



INSTITUTO DE FÍSICA

Universidade Federal Fluminense

**Seqüência isoeletrônica do gálio e espectro
do bromo abaixo de 500 Angstrons**

Eliel Eleuterio Farias

Orientador: Gildo de Holanda Cavalcanti

Este exemplar corresponde à redação final da Tese devidamente corrigida, defendida e aprovada pela banca para a obtenção do título de doutor em Física

Niterói, RJ
2011

Dedicatória

A minha família pelo apoio nestes anos árduos, ao Frei David Raimundo pela sua dedicação em ajudar pessoas como eu, que possuem um sonho e tão somente necessitam de ajuda.

Agradecimentos

Agradeço a Deus ”... por tudo que tem feito e tudo que vai fazer...”, a minha esposa e filhos pela agradável convivência e paciência durante estes anos. A meus pais, irmãos, sobrinhos e sobrinhos netos pela paciência, incentivo e compreensão, principalmente nos últimos doze anos suportando minha ausência e falta de paciência com relação a assuntos familiares.

Aos meus amigos que sempre se fizeram presentes: Helena e Eduardo Terra, Bernardo Coutinho, Carla e Bernardo Mosquera, William Amorim, Claudinha, Karem e José, Scheilla Silva, Luciana Rios, Wellington Dantas, Cinthya Chianca, Carlos E. Grahlha, Aquino Espíndola, José Augusto, Luis Fernando, Carlos Eduardo (Kadu), Odilon e Mariana, Tiago José, Igor e Barbara Kelly. Jamais esquecerei meus amigos e padrinhos de casamento Marcelo Arcoverde e Keity C. Ferraz, por todo incentivo e amizade ao longo destes anos. Aos amigos físicos Elismar, Sandro, Rafael, Jamil, aos amigos biólogos Ana, Liege, Renata, Carlos pela amizade e saudável convívio.

Aos meus amigos e companheiros de laboratório, em particular ao Fábio Borges que desde o meu início no laboratório de Plasma sempre me incentivou a estudar Física, ao Alexandre Pontes que em **todos os momentos** me ajudou nas montagens e execução dos experimentos, sempre me entusiasmava quando era necessário *medir tudo de novo!* e ao Marcos Robba que contribuiu em momentos importantes, porém, ainda deve a execução

da montagem da fonte de RF cujo o pedido foi realizado em julho de 2004.

A meu orientador, Dr. Gildo de Holanda Cavalcanti, que desde o meu segundo semestre na universidade (março de 1998) se dedicou em me ajudar em minhas dificuldades. Sem dúvida que tem sido uma pessoa fundamental para meu caráter profissional. Ao Dr Antonio Trigueiro, que se fez presente desde minha graduação. A Tia Kátia, esposa de meu orientador, que durante os últimos treze anos tem me aturado e por várias vezes me alimentado com deliciosos pães, bolos e feijoadas que só ela faz.

Aos pesquisadores do CIOp que me acolheram de bom grado e compartilharam suas experiências durante minha estadia naquela instituição.

Ao Departamento de Física da UFRR que me acolheu ainda sendo mestre e de bom grado me concedeu afastamento durante meu primeiro ano de universidade para concluir o doutoramento.

As professores do IF-UFF pelo incentivo durante todos estes anos.

Aos secretários da pós graduação, do departamento e da secretaria do IF-UFF pela atenção em minhas solicitações, carinho e amizade ao longo destes anos.

Aos integrantes da Biblioteca do IF UFF pela amizade e compreensão com os livros atrasados.

Aos funcionários da oficina mecânica e eletrônica pela amizade e auxílio durante a execução de inúmeros projetos.

A todos da Assembléia de Deus em Vila Tiradentes, pelas orações e incentivo constante, em particular meus irmãos na fé Demilson e Marci.

Não poderia esquecer de agradecer ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela bolsa de auxílio **que nunca** atrasou. Isso realmente é importante na vida dos alunos de Pós Graduação.

Resumo

Nesta tese estendemos o elenco de elementos químicos que podem ser investigados espectroscopicamente a partir do espectro gerado em um theta pinch. A sistemática de produção do espectro do bromo, um halogênio, pode ser facilmente estendida a outras espécies químicas incluindo a dos alcalinos. Anteriormente estávamos limitados a excitar apenas gases, incluindo gases nobres. Outro avanço alcançado foi o de gerar e registrar espectros abaixo de 500 Angstroms depois das modificações feitas na fonte espectral e no espectrógrafo.

Na execução deste projeto de tese foram realizados sistemáticos estudos sobre a eficiência de transferência de energia entre o banco de capacitores e o plasma formado pelo theta pinch. Analisamos semi empiricamente a eficiência quando os parâmetros: raio do tubo, número de capacitores e número de espiras foram variados. Baseados nos resultados obtidos, otimizamos o desempenho do dispositivo, sendo possível então produzir espectros atômicos de íons cujo potencial de ionização tão altos quando 88 eV para uma energia armazenada no banco de capacitores de 1,5 kJ.

Nesta tese foi estudado a estrutura atômica de elementos químicos pertencentes a seqüência isoeletrônica do Gálio neutro na faixa espectral abaixo de 500 angstroms, em particular os íons Br V e Kr VI. Foram estudadas as configurações, $4p^3$, $4s^24f$, $4s^25p$, $4s^26p$, $4s^25d$, $4s^26s$ e $4s^27s$ pertencentes ao bromo quatro vezes ionizado. Depois de uma análise usando o método gráfico, quinze novos níveis de energia foram indicados

e posteriormente confirmados. A análise do criptônio cinco vezes ionizado foi feita em colaboração com Centro de Investigações óticas de La Plata (CIOp-Argentina). Foram encontradas dezessete dos dezoito níveis de energia da configuração eletrônica $4s4p5p$, onde 78 novas transições foram observadas para o Kr VI. A previsão computacional da estrutura atômica dos diversos íons foi realizada usando o código numérico tipo Hartree-Fock desenvolvido pelo Dr Robert D Cowan.

Foi feita uma modificação opto-mecânica no espectrógrafo de incidência normal com círculo de Rowland de três metros, e colocada uma nova rede de difração coberta com filme reflexivo de ouro. Esta nova rede foi deslocada, girada e alinhada para possibilitar o registro em regiões de comprimento de onda abaixo do originalmente projetado. Adaptamos um microfotodensitômetro para realizar análise densitométrica das placas espectrais produzidas e a partir dos dados obtidos, construímos uma tabela contendo mais de três mil linhas na faixa espectral de 224 a 911 Å.

Abstract

In this thesis we extend the number of chemical elements that can be spectroscopically investigated by their excitation using a theta pinch plasma source. The systematic of production of spectra of bromine, a halogen, may easily be extended to other chemical species including the class of alkaline. Previously our theta pinch was used only to excite gases and noble gases. Another breakthrough achieved with the present project was to generate and record spectra below 500 Å.

In the developing of this project, systematic studies of energy transfer from capacitor to plasma formed by a theta pinch were carried out. We analyze semi empirically the efficiency when the radius of tube, the number of capacitor in the bank and the number of coils were changed. Based on results we improve the performance of theta pinch and achieve ionization energy as high as 88 eV when the capacitor bank was charged to 1.5 kJoules.

In this thesis we studied the atomic structure of the ions belonging to gallium iso-electronic sequence in wavelength range bellow 500 Å, particularly the ions Br V and Kr VI. We analyze the configurations $4p^3$, $4s^24f$, $4s^25s$, $4s^25p$, $4s^26p$, $4s^25d$, $4s^26s$ and $4s^27s$ belong to bromine four times ionized. After the analysis based on the graphic method, fifteen new levels of energy were indicated and subsequently confirmed. The analysis of krypton five times ionized was conducted in collaboration with the Centro de

Investigaciones Optica de La Plata (Argentina-CIOp). The $4s4p5p$ configuration was almost completely determined being determined seventeen of eighteen energy levels of this configuration, based on 78 new atomic transitions. The theoretical prediction of atomic structure was made using the programs developed by Dr Robert D Cowan.

To record the spectrum we have used a three meters normal incidence spectrograph. To achieve wavelength as short as 200 \AA we have replaced the older diffraction grating to a new one with gold coating and we have made some mechanic modifications in the grating holder, changing its position in order to move the zero order closer to the begins of plate holder. To read the spectral plate, we adapt a machine to perform densitometry analysis of the spectral plates produced in laboratory and from it we got a table containing more than three thousand lines in the spectral range from 180 to 911 \AA .

Conteúdo

Dedicatória	i
Agradecimentos	ii
Resumo	v
Abstract	vi
Conteúdo	viii
Lista de figuras	xi
1 Introdução	1
2 Fonte Espectral Theta Pinch	4
2.1 O Efeito Pinch	5
2.2 Estudo da Eficiência	8
2.3 O experimento	12
2.4 Resultados e conclusões	16
2.4.1 Variação da eficiência em função do tubo	16
2.4.2 Eficiência em função da bobina	18
2.4.3 Eficiência em função da capacitância	21
2.4.4 Conclusões	24
3 Análise da Estrutura Atômica de íons	26

3.1	Método Hartree - Fock e Programas Cowan	26
3.1.1	RCN	29
3.1.2	RCG	31
3.1.3	RCE	32
3.2	Análise da estrutura atômica do Bromo	32
3.2.1	Motivação	33
3.2.2	Resultados teóricos	35
3.2.3	Sequência Isoeletrônica	42
3.2.4	Conclusões	45
3.3	Análise espectral do criptônio	46
3.3.1	Sobre o íon Kr VI	46
3.3.2	A análise espectral e seus resultados	48
3.3.3	Conclusões	51
4	Espectro atômico obtido por theta pinch	56
4.1	Aparato Experimental	56
4.2	O experimento	61
4.3	Produção da tabela	63
4.4	Conclusões	65
5	Conclusões gerais e perspectivas	67
	Apêndice	70
A	Sonda Magnética	71
A.1	Considerações físicas para sonda magnética	71
B	Manipulação do bromo	78

CONTEÚDO

xi

Referências

79

Lista de Figuras

2.1	Esquema de um theta pinch.	5
2.2	Esquema elétrico do theta pinch IF - UFF.	6
2.3	Esquema de produção de plasma por um theta pinch.	6
2.4	Representação elétrica de um theta pinch.	9
2.5	Perfil ajustado do campo magnético produzido na bobina do theta-pinch. .	13
2.6	Primeira versão da fonte espectral Theta Pinch do IF - UFF	13
2.7	Segunda versão da fonte espectral Theta Pinch do IF - UFF	14
2.8	Montagem utilizada para realização do experimento.	15
2.9	Eficiência de transferência de energia entre o banco de capacitores de 30,2 μF e o plasma formado no interior de um tubo pirex com diâmetro de 100 mm em função da pressão para tensões de carregamento de 8, 11 e 13 kV. .	17
2.10	Gráfico da máxima eficiência em função do raio do tubo.	18
2.11	Variação da eficiência em função do número de espiras.	19
2.12	Variação do valor ajustado para indutância pelo processo de ajuste não linear, em função do número de espiras que são conectadas em paralelo. Os dados foram obtidos para tensões de 8, 11 e 13 kV em duas situações com plasma e sem plasma (pressão abaixo de 1 mTorr).	20

2.13	Influência do número de capacitores sobre: A - eficiência, B - resistência e capacitância total ajustados pelo ajuste não linear, C - sobre a amplitude do campo magnético e D - Influência da tensão de carregamento sobre a amplitude do campo magnético.	22
2.14	Diagrama esquemático da resistência interna do banco capacitor de um theta pinch	23
3.1	Diagrama de Grotrian para as transições conhecidas do Br V	36
3.2	Diagrama de Grotrian para as transições estudadas do Br V	37
3.3	Sequência isoeletrônica das transições entre as configurações $4s^24p - (4s4p^2, 4s^24d$ e $4s^25s)$ do Br V	44
3.4	Sequência isoeletrônica das transições entre as configurações $4s^24p - 4s^24f$ do Br V	44
3.5	Sequência isoeletrônica das transições entre as configurações $4s^24p - 4p^3$ do Br V	45
3.6	Diagrama dos níveis de energia da configuração $4s4p5p$	49
3.7	Estrutura dos níveis observados do Kr VI	49
4.1	Diagrama mostrando o eixo ótico do espectrógrafo de incidência normal e alguns de seus elementos	57
4.2	Diagrama ilustrando a obtenção do espectro eletromagnético utilizando um theta pinch e um espectrógrafo de incidência normal.	58
4.3	Desenho esquemático do aparato para produção e recuperação de vapor de bromo.	59
4.4	Fotografia da rede de difração côncava com 1200 linhas/mm.	60
4.5	Desenho esquemático do deslocamento da rede de difração.	60
4.6	Detalhes da montagem utilizada no experimento com o bromo.	62

4.7	Detalhes do “ <i>trap</i> ” após o experimento com o bromo.	63
A.1	Esquema elétrico do circuito da sonda magnética.	73
A.2	Diagrama de fasores representando o circuito da sonda magnética.	74
A.3	Oscilograma da tensão sobre o capacitor obtido pela sonda magnética	75

Capítulo 1

Introdução

As observações do espectro atômico de emissão contribuíram para o sucesso da teoria quântica na descrição da estrutura atômica. Muito já se fez na obtenção e na análise do espectro atômico, no entanto, ainda há espaço para contribuições a fim de dar continuidade à esta linha de pesquisa.

A determinação de novos níveis de energia, tempo de vida, probabilidades de transição e força de oscilador são importantes para diversos campos de estudos, tais como determinação de temperaturas e composição de plasmas. A fusão nuclear, física de colisões, física de laser e astrofísica necessitam destes parâmetros atômicos para aos diferentes estados de ionização dos elementos químicos por eles estudados. Fontes espectrais não emitem apenas luz, mas o fazem na qualidade indispensável para o sucesso da análise espectroscópica. É preciso que ela tenha o máximo de pureza espectral (conter espectros apenas do elemento de estudo) além de ser capaz de gerar transições entre níveis que se tenha interesse em investigar. A busca por fontes espectrais ainda hoje é um tema de pesquisa em contínuo progresso. Na região abaixo de 500 Å há acentuada carência de informação experimental sobre a estrutura energética dos átomos de diversos elementos

químicos da tabela periódica. Uma fonte capaz de gerar espectros nesta região de comprimento de onda é obtida com uso de plasma pulsados, que gera espectro de íons com médios e altos estágios de ionização. A produção e o controle deste tipo de espectro não é uma tarefa simples.

A espectroscopia atômica de emissão é importante na física de plasmas. O diagnóstico ótico é uma ferramenta muito útil tendo uma gama alta de aplicação. Por exemplo, diversas características de uma liga metálica podem ser obtidas através do espectro de emissão do plasma gerado a partir de sua erosão. Outro exemplo tem a ver com o campo da Astrofísica, onde a análise espectral é o único modo de se determinar a composição estelar bem como a temperatura de sua superfície.

Esta tese tem dois grandes objetivos: O primeiro é o de ajudar a montar uma estrutura experimental com fonte espectral e espectrógrafo que seja capaz de gerar e registrar espectros abaixo de 500 Å, que era limite inferior dos comprimento de onda registrados no laboratório. O outro é o de planejar e executar uma análise espectral do bromo com foco na região entre 200 à 500 Å. Além de contribuir com o preenchimento da lacuna ainda existente de informações sobre este elemento na região do ultravioleta, estaremos iniciando uma sistemática de obtenção, produção e análise de espectros que vai além dos excitar gases, o elemento da tabela periódica escolhido foio bromo que na CNTP encontra-se no estado líquidos . Isto é algo inédito no laboratório de plasma e espectroscopia atômica do IF-UFF. Para atingir estes objetivos trabalhamos na análise de nossa fonte: “O theta-Pinch ”, na configuração do espectrógrafo e na rotina de armazenamento, manipulação, injeção e recuperação dos vapores de Bromo. A tese é desenvolvida conforme o exposto a seguir:

O capítulo 2 desta tese está dedicado à descrição e apresentação das características principais de um theta pinch. Nele é mostrado os resultados sobre o estudo experimental

do desempenho desta fonte espectral quando a capacitância do banco, a indutância da bobina e o diâmetro do tubo de descarga são variados. Foi medido experimentalmente a eficiência da transmissão de energia entre o banco de capacitores e o plasma. Para chegar ao resultado final, foram analisados mais de mil gráficos de evolução temporal do campo magnético gerado pelo theta pinch e empregado uma descrição de um circuito RLC simples para modelar a descarga. O resultado deste trabalho foi essencial na produção do espectro eletromagnético de bromo também mostrado nesta tese.

No capítulo 3 são apresentados os programas utilizados na análise espectral. Foi usado o método gráfico como uma ferramenta de confirmação dos valores dos novos níveis de energia e são apresentados um resumo histórico e os resultados obtidos na análise dos íons Br V e Kr VI, ambos pertencentes a seqüência isoeletrônica do Ga I.

No capítulo 4 estão descritos os instrumentos utilizados e os procedimentos adotados na obtenção dos espectros atômicos. É apresentado uma rotina adotada na produção da tabela de comprimentos de ondas resultante dos espectros registrados. Para produzir um plasma com diferentes temperaturas de modo a se variar os diferentes estados de ionização, alguns dos parâmetros experimentais, por exemplo, a pressão do gás e tensão foram ajustados. Foram registradas transições de íons cujo potencial de ionização é superior a 88 eV.

No capítulo 5 são apresentadas as conclusões e perspectivas futuras.

Ao final da tese encontra-se uma tabela de comprimento de ondas obtida a partir das transições atômicas experimentais do bromo na região do ultravioleta de vácuo, que era um de nossos objetivos iniciais.

Capítulo 2

Fonte Espectral Theta Pinch

Neste capítulo é descrito uma fonte espectral denominada theta pinch e um estudo realizado para maximizar a transferência de energia para o plasma.

Um theta Pinch consiste basicamente de um banco de capacitores de baixa indutância, uma linha de transmissão uma bobina, que envolve um tubo de vidro onde o plasma é formado, e um sistema especial para chaveamento do banco de capacitores designado na literatura como *spark gap*. No interior do *spark gap* a pressão é positiva de ar comprimido, ou seja, a pressão é maior que a pressão atmosférica, esta pressão é regulada por um manômetro. Um esquema de um theta pinch é mostrado na figura 2.1, onde se vê o banco capacitor conectado a linha de transmissão, na extremidade a direita da linha temos a bobina que envolve o tubo de vidro e na outra extremidade da linha está o *spark gap* que fecha o circuito. Este dispositivo surgiu como uma fonte capaz de produzir plasmas de interesse na fusão termonuclear [1, 2, 3]. Atualmente ela tem sido empregada como fonte de luz para estudos espectroscópicos [4, 5] e como fonte de plasma para o tratamento de superfície e em particular, para o estudo de deposição de filmes finos [6].

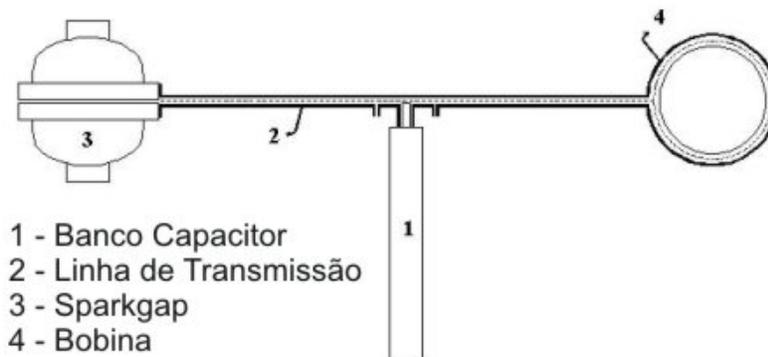


Figura 2.1: Esquema de um theta pinch.

2.1 O Efeito Pinch

Uma vez carregado o banco capacitor à uma tensão pré-estabelecida, o circuito de controle de disparos aciona a válvula solenóide (o modelo de solenóide utilizado neste theta pinch é normalmente fechado) fazendo com que a pressão dentro da chave *spark gap* vá a atmosfera dando assim início ao processo de descarga da energia elétrica armazenada no banco. Um esquema elétrico do theta pinch é mostrado na figura 2.2. O monitoramento da tensão é feito pelo controlador de disparos por intermédio de um divisor de tensão sobre o banco capacitor. A pressão positiva dentro do *spark gap* é alimentada por um compressor de ar, tal pressão pode ser controlada por um manômetro. A distância típica entre os eletrodos dentro do *spark gap* é de aproximadamente cinco milímetros o que dá uma tensão de ruptura é em torno de 6 kV, porem, ao decorrer do experimento a tensão de *self* aumenta devido ao desgastes dos eletrodos.

