

JHONATHA RICARDO DOS SANTOS

**DESENVOLVIMENTO DE UM CÓDIGO COMPUTACIONAL PARA
SIMULAÇÃO E ANÁLISE DE ESPECTROS ATÔMICOS**

Guaratinguetá

2012

JHONATHA RICARDO DOS SANTOS

DESENVOLVIMENTO DE UM CÓDIGO COMPUTACIONAL
PARA SIMULAÇÃO E ANÁLISE DE ESPECTROS ATÔMICOS

Trabalho de Graduação apresentado ao Conselho de Curso de Graduação em Física da Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, como parte dos requisitos para a obtenção do diploma de Graduação em Bacharelado em Física.

Orientadora: Dra. Maria Esther Sbampato

Coorientador: Prof. Dr. Maurício Antônio Algatti

Guaratinguetá

2012

Santos, Jhonatha Ricardo dos

S237d Desenvolvimento de um Código Computacional para Simulação
e Análise de Espectros Atômicos Trabalho / Jhonatha Ricardo dos Santos
– Guaratinguetá : [s.n], 2012.

65 f.: il.

Bibliografia: f. 64-65

Trabalho de Graduação em Bacharelado em Física – Universidade
Estadual Paulista, Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, 2012.

Orientadora: Maria Esther Sbampato

Coorientador: Prof. Dr. Maurício Antonio Algatti

1. Espectrometria de emissão 2. Espectroscopia de emissão atômica.
I. Título

CDU 543.421

**DESENVOLVIMENTO DE UM CÓDIGO COMPUTACIONAL PARA
SIMULAÇÃO E ANÁLISE DE ESPECTROS ATÔMICOS**

JHONATHA RICARDO DOS SANTOS

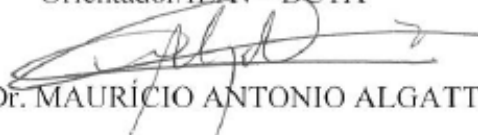
ESTE TRABALHO DE GRADUAÇÃO FOI JULGADO ADEQUADO
COMO PARTE DO REQUISITO PARA A OBTENÇÃO DO DIPLOMA DE
GRADUADO EM FÍSICA BACHARELADO

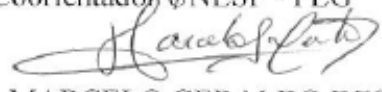
APROVADO EM SUA FORMA FINAL PELO CONSELHO DE CURSO DE
GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Prof.^a. Dr.^a. Isabel Cristina de Castro Nogueira
Coordenadora

BANCA EXAMINADORA:


Prof.^a. Dr.^a. MARIA ESTHER SBAMPATO
Orientador/IEAv - DCTA


Prof. Dr. MAURÍCIO ANTONIO ALGATTI
Coorientador/UNESP - FEG


Prof. Dr. MARCELO GERALDO DESTRO
IEAv - DCTA


Prof. Dr. ROBERTO YZUMI HONDA
UNESP - FEG

Dezembro de 2012

DADOS CURRICULARES

JHONATHA RICARDO DOS SANTOS

NASCIMENTO 06 de maio de 1985.

FILIAÇÃO Otto Ricardo dos Santos e Nadir Claudino dos Santos

Curso de Graduação em Bacharelado em Física – Universidade Estadual Paulista

Resumos expandidos publicados em anais de congressos

- 2012 SANTOS, J. R.; DESTRO, M. G.; SBAMPATO, M. E.; BUENO, P.; VICTOR A. R.; BARRETA, L. F. N.; **Análise do Espectro de Emissão do Disprósio em Lâmpada de Catodo Oco** In: 1º Simpósio de Ciência e Tecnologia do IEAv - I SCTL, 2012, São José dos Campos - SP. Anais do Simpósio de Ciência e Tecnologia do Instituto de Estudos Avançados. São José dos Campos - SP: IEAv/DCTA, 2012. p.95 - 100.
- 2012 BUENO P; DESTRO, M. G.; SBAMPATO, M. E.; NERI, J. W.; VICTOR, A. R.; BARRETA, L. F. N.; SANTOS, J. R.; **Espectroscopia optogalvânica de dois passos utilizando lâmpada de catodo oco de érbio** In: 5º Encontro Nacional Sobre Terras Raras,, 2012, João Pessoa - PB. Resumo. João Pessoa - PB: Universidade Federal da Paraíba - UFPB, 2012.
- 2011 DESTRO M. G.; SBAMPATO, M. E.; NERI, J. W.; SILVEIRA, C. A. B.; VICTOR, A. R.; BARRETA, L. F. N.; BUENO, P.; SANTOS, J. R.; **Separação isotópica a lasers de terras-raras** In: 5º Encontro Nacional Sobre Terras Raras, 2012, João Pessoa - PB. Resumo. João Pessoa - PB: Universidade Federal da Paraíba - UFPB, 2012.
- 2011 SANTOS, J. R.; BARRETA, L. F. N.; DESTRO, M. G.; SBAMPATO, M. E.; **Simulação do Espectro de Disprósio na Região de 570 nm a 650 nm** In: V Seminário de Iniciação Científica e Pós-Graduação do IEAv, 2011, São José dos Campos. Anais do Seminário de Iniciação Científica e Pós-Graduação do IEAv. São José dos Campos: Instituto de Estudos Avançados - IEAv, 2011. v.III. p.25 - 30.

Resumos publicados em anais de congressos e apresentação de pôster

- 2011 BUENO, P.; SBAMPATO, M. E.; BARRETA, L. F. N.; DESTRO, M. G.; VICTOR, A. R.; SANTOS, J. R.; NERI, J. W.; **Espectroscopia Optogalvânica de Érbio I na Região de 582 A 600 nm** In: XXXII CBRAVIC - Congresso Brasileiro de Aplicações de Vácuo na Indústria e na Ciência e Latin Display, 2011, Itajubá. Resumo de Trabalhos. Itajubá - MG: SBV, 2011.

- 2011 SBAMPATO, M. E.; SANTOS, J. R.; BARRETA, L. F. N.; VICTOR, A. R, BUENO, P DESTRO, M. G.; Neri, J. N.; **Programas e base de dados para análise de espectros atômicos** In: XI WAI - Workshop Anual de Pesquisa e Desenvolvimento do IEAv, 2011, São José dos Campos. Atividades de Pesquisas e Desenvolvimento. São José dos Campos: Instituto de Estudos Avançados - IEAv, 2011. v.4. p.146 – 146.
- 2011 SANTOS, J. R.; BARRETA, L. F. N.; DESTRO, M. G.; SBAMPATO, M. E.; **Simulação do Espectro de Disprósio na Região de 570 nm a 650 nm** In: XXIII Congresso de Iniciação Científica UNESP, 2011, Guaratinguetá. Resumo. Guaratinguetá: UNESP, 2011.
- 2011 SBAMPATO, M. E.; BARRETA, L. F. N.; SANTOS, J. R.; VICTOR, A. R; DESTRO, M. D.; NERI, J. W.; **Softwares for Atomic Spectra Analysis** In: Encontro de Física, 2011, 2011, Foz do Iguaçu. ENFMC - Matéria Condensada. São Paulo: SBF - Sociedade Brasileira de Física, 2011.

Prêmio

- 2012 2º Lugar - Apresentações Orais - Prêmio de Melhor Trabalho de Iniciação Científica, Instituto de Estudos Avançados.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, aos meus pais pelo apoio e incentivo incondicionais, em todos os passos de minha vida.

À professora e orientadora Dra Maria Esther Sbampato, pela dedicação e paciência durante todo o trabalho.

Ao professor Marcelo Geraldo Destro, pela confiança e oportunidade de ingresso em projetos de pesquisa no IEAv, além da dedicação em projetos paralelos a este trabalho.

Ao professor e coorientador Dr Maurício Antônio Algatti pela dedicação ao trabalho e no decorrer de minha graduação.

Ao professor Dr. Roberto Yzumi Honda, pelo auxílio e presteza em todo período do curso de graduação.

Ao professor Dr. José Wilson Neri pela ajuda no laboratório, ao professor Nicolau pelo ajuda em conceitos teóricos e ao Eng. Carlos Alberto Barbosa pelo desenvolvimento e auxílio no manuseio da descarga de catodo oco utilizada neste trabalho.

Aos meus irmãos Otto Ricardo Júnior, Rita de Cássia e Flávio. Aos meus sobrinhos Arthur, Augusto, Álvaro e Mário.

À Alessandra da Silva Vidal pelo apoio, carinho e dedicação em todos os momentos deste ano.

Aos amigos da UNESP/FEG e IEAv: Júlio César, Douglas Pimentel, Douglas Benndorf, Luís Rodolfo, Pedro William, Luciano, Danilo Almeida, Ana Paula, Ana Elídia, Diogo Moura e, principalmente, a Patrícia Bueno e Alessandro Victor pela ajuda com os equipamentos do laboratório e ao Felipe Barreta pelos conselhos sobre problemas de linguagens de programação.

Aos Professores da FEG: Fernando Luiz, Isabel Cristina, Amorin, José Lourenço Cindra, Denis Dalmazi, Marisa Andreato, Júlio Marny Hoff, Marcelo Hott e Maria Cecília Zanardi pela dedicação durante todo período de graduação. E principalmente ao professor Antonio Soares Castro por suas aulas inspiradoras, e ao professor Milton Eiji Kayama pelos conselhos indispensáveis nos últimos anos de minha formação acadêmica.

A Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá - UNESP/FEG por todos os anos de graduação e ao Instituto de Estudos Avançados -

IEAv por permitir a realização e proporcionar a infraestrutura necessária para o trabalho.

Ao CNPq pelo suporte financeiro através do programa PIBIC IEAv.

E principalmente ao Pai Celestial por tornar todo o trabalho possível.

Epigrafe

"Somente um principiante que não sabe nada sobre ciência diria que a ciência descarta a fé. Se você realmente estuda ciência, ela certamente o levará para mais perto de Deus".

James Clerk Maxwell.

SANTOS, J. R., **Desenvolvimento de um Código Computacional para Simulação e Análise de Espectros Atômicos**, 2012. 65 p. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Bacharelado em Física) - Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista. Guaratinguetá, 2012

RESUMO

Neste trabalho, foi desenvolvido um código computacional para simulação e análise de espectros atômicos, a partir de bases de dados construídas a partir da literatura. Foram criadas quatro rotinas aplicáveis a processos atômicos de separação isotópica a laser. Na primeira rotina, *Possible Transitions*, o programa verifica as possíveis transições eletrônicas a partir de um nível de energia conhecido do átomo presente na base de dados, aplicando as regras de seleção para uma transição de dipolo elétrico. A segunda rotina, *Locator Transitions*, verifica, aplicando as mesmas regras de seleção, as possíveis transições eletrônicas dentro de uma região espectral especificada pelo usuário. A rotina *Spectra Simulator* cria espectros simulados, utilizando o aplicativo gráfico *gnuplot*, através de curvas lorentzianas e, finalmente, a rotina *Eletronic Temperature*, determina a temperatura de excitação eletrônica do átomo, através do Método do Gráfico de Boltzmann.

Para testar a confiabilidade das rotinas do programa, foram obtidos experimentalmente os espectros de emissão de uma descarga de catodo oco de disprósio e argônio como gás tampão. A descarga de catodo oco foi submetida a diferentes valores de correntes de operação e pressão do gás inerte. Os espectros obtidos foram tratados com o auxílio das rotinas do programa desenvolvido (*Locator Transition* e *Spectra Simulator*) e as temperaturas de excitação eletrônica dos átomos de disprósio, nas diferentes condições de descarga, foram calculadas (rotina *Eletronic Temperature*). Os resultados obtidos mostraram que a temperatura de excitação eletrônica dos átomos de disprósio neutro na descarga de catodo oco aumenta com o aumento da corrente aplicada ao catodo e, também, com o aumento da pressão do gás tampão. Verificou-se, também, com a rotina *Eletronic Temperature*, que as retas ajustadas para a determinação de temperatura, através do Método do Gráfico de Boltzmann, apresentam coeficientes de determinação, R^2 , superiores a 0,90. Atualmente, todas as rotinas implementadas estão sendo utilizadas em trabalhos realizados no laboratório do Instituto de Estudos Avançados – IEAv/DCTA, no projeto de desenvolvimento do processo atômico de separação de isótopos a laser dos terras-raras.

PALAVRA-CHAVE: Disprósio. Espectroscopia de emissão. Simulação de espectros. Espectroscopia atômica.

SANTOS, J. R., **Development of a Code for Computational Simulation and Analysis of Atomic Spectra**, 2012. 65 p. End of Course Work (Graduate Degree in Physics) - Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista. Guaratinguetá, 2012

ABSTRACT

The aim of this work was the development a computer code for simulation and analysis of atomic spectra from databases constructed from the literature. There were created four routines that can be useful for spectroscopic studies in the atomic processes of laser isotope separation. In the first routine, *Possible Transitions*, the program checks the possible electron transitions from an energy level of the atom present in the database considering the selection rules for an electric dipole transition. The second routine, *Locator Transitions*, checks the possible electronic transitions within a user-specified spectral region. The routine *Spectra Simulator* creates simulated spectra using the graphical application *gnuplot* through lorentzian curve and finally, the routine *Electronic Temperature* determines the temperature of electronic excitation of the atom, thought the Boltzmann Plot Method.

To test the reliability of the program there were obtained experimental emission spectra of a hollow cathode discharge of dysprosium and argon as a buffer gas. The hollow cathode discharge has been subjected to different values of operating currents and pressure of inert gas. The spectra obtained were treated with the assistance of program routines developed (*Transition Locator* and *Spectra Simulator*) and temperatures electronic excitation of the atoms of dysprosium in the different discharge conditions were calculated (routine *Electronic Temperature*). The results showed that the electronic excitation temperature of the neutral dysprosium atoms in the hollow cathode discharge increases with increasing current applied to the cathode and also by increasing the gas pressure buffer. The determination coefficients, R^2 , obtained by the *Electronic Temperature* routine using the linear adjust of the Boltzmann Plot Method were greater than 0.90. All implemented routines are being used in studies performed in the laboratory of the Institute of Advanced Studies - IEAv / DCTA, to develop the rare earth Atomic Vapor Laser Isotopes Separation process.

KEYWORDS: Dysprosium. Emission Spectroscopy. Spectra Simulation. Atomic Spectroscopy.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Representação do diagrama de níveis para a emissão espontânea.....	25
Figura 2.2: Representação do diagrama de níveis para a emissão estimulada.	26
Figura 2.3: Representação do diagrama de níveis para a absorção.	27
Figura 2.4: Representação do perfil de uma linha espectral.....	30
Figura 3.1: Tela do Programa ASAS. Rotina <i>Possible Transitions</i> : 1) Descrição; 2) Parâmetros de entrada; 3) Região do espectro; 4) Transição de passo superior sequencial; 5) Filtro de Dados; 6) Tipos de espectros.....	34
Figura 3.2: Tela do Programa ASAS. (à esquerda) Resultados da rotina <i>Possible Transitions</i> : 1A) Tabela de dados; 2A) Salvar dados. (à direita) Diagrama de setas das possíveis transições.	36
Figura 3.3: Tela do Programa ASAS. Rotina <i>Locator Transitions</i> : 1) Descrição; 2) Parâmetro de entrada; 3) Região do espectro; 4) Transição de passo superior sequencial; 5) Filtro de Dados; 6) Tipos de espectros.....	37
Figura 3.4: Tela do Programa ASAS. (à esquerda) Resultados da rotina <i>Locator Transitions</i> : 1A) Tabela de dados; 2A) Salvar dados.	38
Figura 3.5: Tela do Programa ASAS. Resultados da rotina <i>Spectra Simulation</i> : 1) Descrição da rotina; 2) Parâmetros de entrada; 3) Região do espectro; 4) Importar arquivos; 5) Cor do espectro simulado.	39
Figura 3.6: Tela do Programa ASAS. Resultado obtido pela rotina <i>Spectra Simulation</i> : Espectro simulado e opções de armazenamento de dados.	41
Figura 3.7: Tela do Programa ASAS. Entrada de dados rotina <i>Electronic Temperature</i> : 1) Descrição da rotina; 2) Parâmetros de entrada; 3) Região do espectro; 4) Seleção de linhas.....	42
Figura 3.8: Tela do Programa ASAS. Inserir intensidades na rotina <i>Electronic Temperature</i> : 5) Tabela de dados; 6) Incluir Intensidades; 7) Tipo de espectro.....	43
Figura 3.9 Exemplo de arquivo formatado de intensidades de linhas.	44
Figura 3.10: Tela do Programa ASAS. Resultado obtido pela rotina <i>Electronic Temperature</i> : gráfico de Boltzmann para o cálculo da temperatura; valores obtidos de temperatura e coeficiente R^2 da reta ajustada; opções de armazenamento de dados.	45
Figura 3.11: Formatação do arquivo de linhas do espectro para a base de dados do programa.....	47

Figura 3.12: Formatação do arquivo de níveis de energia para a base de dados do programa.....	48
Figura 3.13: Esquema de armazenamento dos arquivos da base de dados.	49
Figura 3.14: Tela do Programa ASAS. Rotina <i>Database</i> : 1) Abrir arquivo; 2) Tipo de arquivo; 3) Tabela de dados; 4) Alterar/Excluir dados.....	49
Figura 4.1: Arranjo Experimental utilizado na espectroscopia de emissão. LCO: Lâmpade de catodo oco de disprósio e argônio; M: monocromador.	52
Figura 4.2: Descarga de catodo oco desenvolvida no IEAv.....	54
Figura 4.3: Elementos e montagem da descarga de catodo oco.	54
Figura 4.4: Identificação das linhas espectrais na região de 398 a 418 nm: (acima) espectro experimental; (abaixo) espectros simulados de Dy I, Ar I e Ar II.	56
Figura 4.5: Determinação da temperatura eletrônica dos átomos de Dy I, na descarga de catodo oco. Gás sob pressão de 1 mbar e corrente de operação de 10 mA.	58
Figura 4.6: Determinação da temperatura eletrônica dos átomos de Dy I, na descarga de catodo oco. Gás sob pressão de 1 mbar e corrente de operação de 40 mA.	59
Figura 4.7: Determinação da temperatura eletrônica dos átomos de Dy I, na descarga de catodo oco. Gás sob pressão de 10 mbar e corrente de operação de 10 mA.	59
Figura 4.8: Determinação da temperatura eletrônica dos átomos de Dy I, na descarga de catodo oco. Gás sob pressão de 10 mbar e corrente de operação de 40 mA.	60

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1: Dados das linhas espectrais de Dy I utilizadas para o cálculo da temperatura de excitação eletrônica, nas quatro condições de operação da lâmpada de catodo oco (gás tampão: argônio).	57
Tabela 4.2: Resumo dos resultados obtidos para a temperatura de excitação eletrônica da LCO de disprósio, para as diversas condições de operação.	60

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

IEAv	=	Instituto de Estudos Avançados
DCTA	=	Departamento de Ciência e Tecnologia Aeroespacial
EFO	=	Divisão de Fotônica
PASIL	=	Processo Atômico de Separação Isotópica a Laser
UNESP	=	Universidade Estadual Paulista
FEG	=	Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá
ASAS	=	Analysis and Simulation of Atomic Spectra
MMQ	=	Método dos Mínimos Quadrados

LISTA DE SÍMBOLOS

i	=	índice que indica o estado eletrônico de energia mais baixa
s	=	índice que indica o estado eletrônico de energia mais alta
A	=	coeficiente de emissão espontânea de Einstein
J	=	número quântico de momento angular total
C	=	constante de proporcionalidade de um sistema gráfico
E	=	energia do nível eletrônico
λ	=	comprimento de onda
h	=	constante de Planck
k_B	=	constante de Boltzmann
c	=	velocidade da luz
τ	=	tempo de vida

SUMÁRIO

Lista de Figuras	13
Lista de Tabelas	15
Lista de Abreviaturas e Siglas	16
Lista de Símbolos	17
1. INTRODUÇÃO	20
2. FUNDAMENTOS DE ESPECTROSCOPIA ATÔMICA	22
2.1. Números Quânticos	22
2.2. Termos Espectrais e Regras de Seleção	23
2.3. Interação Radiação-Matéria	24
2.3.1. Emissão Espontânea:	25
2.3.2. Emissão Estimulada	26
2.3.3. Absorção	27
2.4. Temperatura de Excitação Eletrônica	27
2.5. Perfis de Linhas Espectrais e Alargamentos	29
3. PROGRAMA DE ANÁLISE E SIMULAÇÃO DE ESPECTROS ATÔMICOS	33
3.1. Rotinas do Programa de Análise e Simulação de Espectros... 33	
3.1.1. Rotina: <i>Possible Transitions</i>	34
3.1.2. Rotina: <i>Locator Transitions</i>	36
3.1.3. Rotina: <i>Spectra Simulation</i>	39
3.1.4. Rotina: <i>Electronic Temperature</i>	41
3.2. Base de Dados	45
3.2.1. Formatação de Arquivo: Linhas do Espectro	45
3.2.2. Formatação de Arquivo: Níveis de Energia	47

3.2.3.	Armazenamento de Arquivos	48
3.2.4.	Acesso a Base de Dados	49
4.	ESPECTRO DE EMISSÃO DO DISPRÓCIO	51
4.1.	Técnica da Espectroscopia de Emissão.....	51
4.2.	Procedimento Experimental	51
4.3.	Lâmpada de Catodo Oco.....	53
4.4.	Resultados e Discussão	55
4.4.1.	Análise dos Espectros de Emissão	55
4.4.2.	Determinação da Temperatura Eletrônica de Excitação.....	56
5.	CONCLUSÕES.....	61
	TRABALHOS FUTUROS	63
	REFERÊNCIAS	64
	APÊNDICE A: Base de Dados Espectroscópicos do Dy I construída a partir de [2,20].....	65
	A1 Níveis de Energia	65
	A2 Linhas Espectrais.....	72
	APÊNDICE B: Tratamento dos Espectros de Emissão	86
	B1 Calibração de Intensidade.....	86
	B2 Calibração do Comprimento de Onda.....	87
	B3 Gráficos dos Espectros de Emissão	89
	APÊNDICE C: Tratamento para Determinação da Intensidade Relativa das Linhas do Espectro.	93
	ANEXO A: Método dos Mínimos Quadrados e o Coeficiente de Determinação.	94

1. INTRODUÇÃO

A espectroscopia é uma importante área da ciência, com aplicações nos mais diversos campos de pesquisa. Particularmente, o conhecimento do espectro de um átomo permite sua identificação e medição de sua concentração em amostras. Através da intensidade relativa de linhas de emissão e absorção, é possível o conhecimento da proporção de átomos presentes em cada um dos níveis de energia do mesmo, conhecimento este de importância em vários experimentos, como na separação isotópica a laser. Neste contexto, se torna bastante importante uma ferramenta de simulação de espectros que facilite o planejamento de experimentos e a análise de dados experimentais.

Este trabalho foi desenvolvido, primeiramente, com foco na simulação de espectros de terras-raras, para serem utilizados em experimentos de fotoionização seletiva de isótopos, no Instituto de Estudos Avançados – IEAv – DCTA. O interesse na fotoionização seletiva de isótopos de terras-raras tem crescido muito nos últimos anos devido às suas muitas aplicações industriais, médicas, e aplicações envolvendo segurança nacional, juntamente com o seu uso como novas tecnologias de fontes de energia. O IEAv iniciou, em 2005, um trabalho para estender a capacitação obtida no processo atômico de separação isotópica via lasers do urânio a outros materiais de interesse aeroespacial como, por exemplo, nos elementos das terras-raras e isótopos estáveis de refratários, através do Projeto PASIL, acrônimo de Processo Atômico de Separação Isotópica a Laser. Entre todas as aplicações dos elementos de terras-raras e seus isótopos, o IEAv tem especial interesse nos isótopos do Nd, do Yb, do Dy e do Er. Estes foram escolhidos considerando suas aplicações específicas [1,2].

O objetivo deste trabalho foi desenvolver um código computacional para simulação e análise de espectros atômicos, a partir de bases de dados construídas a partir de dados da literatura, com rotinas aplicáveis ao processo atômico de separação isotópica a laser.

O programa foi, inicialmente, desenvolvido em linguagem C [3] e compreendia duas funções específicas: i) calcular as possíveis transições energéticas para determinado átomo, a partir de certo nível de energia aplicando a regra de seleção ($\Delta J = 0, \pm 1$); ii) verificar todas as possíveis transições dentro de uma região espectral, partindo de todos os níveis definidos pela base de dados criada. Além das funções pré-

determinadas, o programa foi aprimorado com mais uma rotina que simula espectros a partir da base de dados utilizando como recurso gráfico o programa gratuito *gnuplot*.

Posteriormente, o programa original em linguagem C foi otimizado, com o auxílio da linguagem de programação *Visual Basic* [4]. Por ser uma linguagem orientada a objetos, os programas desenvolvidos em *Visual Basic* possibilitam uma maior interatividade entre os seus usuários.

Com base nos projetos iniciais [3, 4], finalizou-se o *Programa de Análise e Simulação de Espectros Atômicos (Software of Analysis and Simulation of Atomic Spectra - ASAS)* com quatro rotinas: i) Possíveis Transições: define as possíveis transições energéticas partindo de um nível aplicando, além das regras de seleção do momento angular, a regra de paridade da função de onda que descreve o elétron em determinado nível de energia; ii) Localizador de Transições: define todas as transições possíveis entre todos os níveis de energia de uma determinada região, aplicando as mesmas regras da rotina anterior; iii) Simulador de Espectro: utiliza a base de dados e o aplicativo *gnuplot* para construir espectros atômicos através de curvas lorentzianas; iv) Determinação de Temperatura: calcula a temperatura eletrônica de átomos através do conceito de distribuição de Boltzmann e com o auxílio gráfico do *gnuplot*.

No Capítulo 2 do presente trabalho, são apresentados os fundamentos teóricos mais relevantes da espectroscopia eletrônica de átomos polieletrônicos. No Capítulo 3, é descrito o programa ASAS, com detalhes de sua utilização e da construção das bases de dados. O Capítulo 4 apresenta um exemplo de aplicação do programa, em experimentos de espectroscopia de emissão no plasma da descarga de catodo oco de disprósio neutro (Dy I), tendo o argônio como gás tampão. Com a utilização do programa, realizou-se a análise dos espectros obtidos em laboratório, bem como a determinação da temperatura de excitação eletrônica para diferentes valores de corrente de operação e pressão do gás inerte (argônio). No Capítulo 6, é apresentada a conclusão do trabalho e sugestões para trabalhos futuros.

2. FUNDAMENTOS DE ESPECTROSCOPIA ATÔMICA

Neste capítulo, é feita uma rápida discussão sobre os aspectos teóricos da emissão e absorção, os coeficientes de emissão e absorção de Einstein, as regras de seleção e os acoplamentos de momentos angulares, conceitos de espectroscopia atômica utilizados neste trabalho.

No final deste capítulo será feita a síntese do Princípio de Distribuição de Boltzmann e do método de determinação de temperatura eletrônica através do método Gráfico de Boltzmann.

2.1. Números Quânticos

Muitos princípios fundamentais da mecânica quântica se devem aos estudos de Erwin Schroedinger e Werner Heisenberg. A teoria de Heisenberg baseia-se em quantidades físicas passíveis de serem observadas experimentalmente e, segundo o *Princípio da Incerteza de Heisenberg*: "é impossível determinar, simultaneamente, com absoluta precisão, a velocidade e a posição de um elétron em um átomo".

A formulação da teoria quântica de Schrödinger foi elaborada em termos das propriedades das ondas materiais com base na *Hipótese de De Broglie*: "O elétron apresenta característica dual, ou seja, comporta-se como matéria e energia, sendo uma partícula-onda". No tratamento apresentado por Schroedinger foi proposto que o comportamento das ondas de De Broglie fosse descrito por uma função de onda Ψ e forneceu ainda uma função diferencial que descreve o comportamento de qualquer sistema de partículas. As soluções deste tratamento fornecem os números quânticos e, foram encontradas por Paul Dirac após desenvolver outra equação de onda que satisfaz a teoria da relatividade restrita [5,6].

Para um átomo com um elétron, a descrição atômica é dada por cinco grandezas quânticas: (i) *número quântico principal*, n , que representa o nível ou camada principal de energia do átomo; (ii) *número quântico azimutal* (ou *orbital de momento angular*), l , determina a forma dos orbitais atômicos (s, p, d, f, \dots), e representa o momento angular do elétron em torno do núcleo atômico; (iii) *número quântico orbital magnético*, m_l , especifica a orientação permitida a uma nuvem eletrônica no espaço quando sujeita a um campo magnético externo, sendo que o número destas orientações permitidas está relacionada à forma desta nuvem eletrônica; (iv) *número quântico de spin eletrônico*, s ,

que tem o valor $1/2$ para um elétron e (v) número quântico de spin magnético, m_s , que dá a orientação do spin eletrônico quando sujeito a um campo externo, assumindo valores de $-1/2$ ou $+1/2$. Os três primeiros números quânticos são usados na determinação da órbita atômica e os outros indicam a orientação do elétron em torno do seu próprio eixo.

Os números quânticos nos permitem fazer uma descrição completa dos elétrons nos átomos, sendo que a combinação dessas grandezas é única para cada elétron (*Princípio de Exclusão de Pauli*).

Para átomos multieletrônicos, o conjunto de números atômicos para o átomo de um elétron, não tem significado físico [7]. Um átomo existe num determinado estado real, cada estado com uma autofunção e energia definida. Estados resultam da combinação das interações magnéticas e eletrostáticas envolvendo o núcleo e todos os elétrons do átomo. No modelo vetorial atômico estes estados podem ser descritos pelo uso de certos números atômicos que coletivamente, incluem todos os elétrons presentes no átomo, conhecidos como números quânticos de momento angular total: L (momento angular eletrônico), M_L (momento magnético relacionado a L), S (momento angular de spin), M_S (momento magnético relacionado a S), J (momento angular total, inclui os acoplamento L e S) e M_J (momento magnético relacionado a J). São os diferentes conjuntos de números quânticos de momento angular total que caracterizam o estado do átomo nos diferentes níveis de aproximação. Na ausência de um campo externo, um termo com momento angular total tem grau de degenerescência dado por $2J + 1$, que corresponde às possíveis orientações de J em relação à direção do campo (dadas por M_J).

