

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN

DEPARTAMENTO DE ELETRÔNICA QUÂNTICA

**NÍVEIS ENERGÉTICOS E TRANSIÇÕES  
ATÔMICAS  
no Kr VI, Ar V e Xe VII**

por

**Gildo de Holanda Cavalcanti**

Orientador: **Antônio Gomes Trigueiros**

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

Campinas

junho de 1994

ESTA É A VERSÃO  
FINAL DA PARTE DE  
DOUTORADO DO A. GILDO  
DE HOLANDA CAVALCANTI, DEPENDENTE  
E APRESENTADA PARA A COMISSÃO  
SUGESTIVA.

09/06/94

*Antônio Trigueiros*

UNIDADE	IF
N.º CHAMADA:	TIONICAMP/10
	C. 314 m
V.	
TOMADA	30/175770
PROD.	286/94
	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	17/08/94
N.º CPD	

11  
7D/1952/HFCW m

CM-00059970-9

# Dedicatória

*A minha esposa e filhas:*

*Catia*

*Giselle*

*e Tatiana*

# Agradecimentos

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

Ao amigo, Cesar Pagan, por sua indispensável ajuda e discussões esclarecedoras.

Aos amigos e companheiros de trabalho: Fernando Tamariz Luna, Roberto Yzumi Honda, Douglas Cioban, Luiz Angelo Berni e Antônio Jamil Mania, pela agradável convivência, dedicação e interesse, que ajudaram a tornar menos árdua a tarefa experimental realizada.

Ao Dr. Sven-Göran Pettersson, do Instituto de Tecnologia de Lund (Suécia), pela ajuda nas mudanças iniciais no theta-pinch e ao pessoal do Centro de Investigações Óticas de La Plata (Argentina), em particular ao Dr. Fausto Bredice e Dr. Jorge Reyna Almandos, pelo fornecimento de importantes dados espectroscópicos e valiosas discussões.

Ao Dr. Munemasa Machida pela colaboração, empréstimo de equipamentos e discussões frutíferas e ao Dr. Edison Shibuia do Departamento de Raios Cósmicos pelo uso do microdensitômetro (Processo FAPESP 88.3885.0).

Ao meu irmão, Eduardo de Holanda Cavalcanti, por sua ajuda na revisão gramatical da versão final desta Tese.

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

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

A todos os colegas do curso de Pós-Graduação, em particular aos amigos, Dionei Andreatta e Antonio Carlos Pereira, pelos momentos agradáveis que passamos juntos.

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

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

À Universidade Federal Fluminense (UFF) pela oportunidade a mim concedida

através do P.I.C.D. e ao pessoal da Pró-Reitoria de Pesquisa (PROPP-UFF) por sua cordialidade e presteza.

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

E finalmente aos amigos anônimos.

A todos, muito obrigado.

# Resumo

Este trabalho de Tese se dedica ao estudo do espectro atômico de emissão dos gases nobres ionizados, criptônio cinco vezes ionizado (Kr VI), argônio quatro vezes ionizado (Ar V) e xênonio seis vezes ionizado (Xe VII). Este trabalho foi realizado com a colaboração do Centro de Investigações Ópticas de La Plata (CIOp-Argentina), que forneceu dados produzidos em tubo de descarga capilar e do Instituto de Tecnologia de Lund (Suécia), que usa um theta-pinch como fonte de luz espectroscópica.

No theta-pinch da Unicamp, foram realizadas uma série de melhoramentos, baseados em estudos teóricos e experimentais sobre a performance do theta-pinch como fonte de luz espectroscópica, os quais conduziram a um aumento na eficiência de transferência de energia entre o banco de capacitores e o plasma, de aproximadamente quatro vezes o valor original. Nele introduzimos um chaveamento especial (“crowbar”) e obtivemos uma classificação iônica mais precisa, possibilitada pela implementação de um “software” para determinação semi-automática dos comprimentos de onda e a caracterização final das linhas espectrais, usando um microdensitômetro.

Na parte de análise da estrutura atômica, os cálculos teóricos iniciais foram feitos usando-se um código numérico multiconfiguracional tipo Hartree-Fock. Para o criptônio cinco vezes ionizado, realizamos uma revisão substancial das configurações que eram conhecidas anteriormente e produzimos dados espectroscópicos completamente novos sobre as configurações  $4s4p4d$  e  $4s4p5s$ , onde 109 novas linhas foram observadas, obtivemos 22 novos níveis, com 111 transições classificadas e alteramos os valores de cinco níveis de energia das configurações estudadas previamente por outros autores. Na análise do Ar V obtivemos todas as 43 linhas previamente classificadas e adicionamos mais 3 novos níveis e classificamos 11 novas transições entre as configurações  $3s^23p^2$ ,  $3s3p^3$ ,  $3s^23p3d$  e  $3s^23d^2$ . No estudo realizado sobre a nova configuração  $3p^4$ , foram classificadas 13 novas transições e todos os seus 5 níveis foram determinados. Por último, na análise do xênonio seis vezes ionizado, 62

transições foram observadas no total, onde 44 delas foram observadas pela primeira vez neste trabalho. Na parte de revisão das configurações conhecidas, obtivemos todas as transições observadas anteriormente e identificamos um novo nível. Para as novas configurações  $5s5d$  e  $5d^2$ , indicamos a posição de 21 novos níveis de energia, além de rejeitarmos um nível classificado como uma linha em desacordo com a classificação iônica produzida pelo crowbar.

# Abstract

In this thesis we studied the atomic emission spectra of five times ionized krypton (KrVI), four time ionized argon (ArV) and six time ionized xenon (XeVII). We used two theta-pinchs (Technological Institute of Lund -Sweden and Unicamp-Brazil) and a tube of capilar discharge (CIOP-Argentina) as a lighth sources. In the theta-pinch at Unicamp, several improvements based on theoretical and experimental studies about the performance of theta-pinch as a spectroscopic light source, were made, which led to a fourfold increased energy transfer efficiency. Also we used a crowbar to control the ringing of the discharge which allowed us to obtain a much more precise ionic classification. The final characterization of the spectral lines was done with a computer controlled microdensitometer.

In the analysis task, the ab-initio calculations was done using a multiconfigurational Hartree-Fock code. We investigated new configurations and made a thorough revision of all previously reported lines. For Kr VI, we obtained 22 new energy levels, classified 121 new transitions and ascribed new energy values for five levels in revised configurations. For Ar V we obtained all 43 previously known lines and also obtained 3 more new energy levels and classified 11 new transitions in previously studied configurations. We introduced the new configuration  $3p^4$  and obtained its five levels based on 13 new transitions. For Xe VII, were observed 62 transitions and of then 44 are new. We obtained all lines already observed in previous work made by other authors. We identified a new energy level and rejected one level due to disagreement with our ionic classification. We indicated 21 new energy levels positions belonging to new configurations  $5s5d$  and  $5d^2$ .

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Parte experimental.</b>	<b>14</b>
1.1	Introdução . . . . .	14
1.2	O theta-pinch básico. . . . .	17
1.3	O espectrógrafo . . . . .	19
1.4	Introdução das linhas de referência . . . . .	22
1.5	O microfotodensitômetro . . . . .	23
1.6	Confecção da tabela espectroscópica . . . . .	27
<b>2</b>	<b>Eficiência do TPIII-UNICAMP e classificação iônica.</b>	<b>31</b>
2.1	Modificações no TPIII-UNICAMP. . . . .	31
2.1.1	Classificação iônica usando “crowbar”. . . . .	37
<b>3</b>	<b>Fundamentos Teóricos e cálculos computacionais</b>	<b>42</b>
3.1	O problema básico. . . . .	43
3.2	Notação espectroscópica . . . . .	46
3.3	Regras de seleção e intensidade relativas das linhas . . . . .	51
3.4	Os programas . . . . .	52
3.4.1	RCN . . . . .	52
3.4.2	Procedimentos de cálculo . . . . .	53
3.4.3	RCN2 . . . . .	55
3.4.4	RCG . . . . .	56
3.4.5	RCE . . . . .	57

3.5	Sistemática de assinalação de níveis . . . . .	58
<b>4</b>	<b>Análise do Kriptônio VI</b>	<b>60</b>
4.1	Introdução . . . . .	60
4.1.1	Histórico . . . . .	61
4.2	Estrutura do cálculo e descrição experimental . . . . .	62
4.3	Análise . . . . .	63
4.4	Conclusões . . . . .	71
<b>5</b>	<b>Análise do Ar V</b>	<b>80</b>
5.1	Introdução. . . . .	80
5.2	Estrutura do cálculo e condições do experimento. . . . .	82
5.3	Linhas de intercombinação. . . . .	83
5.4	Resultados. . . . .	84
<b>6</b>	<b>Análise do Xe VII</b>	<b>93</b>
6.1	Introdução . . . . .	93
6.2	Revisão das configurações $5s^2$ , $5p^2$ , $5s5d$ e $5s5p$ . . . . .	97
6.3	Resultados . . . . .	98
<b>7</b>	<b>Conclusões gerais e Prespectivas Futuras.</b>	<b>104</b>
7.1	Prespectivas futuras . . . . .	106
7.2	Trabalhos publicados. . . . .	107

# Lista de Figuras

1.1	Diagrama básico de um theta-pinch e seus campos. . . . .	18
1.2	Espectrógrafo com montagem de Paschen-Runge com círculo de Rowland de 2 metros de diâmetro . . . . .	20
1.3	Aspecto gráfico da leitura de intensidade x posição numa placa de emulsão . . . . .	24
1.4	Aspecto da tela do micro gerada pelo programa GRAFED87. . . . .	29
1.5	Aspecto da tela do micro gerada pelo programa LINED. . . . .	30
2.1	Sinal típico da corrente de descarga do TPIII-UNICAMP para tensão de 8 kV e pressão de 25 mtorr de argônio. . . . .	35
2.2	Estágios 01 e 02 do TPIII-UNICAMP. . . . .	35
2.3	Detalhes da conexão entre a linha de transmissão e chave “sparkgap”. . . . .	37
2.4	Detalhes da conexão entre a linha de transmissão e um dos capacitores do banco. . . . .	38
2.5	Resultado da espectroscopia resolvida em theta-pinch. . . . .	39
2.6	Comparação entre as intensidades espectrais de algumas linhas sob ação do crowbar, fornecida por um micro-fotômetro, onde vê-se: a- baixa atenuação em duas linhas do Xe VII, b- muita atenuação em linhas do Xe IV e V, c- leve atenuação em duas linhas não tabeladas. . . . .	41
3.1	Diagrama de Grotrian hipotético mostrando 4 níveis de energia e quatro transições. . . . .	44

3.2	Digrama exemplificando a notação espectroscópica para uma configuração $sp$ com acoplamento LS . . . . .	47
4.1	Gráfico isoeletrônico para transições entre os níveis $4s^2 4p^2 \ ^2P_{1/2}$ – $4s 4p^2 \ ^2S_{1/2}$ entre os íons Br V - Zr X . . . . .	65
4.2	Sequência isoeletrônica para transição $4s^2 4d \ ^3D_{3/2}$ – $4s^2 4f \ ^2F_{5/2}$ . . . . .	66
4.3	Sequência isoeletrônica para transição $4s 4p^2 \ ^2D_{3/2}$ – $4p^3 \ ^2P_{1/2}$ . . . . .	68
4.4	Sequência isoeletrônica para transição $4s 4p^2 \ ^4P_{1/2}$ – $4p^3 \ ^4S_{3/2}$ . . . . .	69
5.1	Diagrama de níveis de energia das configurações estudadas do ArV. . . . .	88
6.1	Diagrama de Grotrian teórico para algumas configurações do Xe VII . . . . .	97

# Lista de Tabelas

1.1	Temporização para revelação das placas SWR. Temperatura entre $19^{\circ}C$ e $21^{\circ}C$ . . . . .	22
1.2	Parte de uma tabela gerada na análise do xenônio . . . . .	30
2.1	Alguns parâmetros do TPIII-UNICAMP . . . . .	36
4.1	Novas linhas do Kr VI . . . . .	73
4.1	continuação . . . . .	74
4.1	continuação . . . . .	75
4.1	continuação . . . . .	76
4.2	Níveis de energia das configurações ímpares do Kr VI. . . . .	77
4.3	Níveis de energia das configurações pares do Kr VI. . . . .	78
4.4	Parâmetros de Slater para as configurações pares do Kr VI. . . . .	78
4.5	Parâmetros de Slater para as configurações ímpares do Kr. . . . .	79
5.1	Linhas classificadas nas transições $3s^23p^2 \leftarrow 3s3p^3$ , $3s^23p^2 \leftarrow 3s^23p3d$ and $3s^23p^2 \leftarrow 3s^23p4s$ do Ar V. . . . .	86
5.1	Continuação. . . . .	87
5.2	Níveis ajustados das configurações $3s^23p^2$ , $3s3p^3$ , $3s^23p3d$ e $3s^23p4s$ do Ar V. . . . .	89
5.3	Linhas classificadas para as transições $3s3p^3 - 3p^4$ no Ar V. . . . .	90
5.4	Níveis de energia da configuração $3p^4$ do Ar V. . . . .	90

5.5	Parâmetros de Slater para as configurações ímpares $3s3p^3$ , $3s^23p3d$ e $3s^23p4s$ do Ar V. . . . .	91
5.6	Parâmetros de Slater para as configurações $3s^23p^2$ , $3p^4$ , $3s3p^23d$ , e $3s^23d^2$ do Ar V. . . . .	92
6.1	Resultados prévios de algumas transições (em Å) do Xe VII. . . . .	95
6.2	Resultado do ajuste das configurações conhecidas $5s^2$ , $5p^2$ , $5s5d$ , e $5s5p$ e a sua comparação com os valores das transições experimentais. . . . .	99
6.3	Energia ajustada de algumas configurações do Xe VII . . . . .	100
6.4	Novos níveis obtidos para as configurações $5p^2$ , $5p5d$ e $5d^2$ do Xe VII	101
6.5	Transições observadas entre as configurações do Xe VII . . . . .	102
6.6	Novas transições observadas entre as configurações do Xe VII . . . . .	103

## Apresentação.

Este trabalho foi desenvolvido em colaboração com o Centro de Investigações Ótica de La Plata (CIOp-Argentina) e o Instituto de Tecnologia de Lund (Lund-Suécia). As fontes de luzes espectroscópicas utilizadas foram um tubo de descarga capilar (Argentina) e dois theta-pinches (Brasil e Suécia), os quais forneceram dados para análise do argônio quatro vezes ionizado, criptônio cinco vezes ionizado e xenônio seis vezes ionizado.

No capítulo 1 estão descritas as características principais dessas fontes. Destaque especial é dado a fonte da Unicamp, onde são descritos aspectos sobre a parte ótica do espectrógrafo e as técnicas experimentais usadas na obtenção e medida dos espectros de emissão; enquanto que no capítulo 2 são apresentadas as medidas da evolução da eficiência de transferência de energia para o plasma durante as modificações realizadas no theta-pinch, bem como uma nova técnica para fazer a classificação iônica das linhas espectrais, que se baseia num chaveamento elétrico adicional do circuito de descarga do theta-pinch, desenvolvida no curso deste trabalho.

Seguindo a linha de pesquisa adotada pelo grupo de plasma, que tem realizado intensas pesquisas com o gases nobres altamente ionizados, produzimos e estudamos alguns espectros de gases nobres altamente ionizados, usando o theta-pinch como fonte de luz. A análise foi realizada de maneira semi-empírica, usando além dos dados experimentais produzidos, os recursos numéricos que dispomos e em particular um programa Multiconfiguracional tipo Hartree-Focker, os quais são descritos no capítulo 3.

No capítulo 4, 5 e 6 são apresentadas as análises feita para o Kr VI, Ar V e Xe VI respectivamente. Neste capítulos estão descritos além de uma introdução histórica, que descreve a evolução do conhecimento de cada um destes íons, os detalhes do cálculo e análise para cada íon.

Por último, as conclusões e resultados gerais desta tese, bem como as perspectivas e trabalhos futuros são apresentadas no capítulo 7.

# Capítulo 1

## Parte experimental.

### 1.1 Introdução

Nas análises espectroscópicas do Kr VI, Ar V e Xe VII desenvolvidas nesta Tese, foram utilizados dados espectroscópicos (tabelas de comprimento de onda, classificação iônica, incerteza, características das linhas, etc) relativos a estes gases nobres, em seus respectivos graus de ionização, fornecidos por três centros de pesquisa, Centro de Investigações Ópticas de La Plata (CIOp)- Argentina, Instituto de Tecnologia de Lund - Suécia e da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) - Brasil. O CIOp forneceu dados importantes, principalmente para a análise do argônio, além de colaborar decisivamente na sua análise inicial e revisão final. A colaboração empreendida pela Universidade de Lund se deu principalmente na análise do criptônio cinco vezes ionizado com fornecimento da maioria dos dados espectroscópicos e acompanhamento da análise realizada. A nossa participação se deu majoritariamente na análise deste tres gases e no fornecimento quase exclusivo dos dados relativos ao xenônio. Nos capítulos destinados à análise de cada gás, reenfatizaremos a participação de cada grupo, neste processo de colaboração técnico-científica.

A fonte de luz empregada pelo CIOp é um tubo de descarga capilar e consiste basicamente de um tubo laser sem os espelhos. Na sua construção foi empregado

um tubo pirex de 3 mm de diâmetro interno e 20 cm de comprimento, no qual são colocados dois eletrodos de tungstênio recobertos com índio, através dos quais é produzida uma descarga elétrica axial ionizando o gás contido no tubo. O circuito de descarga emprega um capacitor variável (25 nF à 100 nF) que é carregado a uma tensão de até 19 kV. Este tubo é conectado a vácuo a um espectrógrafo de 3 metros de comprimento e incidência normal, equipado com uma rede de difração de 1200 linhas/mm, tendo com isso um fator de placa ou dispersão recíproca de 2,77 Å/mm. Maiores detalhes sobre esta fonte podem ser obtidos na referência[1].

A fonte empregada no Instituto de Tecnologia de Lund foi um Theta-Pinch[2], que tem características bastantes semelhantes ao nosso. Ele é constituído basicamente por um banco com 7 capacitores de 1,1  $\mu F$  x 30 kV, uma linha de transmissão formada com 3 placas planas de cobre, uma chave pressurizada tipo sparkgap, um conjunto de 60 enrolamentos com duas espiras de fio cada, conectados em paralelo, que envolve um tubo de pirex no qual o gás de trabalho é ionizado quando ocorre a descarga do banco de capacitores. Este tubo está conectado a um espectrógrafo Hilger de incidência normal de 3 metros, contendo uma rede de difração com 1200 linhas/mm e dispersão recíproca de 2,8 Å/mm, com “blazed” em 1300 Å.

A terceira fonte de luz<sup>1</sup> empregada neste trabalho foi um theta-pinch de 14 kJoules, desenvolvido no grupo de plasma do Instituto de Física da Unicamp. No transcorrer deste trabalho, esta máquina sofreu alterações significativas na sua estrutura, de tal maneira que permitisse a obtenção de espectros de emissão de íons altamente ionizados, com menor quantidade de energia armazenada em seu banco de capacitores, ou seja, de maneira mais eficiente. Funcionando assim, o processo de separação energética dos espectrogramas fica muito mais evidente, conforme o verificado experimentalmente. Esta separação energética mais clara, é muito importante para o trabalho de classificação iônica.

Uma característica importante dos theta-pinches é a produção bastante acen-

---

<sup>1</sup>Doravante todos os dados e técnicas experimentais citadas estarão se referindo especificamente ao trabalho realizado na Unicamp, a menos que haja citação em contrário

tuada de linhas espectrais devido a transições de intercombinações, as quais são bastante importantes para o estudo da dinâmica do plasma[3]. Este mesmo tipo de comportamento também se verifica nos tokamaks.

O espectro de emissão oriundo do plasma gerado pela descarga do theta-pinch, foi registrado na faixa compreendida entre 300 Å e 2100 Å, portanto este trabalho foi realizado na região do ultra-violeta do vácuo. Para obtenção do espectro foi utilizado um espectrógrafo de incidência normal de 2 metros, que possui um sistema de vácuo que atinge a pressão final da ordem de  $10^{-6}$  torr, o qual está acoplado ao tubo de descarga do theta-pinch. no qual o gás de trabalho é mantido à pressão desejada, via um sistema de vácuo diferencial. O espectro de linhas (imagens da fenda de entrada) é registrado em placas de emulsão fotográfica SWR (Short Wave Region) da Kodak.

Para se gerar uma tabela de dados espectroscópicos a partir de um espectrograma, é necessessário primeiramente determinar as posições relativas das linhas espectrais<sup>2</sup> gravadas nas placas de emulsão espectroscópica. Para a realização desta tarefa, foi usado um microfotodensitômetro existente no laboratório do grupo de raios cósmicos da Unicamp, a partir da utilização de um "software", desenvolvido pelo autor deste trabalho, que controla a medição das placas no microfotodensitômetro e compatibiliza o formato dos dados de saída para um posterior processamento. Este processamento posterior visa a obtenção dos comprimentos de onda do espectro emitido pelo theta-pinch, bem como a caracterização de cada linha, ou seja, sua distribuição de intensidade.

Alguns detalhes suplementares sobre a parte ótica do espectrógrafo e as técnicas aplicadas na obtenção do espectro de irradiação, ou seja, na determinação dos comprimentos de onda do espectro a partir dos dados da placa de emulsão espectroscópica, serão fornecidos nas seções subsequentes deste capítulo, enquanto que no capítulo 02 serão pormenorizadas as mudanças realizadas no TPIII-UNICAMP.

---

<sup>2</sup>doravante só referido como linhas

## 1.2 O theta-pinch básico.

O esquema básico de um theta-pinch consiste de cinco elementos principais: um banco de capacitores, no qual a energia a ser transferida para o plasma é armazenada; um sistema de chaveamento elétrico especial que seja capaz de suportar intensas correntes<sup>3</sup> e altas tensões; uma linha de transmissão especialmente projetada que conecte o banco de capacitores as bobinas de campo magnético, tendo a menor indutância possível; um sistema de bobinas para produção de campos magnéticos intensos, com taxa de variação temporal inicial superior a  $10^8$  G/s[4]; e finalmente um tubo, que seja envolvido pela bobina, no qual o gás de trabalho, em geral já pré-ionizado, seja submetido a este intenso campo magnético gerado pela descarga do banco de capacitores.

A dinâmica desenvolvida pelo plasma durante a descarga do banco de capacitores pode ser resumida como se segue. Quando se descarrega o banco de capacitores, é gerada uma corrente elétrica, que, ao passar pelas bobinas, produz um campo magnético (aproximadamente axial) no volume interior do tubo onde o plasma está confinado. Como o plasma é diamagnético, ele gera internamente uma corrente, chamada corrente-imagem, que se opõe à variação do campo magnético no seu interior. Sob condições adequadas, esta corrente-imagem produz por impacto eletrônico um efeito de multiplicação eletrônica em cascata (“breakdown”). Como o campo elétrico induzido pela variação do campo magnético é proporcional a distância ao centro, este efeito é obtido principalmente na parte mais externa do tubo, aumentando localmente tanto a densidade como a condutividade do plasma. Devido às elevadas condutividades atingidas, o campo magnético externo é excluído pelo plasma, limitando sua penetração a uma profundidade dada por  $c^2/4\pi\sigma v$ , onde  $c$  é a velocidade da luz no vácuo,  $\sigma$  é a condutividade de Spitzer e  $v$  é a velocidade de propagação do pulso magnético antes de atingir esta casca condutora. O aumento da densidade local provoca ondas de pressão que se deslocam com uma velocidade  $v_s$ , caracteri-

---

<sup>3</sup>em geral maiores que 100 kA

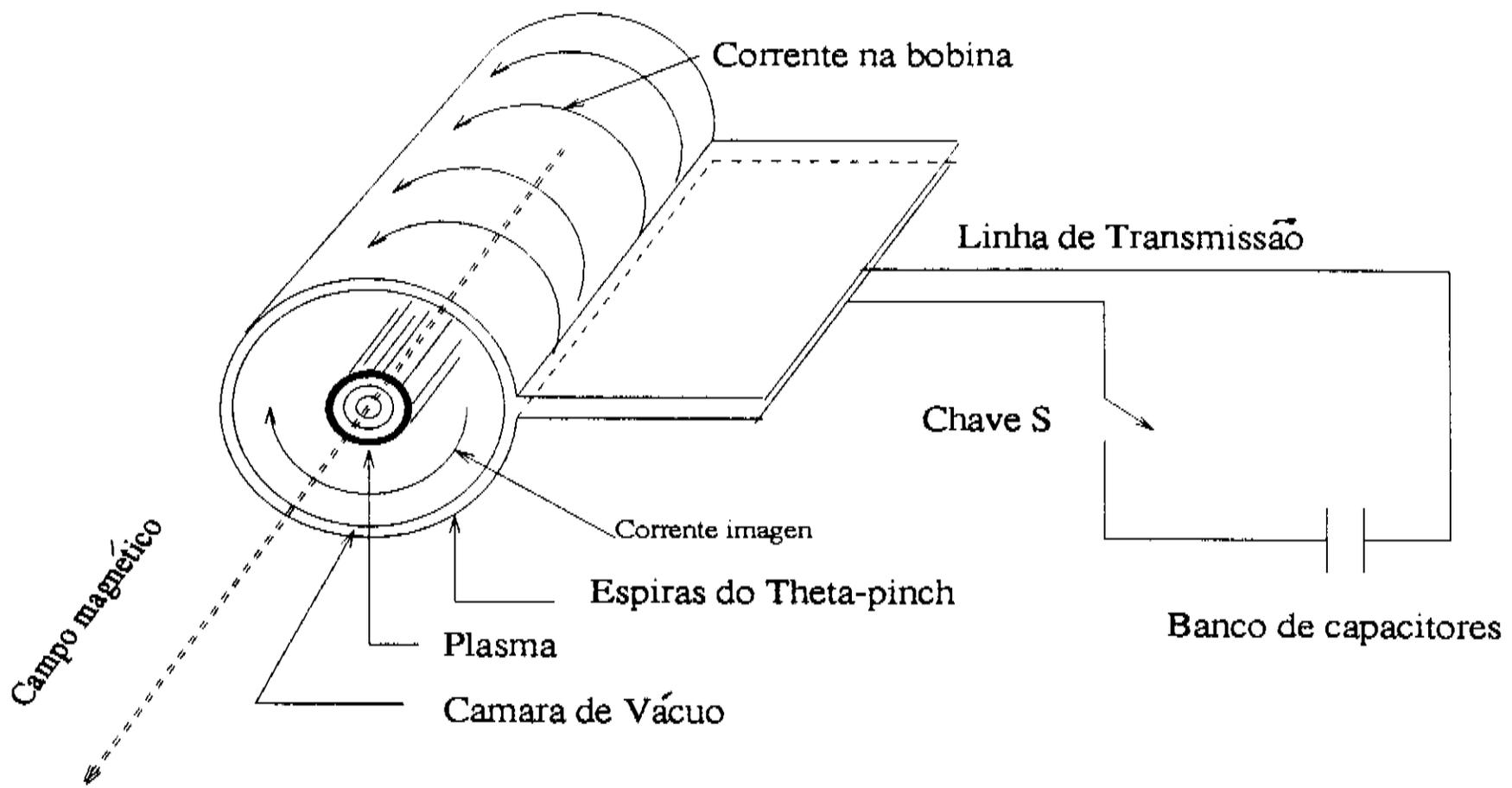


Figura 1.1: Diagrama básico de um theta-pinch e seus campos.

zada pela velocidade das ondas íon acústica no plasma. Com a exclusão do campo magnético, é formado uma espécie de pistão magnético atrás da casca condutora que impulsiona esta onda de pressão com uma velocidade  $v_p$ . Devido à superposição de velocidades, é gerado uma onda de choque que acelera o plasma violentamente para o seu centro. Neste processo, a energia cinética adquirida é convertida em térmica [6, 7].

O processo descrito no parágrafo anterior é chamado de efeito "pinch". Nele se propicia o aparecimento de altos graus de ionização do gás de trabalho e a ocorrência de intensa emissão de radiação eletromagnética, como consequência de desexcitação sofrida pelos átomos ou íons. A figura(1.1) mostra um diagrama básico de um theta-pinch e seus campos

### 1.3 O espectrógrafo

O espectrógrafo utilizado na obtenção do espectro de linhas, dos vários gases nobres estudados neste trabalho, consiste de um espectrógrafo de placas com incidência normal, tendo um círculo de Rowland de 2 metros de diâmetro. Sua montagem é do tipo Paschen-Runge e um esquema com suas dimensões e ângulos característicos é apresentado na figura(1.2).

Este aparelho foi cedido pelo Departamento de Física da Universidade de Lund - Suécia, e com a ótica atual possibilita a obtenção de espectros na região do ultravioleta do vácuo (VUV), compreendida entre 300 Å e 2100 Å. Na sua estrutura original, possuía um sistema de vácuo, constituído por uma bomba mecânica de simples estágio e uma bomba difusora, onde se obtinha um vácuo de até  $10^{-6}$  torr. Na estrutura atual, o sistema de vácuo é constituído por uma bomba mecânica de duplo estágio (EM28 Edwards) e uma bomba turbo molecular (VP500 Varian), que realizam, concomitantemente, a evacuação tanto do espectrógrafo quanto do tubo theta-pinch. Esta modificação no sistema de vácuo, visava à obtenção de uma pureza espectroscópica maior, com a eliminação da mistura do óleo, da antiga bomba difusora, ao gás que estava sob análise, tentando-se assim eliminar o aparecimento linhas muito intensas do espectro de carbono, as quais estavam encobrindo algumas linhas importantes, como por exemplo as do espectro do argônio, conforme o revelado por nossas análises iniciais.

O sistema ótico do espectrógrafo conta com duas redes de difração optativas. A primeira com 1080 ranhuras por milímetro usada para faixa de comprimentos de onda de 300 Å a 2100 Å, enquanto que a segunda com 540 ranhuras/mm é usada para faixa de 600 Å a 4200 Å. Uma terceira rede de difração está sendo adquirida para obtenção do espectro na região do espectro entre 250 Å e 1100 Å. Com esta nova rede aumentaremos bastante nosso poder de resolução, tornando nosso espectrógrafo bastante competitivo a nível internacional. Para obtenção dos espectros usados neste trabalho foi usado exclusivamente a primeira rede citada, e

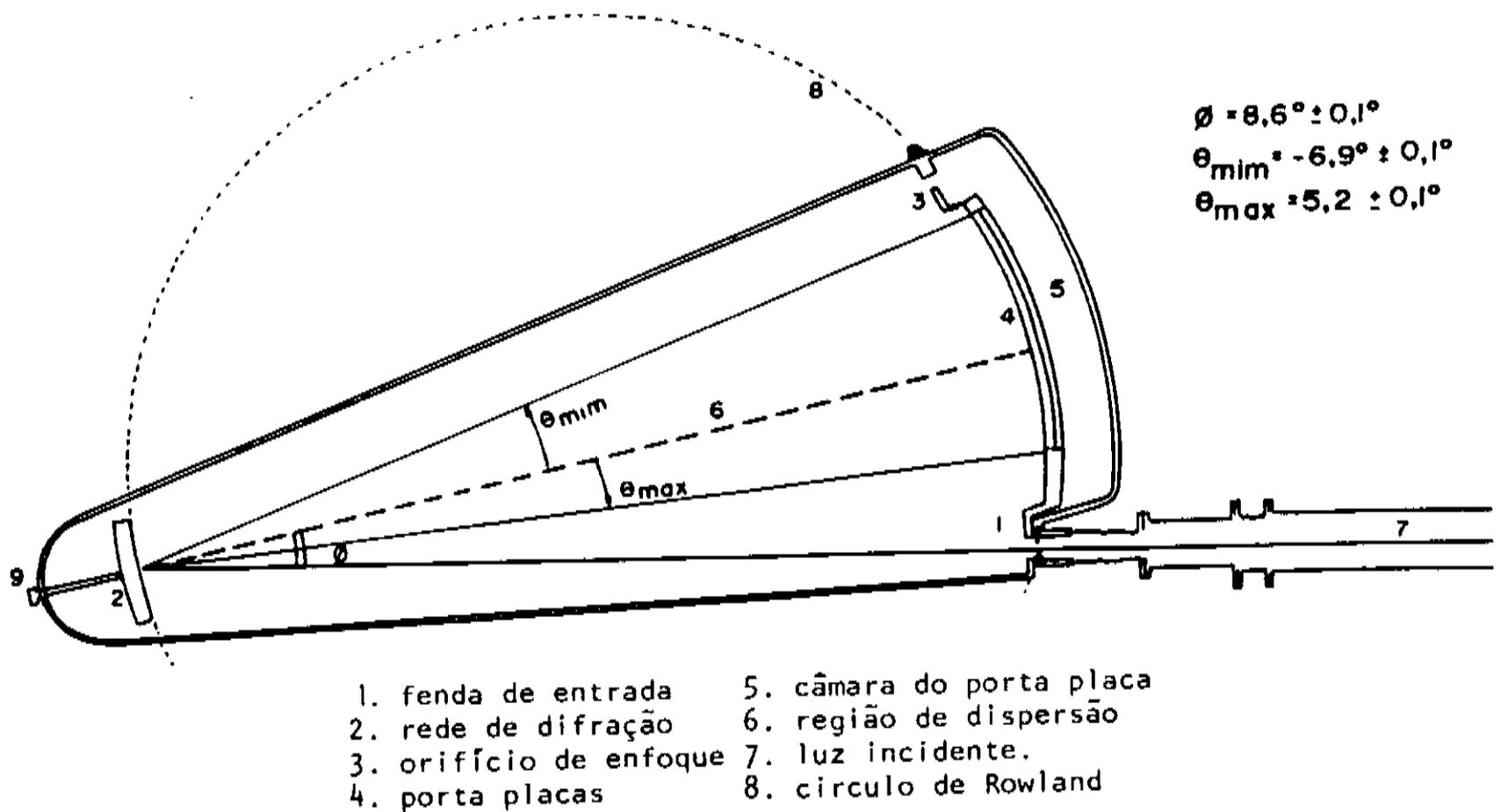


Figura 1.2: Espectrógrafo com montagem de Paschen-Runge com círculo de Rowland de 2 metros de diâmetro

por isso os parâmetros óticos citados daqui para frente estarão relacionados a esta rede de difração especificamente.