As etapas da formação do plasma dentro do tubo são exemplificados na figura 2.3. Em **A** temos a corrente elétrica $i(t)$ fluindo através da linha de transmissão e passando pela espira. Esta corrente elétrica gera um campo magnético oscilante no tempo dentro

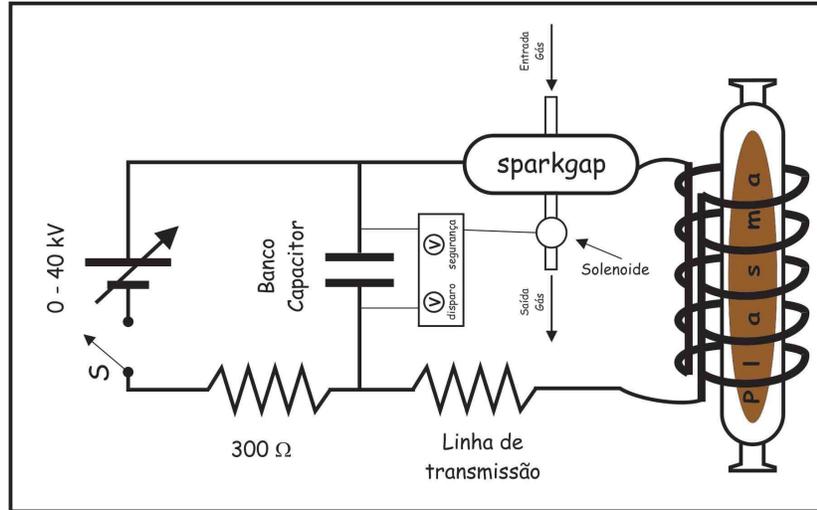


Figura 2.2: Esquema elétrico do theta pinch IF - UFF.

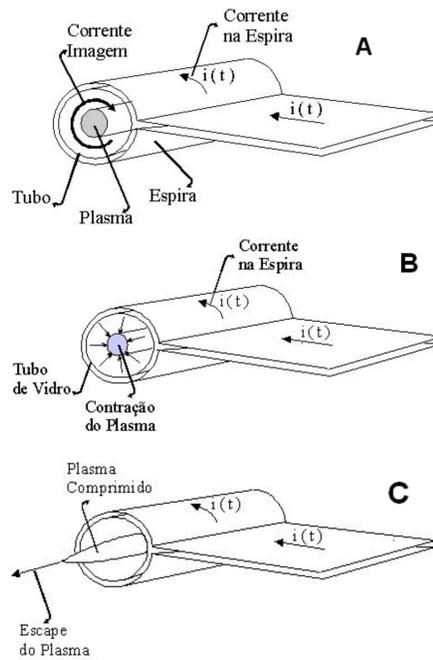


Figura 2.3: Esquema de produção de plasma por um theta pinch.

da espira, sendo assim, o fluxo magnético dentro da espira varia no tempo e como consequência um campo elétrico é induzido. Este campo elétrico induzido gera uma corrente imagem no sentido oposto a corrente $i(t)$. Em **B** temos a força magnética produzida pela velocidade de deriva dos portadores de carga pertencentes a corrente imagem e o campo produzido por $i(t)$ comprimindo o plasma. Em **C** mostra o plasma comprimido expandindo axialmente. Esta compressão sofrida pelo plasma é conhecida como efeito pinch. Há condições para que o plasma seja formado, uma delas é que a variação do campo magnético no tempo seja superior a 10^8 G/s [7], além disso a pressão dentro do tubo é condição para formação do plasma e tal pressão depende do gás a ser utilizado [7].

Formulação do problema

Há um interesse utilizar fontes espectrais que forneçam espectros com o menor índice de impurezas possível, neste aspecto o theta pinch é uma fonte espectral em potencial, diferentes de outras fontes espectrais tais como a descarga capilar e triggered spark, o theta pinch não utiliza eletrodos para formar o plasma. O problema dos eletrodos é que devido a alta temperatura que se alcança durante a descargas estes eletrodos acabam realizando emissão termoiônica e introduzindo impurezas no plasma contaminando o espectro que será registrado pelos espectrógrafos.

O trabalho desenvolvido nesta tese não é a pioneira nesta área, pois há registros da década de 60 mostrando o emprego deste dispositivo com esta finalidade [8, 9, 10]. Normalmente a tensão de carga do banco superava algumas dezenas de kilo volts enquanto que a corrente de pico atingia valores superiores a cem mil ampères. Um destes theta pinch possuía um banco capacitores com energia superiores a 40 MJ para obtenção íons de O VII cujo potencial de ionização é 739 eV [8], um outro theta pinch com 570 kJ utilizando

deutério gerava uma temperatura eletrônica superior a 1200 eV [10], todos estes theta pinchs tinham um volumes de plasma da ordem de 10^{-3} m^3 , mesmo volume de plasma do theta pinch IF-UFF. Ao ter acesso a estas referências pode-se questionar: De que maneira é possível maximizar a transferência de energia do banco de capacitores para o plasma formado dentro do tubo do theta pinch ? É possível variar os parâmetros indutância, capacitância e diâmetro do tubo a fim de maximizar a eficiência ? A resposta a estas perguntas dará a possibilidade de otimizar a energia do banco capacitor e obter íons com o mesma potencial de ionização. Uma rotina de experimentos foi realizado a fim de buscar respostas a tais perguntas.

2.2 Estudo da Eficiência

Foi desenvolvido um estudo sistemático sobre a eficiência da transmissão de energia entre o banco de capacitores e o plasma formado, visando o desenho de um sistema que diminua o *stress* do dispositivo gerado durante a descarga. Este estudo está baseado na análise da performance de um theta pinch quando variada a tensão no banco capacitor, o número de espiras da bobina de campo, o diâmetro da bobina e o número de capacitores empregados no banco.

Com este novo *design* o tempo de vida útil do sistema aumentará consideravelmente. Um resultado prático deste estudo é possibilitar o desenho de um theta pinch com energia de apenas umas centenas de joules que apresente alto desempenho em termos de temperatura e densidade, que se compara ao plasma produzido em sistemas com energia maiores [11].

Inicialmente será descrito o método adotado para determinação da eficiência na transferência de energia. Em seguida é descrito o experimento realizado e por fim os resultados

e conclusões deste estudo são apresentados.

Determinação da Eficiência

O theta pinch pode ser descrito como um circuito RLC conforme ilustrado na figura 2.4, onde R_0 representa a resistência da linha de transmissão e demais contatos elétricos, R_P representa o acréscimo na resistência quando o plasma é formado, L_S representa a indutância parasita do banco de capacitores, da linha de transmissão e da chave S, L_0 representa a indutância da bobina e C a capacitância do banco de capacitores. A equação que descreve este circuito é:

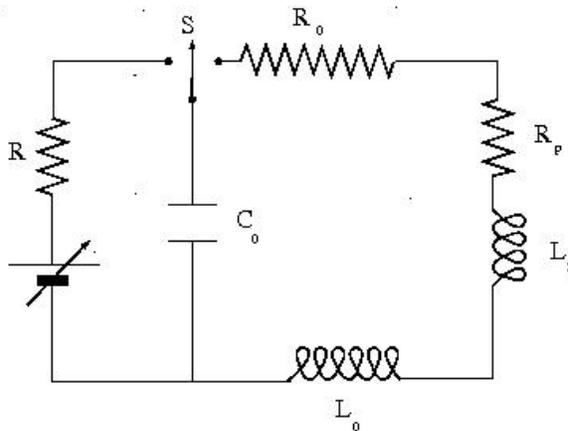


Figura 2.4: Representação elétrica de um theta pinch.

$$(L_0 + L_P) \frac{d}{dt} i(t) + (R_0 + R_P) i(t) + \frac{1}{C} \int i(t) dt = 0 \quad (2.1)$$

A solução da equação 2.1 é bem conhecida

$$i(t) = i_0 e^{-\frac{\beta}{2}t} \sin(\omega t) \quad (2.2)$$

com condição inicial $i(0) = 0$. Onde:

$$i_0 = \frac{V}{(L_0 + L_S)} \quad (2.3)$$

$$\beta = \frac{R_0 + R_P}{L_0 + L_S} \quad (2.4)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{1}{C(L_0 + L_S)}} \quad (2.5)$$

Onde V é a tensão sobre o banco de capacitores. A potência absorvida pelo plasma é dado por:

$$P(t) = i_0^2 R_P e^{-\beta t} \sin^2(\omega t) \quad (2.6)$$

e a energia

$$U_P = R_P \int i_0^2 dt = i_0^2 \frac{R_P}{2\beta} \quad (2.7)$$

Substituindo os valores de i_0 e β obtem-se

$$\frac{U_P}{\frac{1}{2}CV^2} = \frac{R_P}{R_0 + R_P} \quad (2.8)$$

Onde $\frac{1}{2}CV^2$ é a energia fornecida pelo banco de capacitores e a equação 2.8 define a eficiência η da transferência de energia do banco capacitor para o plasma formado. Mais uma vez destaca-se que R_P não é a resistência do plasma e sim o valores acrescido na resistência do sistema quando o plasma é formado.

A equação 2.8 foi apresentada em 1965 no trabalho pioneiro de Silbert [12], têm-se então que a eficiência na transferência de energia entre o banco de capacitores e o plasma

pode ser expressa por:

$$\eta = \frac{R_p}{R_0 + R_p} \quad (2.9)$$

onde R_0 é a resistência do sistema quando não é produzido plasma e R_p é o valor da resistência em série que é adicionada ao sistema quando o plasma é gerado no processo de descarga.

Para determinar a eficiência de um theta pinch é necessário saber os valores de R_0 e R_p , para isso experimentos foram realizados a fim de registrar o campo magnético, $\mathbf{B}(t)$, produzido pela corrente $i(t)$ durante o processo de descarga do banco capacitor. Utilizando uma sonda magnética, descrita no apêndice A, foi possível registrar a evolução de $\mathbf{B}(t)$. O perfil do campo magnético é proporcional a corrente de descarga e a figura formada no osciloscópio é a de um RLC amortecido típico, cuja expressão temporal pode ser dada por:

$$i(t) = i_m \exp\left(-\frac{R}{2L}t\right) \text{sen}(\omega t + \phi); \omega = \left(\frac{1}{LC} - \frac{R^2}{4L^2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.10)$$

Após a obtenção do perfil de $\mathbf{B}(t)$ foi realizado um procedimento de ajuste utilizando o programa *Origin 6.0*©. Neste procedimento haviam cinco parâmetros a serem ajustados: R, L, C, a amplitude i_m e a fase inicial ϕ . Os valores iniciais para fase e amplitude foram retirados observando os valores diretamente no oscilograma, já o valor da capacitância do sistema foi mantida fixa, pois este valor foi obtido utilizando um capacitmetro ICEL modelo CD 300 que permite medir capacitâncias de 200 pF até 200 μF . Antes de iniciar o ajuste, foi descartado o primeiro semiciclo dos oscilogramas, pois eles estão relacionados com o processo de ruptura dielétrica do gás (*breakdown*). O efeito pinch ocorre quando o campo elétrico induzido atingir seu valor máximo e isso corresponde a $\frac{dB}{dt}$ nulo, ou seja, no primeiro semiciclo.

O período, τ , de oscilação do $\mathbf{B}(t)$ esta relacionado com ω que por sua vez depende de R, L e C. Sendo a capacitância um parâmetro medido, ao ajustar o perfil de $\mathbf{B}(t)$ obtêm-se os valores L e R. O *ansatz* para os valores iniciais para L e R foram 100nH e 10m Ω . O primeiro parâmetro a ser determinado foi L, isso porque o produto LC tem um peso muito maior na determinação de ω comparado com a razão entre R e L. Neste primeiro momento o parâmetro L ficava livre, pois o critério adotado era ajustar primeiro o período de oscilação do campo magnético, quando se observava que o período já estava ajustado anotava o valor da indutância e incerteza dada pelo ajuste. Na etapa seguinte, fixava-se o valor da indutância já ajustada e era liberado o valor da resistência, o ajuste era feito até decaimento da oscilação convergir. Uma vez o valor da resistência ajustada iniciava mais uma etapa onde a fase e amplitude eram liberadas com o parâmetro resistência ainda livre. Por ultimo todos os parâmetros eram liberados e não se notava grande variação nos valores de R, L e C quando todos estes parâmetros eram colocados livres para variar. A figura 2.5 mostra o perfil do campo $\mathbf{B}(t)$ ajustado para a condição sem plasma (oscilograma da esquerda) e com plasma (oscilograma da direita). Observa-se que no oscilograma com plasma o decaimento é mais rápido, evidenciando um aumento no valor da resistência total do sistema.

2.3 O experimento

O laboratório de Plasma e Espectroscopia Atômica do IF - UFF usa theta pinches como fonte de luz para estudos espectroscópicos desde a segunda metade da década de 90. A primeira versão deste dispositivo, figura 2.6, dispunha de um único capacitor de 4,5 μF e tensão de carga máxima de 40 kV, com o intuito de obter um dispositivo com melhor performance um novo theta pinch foi projetado e construído, para isso o laboratório

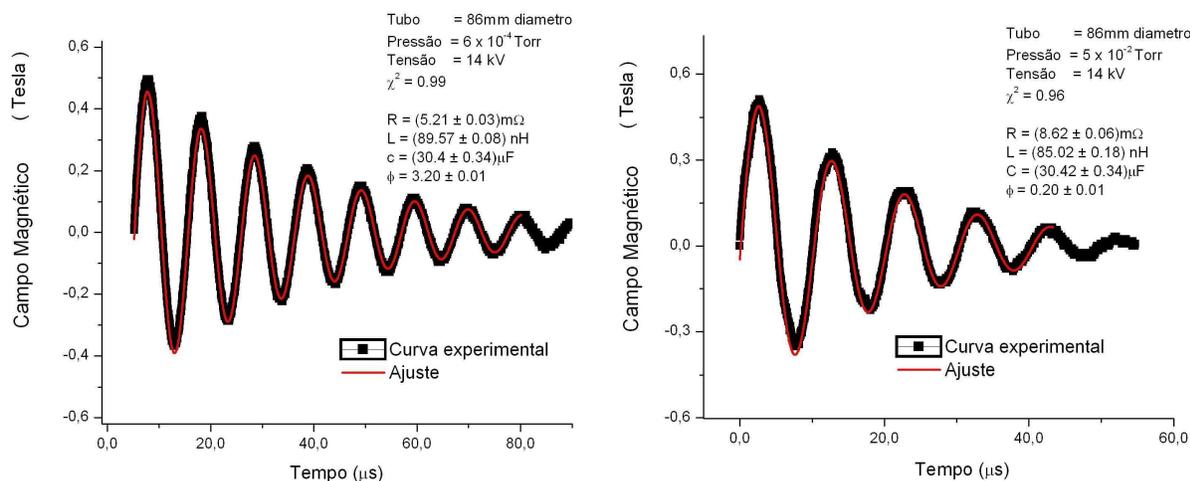


Figura 2.5: Perfil ajustado do campo magnético produzido na bobina do theta-pinch.

contou com a doação de capacitores de baixa indutância do IF - UNICAMP. Este novo theta pinch , figura 2.7, foi utilizado na obtenção de espectro gases nobres, este foi um dos temas abordado na tese de doutorado de Fábio de Oliveira Borges [13].



Figura 2.6: Primeira versão da fonte espectral Theta Pinch do IF - UFF

Para realização do estudo sobre a eficiência da transmissão de energia entre o banco de capacitores e o plasma formado, estava a disposição a segunda versão do theta pinch construído no IF-UFF, que **atualmente** possui um banco com cinco capacitores idênticos que podem ser carregados a uma tensão máxima de 16 kV. Estes capacitores podem ser



Figura 2.7: Segunda versão da fonte espectral Theta Pinch do IF - UFF

conectados em paralelo formando um banco com capacitância variável indo até $37,8 \mu\text{F}$.

Com o intuito de verificar a influência da indutância na eficiência, uma bobina foi construída utilizando o arranjo em paralelo de espiras de uma única volta, cujo diâmetro pode ser variado de forma a se ajustar o mais próximo o possível das paredes do tubo de pirex que contém o gás a ser ionizado no processo de formação do plasma, o número máximo de espiras conectadas em paralelo foi de sessenta e quatro. Foram empregados cinco tubos distintos a fim de se determinar a variação da eficiência, equação 2.9, em função do raio. O sistema de vácuo do theta pinch conta com bombas difusora Leybold modelo 46203 e mecânica Elnor modelo *B3150* e medidor de pressão Edwards modelo AGD. A faixa de pressão durante o experimento foi de alguns mTorr até 2 Torr. O procedimento para injeção do gás de trabalho foi: Alcançava-se a pressão da ordem de 10^{-5} Torr dentro do tubo de pirex, então era injetado o gás por meio de uma válvula

agulha até que a pressão se estabilize na faixa de uns poucos Torr. Este procedimento foi repetido por duas vezes, na terceira vez o gás era injetado até a pressão desejada dentro da faixa de mTorr até 2 Torr. As tensões empregadas no banco capacitor foram de 8, 11 e 13 kV, pois foram as tensões típicas de trabalho empregadas na obtenção de espectros em experimentos já realizados no laboratório. Utilizando uma sonda magnética (descrição no apêndice A), um osciloscópio digital, *Tektronix* modelo TDS 200, e um micro computador foi possível obter os perfis de oscilação de $\mathbf{B}(t)$ gerado pela corrente $i(t)$.

O critério escolhido para iniciar o estudo da eficiência foi utilizar quatro capacitores, a bobina constituída de sessenta e quatro fios de cobre de 4mm de diâmetro em paralelo e os cinco tubos disponíveis. Na figura 2.8 está a montagem experimental utilizada e em evidência está a bobina construída envolvendo o tubo de vidro.



Figura 2.8: Montagem utilizada para realização do experimento.

No primeiro momento o objetivo foi determinar a influência do raio do tubo sobre a eficiência do theta pinch, havia a disposição tubos com raios de 43, 50, 65, 85 e 100mm. Para cada um destes tubos foram construídas bobinas contendo sessenta e quatro fios de cobre de 4mm em paralelos, além disso, foram empregados os gases Argônio (Ar) e Nitrogênio (N_2), pois havia uma quantidade razoável destes gases no laboratório.

Após obtida a curva eficiência versus raio do tubo, um tubo foi escolhido e deu-se continuidade aos estudos verificando a influência da indutância, para isso após cada obtenção dos oscilogramas quatro espiras eram retiradas das bobina, este estudo foi realizado com o objetivo de determinar para qual valor da indutância a eficiência seria máxima.

A última etapa do estudo constituiu em analisar se capacitância influenciava na eficiência do theta pinch. Utilizando o número de espiras que maximiza a eficiência realizou-se um experimento que constituía na variação da capacitância do banco. Após a obtenção dos oscilogramas um capacitor era retirado do banco e novos oscilogramas eram obtidos, desta forma foi possível observar se o valor da capacitância influenciaria ou não na eficiência do theta pinch.

Os procedimentos acima descritos permitiram observar como a eficiência varia em função dos parâmetros L , C e raio do tubo no theta pinch IF - UFF.

2.4 Resultados e conclusões

2.4.1 Variação da eficiência em função do tubo

O primeiro resultado analisado é o da curva da eficiência em função da pressão para os cinco tubos disponíveis. Na figura 2.9 estão os resultados obtidos para o tubo de 50mm de raio. Neste gráfico são mostradas três curvas para as diferentes tensões de carga do banco de capacitores. Em todas as tensões utilizadas nota-se que a eficiência exhibe um máximo em torno de 250 mTorr e decai abruptamente para valores de pressão menores que 100 mTorr. Com o aumento de pressão, a eficiência também cai, contudo o faz de maneira mais suave. Este comportamento foi observado em todos os tubos utilizados.

Ao analisar os valores da eficiência para os diferentes tubos utilizando os gases N_2 e

Ar notou-se que a eficiência era basicamente a mesma para os dois gases. Sendo assim, utilizou-se o N_2 comercial no restante dos estudos.

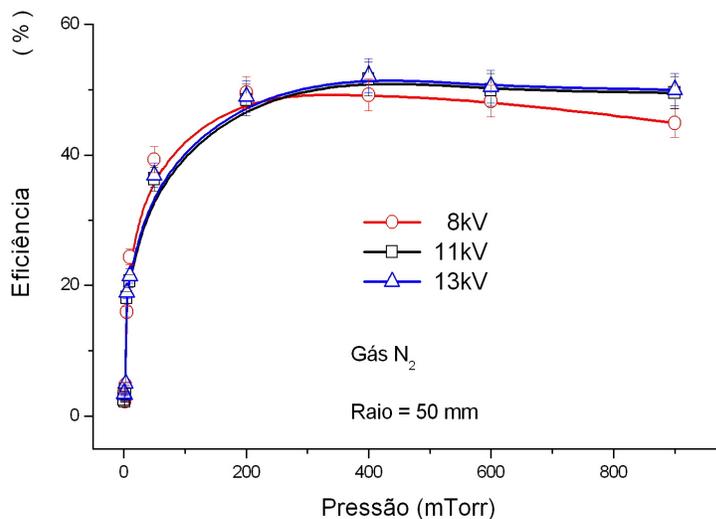


Figura 2.9: Eficiência de transferência de energia entre o banco de capacitores de $30,2 \mu F$ e o plasma formado no interior de um tubo pirex com diâmetro de 100 mm em função da pressão para tensões de carregamento de 8, 11 e 13 kV.

Após analisar os resultados utilizando o tubo de 50 mm de raio, o mesmo procedimento foi repetido para os demais tubos e observou-se que o perfil se mantinha o mesmo, tendo o máximo da eficiência em torno dos 250 mTorr, também observou-se que o valor máximo da eficiência ocorreu para a tensão de 13 kV.