2.2. Termos Espectrais e Regras de Seleção

Uma vez que os estados eletrônicos permitidos de um átomo podem ser descritos pelos números atômicos de momento angular total, estes podem ser usados para interpretar os espectros de átomos. O modelo vetorial atômico [8] é adequado para este trabalho. As combinações resultantes de todas as interações entre os elétrons exigem um estudo espectroscópico detalhado para o átomo multieletrônico sob investigação [9]. Dois casos extremos de acoplamento podem ser destacados - o acoplamento L - S (também denominado como *aproximação de Russel-Saunders*) e o acoplamento j - j . No acoplamento L - S , as interações intereletrônicas são mais acentuadas do que as

interações spin-órbita dos elétrons individuais, sendo este acoplamento o método mais adequado para átomos com número atômico, Z , baixo. Para átomos com valores de Z elevados, onde a interação spin-órbita do elétron individual é mais acentuada do que as interações intereletrônicas [5, 7], o acoplamento $j-j$ deve ser usado.

No modelo vetorial do átomo, um nível eletrônico é, comumente, indicado por uma nomenclatura baseada no acoplamento $L-S$:

$$^{2S+1}L_f,$$

onde os termos correspondentes a $L=0,1,2,3...$ são denotados pelas letras $S, P, D, F...$ (é importante não confundir a letra S para $L=0$ com o número quântico S). O Número de níveis associados com certo termo é dado por $(2S + 1)$ se $L > S$ ou por $(2L + 1)$ se $L < S$. Cada nível é caracterizado por um J e inclui $(2J + 1)$ estados degenerados na ausência de campo magnético externo. Uma simplificação que vem do modelo vetorial do átomo é que uma camada ou subcamada completa não contribui para o momento angular total ($L=S=J=0$) e pode, portanto, ser ignorada na aplicação do modelo [8].

As transições dos elétrons entre distintos níveis de energia eletrônicos do átomo devem obedecer a certas regras de seleção. Estas regras de seleção são resultados diretos do estudo quântico da interação radiação-matéria e dependem do tipo de acoplamento [10]. As regras de seleção a seguir, são válidas para qualquer acoplamento:

$$\begin{cases} \Delta J = 0, \pm 1; & J \neq 0 \\ \Delta J = +1; & J = 0 \end{cases}$$

Outra regra de seleção geral para transições eletrônicas que envolvem momento de dipolo (emissão e absorção de radiação magnética) está ligada à paridade da função de onda Ψ que descreve cada nível de energia. As funções de onda podem ser funções pares e ímpares. Transições de dipolo elétrico são permitidas apenas entre níveis de paridades diferentes, i.e., entre níveis de energia de funções pares para níveis de energia de funções ímpares e vice-versa.

2.3. Interação Radiação-Matéria

Antes de descrever os processos envolvidos na interação de fótons com átomos considera-se um átomo com níveis de energia E_n , com $n= 1, 2, 3...$ e $E_n > E_{n-1}$, em 'equilíbrio térmico, ou seja, com a distribuição de população entre os níveis de energia

obedecendo o Princípio de distribuição de Boltzmann [11]. A síntese destes processos de interação pode ser verificada em [12] e é discutida em seguida.

2.3.1. Emissão Espontânea:

Ocorre quando o átomo encontra-se no estado de energia superior E_2 (ou estado excitado[†]). Tal átomo excitado tende a decair espontaneamente para o nível de energia mais baixa E_1 , liberando a diferença de energia ($E_2 - E_1$) entre estes níveis na forma de onda eletromagnética (o fóton). Este processo é denominado de emissão espontânea e está representado na Figura 2.1. A frequência da onda eletromagnética pode ser calculada a partir da equação de Planck:

$$\nu = \frac{(E_2 - E_1)}{h} \quad (2.1)$$



Figura 2.1: Representação do diagrama de níveis para a emissão espontânea.

O parâmetro que descreve o processo de emissão é o coeficiente de emissão espontânea de Einstein (A_{21}), que fornece o número de fótons com energia $h\nu$ emitidos espontaneamente por unidade de tempo. Esse coeficiente depende da estrutura do átomo e da transição considerada $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$ e é dado por:

$$A_{21} = \frac{d}{dt}(P_{21}^{spont}), \quad (2.2)$$

onde P_{21}^{spont} é a probabilidade de emissão espontânea.

Outro parâmetro importante no estudo da emissão espontânea é o denominado tempo de vida de um estado excitado τ . Considere-se que, por colisões entre os átomos de um sistema, um grande número destes (N) sejam promovidos a um estado excitado, E_2 . Como resultado da emissão espontânea, esse número de átomos diminuirá com o passar do tempo. Em um intervalo de tempo dt , especificamente, uma fração $A_{21}dt$ desses átomos emitirá radiação:

[†] Um átomo encontra-se no estado excitado, quando um de seus elétrons, geralmente o de valência, recebe energia e é excitado para um nível de energia mais alto que o estado fundamental (nível de menor energia E_1).

$$dN = -ANdt \quad (2.3)$$

Resolvendo a equação acima para $N(t)$, encontra-se:

$$N(t) = N(0)e^{-At} \quad (2.4)$$

Evidentemente, o número restante de átomos no estado excitado diminui espontaneamente com uma constante de tempo [10]:

$$\tau = \frac{1}{A_{21}} \quad (2.5)$$

Tecnicamente o tempo de vida τ , é o tempo que $N(t)$ leva para atingir $1/e$ de seu valor inicial.

2.3.2. Emissão Estimulada

Ocorre quando o átomo encontra-se no nível de energia superior E_2 (estado excitado) e há a incidência de um fóton de frequência ν no átomo. Se a energia do fóton incidente for igual à diferença entre os níveis ($h\nu = E_2 - E_1$), há uma probabilidade finita de um segundo fóton ser emitido pelo átomo, causando a transição para o nível inferior (de menor energia). Em outras palavras, existe uma probabilidade finita do fóton incidente estimular o decaimento do nível E_2 para o nível E_1 , sendo emitidos dois fótons. O segundo fóton terá a mesma energia, direção e fase do primeiro. O processo de emissão estimulada está representado na Figura 2.2.

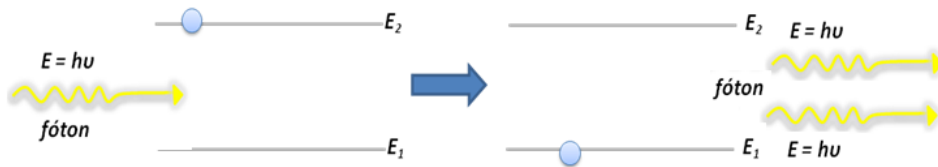


Figura 2.2: Representação do diagrama de níveis para a emissão estimulada.

A probabilidade de um átomo emitir um fóton induzido de energia $h\nu$ por unidade de tempo (dP_{21}/dt) pode ser expressa em termos da densidade de energia espectral da radiação $\rho(\nu)$, como:

$$B_{21}\rho(\nu) = \frac{dP_{21}}{dt} \quad (2.6)$$

onde B_{21} é o coeficiente de Einstein para a emissão estimulada.

2.3.3. Absorção

Ocorre quando o átomo encontra-se em um nível de energia inferior, como, por exemplo, o estado fundamental, e um fóton com energia $h\nu$ incide sobre este átomo. Se a energia do fóton for igual à diferença de energia entre os dois níveis, ou seja, sejam ressonantes, existe a probabilidade finita do fóton ser absorvido pelo átomo e este sofrer uma transição para um nível de maior energia. A Figura 2.3 representa o processo de absorção de radiação de um átomo.

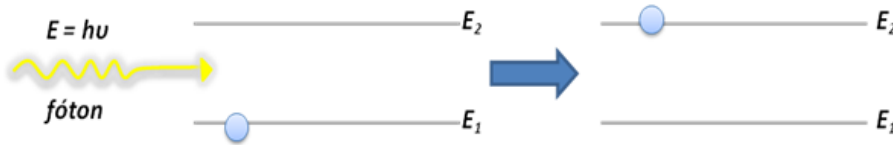


Figura 2.3: Representação do diagrama de níveis para a absorção.

A probabilidade por unidade de tempo (dP_{21}/dt) para o átomo absorva um fóton é proporcional à densidade de fótons de energia $h\nu$ por unidade de volume, expressa por:

$$B_{12}\rho(\nu) = \frac{dP_{12}}{dt} \quad (2.7)$$

onde B_{12} é o coeficiente de Einstein para a absorção induzida.

2.4. Temperatura de Excitação Eletrônica

A temperatura de excitação eletrônica é uma importante propriedade de uma fonte de excitação. O conhecimento da temperatura de uma fonte de excitação é essencial para o entendimento de processos de dissociação, vaporização e excitação que ocorrem na fonte de radiação. A excitação por impacto de elétrons promove uma pequena fração de átomos para seus estados excitados, que decaem emitindo fótons com comprimento de onda característico, que podem ser detectados e analisados de acordo com seu espectro. O método mais utilizado para o cálculo da temperatura eletrônica é o Método do Gráfico de Boltzmann. Se o plasma está em equilíbrio térmico local, na temperatura eletrônica T_e , de acordo com a lei de Boltzmann tem-se [11, 13]:

$$N_s = \frac{N_0 g_s}{Z} \exp\left(-\frac{E_s}{k_B T_e}\right) \quad (2.8)$$

onde E_s é o nível de energia considerado, g_s é o seu peso estatístico, N_0 é a densidade total de átomos, N_s é a densidade de partículas no estado de energia n , e $Z(T)$, a função de partição total na temperatura T_e , dada pela somatória:

$$Z = \sum_j g_j \exp\left(-\frac{E_s}{k_B T_e}\right) \quad (2.9)$$

sendo a somatória feita sobre todos os níveis de energia do átomo.

A intensidade da linha espectral de emissão é proporcional à população do nível superior da transição [11], então:

$$I_{si} = N_s A_{si} h \nu_{si} \quad (2.10)$$

onde N_s é a densidade de átomos no nível de energia superior, A_{si} é a probabilidade de transição (coeficiente de emissão espontânea de Einstein) do nível superior s para o nível inferior i , ν_{si} é a frequência de transição, e h é a constante de Planck. A partir da distribuição de Boltzmann, Equação (2.8), e desprezando a auto-absorção, a intensidade da linha é relacionada com a temperatura eletrônica (T_e) [11]:

$$I_{si} = \frac{hc}{\lambda_{si}} N_0 \frac{g_j}{Z} A_{si} \exp\left(-\frac{E_s}{k_B T_e}\right) \quad (2.11)$$

A espectroscopia atômica de emissão pode ser utilizada para calcular a temperatura eletrônica de determinados elementos em um plasma, sendo que o gráfico da função de Boltzmann utilizando várias linhas de emissão é considerado o melhor método de diagnóstico dessa temperatura. Da teoria da espectroscopia de emissão atômica, a relação entre a temperatura do plasma e a intensidade relativa entre as linhas espectrais, é obtida a partir da Equação (2.11), e é dada por [11, 13, 14]:

$$\ln\left(\frac{I_{si} \lambda_{si}}{g_s A_{si}}\right) = C - \frac{E_s}{k_B T} \quad (2.12)$$

Todo o cálculo envolvido na temperatura eletrônica é realizado com o auxílio da rotina *Electronic Temperature* do programa *Spectra Simulator*, desenvolvido neste trabalho. Os parâmetros g_s , A_{si} e E_n são obtidos através da base de dados de cada átomo de interesse e são característicos de cada linha. Com o número de linhas adequado, é construído um gráfico fazendo-se a função logarítmica, $\ln(I\lambda/Ag)$, versus a energia do nível superior. Utilizando o método dos mínimos quadrados (Anexo A) é feito o ajuste linear entre os valores do gráfico, obtendo-se uma reta cujo coeficiente angular a própria temperatura eletrônica.

O coeficiente de determinação do ajuste linear, R^2 , pode assumir valores entre 0 e 1, e determina a qualidade do ajuste linear. Quando $R^2 = 1$, cada uma das variáveis de

$\ln(I\lambda/Ag)$ torna-se uma função linear das variáveis E_j , ou seja, todos os pontos da função logarítmica estão sobre a reta (ajuste com qualidade de 100%). Quando $R^2 = 0$, não existe uma relação linear entre a função logarítmica e a energia do nível superior. Considera-se que há uma boa correlação quando $R^2 > 0,90$ [14]. Todos os passos para o cálculo do coeficiente de correlação do ajuste linear estão descritos no Anexo A.

O erro para o cálculo da temperatura obtida através do Gráfico de Boltzmann é obtido através da Equação (2.13) [15]:

$$\frac{\Delta T}{T} = \frac{k_B T}{\left[\sum_{l=1}^n E_l^2 - \frac{1}{n} (\sum_{l=1}^n E_l)^2 \right]^{1/2}} \times \left(\frac{\Delta I}{I} + \frac{\Delta A}{A} \right) \quad (2.13)$$

onde $\Delta I/I$ é o desvio médio das intensidades obtidas experimentalmente e $\Delta A/A$ é o desvio médio dos coeficientes de emissão espontânea de Einstein, A , de cada transição envolvida no cálculo da temperatura eletrônica.

2.5. Perfis de Linhas Espectrais e Alargamentos

A absorção ou emissão de radiação em uma transição atômica ($E_2 - E_1 = h\nu_{21}$) não resulta em uma linha espectral estritamente monocromática, mas sim em uma distribuição de frequência em torno da frequência central. Isso fornece o perfil de linha $I(\nu - \nu_0)$, com uma largura de linha à meia altura (FWHM - full-width at half-maximum), $\delta\nu$, a qual se encontra representada na Figura 2.4. Esta largura não depende somente da resolução espectral do equipamento, mas também do tempo de vida dos estados atômicos envolvidos na transição, da distribuição de velocidade dos átomos e da pressão da amostra gasosa. A largura de linha em unidades de frequência é definida como o intervalo $\delta\nu = |\nu_2 - \nu_1|$ entre as frequências $\nu_1 < \nu_0$ e $\nu_2 > \nu_0$, onde ν_0 é a frequência central dada por $\nu_0 = (E_s - E_i)/h$, cuja intensidade é $I(\nu_1) = I(\nu_2) = I(\nu_0)/2$. A largura de linha também pode ser escrita em termos de frequência angular ω e de unidades de comprimento de onda λ [12, 16]. A relação para essas notações é dada por:

$$\left| \frac{\delta\lambda}{\lambda} \right| = \left| \frac{\delta\nu}{\nu} \right| = \left| \frac{\delta\omega}{\omega} \right|$$

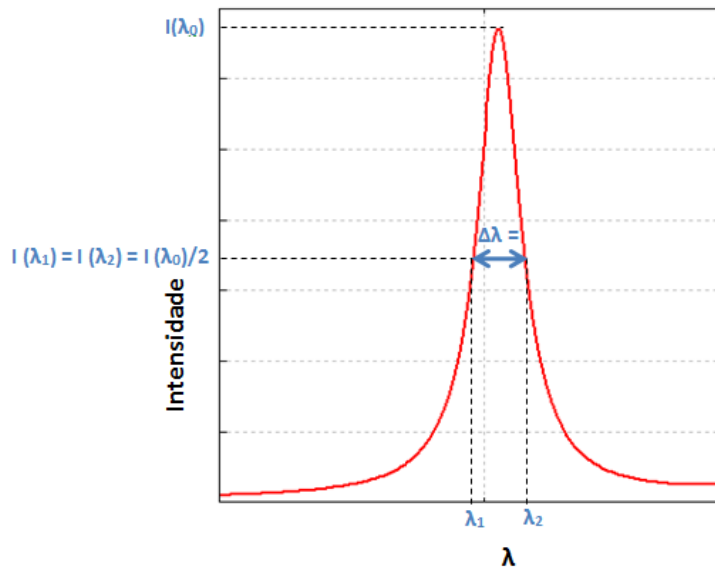


Figura 2.4: Representação do perfil de uma linha espectral.

Os principais processos de alargamento de linhas espectrais são [12, 16]:

- i. Alargamento natural: é relacionado com o tempo de vida médio τ , de um átomo no nível E_s , o qual decai exponencialmente devido a emissão espontânea. Apresenta um perfil lorentziano e fornece uma pequena contribuição para o alargamento de uma linha quando outros tipos de alargamentos são predominantes.
- ii. Alargamento por pressão: Todo átomo em um gás interage com outros átomos vizinhos, íons e elétrons. Dependendo das condições de pressão, os átomos excitados podem sofrer um número variável de interações antes de decaírem, ocasionando o alargamento da sua linha espectral. As linhas emitidas em uma descarga gasosa são menos alargadas quando a pressão do gás e a densidade da corrente de operação da descarga são reduzidas. Este alargamento é função da densidade das espécies perturbadas constituintes do gás e também é conhecido como alargamento colisional. A determinação do alargamento por pressão requer trabalhos experimentais específicos para cada transição e meio considerados, entretanto, uma boa estimativa pode ser dada por:

$$\Delta\omega = 2N\langle v\rangle\sigma_b \quad (2.14)$$

onde N é a densidade de partículas, $\langle v \rangle$ é a velocidade relativa e σ_b é a seção de choque de colisão.

- iii. Alargamento Doppler: é causado pelo movimento térmico dos átomos (ou moléculas) emissores do meio, que se deslocam a frequência aparente dos átomos que estão absorvendo ou emitindo radiação eletromagnética. A distribuição maxwelliana de velocidades das partículas resulta em vários deslocamentos, gerando o alargamento da linha. Em outras palavras, tal alargamento é causado pelo efeito Doppler, que pode ser explicado considerando um átomo excitado com velocidade \vec{v} . Com relação a um sistema de referência ao observador, a frequência angular ω_0 no sistema de coordenadas desse átomo é deslocada pelo efeito Doppler por:

$$\omega_e = \omega_0 + \vec{k} \cdot \vec{v} \quad (2.15)$$

para um observador olhando na direção da partícula emissora. A frequência de emissão aparente ω_e aumenta caso a partícula se mova em direção ao observador ($\vec{k} \cdot \vec{v} > 0$) e diminui em caso contrário ($\vec{k} \cdot \vec{v} < 0$). No equilíbrio térmico os átomos seguem a distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann e o perfil de intensidade da linha espectral é descrito por uma função gaussiana, dada por:

$$I(\omega) = I_0 \exp \left\{ - \left[c \frac{(\omega - \omega_0)}{\omega_0 v_p} \right]^2 \right\}, \quad (2.16)$$

onde v_p é a velocidade mais provável.

A largura de linha Doppler (ou largura à meia altura), é obtida por:

$$\Delta \nu_D = \nu_2 - \nu_1 = 2 \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{2RT}{M} \ln 2}, \quad (2.17)$$

Substituindo os valores das constantes e expressando a equação em termos de comprimento de onda, chega-se:

$$\Delta \lambda_D = 7,17 \cdot 10^{-7} \lambda_0 \sqrt{\frac{T}{M}}, \quad (2.18)$$

onde a temperatura T é dada em Kelvin e a massa molar M é dada em g/mol.

Para um átomo confinado em baixa pressão numa lâmpada de catodo oco comercial, o alargamento por pressão pode ser considerado desprezível frente ao alargamento Doppler [17, 1, 2].

Nos experimentos realizados neste trabalho, utilizou-se uma descarga de catodo oco desenvolvida no IEAv (descrita no próximo capítulo), onde foi possível variar a

pressão do gás no interior da câmara de confinamento da descarga e a corrente aplicada ao catodo.

3. PROGRAMA DE ANÁLISE E SIMULAÇÃO DE ESPECTROS ATÔMICOS

O programa de Análise e Simulação de Espectros Atômicos (ASAS) visa facilitar e agilizar o estudo dos espectros atômicos, com rotinas para aplicação na separação isotópica de átomos com lasers [3, 4]. Os textos no programa foram escritos em inglês, pois se pretende disponibilizar o mesmo para a comunidade científica.

O programa ASAS foi desenvolvido em *Visual Basic* com a utilização do editor *Microsoft® Visual Studio 2010®*[‡]. O programa desenvolvido visa maior interatividade entre os usuários e os dados obtidos através de suas rotinas. Todos os gráficos construídos pelo programa utilizam o programa gráfico *gnuplot* [18].

A versão atual do programa ASAS apresenta quatro rotinas auxiliares. Estas rotinas possibilitam: a verificação de possíveis transições entre os níveis de energia; a simulação de espectros; a identificação das linhas obtidas experimentalmente e o cálculo da temperatura eletrônica a partir de dados experimentais de intensidade de linhas atribuídas. O programa ASAS conta, também, com uma base de dados construída a partir de dados de literatura contendo as informações dos espectros de cada átomo que se deseja estudar. O usuário pode criar a base de dados para o átomo de interesse, de acordo com a formatação adequada ao programa. Dados espectroscópicos para grande número de átomos pode ser encontrados na base de dados do NIST [19].

Nas próximas seções deste capítulo, as informações necessárias sobre cada rotina do programa ASAS, e a formatação da base de dados serão detalhadas.

3.1. Rotinas do Programa de Análise e Simulação de Espectros

Cada uma das rotinas desenvolvidas para o programa ASAS possui funções específicas e é necessário que o usuário as conheça para melhor utilização destas ferramentas.

[‡] O Editor *Microsoft® Visual Studio 2010®* foi fornecido pela *DreamSpark Microsoft* e licenciado sob número de contrato: 700612353.

3.1.1. Rotina: *Possible Transitions*

Para melhor entendimento do usuário dividiu-se cada uma das sub-rotinas desta rotina em quadros (Figura 3.1).

POSSIBLE TRANSITIONS
Program that returns the user all the possible transitions of a given energy level to another within a desired spectral region, using the selection rule. The overall result obtained by this routine is also presented through a diagram of arrows through the use of gnuplot graphics application.

POSSIBLE TRANSITIONS

Parameters

Atom
DyI
(Ex.: DyI; NdII; ErI)

Energy Level (1/cm)
0

Spectral limits

Lower limits:
400 (nm)

Upper limits:
570 (nm)

☒ Vacuum ☐ Air

☒ Second photon

Levels of the second photon

23877.75 (1/cm)

Filters

☒ Wavelength in vacuum (Ao)

☒ Wavelength in air (Aair)

☒ Relative intensity (R.I.)

☒ Einstein emission coefficient (Aif)

☒ Lower energy level (Ei)

☒ Lower angular momentum (Ji)

☒ Upper angular momentum (Jf)

☒ Upper energy level (Ef)

Types of Spectra

☒ Absorption

☐ Emission

☐ Absorption and Emission

Set Parameters

Cancel

Execute

Figura 3.1: Tela do Programa ASAS. Rotina *Possible Transitions*: 1) Descrição; 2) Parâmetros de entrada; 3) Região do espectro; 4) Transição de passo superior sequencial; 5) Filtro de Dados; 6) Tipos de espectros.

- Quadro 1: Descrição resumida da rotina utilizada.
- Quadro 2: Parâmetros de entrada. Neste quadro o usuário insere a sigla do átomo que se deseja estudar e o nível de energia inicial das possíveis transições.

A sigla do átomo pode conter letras maiúsculas, minúsculas e espaço entre as letras (Ex.: Dy I, nd ii, eri, etc.). Caso o usuário insira a sigla de um átomo que não exista na base de dados, o sistema informa ao usuário e o processamento de dados é cancelado.

O nível de energia fornecido pelo usuário pode ser inserido tanto com vírgulas (",") ou pontos ("."), em unidades de cm^{-1} . Entretanto, o usuário deve conhecer os níveis do átomo em estudo, pois se for inserido um nível de energia que não consta na base de dados, o sistema informará ao usuário e o processamento de dados será cancelado.

- Quadro 3: Região do espectro. Neste quadro, o usuário limita sua pesquisa em uma região do espectro cujo meio de propagação (ar ou vácuo) pode ser

definido. Os comprimentos de onda no ar são calculados utilizando a Equação de Ciddor[§]. Os limites, inferior e superior, do espectro são dados em nanômetros, podendo ser escritos tanto com vírgulas (",") ou pontos (".")

- Quadro 4: Transição de passo superior sequencial. Estes são parâmetros opcionais do usuário, e são utilizados quando o usuário deseja verificar as transições que de dois ou mais níveis de energia sequenciais (em unidades de cm^{-1}).
- Quadro 5: Filtros de dados. Os filtros são usados para restringir quais as informações das possíveis transições serão necessárias em sua coleta de dados.
- Quadro 6: Tipos de espectro. Neste quadro, o usuário define qual o espectro que se deseja estudar absorção ou/e emissão. Para maiores informações sobre tipos de espectro verifique a seção 2.3.

Após inserir os parâmetros iniciais, o usuário deve fixar os parâmetros utilizando o botão *Set Parameters*. Este botão verifica se todas as informações fornecidas pelo usuário estão corretas, e libera então o botão de execução da rotina *Execute*. Se existir algum dado incorreto, o sistema interrompe o processamento de dados e solicita ao usuário a correção dos possíveis erros.

O usuário pode também interromper o processamento quando necessário utilizando simplesmente o botão *Cancel*.

Verificada as informações iniciais, o programa faz uma varredura em toda base de dados e, a partir do nível de energia fornecido pelo usuário, determina quais são as possíveis transições eletrônicas aplicando as regras de seleção (vide seção 2.2).

Em seguida, uma nova janela do programa, com as informações das possíveis transições, é aberta. Esta janela disponibiliza ao usuário algumas funções específicas da rotina *Possible Transistion*, como pode ser visto nos quadros da Figura 3.2 (à esquerda):

[§] Para realizar a transformação do comprimento de onda no vácuo para o comprimento de onda no ar ($\lambda_{ar} = \lambda_{vácuo}/n$) utiliza se a equação de Ciddor:
 $n = 1,00035396 - 4,19823 \times 10^{-7}\lambda + 8,38492 \times 10^{-10}\lambda^2 - 7,77411 \times 10^{-13}\lambda^3 + 2,76285 \times 10^{-16}\lambda^4$,
válida na região do visível ao infravermelho próximo [1].

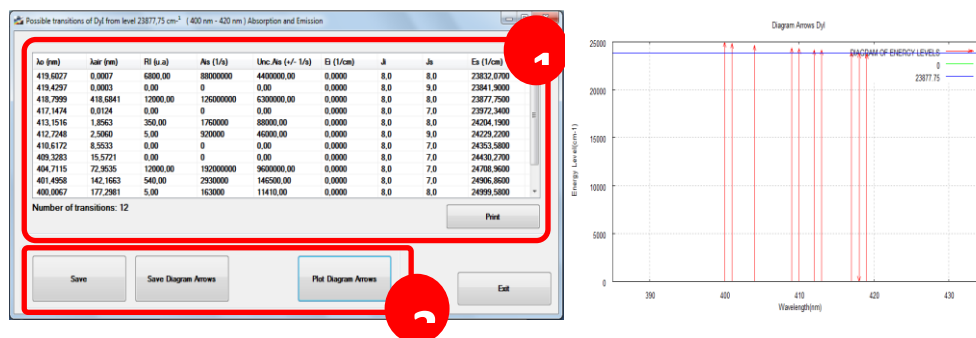


Figura 3.2: Tela do Programa ASAS. (à esquerda) Resultados da rotina Possible Transitions: 1A) Tabela de dados; 2A) Salvar dados.(à direita) Diagrama de setas das possíveis transições.

- Quadro 1A: Tabela de dados. Neste quadro, o usuário tem acesso a tabela de dados com as informações pré-definidas pelo uso dos filtros de dados (Figura 3.1- Quadro 5) e a opção imprimir esta tabela (botão *Print*).
- Quadro 2A: Salvar dados e construção do diagrama de setas. Com o botão *Plot Diagram Arrows* o usuário tem a opção de visualizar as possíveis transições através do gráfico de setas (Figura 3.2 (à direita)). Os gráficos salvos desta forma tem extensão *JPEG*. Existe também a opção de salvar as informações da tabela de dados em um arquivo do tipo *txt* utilizando o botão *Save*.

3.1.2. Rotina: Locator Transitions

Como pode ser observado na Figura 3.3, esta rotina apresenta subrotinas semelhantes à rotina *Possible Transitions*. Entretanto, diferente da rotina anterior, a rotina *Locator Transitions* verifica todas as possíveis transições de qualquer nível de energia inicial para qualquer outro nível de energia, dentro de uma região do espectro definida, aplicando as regras de seleção (vide seção 2.2).

LOCATOR TRANSITIONS

Formulated to assist in analyzing the experimental spectra of an atom, this program tells the user what the possible transitions from any state of lower energy to a higher inside the region where the possible transition was observed, making a name for the possible transition in question.

LOCATOR TRANSITIONS

Parameters

Atom
DyI
(Ex.: DyI, NdI, ErI)

Spectral limits

Lower limits:
400 (nm)

Upper limits:
570 (nm)

☐ Vacuum ☒ Air

Filters

☒ Wavelength in vacuum (λ_0)
☒ Wavelength in air (λ_{air})
☒ Relative intensity (R.I.)
☒ Einstein emission coefficient (A_{ul})
☒ Lower energy level (E_l)
☒ Lower angular momentum (J_l)
☒ Upper angular momentum (J_u)
☒ Upper energy level (E_u)

Types of Spectra

☒ Absorption
☐ Emission
☐ Absorption and Emission

Set Parameters
Cancel
Execute

Figura 3.3: Tela do ProgramaASAS. Rotina *Locator Transitions*: 1) Descrição; 2) Parâmetro de entrada; 3) Região do espectro; 4) Transição de passo superior sequencial; 5) Filtro de Dados; 6) Tipos de espectros.

- Quadro 1: Descrição resumida da rotina utilizada.
- Quadro 2: Parâmetro de entrada. Neste quadro o usuário insere a sigla do átomo que se deseja estudar e o nível de energia inicial das possíveis transições.

