

TRIPPLICADO

F.003

3ej

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

**ANALISIS ESPECTRAL DEL KRIPTON
DOS Y TRES VECES IONIZADO**

T E S I S

para optar al título de Doctor en Física

Fausto Osvaldo Bredice

1988

A mis padres,
a mi esposa,
a mis hijas.

INDICE

		Pag
CAPITULO I.		
	Introducción	1
CAPITULO II		
	Introducción	6
II.1	Átomos con N electrones	8
II.2	Aproximación de campo central	12
II.3	Antisimetrización: determinantes de Slater	14
II.4	Elementos de matriz: caso general	17
II.5	Elementos de matriz: casos especiales	20
II.6	Interacción spin-órbita	26
II.7	Acoplamientos intermedios	28
II.8	Cálculo de los valores de los niveles de energía para la configuración fundamental $4s^2 4p^4$ del Kr III	29
II.9	Pureza de los autovectores	32
II.10	Ecuaciones de Hartree-Fock	35
II.10a	Aplicación del principio variacional	36
II.11	Métodos semiempíricos	38
II.11a	El principio de combinación de Ritz	38
II.11b	Secuencias isoelectrónicas	39

II.11b.1	Métodos gráficos	40
II.11c	Otras secuencias regulares	43

CAPITULO III

III.1	Equipo experimental	45
III.1a	Descripción de la fuente espectral	45
III.1b	Fuente de excitación	46
III.1c	Equipo de vacío	47
III.1d	Espectrógrafos	48
III.1e	Placas espectrográficas	49
III.1f	Dispositivos de medida	49
III.2	Procedimientos experimentales	50
III.2a	Asignación iónica	51
III.3	Estudio de la fuente espectral	52
III.3a	Corrimientos de las líneas por efecto Stark	55

CAPITULO IV

IV.1	Configuraciones electrónicas del Kr III	57
IV.1a	Distribución de Configuraciones	61
IV.2	Análisis de las configuraciones	61
IV.2a	Configuración $4s^2 4p^4$	61
IV.2b	Configuración $4s4p^5$	63
IV.2c	Configuración $4s^2 4p^3 5s$	64

IV.2d	Configuración $4s^2 4p^3 5p$	66
IV.2e	Configuración $4s^2 4p^3 4d$	72
IV.2f	Configuración $4s^2 4p^3 6s$	81
IV.3	Análisis de la configuración $4s^2 4p^2 5s$ del Kr IV	84
IV.3a	Estructura de niveles de la configuración $4s^2 4p^2 5s$	85
IV.3b	Cálculo teórico de los niveles de energía de la configuración $4s^2 4p^2 5s$	86

CAPITULO V

V.1	Introducción	94
V.2	Configuraciones $4s^2 4p^4$, $4s 4p^5$ y $4s^2 4p^3 5s$	94
V.3	Configuración $4s^2 4p^3 5p$	95
V.4	Configuración $4s^2 4p^3 4d$	95
V.5	Configuración $4s^2 4p^3 6s$	96
V.6	Configuración $4s^2 4p^2 5s$	96
V.7	Fuente espectral	97
V.8	Asignación iónica y clasificación de líneas espectrales	98
V.9	Trabajo futuro	99

Referencias 100

APENDICE A:

Lista de líneas clasificadas del Kr III
entre 430 Å y 8700 Å 103

APENDICE B:

Lista de niveles del Kr III de las configuraciones
estudiadas 122

APENDICE C:

Lista de líneas del Xe III, Kr II y Kr III, y sus
corrimientos por efecto Stark 126

Reconocimientos

CAPITULO I

INTRODUCCION

INTRODUCCION

Este trabajo se refiere fundamentalmente al estudio y análisis de la radiación emitida por el kriptón dos y tres veces ionizado, (Kr III y Kr IV), en el rango comprendido entre los 430 y 8700 Angstrom, lo cual marca el comienzo de un nuevo tema de investigación dentro de la línea de trabajo del laboratorio de espectroscopía del Centro de Investigaciones Opticas, (CIOp), la que se encuentra abocada al estudio y análisis espectral de gases nobles ionizados desde hace varios años.

La presente investigación está motivada por la importancia que reviste en la espectroscopía moderna el espectro de los gases nobles en grados intermedios de ionización por su relación con la física del láser, espectroscopía de plasma, estudio de procesos de colisión, estudio y análisis de parámetros atómicos, metrología, industria, medio ambiente, nuevas fuentes de luz e inclusive en la determinación de abundancias estelares.

Destaquemos primeramente que el kriptón es un gas noble de número atómico 36, que presenta la siguiente estructura electrónica: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$ la cual se denota abreviadamente $(Ar)4s^2 4p^6$. Por ende, el kriptón k veces ionizado presenta una estructura electrónica del tipo: $(Ar)4s^2 4p^{6-k}$ por lo que toda la estructura de niveles está determinada fundamentalmente por los "saltos" electrónicos

producidos a partir de estas últimas dos capas. En el capítulo IV se trata este punto con mayor detalle.

En este caso en particular, el espectro del Kr III, en lo que a determinación de niveles y clasificación de líneas respecta, fue estudiado primeramente por Boyce, ref(1), en la zona del ultravioleta lejano, y por Humphreys, ref(2), en la zona del visible, utilizando una fuente excitada por radiofrecuencia y un tubo de Geissler respectivamente.

Aunque estos trabajos representaron un gran avance en el estudio del Kr III, quedaban todavía muchos niveles por determinar, y por ende, una gran cantidad de líneas espectrales por clasificar.

El Kr IV fue también estudiado primeramente por Boyce, ref(3), quien identificó tres líneas del multiplete $4s^2 4p^3 4s$ - $4s^2 4p^3 4p$. En 1980 Fawcett y Bromage, ref(4), confirmaron la clasificación de Boyce e identificaron tres líneas más pertenecientes a las configuraciones $4s^2 4p^3$ - $4s 4p^4$. En 1984 W. Persson y S. G. Pettersson confirman lo anterior y completan las configuraciones $4s^2 4p^3$ y $4s 4p^4$, ref(5).

Al momento de emprender el presente análisis del Kr III se desconocían los niveles que pertenecen principalmente a los términos $4s^2 4p^3 (D)4d$, $4s^2 4p^3 (P)4d$, $4s^2 4p^3 (P)5p$ y $4s^2 4p^3 (D)6s$. Hasta ese momento sólo se conocían en forma completa las configuraciones fundamental, $(4s^2 4p^4)$, la

primera excitada, $(4s4p^5)$ y la $4s^2 4p^3 5s$, ref(6)

Las configuraciones pertenecientes a los electrones ns ($n>6$), np ($n>5$), nd ($n>4$) y nl ($n>4 ; l>3$) son hasta el presente, prácticamente desconocidas.

En el caso del Kr IV, como ya ha sido mencionado, sólo se conocían las configuraciones fundamental y primera excitada. Por estas razones, el objetivo fundamental de este trabajo fue revisar las configuraciones ya analizadas y completar las configuraciones $4s^2 4p^3 4d$, $5p$ y $6s$ del Kr III y analizar la configuración $4s^2 4p^2 5s$ del Kr IV.

La primer etapa para este análisis comenzó en el CIOp con el registro fotográfico en un espectrógrafo montaje Ebert, del espectro del Kriptón desde los 2200 Å hasta los 8000 Å aproximadamente, y en un espectrógrafo de vacío, montaje Robin, para la zona de 1500 Å hasta 2200 Å, utilizando para ello una fuente espectral no convencional, excitada en forma pulsada mediante la descarga de un banco de capacitores.

En la segunda etapa se midieron los espectros obtenidos y se realizó la asignación iónica de las líneas observadas.

En la tercer etapa se realizó el análisis espectral en base a los datos obtenidos previamente mas cálculos teóricos y el uso de métodos semiempíricos tales como secuencias isoelectrónicas, homólogas, etc.

Cabe destacar también que a toda esta información se le sumó la obtenida por el Dr. J. Reyna Almandos y otros, quienes registraron el espectro del Kr entre los 430 Å y 2500 Å en la Universidad de Lund, Suecia, utilizando un Theta-Pinch como fuente espectral, durante su estadía como becario externo del CONICET. Todo este material permitió encarar el análisis del Kr III y Kr IV conociendo su espectro desde los 430 Å hasta los 8000 Å aprox., y conociendo también la información necesaria para el tratamiento teórico y semiempírico de los datos experimentales.

A modo de conclusión entonces puede sintetizarse la labor desarrollada y al respecto puede decirse que se estudió el espectro del Kr varias veces ionizado en la zona ya mencionada, determinando la mayoría de los niveles que restaban para completar las configuraciones $4s^2 4p^3 4d$, $4s^2 4p^3 5p$ y $4s^2 4p^3 6s$ del Kr III, ref(7), y $4s^2 4p^2 5s$ del Kr IV. Se identificaron alrededor de quinientas líneas nuevas pertenecientes al Kr II, Kr III y Kr IV; de ellas se clasificaron del orden de medio centenar en el Kr II, ref(8), mas de ciento cincuenta en el Kr III y aproximadamente otro medio centenar en el Kr IV. Se redesignaron varios niveles, principalmente los de los términos $4p^3(^2D)4d$ y $4p^3(^2D)5p$ del Kr III, y por ende, se reclasificaron un centenar de líneas ya conocidas. Conjuntamente se estudiaron las características

de la fuente espectral en donde se observaron fenómenos muy particulares, los cuales son detallados en el capítulo III.

CAPITULO II

FUNDAMENTOS TEORICOS DE LA ESPECTROSCOPIA ATOMICA

CAPITULO II

INTRODUCCION

Con el objeto de determinar en forma teórica los niveles de energía, en especial los niveles de la configuración $4s^2 4p^2 5s$ del Kr IV por ser ésta totalmente desconocida y en consecuencia obtener valores con que cotejar los resultados experimentales, la primer parte de este capítulo se refiere al cálculo teórico de los niveles de energía de las distintas configuraciones. Para ello se comienza tratando el Hamiltoniano con N electrones y su aproximación de campo central para poder describir el sistema mediante una función de onda expresada como producto de N funciones de onda monoeléctricas del tipo hidrogenoide. Con el objeto de antisimetrizar estas funciones de onda para cumplir con el principio de exclusión de Pauli, se introducen los denominados determinantes de Slater y se analizan los elementos de matriz que de ellos surgen por la aplicación de distintos operadores en forma general para luego analizar los casos especiales que surgen cuando el operador es justamente $\frac{e^2}{r}$. Con la aplicación de este operador se llega a las integrales denominadas directas y de intercambio, F^k y G^k , respectivamente, con lo que la energía total de una configuración o las energías relativas entre los términos,

queda expresada en función de dichas integrales.

Para determinar los valores de los niveles de energía en que se desdobra un término, (estructura fina), se introduce la interacción spin-órbita analizando los casos en que ésta es muy pequeña frente a la interacción electrostática, (tipo de acoplamiento LS puro), cuando es del mismo orden de magnitud, (acoplamientos intermedios), y cuando la interacción spin-órbita es mucho mayor que la electrostática, (acoplamiento JJ). Este último caso solo es mencionado en este trabajo pues el Kr presenta un tipo de acoplamiento intermedio y se utiliza la notación LS para describirlo, lo que lleva a definir la " pureza " de los niveles cuando estos son expresados en un esquema de acoplamiento que solo es aproximado al tipo de acoplamiento verdadero.

A modo de ejemplo, se calculan en forma teórica los niveles de energía de la configuración fundamental $4s^2 4p^4$ del Kr III.

Luego se introducen las ecuaciones de Hartree-Fock con las que es posible determinar la parte radial de las funciones de onda necesaria para el cálculo de las integrales directas y de intercambio además de otras magnitudes de interés.

Es innegable que, hasta el presente, es a través de los métodos semiempíricos que se han obtenido mejores resultados

que los métodos ab-initio, ref.(16), y por tal motivo éstos constituyen el principal soporte de los resultados experimentales presentados en este trabajo, es por ello que en la última parte de este capítulo se tratan los métodos semiempíricos utilizados en la determinación de niveles de energía, ellos son: la secuencia isoelectrónica y los métodos gráficos correspondientes mas comunes, la secuencia homóloga y la secuencia isonuclear.