As características da rede de difração usada no espectrógrafo são as seguintes: rede côncava com raio de curvatura de 1 metro com 1080 ranhuras por milímetro, dimensões frontais de 120mm X 80mm e “blazed” na região de 1100 Å.

O poder de resolução de uma rede ( $R$ ) é um número caracterizando a propriedade de separar, ou resolver, um registro de duas radiações monocromáticas de intensidades e de comprimentos de onda aproximadamente iguais. Um critério arbitrário é estabelecido para mínima separação. Em geral é usado o critério de Rayleigh, que estabelece que esta mínima separação, onde é ainda possível resolver os registros, se dá quando o máximo de um dos registros estiver posicionado no mínimo do outro registro. Quando este critério é satisfeito temos[5] :

$$R = mN = \frac{\lambda}{\delta\lambda} = \frac{\sigma}{\delta\sigma} = \frac{W \text{sen}(\theta)}{\lambda}, \quad (1.1)$$

onde  $m$  é a ordem da difração,  $\delta\lambda$  é a diferença no comprimento de onda,  $\delta\sigma$  é a

correspondente diferença no número de onda ,  $W$  é a largura projetada da rede,  $N$  é o número total de ranhuras nesta largura projeta e  $\theta$  o ângulo de difração.

No nosso caso, onde usamos uma fenda na entrada do espectrógrafo com largura de  $15\mu\text{m}$ , temos para  $\lambda = 1000 \text{ \AA}$  que  $R = 31460$ . Isto significa que a separação mínima entre dois comprimentos de onda deve ser de aproximadamente de 3 centésimos de angstroms para que possam ser resolvidos. Às vezes, é mais significativo usar o limite de resolução  $\delta\lambda$  em si ao invés do poder de resolução  $R$ , como uma medida do poder de resolução do espectrógrafo.

A disposição das imagens da fenda de entrada<sup>4</sup> sobre a placa de emulsão espectroscópica é uma função do comprimento de onda da radiação incidente, regida pela equação da rede:

$$m\lambda = a[\text{sen}(\theta + \delta) + \text{sen}(\phi)] \quad (1.2)$$

onde  $a$  é a distância entre as ranhuras da rede de difração,  $\delta$  é o ângulo de blaze da rede e  $\phi$  é o ângulo de incidência.

A dispersão da rede de difração é dada por  $\frac{d\theta}{d\lambda}$ , entretanto o seu recíproco é mais usado em termos prático. O fator de placa tem a seguinte expressão:

$$\frac{d\lambda}{dx} = \frac{d\lambda}{dl} = \frac{d\lambda}{Pd\theta} = \frac{a\cos(\theta + \delta)}{mP} \quad (1.3)$$

Em primeira ordem de difração o fator de placa para os nossos parâmetros é aproximadamente  $4,62 \text{ \AA/mm}$ . Este valor corresponde à rede de difração com 1080 ranhuras/mm.

O espectro de linhas foi registrado (fotografado) usando-se placas de emulsão espectroscópica SWR<sup>5</sup>-Kodak 25cm X 5cm. O espectrógrafo é dotado de um sistema mecânico que permite a obtenção de vários espectrogramas em uma mesma placa. Tal dispositivo permite-nos posicionar uma máscara de 3mm de largura, em várias posições paralelas à placa de emulsão. Este dispositivo nos permite, para a referida

<sup>4</sup>por esta razão chamada de espectro de linhas

<sup>5</sup>Short Wavelength Region

ordenação	produto	tempo	comentário
primeiro	Revelador D-19 1:1	2,0 mim	leve agitação
segundo	Interruptor (Rinse)	40 seg	vigorosa agitação
terceiro	Fixador	10 mim	contínua agitação
quarto	Água corrente	1 hora	em repouso

Tabela 1.1: Temporização para revelação das placas SWR. Temperatura entre  $19^{\circ}C$  e  $21^{\circ}C$ .

máscara, obter 9 espectrogramas em uma mesma placa de emulsão. A revelação das placas de emulsão SWR são realizadas no próprio laboratório usando os reagentes e temporização contidas na tabela(1.1). Maiores detalhes sobre o sistema de vácuo e procedimentos para alinhamento e o enfoque do espectrógrafo e colocação das placas de emulsão no espectrógrafo estão bem descritos na referência[8], onde cada detalhe foi pormenorizado.

## 1.4 Introdução das linhas de referência

Depois de registrado o espectro de emissão do íon desejado, as próximas tarefas experimentais consistem da determinação o mais precisamente possível, dos comprimentos de onda contidos no referido espectro, bem como da distribuição de intensidade de cada linha, ou seja, da determinação de sua característica e finalmente, a determinação da classificação iônica de cada linha. Por classificação iônica entende-se a determinação do íon que deu origem a uma determinada linha, sem no entanto precisar quais os níveis deste íon que estão envolvidos na transição que deu origem a este fóton em particular.

Para determinação dos comprimentos de onda é necessário a introdução de linhas de referência<sup>6</sup>, e a partir destas determina-se o polinômio (posição, comprimento de onda) que melhor se ajusta a estas linhas de referência, a partir do qual serão obtidos

<sup>6</sup>em geral linhas intensas, estreitas, simétricas, bem resolvidas e de baixa incerteza

os demais comprimentos de onda no espectro registrado, via interpolação polinomial. A introdução das linhas de referência no espectro de emissão, ou seja, a determinação de algumas linhas cuja os comprimentos de onda sejam previamente conhecidos e estejam contidos no referido espectro, é possível usando dois pontos conhecidos da ótica do sistema em questão. O primeiro é o conhecimento do origem do espectro<sup>7</sup>, onde para sua determinação são usados os ângulos do espectrógrafo, os parâmetros da rede de difração e a equação da rede(1.2). No nosso caso especificamente, temos cerca de 300 Å para posição inicial da placa. O segundo ponto é o conhecimento da dispersão recíproca em primeira ordem de difração, que nos fornece uma relação linear, para determinação aproximada da posição na placa “versus” o comprimento de onda associado , ou seja, podemos usar a relação:

$$\lambda = \lambda_0 + \frac{d\lambda}{dx} x \quad (1.4)$$

onde  $x$  é a distância medida a partir da origem e no nosso caso  $\frac{d\lambda}{dx} = 4.62 \text{ Å/mm}$  e  $\lambda_0 = 300 \text{ Å}$ .

Em geral procura-se linhas associadas a impurezas<sup>8</sup> como carbono, oxigênio e silício, por terem algumas transições bastantes intensas e a estrutura de seus multiplets bem definida. Se estas primeiras linhas de referência estiverem bem posicionadas, novas linhas de referência poderão ser encontradas.

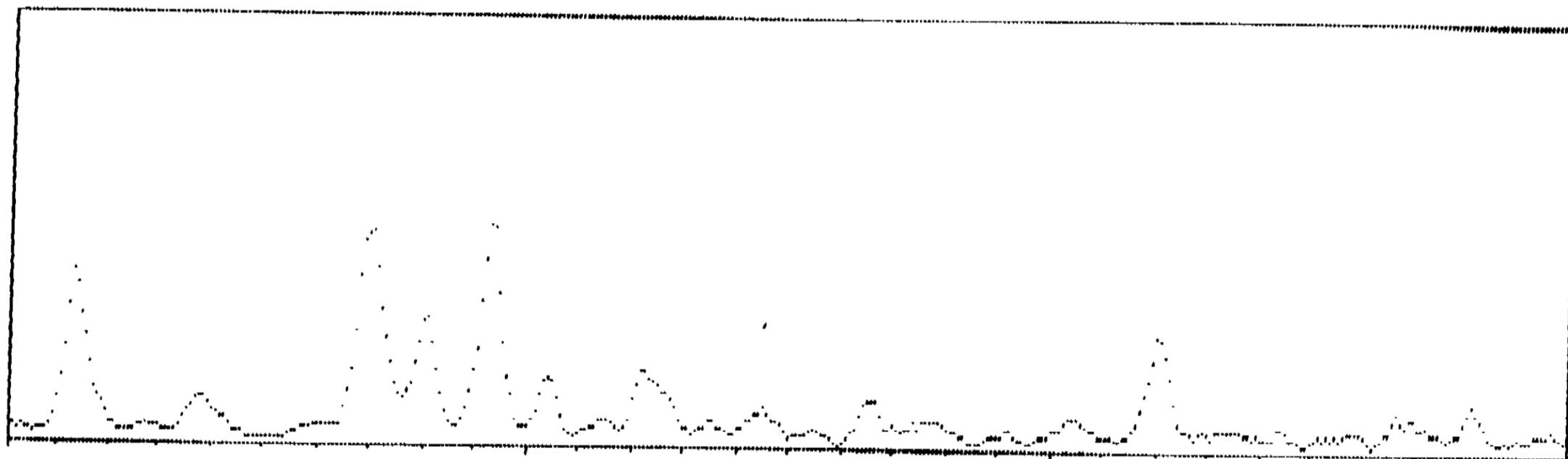
## 1.5 O microfotodensitômetro

Para determinarmos os comprimentos de onda, contidos no espectro de radiação gravados na placa de emulsão espectroscópica, é necessário primeiramente uma determinação precisa das posições relativas das linhas contidas na mesma. Esta tarefa era anteriormente realizada no Centro de Investigações Óticas de La Plata - Argentina, utilizando um comparador semi-automático tipo Grant. No decorrer deste tra-

---

<sup>7</sup>posição inicial e comprimento de onda associado

<sup>8</sup>átomos ou íons que contribuem na composição do espectro de emissão, entretanto não são, a princípio, o objeto de estudo



44.0mm

Figura 1.3: Aspecto gráfico da leitura de intensidade x posição numa placa de emulsão

balho desenvolvemos um “software” a fim de utilizarmos o microfotodensitômetro do Laboratório de Raios Cósmicos (UNICAMP), para a execução desta tarefa.

Esta substituição tem algumas vantagens claras. A primeira é a proximidade deste dispositivo, o que significa uma maior facilidade, baixo custo e rapidez na realização da medida das posições relativas das linhas. Além disso, fornece a determinação da distribuição de intensidade de cada linha e sua intensidade sem a interferência do observador, como era no caso anterior, em que tanto a intensidade como a distribuição de intensidade era atribuída pelo observador dentro de uma escala mental, que dependia implicitamente de sua sensibilidade. No caso atual, a leitura de intensidade é feita com passo de até  $1\mu\text{m}$  e o resultado é armazenado em um arquivo de dados para um posterior processamento. A figura(1.3) mostra o resultado gráfico da leitura da intensidade “versus” posição, num intervalo de aproximadamente 3 mm sobre a placa de emulsão, obtida no experimento sobre o espectro de emissão do xenônio.

Nos parágrafos seguintes, descreveremos com alguns detalhes o microfotodensitômetro e os programas usados para leitura de placas. Também será descrito o uso de um conjunto de programas desenvolvidos na Suécia[9], que têm a função complementar de processar as informações produzidas pelo microfotodensitômetro e produzir a tabela final contendo a intensidade, a largura, a característica (distribuição de intensidade), os comprimentos de onda e o número de onda de cada linha espectral contida na placa de emulsão.

O sistema do microfotodensitômetro NGD 20X20 (MITAKA KOHKI CO, LTDA) é constituído basicamente pelas seguintes unidades: um monitor de TV 12" tipo C1846-03, no qual a imagem digitalizada do objeto em análise (placa) é mostrada; uma unidade XY modelo C1522 com passo de  $1\mu\text{m}$  e uma microcâmara Hamamatsu Photonics acoplada e um microcomputador IBM-30286. Estas unidades se comunicam da mesma maneira que um RS232C. O microcomputador controla o estágio XY e faz a aquisição dos dados. A unidade XY tem uma mesa com área de leitura de 20 cm x 20 cm, na qual é colocada a placa de emulsão.

Quando se usa a objetiva de IC-10 é mostrado no monitor (12") uma área de 1 mm por 1 mm do objeto em análise. Para a objetiva IC-20 a área é de  $500\mu\text{m} \times 500\mu\text{m}$ , enquanto que para objetiva IC-50 a área é de  $200\mu\text{m} \times 200\mu\text{m}$ . A ótica do microfotodensitômetro possui uma lâmpada de halogênio, dois filtros polaróides para controle da intensidade luminosa sobre a fotomultiplicadora e janelas para limitação da área iluminada em que a luz passa pelo objeto e incide sobre a fotomultiplicadora. As leituras que apresentaram melhores resoluções foram aquelas onde usou-se a objetiva IC-10 e janelas 0.5, que correspondem à área de transparência de  $50\mu\text{m} \times 50\mu\text{m}$ . Maiores detalhes técnicos sobre o equipamento podem ser obtidos no manual do mesmo, o qual pode ser encontrado no laboratório do grupo de Raios Cósmicos (Unicamp).

O programa para controle do equipamento e aquisição dos dados, desenvolvido neste trabalho, foi feito em linguagem basic (Apêndice I). Primeiro o usuário indica,

utilizando o controle manual do estágio XY, as posições de início e fim de leitura. A partir das coordenadas destes dois pontos, o computador calcula a equação da reta que os une, e faz com que o estágio XY se mova sobre esta reta com passo determinado pelo usuário ( em geral de  $2 \mu\text{m}$  em  $2 \mu\text{m}$ ), armazenando, a cada passo, a intensidade registrada pelo fotômetro. Os dados de saída são então formatados como inteiros e armazenados em binário num arquivo de dados. A armazenagem com esta formatação tem dois objetivos: O primeiro é economizar espaço de memória, compactando os dados, enquanto que o segundo é compatibilizá-los com a formatação adequada para o processamento posterior, com o conjunto de programas desenvolvido pelo grupo de espectroscopia de Lund-Suécia.

Este parágrafo descreve sucintamente os passos empregados para a leitura de placas, servindo como um guia inicial para realização desta tarefa. Uma vez ligado o sistema do microfotodensitômetro, os procedimentos para a leitura da posição x intensidade nas placas de emulsão são os seguintes:

- Colocar a placa de emulsão na mesa do estágio XY.
- Regular o potenciômetro da lâmpada de halogênio até que o led verde e vermelho acendam simultaneamente.
- Verificar que a objetiva usada seja IC-10 e as janelas sejam 0.5. Caso necessário proceda a troca.
- Focar manualmente a objetiva da câmera até que se observe uma imagem nítida da placa no monitor de TV.
- Em seguida, com o potenciômetro no mínimo, enfoque a janela no monitor de TV, usando o "Slit Focus".
- Repita a operação do item 2.
- Alinhe as janelas da maneira descrita no manual.

- Ajustar a posição da placa sobre a mesa, observando o paralelismo de sua imagem no monitor de TV. Use o controle manual da mesa XY para fazer a varredura prévia sobre a região a ser medida.
- Regular o polaróide até que o indicador do fotômetro esteja marcando 10 para a região mais clara da placa de emulsão.
- Carregar o programa qb (quick basic)
- Carregar o programa LPE90.BAS (leitor de placas de emulsão-comando 90 -Binário)
- Acionar a tecla F-5 para rodar o programa
- Proceda de maneira iterativa com o programa, respondendo e seguindo sua informações fornecidas no monitor do micro.

obs: A velocidade de leitura atual é de cerca de 0,7 mm/mim , para leituras de 2  $\mu\text{m}$  em 2  $\mu\text{m}$ .

## 1.6 Confecção da tabela espectroscópica

Após a leitura da intensidade de cada posição na placa de emulsão, a próxima etapa para a confecção da tabela do espectro de irradiação, é a determinação dos comprimentos de onda ou dos números de onda, a partir das posições relativas das linhas. Esta etapa é realizada usando um conjunto de programas[9] que processam os dados produzidos pelo microfotodensitômetro.

Inicialmente é invocado um “software” gráfico (GRAFED87), que lê os dados e faz uma representação gráfica da posição “versus” intensidade, mostrando a cada tela um comprimento real da placa de 1,2mm. Este programa calcula a intensidade de fundo (background), procede a busca dos picos das linhas (peak-find), registrando em alguns arquivos a intensidade líquida e a característica de cada linha. Estes arquivos

serão utilizados posteriormente por outros programas. A figura(1.4) mostra uma tela gerada por este programa. Os procedimentos básicos para seu uso são descritos a seguir.

O programa GRAFED87 tem um “help” acionado pela tecla F10, que descreve todos os recursos disponíveis neste “software”. Podemos sumarizar os procedimentos básicos de acordo com os itens abaixo:

1. invocar o programa GRAFED87,
2. informar o “drive” e o nome do arquivo(extensão .RDT) a ser processado,
3. determinar o fundo (“background”) acionando as teclas nesta ordem:  
shift< – >F8, F3, 4, F1

4. acionar a tecla F8 para verificar os parâmetros de busca de linhas,

slant-value	20
unresolved	30
first derivative at begining	3
first derivative at end	5
n° of data points	8
maximun dip for average	7
use 3° derivative	N
intensity type	0

5. acione a tecla F3 para verivicar se o programa está localizando apropiadamente as linhas, em caso contrário, altere adequadamente os parâmetros descritos no item anterior,
6. acione as teclas SHIFT< – >F3 para proceder a busca de linhas em todo o arquivo,
7. finalmente, acione a tecla F1 para sair e salvar os resultados.

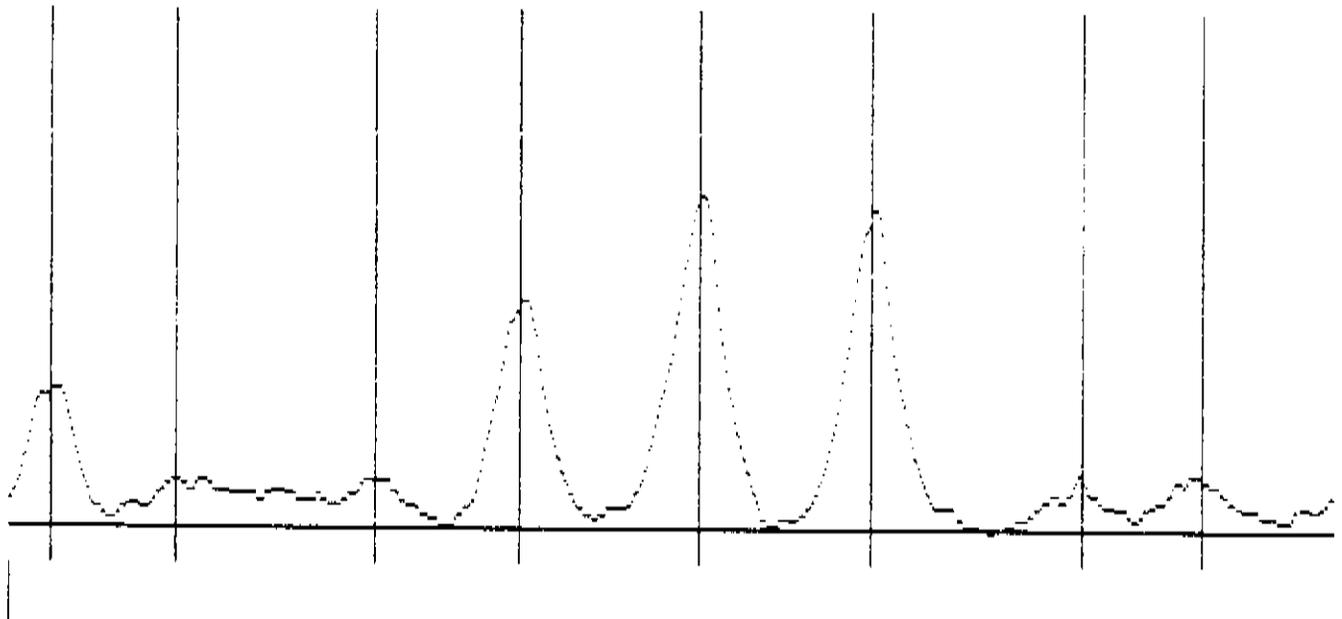


Figura 1.4: Aspecto da tela do micro gerada pelo programa GRAFED87.

O segundo programa invocado é LINED, que a partir dos resultados gerados pelo programa GRAFED87 e das linhas de referências, gera os coeficientes de um polinômio que melhor se ajusta a estas linhas de referência, com o grau escolhido<sup>9</sup> pelo usuário. A partir deste polinômio são interpolados os demais comprimentos de onda contidos no espectro. A avaliação para o trabalho de colocação das linhas de referência e a interpolação, é feita observando a diferença entre o valor do comprimento de onda interpolado e o valor de referência, para cada uma das linhas de referência. Quando esta diferença for menor ou igual a  $0,03 \text{ \AA}$ , o resultado é considerado satisfatório. A figura(1.5) mostra a tela do micro gerada pelo programa LINED, na determinação dos comprimentos de onda relativo ao espectro do xenônio. O programa LINED também tem um “help” interno acionado pela tecla F10.

O programa PRWAVE gera a impressão da tabela obtida, contendo para cada linha as informações na seguinte ordem: posição na placa, intensidade, característica, largura, comprimento de onda( $\text{\AA}$ ), número de onda ( $\text{cm}^{-1}$ ), comprimento de onda de

<sup>9</sup>em geral 2 é suficiente, mas necessariamente deve ser ( $\leq 4$ )

X-value	Intens	W	Note	Wavelength	SO	Reference	Line: Spek	Max: Note
10.566	144	179	L	526.6275	1		<V	
10.696	47	179	L	527.2287	1		>V	
10.812	104	255		527.7619	1		<V	
10.988	94	255		528.5734	1		<V	
11.177	85	255		529.4444	1		>V	
11.328	92	21		530.1412	1		<V	
11.539	948	21		531.1137	1			92%
11.550	732	220	R	531.1649	1	531.1770	VII	
11.644	112	220	R	531.5984	1		>V	
11.935	46	220	R	532.9399	1		>V	
12.126	552	21		533.8205	1	533.8440	VII	54%
12.128	692	62	L	533.8303	1		<V	
12.152	362	62	L	533.9410	1		<V	
12.288	172	62	L	534.5681	1		<V	
12.388	132	153		535.0292	1		<V	
12.608	89	153		536.0456	1		>V	
12.974	162	123	R U	537.7315	1		<V	
13.074	152	123	R U	538.1926	1		<V	
13.258	82	123	R U	539.0407	1		>V	

Figura 1.5: Aspecto da tela do micro gerada pelo programa LINED.

posição(mm)	int.	carac.	larg.	$\lambda(\text{\AA})$	$\sigma(\text{cm}^{-1})$	referência	$\Delta\lambda$	coment.
11.935	46	R	220	532.830	187677.16			
12.126	552		21	533.713	187366.48			
12.152	362	L	62	533.834	187324.06	533.844	-0.010	VII
12.288	172	L	62	534.463	187103.53			

Tabela 1.2: Parte de uma tabela gerada na análise do xenônio

referência (quando for o caso), diferença entre o comprimento de onda de referência e o calculado, e por último algum comentário que queira ser introduzido pelo usuário. O quadro a seguir mostra um trecho da tabela produzida para o espectro do xenônio.

# Capítulo 2

## Eficiência do TPIII-UNICAMP e classificação iônica.

Durante a realização do trabalho de Tese, o theta-pinch TPIII-UNICAMP foi modificado em relação a sua configuração elétrica inicial em três pontos principais: na linha de transmissão, na chave de disparo do banco de capacitores e na bobina de campo magnético. Estas mudanças foram necessárias para se produzir espectros de íons mais altamente ionizados, onde visamos obter uma maior eficiência de transferência de energia entre o banco de capacitores e o plasma, o que é importante não só pelo aspecto de menor fadiga do sistema como também para um trabalho de classificação iônica mais eficiente, atendendo assim melhores as condições de uso com fins espectroscópicos, onde uma taxa de cerca de 30 disparos por minuto do banco de capacitores é normalmente usada, o que é substancialmente maior do que a normalmente usada em theta-pinches com fins ao estudo de processos de plasma como confinamento e aquecimento.

### 2.1 Modificações no TPIII-UNICAMP.

O TPIII-UNICAMP é um sistema constituído basicamente por um banco de capacitores ( $7,89\mu F \times 60kV$ ), uma chave de alta tensão e corrente, uma linha de transmissão, um sistema de bobinas para geração de campo magnético axial e um

tubo de vidro acoplado a um espectrógrafo, no qual o gás de trabalho é mantido à pressão controlada. A evolução desta máquina pode ser dividida em quatro estágios, a saber:

1. O sistema era constituído inicialmente por um chave de alta tensão do tipo distorção de campo, produzida em Los Alamos (Scientific Lab.), uma linha de transmissão de 12 cabos coaxiais (80 nH/m) de 1,80 m de comprimento, um tubo pirex de 100 mm de diâmetro e 1,5 m de comprimento e um conjunto de até 5 bobinas de única espira de latão (1cm de parede, 10cm de comprimento cada), conectadas em paralelo.
2. Foi introduzido uma nova chave de alta tensão pressurizada, que permitiu a colocação de uma nova linha de transmissão constituída por três placas de alumínio. Com esta modificação, a indutância do conjunto, chave e linha de transmissão, reduziu a aproximadamente 18% do antigo valor.
3. Nesta fase, o número de espiras foi aumentado de uma para quatro espiras e passou a ser usado um único solenóide de 20 cm de comprimento.
4. Esta última, consiste da substituição do tubo de pirex por um novo tubo de quartzo com diâmetro menor, da substituição da bomba de difusão por uma turbo-molecular e da diminuição da distância do theta-pinch para o espectrógrafo de 1,5 metros para 50 centímetros.

Através de um raciocínio relativamente simples, chegamos à conclusão que precisávamos fazer algumas modificações na linha de transmissão de energia, a fim de melhorar a sua eficiência. No primeiro estágio, o sistema( linha + banco + chave) tinha uma indutância de 176 nH, contra uma indutância de aproximadamente 32 nH nas bobinas de campo. A energia inicial armazenada no banco de capacitores ( $1/2 CV^2$ ), no momento da descarga é transformada reativamente em energia magnética, nas várias indutâncias ( $L_k$ ) envolvidas ( $1/2i^2 \sum_k L_k$ ). Como o circuito de descarga é um circuito RLC série, podemos afirmar que a fração da energia inicial que é

ofertada ao plasma, através das bobinas de campo, é proporcional à razão entre a indutância das bobinas de campo e a indutância do sistema. Com as modificações mencionadas no item 2 acima, a nova indutância do sistema ficou reduzida a 31,2 nH. O efeito positivo desta modificação foi verificado em alguns resultados espectrográficos obtidos para o argônio. Na primeira montagem (estágio 1), a tensão de trabalho empregadas eram da ordem de 24kV, quando eram obtidos, com relativa dificuldade, espectros do ArVII (principalmente as linhas ressonantes). Com as modificações usando uma tensão de apenas 12kV, foi obtido um espectro mais rico de ArVII. Este resultado está de acordo com a medida de eficiência, realizada usando os oscilogramas da curva de decaimento da corrente de descarga do banco de capacitores.

As modificações propostas no estágio 3 e 4 têm a finalidade de aumentar a densidade de energia magnética no tubo theta-pinch, respeitando as condições para obtermos o "breakdown" induzido[4]. O resultado do aumento do número de espiras foi verificado, tanto pela medida de eficiência quanto comparando duas placas de emulsão espectrográfica, obtidas com uma única espira e com quatro espiras. A análise destas placas revelou que foi obtido um espectro mais energéticos com a inclusão de quatro espiras no solenóide. As modificações propostas no estágio 4 visam à obtenção de um vácuo mais limpo e livre de óleo e conseqüentemente um espectro livre de linhas de carbono que possivelmente estejam encobrendo algumas linhas de intercombinações como por exemplo as do ArV . Além disso, o encurtamento da distância entre o plasma e o espectrógrafo diminui a atenuação luminosa causada pelo meio entre o theta-pinch e o espectrógrafo.

Todas as modificações propostas visam melhorar a eficiência na transferência de energia, aumentando a vida útil do sistema e operando de modo a obter um espectro relativamente intenso, até a faixa de comprimento de onda que o nosso espectrógrafo nos permite observar( atualmente  $\lambda \geq 300\text{\AA}$ ), sem, no entanto, aumentar a temperatura do plasma envolvido além do ponto (relacionado ao potencial de io-

nização) em que a ótica do sistema não nos permite enxergar . Neste ponto temos, possivelmente, a maior diferença entre o theta-pinch com fins espectroscópicos e os com a finalidade de obter altas temperaturas nas pesquisas de fusão. Na figura(2.2) temos esquematicamente desenhados os dois primeiros estágios, mostrando principalmente as mudanças na linha de transmissão, enquanto a tabela(2.1) mostra alguns parâmetros comparativos entre os diversos estágios, onde a eficiência( $\eta$ ) foi obtida usando a equação(2.1)

$$\eta = 1 - \frac{T_p^3 \times \ln((I_1/I_2)_0)}{T_0^3 \times \ln((I_1/I_2)_p)}, \quad (2.1)$$

onde T é o tempo entre dois valores extremos de corrente  $I_1$  e  $I_2$ , obtidos da curva de decaimento da corrente de descarga do theta-pinch (senóide amortecida), o índice p indica a presença do plasma, enquanto o índice zero indica sua ausência. Esta equação foi obtida a partir de uma manipulação adicional da expressão para eficiência obtida na referência [13], onde a descarga é representada por um circuito RLC série e a influência do secundário gasoso (plasma) é introduzido como uma resistência adicional colocada em série. A eficiência definida como a razão entre a energia dissipada no plasma( $R_p$ ) e a armazenada no capacitor, fornece para este tipo de circuito a expressão:

$$\eta = \frac{\int i^2 R_p dt}{1/2CV^2} = \frac{R_p}{R_0 + R_p}, \quad (2.2)$$

onde V representa a tensão no banco de capacitores(C). A figura(2.1) mostra um sinal típico da corrente de descarga do banco de capacitores no theta-pinch, do qual obtivemos os valores de  $I_{0,p}$  e  $T_{0,p}$  para usarmos na equação(2.1). A curva menos atenuada foi obtida na ausência de plasma enquanto a que foi fortemente atenuada indica uma boa transferência de energia para o plasma. Os principais parâmetros e dispositivos da estrutura atual do TPIII-UNICAMP está listado a seguir:

- Largura de linha de transmissão de 90cm.
- Comprimento total do linha de 1,80m.

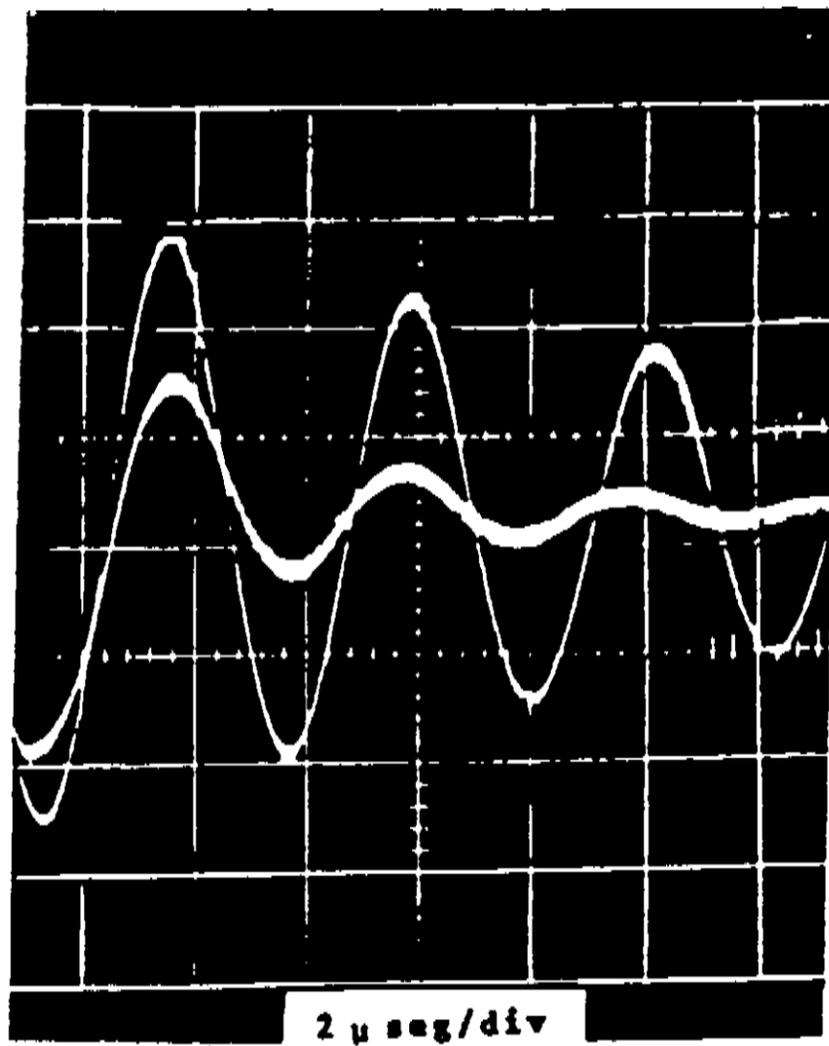


Figura 2.1: Sinal típico da corrente de descarga do TPIII-UNICAMP para tensão de 8 kV e pressão de 25 mtorr de argônio.

