328	126.6
8362 ⁰ Å	1s3s → 1s6p	6 ³ p → 6 ³ s	-	257	945
		6 ³ p → 6 ³ d	-	67	1728
		3 ³ s → 3 ³ p	.896	2328	126.6
21120 ⁰ Å	1s3p → 1s4s	4 ³ s → 4 ³ p	1.21	919	433.2
		3 ³ p → 3 ³ s	.896	2328	42.2
		3 ³ p → 3 ³ d	.111	537	68.0
12846 ⁰ Å	1s3p → 1s5s	5 ³ s → 5 ³ p	-	454	1350*
		3 ³ p → 3 ³ s	.896	2328	42.2
		3 ³ p → 3 ³ d	.111	537	68.0
10668 ⁰ Å	1s3p → 1s6s	6 ³ s → 6 ³ p	-	257	2835
		3 ³ p → 3 ³ s	.896	2328	42.2
		3 ³ p → 3 ³ d	.111	537	68.0
17002 ⁰ Å	1s3p → 1s4d	4 ³ d → 4 ³ p	.200	228	173.2
		4 ³ d → d ³ f	.00331	7	155.6
		3 ³ p → 3 ³ s	.896	2328	42.2
		3 ³ p → 3 ³ d	.111	537	68.0

Linha	Transição	Contribuições	f_{ik}	$\omega_{\alpha k}$	$\langle T_1 \rangle$
11969 ⁰ Å	1s3p → 1s5d	5 ³ d → 5 ³ p	-	116	472.5*
		5 ³ d → 5 ³ f	-	4	540*
		3 ³ p → 3 ³ s	.896	2328	42.2
		3 ³ p → 3 ³ d	.111	537	68.0
19543 ⁰ Å	1s3d → 1s4p	4 ³ p → 4 ³ s	1.21	919	144.4
		4 ³ p → 4 ³ d	.200	228	288.6
		3 ³ d → 3 ³ p	.111	537	40.8
12985 ⁰ Å	1s3d → 1s5p	5 ³ p → 5 ³ s	-	454	450*
		5 ³ p → 5 ³ d	-	116	787.5*
		3 ³ d → 3 ³ p	.111	537	40.8
10997 ⁰ Å	1s3d → 1s6p	6 ³ p → 6 ³ s	-	257	945*
		6 ³ p → 6 ³ d	-	67	1728*
		3 ³ d → 3 ³ p	.111	537	40.8
18686 ⁰ Å	1s3d → 1s4f	4 ³ f → 4 ³ d	.00331	7	74.1
		3 ³ d → 3 ³ p	.111	537	40.8

REFERÊNCIAS

- (1) M. Baranger, Phys. Rev. 111, 481 (1958).
- (2) M. Baranger, Phys. Rev. 111, 494 (1958).
- (3) A.C. Kolb and H.R. Griem, Phys. Rev. 111, 514 (1958).
- (4) V. Fano, Phys. Rev. 131, 259 (1963).
- (5) A. Di Giacomo, N. Cim. 34, 473 (1964).
- (6) M. Cattani, Phys. Lett. 31A, 106 (1970).
- (7) M. Cattani, Lett. N. Cim. 4, 421 (1970).
- (8) M. Cattani, An. Acad. Brasil. Cienc. 42(2), 169 (1970).
- (9) B. Kivel, S. Bloom and H. Margenau, Phys. Rev. 98, 495 (1955).
- (10) O. Bely and H.R. Griem, Phys. Rev. A1, 97 (1970).
- (11) K.S. Barnes and G. Peach, J. Phys. B3, 350 (1970).
- (12) J.M. Bassalo and M. Cattani, Can. J. Phys. 50, 151 (1972).
- (13) J.M. Bassalo and M. Cattani, Can. J. Phys. 52, 1843 (1974).
- (14) J.M. Bassalo, Y. Yamamoto and M. Cattani, Can. J. Phys. 53, 683 (1975).
- (15) J.M. Bassalo and M. Cattani, Phys. Rev. A18, 2488 (1978).
- (16) M.S. Dimitrijevic, N. Feautrier and S.S. Bréchet, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 14, 2559 (1981).
- (17) H.R. Griem, M. Baranger, A.C. Kolb and G. Oertel, Phys. Rev. 125, 177 (1959).
- (18) O. Bely and H. Van Regemorter, An. Rev. of Astron. Astrophysics 8, 329 (1970).
- (19) H.R. Griem, "Spectral Line Broadening by Plasmas" (Academic Press, New York, 1974).
- (20) H.R. Griem, Phys. Rev. 128, 515 (1962).