A sigla do átomo pode conter letras maiúsculas, minúsculas e espaço entre as letras (Ex.: Dy I, nd ii, eri, etc.). Caso o usuário insira a sigla de um átomo que não exista na base de dados o sistema informa ao usuário, e o processamento de dados é cancelado.

- Quadro 3: Região do espectro. Neste quadro o usuário limita sua pesquisa em uma região do espectro cujo meio de propagação (ar ou vácuo) pode ser definido. Os limites, inferior e superior, do espectro são dados em nanômetros, podendo ser escritos tanto com vírgulas (",") e pontos (".")

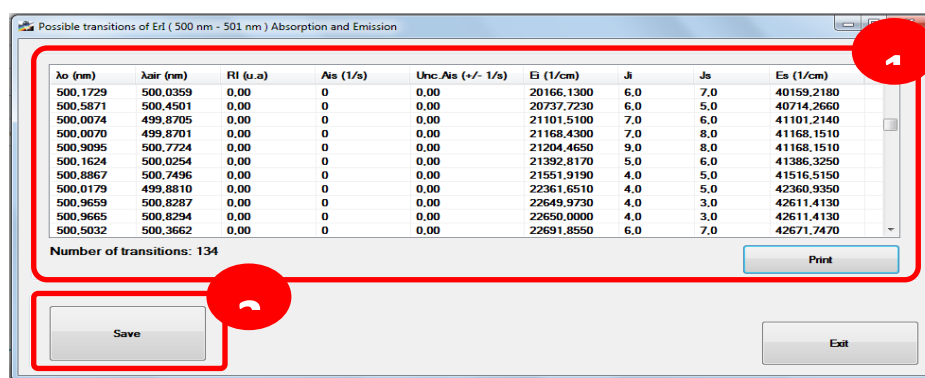
Como nesta rotina o programa procura por **todas** as possíveis transições (partindo de qualquer nível de energia!) dentro da região espectral definida, o programa restringe a região espectral em intervalos de no máximo 10 nm.

- Quadro 4: Filtros de dados. Os filtros são usados para restringir quais as informações das possíveis transições serão necessárias em sua coleta de dados.
- Quadro 5: Tipos de espectro. Neste quadro o usuário define qual o espectro que se deseja estudar absorção ou/e emissão. Para maiores informações sobre tipos de espectro verifique a seção 2.3.

O usuário deve, então, fixar os parâmetros utilizando o botão *Set Parameters*. Se todas as informações fornecidas pelo usuário estiverem corretas, o botão de execução "*Execute*" da rotina é liberado. Caso exista algum dado incorreto, o sistema interrompe o processamento de dados e solicita ao usuário a correção dos possíveis erros.

O processamento de dados pode ser interrompido pelo usuário quando necessário com botão *Cancel*.

Com os dados processados uma nova janela do programa, com as informações das possíveis transições, é aberta. Esta janela disponibiliza ao usuário algumas funções específicas da rotina *Locator transition*, como pode ser visto nos quadros da Figura 3.4.



Possible transitions of Erf (500 nm - 501 nm) Absorption and Emission

λ_o (nm)	λ_{air} (nm)	Rl (u.a)	A_{is} (1/s)	Unc. A_{is} (+/- 1/s)	E_i (1/cm)	J_i	J_s	E_s (1/cm)
500,1729	500,0359	0,00	0	0,00	20166,1300	6,0	7,0	40159,2180
500,5871	500,4501	0,00	0	0,00	20737,7230	6,0	5,0	40714,2660
500,0074	499,8705	0,00	0	0,00	21101,5100	7,0	6,0	41101,2140
500,0070	499,8701	0,00	0	0,00	21168,4300	7,0	8,0	41168,1510
500,9095	500,7724	0,00	0	0,00	21204,4650	9,0	8,0	41168,1510
500,1624	500,0254	0,00	0	0,00	21392,8170	5,0	6,0	41386,3250
500,8867	500,7496	0,00	0	0,00	21551,9190	4,0	5,0	41516,5150
500,0179	499,8810	0,00	0	0,00	22361,6510	4,0	5,0	42360,9350
500,9659	500,8287	0,00	0	0,00	22649,9730	4,0	3,0	42611,4130
500,9665	500,8294	0,00	0	0,00	22650,0000	4,0	3,0	42611,4130
500,5032	500,3662	0,00	0	0,00	22691,8550	6,0	7,0	42671,7470

Number of transitions: 134

Buttons: Save, Print, Exit

Figura 3.4: Tela do Programa ASAS. (à esquerda) Resultados da rotina Locator Transitions: 1A) Tabela de dados; 2A) Salvar dados.

- Quadro 1A: Tabela de dados. Neste quadro o usuário tem acesso a tabela de dados com as informações pré-definidas pelo uso dos filtros de dados (Figura 3.3- quadro 4), e a opção imprimir esta tabela (botão *Print*).
- Quadro 2A: Salvar. Utilizando o botão *Save* o usuário tem opção de salvar as informações da tabela de dados em um arquivo do tipo *txt*.

Esta rotina foi desenvolvida com o intuito de identificar as linhas dos espectros da literatura em espectros obtidos experimentalmente.

3.1.3. Rotina: *Spectra Simulation*

A rotina *Spectra Simulation* utiliza a base de dados e certos parâmetros para construir espectros simulados, de átomos ou moléculas, através de curvas de Lorentz. A Figura 3.5 demonstra as funções específicas desta rotina através de quadros.

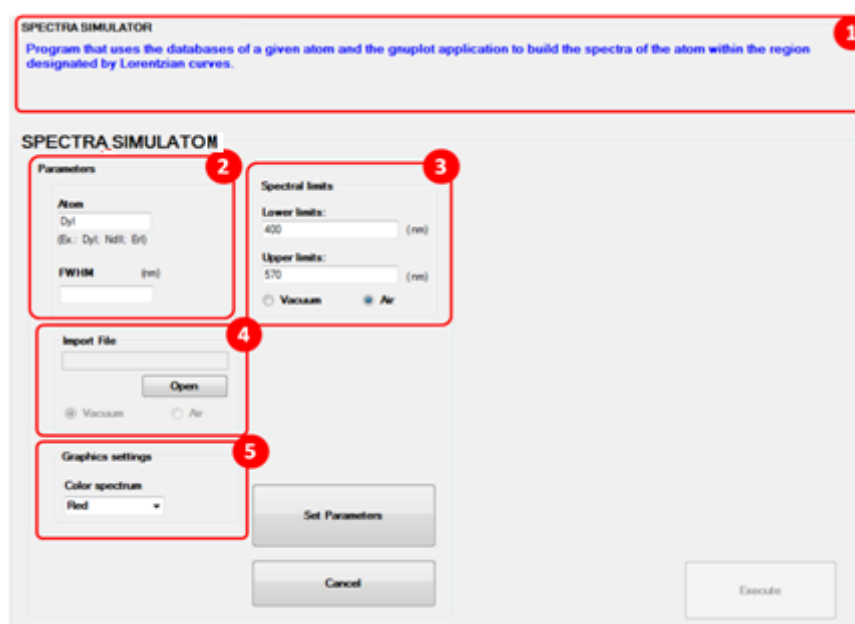


Figura 3.5: Tela do Programa ASAS. Resultados da rotina *Spectra Simulation*: 1) Descrição da rotina; 2) Parâmetros de entrada; 3) Região do espectro; 4) Importar arquivos; 5) Cor do espectro simulado.

- Quadro 1: Descrição da rotina utilizada.
- Quadro 2: Parâmetros de entrada. Neste quadro o usuário insere a sigla do átomo que se deseja estudar e o nível de energia inicial das possíveis transições.

A sigla do átomo pode conter letras maiúsculas, minúsculas e espaço entre as letras (Ex.: Dy I, Nd II, Er I, etc.). Caso o usuário insira a sigla de um átomo que não exista na base de dados, o sistema informa ao usuário, e o processamento de dados é cancelado.

O parâmetro FWHM (*Full Width at Half Maximum*), ou simplesmente chamado de largura de linha (à meia altura), pode ser escrito com o uso de vírgulas (",") ou pontos ("."). Este parâmetro define a resolução do espectro simulado e sua unidade é dada em nanômetros (vide seção 2.5).

- Quadro 3: Região do espectro. Neste quadro o usuário limita sua pesquisa em uma região do espectro cujo meio de propagação (ar ou vácuo) pode ser definido. Os limites, inferior e superior, do espectro são dados em nanômetros, podendo ser escritos tanto com vírgulas (",") ou pontos (".")
- Quadro 4: Importar arquivos. Com o uso desta função o usuário pode simular espectros de arquivos que não estão na base de dados. Esta função requer um pouco de cuidado do usuário, pois os arquivos importados devem ter extensão *txt*. Além de conter pelo menos duas colunas de dados, separadas por espaços em branco, onde a primeira coluna deve conter informações sobre o comprimento de onda de cada linha do espectro, e a segunda coluna com a intensidade relativa de cada linha do espectro.
- Quadro 5: Cor do Espectro. O usuário pode definir dentro de algumas opções a cor do espectro simulado.

O usuário deve então fixar os parâmetros de entrada (o botão *Set Parameters*). Se todas as informações fornecidas pelo usuário estão corretas, o botão de execução "*Execute*" da rotina é liberado. Caso exista algum dado incorreto, o sistema interrompe o processamento de dados e solicita ao usuário a correção dos possíveis erros.

O processamento de dados pode ser interrompido pelo usuário quando necessário com botão *Cancel*.

Em seguida, duas janelas são abertas (Figura 3.6). Na primeira janela, observa-se o gráfico do espectro simulado, com o uso do aplicativo *gnuplot*. Na janela superior estão as funções para salvar o gráfico do espectro (o botão *Save Plot Simulation*) e a função de salvar os dados que descrevem as curvas em arquivos *txt* (o botão *Save Simulation Data*).

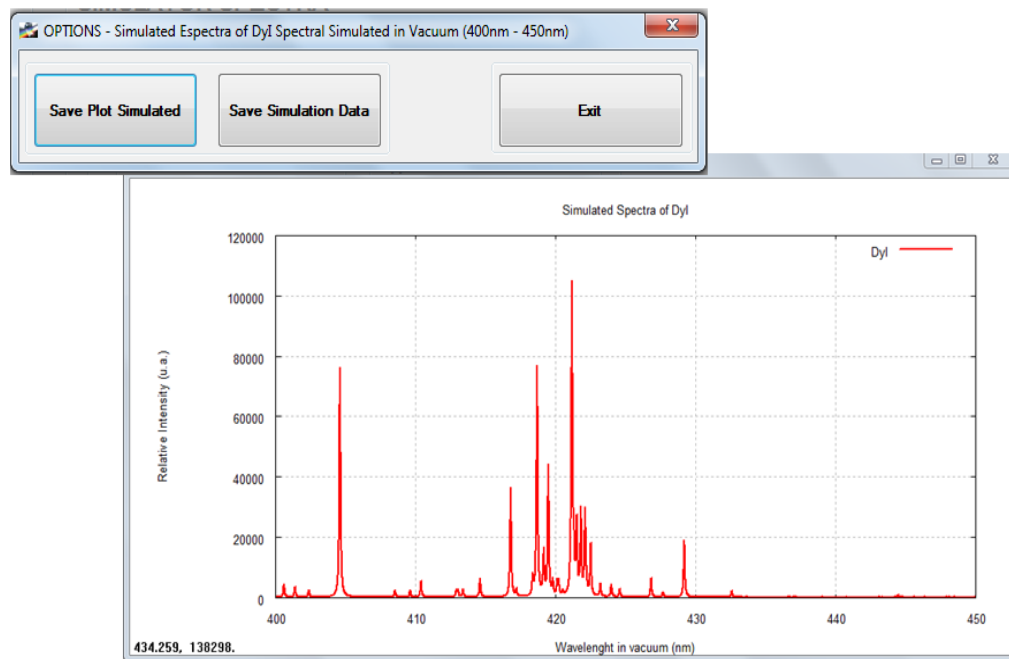


Figura 3.6: Tela do Programa ASAS. Resultado obtido pela rotina *Spectra Simulation*: Espectro simulado e opções de armazenamento de dados.

Todos os gráficos construídos pelo programa *Spectra Simulator* tem extensão *JPEG*.

3.1.4. Rotina: *Electronic Temperature*

A rotina *Electronic Temperature* utiliza a base de dados e informações de dados de espectros experimentais para determinar a temperatura dos elétrons de um sistema. Todos os cálculos realizados para determinar a temperatura tem como base a teoria clássica da mecânica estatística apresentada na seção 2.4.

Nos quadros da Figura 3.7 podem-se verificar as funções desta rotina.

ELECTRONIC TEMPERATURE
The program uses the database and experimental data to calculate the electron temperature through the concept of Boltzmann distribution.

ELECTRONIC TEMPERATURE

Parameters

Atom
Dy I
(Ex.: Dy I, Nd II, Er I)

Spectral limits

Lower limits: 400 (nm)

Upper limits: 570 (nm)

☒ Vacuum ☐ Air

Lines Select

Number	λ_0 (nm)	RI (u.a)	Ais (1/s)
<input type="checkbox"/> 075	400,0067	5,00	163000
<input type="checkbox"/> 076	400,1719	5,00	1070000
<input type="checkbox"/> 079	401,4958	540,00	2930000
<input type="checkbox"/> 080	402,2031	5,00	830000
<input type="checkbox"/> 081	402,4849	370,00	29000000
<input checked="" type="checkbox"/> 082	402,9546	5,00	23500000
<input type="checkbox"/> 083	404,6414	5,00	2380000
<input checked="" type="checkbox"/> 084	404,7115	12000,00	192000000
<input checked="" type="checkbox"/> 085	405,0507	5,00	2540000
<input checked="" type="checkbox"/> 086	405,7172	5,00	109000
<input checked="" type="checkbox"/> 087	408,0740	5,00	3390000
<input checked="" type="checkbox"/> 088	408,6283	5,00	11200000
<input type="checkbox"/> 089	408,6485	370,00	17100000
<input checked="" type="checkbox"/> 090	409,4791	5,00	3360000
<input type="checkbox"/> 092	410,5033	860,00	62000000
<input type="checkbox"/> 093	411,4214	5,00	23400000

Select All Clear All

Set Parameters Cancel Execute

Figura 3.7: Tela do Programa ASAS. Entrada de dados rotina *Eletronic Temperature* : 1) Descrição da rotina; 2) Parâmetros de entrada; 3) Região do espectro; 4) Seleção de linhas.

- Quadro 1: Descrição da rotina utilizada.
- Quadro 2: Parâmetros de entrada. Neste quadro o usuário insere a sigla do átomo que se deseja estudar e o nível de energia inicial das possíveis transições.

A sigla do átomo pode conter letras maiúsculas, minúsculas e espaço entre as letras (Ex.: Dy I, nd ii, eri, etc.). Caso o usuário insira a sigla de um átomo que não exista na base de dados, o sistema informa ao usuário, e o processamento de dados é cancelado.

- Quadro 3: Região do espectro. Neste quadro o usuário limita sua pesquisa em uma região do espectro cujo meio de propagação (ar ou vácuo) pode ser definido. Os limites, inferior e superior, do espectro são dados em nanômetros, podendo ser escritos tanto com vírgulas (",") e pontos (".")
- Quadro 4: Seleção de linhas. Este quadro só é habilitado depois que os dados são fixados pelo usuário e da confirmação do sistema. Aqui são apresentadas as linhas do espectro, registradas na base de dados, do átomo escolhido (no Quadro 1) e cabe ao usuário escolher quais destas linhas vão participar dos cálculos da temperatura dos elétrons. É importante, como visto na seção 2.4, que as linhas selecionadas pelo usuário, para o cálculo da temperatura eletrônica

tenham coeficiente de emissão espontânea, energia do nível superior da transição e momento angular vinculado ao nível superior. Para melhor entendimento da seleção de linhas pode-se, no capítulo 4, verificar o uso desta rotina.

Após a execução, uma nova janela é aberta com novos parâmetros utilizados pra construção do gráfico de Boltzmann e determinação da temperatura eletrônica do sistema. Nesta nova janela tem-se:

Temperature of Electrons in the Atom Dyl

Number	λ_0 (nm)	RI (u.a)	Ais (1/s)	Unc.Ais (+/- 1/s)	Ei (1/cm)	Ji	Js	Es (1/cm)	Intensity	Unc.Intensity
075	400.0067	5.00	163000	11410.00	0.0000	8.0	8.0	24999.5800		
076	400.1719	5.00	1070000	85600.00	7565.6000	8.0	8.0	32554.8600		
079	401.4958	540.00	2930000	146500.00	0.0000	8.0	7.0	24906.8600		
080	402.2031	5.00	830000	66400.00	7565.6000	8.0	8.0	32428.6600		
081	402.4849	370.00	29000000	1450000.00	7565.6000	8.0	7.0	32411.2500		
082	402.9546	5.00	23500000	1175000.00	7565.6000	8.0	7.0	32382.2900		
083	404.6414	5.00	2380000	190400.00	7050.6100	6.0	5.0	31763.8500		
084	404.7115	12000.00	192000000	9600000.00	0.0000	8.0	7.0	24708.9600		
085	405.0507	5.00	2540000	127000.00	4134.2300	7.0	7.0	28822.5000		
086	405.7172	5.00	109000	10900.00	7050.6100	6.0	7.0	31698.3200		
087	408.0740	5.00	3390000	169500.00	7050.6100	6.0	6.0	31555.9700		
088	408.6283	5.00	11200000	560000.00	7050.6100	6.0	5.0	31522.7300		
089	408.6485	370.00	17100000	855000.00	7565.6000	8.0	7.0	32036.5100		

Number of Lines: 177

Import Intensity

Edit Lines

Number	λ_0 (nm)	R.I.	Ais	Unc.Ais	Ei	Ji	Js	Es	Intensity	Unc.Intensity
075	400.0067	5.00	163000	11410.00	0.0000	8.0	8.0	24999.5800		

Save

Types of Spectra

☒ Emission ☐ Absorption

Temperature Calculation

Exit

Figura 3.8: Tela do Programa ASAS. Inserir intensidades na rotina *Eletronic Temperature* : 5) Tabela de dados; 6) Incluir Intensidades; 7) Tipo de espectro.

- Quadro 5: Tabela de dados. Neste quadro, o usuário tem acesso aos dados com as informações das linhas selecionadas anteriormente (Figura 3.7 - quadro 4). As colunas de intensidade da linha (*Intensity*) e de incerteza do valor da intensidade (*Unc. Intensity*) devem ser preenchidas pelo usuário. Existem duas formas de se preencher esta coluna. Na primeira, o usuário pode preencher as colunas, intensidade e incerteza da intensidade, de cada linha do espectro utilizando os parâmetros do quadro 6. Outra forma de se preencher estas colunas é através do botão *Import Intensity*, que possibilita o usuário importar dados de arquivos externos. Este arquivo deve ter extensão *txt*, além de conter três colunas com as informações no número da linha do espectro, intensidade da linha e incerteza do

valor intensidade (como o exemplo da Figura 3.9). Para linhas sem o valor da incerteza é assumido o valor de incerteza nulo.

312	2.3	0.23
310	3.52	0.352
300	1.55	0.155
126	17.59	1.759
118	13.74	1.374
114	14.83	1.483
131	4.69	0.469
130	4.19	0.419
129	4.1	0.41
117	3.73	0.373
108	9.75	0.975
113	2.83	0.283


**Número
da linha**


Intensidade


**Desv.
Intensidade**

Figura 3.9 Exemplo de arquivo formatado de intensidades de linhas.

- Quadro 6: Incluir dados. Este quadro tem a função de inserir na tabela de dados os valores das colunas, intensidade e incerteza da intensidade, de cada linha selecionada. Para concluir a inclusão/alteração dos dados o botão *Save* deve ser acionado.
- Quadro 7: Neste quadro, o usuário define de qual o tipo de espectro (emissão ou absorção) ele pretende calcular a temperatura.

Depois de todos os parâmetros inseridos e o botão para o cálculo da temperatura acionado (*Temperature Calculation*), duas novas janelas são abertas (como na Figura 3.10). Na primeira janela, observa-se o gráfico de Boltzmann para o cálculo da temperatura, com o uso do aplicativo *gnuplot*. Na janela superior, estão as funções para salvar o gráfico do espectro (o botão *Save Boltzmann Graphic*) e a função de salvar os dados das coordenadas dos pontos, utilizadas para o cálculo da temperatura, em arquivos txt (o botão *Save Data Plot*).

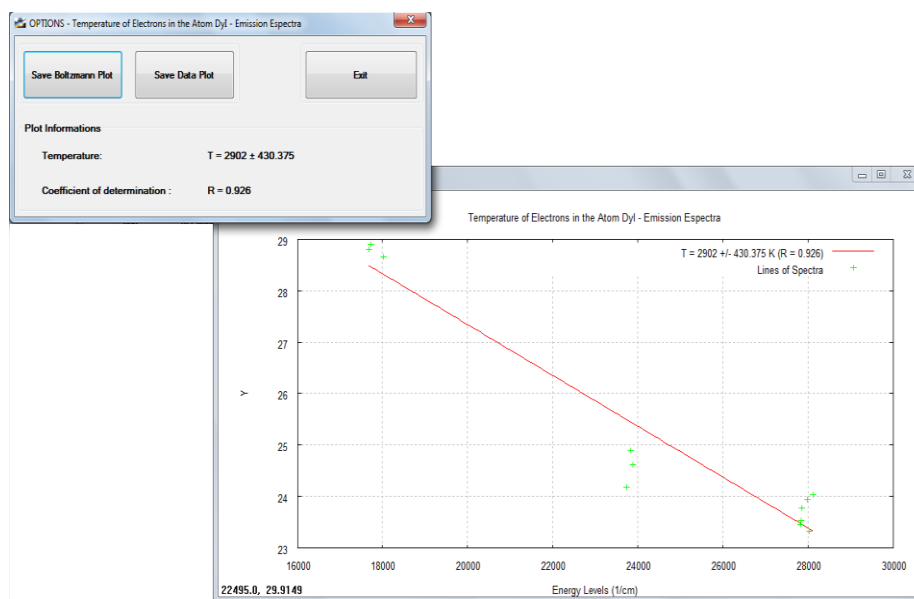


Figura 3.10: Tela do Programa ASAS. Resultado obtido pela rotina *Eletronic Temperature*: gráfico de Boltzmann para o cálculo da temperatura; valores obtidos de temperatura e coeficiente R^2 da reta ajustada; opções de armazenamento de dados.

3.2. Base de Dados

A base de dados definida para utilização do programa de análise e simulação de espectros atômicos (ASAS) e também para o projeto PASIL, consiste na utilização de arquivos com extensão *txt* contendo informações sobre os átomos de interesse. Toda base de dados do projeto esta dividida em dois diretórios, sendo que um deles está destinado aos dados das linhas do espectro e o outro contendo informações sobre os níveis de energia.

Nesta versão do programa, a base de dados é formada por dados obtidos da literatura [19,20] e possui apenas alguns átomos. Por este motivo, é muito importante que o usuário compreenda a formatação dos arquivos para obter dados corretos do espectro do átomo que se deseja estudar. Arquivos da base de dados formatados de maneira errônea podem provocar mau funcionamento do programa e, sucessivamente, nos resultados esperados de cada rotina.

3.2.1. Formatação de Arquivo: Linhas do Espectro

Os arquivos que armazenam as informações das linhas do espectro de um determinado átomo devem ser nomeados adequadamente com o seguinte padrão:


Lines <Sigla do átomo>.txt


Por exemplo: *Lines ErI.txt* é o nome do arquivo que contém as informações das linhas do espectro do átomo de Érbio não ionizado. A sigla que define o átomo pode ser escrita tanto com letras maiúsculas e minúsculas. (Exemplos: NdI, NDI ou ndi).


Além de nomeado e armazenado corretamente, os arquivos de linhas espectrais são formatados como uma tabela de dados com dez colunas. As colunas apresentam respectivamente: 1) número da linha do espectro; 2) comprimento de onda da linha no vácuo λ_0 (em nm); 3) comprimento de onda da linha no ar λ_{air} (em nm); 4) intensidades relativas *I. R.* da linha do espectro; 5) o coeficiente de emissão espontânea de Einstein A_{is} ; 6) a incerteza da coeficiente de emissão de Einstein; 7) o nível de energia do estado inferior E_{inf} (em cm^{-1}); 8) o momento angular total \vec{J} , do estado inferior J_{inf} ; 9) o nível de energia estado superior E_{sup} (em cm^{-1}); 10) o momento angular total \vec{J} , do estado superior J_{sup} .


Os dados de cada linha devem ser separados por espaços em branco (a quantidade de espaços não é relevante na compilação dos dados) como mostra a


1	258.60700	258.5300	220	00	00	00	00	00	00
2	262.44700	262.3690	370	00	00	00	00	00	00
3	264.29400	264.2150	110	00	00	00	00	00	00
4	266.87300	266.7940	110	00	00	00	00	00	00
5	273.66000	273.5790	55	00	00	00	00	00	00
6	286.35351	286.2690	140	7900000	474000	00	8	34921.870	7
7	288.63800	288.5530	120	00	00	00	00	00	00
8	296.54700	296.4600	220	6500000	00	00	8	00	8
9	300.19645	300.1090	5	1450000	87000	00	8	33311.520	7
10	301.51569	301.4280	5	1180000	82600	00	8	33165.770	8
11	313.47235	313.3820	5	1230000	61500	00	8	31900.740	9
12	313.69183	313.6010	5	1650000	99000	00	8	31878.420	7
13	314.86060	314.7694	300	11000000	00	00	7	00	8



**Número
da linha**



 λ_0



 λ_{ar}



I.R.


 A_{is}


**Desv.
 A_{is}**


 E_{inf}


 J_{inf}


 E_{sup}






 J_{sup}


Figura 3.11.


1	258.60700	258.5300	220	00	00	00	00	00	00
2	262.44700	262.3690	370	00	00	00	00	00	00
3	264.29400	264.2150	110	00	00	00	00	00	00
4	266.87300	266.7940	110	00	00	00	00	00	00
5	273.66000	273.5790	55	00	00	00	00	00	00
6	286.35351	286.2690	140	7900000	474000	00	8	34921.870	7
7	288.63800	288.5530	120	00	00	00	00	00	00
8	296.54700	296.4600	220	6500000	00	00	8	00	8
9	300.19645	300.1090	5	1450000	87000	00	8	33311.520	7
10	301.51569	301.4280	5	1180000	82600	00	8	33165.770	8
11	313.47235	313.3820	5	1230000	61500	00	8	31900.740	9
12	313.69183	313.6010	5	1650000	99000	00	8	31878.420	7
13	314.86060	314.7694	300	11000000	00	00	7	00	8



**Número
da linha**



 λ_o



 λ_{ar}



I.R.


 A_{is}


**Desv.
 A_{is}**


 E_{inf}


 J_{inf}


 E_{sup}



 J_{sup}

Figura 3.11: Formatação do arquivo de linhas do espectro para a base de dados do programa.

Os dados não conhecidos pela literatura podem assumir o valor "00". E todos os dados decimais podem ser representados tanto com o uso da vírgula (","), quanto com o uso do ponto (".").

3.2.2. Formatação de Arquivo: Níveis de Energia

Assim como os arquivos de linhas espectrais, os arquivos de níveis de energia também seguem alguns padrões de armazenamento e formatação. Estes arquivos são nomeados da seguinte forma:

Levels <Sigla do átomo>.txt

Por exemplo: o arquivo *Niveis YbII.txt* é o arquivo que contém os níveis de energia do átomo de itérbio uma vez ionizado.

Os arquivos de níveis de energia devem conter cinco colunas de dados e apresentam, respectivamente: 1) o momento angular \vec{J} associado ao nível de energia; o nível de energia E (em cm^{-1}); 3) a paridade de função de onda ψ que descreve os elétrons no nível de energia. Como padrão de formatação a paridade deve admitir os valores: 01 para funções de onda ímpares, 02 para funções de onda pares e 00 para funções de onda com paridade desconhecida; 4) O tempo de meia vida do nível de energia (em milissegundos); 5) a incerteza do tempo meia de vida.

É importante que estes passos sejam seguidos, pois qualquer mudança pode acarretar em erros nos resultados obtidos.

6	16070.095	01	1088	54.4
6	16321.11	01	00	00
7	16464.934	02	00	00
4	16472.783	01	00	00
9	16501.416	01	00	00
8	16727.479	02	00	00
5	17029.058	01	00	00
6	17073.8	01	00	00
7	17157.307	01	857	42.85
8	17297.668	01	00	00
5	17347.86	01	1190	59.5
6	17456.383	01	00	00

Figura 3.12: Formatação do arquivo de níveis de energia para a base de dados do programa.

3.2.3. Armazenamento de Arquivos

Após a formatação e a nomenclatura correta dos arquivos que compõem a base dados, o usuário deve armazenar corretamente os arquivos. Das fases de criação do arquivo esta é a mais importante, pois arquivos armazenados em locais errados não serão lidos pelo programa ASAS.

Assim que o programa é instalado pelo usuário é criada uma pasta de nome ASAS, dentro desta pasta estão os arquivos utilizados pelo programa, além da pasta *DATABASE*, onde os arquivos da base de dados devem ser armazenados. Como visto anteriormente, existem dois tipos de arquivo desta base de dados, por isso dentro da pasta *DATABASE* ainda existem mais duas distinções que devem ser seguidas com rigor. Os arquivos com as informações das linhas do espectro devem ser armazenados na pasta *LINES*, e os arquivos com os dados dos níveis de energia na pasta *LEVELS*. Este esquema de como o usuário deve armazenar os dados no sistema pode ser resumido na Figura 3.13.

