

RESULTADOS INICIAIS DA ANÁLISE ESPECTRAL DO Br^{+4}

E.E. Farias^{1,2*}; F.O. Borges³; G.H. Cavalcanti¹; F.R.T. Luna⁴; A.G. Trigueiros¹

¹ UFF, Instituto de Física, 24.220-008 Niterói, RJ

² UFRR, Departamento de Física, 69.304-000, Boa Vista, RR

³ USP, Instituto de Física, 05.314-970, São Paulo, SP

⁴ Universidade Estadual de Santa Cruz, 45.662-900. Ilhéus, BA

Palavras-chave: Espectroscopia atômica, plasma pulsado, ultravioleta de vácuo.

RESUMO

No presente trabalho realizamos um estudo teórico sobre os níveis de energia e transições atômicas do bromo mediantemente ionizado, Br^{+4} . A previsão teórica foi feita usando um código computacional desenvolvido para átomos e íons contendo muitas configurações eletrônicas, que utiliza o método de Hartree Fock com correção relativística. Ajustando as integrais de Slater, reproduzimos com boa precisão os valores dos níveis de energia e comprimentos de onda conhecidos e disponíveis na literatura. Nossos resultados para probabilidade de transição indicam que poder-se-á observar na região de ultravioleta de vácuo, aproximadamente trinta e cinco novas linhas, que darão suporte à determinação de quinze novos níveis de energia deste íon. Após a submissão deste trabalho nossas previsões teóricas foram confirmadas experimentalmente e apresentamos aqui as comparações entre nossos cálculos e os valores experimentais obtidos. Além do cálculo, estamos propondo uma montagem experimental para produção e registro do espectro do bromo, que incluem um theta pinch como fonte espectral e um conjunto de espectrógrafos que permitem o registro de comprimentos de onda desde 2 até 220 nm. Por razão de segurança, sugerimos na montagem experimental um sistema recuperação do bromo injetado no theta pinch a partir da sua condensação na saída do tubo de descarga.

ABSTRACT

In this work, energy levels and transition array of bromine, in intermediate ionization stage, Br^{+4} , is studied. The theoretical predictions were obtained using a multi-configuration Hartree Fock code. We reproduce theoretically the energy levels and wavelengths very close to the experimental ones, by adjusting properly the Slater's integral. Our results to transition probability indicate that is possible to observe approximately thirty five new lines in vacuum ultra violet region that will give support to assignment of fifteen new energy levels for this ion. After submission of this work, our predictions were experimentally confirmed. Beside calculation, we have proposed a experimental assembly to generate and record the bromine spectrum that use a theta pinch machine and a set of spectrometers ranging from 2 to 220 nm and a special bromine recovery trap placed at end of discharge tube.

1. INTRODUÇÃO

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. Por exemplo, para o Br^{+4} são conhecidos apenas quinze níveis de energia [1]. 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. Esta máquina 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, pode-se formar plasma com temperaturas da ordem de 100 eV, o que é suficiente para se produzir até Br^{+5} , uma vez que as energias de ionização dos íons Br^+ , Br^{+2} , Br^{+3} e Br^{+4} são respectivamente: 21,8 eV, 36,0 eV, 47,3 eV e 59,0 eV. O conjunto destes fatores nos incentiva a implementar uma linha de pesquisa sobre a estrutura energética dos íons de bromo em estágios de ionização intermediários.

No presente trabalho apresentamos nossas previsões teóricas sobre a estrutura energética do Br^{+4} e sua comparação com alguns resultados experimentais encontrados na literatura. Além disso, sugerimos um arranjo experimental que poderá ser utilizado para confirmar a existência dessas novas transições.