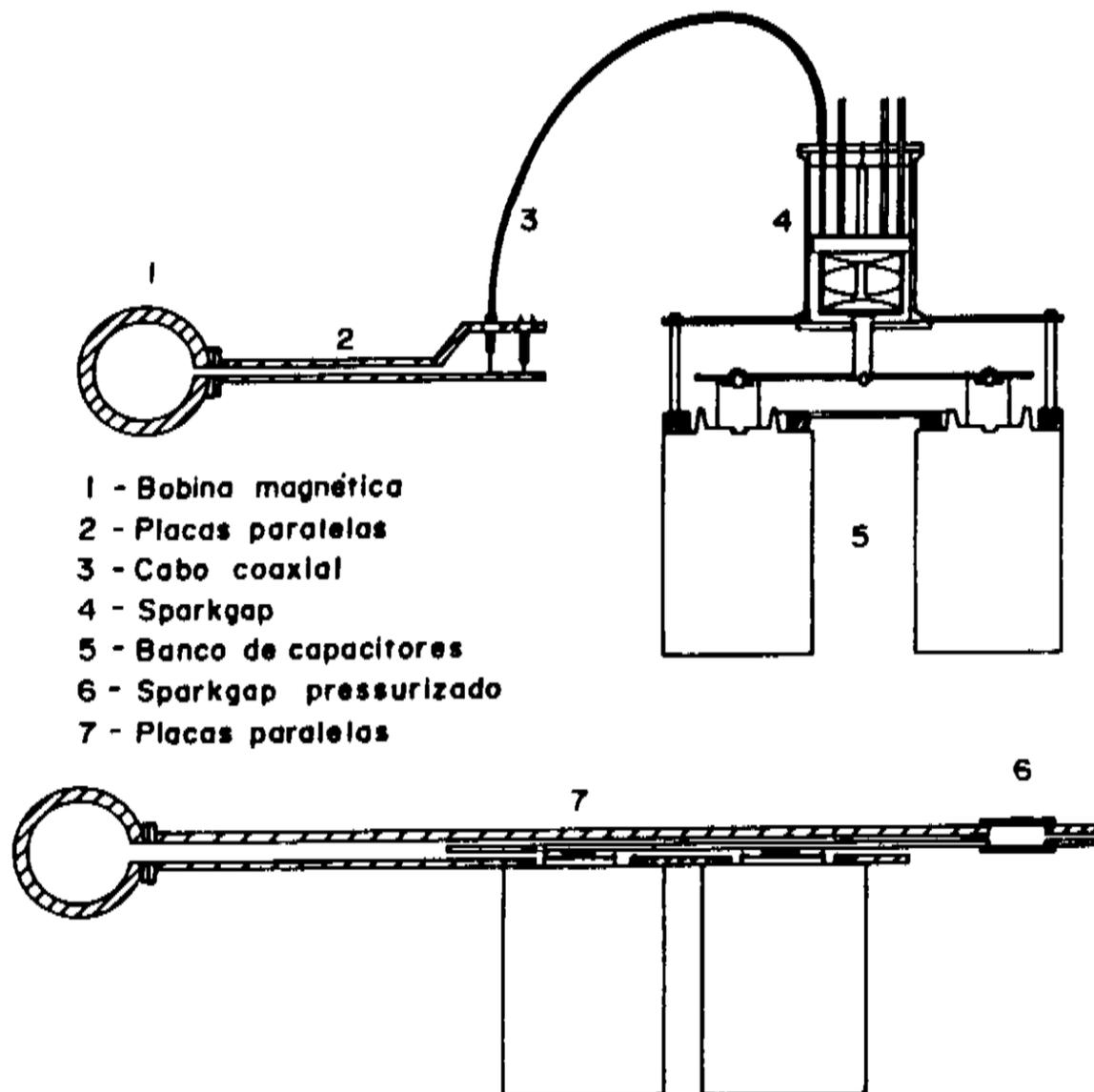


Figura 2.2: Estágios 01 e 02 do TPIII-UNICAMP.

parâmetros	estágio 1	estágio 2	estágio 3	estágio 4
Indutância do sistema	176 nH	31,2 nH	31,2 nH	31,2 nH
Indutância das bobinas	32,2 nH	32,2 nH	532 nH	/
número de espiras	01	01	04	08
eficiência( $\eta$ )	5%	22%	28%	/
diâmetro do tubo	100 mm	100 mm	100 mm	33 mm
$B$ à 10kV	$2,1 \times 10^9$ G/s	$6,9 \times 10^9$ G/s	$1,2 \times 10^{10}$ G/s	/

Tabela 2.1: Alguns parâmetros do TPIII-UNICAMP

- Banco de capacitores de  $7,89\mu F \times 60kV$ .
- Indutância do sistema igual a 31,2 nH.
- Chave pressurizada tipo “sparkgap” .
- Eletrodos de Eukonita (liga de Wofrânio tungstênio).
- Fonte de alimentação Marca Multitest  $60kV \times 150mA$ .
- Sistema de pressurização controlado temporalmente por circuito eletrônico.
- Gás argônio comercial e ar comprimido para controle da tensão de disparo da chave “sparkgap”.
- Tubo de quartzo  $\phi = 40cm \times 50cm$  de comprimento.
- Linha de transmissão constituída por três placas planas de alumínio justapostas e isoladas eletricamente por folhas de mylar.
- Bobina multivolta de lâminas de cobre de 0.2mm de espessura e 20 cm de largura.
- Sistema de controle de pressão do gás espectroscópico modelo barocell 500 da Edwards do Brasil, com válvula servo-controlada.

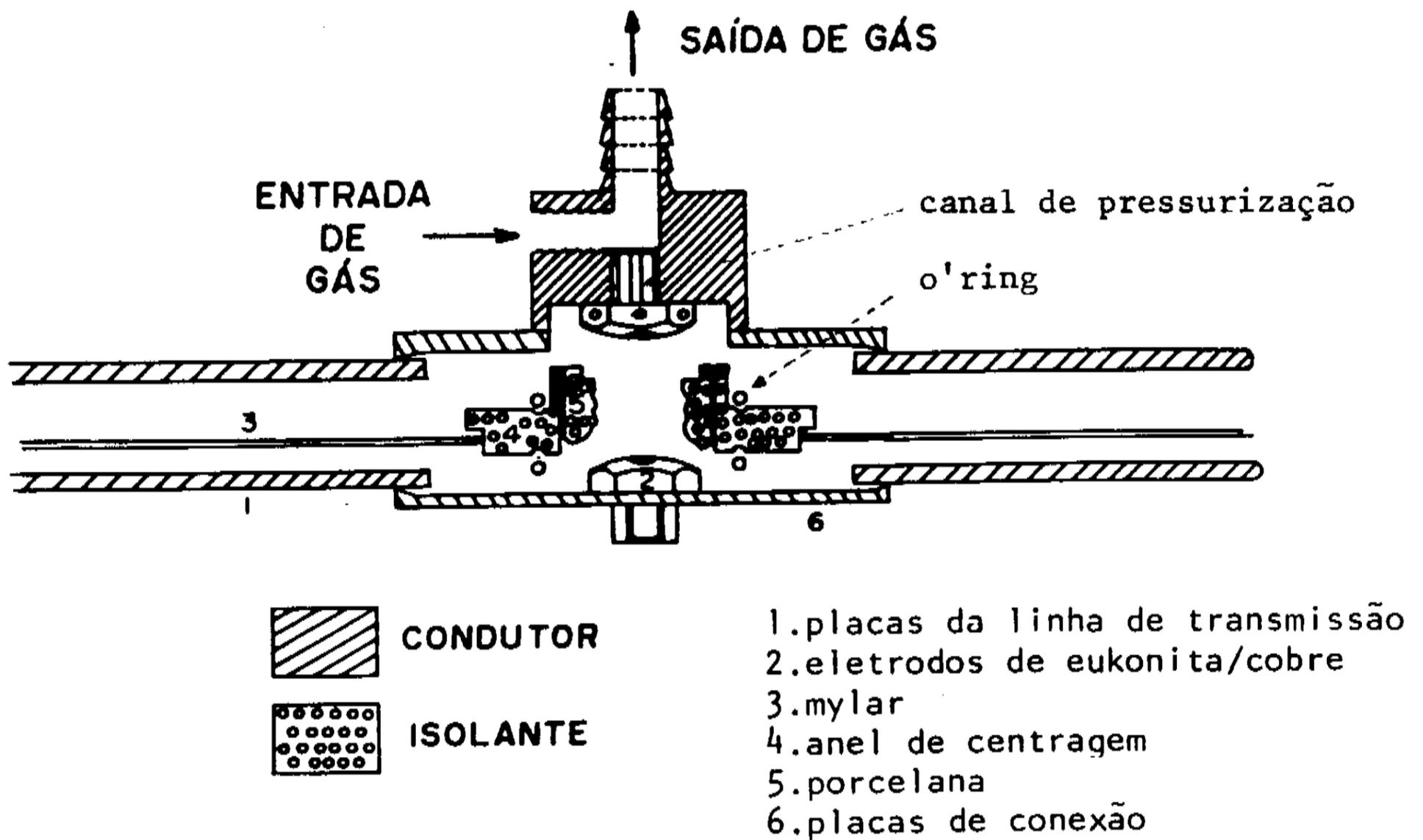


Figura 2.3: Detalhes da conexão entre a linha de transmissão e chave “sparkgap”.

- Sistema de vácuo composto por uma bomba turbo molecular VP 500 da Varian e mecânica duplo estágio EM28 da Edwards.
- Fonte de RF 28MHz x 25 Watts.
- Espectrógrafo de placas com incidência normal de 2 metros.

Neste sistema, a parte mais crítica consiste na isolação de alta tensão devido a proximidade dos elementos para se obter uma baixa indutância na linha de transmissão. A figura(2.3) mostra alguns detalhes mecânicos da chave “sparkgap” pressurizada, enquanto que a figura(2.4) mostra os detalhes da conexão entre um dos capacitores e a linha de transmissão.

### 2.1.1 Classificação iônica usando “crowbar”.

A classificação iônica dos espectros obtidos a partir de um theta-pinch, é feita, tradicionalmente, avaliando-se as mudanças no espectro de emissão obtido, quando a pressão dos gás de trabalho e/ou a tensão no banco de capacitores são alteradas.

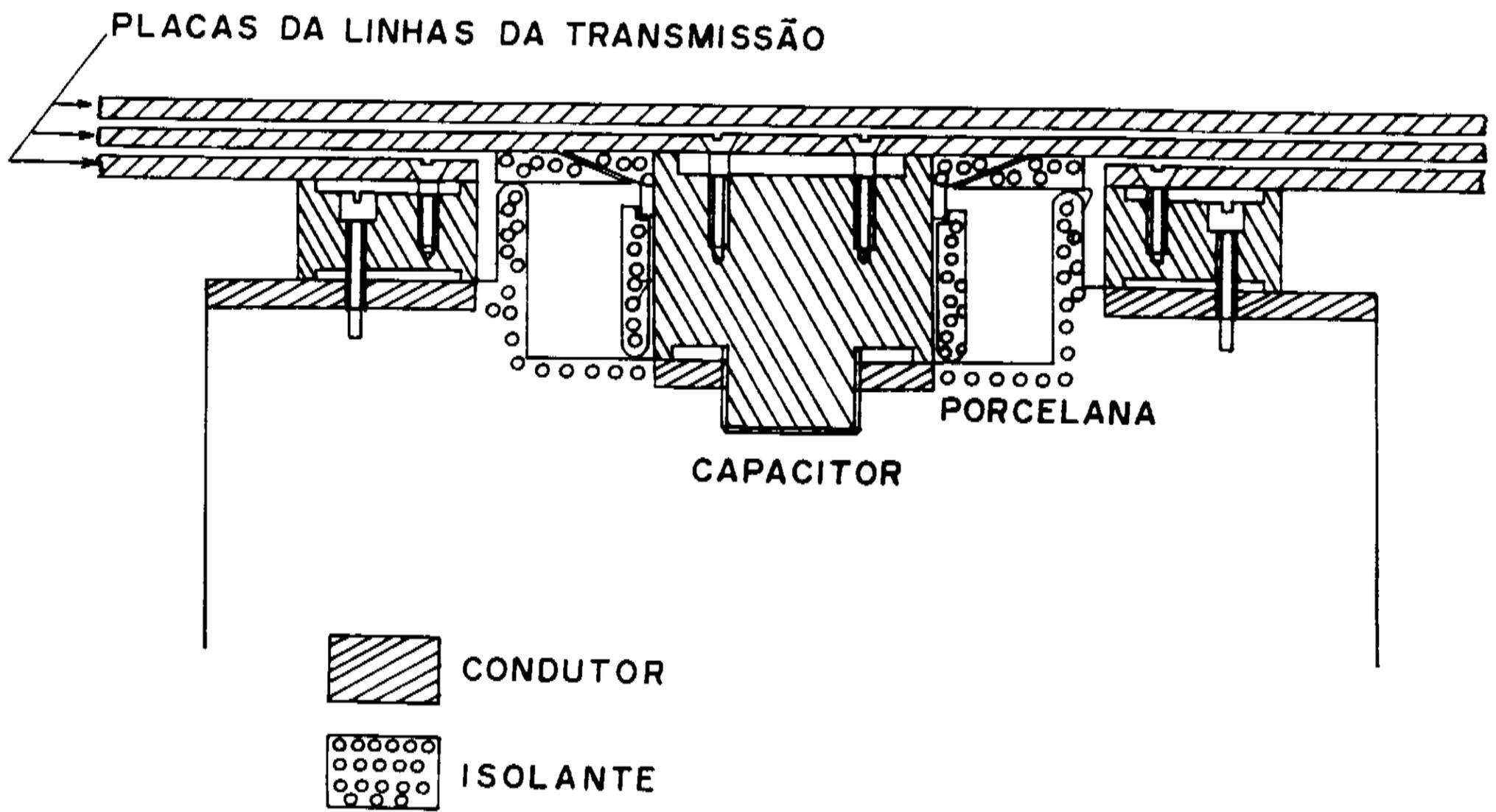


Figura 2.4: Detalhes da conexão entre a linha de transmissão e um dos capacitores do banco.

Entretanto, as grandes variações normalmente usadas[2], mudam drasticamente a dinâmica do plasma, o que podem causar uma certa insegurança na classificação iônica obtida. Neste trabalho, nós propomos um modo alternativo de fazer a classificação iônica, usando uma chave adicional no circuito de descarga do theta-pinch, a chamada chave “crowbar”, no qual nenhuma mudança nas condições de “pré-breakdown” são exigidas.

A descarga produzida em um theta-pinch pode ser vista como a descarga em um circuito RLC, em que a cada semi-ciclo subsequente a energia envolvida diminui, e em cada um deles, o plasma é comprimido e aquecido. Quando o campo magnético confinante se anula o plasma expande e se resfria ao atingir as paredes do vaso que o contém. Como a escala de energia de um circuito RLC é decrescente com o tempo, em cada um dos vários semi-ciclos, a temperatura final do plasma vai decrescendo com o tempo. Em cada um dos ciclos de compressão e aquecimento do plasma, o gás de trabalho vai passando por vários estágios de ionização, até chegar ao grau máximo

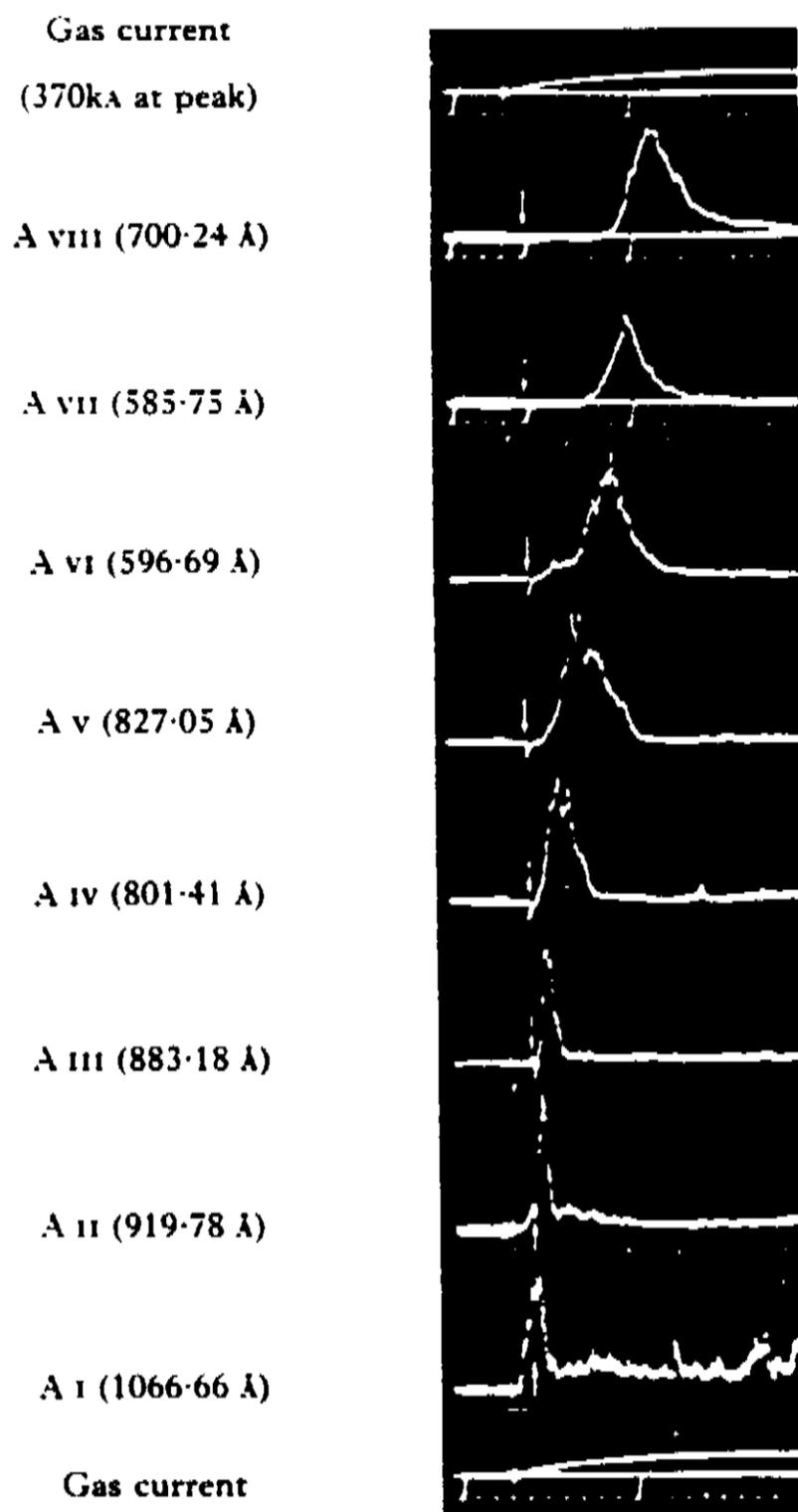


Figura 2.5: Resultado da espectroscopia resolvida em theta-pinch.

de ionização permitido pela máxima temperatura atingida pelo plasma em cada semi-ciclo. A figura(2.5), retirada da referência [14] traduz o resultado das medidas da evolução temporal dos graus de ionização do argônio durante uma descarga em um theta-pinch, usando espectroscopia resolvida no tempo. Nela, são mostrado alguns estágios de ionização em um único semi-ciclo de evolução da corrente de descarga, e está aqui exposta para ilustrar o fato de que o gás vai atingindo graus de ionização cada vez maiores, à medida que a corrente de descarga aumenta.

Como a luz coletada pelo espectrógrafo consiste da superposição da luz emitida em cada um dos semi-ciclos, a idéia básica para fazer classificação iônica, ou seja, fazer a associação entre as linhas espectrais obtidas e o íon que as produziu, con-

siste em interromper eletricamente alguns dos semi-ciclos da parte final da curva de decaimento da corrente, produzidos em cada disparo da chave de alta. Esta interrupção afeta diferentemente o espectro de emissão de cada um dos íons produzido, sendo mais atenuada a emissão dos íons com graus de ionização menores.

A técnica descrita sucintamente acima foi aplicada na obtenção do espectro do xenônio, usando-se: 300 disparos do banco de capacitores, pressão de 10 mbar, tensão no banco de 10 kV e os parâmetros de máquina descrito na tabela 01 para o estágio 3. A fim de verificarmos o efeito do uso da chave "crowbar" sob o espectro de emissão do theta-pinch, realizamos dois experimentos nas mesmas condições, sendo que, somente em um deles a chave "crowbar" foi acionada de modo a interromper, os processos de compressão e aquecimento do plasma após o segundo semi-ciclo de evolução da corrente de descarga. Em seguida, fizemos a razão entre a intensidade de cada linha espectral sem usar e usando a chave "crowbar" respectivamente. Usando linhas previamente conhecidas na literatura, verificamos que a atenuação na intensidade das linhas espectrais foram maiores para íons de menor estágio de ionização e que se manteve aproximadamente constante para um mesmo íon. Por exemplo, verificamos que a razão de intensidade foi de  $0.96 \pm 0.02$  para linhas de Xe VIII e  $0.85 \pm 0.03$  para linhas de Xe VII. Isto fez com que fosse possível uma regra de calibração para classificar ionicamente as linhas desconhecidas. Deve ser ressaltado que a regra de calibração é específica para cada tipo de gás e as condições experimentais envolvidas. A figura(2.6) mostra alguns resultados da medida de intensidade comparativa, obtida usando um foto-densitômetro de passo micrométrico do grupo de raios Cósicos-Unicamp e um software gráfico GRAFED87, onde estão ressaltados os efeitos sobre linhas conhecidas de Xe VII, Xe V, Xe IV e sobre duas linhas não tabeladas que provavelmente pertencem ao espectro do Xe VIII devido à pouca atenuação verificada. Uma descrição mais detalhada desta técnica foi publicada recentemente[15].

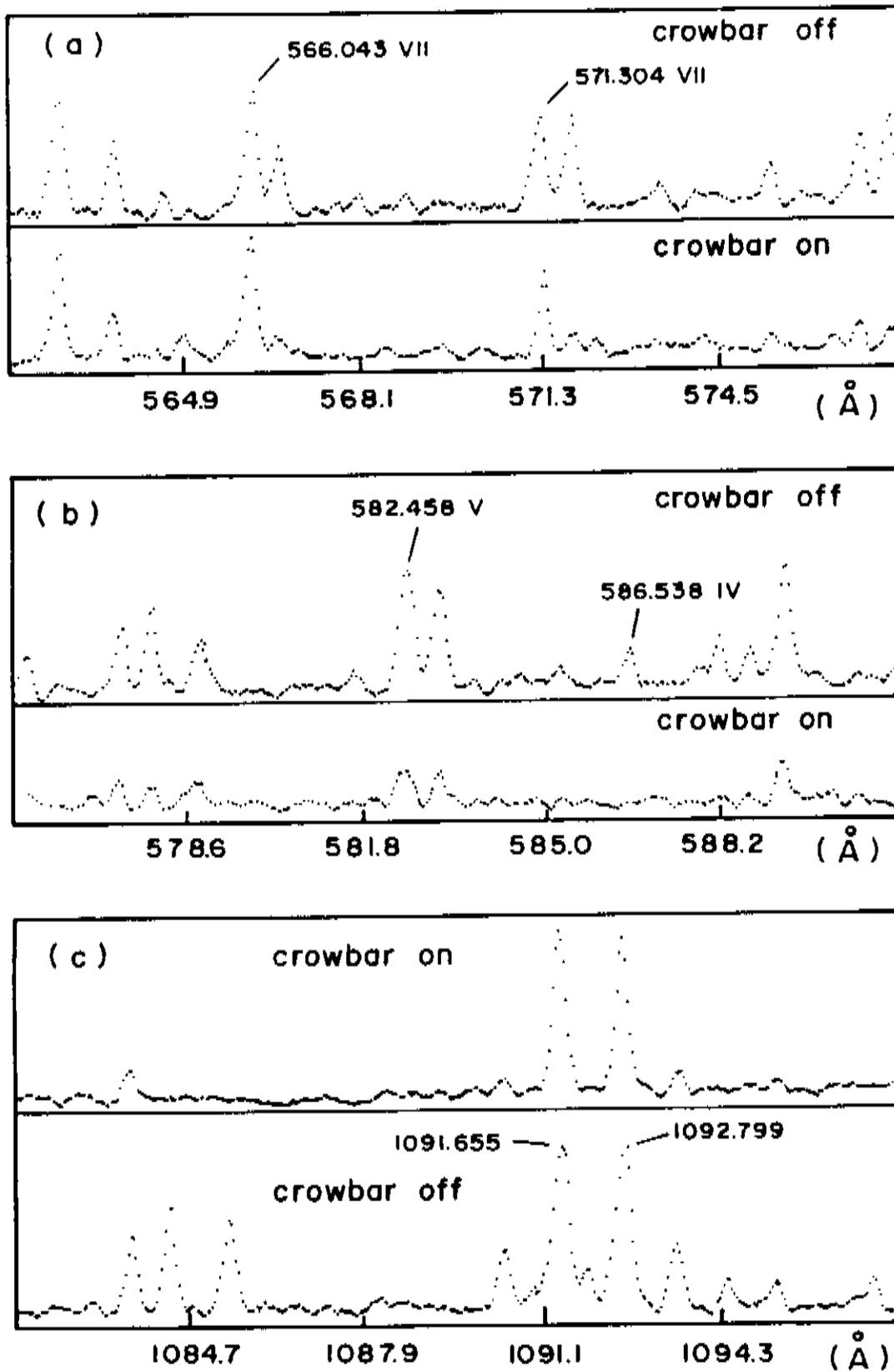


Figura 2.6: Comparação entre as intensidades espectrais de algumas linhas sob ação do crowbar, fornecida por um micro-fotômetro, onde vê-se: a-baixa atenuação em duas linhas do Xe VII, b- muita atenuação em linhas do Xe IV e V, c- leve atenuação em duas linhas não tabeladas.

# Capítulo 3

## Fundamentos Teóricos e cálculos computacionais

### Lista de símbolos e constantes

$v$  - velocidade

$c$  - velocidade da Luz

$h$  - constante de Planck ( $\hbar = h/2\pi$ )

$m$  - massa

$V$  - função potencial elétrico

$\vec{l}$  - momento angular orbital

$E$  - energia

$\vec{r}$  - coordenada espacial

$a_0 = \hbar/m_e^2$  - raio de Bohr

$Ry = m_e^4/2\hbar^2$  - constante de Rydberg

$e$  - carga elementar

$\sigma$  - número de onda

$\vec{s}$  - momento magnético de spin

$n$  - número quântico principal

### 3.1 O problema básico.

Do ponto de vista teórico, o problema a ser resolvido para se encontrar o sistema de níveis de energia de um átomo ou íon, consiste em resolver a equação de Schrödinger:

$$H \Psi^k = E_k \Psi_k. \quad (3.1)$$

Para se incluírem os efeitos relativísticos apropriadamente, devemos resolver a equação de Dirac ao invés da equação de Schrödinger. Contudo, para a maior parte dos problemas de interesse é suficiente considerar somente as correções relativísticas até primeira ordem em  $v/c$ . Estas correções derivadas da equação de Dirac, resultam, para um potencial central, na mesma equação de Schrödinger, com exceção de três novos termos no Hamiltoniano  $H$ : o termo chamado de spin-órbita  $[(\hbar^2/4m^2c^2)(2/r)\vec{l}\cdot\vec{s}]$ , que representa a interação magnética entre o momento magnético de spin do elétron  $\vec{s}$  e o campo magnético que o elétron “vê” como resultado de seu movimento orbital através do campo elétrico do núcleo; o termo chamado de termo de Darwin  $[-(\hbar^2/4m^2c^2)\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r}]$ , que pode ser pensado como surgindo de um momento elétrico induzido relativisticamente e um termo chamado de massa-velocidade  $[-1/2mc(E - V)^2]$  que surge devido à variação relativística da massa com a velocidade.

As funções de onda que são soluções da equação(3.1) são funções de  $4N$  coordenadas (três espaciais e uma de spin para cada um dos  $N$  elétrons). Como para  $N > 1$  não existe solução exata, soluções numéricas são empregadas, onde, além de uma série de aproximações serem feitas, as funções de onda contêm alguns parâmetros para serem ajustados aos dados experimentais.

O recurso computacional que dispomos utiliza o método de Hartree-Fock, que baseado em uma única função derivada do determinante de Slater, constituído de funções spin-orbitais para um elétron, e no princípio variacional aplicado à equação de Schrödinger para  $N$  elétrons, resulta em um conjunto de equações integrodiferen-

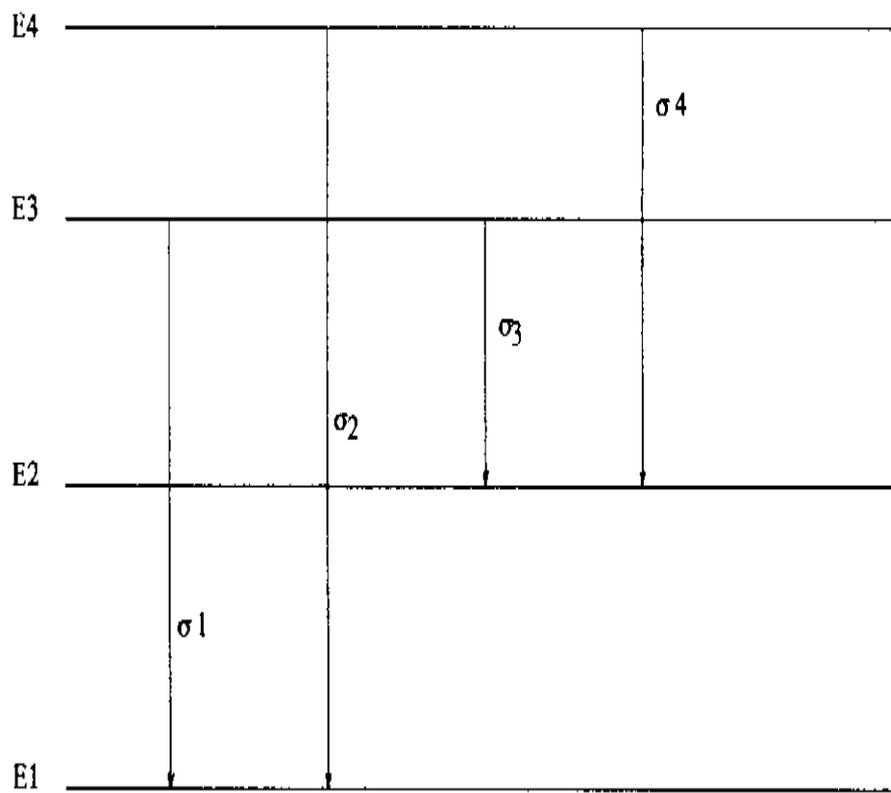


Figura 3.1: Diagrama de Grotrian hipotético mostrando 4 níveis de energia e quatro transições.

ciais não-lineares acopladas para um elétron.

Do ponto de vista experimental, o problema de inferir os possíveis níveis de energia de um átomo ou íon a partir do espectro de linhas observados, consiste em obter um diagrama de Grotrian. Basicamente se deve calcular as diferenças entre os números de onda de cada par de linhas  $i,j$  ( $\Delta_{i,j} = \sigma_i - \sigma_j$ ), e observar dentro de uma pequena margem de erro, aquelas que aparecem várias vezes. Cada valor  $\Delta_{i,j}$  nestas condições, representa a diferença entre um par de níveis. Para exemplificar o que foi dito, a figura(3.1) expõe um diagrama de Grotrian para um átomo hipotético, onde as diferenças dos números de onda  $\sigma_2 - \sigma_1$  e  $\sigma_4 - \sigma_3$  são iguais e correspondem à diferença de energia entre os níveis  $E_4$  e  $E_3$ , enquanto que a diferença entre  $\sigma_1$  e  $\sigma_3$  é igual à diferença entre  $\sigma_2$  e  $\sigma_4$  e correspondem à diferença entre os níveis  $E_2$  e  $E_1$ . Somente a diferença de energia pode ser obtida desta maneira, contudo temos ainda alguns pontos de apoio que podem ajudar na determinação da estrutura dos níveis energéticos. As linhas mais intensas envolvem em geral, níveis mais inferiores

<sup>1</sup>, devido ao fato destes serem os níveis mais populados. Outro ponto de apoio está em associar critério das forças do oscilador com a separação entre os níveis, (níveis mais proximamente espaçados e relacionados a transições pouco intensas tendem a ser os de maiores energias, observados propriamente os possíveis multipletos em questão )

Para átomos simples, a análise empírica descrita anteriormente funciona bem, entretanto para átomos mais complexos, geralmente surgem sérias dificuldades, dentre as quais podemos citar algumas:

- Os pequenos erros exigidos na análise. Para uma análise ser considerada aceitável, os erros cometidos não devem ultrapassar alguns centésimos percentuais ( $10^{-2}\%$ ). Assim erros espúrios podem causar muita confusão, na determinação da estrutura fina destes átomos complexos.
- Importantes linhas espectrais podem não aparecer, ou por serem de pouca intensidade, ou por serem mascaradas por linhas mais intensas, o que pode provocar uma descontinuidade na determinação da estrutura atômica.
- A sobreposição ao espectro de interesse do espectro de impurezas ou de outros estágios de ionização<sup>2</sup>. Neste caso, a tarefa experimental de classificação iônica tem a função crucial de separar a parte do espectro que é indesejável na análise.

Apesar de todos os esforços realizados no desenvolvimento da teoria sobre estrutura atômica e relevantes avanços terem sido conseguidos, as previsões puramente teóricas, ainda assim, fornecem valores com um erro da ordem de 10 a 20% , o que pode ser considerado resultados excelentes, tendo em vista estar se tratando de problemas de muitos corpos. Estas previsões podem ser melhoradas tendo como base os resultados experimentais anteriores, para que estes lhe sirvam de base na

---

<sup>1</sup>fundamental e primeiro excitado basicamente

<sup>2</sup>Costumeiramente, ocorre a presença de vários estágios de ionização em theta-pinch. Isto é um princípio geral para todas as fontes espectrais.

colocação dos vários parâmetros teóricos envolvidos no cálculo numérico de níveis e transições atômicas . Particularmente são obtidos bons resultados, quando se usam os parâmetros ajustados para a sequência isoeletrônica do íon em questão. Desta maneira, as previsões teóricas constituem em geral, apenas um ponto de apoio no trabalho de análise experimental, não tendo um caráter decisivo e sim excludente, ou seja, ela apenas indica, de maneira aproximada, a estrutura atômica procurada e muitas vezes descarta uma análise equivocada, sem, no entanto, afirmar qual está correta. Para uma análise da estrutura atômica bem sucedida, a parte experimental é decisiva, sendo de fundamental importância esforços no sentido de refinar cada vez mais o experimento em si, ou pelo menos, os cuidados que devem ser feitos rotineiramente em trabalhos com precisão do nível exigido em trabalhos de espectroscopia.

## 3.2 Notação espectroscópica

O estado de um átomo ou íon é descrito em termos de alguns números quânticos. Em geral, é suficiente para caracterizá-lo, usarmos os números quânticos: principal  $n$ , azimutal  $l$ , de spin  $s$  e outros ligados às possíveis projeções dos momentos angulares. Dependendo do tipo de acoplamento em questão, pode ser usado o número quântico ligado ao momento angular total  $J^3$  e suas projeções previstas pelo teorema geral de adição do momento angular. A notação espectroscópica tem a finalidade de indicar, de maneira mais sucinta e clara possível, de qual estado do átomo ou íon estamos tratando, naturalmente fazendo menção de quais os números quânticos que o caracterizam.