Na figura 2.10 está o gráfico para as maiores eficiências que foram produzidas em função dos raios dos tubos. Nota-se claramente que a eficiência atinge uma saturação em torno de 70 % a partir do raio de 65 mm. No presente caso, este é o limite superior para o raio do tubo a ser empregado em um theta pinch com vista a se maximizar a eficiência para o plasma gerado. No projeto de um theta pinch além da eficiência deve ser observado o valor da indutância da bobina que envolve o tubo de descarga pirex. Como é sabido,

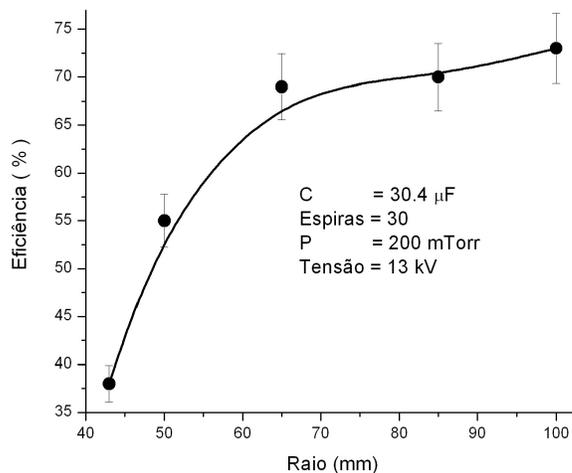


Figura 2.10: Gráfico da máxima eficiência em função do raio do tubo.

a indutância cresce com o aumento do raio e por sua vez diminui a taxa de variação do campo magnético que é proporcional ao campo elétrico induzido no interior da bobina. O campo elétrico é fundamental para se obter o breakdown do gás [7] enquanto que o campo magnético é decisivo para o efeito de pistão magnético que provoca a onda de choque que possibilita a obtenção das altas densidades e temperaturas geradas por este dispositivo. Este é o primeiro resultado prático no sentido de guiar o projeto mecânico para se construir um theta pinch, ou seja, o raio não pode ser muito grande.

2.4.2 Eficiência em função da bobina

Após a conclusão da influência do raio do tubo no theta pinch foi adotado o raio de 43mm como tubo padrão para continuar o experimento. Esta escolha foi feita porque este foi o último tubo a ser utilizado na investigação sobre o raio, a bobina e o tubo já estavam no theta pinch, para iniciar a nova investigação era necessário tão somente fazer a manutenção no *spark gap*.

A etapa seguinte foi investigar a influência da indutância sobre a eficiência. Após cada obtenção do oscilograma quatro espiras eram removidas da bobina e novos oscilogramas eram obtidos. A influência do número de espiras na eficiência pode ser observada na figura 2.11, independente da pressão de trabalho utilizada o máximo da eficiência para cada pressão ocorreu quando o número de espiras foi igual a 32, pelo ajuste numérico este número de espiras corresponde a uma indutância em torno de 90 nH. Para pressão de 5 mTorr não se observou plasma até que o número de espiras fosse inferior a 48, o número final de espiras foi de 8. Foi realizada uma tentativa com 4 espiras, porém os fios explodiram !

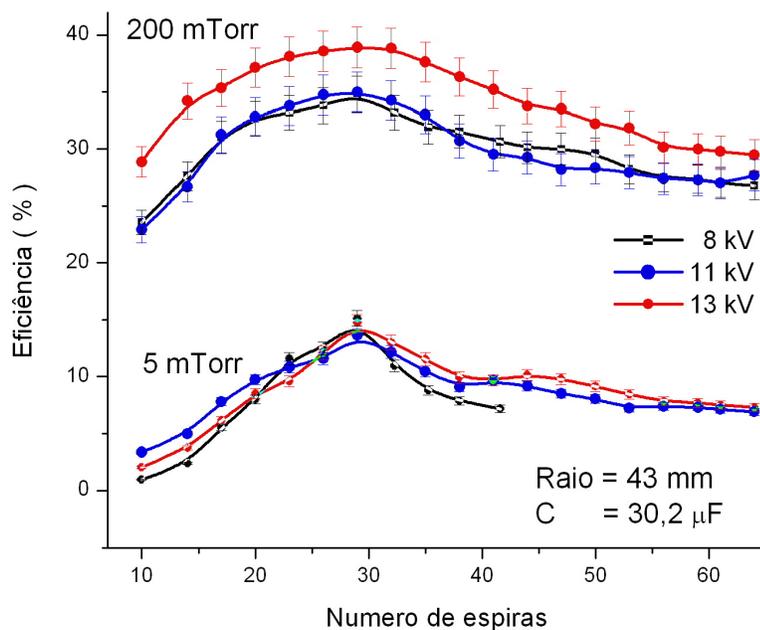


Figura 2.11: Variação da eficiência em função do número de espiras.

Após os ajustes um gráfico foi construído com os valores das indutâncias obtidas em função do número de espiras a fim de saber a faixa de variação da indutância e também comparar a indutância do sistema com plasma e sem plasma. Estas curvas estão na figura

2.12, e se aglutinam em dois grupos: um com a formação de plasma, um pouco mais abaixo, e o outro sem a formação de plasma. Considerado que a indutância da linha de transmissão e do banco de capacitores está associado em série com a bobina de campo que é formada pela a associação em paralelo de n espiras iguais, temos que a indutância total do sistema é dada por:

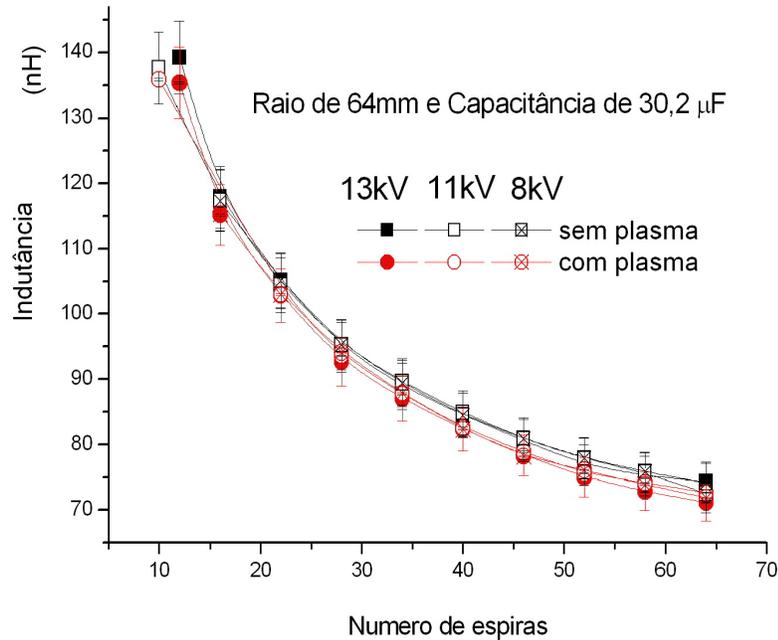


Figura 2.12: Variação do valor ajustado para indutância pelo processo de ajuste não linear, em função do número de espiras que são conectadas em paralelo. Os dados foram obtidos para tensões de 8, 11 e 13 kV em duas situações com plasma e sem plasma (pressão abaixo de 1 mTorr).

$$L = L_S + \frac{L_B}{n} \quad (2.11)$$

Onde L_S é a indutância do sistema (indutância dos capacitores, linha de transmissão e da chave *spark gap*), L_B é a indutância da bobina e n é o número de espiras.

A curva mostrada na figura 2.12 está de acordo com a expressão anterior e pode-se

obter destes dados que a indutância do sistema L_0 excluindo-se a da bobina de campo vale aproximadamente 60 nH enquanto que a indutância devido a uma única espira vale aproximadamente 700 nH. Desta figura pode-se concluir que a influência do plasma sobre a indutância total é pequena e pode ser desconsiderada para efeito de projeto.

2.4.3 Eficiência em função da capacitância

Para concluir a última etapa do experimento, além de utilizar o tubo de 43 mm de raio foi adotado a bobina com 32 espiras como bobina padrão. A tomada de dados foi iniciada utilizando os quatro capacitores no banco, após a aquisição dos oscilogramas para as tensões de 8, 11 e 13 kV um capacitor era desconectando do banco e assim sucessivamente. A figura 2.13 mostra os resultados obtidos da análise dos oscilogramas.

A figura 2.13 A mostra a variação da eficiência em função do número de capacitores para três tensões. Pode-se concluir que houve pouca variação no valor da eficiência e mostrando um tímido máximo para três capacitores. Já na figura 2.13 B apresenta que a resistência do sistema diminui à medida que o número de capacitores no banco aumenta.

A figura 2.14 mostra esquematicamente o circuito que representa o arranjo de quatro capacitores, ligados em série a sua resistência interna r_{int} , os quais podem ser ligados a linha de transmissão, conectada em série a um *spark gap*. A indutância total está representada por L enquanto que a resistência R_S dá conta de toda resistência do circuito excluindo a interna dos capacitores. Neste caso pode ser mostrado que a resistência total pode ser dada por

$$R = R_S + \frac{r_{int}}{n_C} \quad (2.12)$$

onde n_C representa o número de capacitores conectados a linha de transmissão. A

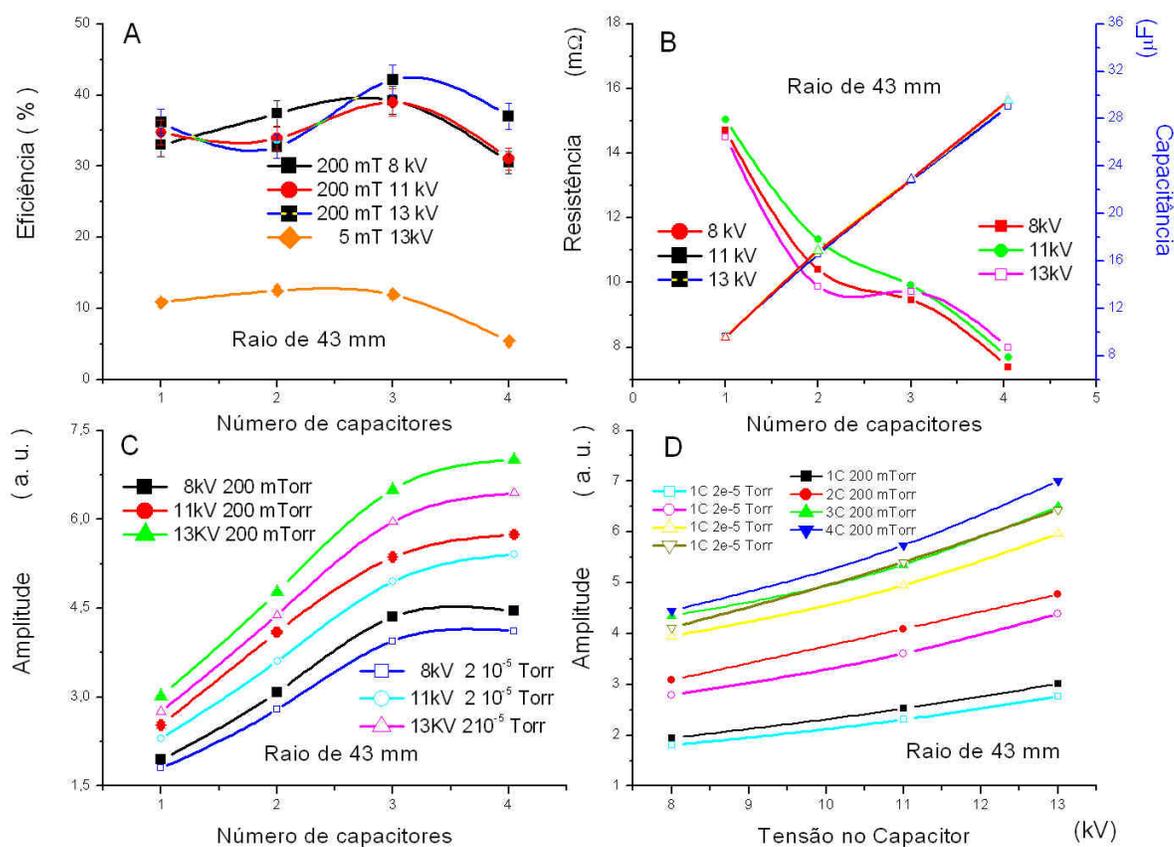


Figura 2.13: Influência do número de capacitores sobre: A - eficiência, B - resistência e capacitância total ajustados pelo ajuste não linear, C - sobre a amplitude do campo magnético e D - Influência da tensão de carregamento sobre a amplitude do campo magnético.

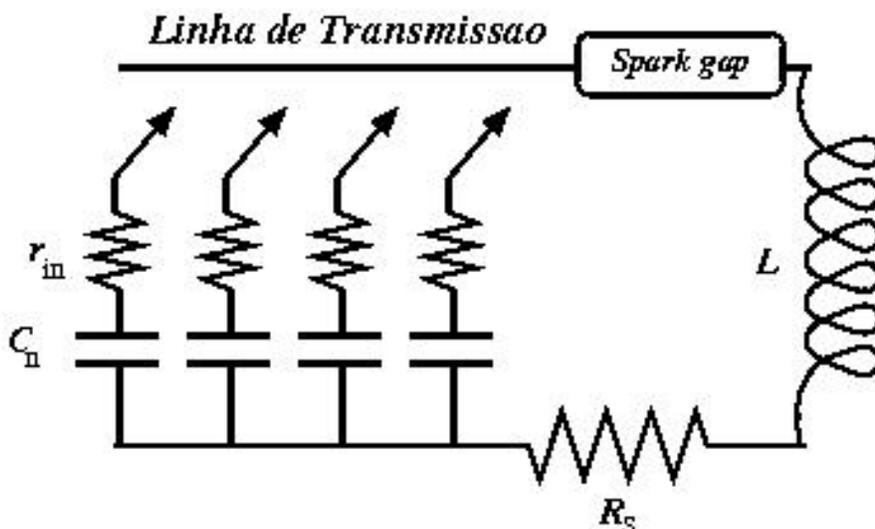


Figura 2.14: Diagrama esquemático da resistência interna do banco capacitor de um theta pinch

análise da figura 2.13 B fornece um valor aproximado para resistência interna de cada capacitor em torno de $9 \text{ m}\Omega$ enquanto que a resistência para o restante do circuito em torno de $6 \text{ m}\Omega$, ou seja, como energia depositada no banco de capacitores é consumida nas resistências, uma parte significativa dela fica dissipada pela resistência interna dos capacitores. Pode-se concluir que do ponto de vista de transferência de energia é preferível ter vários capacitores conectados em paralelo produzindo uma capacitância total C do que um único capacitor com esta mesma capacitância. Nesta mesma figura vemos um aumento linear para o valor da capacitância ajustada, o que confirma que o diagrama modela apropriadamente a associação dos capacitores e que a contribuição do plasma para a capacitância total é de aproximadamente $0,9 \text{ }\mu\text{F}$, enquanto que a capacitância individual para cada capacitor é aproximadamente de $7,3 \text{ }\mu\text{F}$. Para chegar a este valor considero que a capacitância total ajustada pode ser descrita por

$$C = C_P + n_C.C_n \quad (2.13)$$

onde C_P e C_n são as capacitâncias de plasma e dos capacitores respectivamente. Analisando este resultado em conjunto com o mostrado na figura 2.13 B, que mostra uma redução no valor da resistência ajustada com o aumento do número de capacitores. Nas figuras 2.13 C e 2.13 D mostram a dependência da amplitude em função do número de capacitores e tensão de carga respectivamente, sabemos que a amplitude é proporcional a raiz quadrada da capacitância ($i_m \propto C^{1/2}$) e essa dependência são visualizadas no gráfico, já com relação à tensão de carga a dependência é linear, o que também pode ser comprovado pelo gráfico, isso considerando que a energia do banco capacitor se converte em energia magnética.

2.4.4 Conclusões

Os resultados mostram inequivocamente que a aproximação empregada retrata apropriadamente o processo oscilatório que ocorre na formação do plasma. Foi mostrado experimentalmente um valor adequado para o raio do tubo a ser empregado em um theta pinch, que pode ser determinado pela análise da eficiência. Este valor depende do sistema, notadamente do banco de capacitores. Pouca ou nenhuma influência sobre a indutância total do sistema pode ser creditada a formação de plasma, portanto na elaboração de um projeto para construção de um theta pinch, deve-se considerar apenas os aspectos geométricos do circuito de descarga, que deve sempre visar minimizar a indutância do sistema. Os resultados obtidos mostraram que é importante montarmos um banco com diversos capacitores arranjados em paralelo. Teoricamente o valor da capacitância é de pouca ou nenhuma influência. Trabalhando com o mesmo regime de energia, uma capa-

citância menor é compensada com o aumento da tensão. Do ponto de vista experimental com diversos capacitores em paralelo, por um lado é benéfico, pois possibilita a operação com menores tensões de carregamento, por outro lado complica o projeto acoplamento mecânico que deve visar a minimização da resistência de contato.

Estes resultados foram publicados na revista *Review of Scientific Instruments*, **80**, 12, 125109 (2009). doi:10.1063/1.3272785

Capítulo 3

Análise da Estrutura Atômica de Íons

Neste capítulo é introduzido alguns conceitos para o estudo da estrutura atômica de íons mediantemente ionizados e o consagrado método usado para determinar parâmetros atômicos apresentados nesta tese. É apresentado os programas desenvolvidos pelo professor Robert D Cowan [14]. Estes programas foram utilizados para determinar tais parâmetros atômicos. É apresentado também os resultados da análise da estrutura atômica dos íons Br V e Kr VI pertencentes a seqüência isoeletrônica do Ga I.

3.1 Método Hartree - Fock e Programas Cowan

A equação de Schrödinger para um átomo com N-elétrons, ignorado os efeitos relativísticos e nucleares, pode ser escrita no sistema cgs como:

$$\left[\frac{-1}{2} \sum_{i=1}^N \left(\nabla_i^2 + \frac{2Z}{r_i} \right) + \left(\sum_{i>j}^N \frac{1}{r_{ij}} \right) \right] \Psi = E\Psi \quad (3.1)$$

Para se encontrar os parâmetros atômicos desejados, tais como força de oscilador, tempo de vida, probabilidade de transição entregue outros, é necessário resolver a equação 3.1. Como nesta tese foram estudados átomos com mais de um elétron tal equação só tem solução numérica. Nas linhas a seguir são descrito os métodos capazes de resolver a equação 3.1:

É sempre conveniente, ao resolver equações 3.1 com mais de uma variável, usar aproximações que permitam separar as variáveis de forma independente. O método de aproximação empregados nos cálculos foi a aproximação de campo central que parte do seguinte princípio para a função de onda Ψ .

- Os elétrons movem-se em torno do núcleo de forma independente, ou seja, um elétron não sente a presença do outro.
- O potencial no qual o elétron está submetido é esfericamente simétrico, tal potencial é gerado pelo núcleo e todos os demais elétrons do átomo. Esta aproximação permite separar a Ψ em três componentes independente: componentes radial, $P_{nl}(r)$, componente angular, $Y_{lm}(\theta, \phi)$, e um espinor de Pauli, χ_{ms} .
- A função de onda é anti-simétrica a permutação de coordenadas dos elétrons, impedindo que dois elétrons idênticos ocupem o mesmo estado (princípio de exclusão de Pauli).

Com esta aproximação pode-se escrever a função de onda da forma

$$\Psi(r, \theta, \phi, ms) = \frac{1}{r} P_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \chi_{ms} \quad (3.2)$$

Pode-se questionar o fato de se estar utilizando a equação de Schrödinger ao invés da de Dirac, porém, este procedimento é justificado porque os íons estudados podem ser analisados considerando correções relativísticas em primeira ordem em v/c . O que reduz a equação de Dirac para um potencial central em uma equação de Schrödinger, com o diferencial que o hamiltoniano ganha três novos termos, sendo eles: Termo de Spin-Orbita, o termo de Darwin e o termo Massa-Velocidade. Estes novos termos representam:

- **Termo Spin Orbita:** Representa a interação magnética entre o momento magnético de spin do elétron e o campo magnético que o elétrons vê como o resultado de seu movimento orbital através do campo elétrico produzido pelo núcleo.
- **Termo de Darwin:** Pode ser pensado como a indução elétrica relativística do momento do elétron.
- **Massa Velocidade:** Conseqüência da variação da massa com a velocidade.

O método numérico utilizado para solucionar a equação 3.1 é o método Hartree-Fock, que consiste em supor que a Ψ que descreve o sistema atômico é um determinante de Slater (Técnica matemática utilizada na mecânica quântica que se usa para gerar funções de onda antissimétricas que descrevam os estados coletivos de vários fermiões e que cumpram o princípio de exclusão de Pauli). e utiliza o teorema variacional que afirma que, dada uma função de onda normalizada, que satisfaz as condições de contorno apropriadas, o valor esperado de H é superior que a energia exata do estado fundamental.

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle \geq E_{exata} \quad (3.3)$$

Se Ψ for a solução exata, então:

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = E_{exata} \quad (3.4)$$

O processo de cálculo se inicia usando-se o potencial Coulombiano na equação 3.1 como potencial de entrada, e a partir de sua solução se obtém a distribuição de probabilidade para o sistema de partículas, $|\frac{1}{r}P_{nl}(r)|^2$, que é usada iterativamente para se determinar a distribuição de carga e, a partir da qual, se obtém o novo potencial eletrostático, que é então utilizado como novo potencial de entrada para a equação 3.1. Essa energia potencial de saída é comparada com a de entrada. Este método auto consistente termina quando é alcançada uma concordância, dentro de um critério numérico para convergência entre autovalores de entrada e saída. Matematicamente têm-se:

$$\langle \Psi_{entrada} | H | \Psi_{entrada} \rangle - \langle \Psi_{saida} | H | \Psi_{saida} \rangle \leq \delta \quad (3.5)$$

Onde δ é um valor satisfatório.