2. MODELO E RESULTADOS TEÓRICOS

As primeiras linhas espectrais do bromo foram registradas por L. Bloch e E. Bloch em 1927 [2]. 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 [3,4] que

* eliel@if.uff.br

determinaram doze transições atômicas e sete níveis do Br^{+4} . Em 1970, utilizando um espectrógrafo de incidência normal de três metros de comprimento e um theta pinch como fonte de luz [5], Budhiraja e Joshi obtiveram quatro mil linhas espectrais do átomo e íons de bromo, 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[1] confirmaram as transições e níveis já observados por Rao e Rao e designaram mais dez transições e dois novos níveis do íon Br^{+4} .

Motivados por um experimento[5] bem sucedido e um estudo sistemático de análise da eficiência de transferência de energia para o plasma[6], além de poder contar com uma fonte de luz similar a utilizada por Budhiraja e Joshi, iniciamos o estudo teórico sobre o íon Br^{+4} .

Para registro do espectro dispomos de um espectrógrafo de incidência normal com círculo de Rowland de três metros e rede de difração côncava com 1200 ranhuras por milímetros, o que permite registrar comprimentos de onda desde 18 até 220 nm aproximadamente. Contamos ainda com outro espectrógrafo de incidência rasante, que opera de 0,2 a 80 nm. Baseado no trabalho de Luna[7] e Cavalcanti[6], temos feito medidas da eficiência de transferência de energia do theta pinch empregado, 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^{+4} é feita se empregando um código numérico aperfeiçoado pelo professor Robert D. Cowan[8], que resolve a equação de Schrödinger para átomos complexos, tendo-se a opção de se usar o método Hartree Fock com correção relativística. Utilizamos o resultado fornecido para força de osciladores ponderados como critério para avaliar as transições atômicas que teriam intensidade suficiente para serem registradas nas placas de emulsão espectroscópicas. Concluímos que é possível observar aproximadamente trinta e cinco novas transições e determinar sete novas configurações do íon Br^{+4} .

2.1 MODELO TEÓRICO

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

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

Para resolver equações com mais de uma variável é sempre conveniente usar aproximações que permitam separar as variáveis de forma independente. Usando-se a aproximação de campo central, a função de onda poderá ser escrita na forma:

$$\psi(r, \theta, \phi, m_s) = \frac{1}{2} P_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \chi_{ms} \quad (2)$$

onde: $P_{nl}(r)$ são as funções radiais, os $Y_{lm}(\theta, \phi)$ são os funções angulares e χ_{ms} é o espinor de Pauli. O método numérico utilizado para solucionar a equação(1) basea-se no método Hartree-Fock, que consiste basicamente em supor que a função de onda Ψ que descreve o sistema atômico é dada por um determinante de Slater[9] e a partir disso, utilizar o teorema variacional:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle \geq E_{\text{exata}} \quad (3)$$

O processo de cálculo se inicia usando-se o potencial Coulombiano na equação (1) como potencial de entrada, e a partir de sua solução se obtém a distribuição de probabilidade para o sistema de partículas, $|P_{nl}(r) / r|^2$, 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 (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:

$$\langle \psi_{\text{entrada}} | H | \psi_{\text{entrada}} \rangle - \langle \psi_{\text{saída}} | H | \psi_{\text{saída}} \rangle \leq \xi \quad (4)$$

onde ξ é um valor considerado satisfatório.

Os códigos computacionais utilizados para resolver a equação (1) e obter os parâmetros atômicos de interesse são: RCN, RCG e RCE. Estes programas foram desenvolvidos pelo Prof Robert Cowan e a estrutura deles encontra-se na referência [8]. Os programas RCN e RCG resolvem respectivamente as partes radiais e angulares das autofunções descritas na equação (2), enquanto o programa RCE é utilizado para realizar um cálculo semi-empírico, onde os parâmetros atômicos teóricos são ajustados através do método dos mínimos quadrados, de forma a fornecer os valores dos níveis de energia com a melhor concordância com os valores observados. A principal vantagem destes programas é que seu código fonte está disponível na internet em linguagem Fortran. Uma versão deles foi instalada na rede de computadores do Instituto de Física da UFF e disponibilizada aos usuários da rede depois de um trabalho de ajuste na sintaxe para permitir a compilação pelo compilador Intel Fortran.