De maneira geral definimos inicialmente um “pseudo-estado”, como sendo caracterizado apenas pelos números quânticos principais e azimutais e quantos  $m$  elétrons ocupam cada orbital  $l$ , ou seja,  $n l^m n' l'^m \dots$ , o qual damos o nome de **configuração**. Em geral a designação relativa aos elétrons mais internos que constituam camadas

---

<sup>3</sup>é o único número quântico que se conserva em todas as representações  $jj$ ,  $LS \dots$

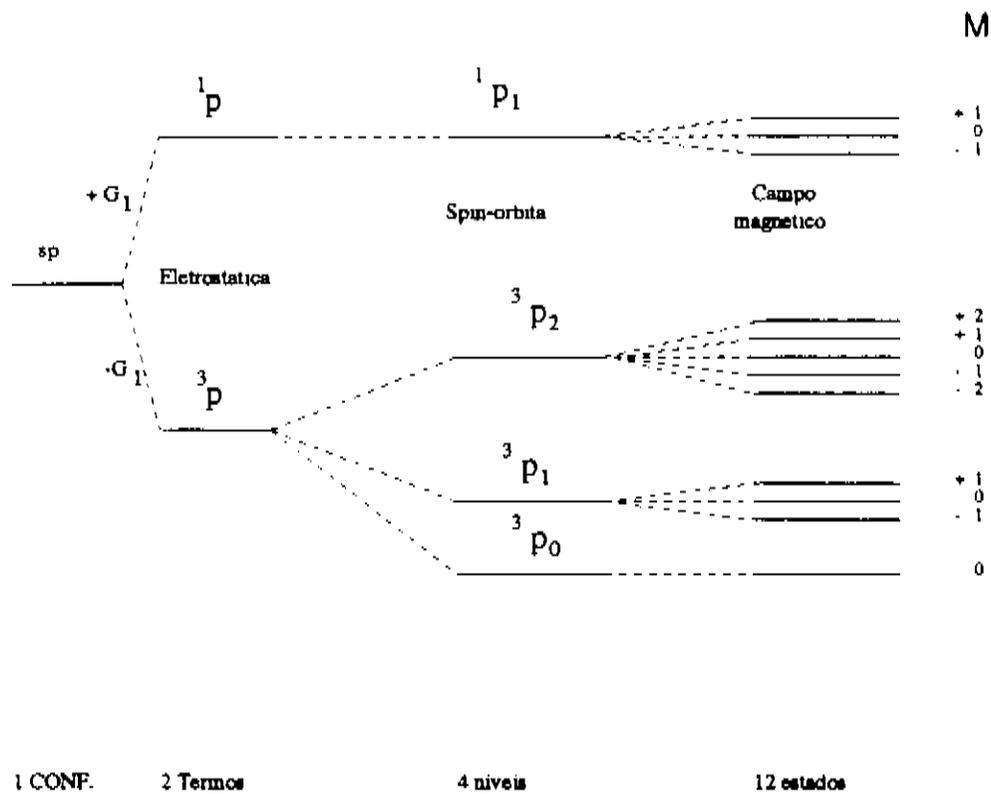


Figura 3.2: Digrama exemplificando a notação espectroscópica para uma configuração  $sp$  com acoplamento LS

fechadas<sup>4</sup> é omitida. Como exemplo podemos citar a configuração excitada para o Lítio neutro,  $2p^1$  ( $n = 2, l = p \Rightarrow l = 1, m = 1$ ), onde está de maneira implícita que a notação completa deveria ser  $1s^2 2p^1$ , ou seja, temos além do elétron  $2p$ , dois elétrons  $1s$ .

O momento angular total  $\vec{J}$  de um átomo ou íon livre da ação de campos externos é uma constante de movimento. Por definição, ele resulta da soma dos momentos angulares e spins de todos os elétrons do átomo. As diferentes maneiras de adicionarmos estes momentos individuais da origem aos distintos **esquemas de acoplamento**. O esquema de acoplamento adequado para cada caso depende da intensidade relativa das várias interações: (a) órbita-órbita ( $l_i, l_k$ ); (b) spin-spin ou interação de troca ( $s_i, s_k$ ); (c) spin-órbita ( $l_i, s_i$ ) e (d) spin-outra-órbita ( $s_i, l_k$ ) ( $i \neq k$ ). As interações do tipo (a) e (b) são devido quase exclusivamente à forças eletrostáticas, enquanto que as do tipo (c) são magnéticas. As interações do tipo (d) são des-

<sup>4</sup>todos os possíveis orbitais completamente ocupados p. ex.  $s^2 p^6$  etc

prezíveis no contexto. A sequência de adição dos momentos angulares segue na ordem decrescente da energia de interação.

Os esquemas de acoplamento mais usados em espectroscopia atômica são:

1. **LS**, onde é somado os momentos angulares de todos os elétrons, resultando num momento angular orbital total  $\vec{L}$  e todos os momentos de spin, resultando num momento total de spin  $\vec{S}$ , obtendo-se assim os **Termos** da configuração. Posteriormente adiciona-se  $\vec{L} + \vec{S}$  obtendo-se o momento angular total  $\vec{J}$ . Em cada uma dessas soma é usado o teorema geral de adição do momento angular, e portanto temos os seguintes valores possíveis para  $J$ :

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|$$

Este passo fornece os chamados **níveis** da configuração. A interação com campos magnéticos externos (efeito Zeeman) “quebra” a degenerescência restante, resultando em **estados** não-degenerados. A figura(3.2) exemplifica diagramaticamente o que foi dito para o caso de um elétron  $s$  com um elétron  $p$ , onde  $s \rightarrow l = 0$  e  $p \rightarrow l = 1 \Rightarrow L = 1 \rightarrow P$  e somando os spin tem-se  $S = 1 \Rightarrow 2S + 1 = 3$  e  $S = 0 \Rightarrow 2S + 1 = 1, L = 1$  e  $S = 0 \Rightarrow J = 1$ , enquanto que  $L = 1$  e  $S = 1 \Rightarrow J = 2, 1$  ou  $0$ .

Esquemáticamente pode-se representar o esquema de acoplamento LS por:

$$\{[(\vec{l}_1 + \vec{l}_2) + \vec{l}_3] + \dots + \vec{l}_N\} \{[(\vec{s}_1 + \vec{s}_2) + \vec{s}_3] + \dots + \vec{s}_N\} \rightarrow LS \rightarrow \vec{J},$$

ou de maneira mais compacta

$$[(\vec{l}_1, \vec{l}_2)\vec{L}, (\vec{s}_1, \vec{s}_2)\vec{S}]\vec{J}M$$

Notação padrão empregada :

$$^{(2S+1)}L_J$$

2. **jj**- onde é somado o momento angular orbital e de spin de cada elétron individualmente, resultando em momentos angulares totais para cada elétron  $\vec{j}_i$ . Então, são somados os diversos  $\vec{j}_i$  resultando no momento angular total  $\vec{J}$ . Esquematicamente tem-se:

$$(\vec{l}_1 + \vec{s}_1) + (\vec{l}_2 + \vec{s}_2) + \dots + (\vec{l}_N + \vec{s}_N) \rightarrow (\dots((\vec{j}_1 + \vec{j}_2) + \vec{j}_3) + \dots + \vec{j}_N) \rightarrow \vec{J}$$

mais compactamente,

$$[(\vec{l}_1, \vec{s}_1)\vec{j}_1, (\vec{l}_2, \vec{s}_2)\vec{j}_2]\vec{J}M$$

Notação padrão empregada :

$$(j_1, j_2)_J$$

Acoplamento aos pares

3. **jl** ou **jK**. Ocorre quando a interação mais forte é a spin-órbita do elétron mais fortemente ligado e a próxima é a interação coulombiana (direta) entre dois elétrons. Verifica-se este tipo de acoplamento principalmente quando o elétron mais externo tem número quântico angular  $l$  grande (elétron f ou g) e experimenta fraca interação de troca, bem como pequena interação spin-orbital. Para o caso do acoplamento entre dois elétrons, tem-se esquematicamente:

$$\vec{l}_1 + \vec{s}_1 = \vec{j}_1$$

$$\vec{j}_1 + \vec{l}_2 = \vec{K}$$

$$\vec{K} + \vec{s}_2 = \vec{J}$$

mais compactamente,

$$\{[(\vec{l}_1, \vec{s}_1)\vec{j}_1, \vec{l}_2]\vec{K}, \vec{s}_2\}\vec{J}M$$

Notação padrão empregada para o acoplamento jK:

$$j_1|K|J$$

4. Outro tipo de acoplamento aos pares é o chamado acoplamento LK (ou Ls). Este acoplamento corresponde ao caso onde a interação de Coulomb direta é a mais importante e a segunda mais importante é a interação spin-orbital do elétron mais interno. O esquema de acoplamento para dois elétrons é o seguinte:

$$\vec{l}_1 + \vec{l}_2 = \vec{L}_1$$

$$\vec{L} + \vec{s}_1 = \vec{K}$$

$$\vec{K} + \vec{s}_2 = \vec{J}$$

de maneira mais compacta,

$$\{[(\vec{l}_1, \vec{l}_2), \vec{s}_1] \vec{K}, \vec{s}_2\} \vec{J} M$$

Notação padrão empregada para o acoplamento LK:

$$L|K|J$$

O primeiro tipo de acoplamento citado é satisfatório para um grande número de configurações, notadamente na primeira parte da tabela periódica. Contudo, a interação spin-orbital varia aproximadamente com a carga nuclear efetiva à quarta potência, enquanto que as interações órbita-órbita e spin-spin apenas um aumento linear. Assim pode ser esperado uma gradual transição do acoplamento LS para o jj com o aumento do número atômico.

A notação de Russel-Saunders coloca de maneira compacta e objetiva todos os números quânticos necessários para descrever estados descritos pelo acoplamento LS, e tem basicamente a seguinte forma:

$$^{2S+1}L_j$$

onde  $2S+1$  é a multiplicidade,  $S$  é o momento total de spin ( $S = \sum \vec{s}_i$ ),  $L$  é o momento angular orbital total ( $L = \sum \vec{l}_i$ ) e  $j$  é a projeção do momento angular total  $J$  ( $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ). A notação para o momento angular orbital total  $L$  segue o mesmo padrão empregado para o momento angular orbital  $l$ , sendo que neste caso usando letras maiúsculas, ou seja,  $L = 0, 1, 2, 3, \dots \Rightarrow L = S, P, D, F, \dots$ .

### 3.3 Regras de seleção e intensidade relativas das linhas

Dos esquemas de acoplamento citados na seção anterior, é empregado quase exclusivamente nesta tese o acoplamento LS e as transições procuradas na análise espectral experimental foram do tipo transições de dipolo elétrico, excetuando-se algumas poucas transições de intercombinação. A probabilidade de um átomo ir de um estado estacionário **a** para um outro estado estacionário **b**, com a emissão de um fóton com energia  $\hbar\omega = E_a - E_b$  é proporcional ao elemento de matriz do operador de dipolo elétrico **P** entre os estados  $\langle \dots L, S, J |$  e  $\langle \dots, L', S', J' |$ , para transições do tipo dipolo elétrico.

Devido às propriedades de ortogonalidade na integração com respeito às coordenadas  $L, S, J$  das autofunções que descrevem os estados, obtém-se que só é possível haver transições de dipolo elétrico, em estados descritos pelo acoplamento LS, quando:

$$\Delta S = S - S' = 0 \quad (3.2)$$

$$\Delta L = L - L' = 0, \pm 1 \quad (3.3)$$

$$L = L' \neq 0 \quad (3.4)$$

As intensidades relativas entre as várias linhas de um multipletto têm a característica de que as mais intensas sejam aquelas onde  $\Delta J = \Delta L$ . Estas linhas são

chamadas de linhas principais do multiplete e usualmente a mais intensa dentre elas é aquela que possui o máximo valor de  $J$ . Linhas com  $\Delta J \neq \Delta L$  são às vezes chamadas de linhas-satélites e usualmente são mais fortes para valores intermediários de  $J$ . Quando  $\Delta L \neq 0$ ; as linhas-satélites de primeira ordem ( $\Delta J = 0$ ) são as mais fortes do que as linhas-satélites de segunda ordem ( $\Delta J = -\Delta L$ )[18].

No capítulo que trata da análise do argônio quatro vezes ionizado, será discutido um pouco sobre linhas de intercombinação, onde ocorre a violação da regra de seleção que proíbe as transições entre múltiplicidades diferentes.

## 3.4 Os programas

Nesta seção descreveremos as funções básicas de um conjunto de programas desenvolvidos pelo professor Robert D. Cowan[16] do Laboratório Nacional de Los Alamos, o qual foi empregado exhaustivamente nesta Tese. Este conjunto de programas realiza cálculos detalhados sobre estrutura atômica, entre os quais podemos citar a composição das autofunções para cada nível, as várias integrais radiais e angulares, a previsão de todas as transições possíveis, com os respectivos números de onda, comprimentos de onda e intensidades.

Todos os programas e subrotinas estão escritos em fortran 77, e foram originalmente escritos em fortran IV.

### 3.4.1 RCN

Os dados de entrada para o primeiro conjunto de programas utilizados para a realização do cálculo da estrutura de níveis de um determinado íon ou átomo, são colocados em dois arquivos separadamente. O primeiro contém basicamente as várias configurações eletrônicas do íon em questão, enquanto o segundo contém o valor da percentagem dos parâmetros de Slater a serem usados no cálculo da estrutura de níveis, além de algumas variáveis que indicam quais os recursos do programas que se deseja (ex. considera ou não a energia de Breit) e quais resultados

devem ser impressos na saída do programa.

O programa RCN33 calcula as funções de onda radiais de um átomo esfericamente simetrizado, correspondendo à energia de centro de gravidade ou energia média ( $E_{av}$ ) de uma configuração eletrônica. Após serem computadas estas funções, são computadas as integrais de Coulomb  $F^k$  e  $G^k$  e as integrais spin-orbitais, através da fórmula para o potencial central<sup>5</sup> :

$$\xi_{nl} = \frac{\alpha^2}{2} \int_0^\infty P_{nl}^2 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} dr \quad (3.5)$$

ou via o método de Blume-Watson[17]. Este programa calcula também os valores de  $\langle r^m \rangle$  para  $-3 \leq m \leq 6 (m \neq 5)$  para cada orbital e computa as correções de massa-velocidade e de Darwin.

O programa RCN2 recebe as funções de onda radiais, calculadas pelo programa RCN33, para as diversas configurações e calcula as várias integrais de configuração  $R^k$ , integrais spin-orbitais  $\xi_{ll'}$ , integrais de dipolo e quadrupolo elétrico. No seu uso mais comum, são computadas todas as quantidades necessárias para o cálculo da energia dos níveis e o espectro do átomo, colocando-as em arquivos adequadamente formatados para um posterior processamento.

A teoria usada nestes cálculos computacionais, pode ser encontrada na referência[18], capítulos 7 e seções 8-1 e 16-1, referido daqui em diante como TASS (Theory of Atomic Structure and Spectra).

### 3.4.2 Procedimentos de cálculo

No arquivo de entrada onde são fornecido as configurações do átomo ou íon sob análise, temos entre outros parâmetros, o número atômico  $Z$ , o grau de ionização, o rótulo de cada configuração(ex. Ca I 4s3d), a especificação de cada orbital e sua respectiva ocupação eletrônica e quando for o caso o autovalor de energia cinética

---

<sup>5</sup>que produz melhores resultados até  $Z \leq 25$  comparado com o método de Blume Watson, o qual se aproxima mais dos resultados experimentais para  $Z \geq 25$

em rydbergs do orbital mais externo para um elétron livre. O programa calcula então:

1. Calcula o número de elétrons no átomo ou íon
2. Inicia o processo de obtenção de cada configuração a partir da configuração fundamental do gás nobre mais pesado (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn ou  $Z=118$ ) que tenha no máximo  $N$  elétrons.
3. Adiciona a esta, o número de elétrons necessários até que seja obtida a configuração desejada. Por exemplo, a configuração  $4p4d$  do germânio neutro é obtida a partir da configuração fundamental do argônio neutro  $3p^6$  e adicionando-se mais 14 elétrons ( $3p^6 3d^{10} 4s^2 4p 4d$ )
4. O potencial atômico RU (inicial), é obtido ou escalonando-se o potencial RUO (Função potencial para o argônio de Hermam e Skillman's) para o valor de  $Z$  em estudo, ou a a partir do Potencial SCF (potencial auto-consistente), calculado para configuração anterior.

Este potencial SCF (self consistent field) é obtido integrando-se a equação diferencial radial, na qual é usado o potencial RU (potencial de entrada) como ponto de partida para obtenção dos polinômios de Legendre  $PNL(I,M)$  para cada orbital  $M$ , dos quais é calculado o novo potencial RU (potencial de saída) que será usado como o novo potencial para calcular os novos polinômios de Legendre. Este processo continua iterativamente até que o potencial de entrada seja igual ao de saída, dentro de um erro estipulado.

5. Usando-se as funções de onda radiais SCF e PNL, são calculadas várias integrais radiais para um elétron (ex. energia média, energia potencial elétron-núcleo etc.) Estas funções de onda e outras informações são armazenadas para um posterior processamento.

### 3.4.3 RCN2

Este programa lê a informação gerada pelo programa RCN (RCN33) e calcula as integrais radiais de configuração  $R^k$  e as matrizes de dipolo e quadrupolo elétrico

$$P_{ll'}^k = \langle l || r^{(k)} || l' \rangle, \quad (k = 1 \text{ ou } 2) \quad (3.6)$$

escrevendo na sua saída um arquivo completo para ser usado pelo programa RCG (RCG10), que faz o cálculo final dos níveis de energia e comprimentos de onda do espectro.

É bem conhecido empiricamente que os níveis de energia teóricos, concordarão melhor com o experimento se os parâmetros de Coulomb  $F^k(l_i, l_i)$ ,  $\xi_i$ ,  $F^k(l_i, l_j)$ ,  $G^k(l_i, l_j)$  e  $R^k(l_i l_j, l'_i, l'_j)$  utilizados, forem de 5 a 30% menores que o previsto no cálculo teórico "puro". A opção da percentagem adequada pode ser introduzida pelo usuário no arquivo de entrada para o programa RCN. Os primeiros e os três últimos parâmetros devem ser de cerca de 80% para a maioria dos átomos neutros (exceto para os lantanídeos e os actinídeos 70%) e devem ser de 92 a 95% para os átomos altamente ionizados.

Para que o cálculo do espectro e níveis de energia seja bem realizado, é necessário que as configurações eletrônicas sejam arranjadas em uma ordem específica. Usualmente é escolhida como primeira configuração a de menor energia de uma dada paridade, seguida de todas as outras desta mesma paridade e, logo depois, as de paridade oposta. Dentro de uma mesma paridade, todas as configurações que sejam membros de uma série de Rydberg simples (ex.  $3p^5 3d$ ,  $3p^5 4d$ ,  $3p^5 5d$ , ...) devem ser colocadas consecutivamente para agilizar o cálculo. Cada configuração deve ser colocada de modo que cada orbital seja arranjado em ordem crescente de  $n$ , e para um mesmo  $n$  na ordem crescente de  $l$ .

### 3.4.4 RCG

Os propósitos básicos do programa RCG (RCG10) são computar os fatores angulares dos elementos de matriz da teoria de estrutura e espectro atômico empregando a algebra de Racah, resolver a matriz de energia e apresentar como resultado final os autovalores de energia (níveis) e as autofunções do íon ou átomo em questão. O programa calcula também os valores  $g_f$  (ligado à intensidade das transições) para todas as transições de dipolo elétrico possíveis. O programa pode ser utilizado também para realizar os cálculos relativos a transições de quadrupolo elétrico e dipolo magnético. Os fatores angulares em questão são:

- a energia de centro de gravidade  $E_{av}$  para cada configuração;
- os coeficientes  $f_k$  e  $g_k$  das interações de Coulomb direta e de troca  $F^k$  e  $G^k$ ;
- as várias integrais de interações spin-orbitais;
- os coeficientes  $r_d^k$  e  $r_e^k$  das interações de configuração de Coulomb direta e de troca das integrais radiais  $R^k$ , os quais estão envolvidos no cálculo dos elementos da matriz Hamiltoniana;
- os elementos de matriz de dipolo-magnético;
- os coeficientes angulares dos elementos da matriz reduzida de dipolo e quadrupolo elétrico.

O programa RCG tem a capacidade de calcular a seção de choque  $Q$  para fotoionização, a probabilidade de transição por auto-ionização, taxa de recombinação dieletrônica, a força do oscilador para cada transição, a probabilidade de auto-ionização devido à excitação colisional.

### 3.4.5 RCE

A finalidade do programa RCE (RCE19) é ajustar os vários parâmetros teóricos ( $E_{av}$ ,  $F^k$ ,  $G^k$ ,  $\xi_{nl}$  e  $R^k$  de modo a produzir níveis atômicos, teoricamente computados, em melhor acordo possível com o experimentalmente observado. Este programa utiliza o método dos mínimos quadrados não-lineares, descrito no capítulo 16 da referência[18]. No processo de ajuste, o usuário tem a possibilidade de excluir níveis ainda não conhecidos, manter qualquer parâmetro fixo, ou fazê-los variar de tal modo que a razão entre dois valores dos parâmetros, de um determinado grupo de parâmetros, seja mantida fixa.

O ajuste pode ser considerado satisfatório se o desvio padrão computado for menor que 1 % do valor médio das energias das configurações envolvidas no ajuste. Este ajuste serve como critério auxiliar para a confirmação de que o conjunto de novos níveis proposto está correto.

Os parâmetros ajustados podem ser usados para um novo cálculo do espectro atômico utilizando o programa RCG, e isto pode ser feito de maneira imediata, uma vez que o programa RCE gera um arquivo de saída (RCE Parvals) que é formatado de maneira adequada para ser usado como arquivo de entrada do programa RCG. Calculados desta forma, os novos resultados do espectro atômico produzem, em geral, valores em boa concordância com o experimentalmente observado e podem ser usados como um bom indicador de transições e níveis que ainda estejam faltando na análise.

Para uma discussão mais aprofundada sobre o mencionado anteriormente, pode-se recorrer ao "report" interno "Programs RCN MOD33 / HF MOD8 / RCN2 - COMPUTATION OF ATOMIC RADIAL WAVE FUNCTION ", Robert Cowan - Los Alamos National Laboratory - January, 1988. Nele são encontrados com alguns detalhes, comentários sobre diversos tópicos como: funções do contínuo, Potenciais de correlação, orbitais congelados e íons negativos.

### 3.5 Sistemática de assinalação de níveis

O problema de obtenção de novos níveis da estrutura atômica de átomos, ou íons em um determinado estágio de ionização, segue uma rotina aproximadamente universal. Uma vez verificado o interesse e a disponibilidade de dados experimentais sobre um determinado átomo ou íon, a análise se inicia primeiro com a escolha do grupo de configurações a serem envolvidas no processo de análise. Este grupo deve ser escolhido em ordem crescente de energia. Em geral, estas configurações são determinadas a partir da configuração fundamental e primeiro excitada, e são descobertas cronologicamente na ordem crescente de energia. Concomitantemente, deve ser obtida e estudada toda a bibliografia existente, a fim de se determinar o grau de conhecimento sobre a estrutura atômica em questão. Mesmo que não haja interesse específico em uma dada configuração, ela pode ser mantida no cálculo, desde que esta apresente uma integral de interação de configuração elevada com alguma das de interesse.

O trabalho inicial da determinação do elenco de configurações a serem estudadas pode ser facilitado, usando como suporte computacional os programas RCN e RCG, de maneira que os seus resultados sirvam de uma base preliminar para esta escolha. Após a escolha do elenco de configurações envolvidas no cálculo, é processado um cálculo final sobre o espectro teórico do átomo ou íon. Este espectro teórico servirá de base na procura do espectro experimental, no qual as similaridades serão exploradas de tal maneira que a diferença de energia teórico-experimental seja aproximadamente constante. Esta regra em geral fornece bons resultados dentro de um mesmo multipletto, onde a relação entre as intensidades previstas teoricamente e obtidas experimentalmente fornece um indicador adicional na determinação dos termos deste multipletto.

Neste trabalho foi utilizado um programa que procura, no espectro experimental, os valores das energias dos novos termos, tendo como base o conhecimento prévio das energias dos termos relacionados as configurações de menores energias de paridade

oposta e o princípio de combinação. O erro envolvido nesta procura é estabelecido pelo usuário e no nosso caso nunca foi superior a  $0.03 \text{ \AA}$ , o que é compatível com a precisão experimental do nosso laboratório. Na utilização deste programa deve ser observado pelo usuário a regra de seleção para transição de dipolo elétrico, bem como os resultados da classificação iônica para descartar-se alguns níveis que são obtidos de maneira fortuita. Posterior seleção pode ser feita via previsão teórica das intensidades das transições. Em geral, é escolhida como o ponto de partida a determinação da energia do termo relacionado à transição mais intensa. Logo após tenta-se determinar as energias dos outros termos deste mesmo multipletto.

Quando existe um conhecimento prévio suficientemente grande, de modo que seja possível fazer uma interpolação de dados de outros elementos isoeletrônicos, o trabalho de assinalação de novos níveis de energia se torna bastante facilitado. Caso contrário, o experimento realizado se torna vital, uma vez que não têm-se valores dos parâmetros teóricos ajustados aos resultados experimentais de outros pesquisadores como fonte de comparação para os seus próprios dados e conclusões. Neste contexto, a técnica de classificação iônica e a medição dos comprimentos de onda do espectro deve ser feita com cuidados redobrados.

Após a determinação dos novos níveis de energia que foram passíveis de identificação, o trabalho de assinalação iônica é continuado usando-se o programa RCE19, que ajusta os vários parâmetros teóricos aos níveis experimentais. Este programa constitui uma fonte de avaliação adicional para o trabalho de análise.

Finalmente são usados os programas ELCALC e STRANS, que realizam respectivamente o ajuste iterativo de todos os níveis envolvidos na análise e coloca sob uma forma ordenada todos os dados relevantes sobre as configurações envolvidas na análise. Este é o último teste para se considerar válidos os novos níveis propostos.

# Capítulo 4

## Análise do Kriptônio VI

### 4.1 Introdução

Durante este trabalho de Tese foram produzidos espectrogramas de gases nobres, em graus de ionização que variaram entre uma vez e oito vezes ionizados, com a respectiva retirada de elétrons da última camada. No caso do  $\text{Kr}^{5+}$  (Kr VI), um esforço especial teve que ser realizado. Embora dispuséssemos de linhas espectrais para o ultravioleta de vácuo, obtidas no theta-pinch do Instituto de Lund[2] e dos experimentos de descarga capilar[1], a natureza da análise espectral do Kr VI exigiu experimentos específicos para afastar dúvidas sobre a classificação iônica nos experimentos citados. Ocorre também que nossa análise do Kr VI abordou configurações não observadas experimentalmente nos íons vizinhos, pertencentes à mesma sequência isoeletrônica (Ga I), o que exigiu uma classificação iônica muito clara.

Por outro lado, o fato de estarmos estudando configurações excitadas da mesma paridade da configuração fundamental, torna a população destes níveis dependentes não só do efeito de excitação por impacto eletrônico mas principalmente dos processos de recombinação e cascata, os quais têm origem em situações de maior energia. Logo a classificação iônica nestes casos tende a confundir-se com estados mais energéticos, em especial do Kr VII.

Estes fatos complicados, ao se juntarem à necessidade de uma classificação iônica precisa, justificam uma série de experimentos para que se pudesse chegar à uma classificação conclusiva.

### 4.1.1 Histórico

A configuração fundamental do Kr VI pode ser expressa por  $4s^24p$ , onde foi omitida a designação referente as camadas “fechadas”. Como é bem conhecido, tais camadas fornecem apenas o termo LS  $^1S_0$ , o qual não altera a energia referente às camadas “abertas” subsequentes. O espectro do Kr VI pertence à sequência isoeletrônica do Ga I, e foi primeiramente estudado por Fawcett[19] e outros em 1961, nas transições entre as configurações  $4s^24p$  e  $4s4p^2$ , usando como fonte de luz um Z-pinch. Schönheit[20] estendeu o espectro observado para a região do violeta extremo, usando uma fonte constituída por um tubo capilar. As três linhas mais intensas do termo LS  $^2S_{1/2}$  da configuração  $4s4p^2$  foram determinadas por Druetta e Buchet[21], usando um “beam-foil”. Trigueiros e outros[22] identificaram mais sete linhas produzidas nas descargas de um theta-pinch. Tauheed e outros[23] determinaram a energia dos termos LS  $(4s4p^2) ^4P$  e das configurações  $4p^3$ ,  $4s^24f$  e  $4s^25s$ . O resumo do conhecimento prévio pode ser expresso pelo conhecimento de 21 níveis referentes às configurações  $4s^24p$ ,  $4s4p^2$ ,  $4s^24s$ ,  $4s^25s$ ,  $4p^3$ ,  $4s^25p$  e  $4s^24f$ .

Na análise presente introduzimos duas novas configurações,  $4s4p4d$  e  $4s4p5s$ , as quais são desconhecidas em toda sequência isoeletrônica do GaI exceto para o Ge II[24], e revisamos todas as sete configurações previamente estudadas. A motivação para introdução das referidas configurações foi devido ao relativo sucesso proporcionado pela introdução das configurações  $3s3p3d$  e  $3s3p4s$  na análise do Ar VI realizada por Raineri e outros[25].

## 4.2 Estrutura do cálculo e descrição experimental

As previsões teóricas na análise da estrutura atômica do Kr VI, realizadas nesta Tese, foram feitas usando o programa desenvolvido por Cowan[16]. Na presente análise, usamos a modalidade que emprega o modelo Hartree-Fock com correções relativísticas (HFR), onde escalonamos os parâmetros de Slater a 85% para as integrais eletrostáticas, 95% para integrais spin-orbitais, 100% para energias médias ( $E_{av}$ ) e 80% para as integrais de interação de configuração. Foram envolvidas no cálculo as configurações  $4s^24p$ ,  $4p^3$ ,  $4s^25p$ ,  $4s4p4d$ ,  $4s^24f$ ,  $4s4p5s$ ,  $4s^26p$ ,  $4s4p4f$ ,  $4p^24f$  e  $4d^24f$  de paridade ímpar e  $4s4p^2$ ,  $4s^24d$ ,  $4s^25s$ ,  $4s^25d$ ,  $4s4p4f$ ,  $4s4d5s$ ,  $4p^24d$  e  $4s4d^2$  da paridade oposta. Cálculos similares foram feitos para os íons entre Se IV – Mo XII, a fim de usarmos os resultados no processo de interpolação de dados na sequência isoeletrônica do Ga I. O resultado deste cálculo produziu uma pureza de 90% para o esquema de acoplamento LS e 82% para o  $jj$  para as configurações pares, enquanto que para as configurações ímpares a pureza média dos auto vetores foi de 78% para o esquema de acoplamento LS contra 62% para o esquema  $jj$ .

O espectro experimental utilizado na análise foi obtido a partir da composição do espectro produzido pelos theta-pinches da Unicamp e do Instituto de Tecnologia de Lund - Lund, Suécia[2] e do tubo de descarga capilar do CIOp, Argentina. O espectro produzido no theta-pinch da Unicamp ficou entre 300 Å e 2100 Å sendo obtido com uma pressão de trabalho de 32  $\mu$ bar, tensão no banco de capacitores de 12 kV e 110 disparos, com a máquina operando no estágio 02, como descrito no capítulo 2 desta Tese. A faixa espectral produzida no theta-pinch de Lund ficou entre 432 Å e 2540 Å, onde foi utilizada uma tensão de 10 kV e pressão de 10  $\mu$ bar, enquanto que o experimento realizado no tubo de descarga capilar cobriu a região entre 233 e 456 Å[1]. Juntos, o intervalo coberto foi de 233 à 2540 Å.

## 4.3 Análise

Na revisão das configurações conhecidas anteriormente, empregamos a técnica da interpolação de dados de uma sequência isoeletrônica, ou seja, de uma sequência de íons contendo o mesmo número de elétrons, como por exemplo, Li, Be<sup>+</sup>, B<sup>2+</sup>, C<sup>3+</sup>, ..., com o espectro correspondente Li I, Be II, B III, C IV, etc. Para este caso, o sistema de termos são idênticos, ou seja, a estrutura atômica é a mesma, diferenciando-se apenas no valor de cada termo. A energia dos termos pode ser escrita como[26]:

$$T_n = R \frac{(Z - S)^2}{n^2} = R \frac{(\zeta + p)^2}{n^2} \quad (4.1)$$

onde R é a constante de Rydberg, Z é o número atômico, S é o parâmetro de blindagem, (Z - S) é a carga nuclear efetiva,  $\zeta$  é a carga nuclear líquida ( $\zeta = Z - (N - 1)$ , N = número total de elétrons) e p é o parâmetro de penetração.

Como o parâmetro de blindagem é aproximadamente constante para variações de Z, tem-se aí a básica relação para comparação isoeletrônica, primeiramente descoberta por Moseley para os raios X, a saber: que a raiz quadrada do valor do termo aproxima-se de uma função linear do número atômico Z.

No estudo da estrutura isoeletrônica, o método gráfico é de grande ajuda. Em geral é feito um gráfico de  $\zeta$  versus alguma função do valor do termo como por exemplo:  $\sqrt{T}$ ,  $T/(\zeta + cte)$  ou  $T/(\zeta + cte)^2$ , onde cte é uma constante apropriada, frequentemente escolhida zero.

Através de uma interpolação de dados da sequência isoeletrônica do Ga I para o termo  $4s4p^2 \ ^2S_{1/2}$ [27], foi possível obter, a partir do espectro observado, um novo valor para este nível em  $17084 \text{ cm}^{-1}$ . Este valor concorda com a previsão teórica recentemente realizada por Biemont e Quinet[28]. Na análise realizada foram obtidas 12 transições entre este novo nível  $^2S_{1/2}$  e todas as outras configurações ímpares. A figura(4.1) mostra o gráfico dos dados relativos à transição  $4s^24p \ ^2P_{1/2} - 4s4p^2 \ ^2S_{1/2}$ , onde o círculo indica o valor observado por Druetta e Buchet [21], enquanto que a

cruz indica o valor encontrado anteriormente por Trigueiros e outros[22]. O valor do nível encontrado nesta nova análise ( $17084 \text{ cm}^{-1}$ ) corresponde de  $\sigma/\zeta$  de  $28347 \text{ cm}^{-1}$ , o qual se ajusta perfeitamente à curva obtida.