Os códigos computacionais utilizados para resolver a equação 3.1 e fornecer os parâmetros atômicos de interesse são RCN, RCG e RCE que estão descritos abaixo. Maiores detalhes sobre a teoria usada por estes códigos encontra-se no livro *Theory of Atomic Structure and Spectra* do Prof Robert Cowan [14].

3.1.1 RCN

O programa RCN resolve a parte radial da equação 3.1 para o íon de interesse. Este programa utiliza o método Hartree-Fock aplicando um potencial central auto consistente. Alguns dos parâmetros atômicos calculados por este programa são:

- Energia de centro de gravidade E_{av} .
- As integrais de Coulomb F^k e G^k , também chamada de Integrais de Slater.
- A integral spin-orbita ξ_i .

- As integrais radiais de dipolo e quadrupolo elétrico para cada par de configurações (E_1 e E_2).

O programa RCN calcula a E_{av} e depois determina as integrais radiais.

As integrais F^k e G^k , ξ_i e E_i^k são dadas por:

$$F^k = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_1^k}{2r_2^{k+1}} |P_i(r_1)|^2 |P_j(r_2)|^2 dr_1 dr_2 \quad (3.6)$$

$$G^k = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_1^k}{2r_2^{k+1}} P_i^*(r_1) P_i(r_1) P_j^*(r_2) P_j(r_2) dr_1 dr_2 \quad (3.7)$$

$$\xi_i = \int_0^\infty \frac{\alpha}{2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} (P_i^*(r) P_i(r)) dr \quad (3.8)$$

$$E_i^k = \int_0^\infty P_{n_i l_i}^*(r) \left[\frac{-d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} \right] P_{n_i l_i}(r) dr \quad (3.9)$$

O RCN necessita de uma carta de entrada que contenha informações sobre o íon a ser estudado. A carta de entrada contém o número atômico, seu grau de ionização, as configurações a serem estudadas e o tipo de acoplamento desejado para solução do cálculo. As configurações devem ser escritas em grupo de paridades onde cada grupo deve ser escrito em ordem crescente de energia.

Para iniciar a solução das configurações o programa toma como base o gás nobre mais próximo do íon a ser estudado cujo o $Z_{gasnobre} <$ número de elétron do íon, acrescenta-se elétrons até se obter a configuração desejada.

O processo de cálculo se inicia usando-se o potencial Coulombiano na equação 3.1. Daí em diante o programa procura encontrar o $P_{nl}(r)$ auto consistente. Uma vez encontrada os polinômios é possível determinar F^k e G^k , ξ_i , R^k e E_1 e E_2 . É conhecido dos

espectroscopistas que usam o código do Prof Cowan que os parâmetros F^k , G^k e ξ_i são superestimados, ao escrever a carta de entrada pode-se informar ao programa para reduzir os valores calculados em alguns porcentos. Os valores calculados pelo programa RCN são escrito em um arquivo de saída que é utilizado pelo programa RCG.

3.1.2 RCG

O programa RCG soluciona a parte angular da equação 3.2 utilizando álgebra de Racah [14] e constrói a função de onda, Ψ , do íon. Daí por diante o programa calcula parâmetros atômicos tais como: probabilidade de transição entre os níveis, comprimento de onda das transições, força de oscilador (gf), tempo de vida dos níveis, transições por dipolo e quadrupolo elétrico, transição por dipolo magnético, seção de choque atômico, taxa de recombinação eletrônica.

É possível escolher qual unidade de energia deve ser escrito a saída do programa, as opções são elétron volts (eV), centímetros a menos um (cm^{-1}) ou Ridberg (Ry). O arquivo de saída do RCG contem as informações desejadas para sabermos se o experimento é viável ou não, pois neste arquivo saberemos qual a faixa espectral se encontram as transições e suas probabilidade de ocorrerem.

Adequa-se as transições a serem estudadas em função da tabela contendo as transições atômicas observada em laboratório.

A execução dos cálculo afim de determinar as probabilidade de transição antes da realização do experimento permite saber se as transições de interesse estão dentro da faixa espectral de registro dos espectrógrafos, caso contrario é necessário trocar a configuração a ser estudada.

3.1.3 RCE

O Programa RCE é utilizado para realizar um cálculo semi-empírico. Os parâmetros calculados são ajustados a partir de valores experimentais conhecidos, isso permitirá ajustar os parâmetros para que os valores de energia dos níveis calculados estejam em melhor acordo com valores observado. O método utilizado para ajustar é o método dos mínimos quadrados [14]. É possível durante o processo de ajuste fixar parâmetros enquanto outros parâmetros estão livres para variar. O RCE fornece uma carta de saída com os valores dos parâmetros já ajustados. Após os parâmetros serem ajustados utiliza-se a carta de saída do RCE como entrada para o programa RCG e calcula os valores dos comprimento de onda e demais valores atômico com valores ajustados a luz do experimento.

Todos estes programas estão disponíveis na internet, seus códigos fontes são de fácil acesso e foram escritos em linguagem Fortran 77. A contribuição dada durante os estudos foi baixar os códigos fontes da internet e compilar estes programas usando o compilador Fortran da Intel ifort [®], este compilador é gratuito e pode ser baixado do site da Intel (www.intel.com). Ao compilar os programas utilizando o ifort foi encontrado alguns erros e warnings durante a compilação que após algumas semanas foram removidos. Hoje é possível utilizar estes programas através da rede IF-UFF, mesmo remotamente (não estando presente dentro do IF-UFF)

3.2 Análise da estrutura atômica do Bromo

Nesta sessão é apresentado um estudo teórico sobre os níveis de energia e transições atômicas do bromo mediantemente ionizado, Br V. A previsão teórica foram feitas usando

um código computacional descrito na sessão anterior. Ajustando as integrais de Slater, foi reproduzido com boa precisão os valores dos níveis de energia e comprimentos de onda conhecidos e disponíveis na literatura. Os resultados para probabilidade de transição indicam que poder-se-á observar na região de ultravioleta de vácuo novas linhas que darão suporte à determinação de quinze novos níveis de energia deste íon. Após a conclusão dos cálculos as previsões teóricas foram confirmadas experimentalmente por Tauheed [35]. Apresentado aqui as comparações entre o cálculo realizado e os valores experimentais obtidos. Além do cálculo, é descrito no capítulo seguinte a montagem experimental utilizada para produção e registro do espectro do bromo, que incluem o theta pinch descrito no capítulo anterior e um espectrógrafo que permitem o registro de comprimentos de onda desde 18 até 220 nm.

3.2.1 Motivação

Dentre as inúmeras aplicações possíveis para o bromo, a mais comum é a sua adição em aditivos para combustíveis automotivos, o que tem como finalidade evitar acumulação de chumbo no interior dos cilindros. O bromo também pode ser utilizado como pigmento de tecidos e como agente purificador da água, embora não estejam estas entre as suas aplicações mais comuns. Em geral, se tem pouca ou nenhuma informação da estrutura atômica de íons mediantemente ionizados do bromo. Por exemplo, para o Br V são conhecidos apenas quinze níveis de energia [16]. Como o ponto de ebulição do bromo a pressão atmosférica é baixo (cerca de 56° C), torna-se fácil injetar seus vapores diretamente em um theta pinch. O theta pinch permite formar plasmas pulsados produzindo íons tipicamente em estágio de ionização igual ou superior a três, operando em torno de 10^{-3} Torr, o que diminui mais ainda a temperatura de ebulição do bromo. Mesmo operando com baixa

energia (500 J), se a transferência de energia entre seu banco de capacitores e o plasma for alta (acima de 50%), pode-se formar plasma com temperaturas da ordem de 100 eV, o que é suficiente para se produzir até Br VI, uma vez que as energias de ionização dos íons Br II, Br III, Br IV e Br V são respectivamente: 21,8; 36,0; 47,3 e 59,0 eV [14]. O conjunto destes fatores incentivou-nos a iniciar um estudo sobre a estrutura energética dos íons de bromo em estágios de ionização intermediários.

As primeiras linhas espectrais do bromo foram registradas por L. Bloch e E. Bloch em 1927 [17]. Neste experimento foi utilizada uma descarga elétrica em vapor de bromo como fonte de luz espectral e observou-se linhas espectrais na faixa de 220 até 600 nm. Só em 1934 foram observadas linhas na região de ultravioleta de vácuo por Rao e Rao [18, 19] que determinaram doze transições atômicas e sete níveis do Br V. Em 1970, utilizando um espectrógrafo de incidência normal de três metros de comprimento e um theta pinch como fonte de luz [20], Budhiraja e Joshi obtiveram quatro mil linhas espectrais do átomo e íons de bromo na região do ultravioleta e ultravioleta de vácuo, das quais mais de três quintos apareceram pela primeira vez, o que demonstra o quanto copiosa é a luz produzida em um theta pinch. Budhiraja e Joshi em 1971 [16] confirmaram as transições e níveis já observados por Rao e Rao e designaram mais dez transições e dois novos níveis do íon Br V. Motivado por um experimento bem sucedido [20] e um estudo sistemático de análise da eficiência de transferência de energia para o plasma [21], além de contarmos com uma fonte de luz similar a utilizada por Budhiraja e Joshi, iniciamos um estudo teórico sobre o íon Br V. Para registro do espectro usamos um espectrógrafo de incidência normal com círculo de Rowland de três metros e rede de difração côncava com 1200 ranhuras por milímetros, que permite registrar comprimentos de onda desde 18 até 220 nm. Baseado no trabalho de Luna [4] e Cavalcanti [21], foram realizados estudos sobre a eficiência de transferência de energia do theta pinch, ajustando sua pressão e tensão de forma que

a eficiência esteja no patamar de pelo menos 40%, o que garante a produção de um plasma denso e quente e a emissão de um espectro de emissão intenso. A previsão sobre a estrutura de níveis e parâmetros atômicos para diversas configurações eletrônicas do Br V é feita se empregando um código numérico descrito no início do capítulo. Utilizando o resultado fornecido para probabilidade de transição como critério para avaliar as transições atômicas que teriam intensidade suficiente para serem registradas nas placas de emulsão espectroscópicas, concluímos que é possível observar novas transições e determinar sete novas configurações do íon Br V.

3.2.2 Resultados teóricos

Até o início do projeto em 2007, os níveis de energia conhecidos para do Br V [16] eram os níveis ${}^2P_{\frac{1}{2}}$ e ${}^2P_{\frac{3}{2}}$ pertencentes à configuração eletrônica fundamental $4s^24p$ e os níveis ${}^2P_{\frac{1}{2}}$, ${}^2P_{\frac{3}{2}}$, ${}^2S_{\frac{1}{2}}$, ${}^2D_{\frac{5}{2}}$, ${}^2D_{\frac{3}{2}}$, ${}^4P_{\frac{5}{2}}$, ${}^4P_{\frac{3}{2}}$ e ${}^4P_{\frac{1}{2}}$ pertencente configuração excitada $4s4p^2$. Além desses, eram conhecidos dois níveis, ${}^2D_{\frac{5}{2}}$ e ${}^2D_{\frac{3}{2}}$, pertencentes à configuração $4s^24d$, o singlete ${}^2S_{\frac{1}{2}}$ pertencente à configuração $4s^25s$ e por fim, os dupletos ${}^2P_{\frac{1}{2}}$ e ${}^2P_{\frac{3}{2}}$ pertencentes à configuração $4s^25p$, que é a de maior energia determinada experimentalmente. As transições atômicas observadas experimentalmente estão ilustradas na figura 3.1 mostrando as energias dos quinze níveis.

No cálculo numérico realizado, foram propostas seis novas configurações, a saber: $4p^3$, $4s^24f$, $4s^25d$, $4s^26s$, $4s^26p$ e $4s^27s$. Estas configurações propostas foram introduzidas no cálculos juntamente com as configurações conhecidas a fim de verificar a probabilidade de transição envolvendo seus níveis de energia e verificar quais poderiam ser observadas na região espectral entre 2 a 220 nm.

Reduzindo as integrais de Slater para 83% do seu valor *ab initio*, os resultados para

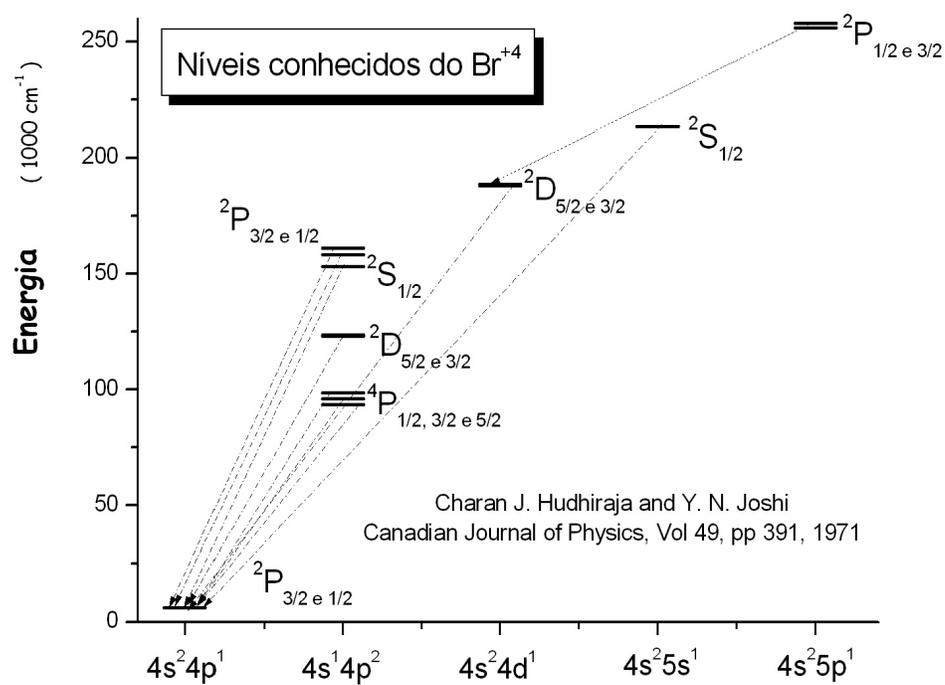


Figura 3.1: Diagrama de Grotrian para as transições conhecidas do Br V

os níveis de energia estavam em excelente acordo com os que eram conhecidos experimentalmente. A tabela 3.1 mostra uma comparação entre os valores obtidos neste tese e os valores experimentais determinados por outros autores. Pode ser observado que as diferenças entre os valores teóricos e experimentais foram inferiores a 10%.

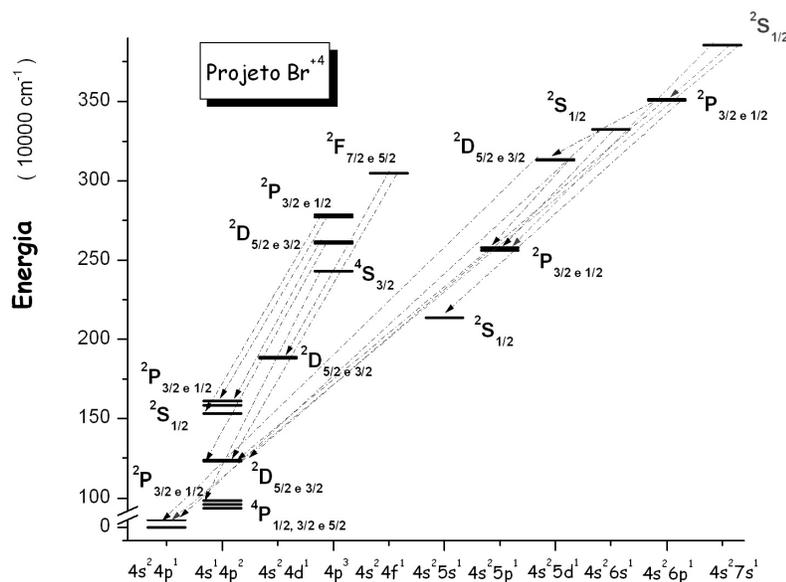


Figura 3.2: Diagrama de Grotrian para as transições estudadas do Br V

O cálculo teórico realizado nesta tese tem importância fundamental no projeto de pesquisa experimental, pois ele informa em qual região espectral se encontra as transições atômicas mais intensas e desta maneira pode-se projetar um experimento de alto rendimento (indicando onde se deve colocar as placas de emulsão). A partir do resultado numérico para o conjunto de transições, foram selecionadas as transições mais intensas usando o resultado da probabilidade de transição como critério de seleção. Na figura 3.2 é apresentado um diagrama de Grotrian, onde estão as transições atômicas mais prováveis a serem observadas.

Algumas das linhas observadas por Budhiraja e Joshi possuem probabilidade de transição

Tabela 3.1: Comparação entre os valores de energia conhecidos experimentalmente [16] e os calculados.

Configuração	Níveis	Experimental (cm ⁻¹)	Calculado (cm ⁻¹)
4s ² 4p	² P _{1/2}	0,0	0,0
	² P _{3/2}	6088,6	5600
4s4p ²	⁴ P _{1/2}	93533,4	90499
	⁴ P _{3/2}	96006,4	92683
	⁴ P _{5/2}	98634,8	95638
	² D _{3/2}	123010,6	121676
	² D _{5/2}	123624,3	122075
	² S _{1/2}	153226,9	145849
	² P _{1/2}	158171,6	158750
	² P _{3/2}	161021,5	161914
	4s ² 4d	² D _{3/2}	187982,2
² D _{5/2}		188604,3	193182
4s ² 5s	² S _{1/2}	213507,6	218228
4s ² 5p	² P _{1/2}	255993,1	259152
	² P _{3/2}	257924,0	260841

inferior a 10⁺⁸. Para se ter uma idéia, a probabilidade de transição para uma transição ressonante, entre um estado da primeira configuração excitada e um da fundamental, é da ordem de 10⁺¹¹, ou seja, foram observadas transições com até três ordens de grandezas inferiores à ressonante. O critério de corte na construção da figura 3.2 e da tabela 3.2 foi o de não expressar transições cuja probabilidade de transição fossem inferiores a 10⁺⁹.

Como os valores dos níveis de energia calculados estão de acordo com os valores experimentais conhecidos previamente da literatura [16], acredita-se que os valores de energia para os outros níveis estarão próximos aos que serão observados experimentalmente. Espera-se observar pelo menos quinze níveis de energia e trinta e cinco novas transições.

Tabela 3.2: Resultado teórico para as transições mais intensas das novas configurações do Bromo quatro vezes ionizado.

Configuração	Transição	λ_{vac} (nm)	Probabilidade de Transição
$4s^26p - 4s^25d$	$^2P_{3/2} - ^2D_{3/2}$	167,06	$1,31 \times 10^9$
$4s^26p - 4s^25d$	$^2P_{1/2} - ^2D_{3/2}$	162,47	$7,13 \times 10^9$
$4s^26p - 4s^26s$	$^2P_{3/2} - ^2S_{1/2}$	140,40	$3,08 \times 10^9$
$4s^26p - 4s^26s$	$^2P_{1/2} - ^2S_{1/2}$	137,14	$1,65 \times 10^9$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^2D_{3/2} - ^2P_{3/2}$	100,41	$1,45 \times 10^{10}$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^2D_{3/2} - ^2P_{1/2}$	98,28	$9,28 \times 10^9$
$4s^24f - 4s^24d$	$^2F_{7/2} - ^2D_{5/2}$	89,61	$5,02 \times 10^{10}$
$4s^24f - 4s^24d$	$^2F_{5/2} - ^2D_{5/2}$	89,62	$2,05 \times 10^9$
$4s^24f - 4s^24d$	$^2F_{5/2} - ^2D_{3/2}$	89,23	$3,55 \times 10^{10}$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^2P_{1/2} - ^2P_{3/2}$	86,81	$3,05 \times 10^9$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^2P_{3/2} - ^2P_{3/2}$	85,69	$2,08 \times 10^{10}$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^2P_{1/2} - ^2P_{1/2}$	84,49	$9,43 \times 10^9$
$4s^25p - 4s^27s$	$^2P_{3/2} - ^2S_{1/2}$	80,31	$1,39 \times 10^9$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^2P_{1/2} - ^2S_{1/2}$	76,18	$1,49 \times 10^9$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^2P_{3/2} - ^2S_{1/2}$	75,32	$9,36 \times 10^9$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^2D_{3/2} - ^2D_{5/2}$	72,24	$5,90 \times 10^9$
$4s^25p - 4s4p^2$	$^2P_{3/2} - ^2D_{5/2}$	72,06	$1,36 \times 10^9$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^2D_{3/2} - ^2D_{3/2}$	72,03	$1,77 \times 10^{10}$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^2D_{5/2} - ^2D_{5/2}$	71,72	$3,46 \times 10^{10}$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^2D_{5/2} - ^2D_{3/2}$	71,52	$3,86 \times 10^9$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^4S_{3/2} - ^4P_{5/2}$	67,81	$3,22 \times 10^{10}$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^4S_{3/2} - ^4P_{3/2}$	66,48	$2,27 \times 10^{10}$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^4S_{3/2} - ^4P_{1/2}$	65,53	$1,20 \times 10^{10}$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^2P_{1/2} - ^2D_{3/2}$	64,34	$1,26 \times 10^{10}$
$4p^3 - 4s4p^2$	$^2P_{3/2} - ^2D_{5/2}$	63,88	$1,64 \times 10^{10}$
$4s^24f - 4s4p^2$	$^2F_{5/2} - ^2D_{3/2}$	54,62	$9,83 \times 10^9$
$4s^24f - 4s4p^2$	$^2P_{1/2} - ^2D_{3/2}$	43,72	$1,42 \times 10^9$
$4s^24f - 4s4p^2$	$^2P_{3/2} - ^2D_{3/2}$	43,65	$2,56 \times 10^9$
$4s^24p - 4s^25d$	$^2P_{3/2} - ^2D_{3/2}$	31,74	$1,26 \times 10^9$
$4s^24p - 4s^25d$	$^2P_{3/2} - ^2D_{5/2}$	31,72	$1,10 \times 10^{10}$
$4s^24p - 4s^25d$	$^2P_{1/2} - ^2D_{5/2}$	31,18	$6,46 \times 10^9$
$4s^24p - 4s^26s$	$^2P_{3/2} - ^2S_{1/2}$	30,63	$6,87 \times 10^9$
$4s^24p - 4s^26s$	$^2P_{1/2} - ^2S_{1/2}$	30,11	$3,61 \times 10^9$
$4s^24p - 4s^26s$	$^2P_{3/2} - ^2S_{1/2}$	26,33	$3,52 \times 10^9$

Tabela 3.3: Comparação entre os valores de energia conhecidos experimentalmente [23] e os calculados nesta tese. $^{\alpha}$ Nível 77%puro, $^{\chi}$ e $^{\delta}$ Níveis 70% puro, $^{\beta}$ Nível 64% puro, $^{\epsilon}$ Nível 51% puro e $^{\phi}$ Nível 76% puro.