II.1 ATOMOS CON N ELECTRONES

EL HAMILTONIANO

Los términos mas importantes de un Hamiltoniano de un átomo con N electrones en ausencia de campos externos son:

$$H = H_0 + H_1 + H_2 \quad (II.1)$$

donde

$$H_0 = \sum_{i=1}^N [(P_i^2/2m) - (Ze^2/r_i)] \quad (II.2)$$

$$H_1 = \sum_{i < j}^N e^2/r_{ij} \quad (II.3)$$

$$H_2 = \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{T}_i \cdot \vec{s}_i \quad (II.4)$$

siendo r_i la distancia desde el núcleo de carga Ze al i -ésimo electrón de masa m y momentum P ; r_{ij} es la distancia entre el i -ésimo y j -ésimo electrón.

El término H_0 contiene la energía cinética y potencial de los electrones en el campo generado por el núcleo. H_1 representa la repulsión coulombiana interelectrónica y H_2 la interacción spin-órbita.

Otros efectos tales como interacciones hiperfinas, correcciones relativistas etc. se tratan como perturbaciones.

Los efectos relativos de H_1 y H_2 dependen del número atómico Z . En átomos livianos H_1 es predominante frente a H_2 , el cual puede ser tratado como una perturbación, mientras que en átomos pesados la situación es a la inversa, H_1 puede ser ahora tratado como perturbación. se tiene entonces, en los dos casos límites, que el Hamiltoniano adopta la forma:

$$H_I = H_0 + H_1 \quad (II.5)$$

para Z bajos, y

$$H_{II} = H_0 + H_2 \quad (II.6)$$

para Z altos

Todo Hamiltoniano de un sistema de N electrones debe ser invariante bajo un intercambio de coordenadas, (espaciales y de spin), debido a la indistinguibilidad de los electrones, lo que implica que la función de onda total debe ser

antisimétrica con respecto a un intercambio de dos partículas.

El Hamiltoniano general (II.1) es invariante frente a una inversión, (reflexión en el origen), lo que implica que las autofunciones de H deben tener una paridad definida, en otras palabras, la paridad es un buen número cuántico para estados atómicos.

Se puede demostrar que H_I conmuta con L donde

$$L = \sum_i l_i$$

y que también conmuta con S donde

$$S = \sum_i s_i$$

por lo tanto también conmuta con $J = L + S$

$$[H_I , J] = 0 \quad (II.7)$$

El Hamiltoniano H_{II} conmuta con $j = l + s$ por lo tanto

$$[H_{II} , J] = 0 \quad (II.8)$$

con

$$J = \sum j_i$$

$$j = \sum l_i + s_i$$

Pero H_{II} no conmuta con L o con S, por lo tanto se tienen dos esquemas de acoplamiento para estos casos límites. Cuando H_I es el Hamiltoniano apropiado el tipo de acoplamiento se denomina LS o Russell-Saunders. Para el segundo caso el acoplamiento se denomina JJ.

Esquemáticamente se representan a estos dos acoplamientos de la siguiente manera:

Para el LS $[(l_1, l_2) L, (s_1, s_2) S] J$

Para el JJ $[(l_1, s_1) j_1, (l_2, s_2) j_2] J$

Para situaciones intermedias se tienen otros dos tipos de acoplamientos, los denominados JK y LK. Esquemáticamente, el acoplamiento JK se representa:

$$[((l_1, s_1) j_1, l_2) K, s_2] J$$

Generalmente ocurre cuando el electrón exterior está altamente excitado, y en particular con un l grande, esto produce cambios notables en la estructura de niveles, los cuales muestran una tendencia a agruparse de a pares.

Para el acoplamiento LK su representación es la siguiente:

$$(((l_1, l_2) L, s_1) K, s_2] J$$

el cual aparece para los estados no muy excitados de elementos livianos.

II.2 APROXIMACION DE CAMPO CENTRAL

La dificultad básica que surge al resolver la ecuación de Schrodinger para un Hamiltoniano de N electrones, es que la repulsión interelectrónica es demasiado grande como para ser tratada como una perturbación.

Pero si se tiene en cuenta que la repulsión interelectrónica contiene gran cantidad de componentes esféricamente simétricos, es lógico imaginar que sea posible construir una función de energía potencial $U(r_i)$ la cual es un operador monoeléctrico esféricamente simétrico. Por lo tanto este operador es una buena aproximación para describir el comportamiento del i-ésimo electrón bajo este potencial $U(r_i)$ generado por el núcleo y los restantes N-1 electrones.

Tomando al Hamiltoniano H_I por ser de mas vasta aplicabilidad, este puede ser reescrito como:

$$H_I = H_0 + H_1$$

donde

$$H_0 = \sum_{i=1}^N (p_i^2/2m + U(r_i))$$

$$\sum_{i=1}^N U(r_i) = - \sum_{i=1}^N Ze^2/r_i + \langle \sum_{i<j}^N e^2/r_{ij} \rangle \quad (II.9a)$$

$$H_1 = - \sum_{i=1}^N Ze^2/r_i + \sum_{i<j}^N e^2/r_{ij} - \sum_{i=1}^N U(r_i)$$

$$= \sum_{i<j}^N e^2/r_{ij} - \langle \sum_{i<j}^N e^2/r_{ij} \rangle \quad (II.9b)$$

y $\langle \sum_{i < j}^N e^2 / r_{ij} \rangle$ es la repulsión electrónica promediada sobre una esfera en base, por ejemplo, a funciones de onda tipo hidrogenoides de Slater, ref.(11). Por lo tanto:

$$H_0' = \sum_{i=1}^N (P_i^2 / 2m - Ze^2 / r_i) + \langle \sum_{i < j}^N e^2 / r_{ij} \rangle \quad (\text{II.9c})$$

es la aproximación de campo central, ref.(9), la cual es utilizada por Hartree para determinar la parte radial de la función de onda, y contiene la mayor parte de la repulsión electrónica. H_1' resulta suficientemente pequeño y puede ser tratado mediante perturbaciones.

La ecuación de Schrodinger para la función de onda de N electrones

$$H_0' \phi = \left[\sum_{i=1}^N (P_i^2 / 2m + U(r_i)) \right] \phi = E \phi \quad (\text{II.10})$$

es separable ahora en N ecuaciones del tipo

$$(P^2 / 2m + U(r_i)) \phi(r) = \epsilon \phi(r)$$

y la solución para cada una de estas es un orbital de campo central:

$$\phi_{n l m_l}(r \theta \phi) = 1/r P_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta \phi) \quad (\text{II.11})$$

La simetría esférica queda establecida por la presencia de armónicos esféricos en la solución, pero la parte radial se determina resolviendo las ecuaciones de Hartree Fock para cada electrón, ref.(10).

Cuando (II.11) es multiplicada por $\xi(m_s)$, una función de spin, se obtiene un orbital de spin de campo central.

$$\psi_{n l m_l m_s}(r, m_s) = \phi_{n l m_l} \xi(m_s) = 1/r P_{n l}(r) Y_{l m_l}(\theta, \phi) \xi(m_s) \quad (II.12)$$

caracterizado por los cuatro números cuánticos n, l, m_l, m_s

donde $n = 1, 2, 3, \dots$; $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$;

$m_l = l, l-1, \dots, -l$; $m_s = \pm 1/2$

por lo que la función de onda para los N electrones se expresa como producto de N funciones de un electrón

$$\Psi(1, \dots, N) = \psi_1(1) \dots \psi_N(N) \quad (II.13)$$

II.3 ANTISIMETRIZACION: DETERMINANTES DE SLATER

El problema de la función producto (II.13) es que ella no refleja la indistinguibilidad de los electrones, requerida cuando dos de ellos son intercambiados.

Si se reescribe (II.13) en forma de un determinante, esto es

$$\Psi(1..N) = \left(\frac{1}{N}\right)^{\frac{1}{2}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) \dots \psi_1(N) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) \dots \psi_2(N) \\ \dots & \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ \psi_N(1) & \psi_N(2) \dots \psi_N(N) \end{vmatrix} \quad (\text{II.14})$$

el cual se denomina determinante de Slater, ref.(11), entonces la antisimetrización, el principio de exclusión de Pauli, y los efectos de correlación que surgen cuando dos orbitales están muy próximos entre sí, quedan establecidos por las conocidas propiedades de los determinantes.

Un conjunto de funciones de onda con el mismo (n, l) en el determinante (II.14) se denomina grupo, si todas las $2(2l+1)$ con el mismo (n, l) aparecen en (II.14) el grupo se denomina completo.

Al conjunto de los M pares de números cuánticos (n, l) que determinan el modo en que cada grupo es ocupado, se lo denomina configuración. Puesto que en general existen más de un orbital de spin con los mismos n, l , se escribe la configuración en forma condensada del siguiente modo:

$$(n_1 l_1)^{w_1} (n_2 l_2)^{w_2} \dots (n_q l_q)^{w_q} \quad \text{donde} \quad \sum_{i=1}^N w_i = N$$

Cuando las condiciones de acoplamiento en un átomo son del tipo LS, dando los valores de L , $(\sum l_i)$ y S , $(\sum s_i)$

de una configuración, se especifica un término de la misma. Una notación universalmente adoptada es la siguiente:

$$\begin{array}{rcl}
 2S+1 & L & L = 0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \dots \\
 & & \text{Símbolo} \quad S \ P \ D \ F \ G \ H \dots
 \end{array}$$

Si se especifica también el valor de J se tiene entonces un nivel, ej:

$${}^3D_3, {}^3D_2, {}^3D_1, {}^2P_{1/2} \text{ etc.}$$

El valor $2S+1$ es llamado la multiplicidad del término aun cuando el número de niveles en el término es igual a $2L+1$ en lugar de $2S+1$ cuando $L < S$.

Para una configuración de grupo completo, cada función de onda monoeléctronica de un dado grupo aparece en el determinante (II.14). Pero si la configuración contiene algún grupo incompleto, un solo determinante como el (II.14) solo puede contener una selección de las $2(2l+1)$ diferentes funciones de onda del grupo n, l ; en consecuencia la función de onda apropiada es tomar una combinación lineal de determinantes, ref. (10)

$$\Phi = \sum_a C_a \Psi_a \quad \text{(II.15)}$$

Como ejemplo, ref. (10) para el término 1S de la configuración $3p^2$, (capa abierta), existen tres

determinantes conteniendo dos funciones de onda 3p para los cuales $M_l = 0$ y $M_s = 0$, utilizando la notación (n, l, m_l, m_s) para describir cada función de onda, estas resultan

$$(3p, +1, +)(3p, -1, -) ; (3p, 0, +)(3p, 0, -) ; (3p, -1, +)(3p, +1, -)$$

sean ψ_1 , ψ_2 y ψ_3 determinantes de 2X2 para cada par de funciones de onda respectivamente, en consecuencia:

$$\Psi = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3$$

tiene los mismos valores M_l y M_s y representa en forma completa al término 1S

II.4 ELEMENTOS DE MATRIZ: CASO GENERAL

Para el cálculo de diversas cantidades físicas es necesaria, cuando las funciones de onda son expresadas en forma de determinantes, una expresión para los elementos de matriz de los operadores.

Sea un sistema de N electrones y

$$A = \left(\frac{1}{N}\right)^{1/2} \begin{vmatrix} a_1(1) & a_2(1) & \dots & a_N(1) \\ a_1(2) & a_2(2) & \dots & a_N(2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_1(N) & a_2(N) & \dots & a_N(N) \end{vmatrix} \quad (\text{II.16a})$$

$$B = \left(\frac{1}{N}\right)^{1/2} \begin{vmatrix} b_1(1) & b_2(1) & \dots & b_N(1) \\ b_1(2) & b_2(2) & \dots & b_N(2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_1(N) & b_2(N) & \dots & b_N(N) \end{vmatrix} \quad (\text{II.16b})$$

$$F = \sum_{i=1}^N f_i \quad (\text{II.17})$$

$$G = \sum_{i < j}^N g_{ij} \quad (\text{II.18})$$

donde $a_k(i)$ y $b_k(i)$ son orbitales de spin, F y G son operadores de uno y dos electrones respectivamente.