Na análise realizada para a configuração  $4s^25p$ , propomos valores novos para dois níveis, comparados com os valores obtidos no trabalho anterior de Trigueiros e outros[22]. Obtivemos o valor de  $324120 \text{ cm}^{-1}$  para o termo  $^2P_{1/2}$  com baseando-nos em três transições e outras sete linhas estabeleceram o nível  $4s^25p \ ^2P_{3/2}$  em  $326657 \text{ cm}^{-1}$ . Desse conjunto de transições, a mais intensa aparece relacionada às transições com o nível  $4s^25s \ ^2S_{1/2}$  e, a partir destas, confirmamos o nível  $4s^25s \ ^2S_{1/2}$  em  $275380 \text{ cm}^{-1}$ , primeiramente encontrado por Tauheed e outros[23] em  $(275340 \pm 100) \text{ cm}^{-1}$ .

Para as configurações  $4p^3$ ,  $4s^24f$ ,  $4s^25s$  e  $4s4p^2$ , confirmamos, ou seja, obtivemos os mesmos valores para energia dos níveis obtidos anteriormente por Tauheed e outros[23], com exceção da configuração  $4s^24f$ . Na figura(4.2) está exposto um gráfico isoeletrônico para a transição  $4s^24d \ ^3D_{3/2} - 4s^24f \ ^2F_{5/2}$  para os íons desde o Kr VI até o I IX. Na construção deste gráfico, foram usados os resultados de um cálculo Hartree-Fock escalonado para estes íons e valores experimentais para esta transição fornecidos no trabalho de Litzén e Reader[27]. A partir deste gráfico, nós ajustamos um novo valor para o nível  $4s^24f \ ^2F_{5/2}$  em  $399599 \text{ cm}^{-1}$ , o que corresponde a um valor de  $\sigma/\zeta$  de  $29580 \text{ cm}^{-1}$  para o referido gráfico. Este valor é mais próximo ao valor teórico previsto por Biemont e Quinet[28] em  $399473 \text{ cm}^{-1}$  do que o de Tauheed em  $398960 \text{ cm}^{-1}$ , além de produzir um valor de  $\sigma/\zeta$  que se ajusta melhor ao gráfico. Tomando como base o valor encontrado para o nível  $^2F_{5/2}$  e o seu desvio em relação ao previsto teoricamente, obtivemos um novo valor para o outro nível deste sistema de dubleto,  $^2F_{7/2}$ , em  $398677 \text{ cm}^{-1}$ , o qual é também mais próximo da previsão teórica de Biemont e Quinet ( $398282 \text{ cm}^{-1}$ ) do que o valor postulado anteriormente por Tauheed.

A figura(4.3) mostra um gráfico isoeletrônico para as transições  $4s4p^2 \ ^2D_{3/2} - 4p^3 \ ^2P_{1/2}$ , no qual são comparados os valores observados para tal transição entre

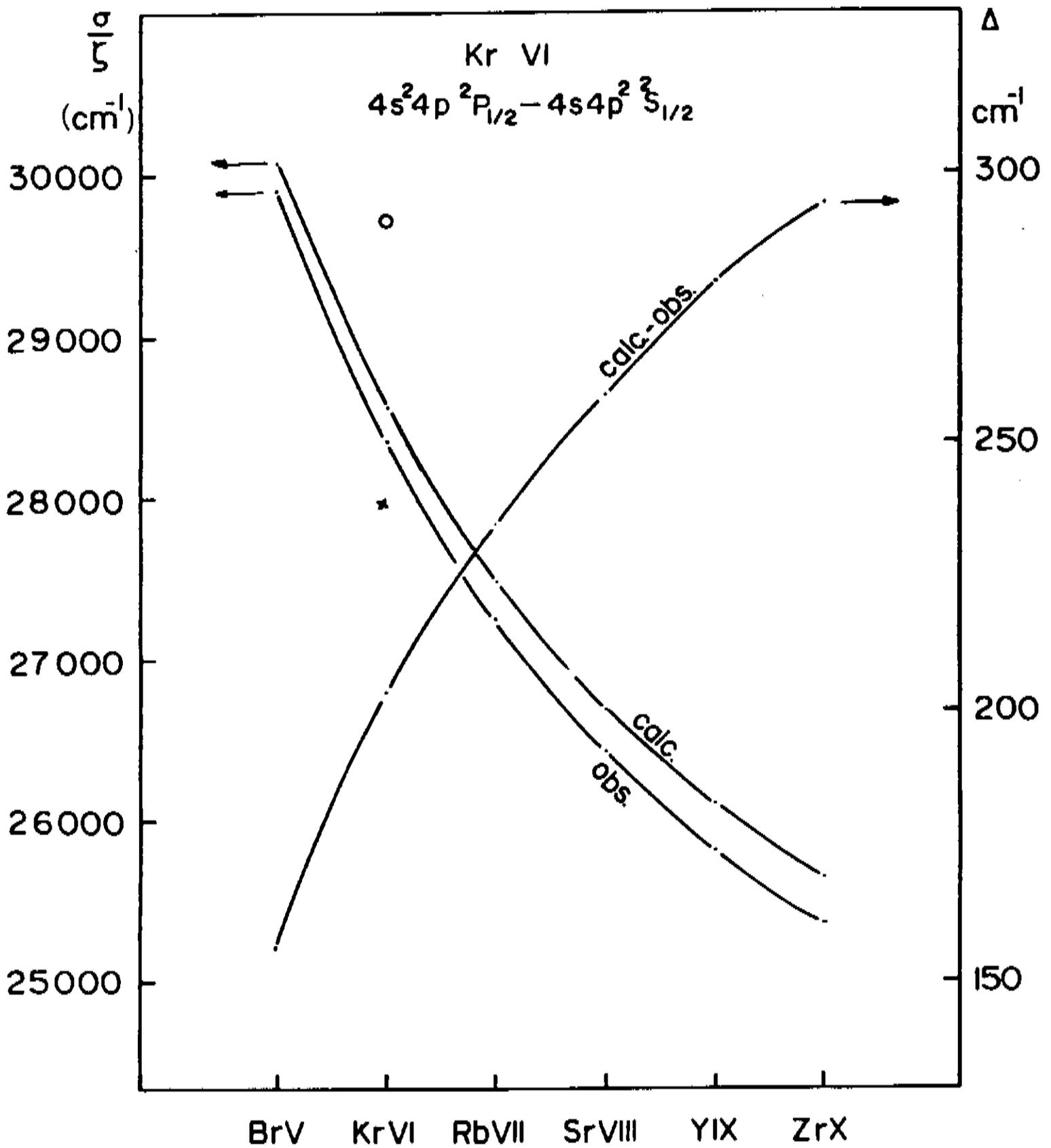


Figura 4.1: Gráfico isoeletrônico para transições entre os níveis  $4s^2 4p^2 \ ^2P_{1/2} - 4s 4p^2 \ ^2S_{1/2}$  entre os íons Br V - Zr X

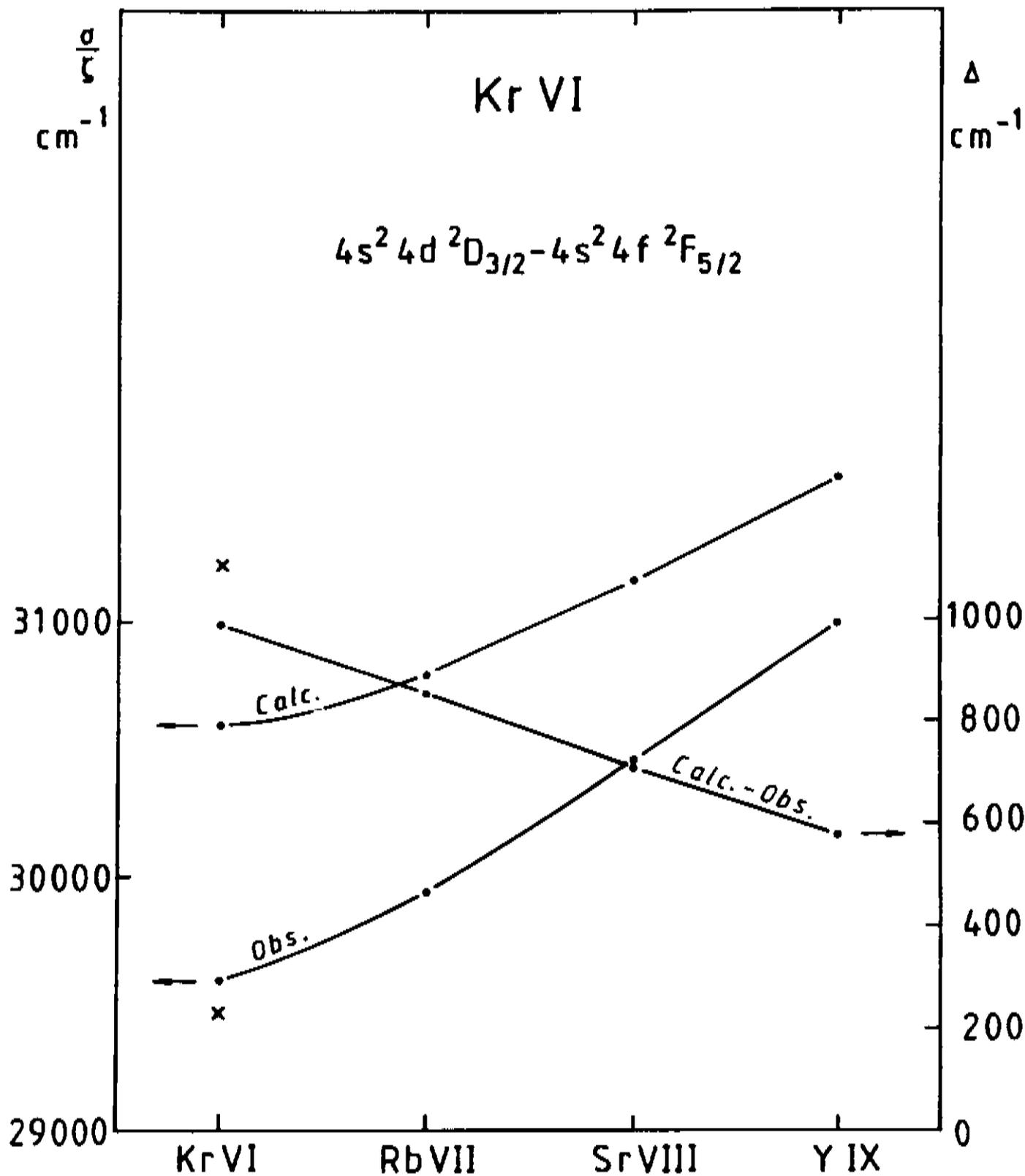


Figura 4.2: Sequência isoeletrônica para transição  $4s^2 4d^2 D_{3/2} - 4s^2 4f^2 F_{5/2}$

os íons SeIV – Mo XII[29, 30] e seus respectivos valores calculados teoricamente. O valor interpolado neste gráfico para  $\sigma/\zeta$  foi de  $26.998 \text{ cm}^{-1}$ , enquanto que o observado experimentalmente neste trabalho foi de  $27004 \text{ cm}^{-1}$ , o que equivale a um valor de energia para o termo  $4p^3 \ ^2P_{1/2}$  de  $303697 \text{ cm}^{-1}$ . Todas as transições com alta probabilidade de ocorrer entre este nível e a configuração  $4s4p^2$  foram observadas experimentalmente<sup>1</sup>, as quais deram suporte a este novo valor de nível. O valor deste nível havia sido indicado anteriormente por Tauheed em  $(303650 \pm 400) \text{ cm}^{-1}$ , enquanto que a previsão teórica de Biemont e Quinet foi de  $303761 \text{ cm}^{-1}$ . A figura(4.4) apresenta o gráfico das transições  $4s4p^2 \ ^4P_{1/2} - 4p^3 \ ^4S_{3/2}$  para os íons entre Kr VI e Nb XI, usando valores experimentais produzidos por Litzén e Reader[27] sua comparação com os valores teoricamente calculados durante esta Tese. A partir da extrapolação dos dados e da análise do espectro experimental, obtivemos o valor de  $278787 \text{ cm}^{-1}$  para o valor do nível  $4p^3 \ ^4S_{3/2}$ , o qual concorda com o valor obtido por Tauheed e outros[23] em  $(278760 \pm 40) \text{ cm}^{-1}$ . Este nível foi obtido a partir de 8 linhas do espectro experimental.

Para as configurações  $4s4p4d$  e  $4s4p5s$ , não havia estudo anteriores que possibilitasse uma análise via sequência isoeletrônica. Assim, a análise realizada baseou-se no código numérico de busca de níveis (LPS ou DIFF), no programa RCE19 (“Least-square”) e nas previsões do código numérico desenvolvido por Cowan[16], os quais guiaram a pesquisa no espectro experimental das transições relacionadas a estes dois níveis.

A maior parte dos 23 níveis pertencentes à configuração  $4s4p4d$  foi encontrada, excetuando-se cinco; o nível  $4s4p(1P)4d \ ^2P_{1/2}$  e os quatro níveis do quarteto  $^4F$ , devido principalmente às fracas taxas de transições entre eles e o quarteto  $4s \ 4p^2 \ ^4P$ .

Devido ao fato de que o acoplamento LS não ser muito puro em alguns termos das configurações estudadas<sup>2</sup>, linhas de intercombinação podem ser encontradas frequentemente neste espectro. De fato, a maior parte das linhas de intercombinação

<sup>1</sup>A transição com o termo  $4s4p^2 \ ^2D_{3/2}$  estava encoberta por uma linha de Kr VII[31]

<sup>2</sup>a pureza média da configurações pares, para o Kr VI foi de 78%

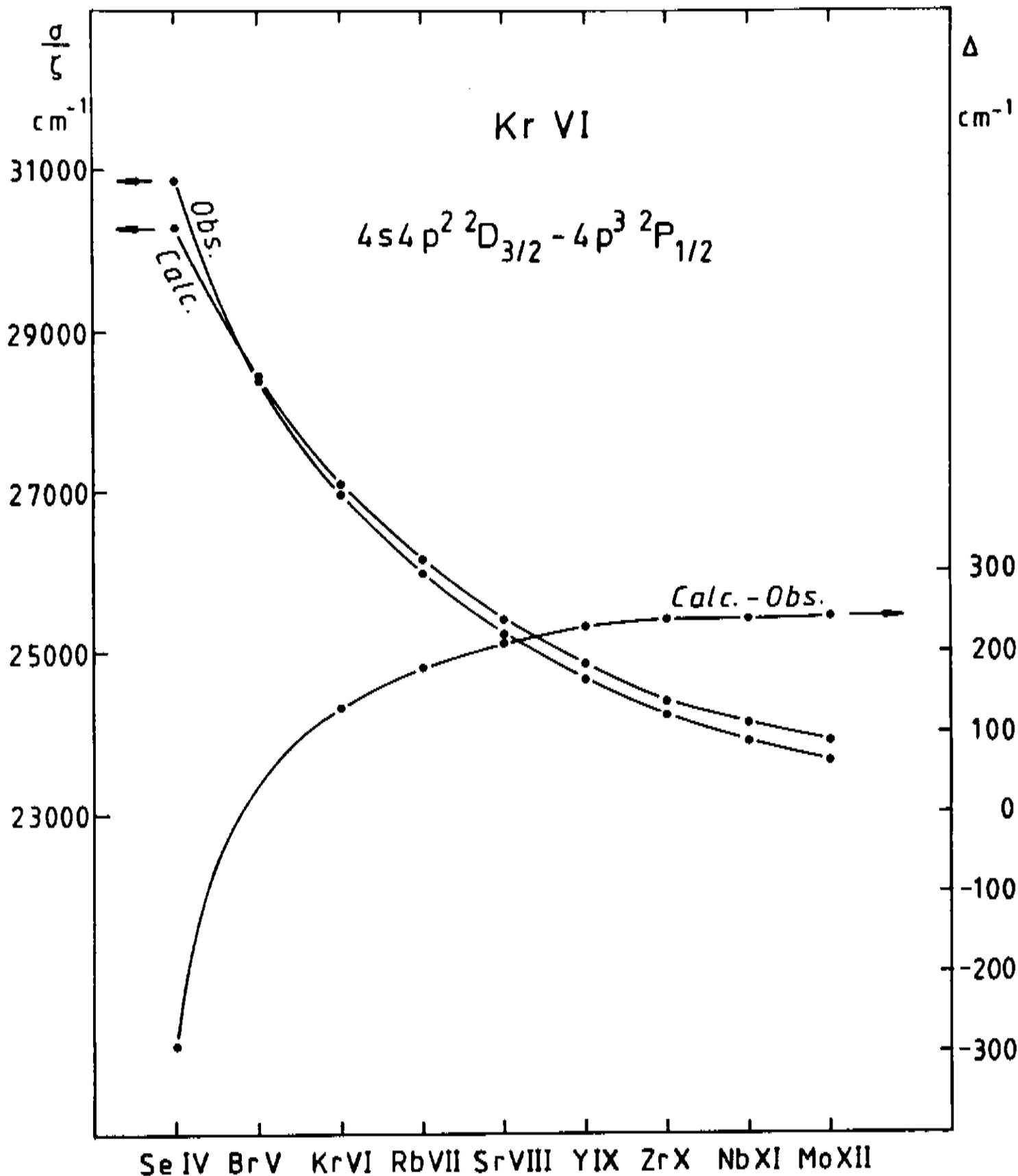


Figura 4.3: Sequência isoeletrônica para transição  $4s4p^2 \ ^2D_{3/2} - 4p^3 \ ^2P_{1/2}$

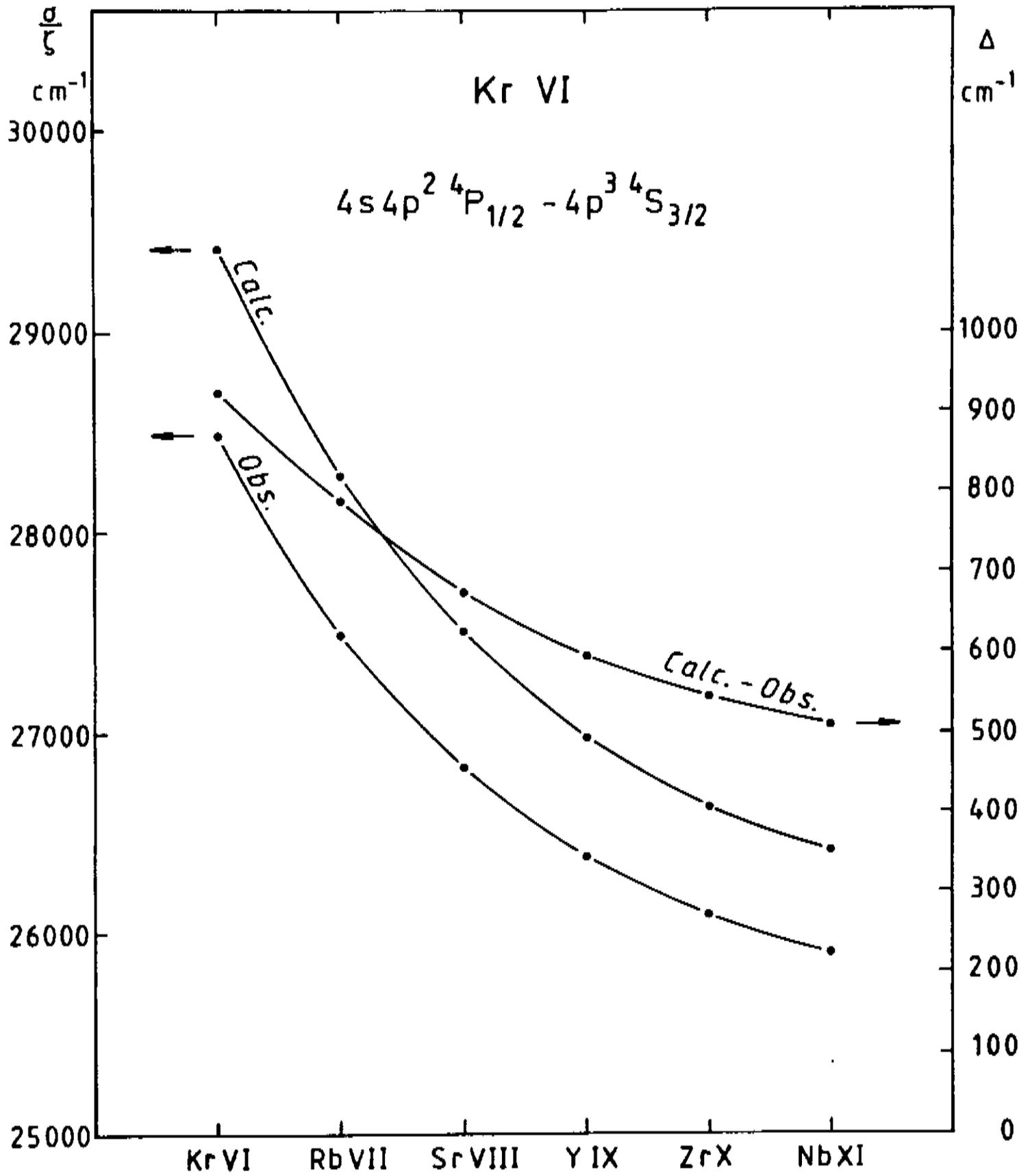


Figura 4.4: Sequência isoeletrônica para transição  $4s4p^2\ ^4P_{1/2} - 4p^3\ ^4S_{3/2}$

intensas preditas pela teoria, ou seja, principalmente as transições entre os quartetos P e D da configuração  $4s4p4d$  e os dupletos das configurações  $4s4p^2$  e  $4s^24d$  foram encontrados.

O menor nível de energia da configuração  $4s4p4d$  é a do termo  ${}^4P_{5/2}$ , com o valor de  $331956 \text{ cm}^{-1}$ . Ele foi estabelecido a partir de seis transições com as configurações  $4s4p^2$  e  $4s^24d$ , das quais 4 foram devidas a transições de intercombinações. O fato de que o acoplamento LS não ser muito puro explica a ocorrência deste tipo de transição (apresentou pureza teórica de 66% na composição dos seus auto-vetores, tendo uma componente de 3,1% associada ao termo  $4s4p({}^3P)4d({}^2D)$ ). O nível  $533133 \text{ cm}^{-1}$  foi classificado como  ${}^4D_{3/2}$  (57% de pureza), o qual estava fortemente misturado com o termo  ${}^4P_{3/2}$  (40%). Nós estabelecemos este nível baseando-nos em quatro linhas, sendo destas, uma encoberta por uma linha do espectro do C III ( $459,47 \text{ \AA}$ ) e outra de intercombinação. O termo  ${}^4D_{1/2}$  teve energia estabelecida em  $333936 \text{ cm}^{-1}$ , descoberto a partir de duas transições com a configuração  $4s4p^2$ .

O nível  $4s4p4d {}^4P_{1/2}$  foi estabelecido tentativamente em  $338032 \text{ cm}^{-1}$ , a partir de uma única transição. Tal fato está de acordo com o predito teoricamente de haver apenas uma transição intensa entre este nível e o nível  $4s4p^2 {}^4P_{3/2}$ . As demais transições possíveis apresentavam uma taxa de transição teórica no mínimo 1000 vezes menor.

Onze linhas deram suporte à determinação dos níveis  $4s4p({}^3P) {}^4D_{(3/2,5/2)}$ . Neste conjunto de linhas, duas eram linhas de intercombinação, observadas nas transições com os termos  $4s4p^2 {}^4P$ . A linha  $626,22 \text{ \AA}$  classificada por Trigueiros e outros[22] como sendo devida à transição  $4s4p^2 {}^2S_{1/2} - 4s^24p {}^2P_{3/2}$ , corresponde nesta análise à transição  $4s4s({}^3P)4d({}^2D_{5/2}) - 4s4p^2 {}^2P_{3/2}$ , posto que o nível  $4s4p^2 {}^2S_{1/2}$  recebeu um novo valor de energia, conforme mencionado anteriormente.

Nós não observamos o nível  $4s4p({}^1P)4d {}^2P_{1/2}$ , entretanto encontramos cinco linhas que foram usadas para determinar o nível  ${}^2P_{3/2}$  em  $393018 \text{ cm}^{-1}$ . Nesse conjunto de linhas está incluída a linha  $470,19 \text{ \AA}$  classificada anteriormente[32] como

sendo produzida na transição com o nível  $4s^2 4p 4d \ ^3P_0$ , o qual foi definido a partir de uma única transição e pode, portanto, ter sido incorretamente definido.

Para a configuração  $4s 4p 5s$ , identificamos os níveis  $^4P_{(3/2,5/2)}$  com base a quatro linhas . Três linhas foram usadas para definir o nível  $4s 4p(^3P) 5s \ ^2P_{1/2}$  em  $403436 \text{ cm}^{-1}$ , dentre as quais a linha  $3832,01 \text{ \AA}$  recebeu dupla classificação<sup>3</sup>. A linha  $595,97 \text{ \AA}$  anteriormente[22] classificada como sendo devida à transição envolvendo o termo  $4s 4p^2 \ ^2S_{1/2}$ , foi classificada neste trabalho, como sendo produzida pela transição  $4s 4p(^1P) 5s \ ^2P_{3/2} - 4s^2 5s \ ^2S_{1/2}$ .

## 4.4 Conclusões

Em resumo, podemos afirmar que foi realizado neste trabalho de análise do Kr VI, uma revisão substancial das configurações que eram conhecidas anteriormente, além de fornecer dados espectroscópicos completamente novos sobre as configurações  $4s 4p 4d$  e  $4s 4p 5s$  do estrutura atômica do Kr VI.

O espectro experimental cobriu a faixa entre  $233 \text{ \AA}$  e  $2540 \text{ \AA}$  e, em conjunto com a análise, produziram 109 novas linhas observadas no espectro do Kr VI. Para as novas configurações incluídas  $4s 4p 4d$  e  $4s 4p 5s$ , obtivemos 22 novos níveis, além de propormos novos valores para para os termos  $4s 4p^2 \ ^2S_{1/2}$  e  $4p^3 \ ^2P_{1/2}$ . A tabela(4.1) fornece os valores dos comprimento de onda das linhas do espectro do Kr VI identificadas pela primeira vez neste trabalho, onde as intensidades experimentais de cada uma delas está colocada numa escala normalizada de 0 a 15, e foram obtidas nos experimentos com os theta-pinches, excetuando-se aquelas marcadas com um superescrito (a), designando que foram produzidas no tubo de descarga capilar. Na tabela(4.2) estão expostos os valores otimizados para os níveis das configurações ímpares analisadas neste trabalho. Nesta tabela, é fornecido um superescrito que indica quando o nível é novo, ou revisado (valor alterado), além de denotarmos a configuração  $4s 4p 4d$  por  $x$  e a configuração  $4s 4p 5s$  por  $y$ , para simplificarmos um

<sup>3</sup>associada às transições  $4s 4p(^3P) 5s \ ^2P_{1/2} - 4s 4p^2 \ ^1D_{3/2}$  e  $4s 4p(^1P) 5d \ ^2P_{1/2} - 4s 4p^2 \ ^2P_{1/2}$

pouco a notação empregada na tabela. A tabela(4.3) mostra os valores otimizados para os níveis das configurações pares analisadas.

As tabelas (4.5) e (4.4) mostram os parâmetros de Slater obtidos para as configurações ímpares e pares respectivamente. Nelas, os valores dos parâmetros calculados teoricamente usando a aproximação de Hartree-Fock com correção relativística (HFR) são comparados com os valores para tais parâmetros, que foram ajustados aos níveis experimentalmente determinados. O conjunto de valores com o superescrito (a) ou (b) indicam parâmetros que tiveram a sua razão fixada durante o processo de ajuste.

Tabela 4.1: Novas linhas do Kr VI

Int.	$\lambda$ Obs. (Å)	$\lambda$ Calc. (Å)	Transição		Nota
1 <sup>a</sup>	331.65	331.67	$4s4p^2 \ ^2D_{3/2}$	-	$4s4p(^1P)5s \ ^2P_{3/2}$
6 <sup>a</sup>	332.83 <sup>c</sup>	332.84	$4s4p^2 \ ^2D_{5/2}$	-	$4s4p(^1P)5s \ ^2P_{3/2}$
		332.85	$4s4p^2 \ ^2D_{3/2}$	-	$4s4p(^1P)5s \ ^2P_{1/2}$
4 <sup>a</sup>	346.69	346.69	$4s4p^2 \ ^4P_{3/2}$	-	$4s4p(^3P)5s \ ^4P_{5/2}$
1 <sup>a</sup>	348.45	348.45	$4s4p^2 \ ^4P_{1/2}$	-	$4s4p(^3P)5s \ ^4P_{3/2}$
6 <sup>a</sup>	351.93	351.93	$4s4p^2 \ ^4P_{5/2}$	-	$4s4p(^3P)5s \ ^4P_{5/2}$
2 <sup>a</sup>	357.99	357.99	$4s4p^2 \ ^4P_{5/2}$	-	$4s4p(^3P)5s \ ^4P_{3/2}$
4 <sup>a</sup>	366.17	366.18	$4s4p^2 \ ^2S_{1/2}$	-	$4s4p(^1P)5s \ ^2P_{3/2}$
4 <sup>a</sup>	374.74	374.75	$4s4p^2 \ ^2D_{3/2}$	-	$4s4p(^3P)5s \ ^2P_{3/2}$
6 <sup>a</sup>	376.23	376.23	$4s4p^2 \ ^2D_{5/2}$	-	$4s4p(^3P)5s \ ^2P_{3/2}$
2 <sup>a</sup>	380.48	380.47	$4s4p^2 \ ^2P_{1/2}$	-	$4s4p(^1P)5s \ ^2P_{3/2}$
6 <sup>a</sup>	382.01 <sup>c</sup>	382.02	$4s4p^2 \ ^2P_{1/2}$	-	$4s4p(^1P)5s \ ^2P_{1/2}$
		382.03	$4s4p^2 \ ^2D_{3/2}$	-	$4s4p(^3P)5s \ ^2P_{1/2}$
4 <sup>a</sup>	387.17	387.16	$4s4p^2 \ ^2P_{3/2}$	-	$4s4p(^1P)5s \ ^2P_{1/2}$
4 <sup>a</sup>	387.72	387.71	$4s4p^2 \ ^2D_{3/2}$	-	$4s4p(^1P)4d \ ^2F_{5/2}$
2 <sup>a</sup>	389.29	389.30	$4s4p^2 \ ^2D_{5/2}$	-	$4s4p(^1P)4d \ ^2F_{5/2}$
6 <sup>a</sup>	390.70	390.70	$4s4p^2 \ ^2D_{5/2}$	-	$4s4p(^1P)4d \ ^2F_{7/2}$
2 <sup>a</sup>	399.54	399.54	$4s4p^2 \ ^2D_{5/2}$	-	$4s4p(^1P)4d \ ^2P_{3/2}$
2 <sup>a</sup>	403.43	403.44	$4s4p^2 \ ^2D_{5/2}$	-	$4s4p(^1P)4d \ ^2D_{3/2}$
4 <sup>a</sup>	410.59	410.58	$4s4p^2 \ ^4P_{5/2}$	-	$4s4p(^3P)4d \ ^2F_{7/2}$
6 <sup>a</sup>	419.42	419.40	$4s4p^2 \ ^2S_{1/2}$	-	$4s4p(^3P)5s \ ^2P_{3/2}$
4 <sup>a</sup>	424.91	424.89	$4s4p^2 \ ^4P_{1/2}$	-	$4s4p(^3P)4d \ ^2D_{3/2}$
6 <sup>a</sup>	428.56	428.54	$4s4p^2 \ ^2S_{1/2}$	-	$4s4p(^3P)5s \ ^2P_{1/2}$
4 <sup>a</sup>	430.46	430.46	$4s4p^2 \ ^4P_{3/2}$	-	$4s4p(^3P)4d \ ^2D_{5/2}$
1 <sup>a</sup>	433.79	433.79	$4s4p^2 \ ^4P_{1/2}$	-	$4s4p(^3P)4d \ ^4P_{3/2}$
2	440.038 <sup>b</sup>	440.035	$4s4p^2 \ ^4P_{3/2}$	-	$4s4p(^3P)4d \ ^4D_{5/2}$
5	440.192 <sup>b,d</sup>	440.196	$4s4p^2 \ ^4P_{3/2}$	-	$4s4p(^3P)4d \ ^4P_{3/2}$
5	440.840 <sup>b</sup>	-	$4s4p^2 \ ^4P_{3/2}$	-	$4s4p(^3P)4d \ ^4P_{1/2}$
6 <sup>a</sup>	442.28 <sup>d</sup>	442.28	$4s4p^2 \ ^4P_{1/2}$	-	$4s4p(^3P)4d \ ^4D_{1/2}$
6 <sup>a</sup>	443.858 <sup>b,d</sup>	443.858	$4s4p^2 \ ^4P_{1/2}$	-	$4s4p(^3P)4d \ ^4D_{3/2}$
1 <sup>a</sup>	445.0	445.0	$4s4p^2 \ ^2P_{3/2}$	-	$4s4p(^3P)5s \ ^2P_{3/2}$
4 <sup>a</sup>	448.502 <sup>b</sup>	448.495	$4s4p^2 \ ^4P_{5/2}$	-	$4s4p(^3P)4d \ ^4D_{5/2}$
5	448.668 <sup>b,d</sup>	448.662	$4s4p^2 \ ^4P_{5/2}$	-	$4s4p(^3P)4d \ ^4P_{3/2}$
2	448.95	448.95	$4s4p^2 \ ^4P_{3/2}$	-	$4s4p(^3P)4d \ ^4D_{1/2}$