Configuração	Níveis	Experimental (cm^{-1})	Calculado (cm^{-1})
$4p^3$	$^2P_{\frac{1}{2}}$	265427 $^{\alpha}$	277109
	$^2P_{\frac{3}{2}}$	266364 $^{\chi}$	278611
	$^2D_{\frac{3}{2}}$	240184 $^{\beta}$	260504
	$^2D_{\frac{5}{2}}$	241399 $^{\delta}$	261505
	$^4S_{\frac{3}{2}}$	243562	243103
$4s^24f$	$^2F_{\frac{5}{2}}$	294338 $^{\epsilon}$	304764
	$^2F_{\frac{7}{2}}$	294644 $^{\phi}$	304794
$4s^25p$	$^2P_{\frac{1}{2}}$	254038	259152
	$^2P_{\frac{3}{2}}$	255819	260841
$4s^26p$	$^2P_{\frac{1}{2}}$	346265	350405
	$^2P_{\frac{3}{2}}$	347363	351179
$4s^25d$	$^2D_{\frac{3}{2}}$	315935	320700
	$^2D_{\frac{5}{2}}$	316178	320922
$4s^26s$	$^2S_{\frac{1}{2}}$	328742	332067
$4s^27s$	$^2S_{\frac{1}{2}}$	381895	385368

Tabela 3.4: Comparação entre as energias de centro de gravidade publicados por Thauheed [23] e os calculado neste trabalho.

Configuração	Parâmetro	Experimental (cm^{-1})	Calculado (cm^{-1})
$4p^3$	E_{av}	265603	254102
$4s^24f$	E_{av}	309012	297367
$4s^25p$	E_{av}	264458	252875
$4s^26p$	E_{av}	347428	343518
$4s^25d$	E_{av}	316657	313105
$4s^26s$	E_{av}	328964	324664
$4s^27s$	E_{av}	381953	377964

O projeto com estas previsões de novos níveis foi apresentado no VI Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, realizado no Instituto Tecnológico da Aeronáutica – ITA em dezembro de 2008. Um resumo das transições mencionadas está exposto na tabela 3.2. Posteriormente a esta apresentação, mais precisamente em julho de 2009, Tauheed [35] determinou novos níveis de energia e transições atômicas para configurações do Br V que estavam incluídas em nosso projeto além das seguintes: $5s5p^2$, $5p^3$, $5s5p5d$ e $5s5p6s$.

Uma comparação entre os valores dos níveis de energia e as energias de centro de gravidade, E_{av} , publicadas na referência [35] com os valores calculados e apresentados no ITA em 2008 estão apresentados nas tabelas 3.3 e 3.4, mostrando uma diferença entre eles inferior a 5%. Com base nesta comparação é possível concluir a acuidade dos cálculos realizados e sobre a pertinência deste projeto, tendo em vista que o método Hartree Fock superestima os valores das energias. Para alguns níveis, a diferença entre o valor calculado e experimental chegou a 20 mil cm^{-1} , porém isto corresponde a menos de 10%

e esta diferença se justifica devido à falta de pureza de alguns níveis de energia, o que faz com que a previsão teórica foi feita um pouco mais afastada do valor experimental. O conjunto destes fatos dá confiança sobre a adequação dos cálculos e na exequibilidade do projeto de determinação de novas configurações para íons do bromo.

3.2.3 Sequência Isoeletrônica

Um sistema atômico isoeletrônico, ou seja, o sistema cuja estrutura eletrônica possua o mesmo número de elétrons diferenciando apenas pela carga nuclear, apresenta um comportamento regular característico bastante útil na análise espectral. Este comportamento regular pode ser observado combinando o *Princípio de Combinação de Rydberg-Ritz* e o *Método Gráfico*.

O Princípio de Combinação de Rydberg-Ritz, proposto em 1908, assegura que podem ser construídas tabelas de termos com dimensão de frequências, de maneira que as frequências observadas podem ser expressas como a diferença entre os valores dos termos

$$\frac{\nu}{c} = \sigma = T_f - T_i \quad (3.10)$$

Onde ν é a frequência, c é a velocidade da luz, σ é o número de onda e T_f e T_i são os valores dos termos envolvidos na transição. Os possíveis valores para σ estão sujeitos as regras de seleção.

O Método Gráfico consiste em plotar uma função dependente da sequência isoeletrônica, esta função pode ser representada por:

$$f(\sigma, \xi) = \frac{\sigma}{\xi + C} \quad (3.11)$$

onde σ é o número de onda, ξ é a carga nuclear líquida (número atômico menos o número de elétrons do íon) e C é uma constante de linearização.

As regularidades encontradas ao plotar função 3.11 pode ser utilizadas, por exemplo, para confirmar ou prever valores de uma determinada transição atômica. Se um determinado ponto na função “*destoar*”, ou seja, estiver longe da interpolação dos demais pontos, é possível que o valor esteja incorreto ou então será necessário analisar com cuidado este ponto e, se possível, encontrar uma justificativa para tal comportamento inesperado.

O método gráfico é uma ferramenta importante para confirmação de transições atômicas. Uma de suas aplicabilidades é: Após realizado a interpolação dos pontos experimentais o valor de $f(\sigma, \xi)$ para o íons objeto de estudo é determinado, sendo conhecido ξ e da constante C o valor de σ pode ser então determinado. Vai-se então na tabela de transições e procura-se transições cujo o valor do σ seja próximo ao previsto pela interpolação do gráfico.

Utilizamos o método gráfico para se observar os valores dos níveis calculados do íon Br V estavam “*de acordo*” na seqüência isoeletrônica. As transições analisadas foram $4s^24p - (4s4p^2, 4p^3 \text{ e } 4s^24f)$. A escolha destas transições se deve ao fato delas já haverem sido observadas em no mínimo seis íons da seqüência isoeletrônica do Ga I, do qual o Br V faz parte. Os valores dos níveis para os íons pertencentes a seqüência (Ga I, Ge II, As III, Se IV, Kr VI, Rb VII, Sr VIII, Y IX, Zr X, Nb X e Mo XI) foram consultados no site do NIST em novembro de 2008 [22].

Na figura 3.3 é apresentado os resultados para as transições entre as configurações $4s^24p - (4s4p^2, 4s^24d \text{ e } 4s^25s)$, com excessão do Br V, as demais transições são experimentais. Observa-se que os valores dos pontos estão todos em *bom acordo*, nenhum dos pontos *destoa*, é possível concluir que os valores calculados para o íon Br V estão em bom acordo com o previsto pelo método gráfico.

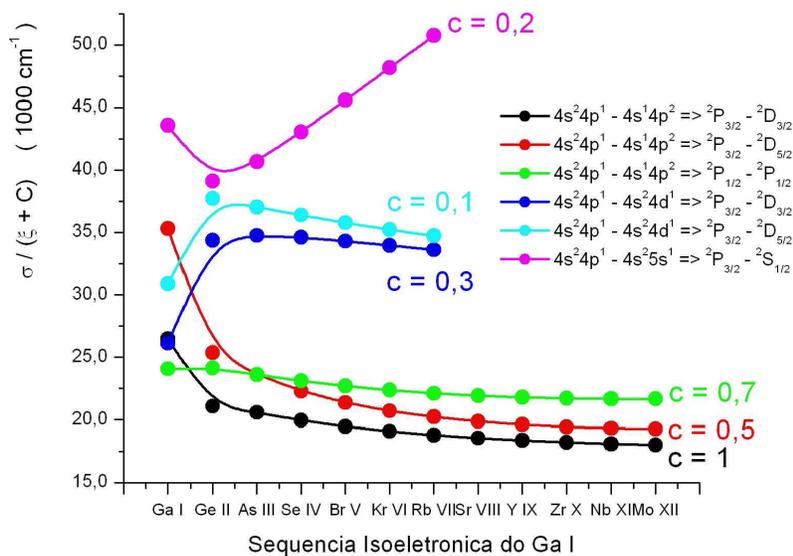


Figura 3.3: Sequência isoeletrônica das transições entre as configurações $4s^2 4p - (4s^2 4p^2, 4s^2 4d \text{ e } 4s^2 5s)$ do Br V

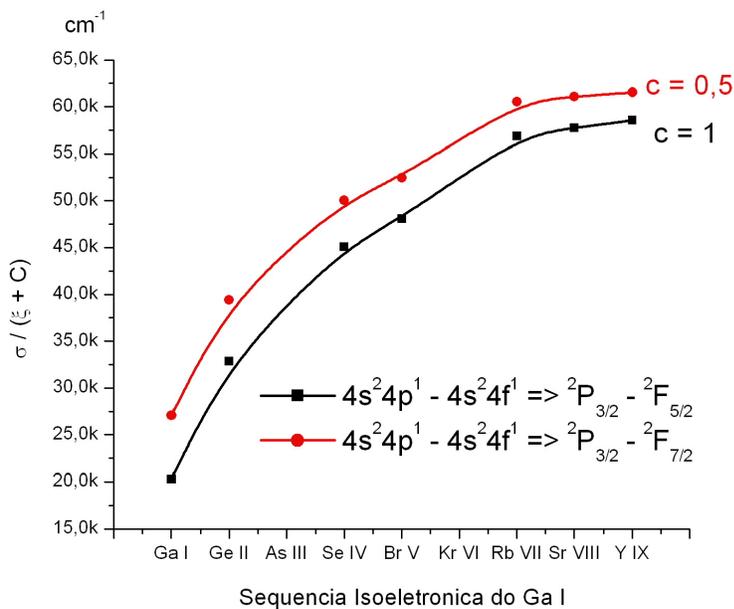


Figura 3.4: Sequência isoeletrônica das transições entre as configurações $4s^2 4p - 4s^2 4f$ do Br V

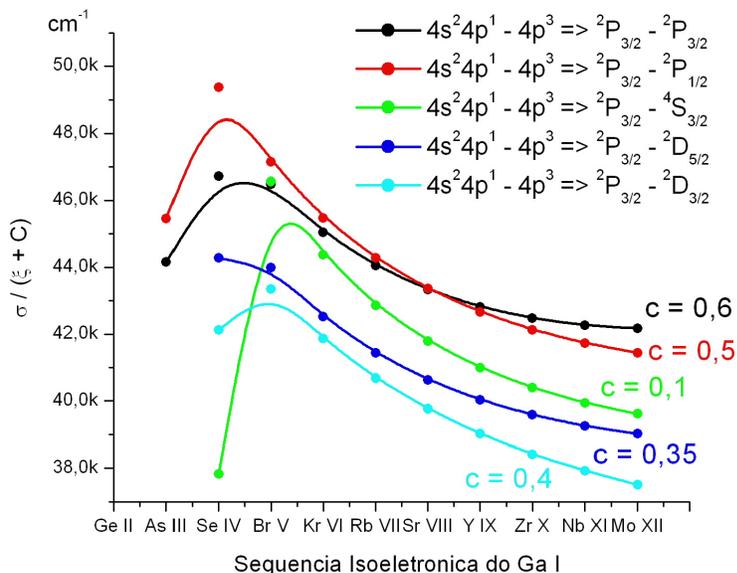


Figura 3.5: Sequência isoeletrônica das transições entre as configurações $4s^2 4p - 4p^3$ do Br V

Também foi aplicado o método gráfico nas transições das seguintes configurações: $4s^2 4p - (4p^3 \text{ e } 4s^2 4f)$ afim de observar se os valores calculados para estes níveis excitados encontrava-se de acordo com os previstos utilizando o método gráfico. Observa-se na figura 3.4 que os resultados teórico para a transições $4s^2 4p - 4s^2 4f$ está em bom acordo com a seqüência, já na figura 3.5 observa-se que para as transições: ${}^2P_{3/2} - {}^4S_{3/2}$ para o íon Se IV e ${}^2P_{3/2} - {}^2P_{1/2}$ para o íon As III não estavam em conformidade com o esperado, ou seja, a curva não tem um comportamento suave em toda a seqüência. Para as demais transições pode-se constatar que as transições observadas corroboram com a previsão teórica para os novos níveis de energia do íon Br V.

3.2.4 Conclusões

Utilizando o método Hatree Fock multiconfiguracional, os parâmetros de energia foram

ajustados de maneira semi-empírica e desta forma foi possível prever quinze novos níveis de energia, são eles: ${}^2P_{\frac{1}{2}}^1$, ${}^2P_{\frac{3}{2}}^3$, ${}^2D_{\frac{3}{2}}^3$, ${}^2D_{\frac{5}{2}}^5$ e ${}^4S_{\frac{3}{2}}^3$ da configuração $4p^3$; ${}^2F_{\frac{5}{2}}^5$ e ${}^2F_{\frac{7}{2}}^7$ da configuração $4s^24f$; ${}^2P_{\frac{1}{2}}^1$ e ${}^2P_{\frac{3}{2}}^3$ da configuração $4s^25p$; ${}^2P_{\frac{1}{2}}^1$ e ${}^2P_{\frac{3}{2}}^3$ da configuração $4s^26p$; ${}^2D_{\frac{3}{2}}^3$ e ${}^2D_{\frac{5}{2}}^5$ da configuração $4s^25d$; ${}^2S_{\frac{1}{2}}^1$ da configuração $4s^26s$ e ${}^2S_{\frac{1}{2}}^1$ da configuração $4s^27s$ para o Br V. Ainda há transições na faixa espectral abaixo de 300 Å que não são conhecidas, além disso, a demanda por informação na região abaixo de 300 Å incentivam em continuar o projeto de determinação de novos níveis atômicos do bromo. A confirmação das previsões teórica posteriormente obtidas por Tauheed [35] confirma a acuidade dos cálculos realizados.

Estes resultados foram publicados na Revista Brasileira de Aplicações de Vácuo, **28**, *n*^o 1 - 2, 33 - 38 (2009).

3.3 Análise espectral do criptônio

Nesta sessão será apresentado os resultados obtidos do estudo realizado sobre o íon Kr VI realizado durante minha estadia de 45 dias no Centro de Investigações Ópticas - CIOp situado na cidade de La Plata - Argentina. Durante este período fui recepcionado pelos pesquisadores: Dr Jorge Almados Reyna, Dr Mário Gallardo, Dr^a Mônica Ranieri e Dr Fausto Bredice. Todos de muito bom grado me receberam e compartilharam suas experiências acerca da análise espectral de íons mediantemente a altamente ionizados.

3.3.1 Sobre o íon Kr VI

O gás criptônio foi isolado pela primeira vez pelos britânicos William Ramsay e Morris William Travers, sua concentração na atmosfera é de 1 ppm [23]. Sendo um gás nobre

possui sua última camada fechada, seu estado fundamental é $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$. Os primeiros registros de espectros atômicos deste elemento são do final da década de 20 obtidos por Meggers [24] e Gremmer [25] e seus respectivos colaboradores, apenas no início da década de 60 foram observadas transições atômicas do ions Kr VI por Fawcett e colaboradores [26] que utilizaram um Z Pinch como fonte de luz, após a segunda metade da década de 70 foram registradas as linhas do criptônico cinco vezes ionizado, Kr VI, por Druetta e Buchet utilizando a técnica “*beam foil*” [27]. Posteriormente, em 1983, previsões de valores para novos níveis de energia foram feitas por Curtis e Ramanujam [28] ao construir seqüências isoeletrônicas. A partir desta data novas transições para o Kr VI foram observadas por Trigueiros e colaboradores em 1988 [5] utilizando um theta pinch, Tauheed e colaboradores em 1990 utilizando “*beam foil*” [29] e por fim, por Pagan e colaboradores em 1996 utilizando um theta pinch [30]. Todas as transições observadas e valores para os níveis de energia para o átomo criptônico foram compilados em 2007 por Saloman [31].

Durante estadia no CIOp foi proposto dar continuidade aos estudos já realizados sobre o Kr VI, em particular, a configuração $4s4p5p$. Esta configuração possui caroços 3P e 1P , sendo assim, a notação usual para esta configuração é: $4s4p(^3P)5p$ e $4s4p(^1P)5p$. A configuração $4s4p(^3P)5p$ possui os seguintes níveis: $^4D_{\frac{1}{2}}$, $^4D_{\frac{3}{2}}$, $^4D_{\frac{5}{2}}$, $^4D_{\frac{7}{2}}$, $^2S_{\frac{1}{2}}$, $^2P_{\frac{3}{2}}$, $^2P_{\frac{1}{2}}$, $^4P_{\frac{1}{2}}$, $^4P_{\frac{3}{2}}$, $^4P_{\frac{5}{2}}$, $^4S_{\frac{3}{2}}$, $^2D_{\frac{5}{2}}$ e $^2D_{\frac{3}{2}}$. Já a configuração $4s4p(^1P)5p$ possuem os níveis $^2D_{\frac{3}{2}}$, $^2D_{\frac{5}{2}}$, $^2S_{\frac{1}{2}}$, $^2P_{\frac{3}{2}}$ e $^2P_{\frac{1}{2}}$, sendo um total de dezoito níveis a serem determinados.

A configuração $4s4p5p$ interage fortemente com as configurações $4s4p5s$, $4s4p4d$ e $4s^2 5p$, além de interagir com as demais configurações já observadas que também foram introduzida nos cálculos. Infelizmente para a configuração $4s4p5p$ não existe informações suficientes para construção da seqüência isoeletrônica, contei apenas com os cálculo teórico, com as tabelas de transições e com os níveis já observados para determinar os novos níveis

de energia.

3.3.2 A análise espectral e seus resultados

Para determinação da configuração $4s4p5p$ foram usado três tabelas contendo transições espectrais dos íons, Kr III, Kr II, Kr V, KrVI e Kr VI. Estas tabelas cobrem a região espectral que vai desde 250 - 4000 Å. Estes dados são frutos de experimentos realizados por Trigueiros, Reyna e Petterson utilizando um theta pinch na Universidade de Lund - Suécia [32] e Reyna, Gallardo, Bredice e Ranieri que utilizaram como fonte de luz uma descarga capilar nos laboratórios do CIOp [33].

Os programas RCN e RCG foram utilizados para realizar os cálculos da estrutura atômica do Kr VI. Para levar em conta a maior interação entre as configurações, foram incluídos no cálculo as seguintes configurações conhecidas experimentalmente: $4s^24p$, $4s4p^2$, $4s^24d$, $4s^25s$, $4p^3$, $4s^25p$, $4s4p4d$ e $4s4p5s$. Também foram incluídas outras configurações desconhecidas, são elas: $4s^25d$, $4s^26d$, $4s4d5s$, $4s4d5d$, $4s4d6d$, $4s4p4f$, $4s4p5p$, $4s4p5f$, $4s^24d$, $4s4d^2$ e $4s5p^2$.

A configuração $4s4p5p$ é principalmente influenciada pela configuração $4s^25s$ dando a interação "pp \longleftrightarrow 'ss e pela configuração $4s4d5s$ através da interação pp' \longleftrightarrow sd. As configurações $4s^25d$, $4s^26d$, $4s4d5d$ e $4s4d6d$ também apresentam interações com a configuração $4s4p5p$, outros componentes destas séries Rydberg não apresentaram significativas interação no cálculo.

Para que a diferença entre os valores calculados e observados dos níveis de energia fosse inferior a 5% as integrais de Slater foram reduzidas para 87 % de seu valor. Uma vez calculado os valores dos níveis de energia da configuração $4s4p5p$ foi iniciada as buscas destes níveis utilizando as tabelas disponíveis.

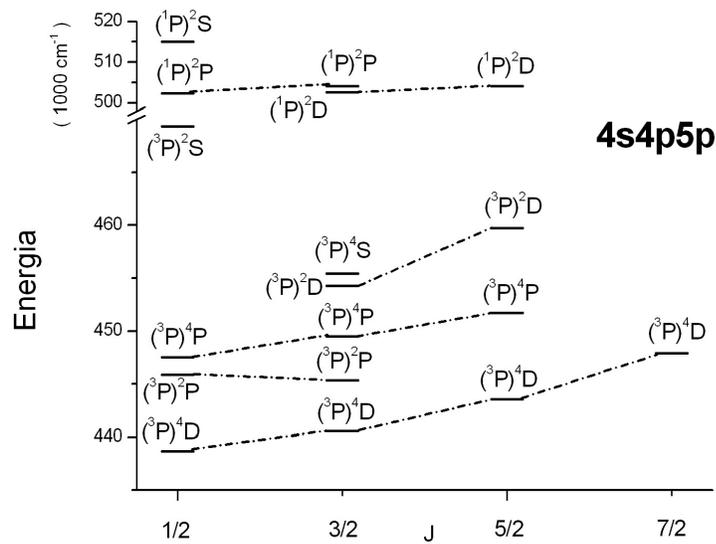


Figura 3.6: Diagrama dos níveis de energia da configuração $4s4p5p$.