Para los elementos de matriz diagonales de F se tiene:

$$\langle A | F | A \rangle = \sum_{k=1}^N \langle a_k | f | a_k \rangle \quad (\text{II.19})$$

(el argumento de a y el subíndice de f han sido omitidos puestos que son arbitrarios)

Los elementos de matriz $\langle B | F | B \rangle$ tienen la misma forma con respecto a los orbitales b . Para los elementos de matriz no diagonales se tiene:

$$\langle A | F | B \rangle = 0 \quad (\text{II.20})$$

si A y B difieren en mas de un par de orbitales, y

$$\langle A | F | B \rangle = \pm \langle a_k | f | b_l \rangle \quad (\text{II.21})$$

si $a_k \neq b_k$ pero el resto de los orbitales en B son los mismos que en A.

Los elementos de matriz diagonales de G son:

$$\begin{aligned} \langle A | G | A \rangle &= \sum_{k < t} \langle a_k(1)a_t(2) | g_{12} | a_k(1)a_t(2) \rangle \\ &\quad - \langle a_k(1)a_t(2) | g_{12} | a_t(1)a_k(2) \rangle \end{aligned} \quad (II.22)$$

Para los elementos no diagonales de G se tienen los siguientes casos:

1) Si A y B difieren en mas de dos pares de orbitales

$$\langle A | G | B \rangle = 0 \quad (II.23a)$$

2) Si A y B difieren en dos pares de orbitales, p.ej. a_k y a_l en A no son los mismos que b_m y b_n en B pero el resto de los orbitales de A y B son iguales, entonces:

$$\begin{aligned} \langle A | G | B \rangle &= \pm [\langle a_k(1)a_l(2) | g_{12} | b_m(1)b_n(2) \rangle \\ &\quad - \langle a_k(1)a_l(2) | g_{12} | b_n(1)b_m(2) \rangle] \end{aligned} \quad (II.23b)$$

3) Si A y B difieren en un solo par de orbitales, p.ej.

$$a_k \neq b_l$$

$$\begin{aligned} \langle A | G | B \rangle &= \pm \sum_{t \neq k} [\langle a_k(1)a_t(2) | g_{12} | b_l(1)a_t(2) \rangle \\ &\quad - \langle a_k(1)a_t(2) | g_{12} | a_t(1)b_l(2) \rangle] \end{aligned} \quad (II.23c)$$

Como el orbital de spin general $a(\lambda_i)$ consiste en un producto de una función espacial $\phi_{a_i}(r_i)$ y una de spin $\xi_i^a(m_s)$

$$a(\lambda_i) = \phi_{a_i}(r_i) \xi_i^a(m_s) \quad \text{ó} \quad a(i) = \phi_a(i) \xi_i^a(m_s)$$

entonces:

$$\begin{aligned} \langle a | f | b \rangle &= \langle \phi_a | f | \phi_b \rangle \langle \xi^a(m_s) | \xi^b(m_s) \rangle = \\ &= \langle \phi_a | f | \phi_b \rangle \delta(m_s^a, m_s^b) \end{aligned} \quad (II.24)$$

Si a, b, c y d son orbitales de spin, el elemento de matriz general de un operador de dos electrones es:

$$\begin{aligned} \langle a(1)b(2) | g_{12} | c(1)d(2) \rangle &= \langle \phi_a(1)\phi_b(2) | g_{12} | \phi_c(1)\phi_d(2) \rangle \\ &\delta(m_s^a, m_s^c) \delta(m_s^b, m_s^d) \end{aligned} \quad (II.25)$$

II.5 ELEMENTOS DE MATRIZ: CASOS ESPECIALES

Cuando los a(i) se expresan como (II.12)

$$a(i) = (1/r_i) P_{nl}^a(r_i) Y_{lm}^a(\Omega_i) \xi_i^a(m_s)$$

y el operador sobre dos electrones

$$g_{12} = e^2/r_{12} \quad (II.26)$$

expandiendo a g_{12} en armónicos esféricos se tiene que:

$$e^2/r_{12} = 4\pi e^2 \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=-k}^k \frac{1}{2k+1} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} Y_{km}^*(\Omega_1) Y_{km}(\Omega_2) \quad (II.27)$$

por lo que la parte radial de

$$\langle a(1)b(2) | g_{12} | c(1)d(2) \rangle$$

es una suma de cantidades del tipo

$$R^k(abcd) = e^2 \int \int \frac{r^k}{r^{k+1}} p^a(r_1) p^b(r_2) p^c(r_1) p^d(r_2) dr_1 dr_2$$

donde en general, las integrales radiales se calculan por los métodos de Hartree-Fock. Las integrales angulares son de la forma:

$$\frac{4\pi}{2k+1} \langle Y_{lm_1}^a(\Omega_1) | Y_{lm_1}^*(\Omega_1) | Y_{lm_1}^c(\Omega_1) \rangle \langle Y_{lm_1}^b(\Omega_2) | Y_{km}(\Omega_2) | Y_{lm_1}^d(\Omega_2) \rangle$$

las cuales se evalúan por medio de la expresión, ref(9),:

$$\int Y_{l-m}^*(\theta\phi) Y_{LM}(\theta\phi) Y_{lm}(\theta\phi) d\Omega = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(2L+1)(2l+1)}{4\pi}} \times \\ \times \begin{pmatrix} l & L & l \\ -m & M & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Es costumbre definir la cantidad $c^k(lm, \bar{l}\bar{m})$ como:

$$c^k(lm, \bar{l}\bar{m}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} \langle Y_{lm} | Y_{k, m-\bar{m}} | Y_{\bar{l}\bar{m}} \rangle$$

cuyos valores están tabulados, por lo tanto

$$\langle a(1)b(2) | e^2/r_{12} | c(1)d(2) \rangle = \delta(m_s^a, m_s^c) \delta(m_s^b, m_s^d) \delta(m_m^a + m_m^b, m_m^c + m_m^d) \times \\ \times \sum_{k=0} c^k R^k(abcd) \quad (II.28)$$

El primer caso especial ocurre cuando $a=c$ y $b=d$, la integral resultante se denomina coulombiana

$$J(a,b) = \sum_0^{\infty} a^k F^k = J(b,a)$$

donde

$$F^k = R^k(abab) = e^2 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{r^{k <}}{r^{k+1}} [P^a(r_1)]^2 [P^b(r_2)]^2 dr_1 dr_2 \quad (II.29)$$

y las a^k son:

$$a^k(l_{m_1}^a, l_{m_1}^b) = c^k(l_{m_1}^a, l_{m_1}^a) c^k(l_{m_1}^b, l_{m_1}^b)$$

Otro caso especial aparece cuando $a=d$ y $b=c$. esto produce otra integral, $K(a,b)$, conocida como integral de intercambio

$$K(a,b) = \delta(m_s^a, m_s^b) \sum_0^{\infty} b^k G^k = K(b,a)$$

donde

$$G^k = R^k(abba) = e^2 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{r^{k <}}{r^{k+1}} P^a(r_1) P^b(r_2) P^b(r_1) P^a(r_2) dr_1 dr_2 \quad (II.30)$$

y los $b^k = (c^k)^2$. Las integrales G^k y F^k son positivas, ref.(11), y, para electrones equivalentes, es decir con los mismos n y l

$$F^k = G^k$$

Si consideramos el Hamiltoniano (II.5), $H_I = H_0 + H_1$ y una función de onda dada por un sólo determinante de Slater, la energía total

$$E = \langle \Psi | H_I | \Psi \rangle$$

se expresa en función de los orbitales espaciales como:

$$E = \sum_i I_i + \sum_{i < j} [J(i, j) - \delta(m_s^i, m_s^j) K(i, j)] \quad (II.31)$$

donde

$$I_i = \langle \Psi_i | H_0 | \Psi_i \rangle = \frac{-1}{2} \int_0^\infty \Psi_i \left[\frac{d^2}{dr_i^2} + \frac{2Z}{r_i} - \frac{l_i(l_i+1)}{r_i^2} \right] \Psi_i dr_i$$

mientras que para el caso de capa completa resulta

$$E = 2 \sum_k I_k + \sum_{k,l}^N [2J(k,l) - K(k,l)] \quad (\text{II.32})$$

El significado físico de J y K es el siguiente, ref.(12),: J(a,b) mide las interacciones coulombianas entre las distribuciones de carga de los electrones mas la interacción del electrón mas externo y una unidad de carga en el núcleo, mientras que K(a,b) mide la frecuencia conque los electrones intercambian sus números cuánticos.

Por ejemplo, para la configuración normal de un sistema de diez electrones (Ne, Na⁺, Si⁴⁺) denominada (1s)²(2s)²(2p)⁶ la energía de la misma es:

$$E = 2I(1s) + 2I(2s) + 6I(2p) + F_0(1s, 1s) + F_0(2s, 2s) + 15F_0(2p, 2p) + \\ - \frac{6}{5} F_2(2p, 2p) + 4F_0(1s, 2s) + 12F_0(1s, 2p) + 12F_0(2s, 2p) - 2G_0(1s, 2s) \\ - 2G_1(1s, 2p) - 2G_1(2s, 2p)$$

Para el caso de dos electrones fuera de capa completa, uno de los cuales se encuentra en una órbita s y el otro en alguna órbita arbitraria nl, los términos que se originan

están dados por la expresión genérica, ref. (13):

$$n s n l \left\{ \begin{array}{l} {}^1L = F_0 + G_1 \\ {}^3L = F_0 - G_1 \end{array} \right. \quad (\text{II.33})$$

donde se ha quitado la parte de energía común a los dos términos para notar que, dado que F y G son cantidades positivas, la teoría predice que el término singulete se encuentra por encima del triplete en la escala de energías, hecho que condice con la regla de Hund, esta establece que el término de mas baja energía de una configuración l^W o $l^W s$ es aquel de máximo S y con mayor valor de L.