2.2 RESULTADO TEÓRICO

Até o envio deste artigo, os níveis de energia conhecidos para do Br^{+4} [1] eram os níveis $^2P_{1/2}$ e $^2P_{3/2}$ pertencentes à configuração eletrônica fundamental $4s^2 4p^1$ e os níveis $^2P_{1/2}$, $^2P_{3/2}$, $^2S_{1/2}$, $^2D_{5/2}$, $^2D_{3/2}$, $^4P_{5/2}$, $^4P_{3/2}$ e $^4P_{1/2}$ pertencente configuração excitada $4s^1 4p^2$. Além desses, eram conhecidos dois níveis, $^2D_{5/2}$ e $^2D_{3/2}$, pertencentes à configuração $4s^2 4d^1$, O singlete $^2S_{1/2}$ pertencente à configuração $4s^2 5s^1$ e por fim, os dupletos $^2P_{1/2}$ e $^2P_{3/2}$ pertencentes à configuração $4s^2 5p^1$, que é a de maior energia determinada experimentalmente. As transições atômicas observadas experimentalmente estão

ilustradas na figura 01 mostrando as energias dos quinze termos.

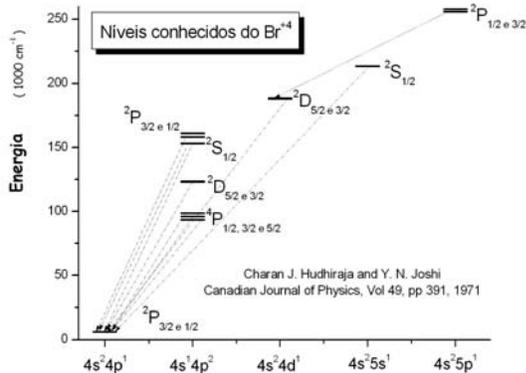


Figura 1 - Diagrama de Grotrian para as transições conhecidas do Br^{+4} .

No cálculo numérico realizado, englobamos seis novas configurações além das citadas, a saber: $4p^3$, $4s^2 4f^1$, $4s^2 5d^1$, $4s^2 6s^1$, $4s^2 6p^1$ e $4s^2 7s^1$. Estas configurações foram introduzidas a fim de verificarmos a probabilidade de transição envolvendo seus níveis de energia e, verificar quais poderiam ser observadas na região espectral entre 2 a 220 nm.

Tabela 1 - Comparação entre os valores de energia conhecidos experimentalmente e os produzidos neste trabalho.

Configuração	Níveis	^A Experimental (cm ⁻¹)	Calculado (cm ⁻¹)
4s ² 4p ¹	² P _{1/2}	0,0	0,0
	² P _{3/2}	6088,6	5600
4s ¹ 4p 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
4s ² 4d ¹	² D _{3/2}	187982,2	192693
	² D _{5/2}	188604,3	193182
4s ² 5s ¹	² S _{1/2}	213507,6	218228
4s ² 5p ¹	² P _{1/2}	255993,1	259152
	² P _{3/2}	257924,0	260841

^A Budhiraja C J e Joshi Y N [1].

Reduzindo as integrais de Slater para 83% do seu valor *ab initio*, os resultados para os níveis de energia estavam em excelente acordo com os que eram conhecidos experimentalmente. A tabela 01 mostra uma comparação entre os valores obtidos neste trabalho e os valores experimentais determinados por outros autores. Pode ser observado que as dife-

renças entre os valores teóricos e experimentais foram inferiores a 10%.

O cálculo teórico realizado neste trabalho tem importância fundamental no projeto de pesquisa experimental, pois ele nos diz em qual região espectral se encontra as transições atômicas mais intensas e desta maneira pode-se projetar um experimento de alto rendimento. A partir do resultado numérico para o conjunto de transições, escolhemos as transições mais intensas usando o resultado para a força de osciladores ponderados como critério de seleção. Na figura 02 construímos um diagrama de Grotrian, onde apresentamos as mais prováveis transições atômicas das novas configurações incluídas no cálculo.