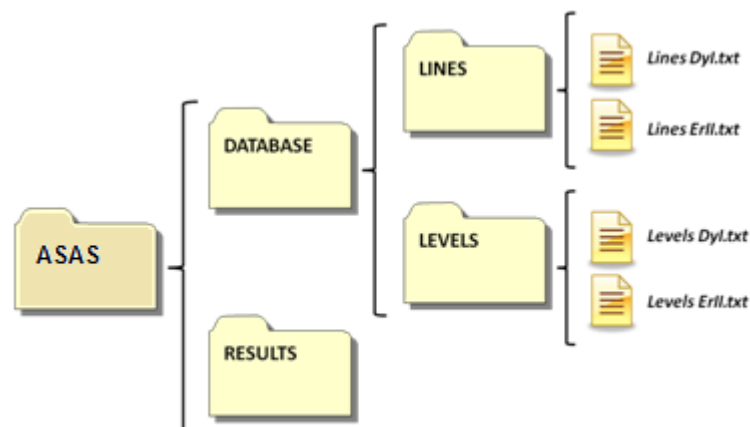


Figura 3.13: Esquema de armazenamento dos arquivos da base de dados.

3.2.4. Acesso a Base de Dados

A base de dados do programa ASAS pode ser acessada de duas formas. Na primeira opção, o usuário pode acessar os arquivos da base de dados através do caminho onde o programa foi instalado (como por exemplo: *C:\Users\Arquivos de Programas\ASAS\DATABASE\LEVELS\Levels ErII.txt*). Desta forma os dados dos arquivos podem ser alterados por qualquer editor de texto, como o *NotePad*.

Outra maneira de acesso aos arquivos da base de dados é através da rotina *Database* do próprio programa ASAS. O uso desta função pode ser mais bem entendido com o auxílio dos quadros da Figura 3.14.

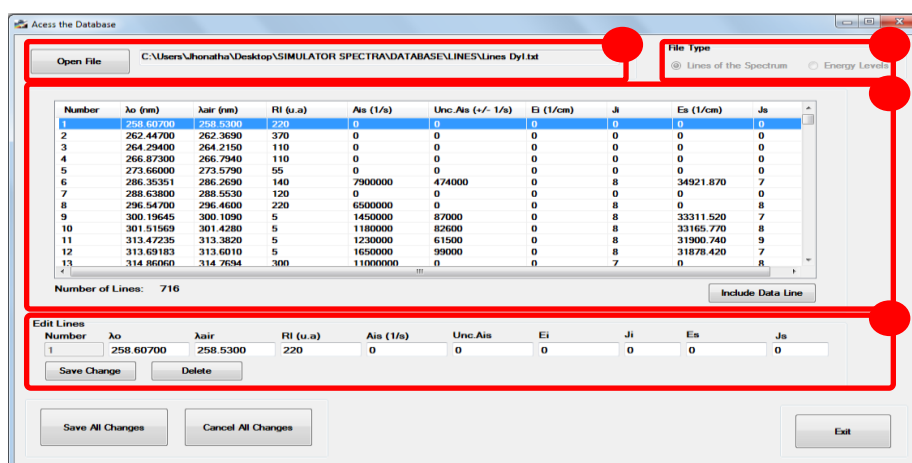


Figura 3.14: Tela do Programa ASAS. Rotina *Database*: 1) Abrir arquivo; 2) Tipo de arquivo; 3) Tabela de dados; 4) Alterar/Excluir dados.

Quadro 1: Abrir arquivo. Antes de qualquer procedimento, o usuário deve abrir um arquivo da base de dados, através do botão *Open File*. Arquivos que não estão armazenados na base de dados não podem ser abertos desta forma. O local onde o arquivo aberto esta armazenado será indicado no *textbox*.

Quadro 2: Tipo de arquivo. Neste quadro o usuário pode verificar qual o tipo de arquivo foi aberto (linhas do espectro ou níveis de energia). Este quadro não pode ser acessado pelo usuário.

Quadro 3: Tabela de dados. O quadro apresenta uma tabela com os dados do arquivo aberto. Com o botão *Include Data Line*, o usuário pode incluir uma nova linha de informações.

Quadro 4: Alterar/Excluir dados. Com este quadro, o usuário pode incluir, alterar ou excluir os dados de uma linha de dados selecionada do arquivo. Para concluir a inclusão/alteração dos dados, o botão *Save* deve ser acionado. O botão *Delete* apaga a linha de dados selecionada.

Para efetivar todas as mudanças, é indispensável que o usuário salve todas as mudanças (botão *Save All Changes*). As alterações realizadas pelo usuário podem ser canceladas com o botão *Cancel All Changes*.

4. ESPECTRO DE EMISSÃO DO DISPRÓSIO

Neste capítulo, são apresentados os resultados obtidos da espectroscopia de emissão de uma lâmpada de catodo oco de disprósio e argônio como gás tampão (LCO Dy-Ar), analisados utilizando o programa *Spectra Simulator*. O espectro em questão compreende as regiões entre 400 e 440 nm e entre 549 e 605 nm, que foram escolhidas devido à densidade e intensidade de linhas do espectro do átomo de disprósio no estado fundamental (Dy I). A partir dos espectros obtidos, foi estimada a temperatura de excitação eletrônica do átomo de disprósio na LCO utilizada, em quatro combinações de pressão do gás tampão e corrente aplicada à descarga. Tal estimativa foi feita por meio do Método do Gráfico de Boltzmann (apresentado na seção 2.4) através da rotina *Electronic Temperature* do programa *Spectra Simulator*.

4.1. Técnica da Espectroscopia de Emissão

A espectroscopia de emissão atômica (AES, do inglês *Atomic Emission Spectroscopy*) é uma das mais antigas técnicas para análise química e física, amplamente usada para a identificação e análise de elementos de uma amostra. A técnica é baseada na medição das emissões ópticas de átomos excitados ao decaírem para níveis inferiores de energia. As amostras são atomizadas e excitadas por chama, descarga elétrica, laser ou em plasma, dependendo de critérios em função de operação e medição. Com o decaimento dos átomos do gás para um estado de energia mais baixa, a diferença de energia entre os níveis é liberada na forma de uma emissão eletromagnética. Os centros das linhas de emissão são específicos para cada átomo e as intensidades relativas entre as linhas dependem das probabilidades das transições e da temperatura da amostra. A identificação dos elementos é obtida resolvendo-se os comprimentos de onda de emissão da amostra por meio de um espectrômetro [2].

4.2. Procedimento Experimental

O arranjo experimental utilizado neste trabalho está ilustrado na Figura 4.1.

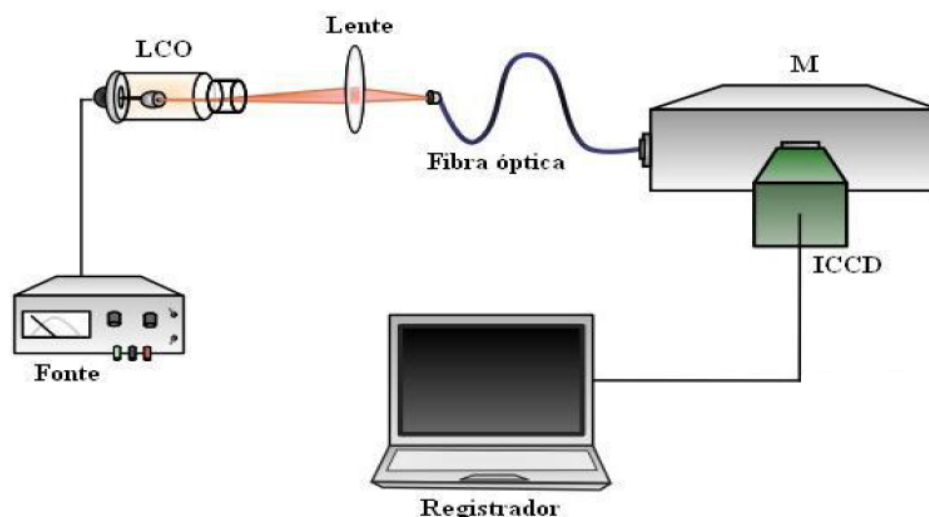


Figura 4.1: Arranjo Experimental utilizado na espectroscopia de emissão. LCO: Lâmpada de catodo oco de disprósio e argônio; M: monocromador.

O sistema consiste em uma lâmpada de catodo oco desenvolvida no IEAv para os estudos de espectroscopia atômica. Esta LCO foi alimentada por uma fonte de tensão estabilizada Tectrol, modelo 400/15. O sistema possui, também, um monocromador Jobin Yvon, modelo TRIAX 550, controlado por computador. Para este trabalho, este monocromador foi configurado para cobrir os espectros desde 400 nm até 600 nm por meio da grade de difração 12008 H- 500 G - 1200 g/mm (*blazed* para 500 nm). Uma câmara ICCD Dicam-Pró DP-25-SVGA-P46 (280-1000 nm) também está acoplada ao sistema para detecção do espectro.

Para verificar os efeitos causados pela corrente de operação e pela pressão no interior da LCO na temperatura eletrônica do átomo de Dy I, o experimento foi realizado aplicando combinações diferentes de corrente de operação e pressão. Quatro combinações foram utilizadas: i) pressão de 1 mbar e corrente de 10 mA; ii) pressão de 1 mbar e corrente de 40 mA; iii) pressão de 10 mbar e corrente de 10 mA e iv) pressão de 10 mbar e corrente de 40 mA.

Os espectros de emissão foram obtidos por meio da ICCD. A radiação emitida pela LCO foi focalizada na fibra óptica empregando-se uma lente de quartzo de distância focal de 150 mm. A fenda de entrada do monocromador utilizada foi 0,002 mm. A grade do TRIAX era fixada em uma posição central da varredura e, então, o espectro era registrado com um intervalo de comprimento de onda de, aproximadamente, 20 nm ao redor desta posição. O tempo de exposição da ICCD foi ajustado de acordo com cada espectro para não danificar a ICCD e garantir que

nenhuma linha ficasse saturada. Posteriormente, o tempo de exposição de todos os espectros obtidos foi normalizado em 1 ms.

Utilizando o mesmo sistema para a espectroscopia de emissão, foram obtidos os espectros de uma lâmpada de tungstênio, da Oriel, modelo 63355, calibrada em intensidade. Os dados dos espectros desta lâmpada permitem a correção dos dados das intensidades das linhas obtidas nos experimentos. A correção dos espectros quanto às intensidades encontram-se no Apêndice B, bem como a calibração da escala de comprimento de onda realizada para corrigir os possíveis desvios devido ao deslocamento da grade no monocromador. A calibração da escala de comprimento de onda foi realizada a partir de linhas tabeladas nas bases de dados para os átomos presentes na LCO.

4.3. Lâmpada de Catodo Oco

A lâmpada de catodo oco utilizada neste trabalho (Figura 4.2) foi desenvolvida no próprio IEAv. Apesar do nome, lâmpada de catodo oco, esta descarga de catodo oco é bastante diferentes das lâmpadas de catodo oco comerciais. A descarga de catodo oco desenvolvida possui catodo removível, portanto, o material que será analisado pode ser substituído. Neste experimento, utilizou-se no catodo uma lâmina de disprósio. A descarga de catodo oco é montada em uma câmara lacrada preenchida por um gás inerte (neste caso o argônio) e o sistema é refrigerado por água corrente. A Figura 4.3 apresenta os elementos que compõem a descarga e sua montagem.

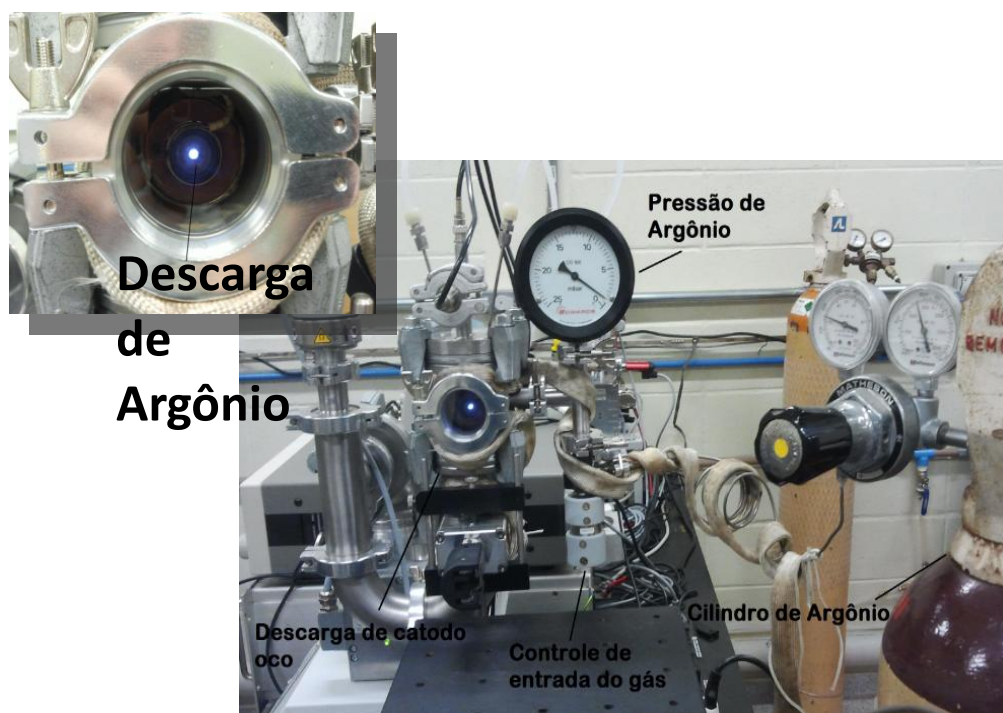


Figura 4.2: Descarga de catodo oco desenvolvida no IEAv.

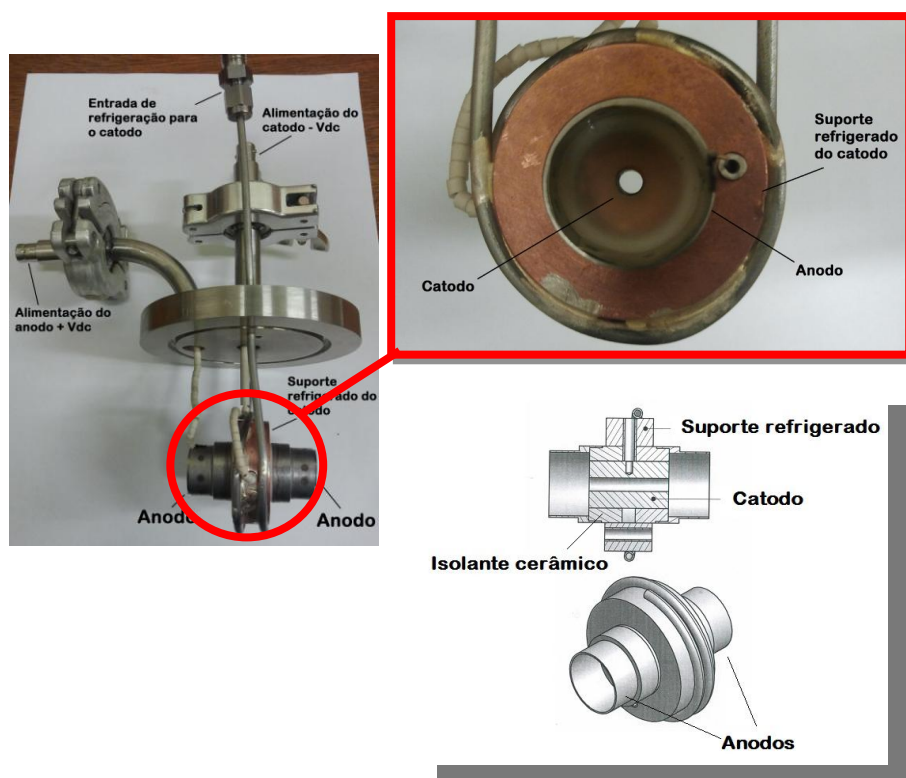


Figura 4.3: Elementos e montagem da descarga de catodo oco.

Uma importante característica desta descarga de catodo oco é a possibilidade de variar significativamente (de 0 a 40 mA) os valores de sua corrente de operação e alterar

tanto o gás de preenchimento quanto a pressão deste gás. Tais mudanças são impossíveis em LCO comerciais.

O funcionamento das LCO consiste na aplicação de uma diferença de potencial entre os eletrodos, promovendo-se uma descarga dentro do recipiente preenchido pelo gás, provocando a ionização do gás. Os íons (cátions) formados são atraídos e acelerados ao catodo (negativo), colidindo violentamente com as paredes internas da cavidade do mesmo, arrancando átomos que ficam no estado de vapor e são confinados no interior do catodo oco. Ocorre, assim, a colisão destes átomos com os elétrons presentes na descarga e com os íons do gás de preenchimento (Ar^+). Assim, tais átomos recebem energia suficiente para que ocorram transições eletrônicas promovendo seus elétrons de valência para um estado de maior energia. Os átomos no estado excitado são instáveis, readquirindo sua estabilidade emitindo a energia armazenada na forma de radiação eletromagnética, e, desta forma, volta ao seu estado fundamental. Desta forma, os comprimentos de onda emitidos pela LCO são característicos do metal que constitui o catodo e o gás de preenchimento, neste experimento, disprósio e argônio [21].

4.4. Resultados e Discussão

Esta seção será destinada a apresentar os resultados obtidos experimentalmente por meio da espectroscopia de emissão. É feita a identificação das linhas de Dy I e Ar I no espectro experimental com o auxílio dos espectros simulados pelo programa *Spectra Simulator*. Em seguida, utilizando novamente o programa, apresenta-se uma discussão a respeito da determinação da temperatura eletrônica do átomo de Dy I e o comportamento da temperatura com a variação da corrente de operação e pressão no interior da LCO. Neste trabalho, todos os valores de comprimento de onda são definidos no ar. A base de dados para o Dy I foi construída a partir de dados da literatura [19,20].

4.4.1. Análise dos Espectros de Emissão

Nesta seção, será apresentada a análise dos espectros na região de 400 a 440 nm e de 545 a 605 nm. Esta região de interesse corresponde à região com maior densidade de linhas espectrais do átomo de disprósio com intensidade relevante para o cálculo da temperatura de excitação eletrônica. Os espectros foram tratados quanto à intensidade e ao comprimento de onda, sendo que o procedimento detalhado está descrito no

Apêndice B. Utilizando a ICCD, as larguras de linha para a grade de 1200 linhas/mm correspondem a aproximadamente 0,1 nm (89 GHz).

Após as correções dos espectros, as linhas do átomo de Dy I, com intensidades relevantes para o cálculo da temperatura de excitação eletrônica, foram identificadas. Para identificação das Linhas de Dy I foi utilizado à rotina de simulação de espectros do programa *Spectra Simulator*. Os espectros simulados do átomo de argônio Ar I (não ionizado) e Ar II (uma vez ionizado), também foram utilizados para auxiliar a identificação das linhas. A Figura 4.4 apresenta as linhas de Dy I, Ar I e Ar II identificadas na região entre 398 a 418 nm.

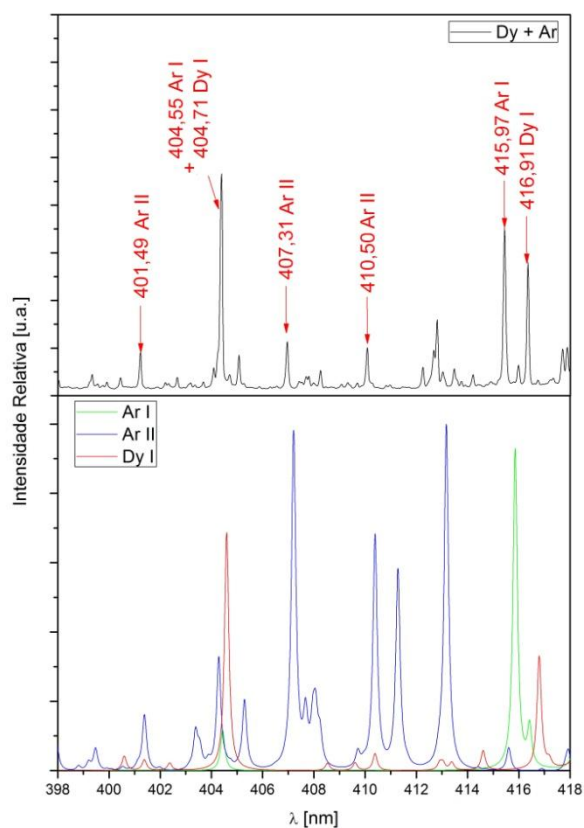


Figura 4.4: Identificação das linhas espectrais na região de 398 a 418 nm: (acima) espectro experimental; (abaixo) espectros simulados de Dy I, Ar I e Ar II.

Os espectros identificados das demais regiões de interesse (420 a 440 nm e 585 a 605 nm) podem ser visualizados no Apêndice B.

4.4.2. Determinação da Temperatura Eletrônica de Excitação

Para o cálculo da temperatura de excitação eletrônica dos átomos de Dy I, foi calculada a intensidade de cada uma das linhas de interesse do espectro. A intensidade

de uma linha espectral é proporcional à área sob essa linha, e o método utilizado neste trabalho, para o cálculo das áreas, foi através das áreas de curvas gaussianas ajustadas sobre cada linha do espectro. O desvio da intensidade das linhas por este método é da ordem de 10% [15]. Todo método para o cálculo da intensidade através da área é descrito no Apêndice C. Como o comportamento das linhas espectrais varia de acordo com o regime que é imposto à descarga elétrica (pressão e corrente de operação), as áreas das linhas espectrais, de interesse, foram calculadas para cada um dos regimes utilizados: i) pressão de 1 mbar e corrente de 10 mA; ii) pressão de 1 mbar e corrente de 40 mA; iii) pressão de 10 mbar e corrente de 10 mA e iv) pressão de 10 mbar e corrente de 40 mA. As informações sobre as linhas de Dy I utilizadas, para cada regime, são apresentadas na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Dados das linhas espectrais de Dy I utilizadas para o cálculo da temperatura de excitação eletrônica, nas quatro condições de operação da lâmpada de catodo oco (gás tampão: argônio).

N	λ_{ar} (nm)	A_{is} ($10^6 s^{-1}$)	δA_{is} ($10^6 s^{-1}$)	E_s (cm^{-1})	J_s	$I(u.a.)$			
						<i>1mbar</i> <i>10 mA</i>	<i>1mbar</i> <i>40 mA</i>	<i>10mbar</i> <i>10 mA</i>	<i>10mbar</i> <i>40 mA</i>
108	416,80	192,0	9,60	28119,94	6	0,026	0,076	0,0010	0,15
114	418,68	126,0	6,30	23877,75	8	0,072	0,12	-	0,25
118	419,48	88,0	4,40	23832,07	8	0,063	0,11	-	0,23
126	421,17	208,0	10,4	23736,6	9	0,12	0,19	-	0,39
129	421,52	81,0	4,05	27851,43	8	0,018	0,068	0,0067	0,12
130	421,81	120,0	6,00	27834,93	7	0,020	0,058	-	0,087
131	422,11	128,0	6,40	27817,99	8	0,023	0,062	-	0,10
133	422,52	195,0	9,75	30711,7	7	0,009	0,031	-	0,052
300	554,73	0,30	0,030	18021,89	8	0,031	0,076	0,00031	0,012
310	563,95	0,49	0,039	17727,15	9	0,066	0,16	0,00075	0,031
312	565,20	0,446	0,0223	17687,9	7	0,047	0,11	-	0,024
340	597,45	0,42	0,0336	16733,2	8	0,050	0,13	0,0011	0,023
342	598,86	0,561	0,0281	16693,87	7	0,065	0,16	0,0015	0,031

Em seguida, a rotina *Electronic Temperature* do programa *Spectra Simulator* foi utilizada para determinação da temperatura. Com mencionado anteriormente (secção Rotina: *Electronic Temperature* 3.1.4), esta rotina utiliza o Método do Gráfico de Boltzmann para determinar a temperatura de excitação eletrônica de um sistema. Os resultados obtidos são apresentados a seguir, levando em conta o regime no qual está submetido a descarga de catodo oco (pressão do gás inerte e corrente de operação) e os dados apresentados na Tabela 4.1.

A) Para pressão de 1 mbar e corrente de 10 mA:

Obteve-se uma reta ajustada com coeficiente de determinação (R^2) igual a 0,95, e uma temperatura eletrônica de excitação dos átomos de Dy I de 2266 ± 30 K. A Figura 4.5 representa o ajuste linear realizado.

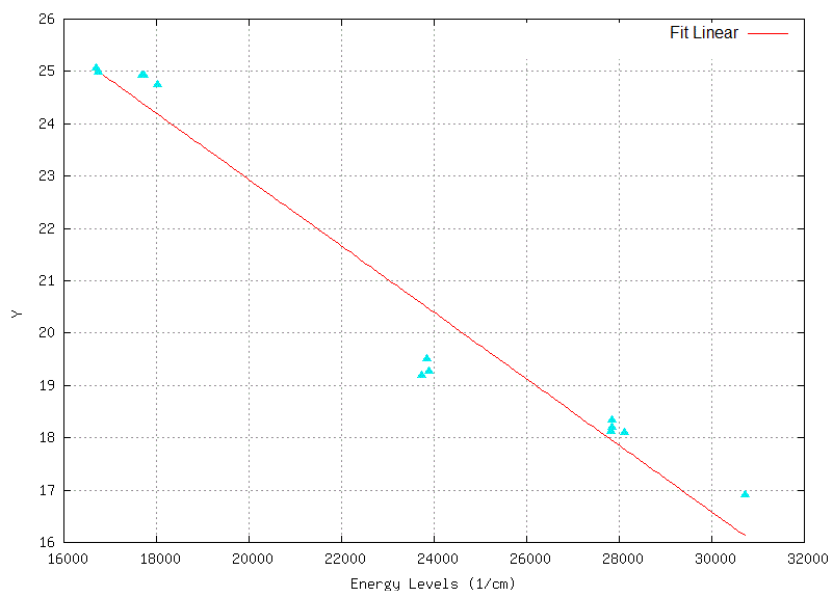


Figura 4.5: Determinação da temperatura eletrônica dos átomos de Dy I, na descarga de catodo oco. Gás sob pressão de 1 mbar e corrente de operação de 10 mA.

B) Para pressão de 1 mbar e corrente de 40 mA:

Neste regime, a reta ajustada (Figura 4.6) tem coeficiente de determinação igual a 0,92, e a temperatura eletrônica, dos átomos de Dy I, calculada foi de 2324 ± 33 K.

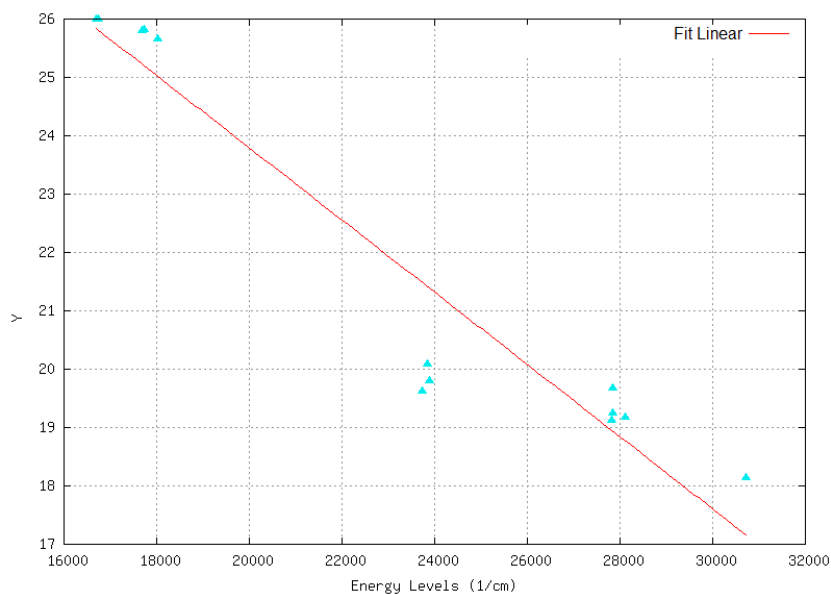


Figura 4.6: Determinação da temperatura eletrônica dos átomos de Dy I, na descarga de catodo oco. Gás sob pressão de 1 mbar e corrente de operação de 40 mA.

C) Para pressão de 10 mbar e corrente de 10 mA:

Com estes valores de pressão do gás inerte (argônio) e corrente de operação, os átomos de Dy I, na descarga, apresentam temperatura eletrônica de excitação igual a 3252 ± 98 K. A reta ajustada (ver Figura 4.7) apresenta coeficiente R^2 igual a 0,91.

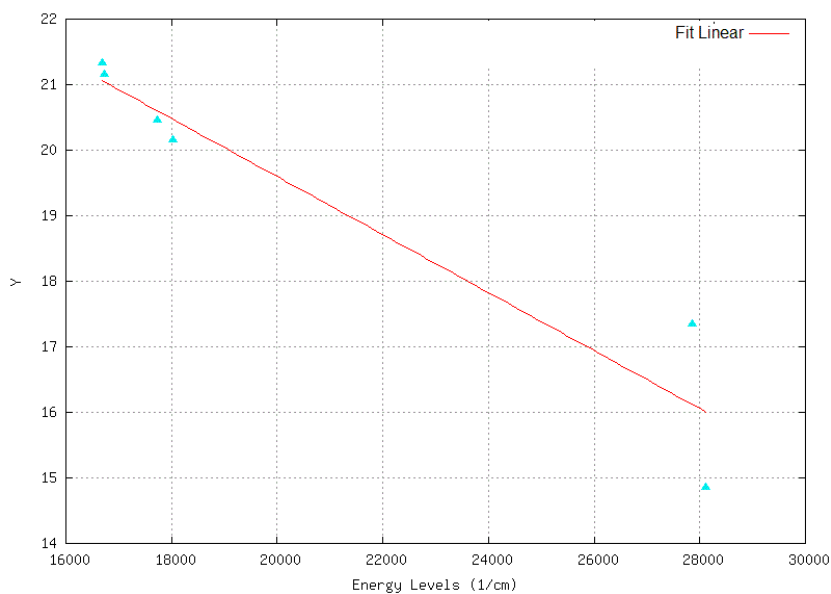


Figura 4.7: Determinação da temperatura eletrônica dos átomos de Dy I, na descarga de catodo oco. Gás sob pressão de 10 mbar e corrente de operação de 10 mA.