Bl by N IV

S  
W

Bl

Tabela 4.1: continuação

Int.	$\lambda$ Obs. (Å)	$\lambda$ Calc. (Å)	Transição		Nota
7	449.15 <sup>d</sup>	449.15	$4s4p^2 \ ^4P_{5/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^4D_{7/2}$	
6 <sup>a</sup>	450.581 <sup>b</sup>	450.572	$4s4p^2 \ ^4P_{3/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^4D_{3/2}$	
7	452.972 <sup>bd</sup>	452.974	$4s4p^2 \ ^4P_{3/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^4P_{5/2}$	
2	459.47	459.45	$4s4p^2 \ ^4P_{5/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^4D_{3/2}$	<i>Bl</i> by C III
4	461.94 <sup>d</sup>	461.94	$4s4p^2 \ ^4P_{5/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^4P_{5/2}$	
8	462.31 <sup>d</sup>	462.30	$4s4p^2 \ ^2D_{5/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^2F_{7/2}$	
5	470.191 <sup>bd</sup>	470.192	$4s4p^2 \ ^2P_{1/2}$	- $4s4p(^1P)4d \ ^2P_{3/2}$	
7	474.209 <sup>bd</sup>	474.215	$4s4p^2 \ ^2D_{3/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^2F_{5/2}$	
8	475.62 <sup>d</sup>	475.61	$4s4p^2 \ ^2P_{1/2}$	- $4s4p(^1P)4d \ ^2D_{3/2}$	
7	478.016 <sup>bd</sup>	478.009	$4s4p^2 \ ^2P_{3/2}$	- $4s4p(^1P)4d \ ^2P_{3/2}$	
2	480.63	480.63	$4s4p^2 \ ^2P_{3/2}$	- $4s4p(^1P)4d \ ^2D_{5/2}$	
3	482.702 <sup>b</sup>	482.694	$4s4p^2 \ ^2S_{1/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^2P_{1/2}$	
7	489.738 <sup>b</sup>	489.728	$4s4p^2 \ ^2S_{1/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^2P_{3/2}$	
7	495.46	495.46	$4s4p^2 \ ^2D_{3/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^2D_{5/2}$	
8	496.237 <sup>bd</sup>	496.234	$4s4p^2 \ ^2D_{3/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^2D_{3/2}$	
9	498.061 <sup>bd</sup>	498.063	$4s4p^2 \ ^2D_{5/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^2D_{5/2}$	
6	507.82	507.83	$4s4p^2 \ ^2P_{1/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^2P_{1/2}$	
1	511.79	511.79	$4s4p^2 \ ^2D_{5/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^4D_{7/2}$	D
1	516.96	516.96	$4s4p^2 \ ^2P_{3/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^2P_{1/2}$	D
2	522.30	522.30	$4s4p^2 \ ^2D_{3/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^4D_{3/2}$	
6	525.04	525.04	$4s4p^2 \ ^2P_{3/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^2P_{3/2}$	
5	528.457 <sup>b</sup>	528.461	$4s4p^2 \ ^2D_{5/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^4P_{5/2}$	
4	540.587 <sup>b</sup>	540.585	$4s4p^2 \ ^2D_{3/2}$	- $4s^25p \ ^2P_{3/2}$	
10	543.689 <sup>b</sup>	543.685	$4s4p^2 \ ^2D_{5/2}$	- $4s^25p \ ^2P_{3/2}$	
10	548.107 <sup>bd</sup>	548.103	$4s4p^2 \ ^2D_{3/2}$	- $4s^25p \ ^2P_{1/2}$	A
7	563.44	563.45	$4s^24d \ ^2D_{3/2}$	- $4s4p(^1P)4d \ ^2F_{5/2}$	
11	569.354 <sup>b</sup>	569.353	$4s^24d \ ^2D_{5/2}$	- $4s4p(^1P)4d \ ^2F_{7/2}$	
6	577.68	577.68	$4s4p^2 \ ^2S_{1/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^2D_{3/2}$	
11	584.958 <sup>b</sup>	584.962	$4s4p^2 \ ^4P_{1/2}$	- $4p^3 \ ^4S_{3/2}$	W
4	585.14	585.15	$4s^24d \ ^2D_{3/2}$	- $4s4p(^1P)4d \ ^2P_{3/2}$	
12	587.94	587.94	$4s^24p \ ^2P_{1/2}$	- $4s4p^2 \ ^2S_{1/2}$	

Tabela 4.1: continuação

Int.	$\lambda$ Obs. (Å)	$\lambda$ Calc. (Å)	Transição		Nota	
9	588.31	588.31	$4s^2 4d^2 D_{5/2}$	-	$4s 4p(^1 P) 4d^2 P_{3/2}$	
4	592.28	592.28	$4s^2 4d^2 D_{5/2}$	-	$4s 4p(^1 P) 4d^2 D_{5/2}$	
2	592.68	592.66	$4s 4p^2 ^2 P_{3/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^2 F_{5/2}$	
4	593.56	593.56	$4s^2 4d^2 D_{3/2}$	-	$4s 4p(^1 P) 4d^2 D_{3/2}$	
12	594.618 <sup>b</sup>	594.618	$4s 4p^2 ^4 P_{1/2}$	-	$4p^3 ^2 D_{3/2}$	W
9	595.970 <sup>b</sup>	595.965	$4s^2 5s^2 S_{1/2}$	-	$4s 4p(^1 P) 5s^2 P_{3/2}$	
1	599.26	599.27	$4s 4p^2 ^4 P_{3/2}$	-	$4p^3 ^2 D_{5/2}$	D
9	599.79	599.79	$4s^2 5s^2 S_{1/2}$	-	$4s 4p(^1 P) 5s^2 P_{1/2}$	
20	606.726 <sup>b</sup>	606.728	$4s 4p^2 ^4 P_{3/2}$	-	$4p^3 ^2 D_{3/2}$	LA
5	610.828 <sup>bd</sup>	610.827	$4s 4p^2 ^2 D_{3/2}$	-	$4p^3 ^2 P_{3/2}$	
9	614.05	614.06	$4s 4p^2 ^2 P_{1/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^2 D_{3/2}$	
10	615.07	615.07	$4s 4p^2 ^4 P_{5/2}$	-	$4p^3 ^2 D_{5/2}$	
15	617.18	617.19	$4s 4p^2 ^2 D_{3/2}$	-	$4p^3 ^2 P_{1/2}$	Bl by Kr VII
9	617.379 <sup>b</sup>	617.381	$4s^2 4p^2 P_{3/2}$	-	$4s 4p^2 ^2 S_{1/2}$	
10	626.220 <sup>b</sup>	626.219	$4s 4p^2 ^2 P_{3/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^2 D_{5/2}$	
5	638.68	638.68	$4s 4p^2 ^2 S_{1/2}$	-	$4s^2 5p^2 P_{3/2}$	
3	657.20	657.21	$4s^2 4d^2 D_{3/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^2 P_{3/2}$	
10	675.033 <sup>b</sup>	675.040	$4s 4p^2 ^2 P_{3/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^4 P_{5/2}$	
3	700.06	700.08	$4s 4p^2 ^2 P_{3/2}$	-	$4s^2 5p^2 P_{3/2}$	D
10	735.316 <sup>b</sup>	735.320	$4s^2 4d^2 D_{5/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^2 F_{7/2}$	
20	739.096 <sup>b</sup>	739.095	$4s 4p^2 ^2 S_{1/2}$	-	$4p^3 ^2 P_{3/2}$	
30	750.277 <sup>bd</sup>	750.278	$4s 4p^2 ^2 D_{5/2}$	-	$4p^3 ^2 D_{3/2}$	W
2	751.10	751.09	$4s^2 5s^2 S_{1/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 5s^2 P_{3/2}$	D
6	766.72	766.72	$4s^2 4d^2 D_{3/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^2 F_{5/2}$	
5	780.92	780.91	$4s^2 5s^2 S_{1/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 5s^2 P_{1/2}$	
20	810.65	810.65	$4s 4p^2 ^2 P_{1/2}$	-	$4p^3 ^2 P_{1/2}$	W
3	823.84	823.84	$4s^2 4d^2 D_{3/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^2 D_{5/2}$	
5	825.98	825.98	$4s^2 4d^2 D_{3/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^2 D_{3/2}$	
7	830.11	830.11	$4s^2 4d^2 D_{5/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^2 D_{5/2}$	
12	834.17	834.17	$4s 4p^2 ^2 P_{3/2}$	-	$4p^3 ^2 P_{1/2}$	
3	859.65	859.66	$4s^2 4d^2 D_{3/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^4 D_{5/2}$	
9	868.96	868.96	$4s^2 4d^2 D_{5/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^4 D_{7/2}$	
3	910.47	910.46	$4s^2 4d^2 D_{3/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^4 P_{5/2}$	
8	918.14	918.14	$4s^2 4d^2 D_{5/2}$	-	$4s 4p(^3 P) 4d^4 P_{5/2}$	

Tabela 4.1: continuação

Int.	$\lambda$ Obs. (Å)	$\lambda$ Calc. (Å)	Transição		Nota
9	919.934 <sup>b</sup>	919.940	$4s4p^2 \ ^2S_{1/2}$	- $4p^3 \ ^4S_{3/2}$	
15	944.05	944.05	$4s4p^2 \ ^2S_{1/2}$	- $4p^3 \ ^2D_{3/2}$	
12	956.615 <sup>b</sup>	956.614	$4s^24d \ ^2D_{3/2}$	- $4s^25p \ ^2P_{3/2}$	
20	965.093 <sup>b</sup>	965.086	$4s^24d \ ^2D_{5/2}$	- $4s^25p \ ^2P_{3/2}$	W
30	980.411 <sup>b</sup>	980.409	$4s^24d \ ^2D_{3/2}$	- $4s^25p \ ^2P_{1/2}$	W LA
8	1011.14	1011.13	$4s^25s \ ^2S_{1/2}$	- $4s4p(^3P)4d \ ^2P_{3/2}$	AU
11	1015.77	1015.76	$4s4p^2 \ ^2P_{1/2}$	- $4p^3 \ ^4S_{3/2}$	UA
30	1045.23	1045.24	$4s4p^2 \ ^2P_{1/2}$	- $4p^3 \ ^2D_{3/2}$	W
75	1061.69 <sup>b</sup>	1061.64	$4s4p^2 \ ^2P_{3/2}$	- $4p^3 \ ^2D_{5/2}$	W
8	1817.45	1817.45	$4s^24d \ ^2D_{5/2}$	- $4p^3 \ ^2D_{5/2}$	
50	1950.20	1950.20	$4s^25s \ ^2S_{1/2}$	- $4s^25p \ ^2P_{3/2}$	W
100	2051.72	205=]1.72	$4s^25s \ ^2S_{1/2}$	- $4s^25p \ ^2P_{1/2}$	W

a - Observada nas descargas do tubo capilar.

b - Observadas em segunda ordem de difração.

c - Dupla classificação.

d - Observada primeiramente by Schönheit[20] sem classificação da transição.

Tabela 4.2: Níveis de energia das configurações ímpares do Kr VI.

Designação	Energia cm <sup>-1</sup>	Obs.-Calc. cm <sup>-1</sup>	Composição percentual
4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	0	-19	97 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup> P
4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	8110	18	97 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup> P
4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>	276011	91	58 4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> D + 17 4p <sup>3</sup> <sup>4</sup> S + 17 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D
4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> D <sub>5/2</sub>	278062	-37	77 4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> D + 22 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D
4p <sup>3</sup> <sup>4</sup> S <sub>3/2</sub>	278787	-21	79 4p <sup>3</sup> <sup>4</sup> S + 15 4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> D + 5 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D
4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	303697 <sup>a</sup>	23	82 4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> P + 11 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P + 4 x( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> P
4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	305385	-55	74 4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> P + 11 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P + 4 x( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> P
4s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	324120 <sup>a</sup>	-5	98 4s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup> P
4s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	326657 <sup>a</sup>	5	98 4s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup> P
4s4p( <sup>3</sup> P)4d <sup>4</sup> P <sub>5/2</sub>	331956 <sup>b</sup>	-145	66 x( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P + 27 x( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D
4s4p( <sup>3</sup> P)4d <sup>4</sup> D <sub>3/2</sub>	333133 <sup>b</sup>	-19	57 x( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D + 40 x( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P
4s4p( <sup>3</sup> P)4d <sup>4</sup> D <sub>1/2</sub>	333936 <sup>b</sup>	101	86 x( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D + 13 x( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P
4s4p( <sup>3</sup> P)4d <sup>4</sup> D <sub>7/2</sub>	338119 <sup>b</sup>	-8	97 x( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D
4s4p( <sup>3</sup> P)4d <sup>4</sup> P <sub>1/2</sub>	338032 <sup>c</sup>	-18	86x( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P + 13 x( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D
4s4p( <sup>3</sup> P)4d <sup>4</sup> P <sub>3/2</sub>	338364 <sup>b</sup>	39	57 x( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P + 41 x( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D
4s4p( <sup>3</sup> P)4d <sup>4</sup> D <sub>5/2</sub>	338447 <sup>b</sup>	64	71 x( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D + 25 x( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P
4s4p( <sup>3</sup> P)4d <sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>	343190 <sup>b</sup>	-1	62 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D + 20 x( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> D + 14 4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> D
4s4p( <sup>3</sup> P)4d <sup>2</sup> D <sub>5/2</sub>	343505 <sup>b</sup>	-25	56 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D + 18 x( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> D + 12 4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> D
4s4p( <sup>3</sup> P)4d <sup>2</sup> F <sub>5/2</sub>	352547 <sup>b</sup>	-61	68 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> F + 26 x( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> F
4s4p( <sup>3</sup> P)4d <sup>2</sup> F <sub>7/2</sub>	359035 <sup>b</sup>	73	47 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> F + 41 x( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> F + 11 4s <sup>2</sup> 4f <sup>2</sup> F
4s4p( <sup>3</sup> P)4d <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	374279 <sup>b</sup>	253	80 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P + 12 4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> P + 5 x( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> D
4s4p( <sup>3</sup> P)4d <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	377255 <sup>b</sup>	-205	87 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P + 10 4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> P
4s4p( <sup>1</sup> P)4d <sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>	390595 <sup>b</sup>	-70	68 x( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> D + 11 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D + 8 4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> D
4s4p( <sup>1</sup> P)4d <sup>2</sup> D <sub>5/2</sub>	391878 <sup>b</sup>	-30	73 x( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> D + 14 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D + 9 4p <sup>3</sup> <sup>2</sup> D
4s4p( <sup>1</sup> P)4d <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	393018 <sup>b</sup>	74	86 x( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> P
4s4p( <sup>3</sup> P)5s <sup>4</sup> P <sub>3/2</sub>	394817 <sup>b</sup>	38	96 y( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P
4s4p( <sup>1</sup> P)4d <sup>2</sup> F <sub>7/2</sub>	398678 <sup>a</sup>	15	49 x( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> F + 34 4s <sup>2</sup> 4f <sup>2</sup> F + 14 x( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> F
4s4p( <sup>1</sup> P)4d <sup>2</sup> F <sub>5/2</sub>	399599 <sup>a</sup>	-38	48 x( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> F + 32 4s <sup>2</sup> 4f <sup>2</sup> F + 16 x( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> F
4s4p( <sup>3</sup> P)5s <sup>4</sup> P <sub>5/2</sub>	399630 <sup>b</sup>	-35	98 y( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P
4s4p( <sup>3</sup> P)5s <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	403436 <sup>b</sup>	-78	97 y( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P
4s4p( <sup>3</sup> P)5s <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	408520 <sup>b</sup>	78	94 y( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P
4s4p( <sup>1</sup> P)5s <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	442106 <sup>b</sup>	-82	87 y( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> P + 12 4s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup> P
4s4p( <sup>1</sup> P)5s <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	443176 <sup>b</sup>	81	88 y( <sup>1</sup> P) <sup>2</sup> P + 9 4s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup> P

a- Níveis revisados.

b- Classificado pela primeira vez.

c- Classificado com apenas uma linha.

Tabela 4.3: Níveis de energia das configurações pares do Kr VI.

Designação	Energia cm <sup>-1</sup>	Obs-Calc. cm <sup>-1</sup>	Composição percentual
4s4p <sup>2</sup> <sup>4</sup> P <sub>1/2</sub>	107836	21	98 4s4p <sup>2</sup> <sup>4</sup> P
4s4p <sup>2</sup> <sup>4</sup> P <sub>3/2</sub>	111193	-16	99 4s4p <sup>2</sup> <sup>4</sup> P
4s4p <sup>2</sup> <sup>4</sup> P <sub>5/2</sub>	115479	-7	98 4s4p <sup>2</sup> <sup>4</sup> P
4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>	141672	-70	89 4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> D + 8 4s <sup>2</sup> 4d <sup>2</sup> D
4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> D <sub>5/2</sub>	142727	72	88 4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> D + 8 4s <sup>2</sup> 4d <sup>2</sup> D
4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	170084 <sup>a</sup>	5	74 4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> S + 23 4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> P
4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	180339	-18	74 4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> P + 23 4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> S
4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	183817	13	96 4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> P
4s <sup>2</sup> 4d <sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>	222122	7	88 4s <sup>2</sup> 4d <sup>2</sup> D + 8 4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> D
4s <sup>2</sup> 4d <sup>2</sup> D <sub>5/2</sub>	223040	-6	88 4s <sup>2</sup> 4d <sup>2</sup> D + 8 4s4p <sup>2</sup> <sup>2</sup> D
4s <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	275380	0	100 4s <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup> S

a- nível revisado.

Tabela 4.4: Parâmetros de Slater para as configurações pares do Kr VI.

configuração	parâmetro	HF (cm <sup>-1</sup> )	valor ajustado. (cm <sup>-1</sup> )	desvio padrão. (cm <sup>-1</sup> )	razão Calc./HF
4s4p <sup>2</sup>	E <sub>av</sub> 4s4p <sup>2</sup>	148544	148729	69	1.00
	F <sup>2</sup> (4p, 4p)	67688	60800	190	.90
	α(4p, 4p)		-9	fixed	
	ξ <sub>4p</sub>	5895	5675	63	.96
	G <sup>1</sup> (4s, 4p)	90608	78176	90	.86
4s <sup>2</sup> 4d	E <sub>av</sub> 4s <sup>2</sup> 4d	228538	227292	67	0.99
	ξ <sub>4d</sub>	444	434	40	.98
4s <sup>2</sup> 5s	E <sub>av</sub> 4s <sup>2</sup> 5s	288786	275353	62	.95
Configuration interaction integrals					
4s4p <sup>2</sup> - 4s <sup>2</sup> 4d	R <sup>1</sup> (4p4p, 4s4d)	77421	67524	277	.87 <sup>a</sup>
4s4p <sup>2</sup> - 4s <sup>2</sup> 5s	R <sup>1</sup> (4p4p, 4s5s)	4000	3425	14	.86 <sup>a</sup>

Tabela 4.5: Parâmetros de Slater para as configurações ímpares do Kr.

configuração	parâmetro	HF ( $\text{cm}^{-1}$ )	val. ajustado. ( $\text{cm}^{-1}$ )	desvio padrão ( $\text{cm}^{-1}$ )	ratio Calc./HF	
$4s^2 4p$	$E_{av}$	16745	16684	451	1.00	
	$\xi_{4p}$	5836	5544	72	.95 <sup>a</sup>	
$4p^3$	$E_{av}$	306538	301592	410	.98	
	$F^2(4p4p)$	67900	53945	1186	.79	
	$\alpha$		784	fixed		
	$\xi_{4p}$	5951	5751	74	.97 <sup>a</sup>	
$4s^2 5p$	$E_{av}$	339855	327780	122	.96	
	$\xi_{4d}$	1905	1757	fixed	.92	
$4s4p4d$	$E_{av}$	350980	351963	60	1.00	
	$\xi_{4p}$	6019	5731	74	.95 <sup>a</sup>	
	$\xi_{4d}$	451	463	fixed	1.03	
	$F^2(4p4d)$	56783	49998	347	.88	
	$G^1(4s4p)$	91355	72533	253	.79	
	$G^2(4s4d)$	49351	39826	500	.81	
	$G^1(4p4d)$	69668	56503	335	.81	
	$G^3(4p4d)$	43311	38664	753	.89	
	$4s^2 4f$	$E_{av}$	384601	380166	628	.99
		$\xi_{4f}$	6	6	fixed	1.00
$4s4p5s$	$E_{av}$	416024	410718	73	.99	
	$\xi_{4p}$	6240	5196	67	.83 <sup>a</sup>	
	$G^1(4s4p)$	92322	63590	321	.69	
	$G^0(4s5s)$	6483	4757	451	.73	
	$G^1(4p5s)$	8766	4311	1259	.49	
	<b>Integrais de interação de configuração</b>					
$4s^2 4p - 4p^3$	$R^1(4s4s4p4p)$	90772	98047	3285	1.08	
$4s^2 4p - 4s4p4d$	$R^1(4s4p4p4d)$	78164	64630	547	.83 <sup>b</sup>	
	$R^2(4s4p4d4p)$	57970	47933	406	.83 <sup>b</sup>	
$4s^2 4p - 4s4p5s$	$R^0(4s4s4s5s)$	4975	4113	35	.83 <sup>b</sup>	
	$R^1(4s4p4p5s)$	3670	3035	26	.83 <sup>b</sup>	
	$R^0(4s4p5s4p)$	717	595	5	.83 <sup>b</sup>	
$4p^3 - 4s4p4d$	$R^1(4p4p4s4d)$	77849	64369	545	.83 <sup>b</sup>	
$4p^3 - 4s4p5s$	$R^1(4p4p4s5s)$	4056	3353	28	.83 <sup>b</sup>	
$4s^2 5p - 4s4p4d$	$R^1(4s5p4p4d)$	-1048	-867	7	.83 <sup>b</sup>	
	$R^2(4s5p4d4p)$	8497	7027	60	.83 <sup>b</sup>	
$4s^2 5p - 4s4p5s$	$R^1(4s5p4p5s)$	40923	33837	287	.83 <sup>b</sup>	
	$R^0(4s5p5s4p)$	6241	5161	44	.83 <sup>b</sup>	
$4s4p4d - 4s^2 4f$	$R^1(4p4d4s4f)$	58674	44815	fixed	.76	
	$R^2(4p4d4f4s)$	38125	31524	267	.83 <sup>b</sup>	
$4s4p4d - 4s4p5s$	$R^2(4p4d4p5s)$	-8792	-7270	62	.83 <sup>b</sup>	
	$R^1(4p4d5s4p)$	-996	-825	7	.83 <sup>b</sup>	

# Capítulo 5

## Análise do Ar V

### 5.1 Introdução.

A configuração de menor energia na sequência isoeletrônica do Si I é  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ , que dá origem aos termos  $^1S$ ,  $^1D$  e  $^3P$ , dos quais o termo  $^3P$  é o de menor energia. Como é usual omitiremos na designação das possíveis configurações deste íon, a notação referente aos elétrons mais internos que pertençam a camadas “fechadas”. Neste caso, a configuração fundamental para o Ar V é simplesmente designada por  $3s^2 3p^2$ . Os termos LS da configuração  $3s 3p^3$  são  $^5S_2$ ,  $^3D_{1,2,3}$ ,  $^3P_{0,1,2}$ ,  $^1D_2$ ,  $^3S_1$  e  $^1P_1$ . As energias experimentais de excitação dos singletos e tripletos de  $3s 3p^3$  são conhecidas para quase todos os íons até o Ni XV. Níveis de energia precisos entre os íons K VI - Cr XI, baseados em estudos espectrais, têm sido fornecidos por Smitt e outros[33]. Dados similares entre os íons Mn XII - Ni XV são também disponíveis em outras referências[34, 35, 36]. Contudo é notado uma falta de resultados experimentais para o termo  $^5S$  além do íon S III. Assim, uma extrapolação isoeletrônica desta energia de excitação para maiores  $Z$  envolve considerável incerteza. Seria natural então tomar as relações padrões para a configuração do tipo  $np^3$ [26], de acordo com a qual a separação  $^1P^0 - ^3P^0$  e  $^1D^0 - ^3D^0$ , são ambas iguais a  $2G_1$ , enquanto que a separação entre  $^3S^0 - ^5S^0$  é igual a  $4G_1$ . Esta aproximação funciona muito bem no caso da sequência isoeletrônica do C I, particularmente para o O III e íons

maiores, contudo para “Si-like ions”, este quadro muda substancialmente devido a perturbações associadas com a subcamada fechada  $3d$ . Por exemplo, os termos  $^1D$  e  $^1P$  de  $3s3p^3$  interagem fortemente com os termos correspondentes de  $3s^23p3d$ . Desta forma, não podemos obter diretamente das energias medidas, os valores corretos do parâmetro  $G_1$ , necessário para obtermos a diferença  $^3S - ^5S$ .

Outra ausência, notada em quase todos os íons da sequência isoeletrônica do silício, é de dados experimentais sobre a primeira configuração excitada de mesma paridade da configuração fundamental,  $3p^4$ . Estas duas ausências citadas, além do fato de que em trabalhos anteriores com o espectro experimental do argônio[8][37], foi notado que as condições experimentais do TPIII-UNICAMP favoreciam, naquela ocasião a produção de um espectro do argônio rico em linhas do Ar V, incentivaram a pesquisa realizada neste trabalho sobre tal íon.

O conhecimento prévio da estrutura atômica do argônio quatro vezes ionizado teve as principais contribuições dos autores citados a seguir: Boyce [38] em 1935, identificou pela primeira vez a configuração fundamental e primeira excitada; Phillips e Parker[39] realizaram em 1941 uma análise mais completa, incluindo as configurações  $3s^23p3d$  e  $3s^23p4s$ ; Fawcett e outros[40] identificaram em 1967 o nível  $3s^23p3d\ ^1F_3$ ; Ekberg[41] em 1970 obteve mais quatro novos níveis das configurações estudadas anteriormente; em 1978 Fawcett[42] inclui na análise as configurações  $3s^23p4d$ ,  $3s^23p4s$  e  $3s^23p5s$ , obtendo 15 novos níveis destas; De-Ye e outros[43] em 1984 reassignam os níveis  $3s^23p3d (^1D_2\ ^1P_1)$ ; em 1986 Lesteven e outros[44] obtiveram mais quatro níveis da configuração  $3s^23p4d$  e mais tarde[45] (1988) fizeram um trabalho de reanálise das configurações  $3s^23p5s$  e  $3s^23p4d$ . Além destes trabalhos, devem ser citados os trabalhos teóricos de Gellis e Martinson[46] e de Träbert e outros[47] que realizaram estudos teóricos sobre as transições de intercombinação do nível  $3s3p^3\ ^5S_2$  para a configuração fundamental.

## 5.2 Estrutura do cálculo e condições do experimento.

Para o cálculo teórico do espectro do argônio quatro vezes ionizado, foi empregado o código numérico descrito no capítulo III desta tese. As configurações envolvidas neste cálculo foram:  $3s^23p^2$ ,  $3p^4$ ,  $3s3p^23d$ ,  $3s^23d^2$ , e  $3s3p^24s$  como configurações pares e  $3s3p^3$ ,  $3s3p3d^2$ ,  $3p^33d$ ,  $3s^23p3d$ ,  $3s^23p4d$  e  $3s^23p4s$  como ímpares. Esta análise teve como objetivo a obtenção dos níveis de energia da configuração  $3p^4$ , bem como reanalisar as configurações  $3s^23p^2$ ,  $3s3p^3$ ,  $3s3p3d^2$ ,  $3p^33d$ ,  $3s^23p3d$  e  $3s^23p4d$ , as quais serviram de base de conhecimento anterior. As demais configurações foram mantidas no cálculo porque eram importantes fontes de interação. Todos os parâmetros de Slater foram escalonados a 85% do valor Hartree-Fock, exceto os parâmetros  $\xi$ , mantidos a 95% e  $E_{av}$  fixo a 100% .

A análise do espectro do Ar V foi realizada através da comparação entre os valores teóricos de níveis de energia e intensidade de linhas espectrais com os valores para as transições observadas anteriormente por outros autores[48], bem como com cálculos empíricos de níveis de energia, no qual foi usado um código de busca, dentro do espectro experimental, para obtenção dos possíveis novos níveis de energia.

Para obtenção do espectro foram feitos diversos experimentos, variando-se a pressão dos gás espectroscópico, o número de disparos do banco de capacitores do theta-pinch e sua diferença de potencial. Dos resultados obtidos, foi possível realizar a tarefa de classificação iônica, enquanto que para confecção da tabela usada na análise foi usado o espectro obtido com 24 kV de tensão no banco, pressão de  $10\mu\text{bar}$  e 400 disparos, com a máquina operando no estágio 01 (vide capítulo 2). Foi empregado também na análise, dados produzidos no CIOp (Centro de Investigaciones Opticas de La Plata - Argentina)<sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>tubo de descarga capilar , descrito com algum detalhe no trabalho de Pagan[8]

### 5.3 Linhas de intercombinação.

A teoria geral da mecânica quântica para adição do momento angular prevê probabilidade não nula para transições de dipolo elétrico com acoplamento LS, somente quando  $\Delta L = 0, \pm 1$ ,  $\Delta J = 0, \pm 1$  e  $\Delta S = 0$ . Destas regras de seleção para o momento angular, a terceira não é muito rígida e é violada desde o átomo de hélio<sup>2</sup>, onde transições como  $1s^2\ ^1S_0 - 1s2p\ ^3P_1$  podem ocorrer. Este é um exemplo de uma transição, que produz uma linha também chamada de intercombinação ou inter-sistema, possível neste caso, devido à interação spin-órbita, que mistura o nível  $1s^2\ ^3P_1$  com o nível  $1s2p\ ^1P_1$ , o qual realmente decai para o estado fundamental. A probabilidade de transição de uma linha de intercombinação cresce aproximadamente com  $Z^{10}$ [49]. Para o íon N VI já é o principal canal de decaimento do nível  $1s2p\ ^3P_1$ , sendo mais provável do que a transição permitida  $1s2s\ ^3S_1 - 1s2p\ ^3P_1$ . Linhas de intercombinação são proeminentes em íons pesados, onde o parâmetro spin-órbita é muito grande e o acoplamento LS praticamente colapsa, ou seja, para estes íons a interação eletrostática entre os elétrons das camadas mais externas com o núcleo é pequena comparada com a interação spin-orbital, devido à blindagem do potencial do núcleo pelos elétrons, além do fato de que os elétrons mais externos estão relativamente afastados do núcleo.

As linhas de intercombinação assumem importante papel em tokamaks e outros plasmatrons. Nestas máquinas, estas transições são de grande importância para a determinação da densidade eletrônica, bem como a temperatura e outras propriedades do plasma[3, 50]. Por exemplo, a densidade eletrônica pode ser determinada através razão da intensidade entre duas linhas espectrais, sendo uma destas obtida por decaimento radioativo espontâneo (transição permitida) e a outra por decaimento induzido por colisões (transição proibida)[51]. Entretanto, o conhecimento da densidade eletrônica é geralmente obtida através de outros métodos como espa-

---

<sup>2</sup>a probabilidade de haver uma transição de intercombinação, também chamada inter-sistema, cresce rapidamente com o aumento da carga nuclear em uma sequência isoeletrônica

lhamento Thomson e interferometria.

Em nosso trabalho sobre o Ar V, duas linhas de intercombinação estão presentes. Estas linhas surgem das transições:  $3s^23p^2\ ^3P_{1,2} \rightarrow 3s3p^3\ ^5S_2$  e são também observadas em muitos objetos astronômicos, sendo o conhecimento de suas energias e taxas de transições importante para o diagnóstico de plasmas astrofísicos. No trabalho de Edlén[52, 53], que empreendeu uma investigação sistemática sobre o “splitting” dos termos pertencentes à configuração fundamental em elementos altamente ionizados como ferro, o cálcio e o níquel, foram identificadas 15 dentre as mais intensas linhas do espectro de emissão da coroa solar, como sendo devido às transições de dipolo magnético entre a configuração fundamental dos íons Ca XII-XIII, Fe X-XIV e Ni XII-XVII. Entre estas linhas, a linha 5303 Å era a mais intensa de todas e foi identificada como sendo devida à transição  $3s^23p(^2P_{1/2} - ^2P_{3/2})$  do Fe XIV. A presença detectada destes elementos em tão altos estágios de ionização, indicavam que a temperatura da coroa solar era muito maior ( $\approx 2 \times 10^6 K$ ) do que se supunha anteriormente, e mostrava que as teorias existentes a respeito da coroa solar tinham que ser revisadas.

## 5.4 Resultados.

Na revisão das configurações  $3s^23p^2$ ,  $3s3p^3$ ,  $3s^23p3d$  e  $3s^23d^2$ , obtivemos todas as 43 linhas previamente classificadas e adicionamos mais 11 novas linhas, que propiciaram a identificação de mais 3 novos níveis:  $3s3p^3(^5S_2)$  com  $(85879 \pm 3)cm^{-1}$ ,  $3s3p^3(^3P_0)$  com  $(141909 \pm 3)cm^{-1}$  e  $3s^23p3d(^1D_2)$  com  $(221829 \pm 4)cm^{-1}$ . As duas transições do quinteto  $^5S_2$  com os níveis  $3s^23p^2\ ^3P_{1,2}$ , (1174,88 Å e 1192,49 Å respectivamente), que determinaram sua posição, ficaram bastante próximas às previstas teoricamente (1174,7 Å e 1192,3 Å) no trabalho de Träbert[47]. A medida das referidas transições ficaram um pouco prejudicadas devido a sua proximidade a linhas muito intensas de impurezas (carbono e silício). A previsão futura é de se fazer novos experimentos, a fim de melhorarmos estes resultados, usando um tubo de quatrzo no

tubo theta-pinch, bombeado por um sistema de vácuo constituído exclusivamente por uma bomba mecânica e uma bomba turbo-molecular. Como ocorreu em trabalhos anteriores de outros autores, não obtivemos nenhuma transição que pudesse ser usada na identificação dos níveis  $3s^23p3d\ ^3F_{2,3,4}$ , devido à fraca intensidade das possíveis linhas geradas pelas transições envolvendo estes níveis. A tabela(5.1) mostra as linhas observadas neste trabalho nas transições entre configurações estudadas previamente estudadas por outros autores, enquanto que a tabela(5.2) mostra os valores ajustados para os níveis destas configurações e suas respectivas incertezas.

A figura(5.1) mostra um diagrama de níveis de energia de centro de gravidade das configurações envolvidas na análise aqui empreendida. Nela as transições tracejadas indicam transições anteriormente desconhecidas, enquanto as transições indicadas por linhas contínuas eram quase que totalmente conhecidas. Nela fica clara a proximidade das configurações  $3p^4$  e  $3s3p^23d$  e pode-se entender a sobreposição (mistura) dos níveis encontrada na análise teórica. Este fato indica que para se legitimar a análise empreendida na configuração  $3p^4$  temos que resolver também a outra configuração.