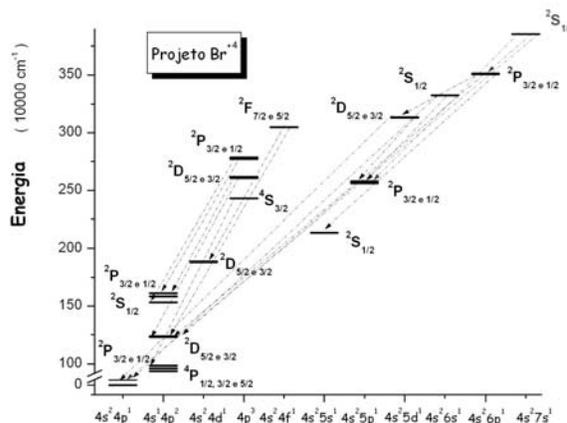


Figura 2 - Diagrama de Grotrian com transições do Br^{+4} .

Algumas das linhas observadas por Budhiraja e Joshi possuem uma probabilidade de transição 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. Nosso critério de corte na construção da figura 02 e da tabela 02 foi o de não expressar transições cuja probabilidade de transição seja inferiores a 10^9 . Como os valores dos níveis de energia calculados estão de acordo com os valores experimentais conhecidos previamente da literatura [1], acreditamos que os valores de energia para os outros níveis estarão próximos aos que serão observados experimentalmente. Estamos convencidos que teremos condições de observar pelo menos 15 níveis de energia e 35 novas transições.

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 02. Posteriormente a esta apresentação, mais precisamente em julho de 2009, Tauheed [10] determinou novos níveis de energia e transições atômicas para configurações do Br^{+4} que estavam incluídas em nosso projeto além das seguintes: $5s^1 5p^2$, $5p^3$, $5s^1 5p^1 5d^1$ e $5s^1 5p^1 6s^1$.

Tabela 2 - Transições intensas das novas configurações do Bromo quatro vezes ionizado.

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

Uma comparação entre os valores dos níveis de energia e as energias de centro de gravidade (E_{AV}) publicadas na referência [10] com os valores calculados e apresentados no ITA em 2008 estão apresentados nas tabelas 03 e 04, mostrando uma diferença entre eles inferior a 5%. Com base nesta comparação é possível concluir a acuidade de nossos cálculos e sobre a pertinência de nosso 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 fique um pouco mais afastada do valor experimental. O conjunto destes fatos nos dá confiança sobre a adequação de nossos cálculos e na exequibilidade do projeto de determinação de novas configurações para íons do bromo.

Tabela 03 - Comparação entre os valores dos níveis publicados por ^BTauheed e os calculado neste trabalho.

Configuração	Níveis	^B Experimental (cm^{-1})	Calculado (cm^{-1})
$4p^3$	$^2P_{1/2}$	265427 ^a	277109
	$^2P_{3/2}$	266364 ^z	278611
	$^2D_{3/2}$	240184 ^β	260504
	$^2D_{5/2}$	241399 ^δ	261505
	$^4S_{3/2}$	243562	243103
$4s^2 4f^1$	$^2F_{5/2}$	294338 ^e	304764
	$^2F_{7/2}$	294644 ^h	304794
$4s^2 5p^1$	$^2P_{1/2}$	254038	259152
	$^2P_{3/2}$	255819	260841
$4s^2 6p^1$	$^2P_{1/2}$	346265	350405
	$^2P_{3/2}$	347363	351179
$4s^2 5d^1$	$^2D_{3/2}$	315935	320700
	$^2D_{5/2}$	316178	320922
$4s^2 6s^1$	$^2S_{1/2}$	328742	332067
$4s^2 7s^1$	$^2S_{1/2}$	381895	385368

^BTauheed A [10]

^aNível 77% puro; ^βNível 64% puro; ^zNível 70% puro; ^δNível 70% puro; ^eNível 51% puro; ^hNível 76% puro

Tabela 4 - Comparação entre as energias de centro de gravidade publicados por ^BTauheed e os calculado neste trabalho.