D) Para pressão de 10 mbar e corrente de 40 mA:

No último regime, ao qual a descarga foi submetida, a temperatura de excitação dos átomos de Dy I foi de 3462 ± 70 K. A reta ajustada apresenta coeficiente de determinação de 0,95.

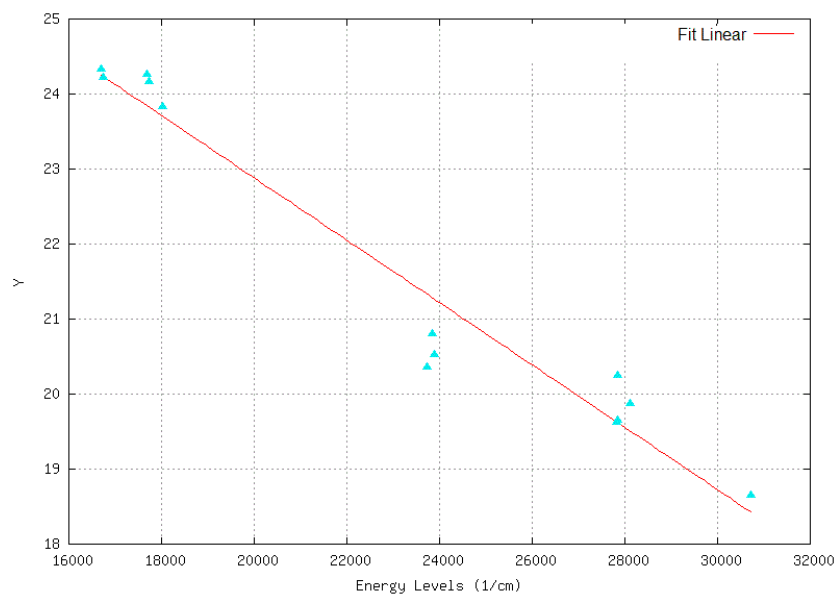


Figura 4.8: Determinação da temperatura eletrônica dos átomos de Dy I, na descarga de catodo oco. Gás sob pressão de 10 mbar e corrente de operação de 40 mA.

A Tabela 4.2 resume os resultados. Observa-se que, tanto o aumento da corrente quanto o da pressão do gás tampão, faz com que a temperatura de excitação eletrônica dos átomos do catodo aumente.

Tabela 4.2: Resumo dos resultados obtidos para a temperatura de excitação eletrônica da LCO de disprósio, para as diversas condições de operação.

	10 mA	40 mA
1 mbar	2266 ± 30 K	2324 ± 33 K
10 mbar	3252 ± 98 K	3462 ± 70 K

5. CONCLUSÕES

Neste trabalho, foi desenvolvido um código computacional para simulação e análise de espectros atômicos, a partir de bases de dados construídas a partir de dados da literatura, com rotinas aplicáveis ao processo atômico de separação isotópica a laser: i) na primeira rotina do programa desenvolvido, *Possible Transitions*, o programa verifica as possíveis transições eletrônicas, a partir de um nível de energia, aplicando as regras de seleção de paridade e de momento angular total ($\Delta J = 0, \pm 1$); ii) a rotina *Locator Transitions* verifica, aplicando novamente as regras de seleção, as possíveis transições eletrônicas dentro de uma região espectrais; iii) a rotina *Spectra Simulator* cria espectros simulados, utilizando o aplicativo gráfico *gnuplot*, através de curvas lorentzianas e; iv) a rotina *Eletronic Temperature* determina a temperatura de excitação eletrônica através do Método Gráfico de Boltzmann.

Para verificar a confiabilidade dos dados obtidos através do programa *Spectra Simulator*, suas rotinas foram utilizadas para a análise de espectros de emissão obtidos experimentalmente. Os espectros foram registrados a partir de uma descarga de catodo oco de disprósio e argônio como gás tampão, desenvolvida no IEAv. A descarga de catodo oco foi submetida a regimes, com valores de pressão do gás inerte (argônio) e de corrente de operação, diferentes. Os espectros obtidos foram, então, tratados com relação ao comprimento de onda e intensidade. Neste processo de tratamento, utilizaram-se as rotinas *Locator Transistion* e *Spectra Simulator* do programa. Em seguida, utilizando-se a rotina *Eletronic Temperature*, foi possível determinar as temperaturas eletrônicas de excitação dos átomos de Dy I na descarga de catodo oco. Para o regime com: i) corrente de operação de 10 mA e pressão do gás inerte de 1 mbar, a temperatura eletrônica foi de 2266 ± 30 K; ii) corrente de operação de 40 mA e pressão do gás inerte de 1 mbar, a temperatura eletrônica foi de 2324 ± 33 K; iii) corrente de operação de 10 mA e pressão do gás inerte de 10 mbar, a temperatura eletrônica foi de 3252 ± 98 K; iv) corrente de operação de 40 mA e pressão do gás inerte de 10 mbar, a temperatura eletrônica foi de 3462 ± 70 K. Verificou-se, também, com a rotina *Eletronic Temperature*, que as retas ajustadas para a determinação de temperatura, através do Método do Gráfico de Boltzmann, apresentam coeficientes de determinação, R^2 , superiores a 0,91.

A partir da análise dos dados obtidos com a utilização do programa desenvolvido, *Spectra Simulator*, pôde-se confirmar a confiabilidade do programa, em todas as suas rotinas. Atualmente, todas as rotinas implementadas estão sendo utilizadas em trabalhos realizados no laboratório do IEAv, no projeto de desenvolvimento do processo atômico de separação de isótopos a laser dos terras-raras [2].

TRABALHOS FUTUROS

- Criar um manual de instruções do programa, versões em português e inglês, e disponibilizá-lo gratuitamente.
- Implementar a possibilidade de simulação de espectros com outras formas de linha (gaussiana, Voigt).

REFERÊNCIAS

- [1] VICTOR, A. R. **Espectroscopia Optogalvânica Neodímio em Lâmpada de Catodo Oco**. Dissertação de mestrado (ITA), São José dos Campos, 2010.
- [2] BUENO, P. **Espectroscopia Optogalvânica de Érbio Visando à Separação Isotópica a Laser**. Dissertação de mestrado (ITA), São José dos Campos, 2012.
- [3] SANTOS, J. R.; DESTRO, M. G.; SBAMPATO, M. E.; BUENO, P.; VICTOR A. R.; BARRETA, L. F. N.; Simulação do Espectro de Disprósio na Região de 570 nm a 650 nm. In: SEMINÁRIO ANUAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E PÓS-GRADUAÇÃO DO IEAv, 2011, São José dos Campos. **Anais...** São José dos Campos: IEAv, 2011, v. 1, p.25-30.
- [4] SANTOS, J. R.; DESTRO, M. G.; SBAMPATO, M. E.; BUENO, P.; VICTOR A. R.; BARRETA, L. F. N.; Análise do Espectro de Emissão do Disprósio em Lâmpada de Catodo Oco. In: SIMPÓSIO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA DO INSTITUTO DE ESTUDOS AVANÇADOS, 2012, São José dos Campos. **Anais...** São José dos Campos: IEAv, 2012, v. 1, p.95-100.
- [5] EISBERG, R. RESNICK, R. **Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas**. 9ed. Rio de Janeiro: Campus, 1992.
- [6] FILHO, W. W. **Mecânica Quântica**. Goiânia: UFG, 2002.
- [7] SUBRAMANIAN, N. Oliveira, S. F. **Algumas Considerações Sobre A Regra de Hund e a Estrutura Eletrônica de Átomos no Ensino de Química**, 1996. Disponível em <http://www.scielo.br/pdf/qn/v20n3/4952.pdf>. Acessado em: 11 out. 2012.
- [8] FARIA, R. B. **Termos Espectrais para Átomos e Íons Livres**, 2012. Disponível em: http://faria.iq.ufrj.br/termos_espectrais.pdf. Acessado em: 11 out. 2012.
- [9] DRAKE, G. W. F. **Atomic Molecular and Optical Physics Handbook**. Atomic Spectroscopy. Disponível em: <http://sed.nist.gov/Pubs/AtSpec/total.html>. Acesso em: 15 jun. 2012.
- [10] GRIFFITHS, D. J. **Mecânica Quântica**. 2ed. São Paulo: Pearson, 2011.
- [11] EISBERG, R. M. **Fundamentals of Modern Physics**. 3ed. Wiley: 1963.
- [12] DENTRODER, W. **Laser Spectroscopy: Basic Concepts and Instrumentation**. 3ed. New York: Springer, 2003, 987p.
- [13] SISMANOGLU, B. N. **Estudo e Caracterização de Microplasmas Luminescentes Através de Espectroscopia Óptica de Emissão**. 2010. 201p. Tese (Doutorado em Física Atômica e Molecular) - Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos.
- [14] ZHOU, X.; LI, Y.; WANG, J.; HUANG, Z., The Temperature Menasurement of the Electrothermal - Chemical Laucher Plasma by Atomic Emission Spectroscopy. **IEEE TRANSACTIONS ON PLASMA SCIENCE**, v. 29, n. 2, 2001.

-
- [15] ROUFFET M. E.; WENDT, M.; GOETT, G.; KOZAKOV, R.; WELTMANN, K. D.; UHRLANDT, D., Spectroscopic Investigation of the high-current phase of pulsed GMAW process. Leibniz Institute for Plasma Science and Technology, Felix-Hausdorff-Str.2, 17489 Greifswald, Germany.
- [16] DENTRODER, W. **Atoms, Molecules and Photons**. 1ed. New York: Springer, 2006, 578p.
- [17] DESTRO, M. G. **Espectroscopia a Laser em Vapor Metálico de Urânio**. 1993. 163p. Tese (Doutorado em Física Atômica e Molecular) - Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos.
- [18] WILLIAMS, T. KELLEY, C. **Gnuplot**, Geeknet, Inc. Disponível em: <http://www.gnuplot.info>. Acesso em: 15 ago. 2011.
- [19] RALCHENKO, Yu.; KRAMIDA, A.E.; READER, J., National Institute of Standards and Technology, **Nist Atomic Spectra Database**, Gaithersburg, MD. Disponível em: <http://physics.nist.gov/asd3>. Acesso em: 15 mar. 2012.
- [20] WICKLIFFE, M. E., LAWLER, J. E. e NAVE, G., Transition Probabilities for Dy I and Dy II. **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 66, p. 6 – 29, may.1999.
- [21] KRUG, J. F., **Espectroscopia de Absorção Atômica**. Disponível em: <http://apostilas.cena.usp.br/Krug/AAS%20geral%20parte%201%20revisada.pdf>. Acesso em 20 nov. 2012.

APÊNDICE A: Base de Dados Espectroscópicos do Dy I construída a partir de [2,20]

A1 Níveis de Energia

J = Número quântico de momento angular total.

E = Energia do nível (cm^{-1}).

P = Paridade do nível: (01) = ímpar; (02) = par.

t = Tempo de vida do nível (ns).

Δt = Desvio no tempo de vida do nível (ns).

Os valores 00 na tabela indicam que não há dados na literatura.

Tabela A1.1: Níveis de energia do Dy I (0 cm^{-1} a $16693,87 \text{ cm}^{-1}$)

J	E	P	t	Δt
8	0	02	00	00
7	4134,23	02	00	00
6	7050,61	02	00	00
8	7565,6	01	00	00
7	8519,2	01	00	00
5	9211,58	02	00	00
9	9990,95	01	00	00
6	10088,8	01	00	00
4	10925,25	02	00	00
6	11673,49	01	00	00
8	12007,1	01	00	00
5	12298,56	01	00	00
7	12655,13	01	00	00
10	12892,76	01	00	00
9	13495,92	01	00	00
4	139502	00	00	00
5	14153,49	01	00	00
7	14367,8	01	00	00
8	14625,64	01	00	00
6	14970,7	01	00	00
7	15194,83	01	00	00
3	15254,94	00	00	00
8	15567,38	01	00	00
6	15862,64	01	00	00
9	15972,35	01	00	00
4	16069,98	00	00	00
8	16288,73	01	00	00
4	16412,8	00	00	00
6	16591,38	01	00	00
5	16684,73	00	00	00
7	16693,87	01	00	00

Tabela A1.2: Níveis de energia do Dy I ($16717,79 \text{ cm}^{-1}$ a $19688,59 \text{ cm}^{-1}$)

J	E	P	T	Δt
9	16717,79	01	00	00
8	16733,2	01	00	00
5	17502,89	00	00	00
10	17513,33	01	00	00
9	17514,5	00	00	00
8	17613,36	00	00	00
7	17687,9	01	00	00
9	17727,15	01	00	00
5	17804,24	01	00	00
8	18021,89	01	00	00
7	18094,502	00	00	00
6	18172,87	00	00	00
7	18339,8	01	00	00
7	18433,76	01	00	00
10	18462,65	00	00	00
8	18472,71	01	00	00
7	18528,55	01	00	00
6	18561,02	00	00	00
6	18711,93	01	00	00
7	18857,04	01	00	00
8	18903,201	00	00	00
7	18937,78	00	00	00
8	19019,15	00	00	00
8	19092,3	01	00	00
6	19182,66	00	00	00
9	19240,802	00	00	00
6	19304,26	01	00	00
11	19348,702	00	00	00
5	19480,87	00	00	00
9	19557,83	01	00	00
8	19688,59	01	00	00

Tabela A1.3: Níveis de energia do Dy I
(19797,96 cm⁻¹ a 23440,46 cm⁻¹)

J	E	P	t	Δt
10	19797,96	01	00	00
5	19813,98	00	00	00
6	19856,88	00	00	00
7	19907,501	00	00	00
8	20193,6	00	00	00
9	20209	00	00	00
8	20341,32	01	00	00
4	20430,101	00	00	00
11	20448,44	01	00	00
4	20474,99	00	00	00
7	20485,4	01	00	00
6	20554,73	01	00	00
7	20614,302	00	00	00
7	20766,29	01	00	00
8	20789,85	00	00	00
6	20817,61	01	00	00
8	20884,87	01	00	00
5	20891,64	01	00	00
5	20921,55	01	00	00
7	20954,18	01	00	00
7	21074,02	00	00	00
6	21159,79	00	00	00
6	21392,4	01	00	00
9	21540,68	01	00	00
8	21603,04	00	00	00
7	21675,28	00	00	00
7	21675,28	01	00	00
7	21778,43	00	00	00
7	21783,42	01	00	00
10	21788,93	01	00	00
9	21838,55	01	00	00
8	21899,22	01	00	00
9	22045,79	00	00	00
7	22061,29	00	00	00
4	22099,06	00	00	00
6	22286,87	01	00	00
5	22294,88	00	00	00
10	22487,14	00	00	00
5	22524,201	00	00	00
12	22541,18	00	00	00
6	22633,23	00	00	00
7	22647,94	01	00	00
4	22696,802	00	00	00
8	22767,83	01	00	00
4	22938,03	00	00	00
6	22956,84	00	00	00
8	23031,46	00	00	00
9	23218,59	00	00	00
9	23271,74	01	00	00
8	23280,46	00	00	00
6	23333,902	00	00	00
7	23340,12	01	00	00
6	23359,82	01	00	00
7	23360,66	00	00	00
8	23388,95	00	00	00
5	23440,46	01	00	00

Tabela A1.4: Níveis de energia do Dy I
(23464,002 cm⁻¹ a 25744,35 cm⁻¹)

J	E	P	T	Δt
6	23464,002	00	00	00
7	23479,77	00	00	00
6	23529,01	01	00	00
8	23534,5	00	00	00
5	23552,65	00	00	00
7	23591,27	00	00	00
7	23655,36	00	00	00
11	23677,38	01	00	00
6	23683,87	00	00	00
4	23686,801	00	00	00
6	23687,87	00	00	00
9	23736,6	01	00	00
9	23780,26	00	00	00
7	23799,401	00	00	00
3	23824,68	00	00	00
8	23832,07	01	00	00
9	23841,9	00	00	00
8	23877,75	01	00	00
10	23953,3	01	00	00
7	23972,34	00	00	00
6	24040,59	01	00	00
6	24040,59	00	00	00
6	24062,88	00	00	00
8	24204,19	01	00	00
9	24229,22	01	00	00
6	24302,002	00	00	00
7	24353,58	01	00	00
7	24430,27	00	00	00
5	24634,07	00	00	00
3	24668,59	00	00	00
7	24708,96	01	00	00
4	24841,04	00	00	00
10	24858,74	01	00	00
10	24858,74	00	00	00
6	24867,17	00	00	00
5	24881,85	00	00	00
6	24899,06	00	00	00
7	24906,86	01	00	00
6	24931,63	00	00	00
10	24978,98	00	00	00
5	24993,47	00	00	00
8	24999,58	01	00	00
8	25012,21	01	00	00
8	25012,201	00	00	00
5	25082,002	00	00	00
9	25084,8	01	00	00
8	25095,66	00	00	00
5	25127,502	00	00	00
4	25203,902	00	00	00
7	25268,87	01	00	00
7	25502,802	00	00	00
6	25506,38	00	00	00
7	25567,53	01	00	00
6	25670,45	01	00	00
4	25687,02	00	00	00
5	25744,35	00	00	00

Tabela A1.5: Níveis de energia do Dy I
(25760,39 cm⁻¹ a 27834,93 cm⁻¹)

J	E	P	t	Δt
8	25760,39	01	00	00
4	25761,77	00	00	00
10	25774,39	01	00	00
6	25825,83	00	00	00
6	25868	00	00	00
7	25879,15	00	00	00
5	25912,63	00	00	00
6	25920,88	01	00	00
9	25955,1	01	00	00
5	25993,57	00	00	00
5	26135,201	00	00	00
7	26200,05	00	00	00
9	26244,6	00	00	00
5	26284,69	00	00	00
8	26349,49	00	00	00
6	26387,801	00	00	00
7	26425,15	00	00	00
7	26435,701	00	00	00
4	26440,401	00	00	00
5	26506,501	00	00	00
6	26533,88	00	00	00
3	26607,16	00	00	00
4	26662,401	00	00	00
10	26752,29	00	00	00
8	26759,801	00	00	00
6	26785,45	00	00	00
7	26848,46	00	00	00
8	26868,07	00	00	00
3	26886,001	00	00	00
9	26955	00	00	00
4	26998,27	00	00	00
9	27014,02	01	00	00
8	27059,89	00	00	00
6	27068,94	00	00	00
5	27109,93	00	00	00
6	27190,74	00	00	00
6	27199,02	00	00	00
7	27316,49	00	00	00
8	27319,08	00	00	00
3	27321,26	00	00	00
9	27390,97	02	00	00
7	27427,08	01	00	00
8	27445,9	00	00	00
7	27462,41	02	00	00
6	27474,64	00	00	00
7	27556,34	01	00	00
4	27578,002	00	00	00
3	27601,33	00	00	00
3	27643,57	00	00	00
4	27659,002	00	00	00
5	27680,102	00	00	00
5	27685,87	00	00	00
4	27714,33	00	00	00
4	27751,46	00	00	00
8	27817,99	01	00	00
7	27834,93	01	00	00

Tabela A1.6: Níveis de energia do Dy I
(27837,54 cm⁻¹ a 30426,59 cm⁻¹)

J	E	P	t	Δt
7	27837,54	00	00	00
8	27851,43	01	00	00
8	27896,8	02	00	00
7	27959,98	00	00	00
7	27984,5	01	00	00
6	27987,9	00	00	00
8	28029,68	01	00	00
4	28082,47	00	00	00
6	28119,94	01	00	00
9	28158,501	00	00	00
8	28177,14	00	00	00
6	28197,66	00	00	00
4	28235,74	00	00	00
5	28265,78	00	00	00
5	28309,18	00	00	00
6	28326,48	02	00	00
7	28358,7	02	00	00
5	28379,802	00	00	00
2	28407,001	00	00	00
10	28433,401	00	00	00
8	28518,3	00	00	00
8	28539,57	00	00	00
5	28666,301	00	00	00
3	28694,501	00	00	00
8	28795,26	00	00	00
7	28822,5	01	00	00
6	28849,06	00	00	00
6	28909,39	00	00	00
4	28923,05	00	00	00
8	28971,42	01	00	00
5	28987,002	00	00	00
5	29054,36	00	00	00
9	29119,11	01	00	00
6	29159,93	00	00	00
7	29161,38	00	00	00
7	29169,98	00	00	00
8	29291,32	02	00	00
6	29447,101	00	00	00
9	29465,04	00	00	00
5	29496,33	00	00	00
7	29512,27	02	00	00
7	29532,402	00	00	00
3	29626,02	00	00	00
6	29682,16	00	00	00
10	29706,72	02	00	00
9	29714,702	00	00	00
11	29742,49	00	00	00
8	29841,69	00	00	00
7	29877,37	02	00	00
7	29878,69	00	00	00
6	30015,44	00	00	00
5	30033,06	00	00	00
6	30102,59	00	00	00
10	30106,65	00	00	00
7	30163,33	00	00	00
6	30426,59	01	00	00

Tabela A1.7: Níveis de energia do Dy I
(30444,88 cm⁻¹ a 31900,74 cm⁻¹)

J	E	P	t	Δt
7	30444,88	02	00	00
9	30459,64	02	00	00
6	30475,95	02	00	00
5	30512,73	00	00	00
7	30528,36	01	00	00
8	30544,57	01	00	00
9	30560,56	00	00	00
7	30566,07	00	00	00
8	30600,15	00	00	00
7	30621,87	02	00	00
4	30662,79	00	00	00
7	30711,7	01	00	00
9	30716,06	00	00	00
8	30739,79	02	00	00
6	30778,96	01	00	00
6	30840,73	01	00	00
4	30896,57	00	00	00
5	30904,89	01	00	00
5	30946,73	01	00	00
8	30979,53	00	00	00
6	30988,25	00	00	00
8	31061,18	00	00	00
5	31079,502	00	00	00
7	31124,8	00	00	00
7	31132,3	01	00	00
6	31180,001	00	00	00
5	31200,96	01	00	00
7	31229,29	01	00	00
8	31233,57	00	00	00
9	31287,04	02	00	00
6	31341,39	01	00	00
7	31362,62	02	00	00
6	31399,49	00	00	00
5	31410,95	01	00	00
7	31423,002	00	00	00
7	31423,04	00	00	00
8	31469	00	00	00
10	31489,64	02	00	00
7	31509,102	00	00	00
7	31519,57	00	00	00
5	31522,73	01	00	00
6	31529,68	00	00	00
5	31545,99	00	00	00
8	31547,001	00	00	00
6	31555,97	01	00	00
7	31580,28	01	00	00
7	31674,08	02	00	00
7	31698,32	01	00	00
5	31742,14	00	00	00
5	31763,85	01	00	00
9	31775,65	00	00	00
8	31820,28	02	00	00
10	31838,24	00	00	00
7	31878,42	01	00	00
9	31900,74	00	00	00
9	31900,74	01	00	00

Tabela A1.8: Níveis de energia do Dy I
(31946,702 cm⁻¹ a 33788,79 cm⁻¹)

J	E	P	t	Δt
7	31946,702	00	00	00
7	32016,83	00	00	00
7	32036,51	02	00	00
6	32082	01	00	00
6	32111,44	01	00	00
6	32126,16	01	00	00
9	32206,27	00	00	00
5	32263,16	00	00	00
5	32359,002	00	00	00
7	32382,29	02	00	00
6	32392,59	00	00	00
7	32411,25	02	00	00
10	32428,08	00	00	00
8	32428,66	02	00	00
6	32431,601	00	00	00
7	32470,801	00	00	00
8	32554,86	02	00	00
7	32564,97	00	00	00
6	32607,88	01	00	00
8	32675,52	02	00	00
9	32711,9	00	00	00
3	32712,54	00	00	00
7	32722,87	02	00	00
9	32763,21	02	00	00
6	32790,66	01	00	00
6	32834,29	01	00	00
5	32889,19	01	00	00
7	32920,02	00	00	00
9	32927,76	00	00	00
8	32940,47	02	00	00
6	32945,3	00	00	00
6	32970,87	01	00	00
5	33025,64	01	00	00
9	33086,26	00	00	00
7	33110,16	00	00	00
5	33139,24	01	00	00
8	33165,77	01	00	00
6	33210,13	00	00	00
8	33246,13	00	00	00
9	33252,28	00	00	00
7	33311,52	01	00	00
4	33324,06	01	00	00
4	33358,79	00	00	00
8	33358,83	00	00	00
5	33381,16	00	00	00
8	33406,06	00	00	00
7	33411,25	02	00	00
6	33474,3	00	00	00
7	33475,702	00	00	00
7	33552,39	00	00	00
5	33652,23	00	00	00
6	33656,96	00	00	00
8	33721,502	00	00	00
7	33746,802	00	00	00
8	33753,101	00	00	00
5	33788,79	00	00	00

Tabela A1.9: Níveis de energia do Dy I
(33806,102 cm⁻¹ a 35221,27 cm⁻¹)

J	E	P	t	Δt
7	33806,102	00	00	00
5	33871,7	00	00	00
6	33911,002	00	00	00
5	33947,13	00	00	00
4	33952,33	00	00	00
7	34027,7	00	00	00
4	34038,46	00	00	00
7	34060,16	00	00	00
7	34131,102	00	00	00
4	34137,43	00	00	00
9	34174,66	00	00	00
6	34179,68	00	00	00
7	34196,55	00	00	00
7	34213,65	00	00	00
6	34296,69	00	00	00
7	34324,66	00	00	00
6	34359,56	00	00	00
4	34359,8	00	00	00
5	34400,67	01	00	00
5	34470,7	01	00	00
4	34486,89	01	00	00
5	34488,402	00	00	00
6	34547,46	00	00	00
5	34573,07	00	00	00
5	34662,101	00	00	00
8	34676,95	00	00	00
6	34679,75	00	00	00
9	34689,19	00	00	00
7	34695,402	00	00	00
4	34720,68	01	00	00
5	34742,701	00	00	00
7	34742,84	00	00	00
8	34755,07	00	00	00
6	34770,3	00	00	00
10	34776,04	00	00	00
6	34793,49	01	00	00
8	34803,87	00	00	00
9	34829,3	00	00	00
5	34841,48	00	00	00
7	34843,101	00	00	00
7	34921,87	01	00	00
8	34922,08	00	00	00
6	34938,33	00	00	00
7	34975	00	00	00
7	35003,75	00	00	00
8	35029,5	00	00	00
8	35053,56	00	00	00
8	35082,98	00	00	00
3	35107,23	01	00	00
7	35107,28	00	00	00
7	35135,33	00	00	00
3	35136,67	01	00	00
3	35141,43	00	00	00
5	35184,56	00	00	00
9	35219,85	00	00	00
9	35221,27	00	00	00

Tabela A1.10: Níveis de energia do Dy I
(35221,98 cm⁻¹ a 36717,57 cm⁻¹)

J	E	P	t	Δt
7	35221,98	00	00	00
3	35231,23	01	00	00
8	35249,13	00	00	00
4	35316,301	00	00	00
5	35354,27	00	00	00
8	35377,501	00	00	00
10	35385,78	00	00	00
6	35421,17	00	00	00
8	35450,17	00	00	00
8	35518,27	00	00	00
5	35523,35	00	00	00
5	35578,47	00	00	00
9	35580,84	00	00	00
7	35695,77	00	00	00
7	35737,77	00	00	00
6	35744,63	00	00	00
9	35762,55	00	00	00
8	35777,79	00	00	00
7	35802,73	00	00	00
7	35866,6	00	00	00
8	35894,36	00	00	00
8	35899,94	00	00	00
8	35938,74	00	00	00
9	35940,35	00	00	00
10	35945,002	00	00	00
6	35970,01	00	00	00
6	36093,54	00	00	00
10	36094,402	00	00	00
7	36119,46	00	00	00
7	36248,002	00	00	00
9	36260,17	00	00	00
8	36288,48	00	00	00
8	36308,08	00	00	00
7	36316,402	00	00	00
9	36341,53	00	00	00
6	36365,09	00	00	00
8	36392,101	00	00	00
7	36417,25	00	00	00
9	36440,201	00	00	00
7	36441,99	00	00	00
6	36462,09	00	00	00
9	36487,02	00	00	00
10	36490,07	00	00	00
7	36491,05	00	00	00
7	36508,79	00	00	00
8	36534,04	00	00	00
8	36546,78	00	00	00
8	36553,84	00	00	00
8	36599,44	00	00	00
7	36608,28	00	00	00
6	36612,84	00	00	00
8	36618,34	00	00	00
10	36640,9	00	00	00
7	36667,78	00	00	00
9	36708,15	00	00	00
9	36717,57	00	00	00

Tabela A1.11: Níveis de energia do Dy I
(36760,64 cm⁻¹ a 37820,202 cm⁻¹)

J	E	P	t	Δt
8	36760,64	00	00	00
8	36807,39	00	00	00
9	36822,27	00	00	00
7	36865,4	00	00	00
10	36868,73	00	00	00
8	36892,01	00	00	00
10	36905,44	00	00	00
7	36924,54	00	00	00
8	36954,35	00	00	00
9	36964,302	00	00	00
10	37007,58	00	00	00
7	37015,202	00	00	00
11	37039	00	00	00
8	37041,002	00	00	00
6	37058,6	00	00	00
7	37073,86	00	00	00
8	37087,47	00	00	00
9	37090,46	00	00	00
9	37121,97	00	00	00
6	37125,45	00	00	00
7	37135,33	00	00	00
8	37146,54	00	00	00
6	37163,16	00	00	00
5	37182,19	00	00	00
11	37182,98	00	00	00
7	37212,06	00	00	00
5	37231,26	00	00	00
7	37295,97	00	00	00
11	37299,36	00	00	00
6	37324,602	00	00	00
8	37339,89	00	00	00
8	37355	00	00	00
7	37360,001	00	00	00
7	37366,09	00	00	00
7	37366,93	00	00	00
8	37398,46	00	00	00
7	37471,09	00	00	00
5	37472,68	00	00	00
7	37501,58	00	00	00
8	37527,15	00	00	00
7	37551,19	00	00	00
5	37559,17	00	00	00
7	37587,58	00	00	00
9	37591,83	00	00	00
7	37607,89	00	00	00
8	37635,26	00	00	00
8	37646,28	00	00	00
5	37646,602	00	00	00
6	37650,98	00	00	00
8	37676,89	00	00	00
7	37694,25	00	00	00
10	37706,102	00	00	00
8	37721,06	00	00	00
9	37751,03	00	00	00
7	37751,34	00	00	00
8	37820,202	00	00	00