Para el caso de dos electrones con $l_1 = l_2$ y $l_2 > l_1$, las energías relativas de los términos son:

$$n p n' p \left\{ \begin{array}{l} {}^1S, {}^3S = F_0 + 10F_2 + (G_0 + 10G_2) \\ {}^1P, {}^3P = F_0 - 5F_2 + (G_0 - 5G_2) \\ {}^1D, {}^3D = F_0 + F_2 + (G_0 + G_2) \end{array} \right. \quad (\text{II.34a})$$

$$n p n d \left\{ \begin{array}{l} {}^1P, {}^3P = F_0 + 7F_2 + (G_1 + 3G_3) \\ {}^1D, {}^3D = F_0 - 7F_2 + (3G_1 - 21G_3) \\ {}^1F, {}^3F = F_0 + 2F_2 + (6G_1 + 3G_3) \end{array} \right. \quad (\text{II.34b})$$

$$n p n f \left\{ \begin{array}{l} {}^1D, {}^3D = F_0 + 12F_2 + (3G_2 + 36G_4) \\ {}^1F, {}^3F = F_0 - 15F_2 + (15G_2 - 9G_4) \\ {}^1G, {}^3G = F_0 + 5F_2 + (45G_2 + G_4) \end{array} \right. \quad (\text{II.34c})$$

Para el caso de k electrones equivalentes p con $1 < k < 6$, la expresión de la energía puede ser compactada de la siguiente forma, ref(13):

$${}^{2S+1}L = \frac{1}{2} k(k-1)F_0 + \frac{1}{2}(-5k^2 + 20k - 3L(L+1) - 12S(S+1))F_2 \quad (\text{II.35})$$

Cuando un electrón s es agregado a una configuración p , p o p , un múltiple desdoblamiento es producido, y la magnitud de los mismos es medida por las integrales $G(s,p)$. La tabla (II.1) muestra las expresiones teóricas para la configuración $p^k s$ donde $F_0 = F_0(p,p)$, $F_0' = F_0(s,p)$, $F_2 = F_2(p,p)$ y $G_1 = G_1(s,p)$

<u>Configuración</u>	<u>Término</u>	<u>Energía</u>	<u>Desdoblamiento</u>
$p^2(1S)s$	2S	$(F_0 + 2F_0') + 10F_2 - G_1$	
$p^2(1D)s$	2D	$(F_0 + 2F_0') + F_2 - G_1$	
$p^2(3P)s$	2P	$(F_0 + 2F_0') - 5F_2 + G_1$	} $3G_1$
	4P	$(F_0 + 2F_0') - 5F_2 - 2G_1$	
$p^3(2P)s$	1P	$(3F_0 + 3F_0')$	} $2G_1$
	3P	$(3F_0 + 3F_0') - 2G_1$	
$p^3(2D)s$	1D	$(3F_0 + 3F_0') - 6F_2$	} $2G_1$
	3D	$(3F_0 + 3F_0') - 6F_2 - 2G_1$	
$p^3(4S)s$	3S	$(3F_0 + 3F_0') - 15F_2 + G_1$	} $4G_1$
	5S	$(3F_0 + 3F_0') - 15F_2 - 3G_1$	

$p^4(1S)s$	2S	$(6F_0 + 4F_0^-) - 2G_1$	
$p^4(1D)s$	2D	$(6F_0 + 4F_0^-) - 9F_2 - 2G_1$	
$p^4(3P)s$	2P	$(6F_0 + 4F_0^-) - 15F_2$	} $3G_1$
	4P	$(6F_0 + 4F_0^-) - 15F_2 - 3G_1$	

Tabla II.1

II.6 INTERACCION SPIN ORBITA

El Hamiltoniano para la interacción spin órbita tiene la forma:

$$H_{so} = \sum_{i=1}^N (r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i$$

y el cálculo se facilita en el esquema de acoplamiento $|\alpha LSJM_J\rangle$, (Aquí α representa la dependencia de la función de onda sobre las coordenadas radiales), ya que los elementos de matriz serán diagonales en J y M . Las funciones $|\alpha LSM_L M_S\rangle$ no serán, en general, autofunciones de $\vec{l} \cdot \vec{s}$.

De especial importancia son los términos diagonales que representan la interacción spin órbita dentro de cada término.

$$\begin{aligned} < 1^n \alpha LSJM_J | H_{so} | 1^n \alpha LSJM_J > = \\ &= \frac{1}{2} A(\alpha LS) [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] = E(J) \end{aligned} \quad (II.36)$$

donde $A(\alpha, L, S)$ es un factor de proporcionalidad que depende de α , L y S pero no de J . La ecuación (II.36) también contiene la regla del intervalo de Landé pues:

$$\Delta E(J) + E(J) - E(J-1) = A(\alpha LS).J \quad (II.37)$$

o sea que la separación de los niveles de un multiplete es proporcional a J .

El resultado general para n electrones equivalentes es:

$$\begin{aligned} & \langle 1^n_{\alpha LSJM_J} | \sum \xi_i(r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i | 1^n_{\alpha L'S'J'M'_J} \rangle = \\ & = (-1)^{L+S'+J} \langle \xi(r) \rangle_{n1} \sqrt{(2L+1)(2L'+1)} \delta_{JJ'} \delta_{nJnJ'} \times \\ & \times \begin{pmatrix} L & S & J \\ S' & L' & 1 \end{pmatrix} \langle 1^n_{\alpha LS} || \vec{V}^{\pm}(1,1) || 1^n_{\alpha L'S'} \rangle \end{aligned} \quad (II.38)$$

Los cálculos de los elementos de matriz reducida $\vec{V}^{\pm}(1,1)$ se encuentran tabulados en las ref.(9) y ref.(11).

La fig. II.1 muestra el desarrollo de la estructura de niveles de la configuración p^3 bajo la condición de acoplamiento LS puro.

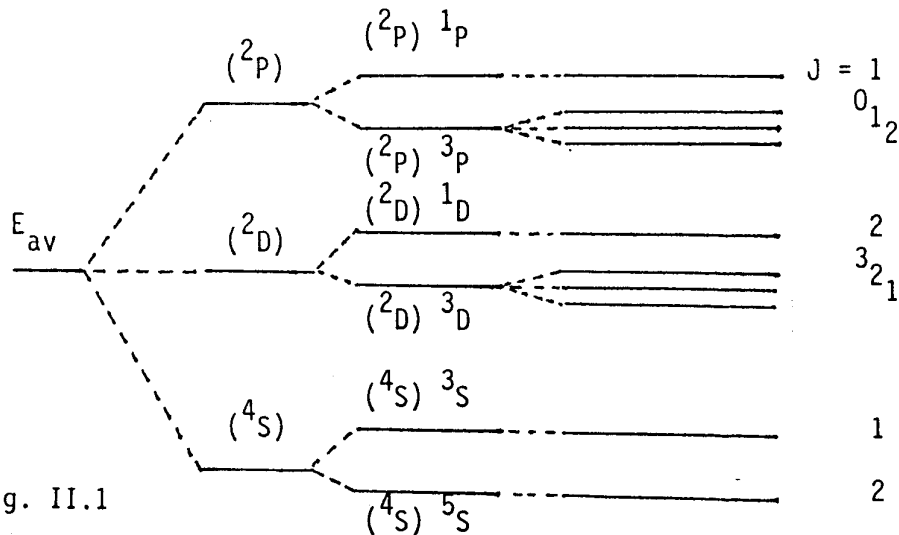


Fig. II.1

donde E_{av} es el "centro de gravedad" o baricentro de la configuración, y está determinado por la siguiente expresión:

$$E_{av} = \frac{\sum_{\text{niveles}} (2j+1)E_j}{\sum_{\text{niveles}} (2j+1)} \quad (\text{II.39})$$

II.7 ACOPLAMIENTOS INTERMEDIOS

Si la interacción electrostática entre electrones, (U), y la interacción spin órbita, (W), son del mismo orden de magnitud, la aproximación de acoplamiento LS o JJ son inaplicables. En tales circunstancias se habla de un acoplamiento intermedio.

Para determinar la energía en este caso es necesario resolver la ecuación secular compuesta por los elementos de matriz de la perturbación U+W, ref.(14).

En este caso es conveniente elegir funciones Ψ_{SLJM} pues la matriz de interacción electrostática U es diagonal con respecto a SLJM, lo cual simplifica enormemente el cálculo. Puesto que la matriz W es también diagonal con respecto a J y M pero no con respecto a SL, la ecuación secular correspondiente a un determinado valor de J y M tiene la

forma:

$$\begin{vmatrix}
 \langle L_1 S_1 J M | U+W | L_1 S_1 J M \rangle - \epsilon & \langle L_1 S_1 J M | W | L_2 S_2 J M \rangle \dots\dots\dots \\
 \langle L_2 S_2 J M | W | L_1 S_1 J M \rangle & \langle L_2 S_2 J M | U+W | L_2 S_2 J M \rangle - \epsilon \dots \\
 \dots\dots\dots & \dots\dots\dots
 \end{vmatrix} = 0 \quad (II.40)$$

las raíces de la ecuación secular (II.40), $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_k$ son las correcciones requeridas para la energía.

II.8 CALCULO DE LOS VALORES (en cm^{-1}) DE LOS NIVELES DE ENERGIA PARA LA CONFIGURACION FUNDAMENTAL $4s^2 4p^4$ DEL Kr III.

Para la configuración p^4 tenemos que las energías de los términos son:

$$\begin{aligned}
 ({}^1S) &= 6 F_0 \\
 ({}^1D) &= 6 F_0 - 9 F_2 \\
 ({}^3P) &= 6 F_0 - 15 F_2
 \end{aligned}$$

La matriz spin órbita para esta configuración surge de la ecuación (II.38) que para este caso es:

$$\langle p^4 SLJM | \epsilon_{nl} \sum_i \vec{T}_i \cdot \vec{s}_i | p^4 S' L' J M \rangle = (-1)^{S'+L+J} \epsilon_{np} \sqrt{6} \langle p^4 SL \parallel \vec{V}^{(11)} \parallel p^4 S' L' \rangle \times$$

$$\begin{pmatrix} S & L & J \\ L' & S' & 1 \end{pmatrix}$$

y tiene la siguiente forma

	1S_0	3P_0	3P_1	3P_2	1D_2	
1S_0	$\sqrt{2} \epsilon_{4p}$					
3P_0	$\sqrt{2} \epsilon_{4p}$	ϵ_{4p}				
3P_1	$\frac{1}{2} \epsilon_{4p}$					
3P_2	$-\frac{1}{2} \epsilon_{4p} \quad -\frac{1}{\sqrt{2}} \epsilon_{4p}$					
1D_2	$-\frac{1}{\sqrt{2}} \epsilon_{4p}$					

(II.41)

por lo que la ecuación secular (II.40) separada en submatrices queda de la forma

Para $J = 0$

$({}^1S_0)$	$({}^3P_0)$	
$({}^1S_0)$	$6F_0 - \epsilon$	$\sqrt{2} \epsilon_{4p}$
$({}^3P_0)$	$\sqrt{2} \epsilon_{4p}$	$6F_0 - 15F_2 + \epsilon_{4p} - \epsilon$

= 0

Para J = 1

$$6F_0 - 15F_2 + \frac{1}{2} \xi_{4p} - \epsilon = 0$$

$(^3P_2)$

$(^1D_2)$

Para J = 2

$$\begin{matrix} (^3P_2) \\ (^1D_2) \end{matrix} \begin{vmatrix} 6F_0 - 15F_2 - \frac{1}{2} \xi_{4p} - \epsilon & -\frac{1}{\sqrt{2}} \xi_{4p} \\ -\frac{1}{2} \xi_{4p} & 6F_0 - 9F_2 - \epsilon \end{vmatrix} = 0$$

Los valores para $F_0(4p, 4p)$, $F_2(4p, 4p)$ y ξ_{4p} pueden ser obtenidos de tablas de integrales radiales, ref.(15), o bien extrapolando de la secuencia isoelectrónica, para este caso los valores son:

$$F_0(4p, 4p) = 5.233,1 \text{ cm}^{-1}$$

$$F_2(4p, 4p) = 1920,7 \text{ cm}^{-1}$$

$$\xi_{4p} = 3.984 \text{ cm}^{-1}$$

por lo que la energía de los niveles de la configuración p^4 se obtiene determinando los valores de de estas submatrices, estos son:

Teórico (cm^{-1})	Experimental (cm^{-1})
32.617,21	33.079
5.353,08	5.313
4.580,30	4.548
14.675,75	14.644
32,24	0.00

Se puede observar también que en el caso límite cuando la interacción spin órbita tiende a cero, los valores de tienden a los de (II.40), lo que establece una relación unívoca entre los niveles y los niveles de la aproximación de acoplamiento LS.

II.9 PUREZA DE LOS AUTOVECTORES

En los casos en que la interacción coulombiana o spin órbita no son estrictamente iguales a cero no se tiene un acoplamiento LS o JJ puro, lo que implica que los autoestados de un átomo serán en general una mezcla, o mejor dicho, una combinación lineal de funciones correspondientes a acoplamientos puros, ref.(16).