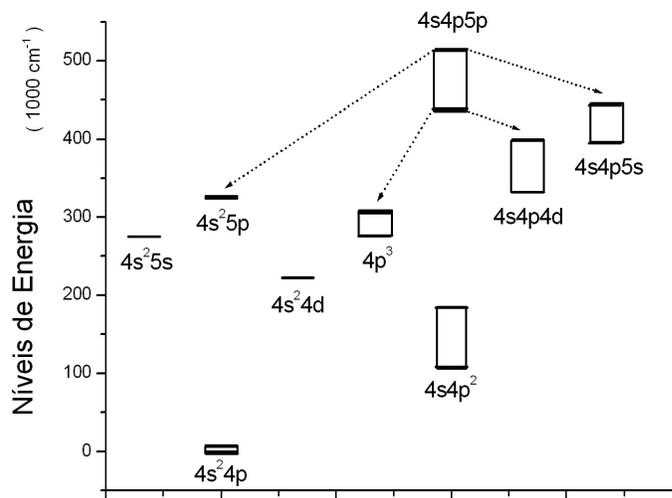


Figura 3.7: Estrutura dos níveis observados do Kr VI

A principal dificuldade para determinação dos níveis de energia foi a pouca designação iônica na região espectral de interesse. Para a região entre 600 a 1600 Å havia poucas linhas classificadas como Kr VI, em sua grande maioria não havia nenhuma designação ou estavam classificadas como n7 (não sete), o que implica que a transição correspondente aquela linha não pertence ao íon Kr VI. Com a atual designação iônica das tabelas foi possível determinar onze novos níveis de energia, faltando sete níveis a determinar para completar toda a configuração. No mês de março de 2010 um novo experimento com o gás criptônio e utilizando uma descarga capilar como fonte de luz foi realizado pelo grupo no CIOp, permitindo uma melhor designação iônica na região de interesse, com a melhora na designação iônica foi possível encontrar dezessete níveis de energia da configuração $4s4p5p$.

Na tabela 3.5 é apresentado os valores calculados e observados dos níveis de energia e sua composição referente ao seu grau de pureza, onde percentual abaixo de 4% foram omitidos, a incerteza no valor das energia é inferior a 3 cm^{-1} . Os valores dos níveis observados foram ajustados utilizando o programa RCE, no procedimento de ajuste a cada parâmetro liberado era comparado o valor ajustado com a previsão teórica. Observa-se boa concordância entre os valores ajustados e calculados. A estrutura geral de termos do Kr VI é mostrado na figura 3.6, apenas o termo $^2P_{\frac{1}{2}}$ do caroço 1P não foi determinado. Há dezessete novos níveis que pertencem à configuração $4s4p5p$.

Nas tabelas 3.6, 3.7 e 3.8 são apresentados as setenta e quatro transições entre os novos níveis de energia com os níveis das configurações $4s4p4d$, $4s4p5s$, $4s^25p$ e $4p^3$, a incerteza no comprimento de onda é de $0,02\text{Å}$. A estrutura dos novos níveis observados é mostrado na figura 3.7

3.3.3 Conclusões

Após reduzir as integrais de Slater para 87% de seu valor *ab initio* nos cálculos, foi possível diminuir a diferença entre os valores dos níveis de energia calculados e já observados por outros pesquisadores a 5%. Com base nos valores calculados e após um novo experimentos com o gás criptônio realizado no CIOp, que permitiu uma melhora significativa da assinalação iônica das transições atômicas contidas nas tabelas, foi possível confirmar a previsão teórica e determinar dezessete dos dezoito níveis de energia da configuração $4s4p5p$. Estes novos níveis de energia foram confirmados através das sessenta e quatro transições atômicas com as configurações $4s4p4d$, $4s4p5s$, $4s^25p$ e $4p^3$.

Estes resultados foram aceitos para publicação em junho de 2011, um mês após a defesa desta tese, na revista Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. JQSRT 112, 2463 (2011).

Tabela 3.5: Valores para os novos níveis de energia para o Kriptônio cinco vezes ionizado.

Designação	E_{Exp} (cm^{-1})	E_{Calc} (cm^{-1})	Composição (cm^{-1})
$4s4p(^3P)5p$ $^4D_{\frac{1}{2}}$	438708	438725	86% $4s4p(^3P)5p$ $^4D_{\frac{1}{2}}$ e 12% $4s4p(^3P)5p$ $^2P_{\frac{1}{2}}$
$^4D_{\frac{3}{2}}$	440560	440614	89% $4s4p(^3P)5p$ $^4D_{\frac{3}{2}}$ e 7% $4s4p(^3P)5p$ $^2P_{\frac{3}{2}}$
$^4D_{\frac{5}{2}}$	443555	443667	94% $4s4p(^3P)5p$ $^4D_{\frac{5}{2}}$
$^4D_{\frac{7}{2}}$	447936	447937	97% $4s4p(^3P)5p$ $^4D_{\frac{7}{2}}$
$^2P_{\frac{3}{2}}$	445375	445535	62% $4s4p(^3P)5p$ $^2P_{\frac{3}{2}}$; 17% $4s4p(^3P)5p$ $^4P_{\frac{3}{2}}$ e 11% $4s4p(^3P)5p$ $^4S_{\frac{3}{2}}$
$^2P_{\frac{1}{2}}$	445870	445626	82% $4s4p(^3P)5p$ $^2P_{\frac{1}{2}}$; 11% $4s4p(^3P)5p$ $^4D_{\frac{1}{2}}$ e 5% $4s4p(^3P)5p$ $^4P_{\frac{1}{2}}$
$^4P_{\frac{1}{2}}$	447533	447240	93% $4s4p(^3P)5p$ $^4P_{\frac{1}{2}}$
$^4P_{\frac{3}{2}}$	449512	449425	71% $4s4p(^3P)5p$ $^4P_{\frac{3}{2}}$; 19% $4s4p(^3P)5p$ $^2P_{\frac{3}{2}}$ e 5% $4s4p(^3P)5p$ $^4D_{\frac{3}{2}}$
$^4P_{\frac{5}{2}}$	451708	451980	92% $4s4p(^3P)5p$ $^4P_{\frac{5}{2}}$
$^4S_{\frac{3}{2}}$	454263	454061	69% $4s4p(^3P)5p$ $^4S_{\frac{3}{2}}$; 21% $4s4p(^3P)5p$ $^2D_{\frac{3}{2}}$ e 9% $4s4p(^3P)5p$ $^4P_{\frac{3}{2}}$
$^2D_{\frac{3}{2}}$	455423	455802	71% $4s4p(^3P)5p$ $^2D_{\frac{3}{2}}$; 15% $4s4p(^3P)5p$ $^4S_{\frac{3}{2}}$ e 9% $4s4p(^3P)5p$ $^2P_{\frac{3}{2}}$
$^2D_{\frac{5}{2}}$	459761	459582	83% $4s4p(^3P)5p$ $^2D_{\frac{5}{2}}$ e 4% $4s4p(^3P)5p$ $^4P_{\frac{5}{2}}$
$^2S_{\frac{1}{2}}$	469330	469272	95% $4s4p(^3P)5p$ $^2S_{\frac{1}{2}}$
$4s4p(^1P)5p$ $^2P_{\frac{1}{2}}$	a determinar	502423	
$^2D_{\frac{3}{2}}$	502627	502378	79% $4s4p(^1P)5p$ $^2D_{\frac{3}{2}}$; 15% $4s4p(^1P)5p$ $^2P_{\frac{3}{2}}$
$^2D_{\frac{5}{2}}$	504082	503949	88% $4s4p(^1P)5p$ $^2D_{\frac{5}{2}}$ e 5% $4p^2(^1D)4d^1$ $^2D_{\frac{5}{2}}$
$^2S_{\frac{1}{2}}$	515088	515161	92% $4s4p(^1P)5p$ $^2S_{\frac{1}{2}}$
$^2P_{\frac{3}{2}}$	504188	504349	79% $4s4p(^1P)5p$ $^2P_{\frac{3}{2}}$ e 14% $4s4p(^1P)5p$ $^2D_{\frac{1}{2}}$

Tabela 3.6: Novas transições observadas para o Kriptônio cinco vezes ionizado. Na coluna intensidade as letras significam: w = larga, bl = misturado, d = difusa, ul = sombreado por comprimento de ondas maiores e us = sombreado por comprimento de onda menores. O símbolo λ_{vac} significa o valor do comprimento de onda no vácuo. Os símbolos σ_{obs} e σ_{cal} significam valor do número de onda observado e calculado respectivamente.

Intensidade	λ_{vac} (Å)	σ_{obs} (cm^{-1})	σ_{cal} (cm^{-1})	Classificação
1	437,15	228754	49	$4p^3 \ ^2D_{\frac{5}{2}} - 4s4p(^1D)4d \ ^2P_{\frac{3}{2}}^3$
2	442,28	226101	101	$4p^3 \ ^2D_{\frac{5}{2}} - 4s4p(^1P)5p \ ^2D_{\frac{5}{2}}^3$
7	474,21	210877	81	$4p^3 \ ^2P_{\frac{1}{2}} - 4s4p(^1P)5p \ ^2S_{\frac{1}{2}}^1$
7	478,02	209196	3	$4p^3 \ ^2P_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^1P)5p \ ^2S_{\frac{1}{2}}^1$
6	525,04	190462	58	$4s^25p^1 \ ^2P_{\frac{1}{2}} - 4s4p(^1P)5p \ ^2S_{\frac{1}{2}}^1$
5	557,29	179440	2	$4p^3 \ ^2D_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^2D_{\frac{3}{2}}^3$
2	566,04	176666	6	$4p^3 \ ^4S_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^2D_{\frac{3}{2}}^3$
9	567,54	176199	7	$4p^3 \ ^2D_{\frac{5}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^4S_{\frac{3}{2}}^3$
4	569,90	175469	72	$4p^3 \ ^4S_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^4S_{\frac{3}{2}}^3$
10ul	578,46	172873	5	$4s4p(^3P)4d \ ^4D_{\frac{3}{2}} - 4p^2(^1D)4d \ ^2P_{\frac{3}{2}}^3$
4	584,07	171212	1	$4p^3 \ ^2D_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^2P_{\frac{1}{2}}^1$
10	585,73	170727	5	$4p^3 \ ^4S_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^4P_{\frac{3}{2}}^3$
2	598,50	167084	3	$4p^3 \ ^2D_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^2P_{\frac{3}{2}}^3$
5	602,25	166044	4	$4s4p(^3P)4d \ ^4D_{\frac{7}{2}} - 4s4p(^1P)5p \ ^2D_{\frac{5}{2}}^3$
11ul	612,34	163308	6	$4s4p(^3P)4d \ ^2D_{\frac{5}{2}} - 4p^2(^1D)4d \ ^2P_{\frac{3}{2}}^3$
9	629,00	158982	5	$4s4p(^3P)4d \ ^2D_{\frac{5}{2}} - 4s4p(^1P)5p \ ^2D_{\frac{5}{2}}^3$
4	659,55	151619	6	$4s4p(^3P)4d \ ^2F_{\frac{5}{2}} - 4s4p(^1P)5p \ ^2D_{\frac{5}{2}}^3$
9	666,35	150071	68	$4p^3 \ ^2P_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^2D_{\frac{3}{2}}^3$
8	705,02	141840	37	$4p^3 \ ^2P_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^2P_{\frac{1}{2}}^1$
4	730,99	136801	799	$4p^3 \ ^2P_{\frac{1}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^4D_{\frac{3}{2}}^3$
1d	754,54	132531	2	$4s4p(^3P)4d \ ^2P_{\frac{3}{2}}^3 - 4p^2(^1D)4d \ ^2P_{\frac{3}{2}}^3$
3	797,49	125393	2	$4s^25p \ ^2P_{\frac{1}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^4P_{\frac{3}{2}}^3$
3	817,53	122320	20	$4s4p(^3P)4d \ ^4D_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^2D_{\frac{3}{2}}^3$
5	817,65	122302	3	$4s4p(^3P)4d \ ^4P_{\frac{5}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^4S_{\frac{3}{2}}^3$
3us	838,84	119212	3	$4s^25p \ ^2P_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^2P_{\frac{3}{2}}^3$
12	860,48	116214	6	$4s4p(^1P)4d \ ^2D_{\frac{3}{2}} - 4p^2(^1D)5d \ ^2P_{\frac{3}{2}}^3$
5	862,85	115895	5	$4s4p(^3P)4d \ ^4P_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^4S_{\frac{3}{2}}^3$
5	863,45	115814	2	$4s4p(^3P)4d \ ^4D_{\frac{5}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^4S_{\frac{3}{2}}^3$
*10	865,25	115574	6	$4s4p(^3P)4d \ ^4D_{\frac{1}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^4P_{\frac{3}{2}}^3$
8	870,04	114937	3	$4s4p(^1P)4d \ ^2D_{\frac{5}{2}} - 4p^2(^1D)4d \ ^2P_{\frac{3}{2}}^3$
1d	877,86	113913	4	$4s4p(^3P)4d \ ^4P_{\frac{5}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^2P_{\frac{3}{2}}^3$
4d	880,51	113571	70	$4s4p(^1P)4d \ ^2D_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^1P)5p \ ^2D_{\frac{3}{2}}^3$
11	886,99	112741	37	$4s4p(^3P)4d \ ^4D_{\frac{3}{2}} - 4s4p(^3P)5p \ ^2P_{\frac{3}{2}}^3$

Tabela 3.7: **Continuação I:** Novas transições observadas para o Kriptônio cinco vezes ionizado.

Intensidade	λ_{vac} (Å)	σ_{obs} (cm^{-1})	σ_{cal} (cm^{-1})	Classificação
11w	890,60	112284	5	$4s4p(^1P)4d\ ^2D_{3/2}^5 - 4s4p(^1P)5p\ ^2D_{3/2}^5$
15w	893,42	111929	34	$4s4p(^3P)4d\ ^4D_{1/2}^1 - 4s4p(^3P)5p\ ^2P_{3/2}^3$
3d	896,05	111601	599	$4s4p(^3P)4d\ ^4P_{3/2}^2 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{3/2}^3$
9	897,00	111483	80	$4s4p(^3P)4d\ ^4P_{1/2}^1 - 4s4p(^3P)5p\ ^4P_{3/2}^3$
4	899,73	111144	5	$4s4p(^1P)4d\ ^2P_{3/2}^3 - 4s4p(^1P)5p\ ^2D_{3/2}^5$
10	900,31	111073	69	$4s4p(^3P)4d\ ^2D_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4S_{3/2}^1$
3d	902,93	110751	4	$4s4p(^3P)4d\ ^2D_{5/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4S_{3/2}^1$
10	900,31	111073	69	$4s4p(^3P)4d\ ^2D_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4S_{3/2}^1$
3d	902,93	110751	4	$4s4p(^3P)4d\ ^2D_{5/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4S_{3/2}^1$
10)	916,12	109156	7	$4s4p(^1P)4d\ ^2P_{1/2}^1 - 4s4p(^1P)5p\ ^2D_{3/2}^5$
*15w	921,33	108539	40	$4s4p(^3P)4d\ ^4D_{1/2}^1 - 4s4p(^3P)5p\ ^4P_{3/2}^3$
20w	927,34	107835	8	$4s4p(^3P)4d\ ^4P_{1/2}^1 - 4s4p(^3P)5p\ ^2P_{3/2}^3$
12)	931,41	107364	3	$4s4p(^3P)4d\ ^4D_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{3/2}^3$
7)	930,88	107425	3	$4s4p(^3P)4d\ ^4D_{1/2}^1 - 4s4p(^3P)5p\ ^2P_{3/2}^3$
8)	932,74	107211	2	$4s4p(^1P)4d\ ^2F_{7/2}^5 - 4p^2(^1D)4d\ ^2P_{3/2}^3$
9ul	939,39	106566	60	$4s4p(^3P)4d\ ^4D_{1/2}^1 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{3/2}^3$
2	940,55	106321	2	$4s4p(^3P)4d\ ^2D_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4P_{3/2}^3$
10)	948,42	105439	6	$4s4p(^3P)4d\ ^4D_{1/2}^1 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{3/2}^3$
7	951,43	105105	8	$4s4p(^3P)4d\ ^4D_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{3/2}^3$
5us	974,84	102581	76	$4s4p(^1P)4d\ ^2F_{7/2}^5 - 4s4p(^3P)5p\ ^2D_{3/2}^5$
2	979,13	102131	2	$4s4p(^3P)4d\ ^4P_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{3/2}^3$
11)	999,52	100048	50	$4s4p(^3P)4d\ ^2D_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{3/2}^3$
12	1031,31	96964	5	$4s4p(^3P)4d\ ^2F_{7/2}^5 - 4s4p(^3P)5p\ ^4P_{3/2}^3$
4	1231,90	81175	4	$4s4p(^3P)4d\ ^2P_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^2D_{3/2}^5$
10	1250,34	79978	80	$4s4p(^3P)4d\ ^2P_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4S_{3/2}^1$
5d	1400,56	71400	402	$4s4p(^1S)5s\ ^2P_{3/2}^3 - 4s4p(^1P)5p\ ^2S_{1/2}^1$
7	1429,27	69966	7	$4s4p(^3P)4d\ ^2P_{1/2}^1 - 4s4p(^3P)5p\ ^2P_{1/2}^1$
1d	1443,53	69275	6	$4s4p(^3P)4d\ ^2P_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{3/2}^3$
2d	1510,20	66216	7	$4s4p(^3P)4d\ ^2P_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{3/2}^3$
4d	1541,87	64856	8	$4s4p(^1P)4d\ ^2D_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^2D_{3/2}^5$
8d	1572,98	63574	5	$4s4p(^1P)4d\ ^2D_{1/2}^1 - 4s4p(^3P)5p\ ^2D_{3/2}^5$
10	1581,27	63240	41	$4s4p(^3P)4d\ ^2P_{1/2}^1 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{3/2}^3$

Tabela 3.8: **Continuação II:** Novas transições observadas para o Kriptônio cinco vezes ionizado.

Intensidade	λ_{vac} (Å)	σ_{obs} (cm^{-1})	σ_{cal} (cm^{-1})	Classificação
6	1664,73	60070	69	$4s4p(^1P)5s\ ^2P_{3/2}^1 - 4s4p(^1P)5p\ ^2D_{3/2}^3$
50w	1844,91	54203	4	$4s4p(^1P)4d\ ^2P_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^2P_{1/2}^1$
9	1852,09	53993	2	$4s4p(^1P)4d\ ^2D_{5/2}^5 - 4s4p(^3P)5p\ ^2P_{3/2}^3$
4d	1958,82	51051	3	$4s4p(^3P)5s\ ^4P_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^2P_{3/2}^3$
100w	2051,72	48740	38	$4s4p(^3P)5s\ ^4P_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{3/2}^5$
7d	2056,86	48618	8	$4s4p(^1P)4d\ ^2D_{5/2}^5 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{3/2}^5$
6d	2189,11	45681	79	$4s4p(^3P)5s\ ^4P_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{3/2}^5$
1d	2276,70	43923	5	$4s4p(^3P)5s\ ^4P_{5/2}^5 - 4s4p(^3P)5p\ ^4D_{5/2}^5$
2d	2439,55	40991	2	$4s4p(^3P)5s\ ^2P_{3/2}^3 - 4s4p(^3P)5p\ ^4P_{3/2}^2$

Capítulo 4

Espectro atômico obtido por theta pinch

Neste capítulo é apresentado os resultados da obtenção do espectro atômico do elemento bromo obtidos utilizando um theta pinch. Para obtenção destes espectros foi montado e alinhado um espectrógrafo de incidência normal com circulo de Rowland de 3m. Este espectrógrafo chegou ao IF - UFF no ano de 2005 doado pela Universidade de Lund - Suécia. Nas sessões seguintes estão descritos o espectrógrafo e o procedimento experimental adotado para obtenção dos espectros na região do ultravioleta de vácuo.

4.1 Aparato Experimental

A fonte de luz para obtenção de espectros atômicos do bromo é o theta pinch descrito no capítulo 2. As principais características desta máquina são: taxa de repetição de oito disparos por minuto a 14 kV, banco de capacitores com $30,2 \mu\text{F}$, indutância típica de 100

mH e resistência total da ordem de $5 \text{ m}\Omega$. O sistema de chaveamento elétrico consiste de um spark gap pressurizado. A bobina de campo utilizada tem diâmetro de 100 mm e envolve um tubo de pirex onde o plasma é gerado. A radiação eletromagnética emitida pelo theta pinch é colhida axialmente conforme ilustrado nas figuras 4.1 e 4.2. O espectrógrafo é acoplado à vácuo através de uma fenda regulável (normalmente emprega-se a abertura de $8 - 20 \mu\text{m}$ de largura) e 10 mm de altura.