Tabela A1.12: Níveis de energia do Dy I
(37836,5 cm⁻¹ a 39035,85 cm⁻¹)

J	E	P	t	Δt
9	37836,5	00	00	00
8	37841,84	00	00	00
8	37843,38	00	00	00
6	37856,402	00	00	00
9	37933,63	00	00	00
7	37980,03	00	00	00
8	37992,78	00	00	00
10	38019,102	00	00	00
7	38054,601	00	00	00
6	38070,03	00	00	00
8	38078,102	00	00	00
5	38093,85	00	00	00
5	38101,89	00	00	00
9	38102,902	00	00	00
7	38123,3	00	00	00
8	38150,502	00	00	00
5	38164,83	00	00	00
8	38202,48	00	00	00
6	38214,801	00	00	00
10	38247,38	00	00	00
7	38251,55	00	00	00
8	38254,97	00	00	00
7	38264,28	00	00	00
9	38285,36	00	00	00
10	38297,502	00	00	00
10	38329,901	00	00	00
5	38334,02	00	00	00
7	38342,48	00	00	00
8	38356,27	00	00	00
8	38358,88	00	00	00
7	38362,65	00	00	00
7	38366,301	00	00	00
7	38421,29	00	00	00
4	38431,801	00	00	00
8	38438,87	00	00	00
9	38444,35	00	00	00
7	38452,46	00	00	00
7	38515,301	00	00	00
8	38516,86	00	00	00
7	38524,502	00	00	00
8	38551,45	00	00	00
9	38563,33	00	00	00
5	38673,5	00	00	00
9	38674,901	00	00	00
6	38715,04	00	00	00
7	38737,66	00	00	00
7	38779,77	00	00	00
8	38814,46	00	00	00
6	38852,6	00	00	00
7	38861,55	00	00	00
8	38870,001	00	00	00
5	38890,902	00	00	00
7	38954,001	00	00	00
5	38964,68	00	00	00
8	38973,45	00	00	00
9	39035,85	00	00	00

Tabela A1.13: Níveis de energia do Dy I
(39048,18 cm⁻¹ a 440683,59cm⁻¹)

J	E	P	t	Δt
5	39048,18	00	00	00
7	39078,14	00	00	00
4	39084,97	00	00	00
8	39096,06	00	00	00
7	39097,74	00	00	00
9	39120,601	00	00	00
8	39135,302	00	00	00
10	39176,58	00	00	00
10	39182,4	00	00	00
6	39188,23	00	00	00
5	39201,13	00	00	00
7	39325,28	00	00	00
9	39332,802	00	00	00
7	39332,97	00	00	00
8	39376,93	00	00	00
4	39378,701	00	00	00
8	39398,01	00	00	00
5	39411,002	00	00	00
4	39420,8	00	00	00
4	39430,94	00	00	00
9	39513,68	00	00	00
7	39516,88	00	00	00
6	39545,9	00	00	00
10	39573,04	00	00	00
9	39602,47	00	00	00
11	39627,83	00	00	00
7	39681,94	00	00	00
9	39692,49	00	00	00
8	39714,02	00	00	00
5	39748,26	00	00	00
10	39750,08	00	00	00
7	39777,602	00	00	00
5	39780,002	00	00	00
6	39786,3	00	00	00
6	39849,801	00	00	00
4	39853,98	00	00	00
9	39895,76	00	00	00
9	39903,34	00	00	00
8	39909,55	00	00	00
10	40005,802	00	00	00
4	40023,04	00	00	00
9	40030,48	00	00	00
5	40213,201	00	00	00
7	40245,78	00	00	00
3	40295,08	00	00	00
7	40396,05	00	00	00
6	40410,19	00	00	00
8	40472,96	00	00	00
6	40491,53	00	00	00
6	40520,48	00	00	00
9	40594,03	00	00	00
8	40605,98	00	00	00
3	40621,202	00	00	00
4	40625,9	00	00	00
8	40639,33	00	00	00
9	40683,59	00	00	00

Tabela A1.14: Níveis de energia do Dy I
(40782,04 cm⁻¹ a 47354,04 cm⁻¹)

J	E	P	t	Δt
3	40782,04	00	00	00
5	40796,402	00	00	00
8	40833,301	00	00	00
4	40835,6	00	00	00
8	40871,39	00	00	00
4	40924,8	00	00	00
5	40931,58	00	00	00
4	40973,37	00	00	00
3	40983,6	00	00	00
9	41029,59	00	00	00
8	41037,23	00	00	00
7	41053,08	00	00	00
8	41098,701	00	00	00
9	41135,13	00	00	00
8	41136,59	00	00	00
8	41203,9	00	00	00
9	41210,3	00	00	00
9	41235,96	00	00	00
7	41371,37	00	00	00
8	41383	00	00	00
4	41458,202	00	00	00
3	41492,401	00	00	00
7	41503,84	00	00	00
6	41577,18	00	00	00
8	41638,55	00	00	00
7	41642,79	00	00	00
6	41656,46	00	00	00
4	41859,44	00	00	00
4	41957,18	00	00	00
4	42146,002	00	00	00
3	42220,102	00	00	00
4	42236,05	00	00	00
6	42375,03	00	00	00
5	42479,83	00	00	00
5	42490,5	00	00	00
10	42668,01	00	00	00
4	42892,94	00	00	00
8	42921,39	00	00	00
4	42940,96	00	00	00
7	42984,701	00	00	00
5	43020,84	00	00	00
7	43222,01	00	00	00
8	43728,57	00	00	00
8	44487,65	00	00	00
6	45703,64	00	00	00
7	46391,45	00	00	00
8	47354,04	00	00	00

A2 Linhas Espectrais

N = Numero da linha.

λ_{vacuo} = Comprimento de onda no vácuo (nm).

λ_{ar} = Comprimento de onda no ar (nm).

I. R. = Intensidade relativa.

A_E = Coeficiente de Einstein (s^{-1})

ΔA_E = Incerteza no Coeficiente de Einstein (s^{-1}).

E_i = Nível de energia inferior

J_i = Número quântico de momento angular associado ao nível inferior.

E_s = Nível de energia superior

J_s = Número quântico de momento angular associado ao nível superior.

Os valores 00 nas tabelas a seguir indicam que não há dados na literatura.

Tabela A2.1: Linhas Espectrais de Dy I (1-31)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A_E	ΔA_E	E_i	J_i	E_s	J_s
1	258,607	258,53	220	00	00	00	00	00	00
2	262,447	262,369	370	00	00	00	00	00	00
3	264,294	264,215	110	00	00	00	00	00	00
4	266,873	266,794	110	00	00	00	00	00	00
5	273,66	273,579	55	00	00	00	00	00	00
6	286,35351	286,269	140	7,9E6	474000	0	8	34921,87	7
7	288,638	288,553	120	00	00	00	00	00	00
8	296,547	296,46	220	6,5E6	00	00	8	00	8
9	300,19645	300,109	5	1,45E6	87000	0	8	33311,52	7
10	301,51569	301,428	5	1,18E6	82600	0	8	33165,77	8
11	313,47235	313,382	5	1,23E6	61500	0	8	31900,74	9
12	313,69183	313,601	5	1,65E6	99000	0	8	31878,42	7
13	314,8606	314,7694	300	1,1E7	00	00	7	00	8
14	315,47413	315,383	5	430000	34400	0	8	31698,32	7
15	316,6533	316,562	5	1,36E7	1,088E6	0	8	31580,28	7
16	326,16573	326,072	5	1,86E6	111600	4134,23	7	34793,49	6
17	326,4127	326,3186	3000	1,4E7	00	00	7	00	6
18	327,39043	327,296	5	5,81E6	290500	0	8	30544,57	8
19	342,73231	342,634	5	200000	34000	4134,23	7	33311,52	7
20	343,41709	343,319	5	2,32E6	116000	0	8	29119,11	9
21	344,45296	344,354	5	285000	28500	4134,23	7	33165,77	8
22	348,43133	348,332	5	1,21E6	145200	4134,23	7	32834,29	6
23	351,2019	351,1015	1000	9,4E6	470000	4134,23	7	32607,88	6
24	357,24582	357,1438	1000	4,8E6	240000	4134,23	7	32126,16	6
25	357,43378	357,332	5	1,03E6	92700	4134,23	7	32111,44	6
26	357,8103	357,708	5	2,77E6	166200	4134,23	7	32082	6
27	359,04799	358,946	5	326000	26080	0	8	27851,43	8
28	360,43582	360,333	5	1,29E6	77400	4134,23	7	31878,42	7
29	360,45284	360,35	5	560000	61600	7050,61	6	34793,49	6
30	362,79086	362,687	5	600000	36000	4134,23	7	31698,32	7
31	362,8929	362,789	5	175000	10500	0	8	27556,34	7

Tabela A2.2: Linhas Espectrais de Dy I (32-88)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A_E	ΔA_E	E_i	J_i	E_s	J_s
32	366,788	366,684	400	00	00	00	00	00	00
33	367,55031	367,446	5	5,22E7	2,61E6	4134,23	7	31341,39	6
34	367,956	367,851	640	00	00	00	00	00	00
35	368,59	368,485	820	00	00	00	00	00	00
36	368,683	368,578	1300	00	00	00	00	00	00
37	369,07097	368,966	5	248000	27280	4134,23	7	31229,29	7
38	370,17815	370,073	5	1,19E8	7,14E6	0	8	27014,02	9
39	372,906	372,8	300	00	00	00	00	00	00
40	374,04	373,934	930	00	00	00	00	00	00
41	374,44068	374,334	5	4,1E6	328000	4134,23	7	30840,73	6
42	375,812	375,705	1200	3E8	0	0	8	0	9
43	376,25854	376,152	5	590000	53100	4134,23	7	30711,7	7
44	376,87	376,763	640	00	00	00	00	00	00
45	377,218	377,111	330	00	00	00	00	00	00
46	377,412	377,305	640	00	00	00	00	00	00
47	377,578	377,471	370	00	00	00	00	00	00
48	378,254	378,147	420	00	00	00	00	00	00
49	380,33862	380,231	5	119000	10710	4134,23	7	30426,59	6
50	381,335	381,227	470	00	00	00	00	00	00
51	384,198	384,089	370	00	00	00	00	00	00
52	384,545	384,436	330	00	00	00	00	00	00
53	384,811	384,702	420	00	00	00	00	00	00
54	385,7986	385,689	5	450000	36000	7050,61	6	32970,87	6
55	385,949	385,84	420	00	00	00	00	00	00
56	386,991	386,881	1600	3,1E8	0	0	8	0	8
57	387,84223	387,732	5	1000000	170000	7050,61	6	32834,29	6
58	388,49963	388,39	5	1,1E6	77000	7050,61	6	32790,66	6
59	391,2781	391,167	5	1,78E6	124600	7050,61	6	32607,88	6
60	391,84	391,729	540	00	00	00	00	00	00
61	392,01697	391,906	5	2,36E6	188800	9211,58	5	34720,68	4
62	392,897	392,786	420	00	00	00	00	00	00
63	393,125	393,014	540	00	00	00	00	00	00
64	393,781	393,67	420	00	00	00	00	00	00
65	394,09069	393,979	5	1,89E6	113400	7565,6	8	32940,47	8
66	396,371	396,259	370	00	00	00	00	00	00
67	396,86304	396,751	320	1,45E7	725000	7565,6	8	32763,21	9
68	396,99727	396,885	5	1,87E6	168300	9211,58	5	34400,67	5
69	397,49941	397,387	5	9,7E6	485000	7565,6	8	32722,87	7
70	398,24898	398,136	5	6,7E6	402000	7565,6	8	32675,52	8
71	398,79484	398,682	5	650000	52000	7050,61	6	32126,16	6
72	399,49839	399,385	5	960000	76800	7050,61	6	32082	6
73	399,56607	399,453	5	1,19E6	59500	4134,23	7	29161,38	7
74	399,80474	399,692	5	370000	37000	0	8	25012,21	8
75	400,00672	399,894	5	163000	11410	0	8	24999,58	8
76	400,17191	400,059	5	1,07E6	85600	7565,6	8	32554,86	8
77	400,697	400,584	420	00	00	00	00	00	00
78	400,72	400,607	320	00	00	00	00	00	00
79	401,49581	401,382	540	2,93E6	146500	0	8	24906,86	7
80	402,20311	402,089	5	830000	66400	7565,6	8	32428,66	8
81	402,48494	402,371	370	2,9E7	1,45E6	7565,6	8	32411,25	7
82	402,95462	402,841	5	2,35E7	1,175E6	7565,6	8	32382,29	7
83	404,6414	404,527	5	2,38E6	190400	7050,61	6	31763,85	5
84	404,71149	404,597	12000	1,92E8	9,6E6	0	8	24708,96	7
85	405,05066	404,936	5	2,54E6	127000	4134,23	7	28822,5	7
86	405,7172	405,603	5	109000	10900	7050,61	6	31698,32	7
87	408,07399	407,959	5	3,39E6	169500	7050,61	6	31555,97	6
88	408,62827	408,513	5	1,12E7	560000	7050,61	6	31522,73	5

Tabela A2.3: Linhas Espectrais de Dy I (89-145)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A_E	ΔA_E	E_i	J_i	E_s	J_s
89	408,64847	408,533	370	1,71E7	855000	7565,6	8	32036,51	7
90	409,47911	409,364	5	3,36E6	201600	8519,2	7	32940,47	8
91	409,726	409,61	390	00	00	00	00	00	00
92	410,5033	410,387	860	6,2E7	3,1E6	7050,61	6	31410,95	5
93	411,42139	411,305	5	2,34E7	1,17E6	10925,25	4	35231,23	3
94	412,29157	412,175	5	72000	7920	7565,6	8	31820,28	8
95	412,7248	412,608	5	920000	46000	0	8	24229,22	9
96	413,02823	412,912	350	9,8E7	4,9E6	10925,25	4	35136,67	3
97	413,15161	413,035	350	1,76E6	88000	0	8	24204,19	8
98	413,16048	413,044	5	780000	62400	8519,2	7	32722,87	7
99	413,502	413,385	390	00	00	00	00	00	00
100	413,53107	413,414	5	7,4E7	3,7E6	10925,25	4	35107,23	3
101	413,58751	413,471	5	2,92E6	233600	7050,61	6	31229,29	7
102	413,97034	413,854	5	6,9E6	414000	8519,2	7	32675,52	8
103	414,07267	413,956	5	6,8E6	340000	7050,61	6	31200,96	5
104	414,723	414,606	990	1,95E8	9,75E6	9211,58	5	33324,06	4
105	414,79181	414,675	5	208000	14560	7565,6	8	31674,08	7
106	415,25325	415,136	5	2,97E7	1,485E6	7050,61	6	31132,3	7
107	416,04849	415,931	5	7,3E6	438000	8519,2	7	32554,86	8
108	416,9149	416,797	5700	1,92E8	9,6E6	4134,23	7	28119,94	6
109	417,311	417,193	370	00	00	00	00	00	00
110	417,92637	417,809	5	1,48E7	740000	9211,58	5	33139,24	5
111	418,24449	418,127	5	3,15E6	189000	8519,2	7	32428,66	8
112	418,47798	418,36	5	1,23E7	615000	7050,61	6	30946,73	5
113	418,48971	418,372	930	8,8E7	4,4E6	4134,23	7	28029,68	8
114	418,79993	418,682	12000	1,26E8	6,3E6	0	8	23877,75	8
115	419,05721	418,939	5	2,49E6	174300	8519,2	7	32382,29	7
116	419,21198	419,094	320	2,03E7	1,015E6	7050,61	6	30904,89	5
117	419,28247	419,164	2200	7,1E7	3,55E6	4134,23	7	27984,5	7
118	419,60266	419,484	6800	8,8E7	4,4E6	0	8	23832,07	8
119	419,92	419,802	800	1,08E8	5,4E6	9211,58	5	33025,64	5
120	420,22068	420,102	5	3,09E6	154500	7565,6	8	31362,62	7
121	420,24876	420,13	680	1,7E8	8,5E6	10925,25	4	34720,68	4
122	420,34256	420,224	680	4,82E7	2,41E6	7050,61	6	30840,73	6
123	420,624	420,506	230	00	00	00	00	00	00
124	420,888	420,769	5	1,58E7	790000	9211,58	5	32970,87	6
125	421,243	421,124	440	00	00	00	00	00	00
126	421,29033	421,172	16000	2,08E8	1,04E7	0	8	23736,6	9
127	421,4368	421,318	1800	1,27E8	6,35E6	7050,61	6	30778,96	6
128	421,55957	421,441	5	5,78E6	289000	7565,6	8	31287,04	9
129	421,63493	421,516	3700	8,1E7	4,05E6	4134,23	7	27851,43	8
130	421,92847	421,81	4400	1,2E8	6E6	4134,23	7	27834,93	7
131	422,23025	422,111	4400	1,28E8	6,4E6	4134,23	7	27817,99	8
132	422,33992	422,221	540	7,1E7	3,55E6	9211,58	5	32889,19	5
133	422,6348	422,516	2700	1,95E8	9,75E6	7050,61	6	30711,7	7
134	423,32146	423,202	680	7,9E7	3,95E6	9211,58	5	32834,29	6
135	424,10476	423,985	680	9,4E7	4,7E6	9211,58	5	32790,66	6
136	424,41867	424,299	5	6,2E6	310000	10925,25	4	34486,89	4
137	424,71051	424,591	440	1,18E8	5,9E6	10925,25	4	34470,7	5
138	425,93519	425,815	5	4,55E6	227500	7050,61	6	30528,36	7
139	425,97747	425,858	5	4,11E7	2,055E6	10925,25	4	34400,67	5
140	426,94702	426,8264	1000	1,14E6	57000	4134,23	7	27556,34	7
141	427,41801	427,298	5	1,73E6	121100	9211,58	5	32607,88	6
142	427,78955	427,669	250	1,22E7	610000	7050,61	6	30426,59	6
143	429,16466	429,044	5	2,31E6	115500	8519,2	7	31820,28	8
144	429,31629	429,1966	3000	2,28E6	114000	4134,23	7	27427,08	7
145	429,625	429,504	5	00	00	00	00	00	00

Tabela A2.4: Linhas Espectrais de Dy I (147-202)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A_E	ΔA_E	E_i	J_i	E_s	J_s
147	431,8744	431,753	5	236000	21240	8519,2	7	31674,08	7
148	432,708	432,586	320	00	00	00	00	00	00
149	433,7215	433,6	5	820000	57400	7565,6	8	30621,87	7
150	436,68389	436,561	5	920000	82800	9211,58	5	32111,44	6
151	436,7949	436,672	5	6,6E6	330000	7565,6	8	30459,64	9
152	437,07669	436,954	5	930000	55800	7565,6	8	30444,88	7
153	437,24601	437,123	5	190000	36100	9211,58	5	32082	6
154	439,13077	439,007	5	248000	19840	9990,95	9	32763,21	9
155	440,82828	440,705	5	160000	14400	9990,95	9	32675,52	8
156	443,1856	443,061	5	239000	21510	9990,95	9	32554,86	8
146	431,51454	431,393	5	990000	108900	7565,6	8	30739,79	8
157	443,41434	443,29	5	650000	71500	9211,58	5	31763,85	5
158	444,583	444,458	150	00	00	00	00	00	00
159	445,67828	445,553	5	2,13E6	0	9990,95	9	32428,66	8
160	446,45229	446,327	5	1,55E6	108500	10925,25	4	33324,06	4
161	447,9795	447,854	5	350000	38500	10088,8	6	33411,25	7
162	448,19394	448,068	5	2,38E6	119000	7565,6	8	29877,37	7
163	448,20639	448,081	5	173000	20760	9211,58	5	31522,73	5
164	448,56144	448,436	5	4,65E6	279000	10088,8	6	32382,29	7
165	450,03305	449,907	5	116000	13920	8519,2	7	30739,79	8
166	450,46323	450,337	5	2,01E6	160800	9211,58	5	31410,95	5
167	452,885	452,758	100	00	00	00	00	00	00
168	455,44081	455,313	5	970000	48500	8519,2	7	30475,95	6
169	455,6284	455,501	5	1,03E6	82400	10088,8	6	32036,51	7
170	455,64999	455,522	5	1,95E6	97500	7565,6	8	29512,27	7
171	456,0862	455,958	5	234000	21060	8519,2	7	30444,88	7
172	456,63727	456,509	140	660000	33000	0	8	21899,22	8
173	457,90586	457,778	420	1,96E6	98000	0	8	21838,55	9
174	458,09926	457,971	5	247000	27170	9990,95	9	31820,28	8
175	459,06474	458,936	2100	1,37E7	685000	0	8	21783,42	7
176	460,28394	460,155	5	97000	10670	7565,6	8	29291,32	8
177	461,35506	461,226	990	8,2E6	410000	0	8	21675,28	7
178	461,512	461,383	50	00	00	00	00	00	00
179	461,611	461,482	50	00	00	00	00	00	00
180	463,27868	463,149	5	3,32E6	166000	10088,8	6	31674,08	7
181	465,14462	465,014	5	1,61E6	96600	9990,95	9	31489,64	10
182	466,403	466,272	50	00	00	00	00	00	00
183	467,16267	467,032	5	33000	2310	7565,6	8	28971,42	8
184	468,20491	468,074	5	331000	19860	8519,2	7	29877,37	7
185	469,56977	469,438	5	590000	41300	9990,95	9	31287,04	9
186	470,06132	469,93	5	450000	31500	10088,8	6	31362,62	7
187	472,254	472,122	85	00	00	00	00	00	00
188	474,62354	474,491	5	259000	23310	7050,61	6	28119,94	6
189	475,07338	474,941	5	162000	17820	11673,49	6	32722,87	7
190	477,327	477,194	60	00	00	00	00	00	00
191	477,614	477,48	50	00	00	00	00	00	00
192	477,713	477,579	120	00	00	00	00	00	00
193	478,97354	478,84	5	108000	11880	4134,23	7	25012,21	8
194	479,26347	479,13	95	1,16E6	58000	4134,23	7	24999,58	8
195	480,198	480,064	29	00	00	00	00	00	00
196	480,92877	480,794	50	960000	48000	7565,6	8	28358,7	7
197	481,162	481,028	40	00	00	00	00	00	00
198	481,40269	481,268	5	258000	15480	4134,23	7	24906,86	7
199	481,41451	481,28	50	850000	85000	8519,2	7	29291,32	8
200	481,54967	481,415	5	28000	3360	0	8	20766,29	7
201	481,78585	481,651	5	600000	54000	12007,1	8	32763,21	9
202	481,95465	481,82	5	830000	91300	9990,95	9	30739,79	8

TabelaA2.5: Linhas Espectrais de Dy I (203-259)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A _E	ΔA_E	E _i	J _i	E _s	J _s
203	482,039	481,904	75	00	00	00	00	00	00
204	482,631	482,496	85	00	00	00	00	00	00
205	482,8865	482,752	5	680000	61200	11673,49	6	32382,29	7
206	483,023	482,888	75	00	00	00	00	00	00
207	483,373	483,238	70	00	00	00	00	00	00
208	483,82992	483,695	5	650000	45500	12007,1	8	32675,52	8
209	484,31	484,175	75	00	00	00	00	00	00
210	486,03311	485,897	5	259000	20720	4134,23	7	24708,96	7
211	486,67105	486,535	5	176000	17600	12007,1	8	32554,86	8
212	487,01923	486,883	5	217000	15190	10088,8	6	30621,87	7
213	487,729	487,593	40	00	00	00	00	00	00
214	488,15254	488,016	85	520000	26000	0	8	20485,4	7
215	488,55105	488,415	5	1,33E6	79800	9990,95	9	30459,64	9
216	488,591	488,455	40	00	00	00	00	00	00
217	488,94448	488,808	95	4,97E6	248500	8519,2	7	28971,42	8
218	489,505	489,368	50	00	00	00	00	00	00
219	490,061	489,924	24	00	00	00	00	00	00
220	490,50505	490,368	5	850000	51000	10088,8	6	30475,95	6
221	490,76214	490,625	5	910000	54600	7050,61	6	27427,08	7
222	491,08629	490,949	5	440000	35200	11673,49	6	32036,51	7
223	491,25372	491,117	5	500000	35000	10088,8	6	30444,88	7
224	491,61018	491,473	5	106000	7420	0	8	20341,32	8
225	491,778	491,641	55	00	00	00	00	00	00
226	491,85488	491,718	5	550000	33000	7565,6	8	27896,8	8
227	496,097	495,959	24	00	00	00	00	00	00
228	497,496	497,357	28	00	00	00	00	00	00
229	498,691	498,552	40	00	00	00	00	00	00
230	499,26583	499,127	5	227000	22700	12007,1	8	32036,51	7
231	499,98525	499,846	5	1,64E6	98400	11673,49	6	31674,08	7
232	500,527	500,387	50	00	00	00	00	00	00
233	501,2	501,06	24	00	00	00	00	00	00
234	502,35201	502,212	70	1,27E6	63500	4134,23	7	24040,59	6
235	502,543	502,403	30	00	00	00	00	00	00
236	502,59313	502,453	24	1,19E6	71400	7565,6	8	27462,41	7
237	502,927	502,787	40	00	00	00	00	00	00
238	503,44	503,3	50	00	00	00	00	00	00
239	504,04496	503,904	5	544000	27200	8519,2	7	28358,7	7
240	504,40421	504,264	160	6,9E6	345000	7565,6	8	27390,97	9
241	504,71454	504,574	5	272000	21760	12007,1	8	31820,28	8
242	504,86488	504,724	24	1,05E6	52500	8519,2	7	28326,48	6
243	505,162	505,021	50	00	00	00	00	00	00
244	505,34223	505,201	5	740000	44400	10088,8	6	29877,37	7
245	505,476	505,335	30	00	00	00	00	00	00
246	505,687	505,546	24	00	00	00	00	00	00
247	505,7266	505,586	5	348000	31320	12655,13	7	32428,66	8
248	506,91534	506,774	5	194000	19400	12655,13	7	32382,29	7
249	507,20819	507,067	95	4,59E6	229500	9990,95	9	29706,72	10
250	507,90839	507,767	120	410000	32800	0	8	19688,59	8
251	508,46648	508,325	5	203000	18270	12007,1	8	31674,08	7
252	511,174	511,032	80	00	00	00	00	00	00
253	512,147	512,004	130	00	00	00	00	00	00
254	513,645	513,502	30	00	00	00	00	00	00
255	514,84107	514,698	5	433000	25980	10088,8	6	29512,27	7
256	515,95913	515,815	5	117000	12870	12655,13	7	32036,51	7
257	516,05978	515,916	5	434000	26040	8519,2	7	27896,8	8
258	516,64848	516,505	5	239000	28680	12007,1	8	31362,62	7
259	516,678	516,534	50	00	00	00	00	00	00

Tabela A2.6: Linhas Espectrais de Dy I (260-316)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A_E	ΔA_E	E_i	J_i	E_s	J_s
260	518,67381	518,529	80	246000	24600	12007,1	8	31287,04	9
261	519,01435	518,87	5	340000	37400	13495,92	9	32763,21	9
262	521,38731	521,242	5	290000	29000	13495,92	9	32675,52	8
263	524,68815	524,542	5	110000	9900	13495,92	9	32554,86	8
264	526,134	525,988	70	00	00	00	00	00	00
265	526,202	526,056	130	00	00	00	00	00	00
266	526,85734	526,711	65	2,85E6	171000	9990,95	9	28971,42	8
267	527,7496	527,603	5	135000	10800	11673,49	6	30621,87	7
268	528,18557	528,039	5	306000	30600	13495,92	9	32428,66	8
269	528,354	528,207	55	00	00	00	00	00	00
270	530,30592	530,158	160	850000	42500	0	8	18857,04	7
271	531,8453	531,697	5	720000	50400	11673,49	6	30475,95	6
272	532,617	532,469	50	00	00	00	00	00	00
273	532,7256	532,577	5	225000	15750	11673,49	6	30444,88	7
274	533,82616	533,678	5	440000	52800	12007,1	8	30739,79	8
275	534,179	534,03	65	00	00	00	00	00	00
276	535,36	535,211	30	00	00	00	00	00	00
277	537,20782	537,058	5	940000	94000	12007,1	8	30621,87	7
278	537,72461	537,575	5	122000	10980	12892,76	10	31489,64	10
279	538,42555	538,276	5	220000	39600	14367,8	7	32940,47	8
280	539,707	539,557	40	00	00	00	00	00	00
281	540,569	540,419	50	00	00	00	00	00	00
282	541,93081	541,78	5	38000	3800	12007,1	8	30459,64	9
283	542,064	541,913	80	00	00	00	00	00	00
284	542,36464	542,214	5	139000	11120	12007,1	8	30444,88	7
285	542,483	542,332	70	00	00	00	00	00	00
286	542,578	542,427	30	00	00	00	00	00	00
287	543,64726	543,496	5	313000	28170	12892,76	10	31287,04	9
288	545,262	545,111	95	00	00	00	00	00	00
289	545,72165	545,57	5	900000	63000	13495,92	9	31820,28	8
290	547,34837	547,196	5	253000	15180	10088,8	6	28358,7	7
291	548,31536	548,163	5	246000	14760	10088,8	6	28326,48	6
292	549,33344	549,181	5	412000	28840	11673,49	6	29877,37	7
293	549,836	549,683	28	00	00	00	00	00	00
294	550,13399	549,981	5	100000	8000	12298,56	5	30475,95	6
295	550,432	550,279	24	00	00	00	00	00	00
296	550,805	550,652	28	00	00	00	00	00	00
297	551,34177	551,189	5	750000	75000	14625,64	8	32763,21	9
298	552,95482	552,801	30	2,21E6	243100	12655,13	7	30739,79	8
299	553,68349	553,53	5	188000	26320	14367,8	7	32428,66	8
300	554,88076	554,727	65	300000	30000	0	8	18021,89	8
301	556,584	556,43	5	213000	14910	12655,13	7	30621,87	7
302	557,74875	557,594	5	390000	46800	14625,64	8	32554,86	8
303	559,58864	559,433	5	176000	17600	12007,1	8	29877,37	7
304	560,57645	560,421	5	77000	6930	11673,49	6	29512,27	7
305	560,709	560,553	24	00	00	00	00	00	00
306	561,14141	560,986	5	440000	35200	12655,13	7	30475,95	6
307	561,479	561,323	30	00	00	00	00	00	00
308	562,07816	561,922	5	64000	7680	13495,92	9	31287,04	9
309	562,9049	562,749	20	166000	11620	4134,23	7	21899,22	8
310	564,10647	563,95	100	490000	39200	0	8	17727,15	9
311	564,756	564,599	55	00	00	00	00	00	00
312	565,35824	565,201	80	446000	22300	0	8	17687,9	7
313	566,59824	566,441	5	33000	2310	4134,23	7	21783,42	7
314	568,716	568,558	24	00	00	00	00	00	00
315	569,25305	569,095	5	215000	21500	12892,76	10	30459,64	9
316	570,0913	569,933	5	167000	11690	4134,23	7	21675,28	7