No estudo aqui realizado sobre a nova configuração  $3p^4$ , foram classificadas treze novas linhas e todos os seus cinco níveis foram determinados. A tabela(5.3) mostra estas novas linhas, onde a linha 804.46 Å recebeu dupla classificação enquanto a linha 814.42 Å consiste de uma superposição de duas linhas relacionadas às transições com  $3s3p^3(^3P_{1,2})$ . A tabela(5.4) mostra os cinco novos níveis da configuração  $3p^4$  com suas respectivas incertezas. Nela, é também mostrada a composição de cada nível, onde pode ser notado o reflexo da forte interação da mesma com a configuração fundamental  $3s^23p^2$  (interação  $s^2 - p^2$ ), bem como com a configuração excitada  $3s3p^23d$  (interação  $p^2 - sd$ ). A Tabela(5.5) mostra os parâmetros de Slater obtidos para as configurações ímpares, enquanto que a tabela(5.6) mostra os parâmetros de Slater ajustados para as configurações pares  $3s^23p^2$ ,  $3p^4$ ,  $3s3p^23d$  e  $3s^23d^2$ , com um desvio-padrão de  $24\text{cm}^{-1}$  em 10 níveis ajustados.

Tabela 5.1: Linhas classificadas nas transições  $3s^23p^2 \leftarrow 3s3p^3$ ,  $3s^23p^2 \leftarrow 3s^23p3d$  and  $3s^23p^2 \leftarrow 3s^23p4s$  do Ar V.

Intensidade <sup>a</sup>	Comprimento de onda (Å)	Transição	
1	336.57	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	- $3s^23p4s \ ^3P_2^0$
1	337.58	$3s^23p^2 \ ^3P_0$	- $3s^23p4s \ ^3P_1^0$
1	338.01	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	- $3s^23p4s \ ^3P_2^0$
1	338.45	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	- $3s^23p4s \ ^3P_1^0$
1	339.02	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	- $3s^23p4s \ ^3P_0^0$
1	339.89	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	- $3s^23p4s \ ^3P_1^0$
2	350.88	$3s^23p^2 \ ^1D_2$	- $3s^23p4s \ ^1P_1^0$
1	357.23 <sup>bc</sup>	$3s^23p^2 \ ^1D_2$	- $3s^23p4s \ ^3P_1^0$
3	379.69	$3s^23p^2 \ ^1S_0$	- $3s^23p4s \ ^1P_1^0$
1	411.01 <sup>b</sup>	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	- $3s^23p3d \ ^1F_3^0$
3	436.63	$3s^23p^2 \ ^1D_2$	- $3s^23p3d \ ^1F_3^0$
3	445.97	$3s^23p^2 \ ^3P_0$	- $3s^23p3d \ ^3D_1^0$
2	446.96	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	- $3s^23p3d \ ^3D_2^0$
3	447.53	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	- $3s^23p3d \ ^3D_1^0$
2	449.08	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	- $3s^23p3d \ ^3D_3^0$
3	449.50	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	- $3s^23p3d \ ^3D_2^0$
3	452.39 <sup>b</sup>	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	- $3s^23p3d \ ^1D_2^0$
2	454.99 <sup>b</sup>	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	- $3s^23p3d \ ^1D_2^0$
3	458.09	$3s^23p^2 \ ^3P_0$	- $3s^23p3d \ ^3P_1^0$
3	458.96	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	- $3s^23p3d \ ^3P_0^0$
3	459.73	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	- $3s^23p3d \ ^3P_1^0$
2	461.24	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	- $3s^23p3d \ ^3P_2^0$
2	462.41	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	- $3s^23p3d \ ^3P_1^0$
3	463.94	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	- $3s^23p3d \ ^3P_2^0$
1	466.79	$3s^23p^2 \ ^1S_0$	- $3s^23p3d \ ^1P_1^0$
3	486.57 <sup>b</sup>	$3s^23p^2 \ ^1D_2$	- $3s^23p3d \ ^1D_2^0$
1	495.09	$3s^23p^2 \ ^1D_2$	- $3s^23p3d \ ^3P_1^0$
2	511.89	$3s^23p^2 \ ^3P_0$	- $3s3p^3 \ ^1P_1^0$
2	513.90	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	- $3s3p^3 \ ^1P_1^0$
2	517.26	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	- $3s3p^3 \ ^1P_1^0$
3	522.08	$3s^23p^2 \ ^3P_0$	- $3s3p^3 \ ^3S_1^0$
3	524.19	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	- $3s3p^3 \ ^3S_1^0$

Tabela 5.1: Continuação.

Intensidade <sup>a</sup>	Comprimento de onda (Å)	Transição	
3	527.68	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	– $3s3p^3 \ ^3S_1^0$
2	536.75	$3s^23p^2 \ ^1S_0$	– $3s3p^3 \ ^3D_1^0$
3	558.48	$3s^23p^2 \ ^1D_2$	– $3s3p^3 \ ^1P_1^0$
2	570.65	$3s^23p^2 \ ^1D_2$	– $3s3p^3 \ ^3S_1^0$
4	635.17	$3s^23p^2 \ ^1S_0$	– $3s3p^3 \ ^1P_1^0$
2	650.95 <sup>bc</sup>	$3s^23p^2 \ ^1S_0$	– $3s3p^3 \ ^3S_1^0$
3	651.68	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	– $3s3p^3 \ ^1D_2^0$
4	705.33	$3s^23p^2 \ ^3P_0$	– $3s3p^3 \ ^3P_1^0$
2	708.57 <sup>b</sup>	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	– $3s3p^3 \ ^3P_0^0$
5	709.20	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	– $3s3p^3 \ ^3P_2^0$
5	715.64	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	– $3s3p^3 \ ^3P_2^0$
4	725.09	$3s^23p^2 \ ^1D_2$	– $3s3p^3 \ ^1D_2^0$
4	822.17	$3s^23p^2 \ ^3P_0$	– $3s3p^3 \ ^3D_1^0$
4	827.03	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	– $3s3p^3 \ ^3D_2^0$
4	827.35	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	– $3s3p^3 \ ^3D_1^0$
4	834.91	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	– $3s3p^3 \ ^3D_3^0$
4	835.79	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	– $3s3p^3 \ ^3D_2^0$
4	836.13	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	– $3s3p^3 \ ^3D_1^0$
2	948.98 <sup>bc</sup>	$3s^23p^2 \ ^1D_2$	– $3s3p^3 \ ^3D_2^0$
2	949.38 <sup>bc</sup>	$3s^23p^2 \ ^1D_2$	– $3s3p^3 \ ^3D_1^0$
5	1174.88 <sup>bc</sup>	$3s^23p^2 \ ^3P_1$	– $3s3p^3 \ ^5S_2^0$
11	1192.49 <sup>bc</sup>	$3s^23p^2 \ ^3P_2$	– $3s3p^3 \ ^5S_2^0$

a- Intensidade visualmente estimada entre 0 e 15.

b- Linhas novas.

c- Observadas no trabalho anterior de Pagan[8].

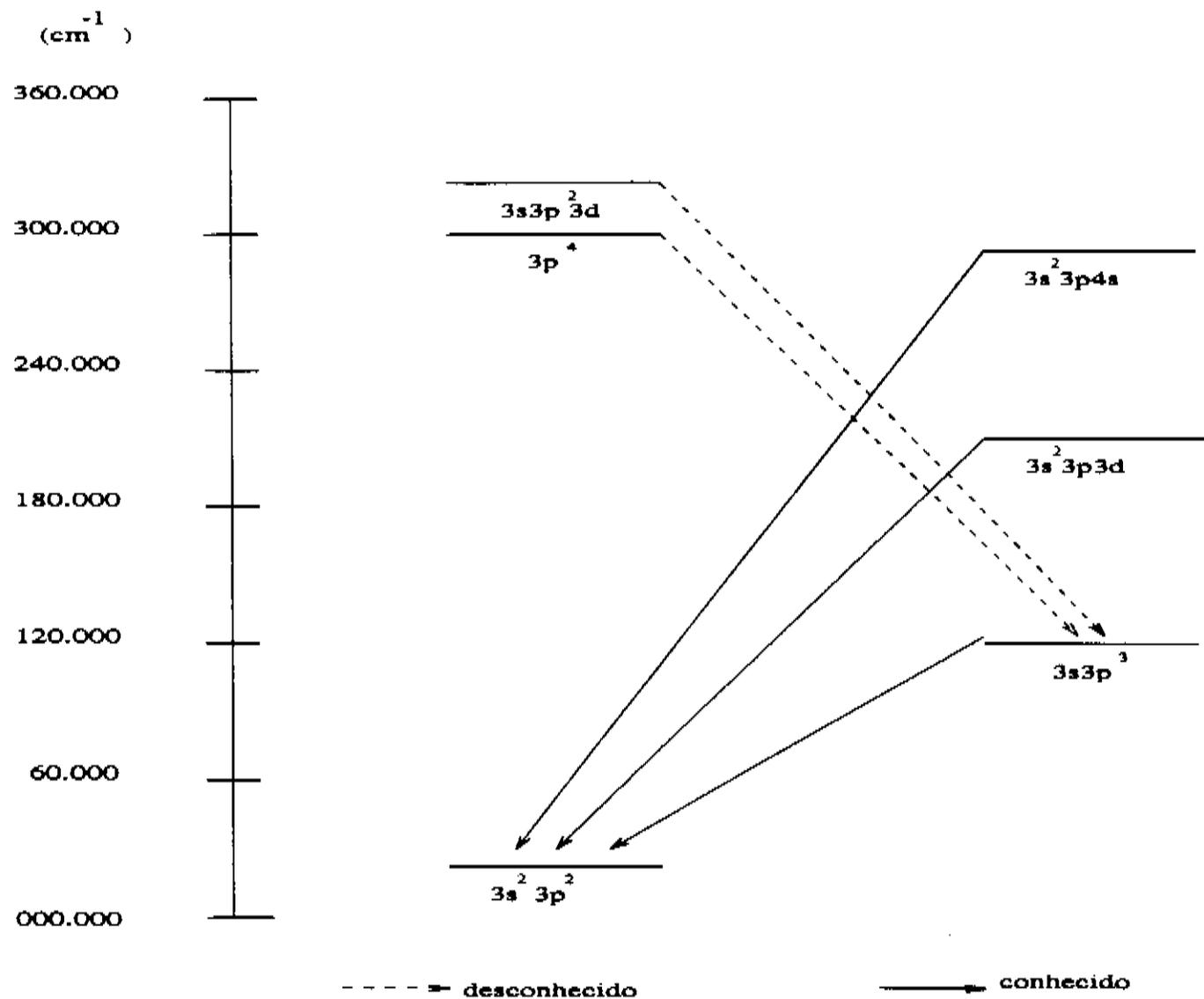


Figura 5.1: Diagrama de níveis de energia das configurações estudadas do ArV.

Tabela 5.2: Níveis ajustados das configurações  $3s^23p^2$ ,  $3s3p^3$ ,  $3s^23p3d$  e  $3s^23p4s$  do Ar V.

Designação	Energia $\text{cm}^{-1}$	Incerteza $\text{cm}^{-1}$
$3s^23p^2$		
$^3P_0$	0.0	2.0
$^3P_1$	767.1	2.0
$^3P_1$	2032.1	1.0
$^1D_2$	16302.0	1.0
$^1S_0$	37919.4	2.0
$3s3p^3$		
$^5S_0$	85879.6 <sup>a</sup>	3.0
$^3D_1$	121631.8	1.0
$^3D_2$	121678.8	1.0
$^3D_3$	121803.9	2.0
$^3P_2$	141768.6	1.0
$^3P_1$	141782.1	3.0
$^3P_0$	141879.5 <sup>a</sup>	3.0
$^1D_2$	154216.2	1.0
$^3S_1$	191545.4	1.0
$^1P_1$	195356.8	1.0
$3s^23p3d$		
$^3P_2$	217575.6	3.0
$^3P_1$	218290.0	3.0
$^1P_0$	218651.1	14.0
$^1D_2$	221817.5 <sup>a</sup>	3.0
$^3D_1$	224223.5	4.0
$^3D_2$	224501.3	8.0
$^3D_3$	224710.3	10.0
$^1F_3$	245335.9	6.0
$^1P_1$	252135.0	5.0
$3s^23p4s$		
$^3P_0$	295735.0	9.0
$^3P_1$	296234.9	5.0
$^3P_2$	297882.2	6.0
$^1P_1$	301295.7	6.0

a- Nível novo determinado neste trabalho.

Tabela 5.3: Novas linhas classificadas para as transições  $3s3p^3 - 3p^4$  no Ar V.

Intensidade <sup>(1)</sup>	Comprimento de onda (Å)	$\sigma_{obs.}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\sigma_{obs.} - \sigma_{calc.}^{(3)}$ (cm <sup>-1</sup> )	Transição
2	546.17 <sup>(4)</sup>	183093.2	0.9	$3s3p^3 \ ^3P_1^o - 3p^4 \ ^1S_0$
8	692.28	144450.2	1.9	$3s3p^3 \ ^3D_1^o - 3p^4 \ ^3P_0$
1	694.39 <sup>(2)</sup>	144011.3	1.6	$3s3p^3 \ ^3D_1^o - 3p^4 \ ^3P_1$
6	694.65 <sup>(5)</sup>	143957.4	-5.1	$3s3p^3 \ ^3D_2^o - 3p^4 \ ^3P_1$
2	694.89 <sup>(2)</sup>	142879.6	0.9	$3s3p^3 \ ^3D_2^o - 3p^4 \ ^3P_2$
6	700.51	142753.1	0.3	$3s3p^3 \ ^3D_3^o - 3p^4 \ ^3P_2$
4	731.24	136754.0	0.1	$3s3p^3 \ ^3P_2^o - 3p^4 \ ^1D_2$
6	772.15	129508.5	-0.1	$3s3p^3 \ ^1P_1^o - 3p^4 \ ^1S_0$
8	804.46 <sup>(6)</sup>	124307.0	0.4	$3s3p^3 \ ^3P_1^o - 3p^4 \ ^3P_0$
			-0.1	$3s3p^3 \ ^1D_2^o - 3p^4 \ ^1D_2$
2	814.42	122786.8	2.6	$3s3p^3 \ ^3P_{1,2}^o - 3p^4 \ ^3P_2$
2	906.29	110340.0	-0.3	$3s3p^3 \ ^1D_2^o - 3p^4 \ ^3P_2$
1	1341.68	74533.4	-0.7	$3s3p^3 \ ^3S_1^o - 3p^4 \ ^3P_0$
4	1413.97	70722.8	0.0	$3s3p^3 \ ^1P_1^o - 3p^4 \ ^3P_0$

(1) Intensidade visualmente estimada entre 1 e 10

(2) Medido em segunda ordem de difração

(3)  $\sigma_{calc.}$  foi obtido do valor do nível estabelecido

(4) Linha larga

(5) Linha assimétrica

(6) Dupla classificação

Tabela 5.4: Níveis de energia da configuração  $3p^4$  do Ar V.

Designação	Energia cm <sup>-1</sup>	Incerteza cm <sup>-1</sup>	Composition Percentual <sup>(1)</sup>
$3p^4 \ ^3P_2$	264568.9	1.1	45 + 48 ( $3s3p^2(^3P)3d \ ^3P$ ) + 5( $3s3p^2(^1D)3d \ ^3P$ )
$3p^4 \ ^3P_1$	265652.7	2.7	45 + 49 ( $3s3p^2(^3P)3d \ ^3P$ ) + 5( $3s3p^2(^1D)3d \ ^3P$ )
$3p^4 \ ^3P_0$	266091.3	0.7	45 + 49 ( $3s3p^2(^3P)3d \ ^3P$ ) + 5( $3s3p^2(^1D)3d \ ^3P$ )
$3p^4 \ ^1D_2$	278535.6	1.5	56 + 35 ( $3s3p^2(^1D)3d \ ^1D$ ) + 5( $3s3p^2(^1S)3d \ ^1D$ )
$3p^4 \ ^1S_0$	324877.1	1.8	50 + 44 ( $3s3p^2(^1D)3d \ ^1S$ ) + 5( $3s3p^2(^1S)3d \ ^1S$ )

(1) Porcentagens menores que 4% foram omitidas.

Tabela 5.5: Parâmetros de Slater para a configurações ímpares  $3s3p^3$ ,  $3s^23p3d$  e  $3s^23p4s$  do Ar V.

configuração	parâmetro	Valor HFR ( $\text{cm}^{-1}$ )	Valor Ajustado <sup>a</sup> ( $\text{cm}^{-1}$ )	razão Ajustado/HF
$3s3p^3$	$E_{av}$	136214	$164465 \pm 80$	1.21
	$F^2(3p, 3p)$	75647	$65985 \pm 283$	0.87
	$G^1(3s, 3p)$	102393	$93546 \pm 144$	0.91
	$\xi_{3p}$	1246	$1395 \pm 101$	1.12
$3s^23p3d$	$E_{av}$	198613	$221995 \pm 122$	1.12
	$F^2(3p, 3d)$	69452	$62913 \pm 364$	0.91
	$G^1(3p, 3d)$	86465	$74797 \pm 399$	0.86
	$G^3(3p, 3d)$	53372	$40386 \pm 415$	0.76
	$\xi_{3p}$	1267	$1419 \pm 103$	1.12
	$\xi_{3d}$	49 <sup>b</sup>		
$3s^23p4s$	$E_{av}$	289964	$298223 \pm 81$	1.13
	$G^1(3p, 4s)$	7978	$6516 \pm 109$	0.82
	$\xi_{3p}$	1349	$1510 \pm 109$	1.12

a- O desvio médio quadrático de  $24 \text{ cm}^{-1}$  para 10 níveis observados.

b- Fixo durante o processo de ajuste.

Tabela 5.6: Parâmetros de Slater para as configurações  $3s^23p^2$ ,  $3p^4$ ,  $3s3p^23d$ , e  $3s^23d^2$  do Ar V.

configuração	parametro	Valor HFR ( $\text{cm}^{-1}$ )	Valor ajustado <sup>(1)</sup> ( $\text{cm}^{-1}$ )	razão ajustado/HF
$3s^23p^2$	$E_{av}$	0	$26254 \pm 13$	
	$F^2(3p, 3p)$	75818	$62651 \pm 53$	0.83
	$\xi_{3p}$	1246	$1378 \pm 22$	1.11
$3p^4$	$E_{av}$	301253	$312358 \pm 20$	1.04
	$F^2(3p, 3p)$	75503	$85491 \pm 123$	1.13
	$\xi_{3p}$	1247	$1269 \pm 40$	1.02
$3s3p^23d$	$E_{av}$	322922	$348131^{(2)}$	1.08
	$F^2(3p, 3p)$	$76030^{(2)}$		
	$F^2(3p, 3d)$	$69758^{(2)}$		
	$G^1(3s, 3p)$	$102803^{(2)}$		
	$G^2(3s, 3d)$	$67493^{(2)}$		
	$G^1(3p, 3d)$	$86919^{(2)}$		
	$G^3(3p, 3d)$	$53657^{(2)}$		
	$\xi_{3p}$	$1266^{(2)}$		
	$\xi_{3d}$	$51^{(2)}$		
$3s^23d^2$	$E_{av}$	405399	$442155^{(2)}$	1.09
	$F^2(3d, 3d)$	$65792^{(2)}$		
	$F^4(3d, 3d)$	$41943^{(2)}$		
	$\xi_{3d}$	$52^{(2)}$		
Integrais de interação de configuração				
$3s^23p^2 - 3p^4$	$R^1(3s3s, 3p3p)$	102138	$88817^{(2)}$	0.87
$3s^23p^2 - 3s3p^23d$	$R^1(3s3p, 3p3d)$	93178	$97837^{(2)}$	1.05
$3s^23p^2 - 3s3p^23d$	$R^1(3s3p, 3d3p)$	70649	$74181^{(2)}$	1.05
$3s^23p^2 - 3s^23d^2$	$R^1(3p3p, 3d3d)$	86653	$73655^{(2)}$	0.85
$3s^23p^2 - 3s^23d^2$	$R^1(3p3p, 3d3d)$	$53488^{(2)}$		
$3p^4 - 3s3p^23d$	$R^1(3p3p, 3s3d)$	93029	$78075^{(2)}$	0.84
$3s3p^23d - 3s^23d^2$	$R^1(3p3p, 3s3d)$	93176	$97835^{(2)}$	1.05

1. O desvio padrão foi de  $24 \text{ cm}^{-1}$  para 10 níveis observados.
2. Fixo durante o processo de ajuste.

# Capítulo 6

## Análise do Xe VII

### 6.1 Introdução

A configuração fundamental do xenônio neutro é descrita por  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6$ , enquanto a configuração fundamental para o xenônio seis vezes ionizado (Xe VII), é idêntica a do xenônio neutro, excluindo-se os seis elétrons  $5p$ . Como é usual, omitiremos na designação das possíveis configurações deste íon, a notação referente aos elétrons mais internos que pertençam a camadas “fechadas”, ou seja, orbitais que estejam com todos os estados possíveis ocupados. Neste caso, a configuração fundamental para o Xe VII foi descrita simplesmente por  $5s^2$ .

As configurações excitadas serão obtidas a partir dos elétrons  $5s$  para níveis de maior energia, como por exemplo  $5s5p$ ,  $5s5d$  etc. Nota-se que neste caso também está sendo omitida a designação dos elétrons pertencentes às camadas “cheias”.

Até 1979 só havia sido publicado cinco linhas relativas às medidas do espectro do Xe VII, observadas em um Zeta Torus por Fawcett e outros[54]. Naquele ano, Knystautas e outros[55] realizaram uma análise mais completa das configurações  $5s^2$ ,  $5s5p$ ,  $5p^2$ ,  $5s5d$ ,  $5s6s$ , usando um theta-pinch. Kernahan e outros[56], através do tempo e vida de algumas linhas do Xe VII produzidas por um “beam-foil”, fizeram pequenas correções na análise de Knystautas. Com exceção de algumas tentativas para identificar transições com camadas internas,  $4d^{10}5s^2 - 4d^9 5s^2 np$  ( $n=5$ )

e  $4d^{10}5s^2 - 4d^95s^2nf$  ( $n=4,5$ ) [57, 58], não conhecemos nenhum outro artigo que contivesse informações novas a respeito do espectro do Xe VII até 1987, quando Kaufman e Sugar, usando uma fonte *sparc* de baixa indutância e um espectrógrafo de 10 metros, obtiveram um espectro com precisão entre  $0.005\text{\AA}$  e  $0.010\text{\AA}$  e estudaram a sequência isoeletrônica do cádmio entre o Xe VII e o Eu XVI. Eles determinaram a energia do termo  $^1D_2$  da configuração excitada  $5p^2$ , além de algumas novas transições, bem como a atribuição de alguns níveis em desacordo com o trabalho anterior de Knystautas e outros. Seus cálculos teóricos foram feitos baseado na aproximação Hartree-Fock (HFR) com correção relativística, usando o programa desenvolvido por Cowan[18], onde o escalonamento das integrais eletrostáticas radiais a 85% e as integrais Spin-orbitais a 100%, permitiram-no um acerto com o espectro observado, em geral, dentro de  $1\text{\AA}$ . Em 1991, Pinnington e outros[60] estudaram as discrepâncias entre os trabalhos de Knystautas e Kaufman citados anteriormente, através da medida do tempo de vida médio dos sistemas tripletos  $5s5p\ ^3P - 5p^2\ ^3P$ ,  $5s5p\ ^3P - 5p^2\ ^1D$  e  $5s5p\ ^1P - 5p^2\ ^1D$ . Seus resultados confirmaram as assinalações realizadas por Kaufman.

A tabela(6.1) apresenta um resumo das transições obtidas para o xenônio seis vezes ionizado, para as configurações relacionadas com este trabalho de tese, mostrando os progressos obtidos na análise deste íon até a realização deste trabalho. Nela são mostrados os resultados de Fawcett(1962), Knystautas(1979) e Kaufman(1987). Note as diferenças entre estes dois últimos, as quais foram resolvidas levando-se em conta que, o tempo de vida comum à algumas determinadas transições indicam um estado comum, ou seja, o mesmo multipletto. A técnica de classificação iônica usando “crowbar” foi aplicada para análise do espectro do xenônio e através do resultados obtido, nós confirmamos que a linha  $533,84\text{\AA}$  de fato não correspondia a uma linha do espectro do Xe VII. Submetida ao chaveamento com o crowbar, sua intensidade ficou reduzida a 54% do valor original, o que corresponde a uma linha do espectro do Xe V, enquanto que a variação sofrida tipicamente por uma linha do espectro do

transição	Fawcett(1962)	Knystautas(1979)	Kaufmam(1987)
$5s^2 - 5s5p$			
$^1S_0 - ^1P_1$	698,02	698,08	698,027
$^1S_0 - ^3P_1$	995,50	$995 \pm 1$	995,505
$5s5p - 5p^2$			
$^3P_2 - ^3P_2$	723,71	723,72	723,698
$^3P_2 - ^3P_1$		<b>816,80</b>	<b>826,387</b>
$^3P_2 - ^1D_2$			816,820
$^3P_1 - ^3P_2$		660,47	660,494
$^3P_1 - ^3P_1$		<b>737,21</b>	<b>744,985</b>
$^3P_1 - ^3P_0$		<b>798,17</b>	<b>811,543</b>
$^3P_1 - ^1D_2$			737,203
$^3P_0 - ^3P_1$		<b>714,31</b>	<b>721,801</b>
$^1P_1 - ^1D_2$			1077,126
$^1P_1 - ^3P_2$			920,126
$5s5p - 5s5d$			
$^3P_2 - ^3D_3$	566,04	566,07	566,043
$^3P_2 - ^3D_2$		571,33	571,304
$^3P_2 - ^3D_1$			578,480
$^3P_1 - ^3D_2$	531,18	531,17	531,177
$^3P_1 - ^3D_1$		<b>533,84</b>	<b>521,831</b>
$^1P_1 - ^1D_2$			595,094
$^3P_0 - ^3D_1$		521,79	

Tabela 6.1: Resultados prévios de algumas transições (em Å) do Xe VII.

Xe VII era para 81% do valor de intensidade original. Outro resultado interessante da análise, utilizando-se esta nova técnica de classificação iônica, está relacionado à transição  $5s5p - 5s5d$  (595,094 Å) que será comentado na próxima seção.

Na análise teórica do xenônio seis vezes ionizado, realizada nesta tese, foram envolvidas seis configurações pares ( $5s^2$ ,  $5p^2$ ,  $5s5d$ ,  $5p4f$ ,  $4f^2$  e  $5d^2$ ) e quatro configurações ímpares ( $5s5p$ ,  $5s4f$ ,  $5p5d$  e  $5d4f$ ). A maior parte dos níveis das três primeiras configurações pares e da primeira ímpar citadas, já tinham sido obtidas experimentalmente por outros autores[59]. As configurações que contêm elétrons

4*f* foram incluídas no cálculo teórico para interagir com as outras configurações e produzir assim uma previsão teórica mais realística. A determinação dos níveis de energias das configurações  $5d^2$  e  $5p5d$  foi o objetivo específico desta análise. A inclusão desta análise estende consideravelmente a determinação da estrutura atômica do complexo relativo ao número quântico principal  $n=5$  para este íon.

A figura(6.1) mostra um diagrama de Grotrian teórico com as energias de centro de gravidade destas configurações. Uma primeira análise desta figura indica que a configuração de menor energia ainda desconhecida é a configuração  $5s4f$ , a qual deveria ser o alvo natural desta análise. Entretanto, ela não foi o objeto de estudo por duas razões . Primeiramente, devido ao fato que ela fornece apenas os termos  $^1F_3$  e  $^3F_{4,3,2}$ , enquanto que a configuração fundamental  $5s^2$  fornece apenas o singlete  $^1S_0$  e portanto, não é possível haver transição de dipolo elétrico entre estas duas configurações( $\Delta J \geq 2$ ). Em segundo lugar, as transições entre esta configuração e a configuração  $5p^2$  são muito pouco intensas devido ao fato de que neste caso é necessário o envolvimento de dois elétrons opticamente ativos, além do fato de que as possíveis transições estão fora da faixa espectral (300-2100 Å) experimentalmente obtida neste trabalho. A outra configuração conhecida ( $5s5d$ ) que poderia dar suporte experimental a análise da configuração  $5s4f$ , produz transições com esta, também fora da faixa espectral investigada.

Pelas razões citadas anteriormente, a configuração nova de menor energia que passamos a estudar foi  $5p5d$ , que produz transições intensas com as outras configurações e que estão dentro da faixa espectral de interesse. A configuração  $5d^2$  foi introduzida para uma verificação adicional da configuração  $5p5d$ . Estas duas configurações foram adicionadas às configurações usadas na análise do xenônio seis vezes ionizado realizada por Kaufman e Sugar[59]. As porcentagens para os parâmetros de Slater, aqui utilizadas para realizar os cálculos teóricos iniciais, foram as mesmas que eles empregaram, ou seja, 85% para as integrais eletrostáticas radiais e 100% para as integrais spin-orbitais.

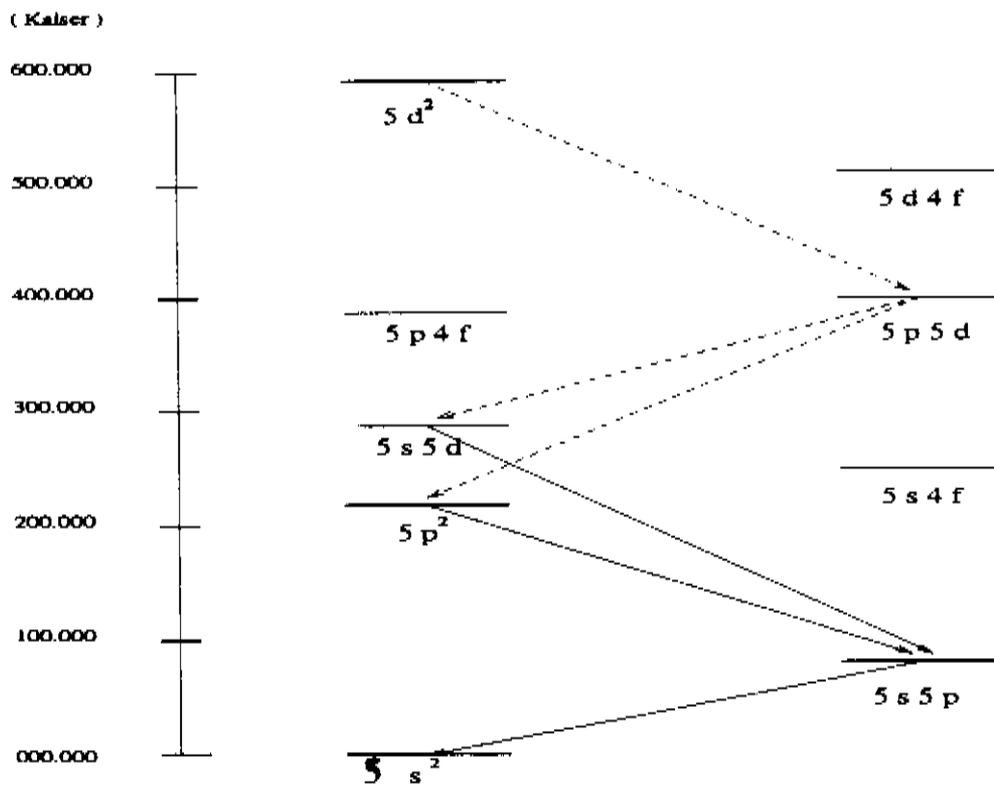


Figura 6.1: Diagrama de Grotrian teórico para algumas configurações do Xe VII

## 6.2 Revisão das configurações $5s^2$ , $5p^2$ , $5s5d$ e $5s5p$ .

A energia de todos os termos das configurações  $5s^2$ ,  $5p^2$ ,  $5s5d$  e  $5s5p$  já eram conhecidas previamente[59], excluindo-se a energia do termo  $^1S_0$  da configuração  $5p^2$  e algumas transições pouco intensas relativas às combinações entre estas configurações.

Na primeira fase de análise do Xe VII, usamos os resultados experimentais conhecidos anteriormente e fizemos um ajuste dos parâmetros teóricos como integrais eletrostáticas, parâmetro spin-órbita, energia de centro de gravidade e outros, usando o método dos mínimos quadrados contido no programa RCE19. Tal cálculo forneceu valores teóricos para os níveis dos termos e os comprimentos de onda relativos as transições bastantes aproximados dos valores experimentais ( $\leq 1\text{\AA}$ ) e assim obtivemos uma boa indicação do valor de energia do termo desconhecido até então  $^1S_0$  ( $5p^2$ ). A tabela(6.2) mostra o resultado deste ajuste num formato de um quadro

usado na análise espectral. Para as configurações  $5s^2$ ,  $5p^2$ ,  $5s5d$ , o desvio padrão<sup>1</sup> foi de 0,047 kk (kk =  $10^3$  kaiser =  $10^3$  cm<sup>-1</sup>), enquanto que para a configuração  $5s5p$  foi de 0,010 kk. A tabela(6.3) mostra as previsões teóricas e os valores experimentalmente determinados para as referidas configurações. A partir destes resultados indicamos o valor experimental do nível  $5p^2(^1S_0)$  como sendo 278911 cm<sup>-1</sup>, com duas transições como suporte, sendo uma delas a transição  $5p^2(^3D_1) - 5s5p(^1P_1)$  (737,19 Å), que ficou a cerca de 0,5Å do valor teórico ajustado. Esta linha apresenta uma montagem com a linha 737,203 Å, produzida pela transição  $5p^2\ ^3P_1 - 5p5d\ ^3P_2$ . Outro resultado deste ajuste foi a exclusão da transição  $5s5p(^1P_1) - 5s5d(^1D_2)$ , obtida anteriormente por Kaufman e Sugar[59], com a qual não foi possível obter convergência no ajuste citado. Outro fato que corroborou para esta exclusão foi a análise de classificação iônica, produzida pelo sistema “crowbar” de chaveamento, o qual indicava claramente que esta transição não pertencia ao espectro do xênonio seis vezes ionizado. Recentemente, Tauheed e outros[61] mostraram que de fato, a referida transição pertence ao espectro do Xe V.

## 6.3 Resultados

Preliminarmente temos indicado a posição de 22 novos níveis relacionadas as configurações do Xe VII, com 62 transições observadas, sendo que destas 44 são novas.

Na parte de revisão das configurações  $5s^2$ ,  $5s5p$ ,  $5p^2$  e  $5s5d$ , obtivemos todas as transições observadas anteriormente por Kaufmam e Sugar[59] e identificamos o nível  $5p^2\ ^1S_0$  em 278911 cm<sup>-1</sup>. Na tabela(6.5) estão apresentadas 19 transições relativas às configurações revisadas, das quais uma é nova ( $5p^2\ ^1P_1 - 5p5d\ ^3P_1$  1093,82 Å) e duas outras foram rejeitadas. Por último, confirmamos a linha 521,831 Å no lugar da linha 533,84 Å, usando a técnica de classificação iônica com “crowbar”,

---

<sup>1</sup>considerado satisfatório quando inferior a 1% do valor médio da energia dos níveis envolvidos [pp. 467 TASS]

Tabela 6.2: Resultado do ajuste das configurações conhecidas  $5s^2$ ,  $5p^2$ ,  $5s5d$ , e  $5s5p$  e a sua comparação com os valores das transições experimentais.