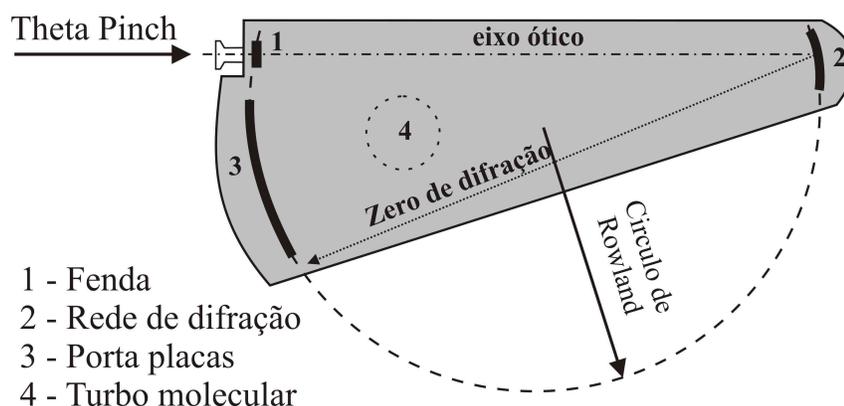


Figura 4.1: Diagrama mostrando o eixo óptico do espectrógrafo de incidência normal e alguns de seus elementos

A temperatura do plasma produzido no theta pinch pode ser ajustada variando-se a tensão de carga do banco de capacitores e a pressão do gás de trabalho. Na produção de espectro é comum ser usado o hidrogênio ou hélio como gás de base (tampão). A pressão parcial do gás de trabalho e do gás tampão também determina o grau máximo de ionização que pode ser atingido. Para se realizar a tarefa de classificação iônica é necessário comparar o espectro produzido conforme a energia do sistema é variada. Elevar-se a temperatura do plasma de maneira gradativa, de modo a se incluir a cada novo espectrograma, um único estágio iônico adicional, ou seja, no espectro seguinte tem-se todos os íons anteriores adicionados de mais um. Para se realizar isto experimentalmente é

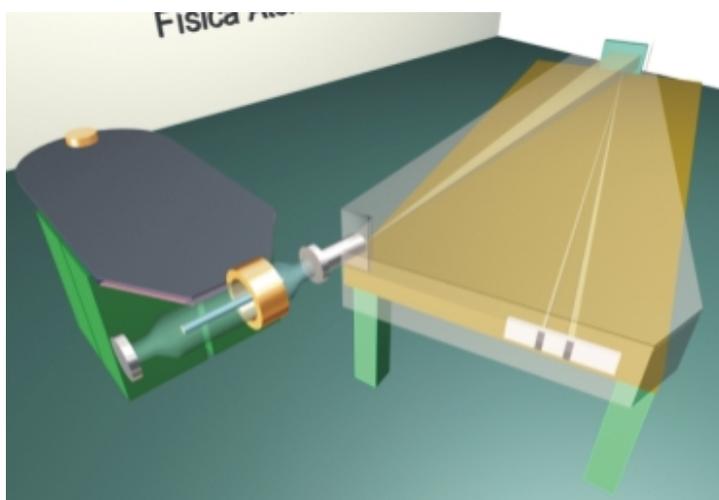


Figura 4.2: Diagrama ilustrando a obtenção do espectro eletromagnético utilizando um theta pinch e um espectrógrafo de incidência normal.

levado em conta o potencial de ionização do bromo nos seus diversos estágios de ionização, os dados experimentais sobre a eficiência de transferência de energia entre o banco de capacitores e o plasma, a tensão de carga do banco de capacitores e a pressão parcial de gás tampão e do gás de trabalho.

Para produção do espectro dos íons do bromo alguns cuidados especiais foram tomados uma vez que este elemento é nocivo, tanto ao meio ambiente quanto ao próprio sistema de vácuo. Por esta razão, um sistema de recuperação do bromo semelhante ao utilizado por Joshi [20] foi construído e está ilustrado na figura 4.3. O sistema de recuperação proposto é constituído por um recipiente de pirex com juntas cônicas esmerilhadas. Dentro do balão está colocado limalha de cobre que irá reagir com o vapor do bromo introduzido no tubo do theta pinch, este “trap” diminui em muito a quantidade de bromo que entra no sistema de difusão.

Para registrar os espectros foi utilizado placas fotográficas especiais para a região de ultravioleta de vácuo Q-Plates da Ilford, que são posicionadas no círculo de Rowland dentro do espectrógrafo de incidência normal. Este espectrógrafo está equipado com uma

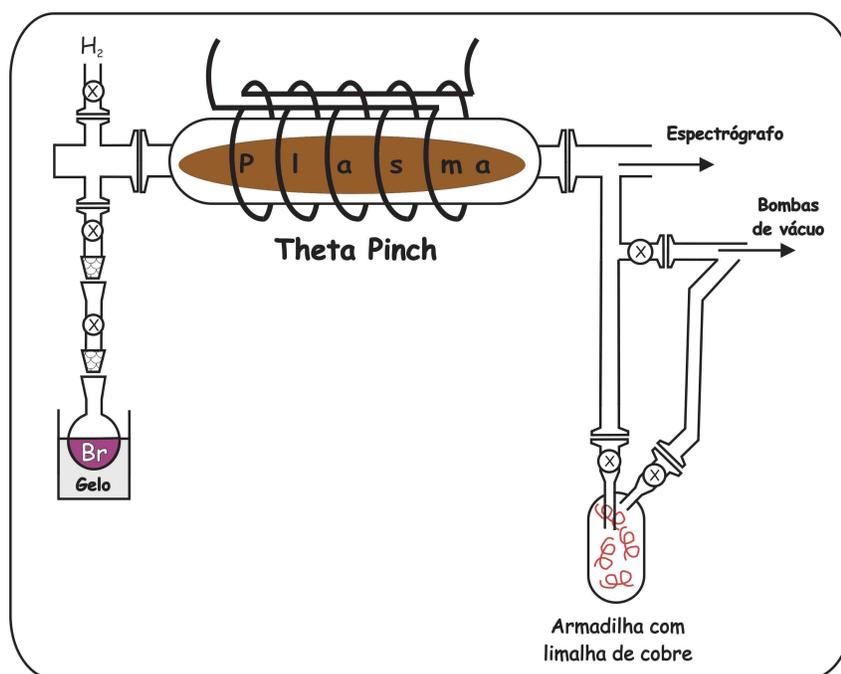


Figura 4.3: Desenho esquemático do aparato para produção e recuperação de vapor de bromo.

rede de difração côncava com 1200 linhas/mm o que lhe confere uma dispersão recíproca de cerca de $2,77 \text{ \AA}/\text{mm}$, esta rede de difração foi coberta com um filme de ouro o que aumenta a reflexibilidade da radiação eletromagnética incidente sobre a rede. Uma foto da rede pode ser observada na figura 4.4.

Uma modificação, realizada na Suécia, na posição da rede de difração permite que seja registrado espectro abaixo de 200 \AA , o deslocamento da rede no círculo de Rowland fez com que o ordem zero se aproximasse do porta placa, permitindo assim que comprimentos de ondas menores fossem registrados. A figura 4.5 ilustra o deslocamento da rede de difração. A posição original da rede é a posição 1 a posição 2 representa a posição da rede após seu deslocamento.

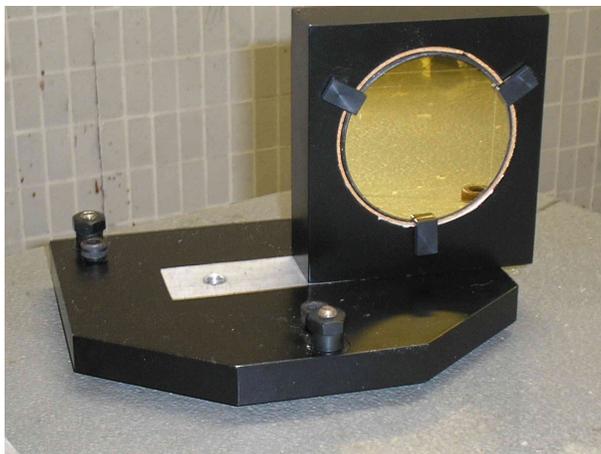


Figura 4.4: Fotografia da rede de difração cônica com 1200 linhas/mm.

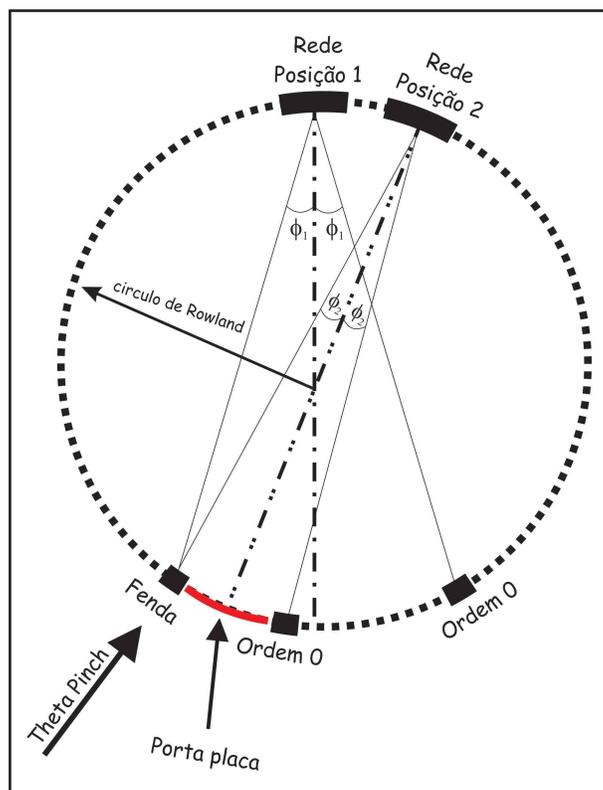


Figura 4.5: Desenho esquemático do deslocamento da rede de difração.

4.2 O experimento

Na realização do experimento para obtenção dos espectros com os diferentes estágios de ionização do bromo, as tensões e pressões utilizadas foram: 10, 11, 13 e 14 kV e 50, 75, 100, 150 e 200 mTorr respectivamente. Foram dados duas mil descargas do banco de capacitores para obtenção de cada espectrograma. É possível obter até oito espectrogramas nas placas de emulsão. O procedimento de manipulação do bromo encontra-se no apêndice B.

Antes de iniciar a obtenção do espectro do bromo alcançava-se as pressões de 10^{-6} Torr tanto no espectrógrafo quanto no tubo do theta pinch. Após alcançar esta pressão, iniciou-se o processo de expurgas com gás hidrogênio ajustando a pressão em alguns mTorr dentro do tubo do theta pinch. Alcançando tal pressão, iniciou-se as descargas do banco de capacitores para obtenção do primeiro oscilograma. A pressão dentro do espectrógrafo durante a realização do experimento era de aproximadamente 1×10^{-5} Torr. Este primeiro espectrograma é conhecido como espectrograma de referência, pois nele estão contidos as linhas espectrais de um gás conhecido, neste caso o hidrogênio, e dos demais elementos contidos no tubo que são impurezas. Todas as linhas contidas neste primeiro espectrograma são bastante úteis durante a etapa de classificação iônica e também são úteis na localização das linhas de referência (linhas já conhecidas na literatura). Ao final da obtenção do primeiro espectrograma pulou-se para a posição do espectrograma dois e posicionou-se a placa na posição do espectrograma três. Isso foi feito para se saber qual o espectrograma inicial. Na aquisição do espectrograma três fez-se o processo de expurga, agora utilizando o bromo. Antes de injetar o bromo dentro do tubo, o desvio foi acionando, isso implica em bombear o sistema utilizando o armadilha. No momento de injetar bromo no tubo tanto a válvula manual quando a entrada do espectrógrafo foram

fechadas, injetou-se bromo até a pressão dentro do tubo chegar próximo a atmosfera e após isso o sistema era bombeado utilizando o *bypass* até chegar à pressão de poucos mtorr. Só depois de regulada a pressão dentro do tubo era aberta a entrada do espectrógrafo, esta medida foi adotada para minimizar a entrada do bromo dentro do espectrógrafo já que o bromo é nocivo para rede de difração. Na aquisição do espectrograma três utilizou-se a mesma pressão e tensão utilizada na aquisição do primeiro espectrograma. Nos espectrogramas seguintes foram variados os valores da pressão e tensão sobre o banco capacitor, na intenção de acrescentar espectros de íons com um grau de ionização mais elevados.

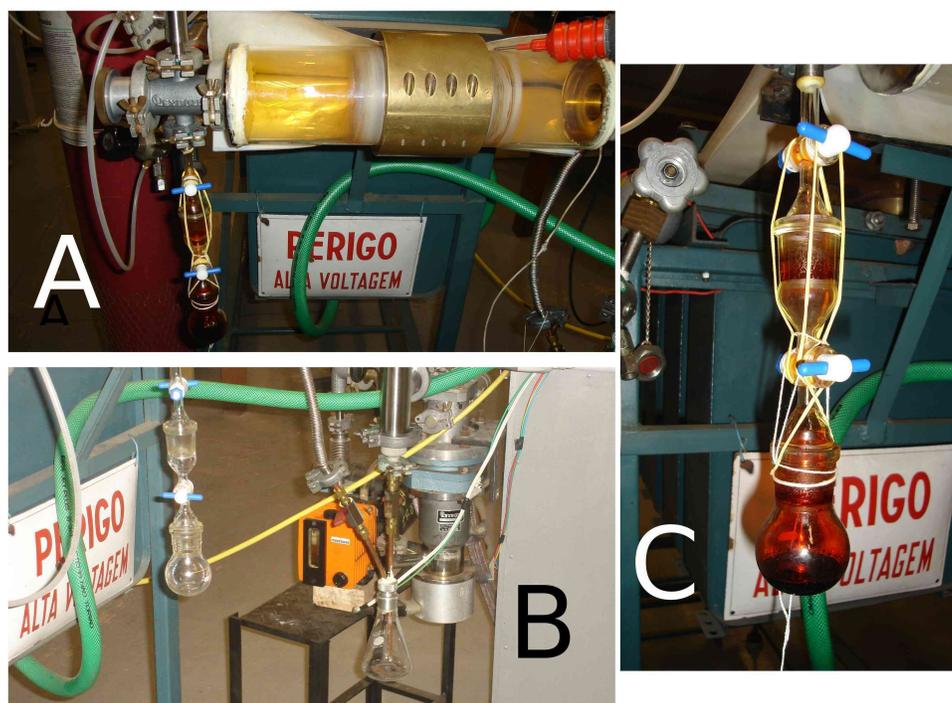


Figura 4.6: Detalhes da montagem utilizada no experimento com o bromo.

A figura 4.6 mostra detalhes da montagem utilizada para realização do experimento. Vê-se em **A** o tudo do theta pinch já alimentado com bromo no momento de expurga, em **B** vê-se o balão de fundo chato conectado as torneiras de vidro em série e o sistema de recuperação do bromo e em **C** o bromo já dentro do balão de fundo chato. Na figura 4.7

vê-se o resultado da reação limalha de cobre + bromo, o cobre colocado dentro do “trap” com a intenção de reagir com o bromo teve sua cor original completamente alterada.



Figura 4.7: Detalhes do “trap” após o experimento com o bromo.

4.3 Produção da tabela

As placas obtidas no experimento foram lidas usando um microfotodensitômetro comparador, um PC e um conjunto de programas para obtenção da tabela. Para dar início ao procedimento de leitura primeiro coloca-se a placa paralelamente a mesa, depois ajusta-se os filtros para que a variação entre as regiões mais claras e mais escuras forneça uma

tensão na fotomultiplicadora entre 0 e 5 volts. A posição de início da leitura é considerada a posição zero. O sentido do deslocamento da mesa é no sentido crescente dos comprimentos de onda. A velocidade da mesa durante a leitura foi de $211 \mu/s$ e a leitura de intensidade é realizada ao passo de $2 \mu m$. O sinal da fotomultiplicadora foi registrado num programa desenvolvido no laboratório pelo bolsista PIBIT - CNPq David Vaz. Este programa registra a leitura da placa identificando as posições das linhas espectrais e sua intensidade. Os valores das intensidade são ajustados em função da tensão obtida pela fotomultiplicadora e no caso particular da tabela produzida nesta tese, para tensão igual a 2,5V o valor da intensidade foi ajustado para ser igual a 100.

Sendo conhecida a dispersão recíproca e conhecida a distância entre as linhas até a posição de ordem zero foi possível determinar os valores dos comprimentos de onda mais intensos e alguns deles foram utilizados como linhas de referência. Plotando-se um gráfico dos comprimentos de onda das *linhas de referência versus a posição* e interpolando-se um polinômio de grau dois, foi possível determinar os demais comprimentos de onda da tabela. Ao final do processo de leitura foi possível determinar os comprimentos de onda registrado pelos experimentos. Os espectros obtidos estão na região espectral de 224 a 911 Å.

Comentários

Para introduzir bromo dentro do balão de fundo chato, primeiramente foi alcançado a pressão dentro do balão da ordem de 10^{-3} Torr. Isso foi possível ligando o sistema de vácuo do theta pinch. Após alcançado esta pressão as torneiras foram fechadas e o sistema balão + torneiras fechadas foi removido e levado até uma capela. Dentro da capela o bromo na fase líquida foi derramado dentro da primeira torneira com o auxílio

de um funil, após isso abria-se lentamente a primeira torneira fazendo com que apenas o bromo entra-se no sistema. Após a entrada do bromo a primeira torneira era fechada e a segunda torneira era aberta permitindo a entrada do bromo dentro do balão de fundo chato. Em um único procedimento foi possível preencher o balão com aproximadamente 10ml de bromo, o que foi suficiente para realizar um experimento.

O bromo é altamente reativo com alguns metais, por este motivo as peças do sistema de vácuo feitas dos metais: alumínio, latão e cobre (anéis de orings, flanges e conexões) foram substituídas por peças de aço inox.

Ao final dos experimentos o bromo contido no “*trap*” foi reduzido utilizando tetracloreto de carbono (CCl_4) e tiosulfato ($\text{S}_2\text{O}_3^{-2}$).

Ao final de cada um dos experimentos realizados fez-se manutenção em todo o sistema de vácuo. Todo o sistema de vácuo foi desmontado e limpo. Nos componentes das bombas difusoras e mecânica havia marcas da reação do bromo com suas partes metálicas e em seus óleos lubrificantes.

4.4 Conclusões

Utilizando um theta pinch como fonte de luz e um espectrógrafo de 3 m de círculo de Rowland dotado com uma rede de difração côncava com 1200 linhas/mm foi possível obter espectro na região entre 224 a 910 Å. O estudo da eficiência do theta pinch contribuiu para a maximização da transferência de energia do banco capacitor para o plasma, isso foi observado pelo fato de ter sido obtido transições de diferentes grau de ionização. Obteve-se transições referente a íons superior ao Br VI, cujo potencial de ionização é de 88,6 eV, mesmo contando com energia inferior a 3 kJ. Isso mostra a boa eficiência deste theta pinch comparada outro theta pinch [4] cuja energia disponível era de 14kJ permitindo

obtenção de espectros de Rb VII cujo potencial de ionização é de 136eV.

Obteve-se sucesso na utilização da armadilha projetado para recuperar o bromo. Ao final do experimento a cobre tinha reagido fortemente com o bromo injetado no sistema, tendo a cor original completamente alterada para negra.

Este resultado abre as portas para mais uma nova linha de pesquisa dentro do laboratório de plasma do IF-UFF, o de análise espectral de íons que não sejam gases nobres.

Capítulo 5

Conclusões gerais e perspectivas

Nesta tese foi apresentado os resultados obtidos na obtenção de espectros do bromo o que em si constitui um passo inicial para abertura de uma nova linha de pesquisa no Laboratório de Plasma e Espectroscopia Atômica do IF-UFF, a da análise espectroscópica de elementos químicos da família dos halogênios em altos estágios de ionização.

Durante a execução do projeto de doutoramento foi realizado um estudo aprofundado do theta pinch que possuíamos para torná-lo uma fonte de luz de melhor performance de modo a diminuir sua manutenção e produzir plasmas com maiores temperaturas para mesma energia armazenada no banco de capacitores do theta pinch. A análise dos resultados práticos e teóricos indicam que existe um valor ótimo para o raio do tubo a ser empregado no theta pinch, que maximiza a transferência de energia entre o banco de capacitores e o plasma. Este valor depende do sistema, notadamente do banco de capacitores. Pouco ou nenhuma influência sobre a indutância total do sistema pode ser creditada a formação de plasma, portanto na elaboração de um projeto para construção de um theta pinch, deve considerar apenas aos aspectos geométricos do circuito de descarga, que deve

sempre visar minimizar a indutância do sistema. Os resultados obtidos mostraram que é importante montar um banco com diversos capacitores arrançados em paralelo. Teoricamente o valor da capacitância é de pouca ou nenhuma influência. Trabalhando com o mesmo regime de energia, uma capacitância menor é compensada com o aumento da tensão. Do ponto de vista experimental com diversos capacitores em paralelo, é benéfico, pois possibilita a operação com menores tensões de carregamento, mas por outro lado é complica o acoplamento mecânico que produzir a menor resistência de contato possível.