Del ejemplo anterior se tiene que las funciones de onda correspondientes a esos niveles están relacionadas a las funciones Ψ_{LSJM} , (pertenecientes al esquema de acoplamiento

LS puro), de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \Psi ({}^1S_0) &= c_{11} \Psi_{SLJM}({}^1S_0) + c_{12} \Psi_{SLJM}({}^3P_0) \\
 \Psi ({}^3P_0) &= c_{21} \Psi_{SLJM}({}^1S_0) + c_{22} \Psi_{SLJM}({}^3P_0) \\
 \Psi ({}^3P_1) &= \Psi_{SLJM}({}^3P_1) \\
 \Psi ({}^3P_2) &= b_{11} \Psi_{SLJM}({}^3P_2) + b_{12} \Psi_{SLJM}({}^1D_2) \\
 \Psi ({}^1D_2) &= b_{21} \Psi_{SLJM}({}^3P_2) + b_{22} \Psi_{SLJM}({}^1D_2)
 \end{aligned}
 \tag{II.42}$$

en donde, en el caso límite, cuando la interacción spin órbita tiende a cero

$$c_{11}; c_{12} \rightarrow 1 \quad c_{12}; c_{21} \rightarrow 0 \quad b_{11}; b_{22} \rightarrow 1 \quad b_{12}; b_{21} \rightarrow 0$$

Las expresiones (II.42) muestran que en presencia de interacción spin órbita es imposible caracterizar los estados de un átomo mediante valores específicos de L y S. El momentum angular y el spin no se conservan separadamente, es por esto que el estado 1S_0 es una superposición de un estado singulete con L=0 y un estado triplete con L=1.

Si en alguna representación, un componente de un autovector es mucho mayor en magnitud que todos los restantes, entonces el autoestado puede ser designado con el nombre de esta función base dominante.

Una indicación del grado de aproximación realizado al designar un estado mediante la designación correspondiente a

acoplamientos puros es provista por la "pureza" del estado cuántico, la cual se define como el cuadrado de la componente del autovector correspondiente, usualmente expresada en tantos por ciento

Las figuras (II.2) y (II.3) ilustran ejemplos de acoplamientos intermedios en las cuales se aprecia la estructura de niveles para las configuraciones sp y sp^5 , respectivamente, en transición del LS al JJ. $\psi = \chi / (1 + \chi)$, (parámetro de acoplamiento), $\chi = 3\xi / 4G_1$, la energía ϵ esta expresada en unidades de $G_1 + 3/4\xi$ con $1/2(^1P_1 + ^3P_1)$ como nivel cero, ref.(13).

Fig. II.2

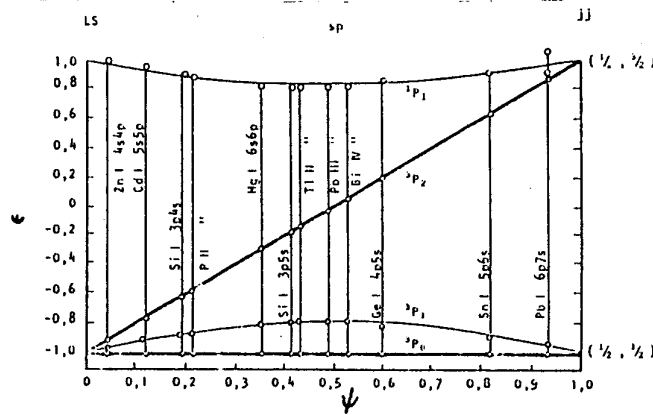
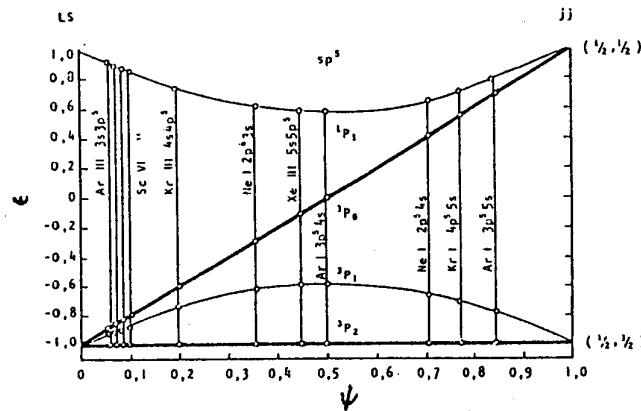


Fig. II.3



II.10 ECUACIONES DE HARTREE FOCK

Antes de introducir las ecuaciones de Hartree Fock para la determinación de la parte radial de las funciones de onda, es conveniente introducir las funciones Y_k y Z_k definidas de la siguiente manera, ref. (10), :

$$Y_k(nl, n'l') = r \int_0^\infty U_k(r,s) P_{nl}(s) P_{n'l'}(s) ds \quad (\text{II.43})$$

donde

$$U_k(r,s) = \begin{cases} \frac{r^k}{s^{k+1}} & \text{si } r \leq s \\ \frac{s^k}{r^{k+1}} & \text{si } r > s \end{cases}$$

En términos de esta integral, las funciones F^k y G^k se describen

$$F^k(nl, n'l') = \int_0^\infty P_{nl}^2(r) \frac{1}{r} Y_k(n'l; n'l; r) dr \quad (\text{II.44})$$

$$G^k(nl, n'l') = \int_0^\infty P_{nl}(r) P_{n'l'}(r) \frac{1}{r} Y_k(nl, n'l; r) dr \quad (\text{II.45})$$

y Z_k se define como:

$$Z_k(nl, n'l; r) = \int_0^r \frac{s^k}{r} P_{nl}(s) P_{n'l'}(s) ds \quad (\text{II.46})$$

por lo que

$$Y_k(nl, n'l; r) = Z_k(nl, n'l; r) + \int_r^\infty \left(\frac{r}{s}\right)^{k+1} P_{nl}(s) P_{n'l'}(s) ds \quad (\text{II.47})$$

Las funciones Z_0 y Y_0 pueden ser interpretadas de la siguiente manera: si se escribe $U(r)$ como la carga por unidad de radio de una distribución de carga esféricamente simétrica, (densidad de carga $\rho = U(r)/4\pi r^2$), entonces $Z_0(n_l, n_l, r)/r^2$ es el campo a un radio r de una distribución con densidad de carga radial $U(r) = P_{n_l}(r)P_{n_l}(r)$ y $Y_0(n_l, n_l, r)/r$ es el potencial a un radio r de este campo.

Las funciones Y_k y Z_k están similarmente relacionadas al potencial y al campo radial de una distribución cuya densidad de carga tiene una variación con la dirección dada por los polinomios de Legendre $P_k(\cos\theta)$.

II.10a APLICACION DEL PRINCIPIO VARIACIONAL

Para obtener las "mejores" ecuaciones radiales $P_{n_l}(r)$ en el sentido del principio variacional, para un sistema atómico, se debe obtener una expresión para $\Delta E'$, la variación de E' debido a las variaciones $\Delta P_{n_l}(r)$ en las funciones de onda radiales. Las $P_{n_l}(r)$ deben ser tales que minimizen la energía del centro de gravedad de la configuración correspondiente, esto es, las funciones $P_{n_l}(r)$ deben ser tales que para cualquier conjunto $\Delta P_{n_l}(r)$ de pequeñas variaciones las cuales no violan la condición de ortonormalización, la variación resultante $\Delta E'$ deberá ser

cero.

La contribución a E' debido a $P_{n'l}(r)$ consiste de varios múltiplos de integrales $I(nl)$, $F_k(nl, nl)$, $F_k(nl, n'l)$ y $G_k(nl, nl)$. Considerando la variación a primer orden de estas integrales y teniendo en cuenta que las funciones $P_{n'l}(r)$ son normalizadas y ortogonales para los mismos l , (esta condición es incorporada introduciendo los multiplicadores de Lagrange $(\lambda_{n'l n'l'})$, y requiriendo que la cantidad:

$$E' = E + \sum_{n'l} \lambda_{n'l n'l'} \int_0^{\infty} P_{n'l}(r) P_{n'l'}(r) dr$$

sea estacionaria para todas las variaciones ΔP , se llega a:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} Y(nl, r) - \epsilon_{nl, nl} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] P_{n'l}(r) = X(nl, r) + \sum_{n'l' \neq n} \epsilon_{n'l, n'l'} P_{n'l'}(r)$$

donde

$$Y(r) = N - \sum_{n,l} q(nl) Y_0(nl, nl, r)$$

$$Y(nl, r) = Y(r) + \sum_k \alpha_{lk} Y_k(nl, nl, r) \quad (II.48)$$

$$X(nl, r) = -\frac{2}{r} \sum_{n'l' \neq k} \beta_{ll'k} Y_k(nl, n'l', r) P_{n'l'}(r)$$

y la suma Σ' es sobre todos los nl excluyendo los $n'l' = nl$.

Los valores de α_{lk} y $\beta_{ll'k}$ son constantes y se hallan tabuladas para los diversos grupos, ref(10).

Las ecuaciones (II.48) son conocidas como las ecuaciones

de Hartree Fock las cuales constituyen un sistema de ecuaciones integrodiferenciales acopladas. Existen distintos procedimientos para evaluar (II.48), ref.(10), ref(16), ref(17), uno de ellos es trabajar numericamente eligiendo un conjunto $\{P_{nl}\}$ de partida que frecuentemente son funciones hidrogenoides con apantallamiento, denominadas orbitales de Slater, ref(1), y con ellas se calculan las Y_k y se resuelven las ecuaciones diferenciales (II.48), con el nuevo conjunto de funciones $\{P_{nl}\}$ se repite el proceso hasta que se cumpla el criterio de autoconsistencia.

II.11 METODOS SEMIEMPIRICOS

II.11a EL PRINCIPIO DE COMBINACION DE RIDBERG RITZ

El principio de combinación de Ridberg Ritz expresa que el número de onda de una transición se puede expresar como:

$$\sigma = T_2 - T_1 \quad (II.49)$$

donde para átomos hidrogenoides

$$T_n = \frac{R Z^2}{n^2} = - \frac{E_n}{hc} \quad (II.50)$$

siendo R la constante de Rydberg, Z la carga nuclear y n el

número cuántico principal. Al valor T se lo denomina término espectral.

Para átomos con varios electrones, los apartamientos de $T = RZ^2/n^2$ pueden expresarse en dos formas diferentes:

$$a) T_n = \frac{R \zeta^2}{(n - \delta)^2}$$

donde δ es el defecto cuántico y $(n - \delta) = n^*$ es el número cuántico efectivo, o bien

$$b) T_n = \frac{R(\zeta + P)^2}{n^2}$$

donde $\xi = Z - N + 1$ es la carga neta, la cual toma el valor 1 para átomos neutros, 2 para los simplemente ionizados, etc.; $\xi + P$ es la carga efectiva y P el parámetro de penetración, además $\xi + P = Z - S$ donde S es el parámetro de apantallamiento.

II.11b SECUENCIAS ISOELECTRONICAS

Los sistemas atómicos isoelectrónicos, esto es, sistemas con idéntica estructura que difieren solamente con respecto a la carga nuclear Z , (ej. Se I, Br II, Kr III, Rb IV etc.), exhiben un número de relaciones que son de gran interés para el análisis práctico de los espectros como también para

la descripción sistemática de los resultados experimentales y sus extrapolaciones, ref(18).

II.11b.1 METODOS GRAFICOS

El análisis de los gráficos de la secuencia isoelectrónica resulta de gran ayuda en la determinación de la estructura global del elemento, cálculo de la energía de ionización, número de onda de una transición etc. examinando las relaciones lineales en los diagramas y realizando las extrapolaciones o interpolaciones convenientes.

Un método práctico es graficar alguna función del valor del término versus ξ , por ejemplo T , $T/(\xi+C)$ o $T/(\xi+C)^2$ donde C es una constante que se elige adecuadamente en cada caso estudiado.

Un diagrama tipo de reconocimiento se muestra en la fig. II.4- el que ha sido realizado para la secuencia isoelectrónica del Be I, ref(13). Aquí se graficó $T/(\xi+C)$ para distintos valores de ξ y se eligió $C=1$ de manera de lograr que la diferencia entre los dos límites ($2s^2S$ y $2p^2P$) se haga aproximadamente constante. Esto hace que los distintos iones se ubiquen sobre rectas con una pendiente determinada por el número cuántico principal n .