- (21) S. Sahal-Brchot, Astron. Astrophys. 1, 91 (1969).
- (22) S. Sahal-Brchot, Astron. Astrophys. 2, 322 (1969).
- (23) C. Fleurier, S. Sahal-Brchot and J. Chapelle, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 17, 595 (1977).
- (24) L.A. Vainshtein and I.I. Sobel'man, Opt. Spectrosc. 6, 279 (1959).
- (25) R.J. Dyne and B.J. O'Mara, Astron. Astrophys. 18, 363 (1972).
- (26) M. Cattani, Phys. Lett. 38A, 147 (1972).
- (27) J.S. Murphy and J.E. Boggs, The Journal of Chemical Phys. 47, 691 (1966).
- (28) Y. Yamamoto, tese de doutoramento apresentada no IFUSP (1977).
- (29) Y. Yamamoto and M. Cattani, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 20, 271 (1978).
- (30) Y. Yamamoto and M. Cattani, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 24, 59 (1980).
- (31) Y. Yamamoto and M. Cattani, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 24, 137 (1980).
- (32) J.S. Murphy and J.E. Boggs, J. Chem. Phys. 50, 3320 (1969).
- (33) M. Cattani and Y. Yamamoto, aceito para publicao no J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.
- (34) A.J. Barnard, J. Cooper and E.W. Smith, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 14, 1025 (1974).
- (35) H. Wulff, Z. Phys. 150, 614 (1958).
- (36) H.F. Berg, A.W. Ali, R. Luicke and H.R. Griem, Phys. Rev. 125, 199 (1962).
- (37) D.E. Kelleher, Ph.D. Thesis, Univeristy of Maryland, 1977.
- (38) C.S. Diatta, thesis, Universit D'Orleans, 1977.
- (39) P.W. Anderson, Phys. Rev. 76, 47 (1949).
- (40) A.S. Davydov and D. Ter Haar, "Quantum Mechanics)".
- (41) S. Klarsfeld, Phys. Lett. 32A, 26 (1970).
- (42) C. Deutsh and S. Klarsfeld, Phys. Rev. A7, 2081 (1973).
- (43) G.K. Oertel and L.P. Shomo, Astrophys. J. Suppl. Ser. L6, 175 (1968).

- (44) H.R. Griem, A. Kolb and K. Shen, Phys. Rev. 116, 4 (1959).
- (45) P. Bogen, Z. Phys. 149, 62 (1957).
- (46) V.F. Kitalva and N.N. Sobolev, Dobl. ANSSSR 137, 92 (1961).
- (47) R.W. Lee, J. Phys. B5, L23 (1972).
- (48) R.W. Lee, J. Phys. B6, 1044 (1973).
- (49) J. Cooper, E.W. Smith and W.R. Chapell, Phys. Letters, 34A, 363 (1971).
- (50) H.R. Griem, Comments Atom. Molec. Phys. 2, 206 (1971).
- (51) A.J. Barnard and J. Cooper, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 10, 695 (1970).
- (52)
- (53) R.H. Tipping and R.M. Herman, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 10, 881 (1970).
- (54) D. Robert and J. Bonamy, Journal de Physique 10, 923 (1979).
- (55) M.S. Dimitrijevic and P. Grujic, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 19, 407 (1978).
- (56) J.R. Greig and L.A. Jones, Phys. Rev. A1, 1261 (1970).
- (57) W.T. Chiang, D.P. Murphy, Y.G. Shen and H.R. Griem, Z. Naturforsch. 32a, 813 (1977).
- (58) W.L. Wiese, M.W. Smith, B.M. Glennon, "Atomic Transition Probabilities", U.S. National Bureau of Standards National Standard Reference Data Series - 4 (U.S. GPO, Washington D.C., 1966).