Tabela A2.7: Linhas Espectrais de Dy I (317-373)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A_E	ΔA_E	E_i	J_i	E_s	J_s
317	570,449	570,291	24	00	00	00	00	00	00
318	571,2598	571,101	5	390000	31200	12007,1	8	29512,27	7
319	572,005	571,846	70	00	00	00	00	00	00
320	572,0598	571,901	5	117000	15210	15194,83	7	32675,52	8
321	574,179	574,02	50	00	00	00	00	00	00
322	574,71198	574,553	55	1,49E6	89400	9990,95	9	27390,97	9
323	575,207	575,048	24	00	00	00	00	00	00
324	575,58562	575,426	5	264000	21120	10088,8	6	27462,41	7
325	576,039	575,879	24	00	00	00	00	00	00
326	578,56241	578,402	5	121000	14520	12007,1	8	29291,32	8
327	580,64456	580,484	5	82000	11480	12655,13	7	29877,37	7
328	581,53634	581,375	5	196000	23520	15567,38	8	32763,21	9
329	582,90378	582,742	5	245000	24500	15567,38	8	32722,87	7
330	585,96691	585,805	5	310000	34100	14970,7	6	32036,51	7
331	586,56393	586,401	5	960000	76800	14625,64	8	31674,08	7
332	588,58221	588,419	5	65000	5850	7050,61	6	24040,59	6
333	588,66883	588,506	5	128000	16640	15567,38	8	32554,86	8
334	589,47249	589,309	5	284000	19880	12007,1	8	28971,42	8
335	589,49334	589,33	5	420000	46200	13495,92	9	30459,64	9
336	593,07478	592,91	5	186000	20460	15567,38	8	32428,66	8
337	593,22044	593,056	5	40000	4000	12655,13	7	29512,27	7
338	594,74389	594,579	70	4,21E6	210500	12892,76	10	29706,72	10
339	596,611	596,446	50	00	00	00	00	00	00
340	597,61432	597,449	120	420000	33600	0	8	16733,2	8
341	598,652	598,486	24	00	00	00	00	00	00
342	599,02228	598,856	140	561000	28050	0	8	16693,87	7
343	599,33318	599,167	5	510000	35700	11673,49	6	28358,7	7
344	600,49276	600,326	5	261000	20880	11673,49	6	28326,48	6
345	601,06	600,894	30	00	00	00	00	00	00
346	601,09917	600,933	5	390000	42900	12655,13	7	29291,32	8
347	601,24843	601,082	65	590000	59000	4134,23	7	20766,29	7
348	601,893	601,726	24	00	00	00	00	00	00
349	603,265	603,098	24	00	00	00	00	00	00
350	605,986	605,818	24	00	00	00	00	00	00
351	606,82373	606,656	5	80000	8800	15194,83	7	31674,08	7
352	607,66964	607,501	5	830000	99600	15972,35	9	32428,66	8
353	608,674	608,506	30	00	00	00	00	00	00
354	608,99485	608,826	140	1,46E6	73000	4134,23	7	20554,73	6
355	611,56095	611,392	5	470000	32900	12007,1	8	28358,7	7
356	611,57703	611,408	5	57000	4560	4134,23	7	20485,4	7
357	612,65275	612,483	5	420000	33600	14153,49	5	30475,95	6
358	612,88442	612,715	24	1,1E6	77000	12655,13	7	28971,42	8
359	613,534	613,364	24	00	00	00	00	00	00
360	615,23052	615,06	5	800000	48000	14367,8	7	30621,87	7
361	615,998	615,828	24	00	00	00	00	00	00
362	617,01391	616,843	100	810000	40500	4134,23	7	20341,32	8
363	620,5726	620,401	5	510000	66300	14625,64	8	30739,79	8
364	623,2308	623,058	5	960000	105600	16717,79	9	32763,21	9
365	623,82993	623,657	5	205000	24600	16733,2	8	32763,21	9
366	623,91127	623,739	5	35000	2800	12298,56	5	28326,48	6
367	625,1473	624,974	5	290000	23200	14625,64	8	30621,87	7
368	625,71762	625,545	5	1,18E6	129800	16693,87	7	32675,52	8
369	626,08195	625,909	270	890000	44500	0	8	15972,35	9
370	626,209	626,036	30	00	00	00	00	00	00
371	629,3385	629,164	5	440000	30800	12007,1	8	27896,8	8
372	630,47767	630,303	5	227000	27240	16693,87	7	32554,86	8
373	632,04493	631,87	5	290000	34800	16733,2	8	32554,86	8

Tabela A2.8: Linhas Espectrais de Dy I (374-430)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A_E	ΔA_E	E_i	J_i	E_s	J_s
374	632,45346	632,279	5	290000	40600	15862,64	6	31674,08	7
375	633,09571	632,921	5	88000	11440	13495,92	9	29291,32	8
376	634,507	634,332	14	00	00	00	00	00	00
377	635,01014	634,835	5	176000	24640	16288,73	8	32036,51	7
378	636,14607	635,97	5	420000	50400	15567,38	8	31287,04	9
379	636,79787	636,622	5	30000	2400	12655,13	7	28358,7	7
380	638,10712	637,931	5	161000	12880	12655,13	7	28326,48	6
381	638,857	638,68	40	00	00	00	00	00	00
382	638,92987	638,753	5	520000	41600	14970,7	6	30621,87	7
383	639,01479	638,838	5	460000	69000	16733,2	8	32382,29	7
384	642,37	642,192	50	00	00	00	00	00	00
385	642,90655	642,729	5	45000	4500	4134,23	7	19688,59	8
386	643,29532	643,118	5	250000	32500	15194,83	7	30739,79	8
387	643,833	643,655	13	00	00	00	00	00	00
388	643,85074	643,673	5	360000	32400	16288,73	8	31820,28	8
389	646,18268	646,004	5	65000	7150	13495,92	9	28971,42	8
390	646,262	646,083	8	00	00	00	00	00	00
391	647,02681	646,848	5	114000	9120	12007,1	8	27462,41	7
392	647,67	647,491	11	00	00	00	00	00	00
393	648,838	648,659	28	00	00	00	00	00	00
394	650,03149	649,852	5	18000	2340	12007,1	8	27390,97	9
395	654,4023	654,222	5	99000	8910	15194,83	7	30475,95	6
396	655,66332	655,482	5	124000	18600	14625,64	8	29877,37	7
397	655,73555	655,554	5	73000	7300	15194,83	7	30444,88	7
398	655,983	655,802	20	00	00	00	00	00	00
399	656,09608	655,915	5	20000	3200	12655,13	7	27896,8	8
400	658,11858	657,937	160	770000	77000	0	8	15194,83	7
401	663,01126	662,828	5	264000	29040	16591,38	6	31674,08	7
402	664,52	664,337	15	00	00	00	00	00	00
403	666,02	665,836	22	00	00	00	00	00	00
404	666,348	666,164	29	00	00	00	00	00	00
405	668,96926	668,785	75	300000	39000	17727,15	9	32675,52	8
406	670,0832	669,898	5	16000	2400	14367,8	7	29291,32	8
407	671,48975	671,304	5	560000	61600	15567,38	8	30459,64	9
408	674,41297	674,227	5	510000	61200	17727,15	9	32554,86	8
409	674,979	674,793	29	00	00	00	00	00	00
410	675,34348	675,157	5	69000	7590	12655,13	7	27462,41	7
411	675,949	675,762	10	00	00	00	00	00	00
412	676,776	676,589	45	00	00	00	00	00	00
413	676,99123	676,805	5	201000	24120	16591,38	6	31362,62	7
414	678,75714	678,57	5	13400	1340	7050,61	6	21783,42	7
415	679,21817	679,031	5	29000	2320	4134,23	7	18857,04	7
416	681,72135	681,533	5	640000	64000	16693,87	7	31362,62	7
417	682,008	681,82	12	00	00	00	00	00	00
418	683,5541	683,366	5	460000	50600	16733,2	8	31362,62	7
419	683,731	683,542	180	00	00	00	00	00	00
420	684,30766	684,119	5	67000	6700	15862,64	6	30475,95	6
421	685,485	685,296	80	00	00	00	00	00	00
422	685,7657	685,576	5	184000	20240	15862,64	6	30444,88	7
423	685,835	685,646	22	00	00	00	00	00	00
424	687,68365	687,494	5	95000	7600	14970,7	6	29512,27	7
425	688,0906	687,901	5	270000	48600	18021,89	8	32554,86	8
426	689,073	688,883	22	00	00	00	00	00	00
427	689,74032	689,55	5	276000	27600	12892,76	10	27390,97	9
428	690,26022	690,07	5	255000	17850	15972,35	9	30459,64	9
429	693,146	692,955	15	00	00	00	00	00	00
430	694,40201	694,21	5	235000	21150	13495,92	9	27896,8	8

Tabela A2.9: Linhas Espectrais de Dy I (431-487)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A_E	ΔA_E	E_i	J_i	E_s	J_s
431	695,334	695,142	11	00	00	00	00	00	00
432	696	695,808	40	00	00	00	00	00	00
433	696,35943	696,167	5	220000	30800	18021,89	8	32382,29	7
434	697,0691	696,877	5	89000	10680	14625,64	8	28971,42	8
435	697,68383	697,492	5	134000	12060	16288,73	8	30621,87	7
436	698,437	698,244	13	00	00	00	00	00	00
437	698,81251	698,62	5	97000	9700	15567,38	8	29877,37	7
438	699,323	699,13	13	00	00	00	00	00	00
439	700,003	699,81	45	00	00	00	00	00	00
440	701,936	701,742	20	00	00	00	00	00	00
441	705,56742	705,373	5	138000	12420	14153,49	5	28326,48	6
442	708,16013	707,965	5	146000	20440	18433,76	7	32554,86	8
443	712,73348	712,537	5	71000	7100	16591,38	6	30621,87	7
444	713,16503	712,968	5	186000	29760	16717,79	9	30739,79	8
445	713,53497	713,338	5	116000	15080	15862,64	6	29877,37	7
446	713,94965	713,753	5	183000	27450	16733,2	8	30739,79	8
447	716,40012	716,203	5	135000	13500	14367,8	7	28326,48	6
448	719,68075	719,482	5	187000	16830	13495,92	9	27390,97	9
449	720,06371	719,865	5	6500	910	4134,23	7	18021,89	8
450	721,526	721,327	11	00	00	00	00	00	00
451	723,203	723,004	17	00	00	00	00	00	00
452	725,201	725,001	13	00	00	00	00	00	00
453	726,0208	725,821	5	86000	10320	17513,33	10	31287,04	9
454	728,10038	727,9	5	40000	6400	15972,35	9	29706,72	10
455	728,16983	727,969	5	35000	3500	14625,64	8	28358,7	7
456	728,52101	728,32	5	134000	13400	16733,2	8	30459,64	9
457	729,09254	728,892	5	29000	3480	7050,61	6	20766,29	7
458	729,30523	729,104	5	79000	10270	16733,2	8	30444,88	7
459	732,62059	732,419	5	38000	7220	15862,64	6	29512,27	7
460	735,90882	735,706	5	120000	14400	16288,73	8	29877,37	7
461	737,80755	737,604	20	110000	7700	4134,23	7	17687,9	7
462	740,51475	740,311	5	41000	3280	7050,61	6	20554,73	6
463	740,963	740,759	11	00	00	00	00	00	00
464	741,441	741,237	24	00	00	00	00	00	00
465	746,93756	746,732	5	36000	3960	14970,7	6	28358,7	7
466	748,7395	748,533	5	40000	4400	14970,7	6	28326,48	6
467	749,58417	749,378	5	410000	57400	18021,89	8	31362,62	7
468	753,51363	753,306	5	67000	8040	14625,64	8	27896,8	8
469	754,581	754,373	55	00	00	00	00	00	00
470	755,508	755,3	17	00	00	00	00	00	00
471	756,186	755,978	27	00	00	00	00	00	00
472	759,339	759,13	27	00	00	00	00	00	00
473	761,365	761,155	13	00	00	00	00	00	00
474	761,98	761,77	11	00	00	00	00	00	00
475	764,319	764,109	35	00	00	00	00	00	00
476	764,796	764,586	17	00	00	00	00	00	00
477	764,874	764,664	13	00	00	00	00	00	00
478	766,447	766,236	80	00	00	00	00	00	00
479	768,48357	768,272	5	270000	43200	17727,15	9	30739,79	8
480	769,07755	768,866	5	22000	3080	16288,73	8	29291,32	8
481	769,2858	769,074	5	60000	6000	15972,35	9	28971,42	8
482	771,745	771,533	35	00	00	00	00	00	00
483	772,42087	772,208	5	440000	48400	17513,33	10	30459,64	9
484	773,4634	773,251	5	216000	28080	18433,76	7	31362,62	7
485	780,21134	779,997	5	76000	9120	18857,04	7	31674,08	7
486	780,37634	780,162	5	130000	16900	18472,71	8	31287,04	9
487	781,421	781,206	35	00	00	00	00	00	00

Tabela A2.10: Linhas Espectrais de Dy I (488-544)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A_E	ΔA_E	E_i	J_i	E_s	J_s
488	781,78014	781,565	5	59000	6490	15567,38	7	28358,7	7
489	785,39233	785,176	5	109000	13080	17727,15	9	30459,64	9
490	786,29333	786,077	5	200000	30000	18021,89	8	30739,79	8
491	787,27945	787,063	5	60000	7800	15194,83	7	27896,8	8
492	789,15947	788,942	5	64000	7680	17804,24	5	30475,95	6
493	790,47072	790,253	5	480000	62400	18711,93	6	31362,62	7
494	791,156	790,938	27	00	00	00	00	00	00
495	793,71568	793,497	5	13600	1632	4134,23	7	16733,2	8
496	796,29753	796,079	5	19000	3230	16733,2	8	29291,32	8
497	797,082	796,863	11	00	00	00	00	00	00
498	800,25224	800,032	5	21000	2310	15862,64	6	28358,7	7
499	806,45226	806,231	5	70000	14700	18339,8	7	30739,79	8
500	814,195	813,971	5	129000	11610	18339,8	7	30621,87	7
501	814,953	814,729	13	00	00	00	00	00	00
502	815,1567	814,933	5	31000	3100	15194,83	7	27462,41	7
503	826,09946	825,872	5	37000	4810	18339,8	7	30444,88	7
504	826,78	826,553	20	00	00	00	00	00	00
505	828,50247	828,275	5	21000	2730	16288,73	8	28358,7	7
506	832,839	832,61	35	00	00	00	00	00	00
507	839,63479	839,404	5	57000	7410	18711,93	6	30621,87	7
508	845,71102	845,479	5	39000	5070	17687,9	7	29512,27	7
509	852,14442	851,91	5	36000	5400	16591,38	6	28326,48	6
510	852,57234	852,338	5	146000	18980	19557,83	9	31287,04	9
511	863,249	863,012	11	00	00	00	00	00	00
512	873,85012	873,61	5	31000	4960	18433,76	7	29877,37	7
513	877,20914	876,968	5	150000	28500	21540,68	9	32940,47	8
514	878,324	878,083	12	00	00	00	00	00	00
515	889,34186	889,098	5	35000	4550	17727,15	9	28971,42	8
516	895,05723	894,812	5	18000	2520	18339,8	7	29512,27	7
517	895,11972	894,874	5	57000	9690	19304,26	6	30475,95	6
518	904,11008	903,862	5	43000	6020	4134,23	7	15194,83	7
519	913,11526	912,865	5	28000	4200	18339,8	7	29291,32	8
520	918,0966	917,845	5	200000	42000	21783,42	7	32675,52	8
521	924,33316	924,08	5	128000	20480	18472,71	8	29291,32	8
522	928,38098	928,126	5	420000	67200	21783,42	7	32554,86	8
523	929,12884	928,874	5	90000	14400	18528,55	7	29291,32	8
524	933,15703	932,901	5	330000	52800	21838,55	9	32554,86	8
525	943,72297	943,464	5	31000	5270	20766,29	7	31362,62	7
526	945,79551	945,536	5	68000	9520	19304,26	6	29877,37	7
527	950,36798	950,107	5	22000	3080	17804,24	5	28326,48	6
528	954,40338	954,142	5	124000	18600	20884,87	8	31362,62	7
529	959,69566	959,433	5	114000	19380	19092,3	8	29512,27	7
530	960,75877	960,495	5	61000	9150	20954,18	7	31362,62	7
531	985,32943	985,059	5	112000	15680	19557,83	9	29706,72	10
532	998,11357	997,84	5	7700	1078	18339,8	7	28358,7	7
533	1000,9459	1000,672	5	103000	16480	20485,4	7	30475,95	6
534	1001,3338	1001,059	5	20000	2800	18339,8	7	28326,48	6
535	1002,9869	1002,712	5	29000	4640	21392,4	6	31362,62	7
536	1009,208	1008,931	5	290000	34800	19797,96	10	29706,72	10
537	1010,8443	1010,567	5	39000	4680	18433,76	7	28326,48	6
538	1011,5325	1011,255	5	53000	8480	18472,71	8	28358,7	7
539	1017,2785	1017	5	77000	9240	18528,55	7	28358,7	7
540	1017,9485	1017,67	5	48000	7200	19688,59	8	29512,27	7
541	1026,0241	1025,743	5	173000	27680	21540,68	9	31287,04	9
542	1027,3807	1027,099	5	162000	24300	19557,83	9	29291,32	8
543	1030,8524	1030,57	5	300000	39000	21788,93	10	31489,64	10
544	1043,3719	1043,086	5	44000	6600	20891,64	5	30475,95	6

Tabela A2.11: Linhas Espectrais de Dy I (545-601)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A_E	ΔA_E	E_i	J_i	E_s	J_s
545	1044,4115	1044,125	5	60000	9600	20884,87	8	30459,64	9
546	1046,6382	1046,352	5	33000	4950	20921,55	5	30475,95	6
547	1052,841	1052,553	5	280000	47600	21788,93	10	31287,04	9
548	1061,1104	1060,82	5	137000	17810	18472,71	8	27896,8	8
549	1062,294	1062,003	5	44000	5720	19557,83	9	28971,42	8
550	1063,4022	1063,111	5	111000	21090	23271,74	9	32675,52	8
551	1067,4352	1067,143	5	21500	2795	18528,55	7	27896,8	8
552	1079,1678	1078,872	5	32000	4480	19092,3	8	28358,7	7
553	1080,1142	1079,818	5	124000	16120	20448,44	11	29706,72	10
554	1104,4305	1104,128	5	9700	1358	19304,26	6	28358,7	7
555	1107,8933	1107,59	5	85000	12750	22647,94	7	31674,08	7
556	1108,3747	1108,071	5	20500	2665	19304,26	6	28326,48	6
557	1112,3842	1112,08	5	119000	15470	18472,71	8	27462,41	7
558	1118,7034	1118,397	5	2,1E6	357000	23736,6	9	32675,52	8
559	1119,337	1119,031	5	480000	57600	18528,55	7	27462,41	7
560	1120,6755	1120,369	5	25000	4000	20954,18	7	29877,37	7
561	1121,207	1120,9	5	160000	40000	21540,68	9	30459,64	9
562	1130,7804	1130,471	5	790000	142200	23832,07	8	32675,52	8
563	1134,0106	1133,7	5	3,8E6	570000	23736,6	9	32554,86	8
564	1136,6517	1136,341	5	1000000	180000	23877,75	8	32675,52	8
565	1146,4222	1146,109	5	1,02E6	173400	23832,07	8	32554,86	8
566	1150,1312	1149,816	5	14000	2240	20817,61	6	29512,27	7
567	1152,4574	1152,142	5	2,2E6	352000	23877,75	8	32554,86	8
568	1153,3081	1152,992	5	120000	19200	21788,93	10	30459,64	9
569	1159,0978	1158,78	5	35000	5250	20884,87	8	29512,27	7
570	1163,2519	1162,934	5	700000	112000	23832,07	8	32428,66	8
571	1168,485	1168,165	5	150000	22500	20954,18	7	29512,27	7
572	1169,4662	1169,146	5	240000	40800	23877,75	8	32428,66	8
573	1169,7904	1169,47	5	77000	13090	23271,74	9	31820,28	8
574	1178,5546	1178,232	5	45000	7200	21392,4	6	29877,37	7
575	1199,1889	1198,861	5	130000	16900	19557,83	9	27896,8	8
576	1199,4521	1199,124	5	18000	3060	20954,18	7	29291,32	8
577	1201,1089	1200,78	5	124000	22320	24229,22	9	32554,86	8
578	1215,8838	1215,551	5	350000	59500	24204,19	8	32428,66	8
579	1222,7779	1222,443	5	240000	45600	24204,19	8	32382,29	7
580	1225,7681	1225,433	5	206000	26780	19304,26	6	27462,41	7
581	1231,5468	1231,21	5	230000	34500	21392,4	6	29512,27	7
582	1236,6213	1236,283	5	135000	18900	20884,87	8	28971,42	8
583	1246,4942	1246,153	5	45000	8100	23340,12	7	31362,62	7
584	1247,312	1246,971	5	14000	2100	20954,18	7	28971,42	8
585	1247,6139	1247,273	5	47000	7990	23271,74	9	31287,04	9
586	1254,0868	1253,744	5	98000	11760	22647,94	7	30621,87	7
587	1254,3967	1254,054	5	63000	11970	22767,83	8	30739,79	8
588	1255,2469	1254,904	5	1,05E6	199500	24708,96	7	32675,52	8
589	1259,0447	1258,7	5	45000	8100	23877,75	8	31820,28	8
590	1262,9787	1262,633	5	240000	31200	21788,93	10	29706,72	10
591	1265,107	1264,761	5	400000	80000	24858,74	10	32763,21	9
592	1273,2301	1272,882	5	59000	7080	22767,83	8	30621,87	7
593	1274,551	1274,203	5	1,9E6	323000	24708,96	7	32554,86	8
594	1276,6273	1276,278	5	23000	3220	19557,83	9	27390,97	9
595	1276,7609	1276,412	5	220000	41800	24204,19	8	32036,51	7
596	1277,4639	1277,115	5	38000	6080	22647,94	7	30475,95	6
597	1280,0393	1279,689	5	370000	51800	23677,38	11	31489,64	10
598	1282,5544	1282,203	5	57000	9120	22647,94	7	30444,88	7
599	1290,216	1289,863	5	42000	7140	21540,68	9	29291,32	8
600	1295,3871	1295,033	5	560000	95200	24708,96	7	32428,66	8
601	1302,353	1301,997	5	94000	19740	25084,8	9	32763,21	9

Tabela A2.12: Linhas Espectrais de Dy I (602-658)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A_E	ΔA_E	E_i	J_i	E_s	J_s
602	1304,9191	1304,563	5	84000	16800	25012,21	8	32675,52	8
603	1313,0097	1312,651	5	55000	9350	24204,19	8	31820,28	8
604	1317,0008	1316,641	5	78000	10920	19797,96	10	27390,97	9
605	1317,3391	1316,979	5	170000	28900	24229,22	9	31820,28	8
606	1325,794	1325,432	5	92000	17480	25012,21	8	32554,86	8
607	1326,904	1326,541	5	123000	19680	23953,3	10	31489,64	10
608	1338,0021	1337,636	5	27000	4050	20884,87	8	28358,7	7
609	1339,0376	1338,672	5	390000	70200	23271,74	9	30739,79	8
610	1345,0189	1344,651	5	29000	4060	20891,64	5	28326,48	6
611	1345,761	1345,393	5	74000	11100	21540,68	9	28971,42	8
612	1350,4517	1350,083	5	23000	3220	20921,55	5	28326,48	6
613	1350,5264	1350,157	5	23000	3450	20954,18	7	28358,7	7
614	1361,6817	1361,31	5	129000	23220	25084,8	9	32428,66	8
615	1363,5608	1363,188	5	105000	18900	23953,3	10	31287,04	9
616	1377,0216	1376,645	5	40000	5200	23359,82	6	30621,87	7
617	1383,2349	1382,857	5	320000	51200	22647,94	7	29877,37	7
618	1384,0064	1383,628	5	20000	3200	22286,87	6	29512,27	7
619	1392,7421	1392,362	5	43000	8600	25760,39	8	32940,47	8
620	1401,3787	1400,996	5	23000	3910	23340,12	7	30475,95	6
621	1405,2582	1404,874	5	189000	30240	23359,82	6	30475,95	6
622	1405,7936	1405,409	5	190000	38000	25268,87	7	32382,29	7
623	1406,5608	1406,177	5	92000	14720	22767,83	8	29877,37	7
624	1407,5071	1407,122	5	23000	3910	23340,12	7	30444,88	7
625	1411,4207	1411,035	5	29000	5220	23359,82	6	30444,88	7
626	1421,3651	1420,977	5	78000	12480	23440,46	5	30475,95	6
627	1426,1409	1425,751	5	127000	17780	20884,87	8	27896,8	8
628	1426,7289	1426,339	5	74000	13320	24353,58	7	31362,62	7
629	1431,5634	1431,172	5	38000	7600	25955,1	9	32940,47	8
630	1435,4823	1435,09	5	8000	1200	21392,4	6	28358,7	7
631	1439,4827	1439,089	5	25000	4250	23529,01	6	30475,95	6
632	1440,3784	1439,985	5	151000	21140	20954,18	7	27896,8	8
633	1442,1524	1441,758	5	17000	2380	21392,4	6	28326,48	6
634	1445,9497	1445,554	5	8500	1615	23529,01	6	30444,88	7
635	1446,1044	1445,709	5	38000	8360	25760,39	8	32675,52	8
636	1468,8451	1468,444	5	55000	9900	25012,21	8	31820,28	8
637	1477,62	1477,216	5	131000	26200	25268,87	7	32036,51	7
638	1482,7028	1482,298	5	24000	4080	22767,83	8	29512,27	7
639	1484,6752	1484,27	5	260000	44200	25084,8	9	31820,28	8
640	1505,2579	1504,846	5	63000	11340	22647,94	7	29291,32	8
641	1508,0909	1507,679	5	190000	30400	24858,74	10	31489,64	10
642	1512,2164	1511,803	5	17000	3060	23832,07	8	30444,88	7
643	1520,3252	1519,91	5	10700	1605	20884,87	8	27462,41	7
644	1529,6952	1529,277	5	23000	4140	23340,12	7	29877,37	7
645	1532,9218	1532,503	5	166000	28220	22767,83	8	29291,32	8
646	1534,3189	1533,9	5	122000	20740	23359,82	6	29877,37	7
647	1535,9638	1535,545	5	27000	5400	24229,22	9	30739,79	8
648	1536,5161	1536,096	5	49000	7350	20954,18	7	27462,41	7
649	1536,9624	1536,543	5	170000	30600	23953,3	10	30459,64	9
650	1537,0191	1536,599	5	31000	4650	20884,87	8	27390,97	9
651	1544,7451	1544,323	5	53000	10600	25955,1	9	32428,66	8
652	1555,6212	1555,197	5	53000	10070	24858,74	10	31287,04	9
653	1561,2291	1560,802	5	151000	25670	25268,87	7	31674,08	7
654	1561,3193	1560,893	5	64000	10880	25084,8	9	31489,64	10
655	1570,8303	1570,401	5	83000	16600	25670,45	6	32036,51	7
656	1575,21	1574,78	5	28000	4760	23529,01	6	29877,37	7
657	1599,2963	1598,859	5	37000	7030	25567,53	7	31820,28	8
658	1602,3869	1601,949	5	27000	4860	24204,19	8	30444,88	7