Configuração	Parâmetro	^B Experimental (cm^{-1})	Calculado (cm^{-1})
$4p^3$	E_{av}	265603	254102
$4s^2 4f^1$	E_{av}	309012	297367
$4s^2 5p^1$	E_{av}	264458	252875
$4s^2 6p^1$	E_{av}	347428	343518
$4s^2 5d^1$	E_{av}	316657	313105
$4s^2 6s^1$	E_{av}	328964	324664
$4s^2 7s^1$	E_{av}	381953	377964

^BTauheed [10]

2.3 EXPERIMENTO PROPOSTO

Nossa fonte de luz para estudos espectroscópicos é um theta pinch[6]. As principais características desta máquina são: taxa de repetição de cinco disparos por minuto a 14kV, banco de capacitores com 30,2 μ F, indutância típica de 100 mH e resistência total de 5,3m Ω . O sistema de chaveamento elétrico consiste de um *sparkgap* pressurizado. A bobina de campo tem diâmetro de 70 mm e envolve um tubo de quartzo onde o plasma é gerado. A radiação eletromagnética emitida pelo theta pinch é colhida axialmente conforme ilustrado na figura 03. Os espectrógrafos são acoplados a vácuo através de uma fenda de 8 μ m de largura e 10 mm de altura.

Para produção do espectro dos íons do bromo deve-se tomar alguns cuidados especiais, 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 se-

melhante ao utilizado por Joshi[11], foi construído e está ilustrado na figura 04. O sistema de recuperação proposto é constituído por um cilindro de cobre, um balão de pirex com duas juntas e um recipiente com isolamento térmica. Dentro do recipiente está colocado um cilindro de cobre por onde passa os vapores de bromo. O líquido refrigerante consiste uma mistura de álcool e N₂ líquido. A baixa temperatura da parede do cilindro de cobre é responsável pela condensação dos vapores de bromo introduzidos no theta pinch. O vapor condensado será depositado em um tubo pirex de duas juntas cônicas ligadas à saída do tubo de cobre.

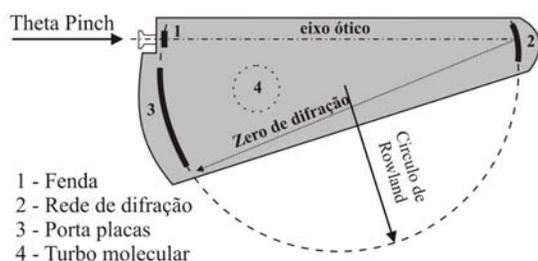


Figura 3 - Diagrama mostrando o eixo óptico do espectrógrafo de incidência normal, e alguns de seus elementos.

Para registrar os espectros usaremos placas fotográficas especiais para a região de ultravioleta de vácuo Q-Plates da Ilford, que são colocadas em um espectrógrafo de incidência normal, com círculo de Rowland de 3m. Este espectrógrafo está equipado com uma rede de difração côncava com 1200 linhas/mm o que lhe confere uma dispersão recíproca de cerca de 2,77 Å/mm. Usando um densitômetro comparador para leitura das placas e um conjunto de programas para obtenção de tabelas, determinaremos os comprimentos de onda com incerteza na ordem de 0,002 nm. Para registro de comprimentos de onda abaixo de 27 nm empregaremos outro espectrógrafo de incidência rasante com círculo de Rowland com 2m que está equipado com uma rede côncava 576 linhas/mm.