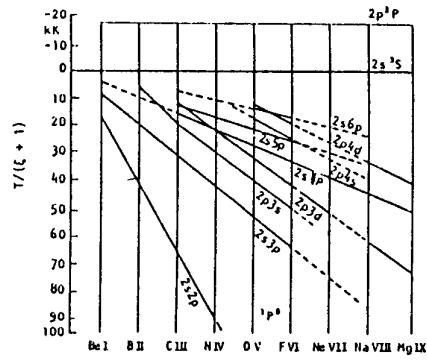


Fig. II.4

Otro tipo de análisis es el que se muestra en la fig. II.5-donde se graficó $(\Delta E - \Delta L)/\xi$ en función de ξ , siendo ΔE la diferencia entre un nivel y otro E_0 de referencia, y ΔL la separación entre los límites L y L_0 para E y E_0 respectivamente.

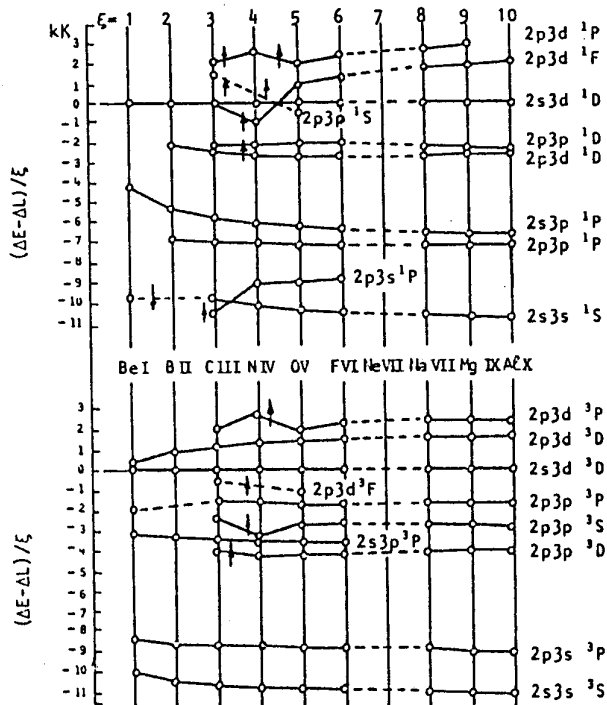


Fig. II.5

En este caso se eligieron como referencia los niveles $2s3d^3D_3$ y $2s3d^1D_2$ en la secuencia isoelectrónica del Be I. Aparecen aquí irregularidades cuando dos términos de igual paridad y distinto n invierten su posición relativa con un cambio de ξ .

Puede convenir también, graficar $\Delta E/\xi$ en función de dependiendo de la naturaleza de los datos con que se cuenta, ΔE es siempre la diferencia entre un nivel E y otro de referencia. Este es el caso de la fig. II.6- para la secuencia del C I, en la que se muestran los términos obtenidos al agregar un electrón 3s ó 3p al termino "parent" $2s^2 2p^2 P$. El nivel de referencia es el $3p^3 S$. Es notable aquí la perturbación del nivel $3s^1 P_1$ particularmente en N II, el que, como consecuencia, altera la estructura fina del elemento por la proximidad accidental del $^1 P_1$.

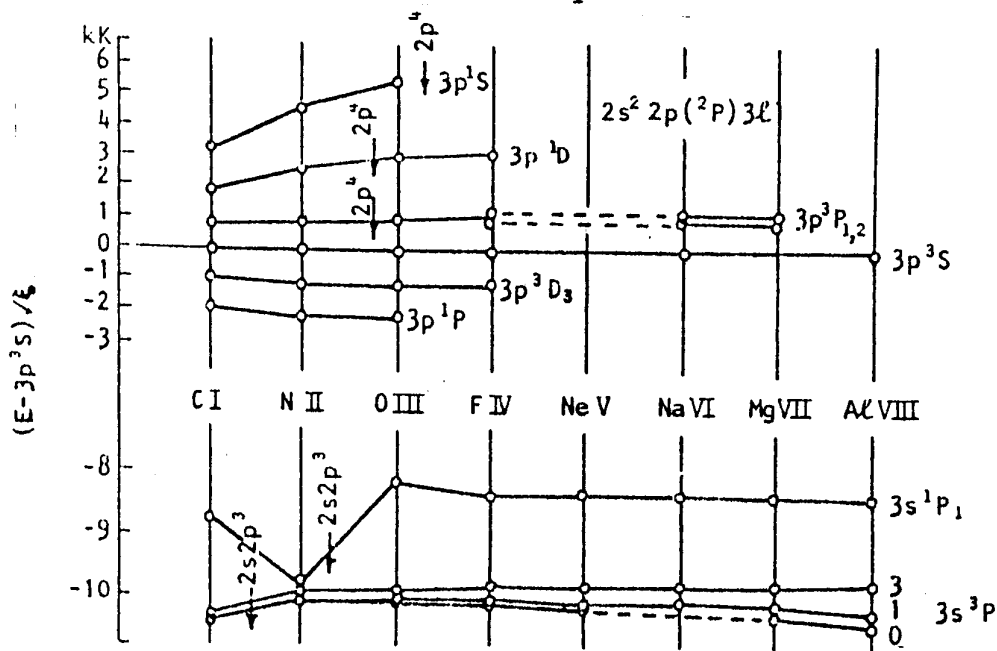


Fig. II.6

En la fig. II.7-se realizó la comparación isoelectrónica de intervalos de términos en la configuración fundamental $2s2p^2$ de la secuencia del C I, $\Delta T/(\xi+C)$ versus con $C=1.3$. Dieron en este caso curvas que permiten extrapolaciones, (marcadas con líneas de puntos), las cuales permitieron obtener el nivel $2s^22p^2(3P_2 - 1D_2)$ para el Al VIII y Si IX, ref. (13).

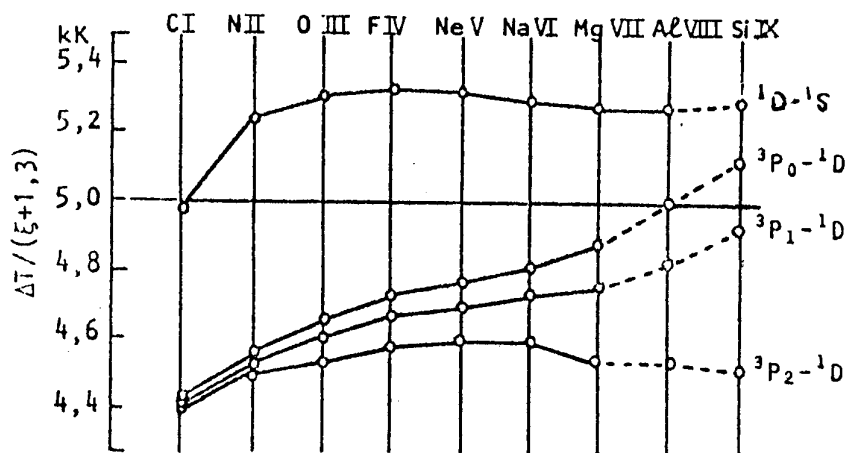


Fig. II.7

II.11.c OTRAS SECUENCIAS REGULARES

Los elementos correspondientes a una misma columna de la tabla periódica pero con el mismo grado de ionización, (secuencia homóloga o isoiónica), presentan una estructura de niveles similares entre si por lo que se puede establecer una

inmediata correlación entre los espectros a fin de determinar los apartamientos de los esquemas de acoplamientos puros y la importancia de la interacción de configuraciones en los correspondientes espectros. Como ejemplo de esta secuencia: Ne III, Ar III, Kr III, Xe III etc.

Otra secuencia útil en el análisis espectral es la denominada isonuclear, ref.(19), esto es, iones con igual Z pero con diferente carga neta, (ej. Kr I, Kr II, Kr III, Kr IV, ...). En este caso la estructura de niveles es diferente para cada ion, pero se verifica que las energías promedio de cada configuración siguen una tendencia similar con respecto al potencial de ionización del ion

CAPITULO III

EQUIPO EXPERIMENTAL

CAPITULO III

III-1

EQUIPO EXPERIMENTAL

El equipo experimental utilizado en el CIOp para el registro de los espectros del Kr consta, basicamente de una fuente espectral con sus correspondientes equipos de excitación y de vacío, un espectrógrafo para el análisis de la radiación y los elementos necesarios para el proceso de medida y de cálculo.

La fig.III-1 muestra esquematicamente los elementos utilizados.

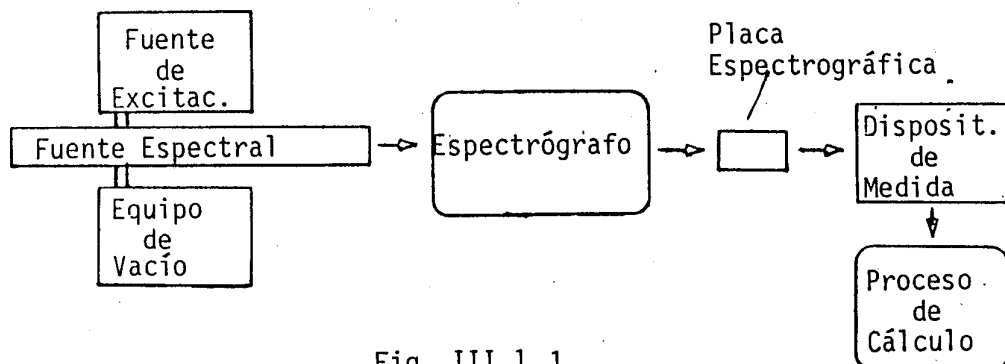


Fig. III.1.1

III-1.a DESCRIPCIÓN DE LA FUENTE ESPECTRAL

El espectro del Kr se obtuvo por medio de una fuente luminosa no convencional cuyo diseño corresponde al de los tubos de los láseres gaseosos pulsados

Esta fuente, como lo muestra la fig.III-1.a.1, consta de un tubo pyrex de 5 mm de diámetro y 250 mm de longitud

contenido dentro de otro tubo coaxial al primero que actúa como camisa refrigerante debido a un flujo continuo de agua entre ellos.

Dentro del primer tubo se encuentran dos electrodos de tungsteno recubiertos con indio dispuestos perpendicularmente al eje del tubo y separados unos 200 mm entre si. Dicho tubo está terminado en sus extremos por ventanas de cuarzo colocadas en ángulo de Brewster.

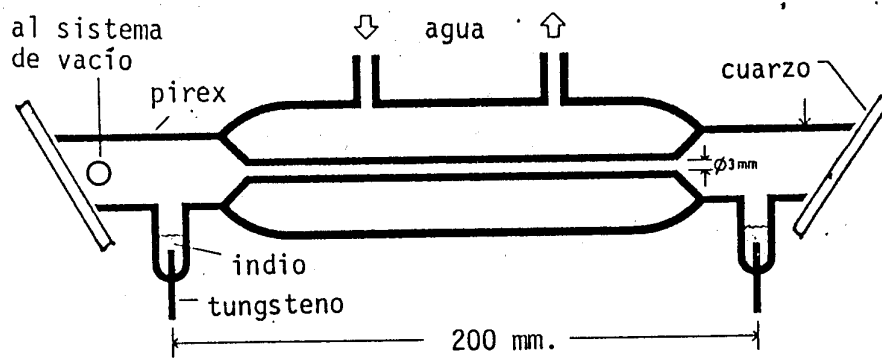


Fig. III.1.a.1

III-1.b FUENTE DE EXCITACION

Para lograr la excitación del gas se utilizó un circuito como muestra la fig. III-1.b.1

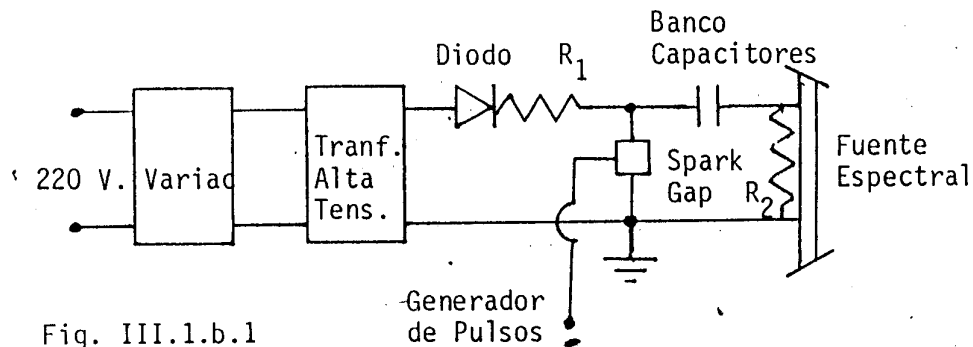


Fig. III.1.b.1

Este circuito permite descargar a través del tubo un banco de capacitores variable entre 1 nf ,hasta 100 nf, cargado a una tensión de hasta 20 Kv.