( $\text{cm}^{-1}$ ) configuração termo	96199.83 $5s5p$ $J=0$ $(2S)^3P$	100380.46 $5s5p$ $J=1$ $(2S)^3P$	111683.84 $5s5p$ $J=2$ $(2S)^3P$	143263.88 $5s5p$ $J=1$ $(2S)^3P$
-0.05 $5s^2$ $J=0$ $(1S)^3P$	( $\text{cm}^{-1}$ ) $\lambda$ ajus Intens. $\lambda$ exp.	100380.51 996.209 584 995.505		143263.94 698.012 2420 698.027
223673.01 $5p^2$ $J=0$ $(3P)^3P$		123292.55 811.079 1525 811.505		80409.14 1243.640 160
234682.52 $5p^2$ $J=1$ $(3P)^3P$	138482.69 722.112 1707 721.801	134302.06 744.590 1497 744.985	120998.69 826.455 1614 826.387	91418.65 1093.869 <i>nova</i> 294 1093.824
236099.85 $5p^2$ $J=2$ $(1D)^1D$		135719.39 736.814 1524 737.203	122416.02 816.887 1675 816.820	92835.98 1077.16 1117 1077.126
251853.02 $5p^2$ $J=2$ $(3P)^3P$		151472.55 660.186 1563 660.494	138169.19 723.750 2210 723.689	108589.14 920.902 1214 920.872
218214.48 $5p^2$ $J=0$ $(1S)^1S$		180834.02 552.993 472		137950.61 724.897 1696
287749.90 $5s5d$ $J=1$ $(2S)^3D$	191550.06 522.057 2426 521.823	187369.06 53.705 2164 533.844	174066.08 574.495 850 574.480	144486.02 692.109 563
288748.44 $5s5d$ $J=2$ $(2S)^3D$		188367.98 530.876 2989 531.177	175064.61 571.218 2071 571.304	145484.56 687.358 <i>nova</i> 655 687.434
290324.90 $5s5d$ $J=3$ $(2S)^3D$			176641.06 566.120 3383 566.043	
324606.91 $5s5d$ $J=2$ $(2S)^1D$		224226.44 455.978 1561	210923.06 474.107 304	181343.03 551.441 3727 ? 595.094

Tabela 6.3: Energias ajustadas para algumas configurações do Xe VII

configuração	termo	J	E(cm <sup>-1</sup> ) experimental	E(cm <sup>-1</sup> ) ajustado
5s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S	0	0,0	0,4
5s5p	<sup>3</sup> P	0	96.139,7	96.199,7
		1	100.451,5	100.380,3
		2	113.674,1	113.683,7
5s5p	<sup>1</sup> P	1	143.260,9	143.264,3
5p <sup>2</sup>	<sup>3</sup> P	0	223.673,6	223.674,8
		1	234.682,6	223.674,8
		2	251.853,3	251.852,9
5p <sup>2</sup>	<sup>1</sup> D	2	236.100,0	236.100,9
5p <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S	0	278.911	278.976,2
5s5d	<sup>3</sup> D	1	287.772,1	287.758,3
		2	288.712,5	288.735,1
		3	290.339,1	290.330,8
5s5d	<sup>1</sup> D	2	311.301,6	312.422,5

em concordância com o trabalho de Kaufmam[59].

Para as novas configurações 5p5d e 5d<sup>2</sup>, indicamos tentativamente os seus 22 níveis. Na tabela(6.4) indicamos a energia e o número de transições que dão suporte as respectivas assinalações destes níveis, enquanto que na tabela(6.6) apresentamos as 43 novas transições obtidas. Na análise do espectrograma que foi digitalizado e mostrado através do “software” gráfico GRAFED87, observamos que a estrutura deste espectro apresentava muita montagem, ou seja, apresentava muitas linhas que não estavam resolvidas, entretanto, podia-se fazer medidas de seu comprimento de onda, muito embora comprometendo um pouco tanto a intensidade bem como o comprimento de onda medidos. Tais fatos justificam o emprego de uma rede de difração com maior poder de resolução<sup>2</sup>, para obtermos uma precisão maior nestas assinalações.

<sup>2</sup>atualmente se encontra em fase de aquisição uma nova rede com dispersão recíproca de aproximadamente 2,3 Å/mm.

Tabela 6.4: Novos níveis obtidos para as configurações  $5p^2$ ,  $5p5d$  e  $5d^2$  do Xe VII

configuração	termo	Energia ( $cm^{-1}$ )	número de transições	
$5p^2$	$^1S_0$	278911	02	
$5p5d$	$^3D_1$	403793	03	
	$^3D_2$	406379	04	
	$^3D_3$	413556	04	
	$^3P_0$	414700	02	
	$^3P_1$	414950	07	
	$^3P_2$	414017	05	
	$^3F_2$	383591	03	
	$^3F_3$	391501	03	
	$^3F_4$	399593	02	
	$^1D_2$	395869	03	
	$^1F_3$	431032	04	
	$^1P_1$	430295	04	
	$5d^2$	$^3F_2$	577031	02
		$^3F_3$	579785	02
$^3F_4$		580303	03	
$^1D_2$		587508	02	
$^3P_0$		587709	02	
$^3P_1$		588688	02	
$^3P_2$		591027	02	
$^1G_4$		590677	02	
$^1S_0$		610606	02	

Tabela 6.5: Transições observadas entre as configurações do Xe VII

configuração	Termo		configuração	termo	comp. de onda Å	Intens. (1-15)	nota
5s5p	$^3P_0$	-	5s5d	$^3D_1$	521,831	03	
	$^3P_1$	-		$^3D_2$	531,831	07	
	$^3P_1$	-		$^3D_1$	533,844	05	1
	$^3P_2$	-		$^3D_3$	566,043	08	
	$^3P_2$	-		$^3D_2$	571,304	07	
	$^3P_2$	-		$^3D_1$	574,48		2
	$^3P_1$	-		$^1D_2$	595,094	09	3
5p <sup>2</sup>	$^3P_1$	-	5p5d	$^3P_2$	660,494	07	
	$^3P_0$	-		$^3P_1$	721,801	09	
	$^3P_2$	-		$^3P_2$	723,698	09	
	$^3P_1$	-		$^1D_2$	737,203	09	4
	$^1S_0$	-		$^1P_1$	737,203	09	4
	$^3P_1$	-		$^3P_1$	744,985	08	
	$^3P_1$	-		$^3P_0$	811,543	10	
	$^3P_2$	-		$^1D_2$	816,820	10	
	$^3P_2$	-		$^3P_1$	826,387	06	
	$^1P_1$	-		$^3P_2$	920,872	04	
	$^1P_1$	-		$^1D_2$	1077,126	07	
	$^1P_1$	-		$^3P_1$	1093,82	03	5

1- Rejeitada pela classificação iônica (crowbar) e por medida do tempo de vida (Kaufman-ver texto)

2- Observada no trabalho de Knystautas (JOSA **69**,12 dec(1979)).

3- Rejeitada pela classificação iônica (crowbar) e por media do tempo de vida (Tauheed-ver texto).

4- dupla classificação.

5- linha classificada pela primeira vez - Linha assimétrica.

Tabela 6.6: Novas transições observadas entre as configurações do Xe VII

configuração	Termo	configuração	termo	comp. de onda Å	Intens. (1-15)	nota	
$5p^2$	$^1F_3$	-	$5p5d$	$^1D_2$	512,98	03	
	$^3P_1$	-		$^3P_1$	554,73	11	1
	$^3P_0$	-		$^3D_1$	555,18	08	1
	$^3P_1$	-		$^3P_0$	555,50	08	2
	$^3P_2$	-		$^3P_0$	557,60	01	
	$^3P_2$	-		$^3D_2$	582,44	15	2
	$^3P_1$	-		$^3P_2$	613,16	01	
	$^3P_2$	-		$^3P_2$	616,66	03	
	$^3P_2$	-		$^3D_3$	618,43	10	
	$^1D_2$	-		$^1D_2$	625,90	08	
	$^1D_2$	-		$^3D_2$	647,10	04	2
	$^1P_1$	-		$^1S_0$	660,54	05	
	$^3F_2$	-		$^3P_2$	759,08	01	
$5s5d$	$^3D_1$	-	$5p5d$	$^3P_0$	787,85		1
	$^3D_1$	-		$^3P_1$	786,30	01	
	$^3D_2$	-		$^3P_1$	792,18	06	3
	$^3D_1$	-		$^3P_2$	792,18	06	3
	$^3D_3$	-		$^3D_3$	811,54	10	
	$^1F_3$	-		$^1D_2$	835,26	11	4
	$^1D_2$	-		$^1P_1$	840,46	11	4
	$^3D_3$	-		$^3F_4$	915,28	07	1
	$^3D_3$	-		$^1D_2$	947,60	01	
	$^3D_2$	-		$^3F_3$	972,80	03	
	$^3D_3$	-		$^3F_3$	988,59	04	2
	$^3D_1$	-		$^3F_2$	1043,68	02	
	$^1D_2$	-		$^3D_2$	1051,91	05	
$5s5p$	$^3F_3$	-	$5d^2$	$^1G_4$	502,06	01	
	$^3P_1$	-		$^1S_0$	511,07	01	
	$^3F_2$	-		$^3F_2$	516,96	04	
	$^1D_2$	-		$^1D_2$	521,832	03	3
	$^3F_3$	-		$^3F_3$	531,11	09	
	$^3F_4$	-		$^3F_4$	533,37	12	1
	$^3D_2$	-		$^3P_2$	541,59	02	
	$^3D_1$	-		$^3P_0$	543,52	02	
	$^1P_1$	-		$^1S_0$	554,59	15	1
	$^3P_1$	-		$^3P_1$	575,56	04	
	$^3D_2$	-		$^3F_3$	576,68	03	
	$^3D_1$	-		$^3F_2$	577,24	06	2
	$^3P_1$	-		$^3P_0$	578,66	03	
	$^3D_3$	-		$^3F_4$	599,71	15	
	$^1F_3$	-		$^1G_4$	626,40	09	5
	$^1P_1$	-		$^1D_2$	632,07	08	
$^1F_3$	-		$^3F_4$	669,87	01		

1- Montagem com linhas intensas de O IV.

2- montagem linha de Xe V.

3- dupla classificação.

4- Montagem com a linhas 835,29 do O III.

5- Este valor corresponde a linha do Xe IV, entretanto a classificação iônica (crowbar) indica ser esta uma linha de Xe VII

# Capítulo 7

## Conclusões gerais e Perspectivas Futuras.

Neste trabalho de Tese foi desenvolvido um esforço todo especial, tanto na performance do TPIII-UNICAMP quanto nos métodos de obtenção experimental dos espectros atômicos. Uma série infindável de experimentos foram realizados para obtenção criteriosa das melhores condições de operação do theta-pinch para cada íon estudado. Estes esforços, baseados na observação atenta da evolução dos espectrogramas obtidos e em estudos teóricos sobre as condições de mínima energia para se obter o “breakdown” induzido e eficiência de transferência de energia, culminaram em grandes modificações tanto no sistema de vácuo quanto nas características físicas e elétricas do theta-pinch. Os resultados destes esforços podem ser considerados bastantes motivadores, uma vez que aumentamos a eficiência de transferência de energia entre o banco de capacitores e theta-pinch em cerca de quatro vezes. Este aumento de eficiência foi detectado não só através dos oscilogramas da corrente de descarga do banco de capacitores como também nos espectrogramas obtidos. Podemos citar como exemplo, que somente as linhas mais intensas do Ar VII eram obtidas na estrutura inicial do theta-pinch, onde uma tensão de no mínimo 24 kV tinha que ser aplicada ao banco de capacitores. Na configuração modificada, foi suficiente uma tensão de apenas 12 kV para obtermos um espectrograma mais rico

em linhas do mesmo Ar VII. Este aumento de eficiência é importante não só em termos de diminuir a “fadiga” do sistema mas também para o processo de classificação iônica, uma vez que as mudanças nas condições energéticas do experimento se refletiam de maneira mais nítida nos espectrogramas obtidos.

Todas as etapas para obtenção de um espectrograma são importantes, desde a realização de um bom vácuo, passando por uma caracterização bem definida nas condições de realização do experimento e da revelação das placas de emulsão fotográfica, até a colocação das linhas padrões para obtenção da tabela de comprimentos de onda. A cada passo deste processo, cada detalhe tem que ser cuidado de maneira especial, para se obter uma análise espectral bem sucedida. Entretanto, um esforço redobrado deve ser feito no processo de classificação iônica, o qual é decisivo para a parte de análise, colimando a visão do analista para a parte do espectro que de fato é importante na sua investigação, evitando com isso perda de tempo e esforços em vão. Neste trabalho, introduzimos uma nova técnica de classificação iônica, utilizando um sistema de chaveamento elétrico no theta-pinch, comumente chamado de crowbar. A classificação iônica produzida por este tipo de chaveamento mostrou-se bastante confiável, inclusive apontando de maneira acertada para assinalações realizadas equivocadamente por outros autores, conforme mencionado em capítulos anteriores desta Tese. Por ser uma técnica nova, precisa ser muito mais aplicada para se determinar toda a sua potencialidade e limitações.

Na parte de análise, investigamos a estrutura atômica de tres íons; Kr VI, Ar V e Xe VII. Para o criptônio cinco vezes ionizado, realizamos uma revisão substancial das configurações que eram conhecidas anteriormente e produzimos dados espectroscópicos completamente novos sobre as configurações  $4s4p4d$  e  $4s4p5s$ , onde 109 novas linhas foram observadas, obtivemos 22 novos níveis, com 111 transições classificadas e alteramos os valores de cinco níveis de energia das configurações estudadas previamente por outros autores. Na análise do Ar V obtivemos todas as 43 linhas previamente classificadas e adicionamos mais 3 novos níveis e classificamos

11 transições entre as configurações  $3s^23p^2$ ,  $3s3p^3$ ,  $3s^23p3d$  e  $3s^23d^2$ . No estudo realizado sobre a nova configuração  $3p^4$ , foram classificadas 13 novas transições e todos os seus 5 níveis foram determinados. Por último, na análise do xênonio seis vezes ionizado, 62 transições foram observadas no total, onde 44 delas foram observadas pela primeira vez neste Trabalho. Na parte de revisão das configurações conhecidas, obtivemos todas as transições observadas anteriormente e identificamos um novo nível. Para as novas configurações  $5s5d$  e  $5d^2$ , indicamos a posição de 21 novos níveis de energia. Além de rejeitarmos um nível classificado como uma linha em desacordo com a classificação iônica produzida pelo crowbar.

## 7.1 Perspectivas futuras

Apesar de ter sido feito bastantes esforços na análise do Ar V, os resultados conseguidos não tiveram o alcance esperado. Duas dificuldades extras se apresentaram em sua análise, primeiramente a presença de impurezas em regiões importantes do espectrograma, como no caso do quinteto  $^5S_2$ . Isto justifica a recente instalação de um novo sistema de vácuo, que esperamos poder melhorar os próximos espectrogramas a serem obtidos para este íon. A segunda dificuldade foi a grande sobreposição de níveis entre a configuração estudada  $3p^4$  e a configuração desconhecida  $3s3p^23d$ . Tal sobreposição compromete um pouco, não os valores dos níveis mas sua assinalação. Desta forma, uma continuação deste trabalho de análise consiste em resolver as duas configurações simultaneamente, tendo como base o estudo até aqui realizado.

Na análise do Xe VII, outro tipo de dificuldade se apresentou. Verificamos que a sua estrutura espectral era de certa forma compacta, e muitas das linhas usadas na análise empreendida, estavam mais próximas que o limite de resolução do espectrógrafo. Como está sendo adquirida atualmente uma nova rede de difração que aumentará significativamente o poder de resolução do espectrógrafo, esta sendo projetado um novo experimento para se tentar ratificar os dados e conclusões obtidos até aqui.

Acreditamos que as futuras análises mencionadas nos dois parágrafos anteriores, deverão se materializar em novas publicações.

Outra perspectiva futura consiste no uso mais sistemático da técnica de classificação iônica com crowbar, com um projeto específico para sua utilização em theta-pinchs dedicados à espectroscopia.

A nível experimental se espera produzir brevemente espectros de metais, a partir da utilização do  $\Theta$ -pinch ou Z-pinch com um sistema de introdução de vapores de metal nestas máquinas, estendendo, deste modo, nossa fonte de estudo.

## 7.2 Trabalhos publicados.

- “Espectroscopia da Emissão do Argônio”  
A. J. Mania, G. H. Cavalcanti, C. J. B. Pagan e A. G. Trigueiros  
XIII CBRAVIC / I ELAPF 23/07/92 - RBV
- “The Atomic Spectroscopy in Brasil and Argentina”  
A. G. Trigueiros, G. H. Cavalcanti, F. R. T. Luna and A. J. Mania  
J. G. R. Almandos, F. Bredice, M. Gallardo and M. Raineri  
25 th EGAs (European Group for Atomic Spectroscopy) conference - Apresentação oral 13-17 julho (1993) - Labo. Spectro. Atom. - CAEN - França
- “New Technique for ionic classification using a crowbar switch”  
G. H. cavalcanti, R. Y. Honda, F. R. T. Luna and A. G. Trigueiros  
Rev. Bras. de Fis Apl. e Instr. **8**, 1 março 1993
- “The Unicamp Theta-pinch for spectroscopic study of plasma radiations”  
A. G. Trigueiros, G. H. Cavalcanti, F. R. R. Luna, A. J. Mania  
Proceedings do 2º Enc. Bras. de Física dos Plasmas -  
FOURTH BRAZILIAN PLASMA ASTROPHYSICS WORKSHOP, 27-29 de out (1993)

- “Energy Transfer efficiency measurements in a theta-pinch”  
G. H. Cavalcanti, F. R. T. Luna and A. G. Trigueiros  
Proceedings do 2º Enc. Bras. de Física dos Plasmas -  
FOURTH BRAZILIAN PLASMA ASTROPHYSICS WORKSHOP, 27-29 de  
out (1993)
- “Ionic classification in a Theta-pinch Spectroscopy Light Source”  
G. H. cavalcanti, R. Y. Honda, F. R. T. Luna and A. G. Trigueiros  
Proceedings do 2º Enc. Bras. de Física dos Plasmas -  
FOURTH BRAZILIAN PLASMA ASTROPHYSICS WORKSHOP, 27-29 de  
out (1993)
- “Axial Contraction Measurements on TC1-Unicamp”  
R. Y. Honda, M. Machida, G.H. Cavalcanti, L. A. Berni, E. A. Aramaki and  
D. O. Campos”  
IAEA - TECHNICAL COMMITTEE MEETING  
on Research Using Small tokamaks  
Serra Negra, SP, Brasil 25-26 October, 1993
- “Study of The  $4s4p4d$  and  $4s4p5s$  configurations of KrVI”  
C. J. B. Pagan, J. G. Reyna Almandos, S.-G. Pettersson, G. H. Cavalcanti  
and A. G. Trigueiros  
Journal of the Optical Society of America B (submetido 1994)
- “The Spectrum of Kr VI And Weighted Oscillator Strengths.”  
C. J. B. Pagan, J. G. Reyna Almandos, S.-G. Pettersson, G. H. Cavalcanti  
and A. G. Trigueiros  
Atomic Data and Nuclear Data Tables. (Submetido 1994)
- “Additonal results About The Spectrum of ArV”  
G. H. Cavalcanti, F. Bredice, M. Gallardo, F. R. T. Luna, M. Raineri, J. G.

Reyna Almandos and A. G. Trigueiros

Brazilian Journal of Physics (submetido 1994)

- “Study of the  $3p^4$  and  $3s3p^23d$  Configurations in Four Times Ionized Argon, ArV” , G. H. Cavalcanti e outros - (a ser submetido).
- “New Results in Six Times Ionized Xenon.” , G. H. Cavalcanti e outros - (a ser submetido).

# Bibliografia

- [1] M. Gallardo, F. Bredice, M. Raineri and J. G. Reyna Almandos  
Appl. Opt. **28**, 4513 - 4515 (1989)
- [2] S. G. Pettersson - Phy. Scr. **26**, 296-318 (1982)
- [3] B. Denne and E. Hinnov Physica Scripta **35**, 811-818 (1987)
- [4] M. Sato, Il Nuovo Cimento, vol XXIII,1, 22 (1962)
- [5] Summer P. Davis “Diffraction Grating Spectrographs”  
Holt, Rinehart and Winston-New York (1969)
- [6] Gerold Yonas and Alan J. Toepfer “Gaseous Electronics” **1**  
Copyright © Academic Press. Inc. (1978)
- [7] R. J. Commisso - PhD Tesis (1976)  
and University of Maryland Thechnical report 76-083
- [8] Cesar José Bonjuani Pagan Tese de Doutorado IFGW-UNICAMP (1991)
- [9] B. Skogvall “An automatic comparator and a program package  
for spectroscopic wavelenght measurements”  
Dep. of Physics, University of Lund, Lund-Sweden  
Lund Reports on Atomic Physics, **LRAP-58**,(1986)
- [10] F. Hertweek and A. Schüter, Zeits. Naturfor. **12a**, 884 (1957)

- [11] A. Von Engel, Ionized Gases (Oxford 1955)
- [12] J. M. Meekand and J. D. Gragg, Electrical Breakdown of Gases, (Oxford 1953)
- [13] P. A. Silberg, Journal of Applied Physics vol **37**, 5 (1966)
- [14] R. C. Elton e outros, Physica Scripta **41**,440-444 (1990)
- [15] G.H. Cavalcanti, R. Y. Honda, F. R. T. Luna and A. G. Trigueiros  
Rev. Bras. de Fís. Apl. e Instr. **8**,1 março (1993)
- [16] R. D. Cowan, "Theoretical calculation of atomic spectra using digital computer"- J. Opt. Soc. Am. **58** 808-818 (1968)
- [17] M. blume and R. E. Watson  
Proc. Roy. Soc. London **A270**, 127(1962), **A271**, 565 (1963)
- [18] R. D. Cowan  
"The Theory of Atomic Struture and Spectra ."  
Un. California Press, Berkeley Calif. (1981)
- [19] B. C. Fawcett, B. B. Jones and R. Wilson  
Proc. Phy. Soc. Lond. **78**, 1223-1226 (1961)
- [20] E. Schönheit - Optik **33**, 409-435 (1966)
- [21] M. Druetta and J. P. buchet- J. Opt. Soc. Am. **66**, 433-436 (1976)
- [22] A. G. Trigueiros, C. J. B. Pagan and J. G. Reyna Almandos  
Phys. Rev. A **38**, 166-169 (1988)
- [23] A. Tauheed, E. H. Pinnington, W. Ansbacher and J. A. Kernaham  
Phys. Scr. **42**, 431-433 (1990)

- [24] A. G. Shenstone - Proc. Roy. Soc. A. **276**, 293-307 (1963)
- [25] M. Raineri, F. Bredice, M. Gallardo, J. G. Reyna Almandos, C. J. B. Pagan and A. G. Trigueiros  
Phy. Scr. **45**, 584-589 (1992)
- [26] B. Edlén, Encyclopedia of Physics, vol **27**, pg 80 edited by S. Flüge (Springer Verlag, Berlin, 1964)
- [27] U. Litzén and J. Reader - Phy. Scr. **39**, 73-80 (1989)
- [28] E. Biemont and P. quinet - J. Quant. Spec. Rad. Trans. **44** , 233-244 (1990)
- [29] R. Kelly, "Atomic and ionic spectrum lines bellow 2000 Angstroms: Hydrogen through Kryppton" - J. Chem. Ref. Data **16**, supl. 1 (1987)
- [30] J. Reader, N. Acquisita and S. Goldsmith - J. Opt. Soc. Am. B **2**, 874-878 (1987)
- [31] A. G. Trigueiros, S. G. Pettersson and J. G. Reyna Almandos  
Phy. Scri. **34**, 164-166 (1986)
- [32] A. G. Trigueiros, C. J. B. Pagan, S. G. Pettersson and J. G. Reyna Almandos  
Phys. Rev. A **40**, 3911-3914 (1989)
- [33] H. R. Smitt, L. A. Svensson and M. Outred  
Physica Scripta **13**, 293 (1976)
- [34] B. C. Fawcett - " J. Physics B **4**, 1577 (1971)
- [35] B. C. Fawcett and R. W. Hayes - J. Physics B **5**, 336 (1972)
- [36] C. Corliss and J. Sugar, J. Phys. Chem. Ref. Data **10**, 1153 (1981)

- [39] W. Phillips and W. L. Parker - *Physical Review* **60**, 301-307 (1941)
- [40] B. C. Fawcett, A. H. Gabriel and P.H. Saunders  
*Proc. Phys. Soc.* **90**, 863 (1967)
- [41] J. O. Ekberg - *Physica Scripta* **2**, 283-297 (1970)
- [42] B. C. Fawcett - *Physica Scripta* **18**, 315-322 (1978)
- [43] Jiang De-Ye, Shum Li-Kang, Zhāo li-Zang and Yang Wan-Shu  
*Acta Physica Sinica* **33** 4, 508-514 (1984)
- [44] I. Lesteven-Vaïsse e outros- *Physica Scripta* bf 34, 138-142 (1986)
- [45] I. Lesteven-Vaïsse and F. Folkman - *Physica Scripta* bf 38, 45-54 (1988)
- [46] D. Gellis and I. Martinson - *Physica Scripta* **30**, 508-514 (1984)
- [47] E. Träbert R. Hutton, L. Engström, S. L. Blimam, H. G. Benny and C. Kurts - *Phys. Lett. A* **129**, 381-385 (1988)
- [48] R. L. Kelly and L. J. Palumbo- "Atomic and Ionic emission lines bellow 2000 Å, Hidrogen through kripton" - N.R.L. Washington (1973)
- [49] I. Martinson and D. G. Ellis  
 "Comments *At. Mol. Phys.* **16** n°1 pp 21-33 (1985)
- [50] E. Hinnov - *Phys. Fluids* **7**, 130 (1964)
- [51] G. A. Doschek and U. Feldman - *J. Appl. Phys.* **47**, 3083 (1976)
- [52] B. Edlén - *Ark Mat. Astr. Fys.* **28B**, 1 (1941)
- [53] B. Edlén - *Z. Astrophys.* **22**, 30 (1942)

- [54] B. C. Fawcett, B. B. Jones and R. Wilson  
 “Vacuum Ultra-Violet Spectra of Multiply Ionized Inert Gases”  
 Proc. Phys. Soc. **78**, 1223-1226(1962)
- [55] E. J. Knystautas, J. Sugar and J. R. Roberts  
 “New line classifications and Energy levels in Triplet system of Xe VII”  
 J. Opt. Soc. Am., **69** 12, december(1979)
- [56] J. A. Kernahan, E. H. Pinnington, J. A. O’Neill, J. L. Bahr and K. E. Donnelly  
 “Study of beam foil spectrum of Xe VI, Xe VII and Xe VIII from 500 to 1550 Å.”  
 J. Opt. Soc. Am. **70** 1126-1130 (1980).
- [57] G. O’Sullivan  
 “ Charge-dependent wave function collapse in ionised Xenon”  
 J. Phys. B **5**, L 7665 (1982)
- [58] J. Blackburn, P. K. Carrol, J. Costello and G. O’Sullivan  
 “Spectra of Xe VII, VIII and IX in the extreme ultraviolet: 4d-mp,nf transitions”  
 J. Opt. Soc. Am. **73** 10, october (1983).
- [59] V. Kaufmam and J. Sugar  
 “Cd I isoelectronic sequence: Wavelengths and energy levels for Xe VII through Eu XVI.”  
 J. Opt. Soc. Am. B **8** 12 (dec 1987)
- [60] E. H. Pinnington, J. A. Kernahan, W. Ansbacher and A. Tauheed  
 “5s5p – p<sup>2</sup> multiplets in Xe VII.”  
 J. Opt. Soc. Am. B **8** 8 2233-2235 (1991)

# Apêndice I

Programa LPE90B.BAS

```

10 '*****
20 '*
30 '*          PROGRAMA PARA LEITURA DE PLACAS DE EMULSAO
40 '*
50 '*          ESPECTROSCOPIA DE THETA-PINCH
60 '*
70 '*          DEPARTAMENTO DE ELETRONICA QUANTICA - UNICAMP
80 '*
90 '* Gildo de Holanda Cavalcanti 10/07/92
100 '*****
110 '  PROGRAMA LPE90B.BAS          (REVISADO EM 17/02/93)
120 '
130 OPTION BASE 0
140 DIM IAD(256)
    DIM INTEN AS INTEGER
150 OPEN "COM2:9600,N,8,2,CS,DS,CD,LF" FOR RANDOM AS #1
160 WIDTH 80
170 '
180 'ST
190 CLS
200     SCREEN 2
210     '
220     '----CONSTRUINDO A EQUACAO DA RETA A SER LIDA----
230     '
240     LOCATE 10, 1: INPUT "Entre com o nome do arquivo de dados: ", a$
250     OPEN "A:" + a$ FOR RANDOM AS #2 LEN = LEN(INTEN)
260     RCDNUM = LOF(1) \ LEN(INTEN)
270     CLS
280     '
290     '
300     LOCATE 2, 1: PRINT "Coloque a objetiva no ponto inicial "
310     LOCATE 4, 1: PRINT "ZERAR O CONTADOR XY (RESET)"
320     LOCATE 6, 1: PRINT "Coloque a objetiva no ponto final e tecle enter"
330     a$ = INPUT$(1)
340     GOSUB 5890 'NCMD70
350     memY = DI2
360     LY = 255
370     coefa = DI1 / DI2
380     CLS
390     INPUT "ENTRE COM O PASSO (em microns)", PASSO
400     LOCATE 6, 1: PRINT "Tecle enter para iniciar a leitura"
410     a$ = INPUT$(1)
420     FOR N1 = 0 TO memY STEP PASSO
430         DO2 = N1
440         DO1 = INT(N1 * coefa)
450         delta = (DO1 * DO1 + DO2 * DO2) ^ .5
460         GOSUB 5960 'NCMD71
470         DO1 = 1
480         GOSUB 6620 'NCMD 90
490         INTEN = INT(8 * DI1)
500         RCDNUM = RCDNUM + 1
510             PUT #2, RCDNUM, INTEN
520     NEXT N1
530     INPUT " ACABOU, TECLE ENTER", a$
540     CLOSE #2
550     CLOSE #1
560     END
3820 '
3920 '
3930 'NCMD12
3940 GOSUB 6730 'CNVASC
3950 PRINT #1, "!12" + D1$ + D2$ + D3$ + D4$
3960 INPUT #1, CR$
3970 PRINT #1, CHR$(10);
3980 RETURN
3990 '

```

```

4000 'NCMD13
4010 PRINT #1, "!13"
4020 INPUT #1, CR$
4030 PRINT #1, CHR$(10);
4040 RETURN
4050 '
4060 'NCMD14
4070 PRINT #1, "!14"
4080 INPUT #1, CR$: PRINT #1, CHR$(10);
4090 RETURN
4100 '
4630 '
4640 'NCMD32
4650 GOSUB 6730 'CNVASC
4660 PRINT #1, "!32" + D1$
4670 INPUT #1, CR$: PRINT #1, CHR$(10);
4680 RETURN
4690 '
4700 'NCMD33
4710 PRINT #1, "!33"
4720 INPUT #1, CR$: PRINT #1, CHR$(10);
4730 RETURN
4740 '
4750 'NCMD34
4760 PRINT #1, "!34"
4770 INPUT #1, CR$: PRINT #1, CHR$(10);
4780 RETURN
4790 '
4910 '
4920 'NCMD36
4930 PRINT #1, "!36"
4940 LLY = LY - 1
4950 FOR I = 1 TO LLY
4960 INPUT #1, D1$
4970 IAD(I) = VAL(D1$)
4980 PRINT #1, "!";
4990 NEXT I
5000 INPUT #1, D1$
5010 IAD(LY) = VAL(D1$)
5020 INPUT #1, CR$: PRINT #1, CHR$(10);
5030 RETURN
5040 '
5880 '
5890 'NCMD70
5900 PRINT #1, "!70"
5910 INPUT #1, D$: PRINT #1, CHR$(10);
5920 GOSUB 6830 'CNVDEC2
5930 RETURN
5940 '
5950 'NCMD71
5960 GOSUB 6730 'CNVASC
5970 PRINT #1, "!71" + D1$ + D2$
5980 INPUT #1, CR$: PRINT #1, CHR$(10);
5990 RETURN
6620 'NCMD90
6630 GOSUB 6730 'CNVASC
6640 PRINT #1, "!90" + D1$
6650 INPUT #1, D$: PRINT #1, CHR$(10);
6660 IF D$ = "???" THEN 6670 ELSE 6680
6670 'PRINT "DATA = ???": GOTO 6700
6680 GOSUB 6870 'CNVDEC3
6690 'PRINT "DATA = "; D1
6700 '
6710 RETURN
6720 '
6730 'CNVASC

```

```
6740 E1$ = STR$(DO1): E2$ = STR$(DO2): E3$ = STR$(DO3): E4$ = STR$(DO4)
6750 S1 = 7 - LEN(E1$): S2 = 7 - LEN(E2$): S3 = 7 - LEN(E3$): S4 = 7 - LEN(E4$)
6760 D1$ = SPACE$(S1) + E1$: D2$ = SPACE$(S2) + E2$: D3$ = SPACE$(S3) + E3$
6765     D4$ = SPACE$(S4) + E4$
6770 RETURN
6780 '
6790 'CNVDEC
6800 L1 = LEN(D$)
6810 DI1 = VAL(LEFT$(D$, L1 - 21)): DI2 = VAL(MID$(D$, L1 - 20 + 0, 7))
6815 DI3 = VAL(MID$(D$, L1 - 20 + 7, 7)): DI4 = VAL(MID$(D$, L1 - 20 + 14, 7))
6820 RETURN
6830 'CNVDEC2
6840 L1 = LEN(D$)
6850 DI1 = VAL(LEFT$(D$, L1 - 7)): DI2 = VAL(MID$(D$, L1 - 6, 7))
6860 RETURN
6870 'CNVDEC3
6880 DI1 = VAL(LEFT$(D$, LEN(D$)))
6890 RETURN
```