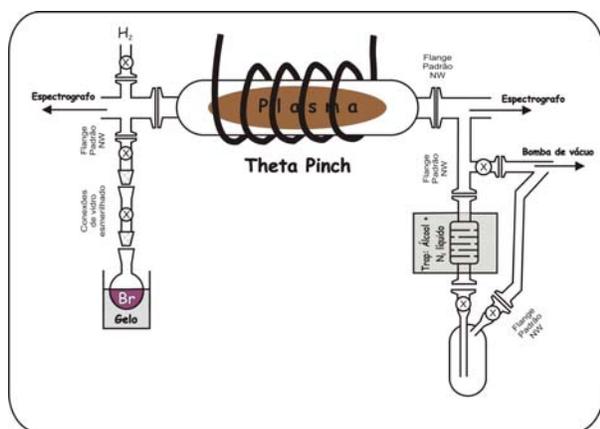


Figura 04: Desenho esquemático do aparato proposto para produção e recuperação de vapor de bromo.

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. No caso de produção de espectro de metais alcalinos, é usado o hidrogênio ou hélio como gás de base (tampão). A pressão parcial de vapor metálico 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. Eleva-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 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 vapor metálico. Para produção dos espectros com os diferentes estágios de ionização do bromo, iremos variar a tensão sobre o banco capacitor entre 8 kV e 14 kV e a pressão entre 50 e 200 mTorr. Será dado um total de mil descargas do banco de capacitores para cada valor de tensão. No total, serão dados 6000 disparos para obtermos seis espectrogramas com linhas espectrais do bromo na faixa de 8 a 220nm. A figura 03 ilustra alguns detalhes de como o espectro produzido por um theta pinch é coletado e dispersado em um espectrógrafo de incidência normal.

3. CONCLUSÃO

Projetamos um experimento para registro de transições de bromo quatro vezes ionizado com base nos resultados numéricos para um cálculo Hatree Fock multiconfiguracional. Ajustamos de maneira semi-empírica os parâmetros de energia e determinamos teoricamente quinze novos níveis de energia que geram trinta e cinco novas transições para o bromo quatro vezes ionizados cuja probabilidade de transição é maior ou igual a 10⁹. Nossas previsões foram confirmadas posteriormente por Tauheed[10]. A metodologia e arranjo experimental apresentado podem ser empregados para confirmar a existência dessas novas transições.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao CNPq e FAPERJ pelo auxílio financeiro na aquisição de equipamentos de vácuo e para execução deste projeto. Ao Departamento de Química Orgânica da UFF, na pessoa do Prof. Msc Nelson Ângelo de Souza e ao IF-UFF pela doação de 270ml de Br.

REFERÊNCIAS

1. BUDHIRAJA, C.J.; JOSHI, Y.N., *Canadian Journal of Physics* 49 (1971) 391-393.
2. BLOCH, L.; BLOCH, E., *Annalen der Phys.* 7 (1927) 205-206.
3. RAO, A.S.; RAO, K.R., *Nature* 131 (1933) 170-172.

4. RAO, A.S.; RAO, K.R., *Proc. Phys Soc (London)* 46 (1934) 163-168.
5. BUDHIRAJA, C.J.; JOSHI, Y.N., *Bulletin of the American Physical Society*, 15 (1970) 795-799.
6. CAVALCANTI, G.; FARIAS, E., *Review of Scientific Instruments* 80 (2009) 125109 (5 p.).
7. LUNA, F.R.T; CAVALCANTI, G.H.; TRIGUEIROS, A.G., J. *Phys. D: Applied Physics* 31 (1998) 886-891.
8. COWAN, R.D., *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, Hardcover, 2001.
9. WOODGATE, G.K., *Elementary Atomic Structure*, Oxford (1980)
10. TAUHEED, A.E.; JOSHI, Y., *Phys Scripta* 80 (2009) 025305 (5 p).
11. JOSHI, Y.N.; BUDHIRAJA, C.J., *Canadian Journal of Physics* 49 (1971) 670-677.