La descarga y frecuencia de disparo se obtiene mediante pulsos de alta tensión y baja corriente sobre el espinterómetro, (spark-gap). Dichos pulsos son producidos por un generador de pulsos, (trigger), cuya frecuencia se puede graduar entre 10 y 6000 pulsos por minuto.

La selección de la frecuencia de disparo depende de la capacidad del banco, de la resistencia del circuito, de la presión del gas como también de la corriente máxima del transformador. Los valores típicos oscilan entre 100 y 1200 pulsos por minuto.

III-1.c EQUIPO DE VACIO

Este equipo consta esencialmente de una bomba rotativa mecánica, de una bomba difusora de aceite y de una trampa de aire líquido dispuestos como muestra la fig.III-1.c.1.

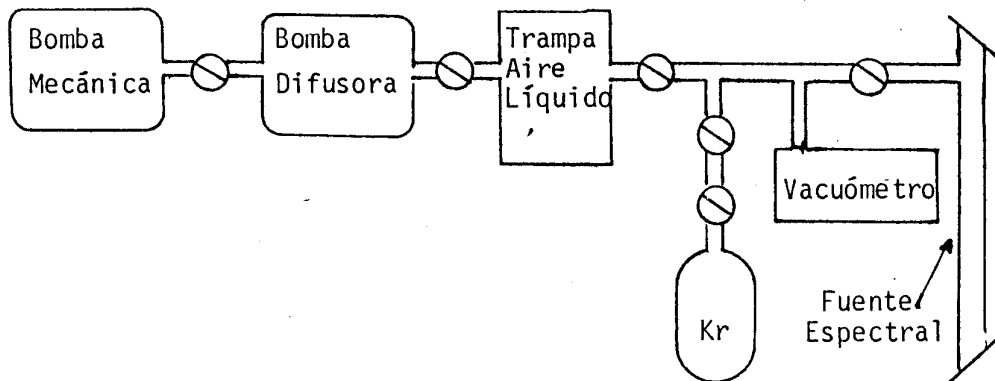


Fig. III.1.c.1

Dicho equipo permite lograr presiones del orden de 10^{-5} torr y un caudal de 150 litros por minuto.

III-1.d ESPECTROGRAFOS

Para la zona de los 2100 \AA hasta los 8000 \AA se utilizó un espectrógrafo montaje Ebert de 3,4 m de distancia focal. Este espectrógrafo posee una red de difracción plana de 600 líneas/mm, superficie rayada de 12 cm por 5 cm, con "blaze" en 5000 \AA , "unblaze" en 25000 \AA y una dispersión recíproca de $4,9 \text{ \AA/mm}$ aprox. a primer orden de difracción.

Para la zona de los 1500 \AA hasta los 2200 \AA se utilizó un espectrógrafo de vacío, montaje Robin, de 3 m de distancia focal y red de difracción cóncava de 1200 líneas/mm con lo que se obtiene de este dispositivo una dispersión recíproca de $2,7 \text{ \AA/mm}$.

Para este caso la fuente espectral está adherida al espectrógrafo mediante una ventana de cuarzo.

III-1.e PLACAS ESPECTROGRAFICAS

Según la zona espectral en estudio, los espectros fueron registrados en distintos tipos de placas, a saber, placas Ilford Q-2 para la zona de los 1500 Å hasta los 2500 Å, Kodak 103 a-O para la zona del ultravioleta cercano, Kodak 103 a-F para el visible y Kodak I-N para el infrarrojo.

III-1.f DISPOSITIVOS DE MEDIDA

Las placas obtenidas en el laboratorio fueron medidas en forma preliminar con un comparador manual Carl Zeiss con una precisión cercana a los dos micrones.

Posteriormente, las placas obtenidas en tercer orden de difracción fueron medidas en un comparador fotoeléctrico automático del Observatorio Astronómico de la U.N.L.P. con una precisión de un micrón.

Para la confrontación de los espectros entre si con el objeto de determinar la asignación iónica, se utilizó un

espectroproyector con el que se obtiene sobre la pantalla la imagen de los espectros con un aumento de 20x, lo cual permite distinguir claramente las variaciones de intensidad de las líneas espectrales según las diferentes energías con que se ha excitado a la fuente.

III-2 PROCEDIMIENTOS EXPERIMENTALES

Para la obtención de espectros a primer orden de difracción, los valores utilizados de los parámetros característicos son los siguientes:

Presión del gas= 10 a 20 mTorr aprox.

Capacidad= 0.25 nf hasta 100 nf

Tensión pico de la descarga= 5 Kv hasta 20 Kv

Tiempo de exposición= 10 min. hasta 3 hs.

Frecuencia de disparo= 3 pulsos/seg hasta 10 pulsos/seg

Ancho rendija de entrada al espectrógrafo= 25 micrones aprox.

Espectro patrón= Hg, He, Th²³² (según la zona espectral)

Para la medida precisa de las líneas, los espectros se obtuvieron en tercer orden de difracción, (dispersión

recíproca: $1,7 \text{ \AA/mm}$), con Th^{232} como espectro patrón.

Los parámetros del sistema son similares a los utilizados para los espectros de primer orden excepto en el tiempo de exposición, que en este caso, se incrementa notablemente.

III-2.a ASIGNACION IONICA

Para determinar el ion al cual pertenece una dada línea espectral, esto es asignarla ionicamente, se analiza la intensidad de la misma en varios espectros de la misma zona espectral pero obtenidos con diferentes energías de descarga, la cual se consigue variando la capacidad y/o la tensión en el circuito de descarga.

De la observación en los distintos espectros de las variaciones de las intensidades de líneas ya conocidas y asignadas previamente, se determina un patrón de "comportamiento" para cada especie iónica, con el cual se cotejan las variaciones de intensidad de las líneas sin asignar. La fig. III-2.a.1 muestra la variación relativa de la intensidad de las líneas según su especie iónica.

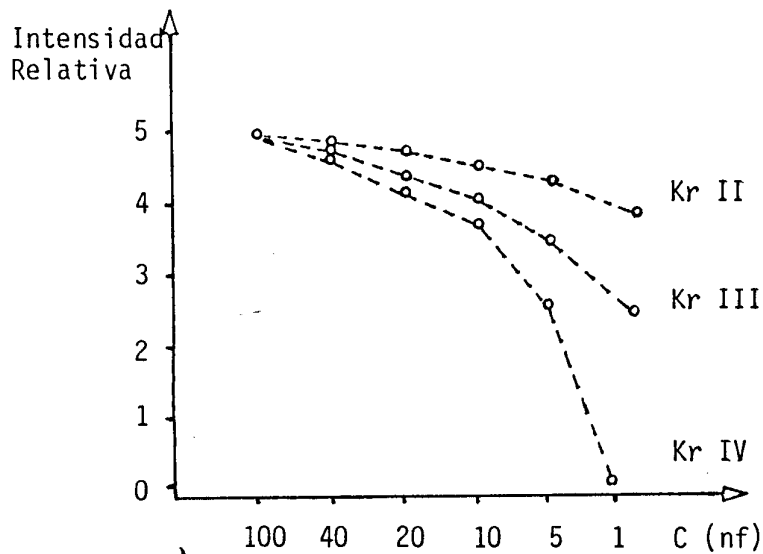


Fig. III.2.a.1

III-3 ESTUDIO DE LA FUENTE ESPECTRAL

Esta fuente se caracteriza fundamentalmente por su luminosidad, energía y por la forma de las líneas espectrales que de ella se obtienen, ref (20).

Debido a la primera característica, se obtiene de esta fuente un espectro muy rico en líneas nuevas puesto que puede excitar a determinadas configuraciones más fuertemente que las otras fuentes convencionales.

Cuando la radiación luminosa es analizada en forma axial a la fuente, es claro que lo que se observa es la distribución espacial del plasma ionizado alrededor del eje longitudinal del tubo, pero dado a que éste presenta un angostamiento en la parte central, (fig III-1.a.1), implica que la densidad de corriente en esta zona sea superior que en

las zonas mas anchas, como consecuencia de esto, se genera un efecto tipo Pinch el cual colapsa el plasma hacia el eje del tubo por lo que la distribución de iones altos se concentra principalmente en el centro del mismo mientras que en los extremos de la fuente se encuentran esencialmente iones bajos. Por tanto, cuando se analiza en el espectrógrafo la radiación luminosa en forma axial, las líneas espectrales correspondientes a iones altos presentan un ensanchamiento en su parte central lo que les confiere forma de "huso", que surge como consecuencia de la distribución espacial de este tipo de iones en la fuente.

Analogamente, debido al mismo efecto, los iones intermedios presentan líneas en forma de "barra uniforme" y los iones mas bajos de "lente divergente". En la fig III-3.1 se pueden apreciar las formas de las líneas espectrales del Xe según el grado de ionización.

Esta cualidad de la fuente conjuntamente con el método tradicional de asignación iónica, permite determinar con mayor precisión la especie iónica de la línea espectral, o también realizar una asignación preliminar con observar solamente la forma de la línea.

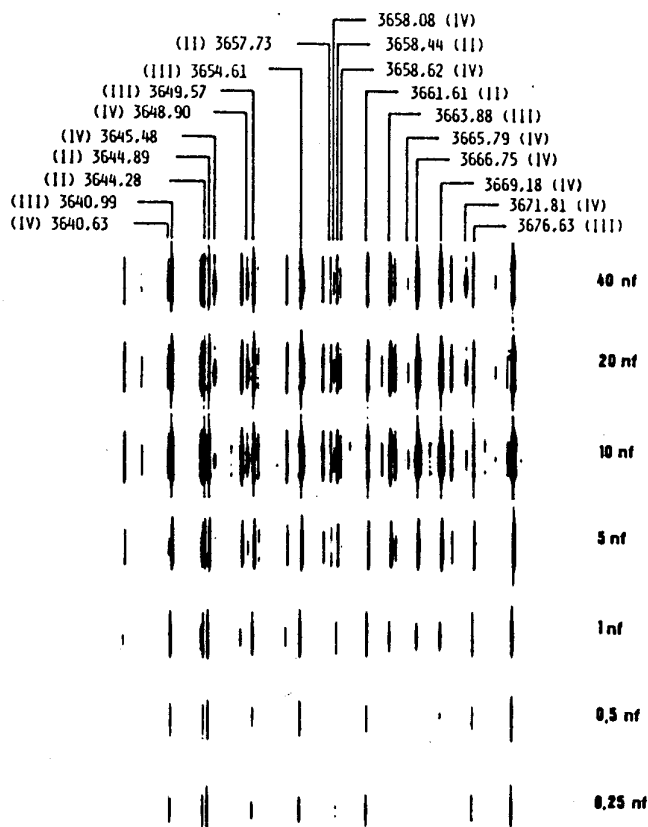


Fig. III.3.1

Otra característica muy importante de esta fuente es el grado de ionización que de ella se puede obtener. Para la zona del infrarrojo lejano, el espectro del Kr generado por esta fuente, está compuesto principalmente de líneas correspondientes al Kr II y muy pocas del Kr III.

Para la zona del visible, el mayor porcentaje de líneas corresponde al Kr III, encontrándose también una buena cantidad de líneas pertenecientes al Kr II y al Kr IV.