Tabela A2.13: Linhas Espectrais de Dy I (659-715)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A_E	ΔA_E	E_i	J_i	E_s	J_s
659	1611,9698	1611,53	5	17000	2720	22767,83	8	28971,42	8
660	1620,181	1619,738	5	113000	19210	23340,12	7	29512,27	7
661	1625,3688	1624,925	5	13000	2340	23359,82	6	29512,27	7
662	1641,6857	1641,237	5	34000	6120	24353,58	7	30444,88	7
663	1647,4437	1646,994	5	165000	24750	21392,4	6	27462,41	7
664	1654,1776	1653,726	5	12000	2160	23832,07	8	29877,37	7
665	1658,5563	1658,103	5	41000	6150	23677,38	11	29706,72	10
666	1661,2455	1660,792	5	9900	1881	23271,74	9	29291,32	8
667	1666,7722	1666,317	5	18000	3240	23877,75	8	29877,37	7
668	1671,3297	1670,873	5	169000	28730	23529,01	6	29512,27	7
669	1680,3334	1679,874	5	66000	11880	23340,12	7	29291,32	8
670	1704,9775	1704,512	5	127000	24130	25955,1	9	31820,28	8
671	1709,317	1708,85	5	42000	6720	21540,68	9	27390,97	9
672	1725,5987	1725,128	5	21000	4200	25567,53	7	31362,62	7
673	1738,0967	1737,622	5	4900	784	23953,3	10	29706,72	10
674	1745,9381	1745,462	5	55000	11550	25012,21	8	30739,79	8
675	1751,0804	1750,602	5	120000	19200	22647,94	7	28358,7	7
676	1756,7993	1756,32	5	14000	2800	25670,45	6	31362,62	7
677	1761,016	1760,535	5	10900	1635	22647,94	7	28326,48	6
678	1785,4273	1784,94	5	162000	29160	24858,74	10	30459,64	9
679	1788,6304	1788,142	5	10100	1717	22767,83	8	28358,7	7
680	1806,8349	1806,341	5	14000	2660	25955,1	9	31489,64	10
681	1810,3512	1809,857	5	18000	3240	24353,58	7	29877,37	7
682	1814,0096	1813,515	5	320000	60800	25774,39	10	31287,04	9
683	1825,6504	1825,152	5	11400	1824	24229,22	9	29706,72	10
684	1835,728	1835,227	5	28000	5320	25012,21	8	30459,64	9
685	1860,5205	1860,013	5	66000	12540	25084,8	9	30459,64	9
686	1875,49	1874,978	5	23000	4600	25955,1	9	31287,04	9
687	1883,9204	1883,406	5	14000	2660	24204,19	8	29512,27	7
688	1905,1756	1904,655	5	17000	2890	22647,94	7	27896,8	8
689	1920,4621	1919,938	5	9200	1748	25268,87	7	30475,95	6
690	1931,9901	1931,462	5	25000	4750	25268,87	7	30444,88	7
691	1949,7092	1949,177	5	19000	3230	22767,83	8	27896,8	8
692	1965,7449	1965,208	5	14000	2660	24204,19	8	29291,32	8
693	2000,4481	1999,903	5	7700	1309	23359,82	6	28358,7	7
694	2005,4709	2004,923	5	6600	1056	23340,12	7	28326,48	6
695	2008,2741	2007,727	5	20000	4200	25760,39	8	30739,79	8
696	2046,6556	2046,097	5	73000	11680	23440,46	5	28326,48	6
697	2070,5263	2069,961	5	4700	846	23529,01	6	28358,7	7
698	2084,432	2083,863	5	9200	1472	23529,01	6	28326,48	6
699	2094,4909	2093,919	5	21000	4200	25670,45	6	30444,88	7
700	2097,6542	2097,082	5	27000	4860	24204,19	8	28971,42	8
701	2108,7259	2108,151	5	92000	15640	24229,22	9	28971,42	8
702	2127,2115	2126,632	5	22000	3300	25920,88	6	30621,87	7
703	2130,116	2129,535	5	127000	20320	22767,83	8	27462,41	7
704	2134,7041	2134,122	5	34000	6460	25760,39	8	30444,88	7
705	2162,1341	2161,544	5	8900	1602	23271,74	9	27896,8	8
706	2163,032	2162,442	5	13000	2210	22767,83	8	27390,97	9
707	2209,149	2208,547	5	58000	9860	23832,07	8	28358,7	7
708	2219,9825	2219,376	5	17000	3400	25955,1	9	30459,64	9
709	2231,6696	2231,061	5	40000	6800	23877,75	8	28358,7	7
710	2320,2717	2319,639	5	16000	3200	25567,53	7	29877,37	7
711	2336,9345	2336,297	5	15000	3000	25012,21	8	29291,32	8
712	2377,262	2376,614	5	37000	7400	25084,8	9	29291,32	8
713	2425,8361	2425,174	5	20000	3600	23340,12	7	27462,41	7
714	2427,6382	2426,976	5	11400	1938	23271,74	9	27390,97	9
715	2428,9649	2428,303	5	60000	11400	25760,39	8	29877,37	7

Tabela A2.14: Linhas Espectrais de Dy I (716)

N	λ_{vacuo}	λ_{ar}	I. R.	A_E	ΔA_E	E_i	J_i	E_s	J_s
716	2437,4846	2436,82	5	20000	3600	23359,82	6	27462,41	7

APÊNDICE B: Tratamento dos Espectros de Emissão

Os espectros de emissão obtidos em laboratório foram tratados por meio do programa *Origin* quanto à intensidade e ao comprimento de onda, a fim de eliminar a influência do equipamento e o erro pela variação de posição da grade de difração durante as medições. A calibração de intensidade foi realizada utilizando uma lâmpada da *Oriel* de quartzo e filamento de tungstênio, Modelo 63355-Sn7-1719, que emite de 250 nm a 2400 nm. Tal lâmpada é pré tratada e calibrada pelo fabricante e os dados são modelados através de dados do NIST, resultando em uma fórmula que é fornecida em seu manual:

$$I(mW/m^2 nm) = \lambda^{-5} \cdot e^{(A+B/\lambda)} \cdot (C + D/\lambda + E/\lambda^2 + F/\lambda^3 + G/\lambda^4 + H/\lambda^5)$$

onde:

$$A = 42,9662266936948$$

$$B = -4467,28058252347$$

$$C = 0,91706929594553$$

$$D = 216,922972460706$$

$$E = -190527,025445589$$

$$F = 68092375,7403678$$

$$G = -9076524505,64917$$

$$H = 0$$

B1 Calibração de Intensidade

Para realizar a calibração de intensidade, foram obtidos espectros na mesma posição de grade tanto para a lâmpada de catodo oco de érbio quanto para a lâmpada de calibração de tungstênio. Para cada um dos espectros, foi obtido o sinal de fundo colocando-se um anteparo entre a entrada do monocromador e a fonte de radiação. Estes sinais foram subtraídos dos espectros das lâmpadas. Considerando a mesma base de tempo, o cálculo para a calibração de intensidade segue a seguinte equação:

$$I_{corr} = I_{LCO} \cdot \frac{I_{Oriel}}{I_{TRIAX Oriel}}$$

onde:

I_{corr} = intensidade corrigida.

I_{LCO} = intensidade do espectro da lâmpada de catodo oco menos a intensidade obtida com o anteparo (intensidade de fundo).

I_{Oriel} = valores obtidos pela equação fornecida pelo fabricante.

$I_{TRIAX\ Oriel}$ = intensidade medida com a lâmpada de calibração menos a intensidade de fundo.

B2 Calibração do Comprimento de Onda

Para a Calibração de comprimento de onda, realizaram-se os seguintes procedimentos:

- a) Comparação dos espectros simulados do disprósio e do argônio a partir da literatura com o espectro obtido com a lâmpada de catodo oco e identificação das linhas de emissão. Este procedimento está representado nas Figuras B2.1.
- b) Como os espectros adquiridos possuem 1024 pontos, é possível relacionar as linhas de emissão com o correspondente ponto do gráfico:

$$\text{Ponto}_i \leftrightarrow \lambda_i$$

- c) Interpolação dos 1024 pontos por meio do gráfico construído a partir da lista de pontos anterior.
- d) Esta interpolação dá origem a uma lista de pontos no *Origin* equivalente ao comprimento de onda corrigido.

$$\text{Ponto}_j \leftrightarrow \lambda_j$$

com $j = 1, 2, 3, \dots, 1024$.

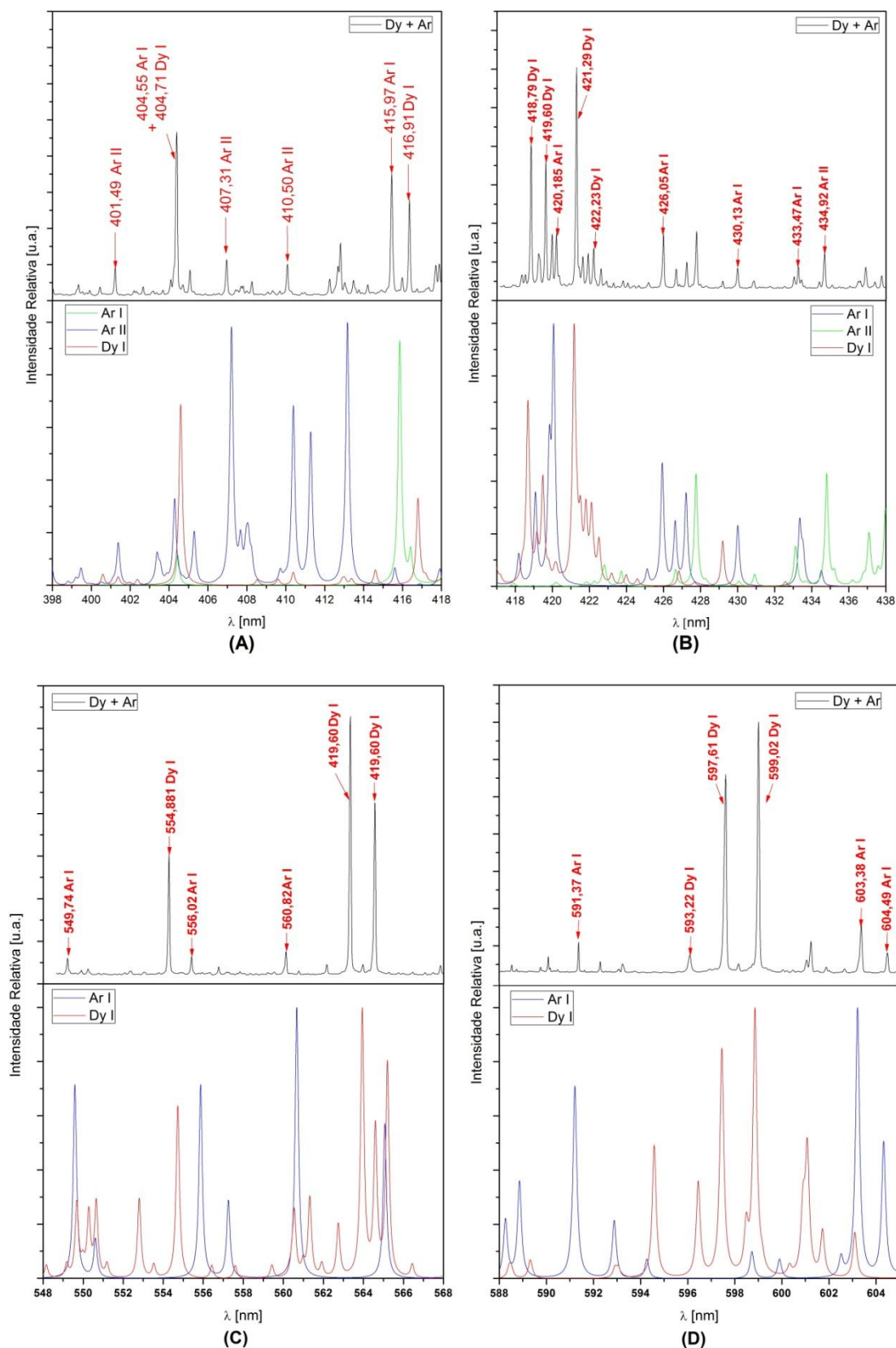


Figura B2.0.1: : Identificação das linhas espectrais. (A) na região de 398 a 418 nm: (acima) espectro experimental; (abaixo) espectros simulados de Dy I, Ar I e Ar II. (B) na região de 417 a 438 nm: (acima) espectro experimental; (abaixo) espectros simulados de Dy I, Ar I e Ar II. (C) na região de 548 a 568 nm: (acima) espectro experimental; (abaixo) espectros simulados de Dy I e Ar I. (D) na região de 588 a 605 nm: (acima) espectro experimental; (abaixo) espectros simulados de Dy I e Ar I.

B3 Gráficos dos Espectros de Emissão

A seguir são apresentados os espectros calibrados com relação à intensidade e ao comprimento de onda, em que são indicadas linhas de disprósio. Todos os valores de comprimento de onda mostrados no gráfico são correspondentes ao comprimento de onda no vácuo.

A as figuras a seguir apresentam os espectros obtidos da descarga de catodo oco de disprósio submetidas à diferentes correntes de operação e pressão de argônio.

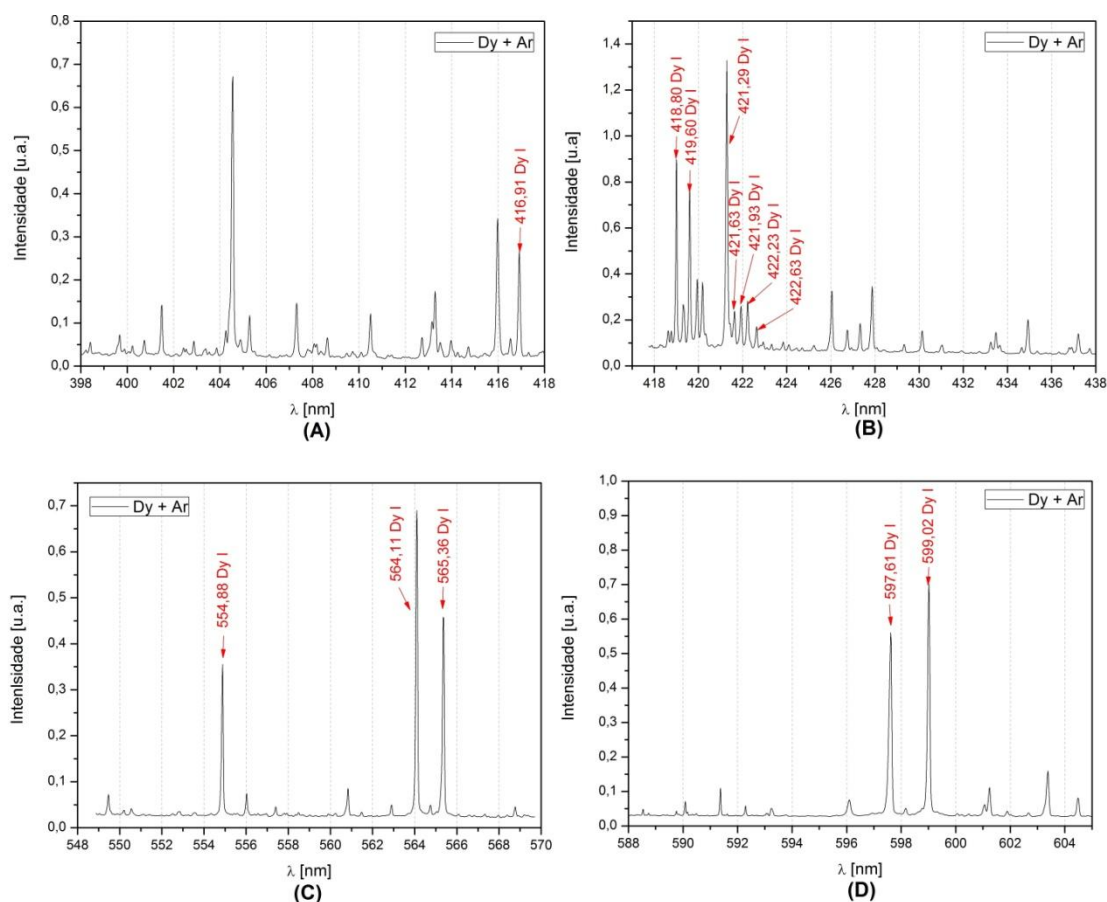


Figura B3.1: Espectros corrigidos da descarga de catodo oco de disprósio submetida a corrente de 10 mA e pressão do argônio de 1 mbar. (A) região de 398 a 418 nm. (B) região de 417 a 438 nm. (C) 548 a 570 nm. (D) região 588 a 605 nm.

Figura B3.2: Espectros corrigidos da descarga de catodo oco de disprósio submetida a corrente de 10 mA e pressão do argônio de 10 mbar. (E) região de 398 a 418 nm. (F) região de 417 a 438 nm. (G) 548 a 570 nm. (H) região 588 a 605 nm

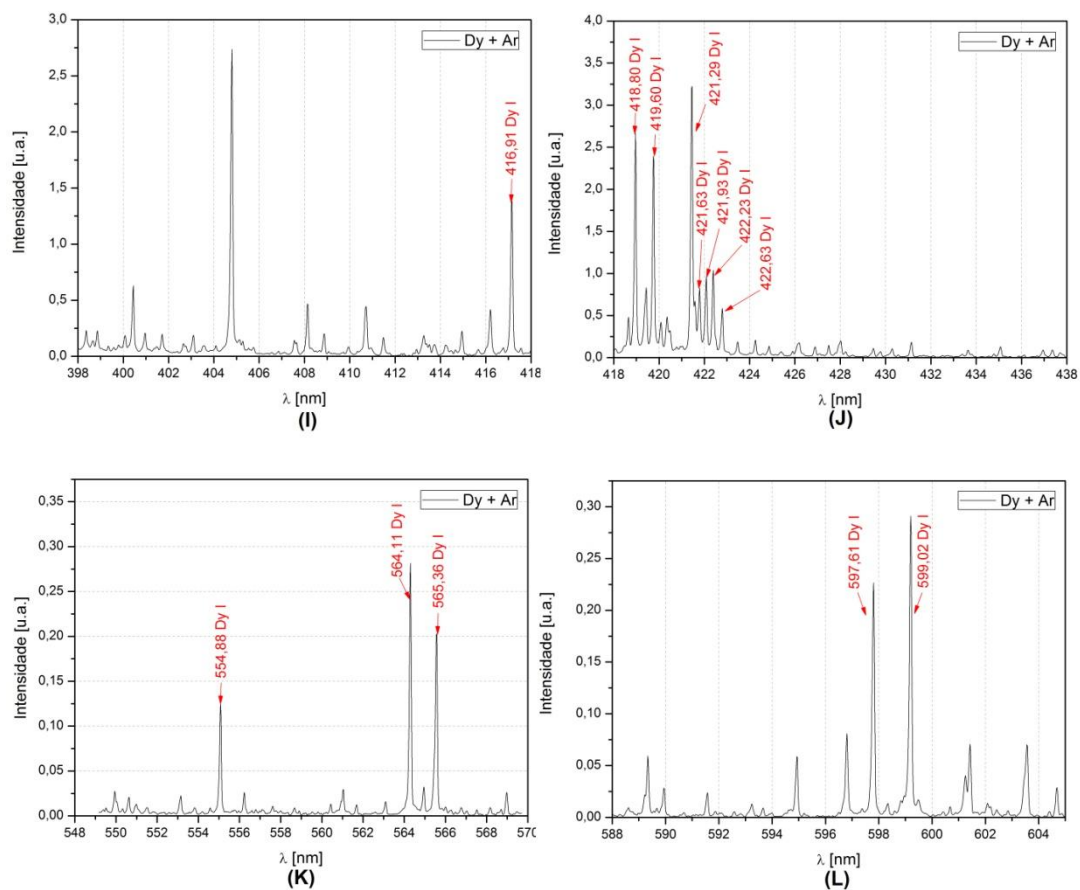


Figura B3.3: Espectros corrigidos da descarga de catodo oco de disprósio submetida a corrente de 40 mA e pressão do argônio de 10 mbar. (I) região de 398 a 418 nm. (J) região de 417 a 438 nm. (K) 548 a 570 nm. (L) região 588 a 605 nm

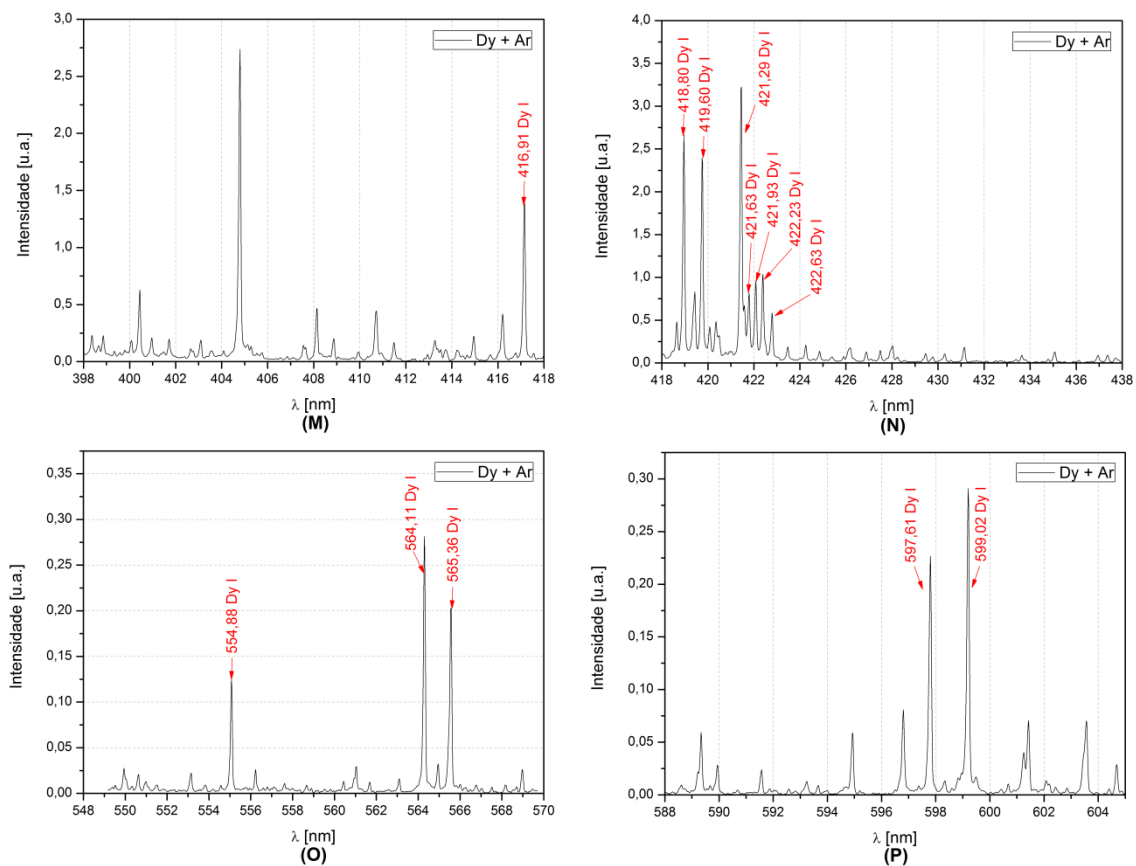


Figura B3.4: Espectros corrigidos da descarga de catodo oco de disprósio submetida a corrente de 40 mA e pressão do argônio de 1 mbar. (I) região de 398 a 418 nm. (J) região de 417 a 438 nm. (K) 548 a 570 nm. (L) região 588 a 605 nm

As possíveis atribuições para estas linhas encontram-se nas tabelas A2.3, A2.6 e A2.7, do Apêndice A.

APÊNDICE C: Tratamento para Determinação da Intensidade Relativa das Linhas do Espectro.

Para calcular a temperatura eletrônica de excitação de um sistema, através do Método do Gráfico de Boltzmann, é necessário conhecer a intensidade das linhas do espectro deste sistema. O método utilizado para determinar a intensidade de uma linha é calcular a área formada pela mesma.

Neste trabalho, as áreas de cada linha são calculadas através de ajustes de curvas gaussianas sobre as linhas espectrais. Adota-se, assim, que a intensidade da linha espectral é aproximadamente igual a área descrita pela curva gaussiana. O programa *Origin* foi utilizado para a determinação destas intensidades.

O método para o cálculo da intensidade da linha é representado na figura abaixo.

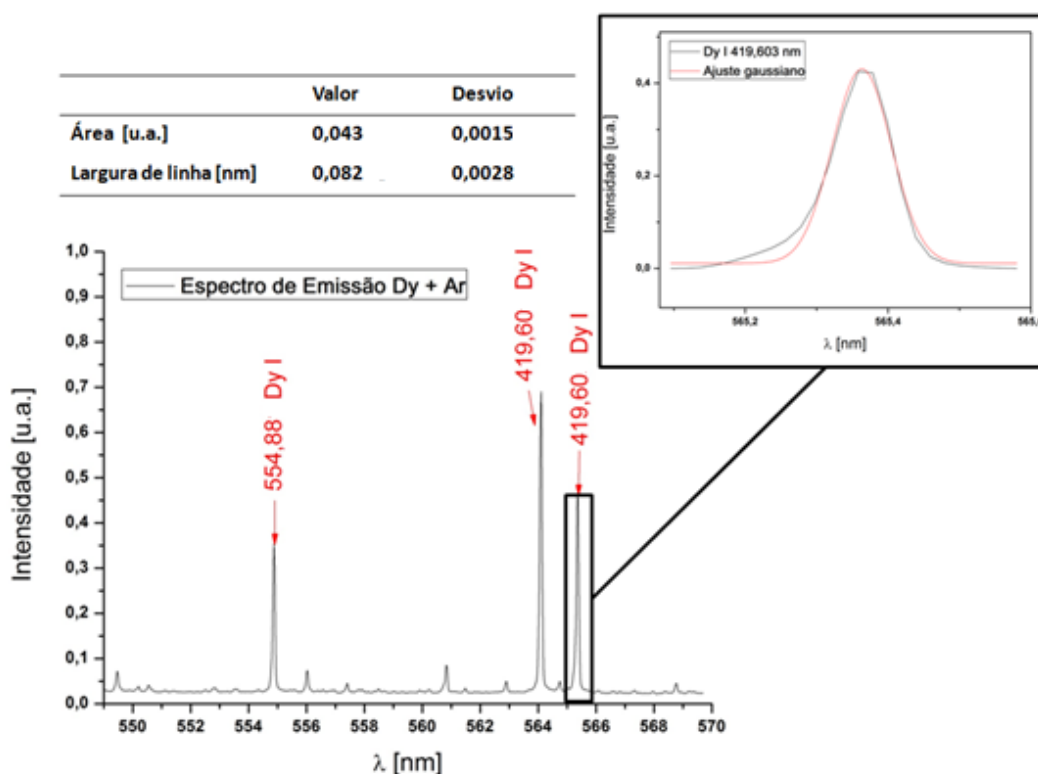


Figura C.1: Método do cálculo de intensidade através de curvas gaussianas.

ANEXO A: Método dos Mínimos Quadrados e o Coeficiente de Determinação.

O método dos mínimos quadrado (MMQ) é aplicado ao caso em que se pretende ajustar uma linha reta a um conjunto de pares experimentais.

Admita-se que são realizadas várias medidas das grandezas x e y , obtendo-se um conjunto de pontos $\{(x_1, y_1); (x_2, y_2); (x_3, y_3), \dots, (x_n, y_n)\}$, sendo y uma variável aleatória relacionada a x pela equação de uma reta.

$$y = a \cdot x + b \quad (\text{D.1})$$

A equação D.1 representa o valor mais provável para a variável y . Ver figura abaixo.

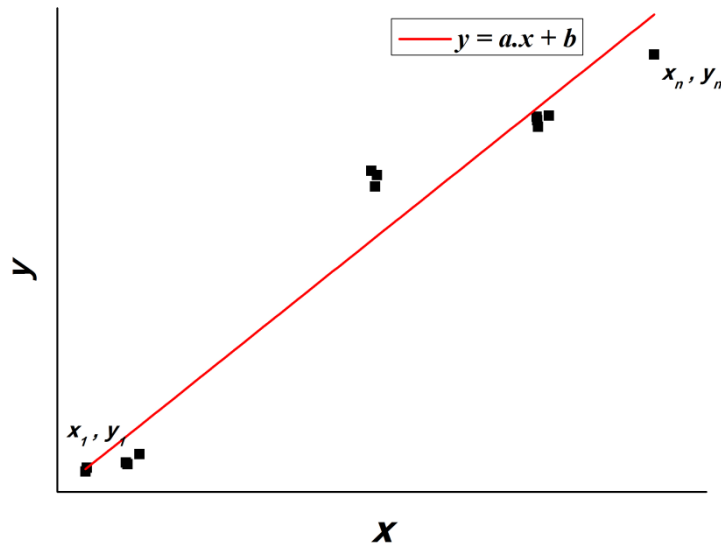


Figura D.1: Representação de ajuste linear.

As estimativas de mínimos quadrados das constantes a e b são os valores de a e b que tornam mínima a expressão.

$$\sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - (a \cdot x_i + b))^2 \quad (\text{D.2})$$

onde n é o número de pontos e, ε_i é a diferença entre o valor observado y_i e o valor esperado para $y = a \cdot x + b$. E a expressão (D.2) acima representa a soma dos quadrados destas diferenças.

Diferenciando-se a equação D.2 com relação aos parâmetros a e b , respectivamente, e igualando-se os resultados a zero (condição de mínimo), os melhores valores para as constantes podem então ser encontrados.

$$\frac{\partial \sum \varepsilon_i^2}{\partial a} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial [(y_i - (a \cdot x_i + b))^2]}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^n [x_i \cdot y_i - a \cdot x_i^2 - b \cdot x_i] = 0 \quad (D.3)$$

$$\frac{\partial \sum \varepsilon_i^2}{\partial b} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial [(y_i - (a \cdot x_i + b))^2]}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^n [y_i - a \cdot x_i^2 - b] = 0 \quad (D.4)$$

Pela resolução simultânea das equações D.3 e D.4 para a e b obtemos:

$$a = \frac{\sum x_i \sum y_i - n \sum (x_i \cdot y_i)}{(\sum x_i)^2 - n \sum x_i^2} \quad (D.5)$$

$$b = \frac{\sum (x_i \cdot y_i) \sum x_i - \sum x_i^2 \sum y_i}{(\sum x_i)^2 - n \sum x_i^2} \quad (D.6)$$

Outro parâmetro importante no MMQ é o coeficiente de determinação R^2 que assume valores entre 0 e 1 que indica quão a equação determinada se ajusta aos pontos dados. Quanto mais próximo de 1, tanto melhor o ajuste. O coeficiente de determinação pode ser calculado a através da equação D.7.

$$R^2 = \frac{\left(\sum x_i \cdot y_i - \sum x_i \sum \frac{y_i}{n} \right)^2}{\left(\sum x_i^2 - \frac{(\sum x_i)^2}{n} \right) \left(\sum y_i^2 - \frac{(\sum y_i)^2}{n} \right)} \quad (D.7)$$