Foi realizado um estudo teórico para o íons Br V. Com base nos resultados numéricos os parâmetros de energia foram ajustados de maneira semi-empírica e previmos quinze novos níveis para o bromo quatro vezes ionizados. Ainda há transições na faixa espectral abaixo de 300 Å que não são conhecidas para as configurações estudadas e, além disso, a demanda por informação na região abaixo de 300 Å incentivam em continuar o projeto de determinação de novos níveis atômicos não apenas do bromo, como também para os demais elementos da família dos halogênios. A confirmação das previsões teórica posteriormente obtidas por Tauheed [35] dá confiança na pertinência de nossos cálculos realizados. Nossos cálculos apontam que as configurações $4s4p5p$ e $4s4p6d$ do Br V têm forte interação com as configurações já conhecidas e suas transições com maior probabilidade de transição encontram-se na região abaixo de 350 Å. Com a tabela obtida nesta tese será possível dar continuidade ao projeto e determinar as energias destas configurações.

Nesta tese foi analisada a configuração $4s4p5p$ do Kr VI e reduzindo o valor *ab initio* de nossos cálculos para as integrais de Slater em 13%, diminuimos a diferença entre os valores dos níveis de energia calculados com este ajuste e já observados obtidos experimentalmente por outros pesquisadores para 5% apenas. Com base no conjunto de

valores calculados após o ajuste das integrais de Slater e utilizando dados experimentais de transições produzidas em um experimento recente sobre o espectro do criptônio realizado no CIOp conseguimos avanços significativos na determinação da estrutura de níveis de energia do íon citado. O novo experimento permitiu uma significativa melhora na classificação iônica do espectro gerado o que facilitou em muito o trabalho de análise. Um experimento bem feito é crucial para o sucesso do trabalho de análise espectral. A previsão teórica foi confirmada experimentalmente e pudemos com isso determinar dezessete dos dezoito níveis de energia desta configuração. Os novos níveis de energia da configuração $4s4p5p$ foram confirmados através das sessenta e quatro transições atômicas com níveis das configurações $4s4p4d$, $4s4p5s$, $4s^25p$ e $4p^3$. Como perspectiva futura, temos a intenção de determinar os níveis da configuração $4s4p6d$, a qual possui forte interação com as configurações já conhecidas.

Uma parte experimental desta tese utilizou-se um theta pinch como fonte de luz e um espectrógrafo de 3 m de incidência normal, visando a produção e registro de espectros na região do ultravioleta de vácuo. O estudo da eficiência de transferência de energia entre o banco de capacitores do theta pinch para o plasma contribuiu para obtenção de transições dos íons em diferente grau de ionização do bromo. Projetamos uma armadilha (“*trap*”) para o aprisionamento dos vapores de bromo que mostrou-se eficiente. Após a leitura das placas obtidas nos experimentos, obtivemos uma tabela com transições atômicas pertencentes a íons do bromo na faixa espectral de 224 a 911 Å. Motivados por este bom resultado, em um futuro próximo, após manutenção total do theta pinch e em todos os sistemas de vácuo, novos experimentos com o intuito de obter linhas espectrais abaixo de 300 Å serão realizados. No rol dos elementos químicos de interesse estão dois gases: o silano e o metano. Há poucos dados sobre o silício na região abaixo de 500 Å. O silano é

um gás SiH_4 com quatro átomos de hidrogênio e um de silício. Acreditamos ser bastante promissora a ação do hidrogênio desta molécula após ser quebrada sua ligação com o silício. O hidrogênio é um agente potencial no processo de transferência de energia para o silício e na faixa estudada abaixo de 300 \AA não produziria nenhuma linha espectral. Pela influência do hidrogênio há chance de obter-se espectros bem energéticos sem modificar outro parâmetro energético do theta pinch atual. O mesmo acontece com o metano, CH_4 que têm quatro átomos de hidrogênio e um de carbono. O espectro formado a partir deste gás daria condições de obtermos um conjunto de linhas de referência bastante confiáveis para construção de tabelas, isso porque na região próxima a 250 \AA há carência de referências e algumas impurezas como o nitrogênio e oxigênio tem que ser introduzidos de propósito como marcador de referência. O carbono, como é sabido, é uma das impurezas mais importantes para o trabalho de análise espectral.

Apêndice A

Sonda Magnética

A determinação do campo magnético é feita experimentalmente usando uma sonda cujo princípio de funcionamento se baseia na lei de Faraday. A seguir é descrito os detalhes de sua construção como diâmetro e número de espiras bem como circuito integrador passivo usado. A solução da segunda lei de Kirchhoff proporciona as equações que relacionam a força eletromotriz (fem) induzida V_{ind} com o campo magnético a ser medido.

A.1 Considerações físicas para sonda magnética

Como a corrente que circula nas bobina do theta pinch oscila com o tempo, o campo magnético pode ser obtido a partir da lei de indução de Faraday que diz que a fem induzida é proporcional ao taxa temporal de variação do fluxo magnético. Assim uma bobina, com um número apropriado de espiras, terá em seus terminais uma fem que será proporcional a derivada do campo magnético oscilante. A questão experimental seria qual a dimensão desta bobina e número apropriado de espiras? Além disso é necessário realizar uma integração experimental do sinal da fem produzida nos terminais da dita bobina, que

doravante chamaremos de sonda magnética.

A sonda magnética utilizada foi feita enrolando-se cinco espiras em torno do núcleo de um cabo coaxial 50 ohms. O núcleo consiste da região interna do cabo a partir da blindagem (“terra”) externa com diâmetro aproximado de 4 mm. Esta montagem blindada a sonda de sinais eletromagnéticos espúrios. Dada as dimensões diminutas da sonda, a variação espacial do campo magnético sobre ela pode ser desprezada e o fluxo magnético pode ser expresso pelo produto da área da sonda A pelo campo magnético B . Como a seção reta da sonda é circular sua área pode ser expressa por:

$$A = \frac{\pi d^2}{4} = \frac{\pi(4 \times 10^{-3})^2}{4} = 4\pi \mu m^2 \quad (\text{A.1})$$

A tensão induzida nas espiras de acordo com a Lei de Faraday é:

$$V_{ind} = -\frac{d\phi_B}{dt} = -A\frac{dB}{dt} \quad (\text{A.2})$$

A última relação da equação anterior será verdadeira se a seção transversal for pequena de modo que o campo magnético não varie apreciavelmente sobre a área da sonda. Então como pode ser visto, o campo magnético será dado pela integração direta da tensão induzida V_{ind} .

Se o campo magnético possuir uma dependência temporal harmônica a teoria de fasores pode ser usada. Arranjando um resistor R em série com um capacitor C à saída da sonda magnética, o sinal nos terminais do capacitor será proporcional a tensão integral do sinal sobre a sonda, e portanto proporcional ao campo magnético, com constante de proporcionalidade dada pela relação fasorial entre os sinais. A questão experimental é qual seria os valores apropriados para a resistência R e para a capacitância C . Este arranjo RC tem ampla aplicação em eletrônica e constitui um integrador passivo (sem fonte de energia). O circuito integrador utilizado nesta tese é constituído por um resistor

de resistência igual a $15 \text{ k}\Omega$, um capacitor de capacitância igual a 10 nF . O esquema elétrico da montagem esta ilustrado na figura A.1.

Mecanismo de funcionamento da sonda: A tensão induzida, $V_{ind}(t)$, gera uma corrente que passa pelo resistor e capacitor. O perfil da tensão de oscilação temporal da tensão sobre o capacitor, $V_{osc}(t)$, juntamente com o ganho do integrador, dá o campo magnético. Fazendo uma suposição que o campo magnético oscila temporalmente com a forma: $B(t) = B_m \sin(\omega t)$, a relação entre a tensão induzida $V_{ind}(t)$ e o campo tem a seguinte forma:

$$V_{ind}(t) = -A\omega B_m \cos(\omega t) \quad (\text{A.3})$$

onde a frequência de oscilação, ω , é a frequência de descarga do banco de capacitores do theta pinch que pode ser expressa por

$$\omega = \sqrt{\frac{1}{L_{tp}C_{tp}} - \frac{R_{tp}^2}{4L_{tp}^2}} \quad (\text{A.4})$$

Os valores dos parâmetros na equação A.4 são referentes aos valores no theta pinch.

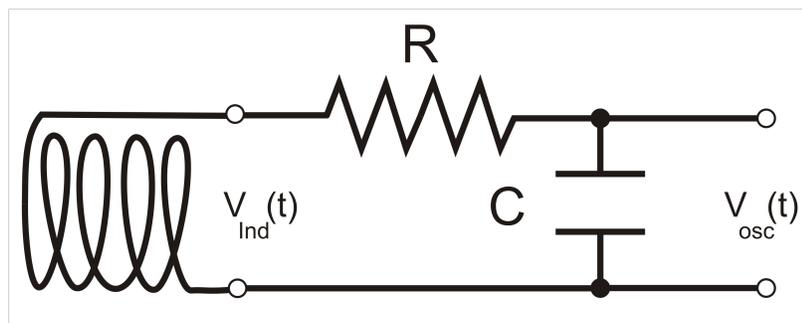


Figura A.1: Esquema elétrico do circuito da sonda magnética.

A figura A.2 mostra um diagrama de fasores com as tensões sobre os elementos do circuito mostrados na figura A.1. Se $V_R \gg V_C$, em outras palavras $R \gg \frac{1}{\omega C}$, a tensão de oscilação será dada pela relação:

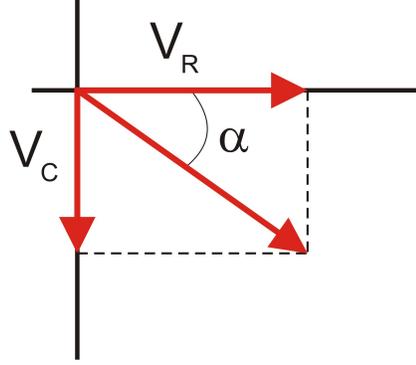


Figura A.2: Diagrama de fasores representando o circuito da sonda magnética.

$$V_{osc}(t) \equiv V_c = I\chi_c = \frac{I}{\omega C} = \frac{V_{ind}}{\omega C \sqrt{R^2 + \left(\frac{1}{\omega C}\right)^2}} \quad (\text{A.5})$$

$$V_{osc}(t) = \frac{1}{\sqrt{1 + R^2\omega^2 C^2}} V_{ind} \quad (\text{A.6})$$

O termo que relaciona a tensão induzida na sonda magnética e a tensão sobre o capacitor na equação A.6 é uma constante de proporcionalidade, chamada de ganho do circuito passivo que pode ser escrita como:

$$ganho \equiv G = \frac{1}{\sqrt{1 + R^2\omega^2 C^2}} \quad (\text{A.7})$$

Substituindo a equação A.3 em A.6 obtemos

$$V_{osc}(t) = \frac{1}{\sqrt{1 + R^2\omega^2 C^2}} A\omega B_m \quad (\text{A.8})$$

Sendo assim, a amplitude do campo magnético é obtido utilizando

$$B_m = \frac{\sqrt{1 + R^2\omega^2 C^2}}{A\omega} V_{osc}(t) = \frac{V_{osc}(t)}{GA\omega} \quad (\text{A.9})$$

Neste tese, os valores dos elementos de circuito utilizado foram:

- $R = 15 \text{ k}\Omega$
- $C = 10 \text{ nF}$
- $L_{tp} = 100 \text{ nH}$ (tipicamente)
- $C_{tp} = 30 \text{ }\mu\text{F}$
- $R_{tp} = 10 \text{ m}\Omega$ (tipicamente)

Exemplo: Para ilustrar como obtive os valores do \vec{B} considere a figura A.3, onde observa-se o perfil de oscilação da tensão sobre o capacitor da sonda magnética. A partir da figura A.3 determinarei o valor máximo do \vec{B} no segundo semi ciclo.

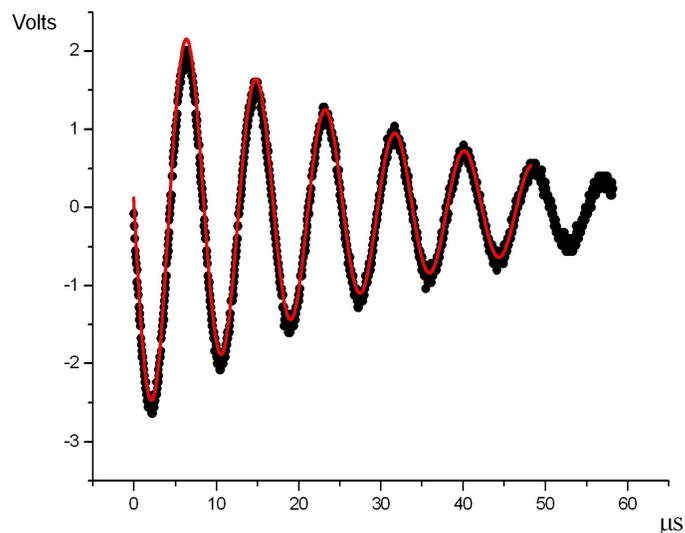


Figura A.3: Oscilograma da tensão sobre o capacitor obtido pela sonda magnética

A partir da equação A.4 obtem-se e frequência angular

$$\omega = \sqrt{\frac{1}{100 \times 10^{-9} \cdot 30 \times 10^{-6}} - \left(\frac{10^{-2}}{4 \times 10^{-7}}\right)^2} \simeq 0,6 \times 10^6 \text{ rad/s} \quad (\text{A.10})$$

o próximo passo é determinar o ganho através da equação A.7

$$G = \frac{1}{\sqrt{1 + (15 \times 10^3)^2 \cdot (0,6 \times 10^6)^2 \cdot (10 \times 10^{-9})^2}} \simeq 0,012 \quad (\text{A.11})$$

e por último o valor do $|\vec{B}|$ a partir da equação A.9. A partir da figura A.3 tem-se que o valor máximo de $V_{osc}(t)$ no segundo semi ciclo é de 2 Volts.

$$B_m = \frac{V_{osc}(t)}{G \cdot A \cdot \omega} = \frac{2}{0,212 \cdot 4\pi \times 10^{-6} \cdot 0,6 \times 10^6} \simeq 0,22T \quad (\text{A.12})$$

Considerando um fator de amortecimento, β , da forma:

$$\beta = e^{\frac{-R}{2L}t} \quad (\text{A.13})$$

e

$$\omega t = \frac{\pi}{2} \quad (\text{A.14})$$

o fator de amortecimento deve ser escrito na forma:

$$\beta = e^{\frac{-R_{tp}}{2L_{tp}} \frac{\pi}{2\omega}} \quad (\text{A.15})$$

Substituindo os valores de R_{tp} , L_{tp} e ω na equação A.15, obtemos um fator de amortecimento igual a 0,77. Conclui-se que o valor máximo para o primeiro semi ciclo é:

$$B_m = 0,22 \times 0,77 = 0,17T \quad (\text{A.16})$$

Estas foram as considerações feitas na obtenção do perfil do campo magnético do Theta Pinch.

Apêndice B

Manipulação do bromo

Neste apêndice estaremos descrevendo a forma utilizada na manipulação do bromo durante a realização do experimento.

O bromo é altamente reativo e nocivo, segundo Manual de Segurança adotado no Programa de Coletas de Resíduos de Laboratório do IMA - UFRJ [36], numa escala de 1 - 4, onde 1 = lesão mínima e 4 = lesão grave. O bromo tem índice 4 para contato por inalação, ingestão, contato com a pele ou com os olhos. No mesmo manual há um ranking das classes de produtos químicos oxidantes mais perigosos em laboratório encontram-se os bromatos e bromo.

Os cuidados tomados durante a manipulação do bromo nesta tese foram a utilização de óculos de proteção, luvas de PVC cano longo, aventar de PVC e protetor facial e toda manipulação foi realizada em capela. Estes cuidados foram tomados porque o bromo:

- Reage violentamente com produtos orgânicos, podendo causar incêndios.
- Causam queimadura de alto grau quando em contato com a pele.
- Sua inalação pode causar morte.

- Sua diluição foi sempre do produto no diluente, utilizamos tiosulfato ($S_2O_3^{-2}$) ou tetra cloreto de carbono (CCl_4), nunca ao contrário.
- A diluição foi realizada lentamente em porções mínimas.
- Usamos sempre material de vidro para homogeneização.

Além dos cuidados descritos acima não permitimos o contato do bromo com os metais alumínio, cobre e latão, isso porque ele é altamente reativo com estes metais.

A armazenagem do bromo deve ser em recipiente de vidro e deve ficar em ambiente refrigerado. Nos intervalos entre os experimentos optamos por armazenar o bromo na geladeira, isso porque observamos sua evaporação a temperatura ambiente tornando difícil o controle de vazamento pelas torneiras de vidro com núcleo de teflon. No momento do experimento o balão de fundo chato foi imerso em um recipiente de isopor contendo água e gelo, isso para que o bromo dentro do balão estivesse a uma temperatura inferior a temperatura ambiente facilitando o controle da injeção de bromo dentro do tubo do theta pinch.

Os cuidados acima nos permitiram manipular o bromo de uma forma segura evitando acidentes durante os experimentos.

Referências

- [1] Taccetti, JM; Intrator, TP; Wurden, GA, et all., Rev. Sci. Instrum., **74**, 10, 4314 (2003).
- [2] Coultas TA; Burke RJ; Krakowsk RA, Nuclear Fusion, **151** suplemento S, 1 (1974).
- [3] Boris JP; Shanny RA; Winsor NK, Bulletin of the American Physical Society, **17**, 11, 1029 (1972).
- [4] Luna FRT; Cavalcanti GH; Trigueiros AG, J. of Phys. D Appl. Phys., **31**, 7, 866 (1998).
- [5] A. Trigueiros, M. Machida, C.J.B. Pagan and J.G. Reyna Almandos, Nuclear Instrum. and Methods in Phys. Research Section A, **280**, 589 (1989).
- [6] Ying-Bing Jiang, Hong-Xia Zhang, Da-Jun Cheng, Si-Ze Yang, Thin Solids Films, **360**, 52 (2000).
- [7] Sato M, Nuovo Cimento, 23, 1 (1962)
- [8] Gabriel A H, Niblett G B F and Peacock N J, Journal Quant Spectrosc Radiat Transfer, **2**, 491 (1962)
- [9] Masahiro Yokota, Journal of the Physical Society of Japan, **18**, n^o 3, 419 (1963)

- [10] Jahoda FC, Little EM, Quinn W E, Ribe F L and Sawyer G A, Journal of Applied Physics, **35**, n^o 8, 2351 (1964)
- [11] A. Trigueiros, M. Machida, C.J.B. Pagan and J.G. Reyna-Almandos, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, **280**, 589 (1989)
- [12] Silbert P A, J. Appl Phys., **37**, 5, 2155 (1966).
- [13] Fábio de Oliveira Borges, Contribuição para o Estudo Teórico - Experimental de Sistemas Atômicos Complexos, Tese de Doutorado, IF - UFF (2007).
- [14] Livro: Theory of Atomic Structure and Spectra Autor: Robert D Cowan Editora: Edição: Ano: 1995.
- [15] Takeuchi N; Yasuoka K; Ishii S, IEEE Trans. Plasma Sci., **34**, 4, 1112 (2006).
- [16] Budhiraja, C.J. e Joshi, Y.N, Canadian Journal of Physics, **49**, 391 (1971).
- [17] Bloch, L and Bloch, E, Annales de Phys., **7**, 205 (1927);
- [18] Rao, AS and Rao KR, Nature, **131**, 170 (1933);
- [19] Rao, AS and Rao KR, Proc Phys Soc (London), **46**, 163 (1934);
- [20] Budhiraja, C.J. e Joshi, Y.N, Bulletin of the American Physical Society, **15**, issue 6, 795 (1970).
- [21] Cavalcanti GH and Farias EE, Rev. Sci. Instrum., **80**, 125109 (2009).
- [22] http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html em novembro de 2008.
- [23] <http://www.metalmundi.com> em 14 de outubro de 2010.

- [24] Meggers W. F., deBruin T. L. and Humphreys C. J., J. Res. Natl. Bur. Stand. (U.S.) **7**, 643 (1931).
- [25] Gremmer W., Z. Phys. **54**, 215 (1929) (Ger.)
- [26] Fawcett B.C., Jones B. B. and Winsol R., Vacuum ultraviolet spectra of multiply ionized gases, Proc Phys Soc London **78**, 1223 (1961).
- [27] Druetta M. and Buchet J. P., J. Opt. Soc. Am. **66**, 66, 433 (1976).
- [28] Curtis L. J. and Ramanujam P. S., Phys Scr, **27**, 417 (1983).
- [29] Tauheed A., Pinnington E. H., Ansbacher W and Kernahan J A, Phys Scr **42**, 431 (1990).
- [30] Pagan C. J. B., Reyna Almandos J. G., Mario Gallardo, Pettersson S. G., Cavalcanti G. H. and Trigueiros A. G., JOSA B **12**, 203 (1995).
- [31] Saloman E B, J. Phys Chem. Ref. Data, **36**, 211 (2007).
- [32] Trigueiros A G, Pettersson S G and Reyna Almandos, Phys. Scr., **34**, 164 (1986).
- [33] Gallardo M, Bredice F, Raineri M and Reyna Almandos J G, Appl. Opt. **28**, 4513 (1989).
- [34] G K Woodgate, livro: Elementary Atomic Structure, Oxford (1980)
- [35] Tauheed, A e Joshi, YN, Phys Scr, **80**, 25305 (2009).
- [36] Manual de informações sobre segurança, recolhimento e descarte de resíduos químicos nos laboratórios de pesquisa. Profa Responsável: Élen Vasques Pacheco. (www.ima.ufrj.br/coleita/index/downloads/manualeseguranca.ped) em 19/05/2011