Para la zona del violeta y ultravioleta cercano, el mayor porcentaje de líneas corresponde al Kr IV y en menor

proporción al Kr III y al Kr V.

En el ultravioleta lejano se encuentran principalmente líneas del Kr V y Kr VI, llegándose a encontrar en la zona de los 400 Å líneas pertenecientes al Kr VII y al Kr VIII.

III-3.1 CORRIMIENTO DE LAS LINEAS POR EFECTO STARK.

De la comparación de los espectros correspondientes a las líneas Kr II, Kr III, Xe II y Xe III obtenidos con la fuente espectral anteriormente descrita con los obtenidos por otros autores, ref (2,20,21,22), se observan corrimientos sistemáticos de las líneas espectrales que dependen fundamentalmente de las transiciones a las cuales pertenecen.

Dichos corrimientos son del orden de $0,5 \text{ cm}^{-1}$ llegando, en algunos casos, a superar el cm^{-1} .

Para las transiciones 6p-7s y 6p-6d en Xe III el corrimiento de las líneas tiene en general el mismo signo que en las líneas correspondientes a las transiciones 5p-6s y 5p-5d del Kr II y Kr III. Una tendencia similar se observa para las líneas del Xe II correspondientes a las transiciones 6p-7s y 6p-6d.

Por otro lado se encuentra que las transiciones 6s-6p en Xe III tienen el mismo comportamiento que las transiciones 5s-5p del Kr II y Kr III.

Finalmente, las transiciones 5d-6p en Xe III muestran un comportamiento errático, e idéntico comportamiento se observa para la misma transición en Xe II y en las transiciones 4d-5p del Kr II y Kr III.

Es importante destacar que para cada transición, el valor promedio de los corrimientos tiene el mismo orden de magnitud que el de los iones de la misma especie isonuclear, esto es, Kr II con Kr III y Xe II con Xe III.

En consecuencia, las regularidades encontradas entre transiciones similares correspondientes a los iones Kr II, Kr III, Xe II y Xe III pueden ser interpretadas como consecuencia de un efecto Stark debido al campo generado por los iones.

En el Apéndice C se lista una selección de líneas espectrales pertenecientes al Xe III, Kr II y Kr III, donde se destacan los valores de las mismas según otros autores y según nuestras medidas obtenidas de los espectros generados por dicha fuente.

CAPITULO IV

RESULTADOS Y DISCUSION

CAPITULO IV.

IV-1 CONFIGURACIONES ELECTRONICAS DEL Kr III

El Kr dos veces ionizado, (Kr III), pertenece a la secuencia isoelectrónica del Se I, por lo tanto presenta una configuración fundamental de la forma $4s^2 4p^4$, la que da origen, de acuerdo a como se acoplen los cuatro electrones equivalentes p, a términos 3P , 1D y 1S , los que a su vez dan origen a los niveles, (expresados en notación LS),: 3P_2 , 3P_1 , 3P_0 , 1D_2 y 1S_0

Una característica importante del espectro del kriptón es que viola frecuentemente las reglas de selección $\Delta S=0$ y $\Delta L=0, +1$ ó -1 .

Esto se debe que en el caso de gases nobles se está en presencia de un acoplamiento intermedio entre LS y JJ, por lo que cabe esperar un apartamiento de las reglas de selección correspondientes al primer tipo mencionado.

Teniendo en cuenta las reglas de Hund, corresponde al 3P_2 la menor energía de esta configuración, la cual se toma como cero por ser el nivel fundamental, y al 1S_0 la mayor.
(Tabla IV-1.1)

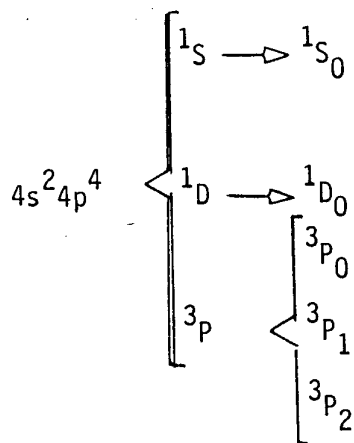


Tabla IV-1.1

La primera configuración excitada aparece cuando uno de los electrones de la capa 4s salta a la capa 4p, o sea que dicha configuración adopta la forma $4s4p^5$, la que da lugar a términos 3P y 1P siendo sus correspondientes niveles 3P_2 , 3P_1 , 3P_0 y 1P_1 . (Tabla IV-1.2)

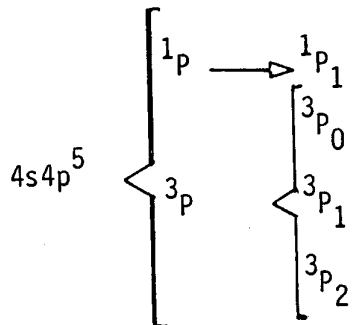


Tabla IV-1.2

Las siguientes configuraciones excitadas surgen por el salto de uno de los electrones de la capa 4p a otras de mayor número cuántico principal, n, o de distinto número

cuántico orbital, 1, o ambas situaciones simultáneamente. En consecuencia, dichas configuraciones serán de la forma: $4s^2 4p^3 5s$, $4s^2 4p^3 5p$, $4s^2 4p^3 4d, \dots, 4s^2 4p^3 n l$.

Al producirse dicho salto, los restantes electrones que han permanecido en sus respectivas capas presentan una configuración $4s^2 4p^3$ y se acoplan entre si generando los términos 4S , 2D y 2P . En consecuencia, el electrón excitado que se encuentra en alguna capa $n l$ se acoplará angularmente con alguno de los tres términos generando una serie de niveles que dependerán del término al que se ha acoplado.

Las tablas IV-1.3, IV-1.4 y IV-1.5 muestran los niveles que surgen de las configuraciones $4s^2 4p^3 ns$, $4s^2 4p^3 np$ y $4s^2 4p^3 nd$.

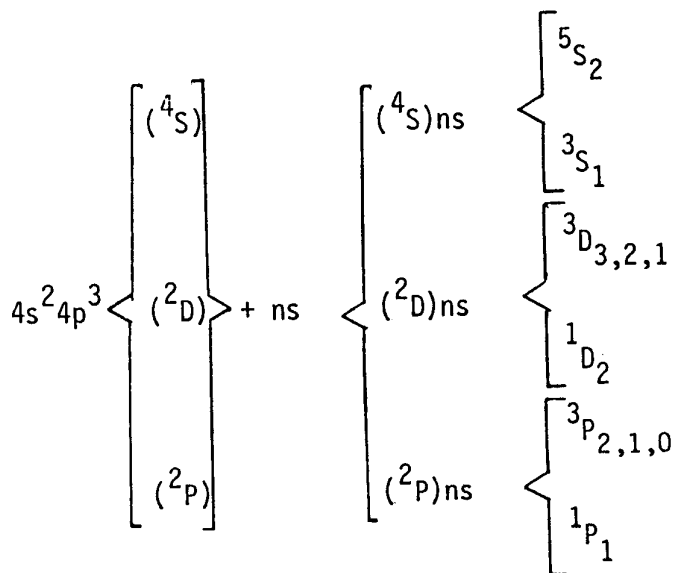


Tabla IV-1.3

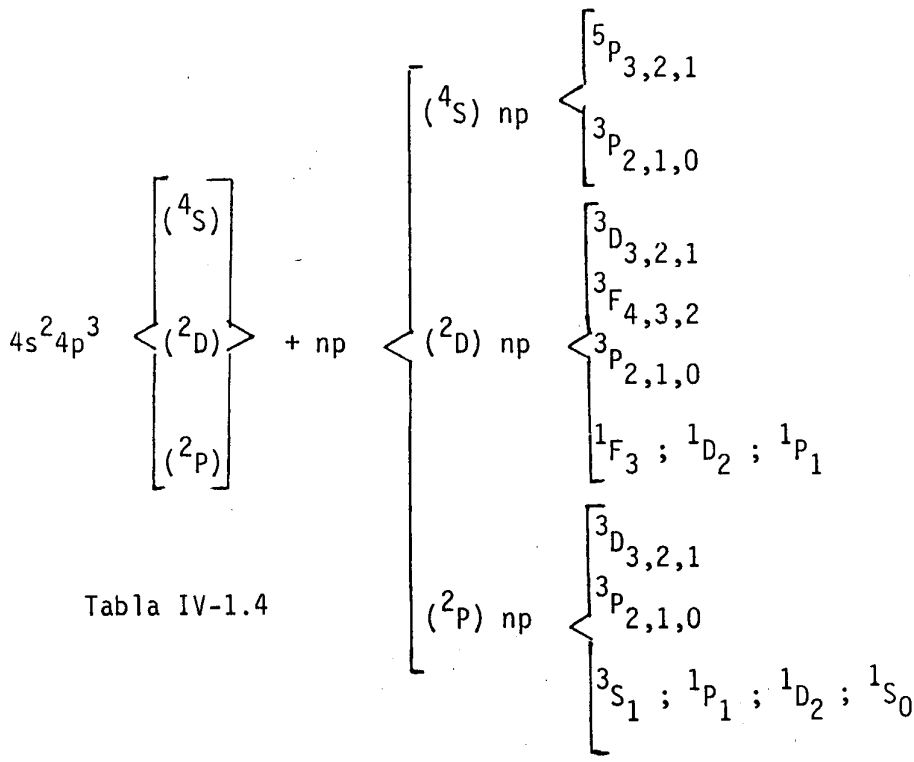


Tabla IV-1.4

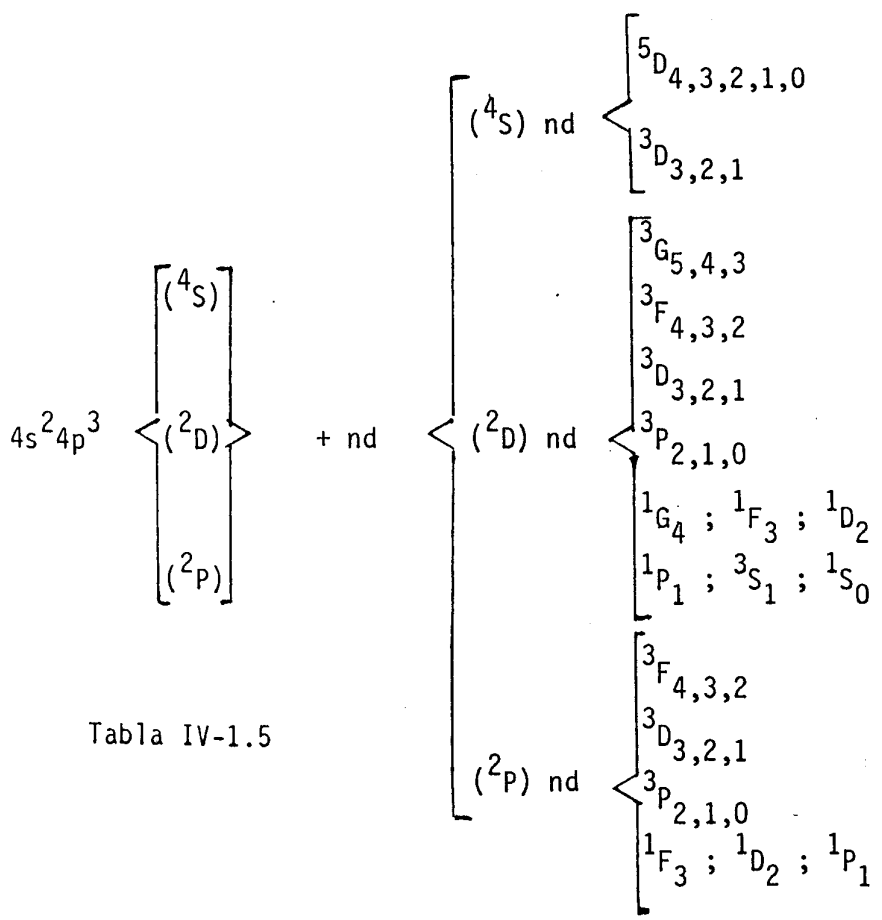
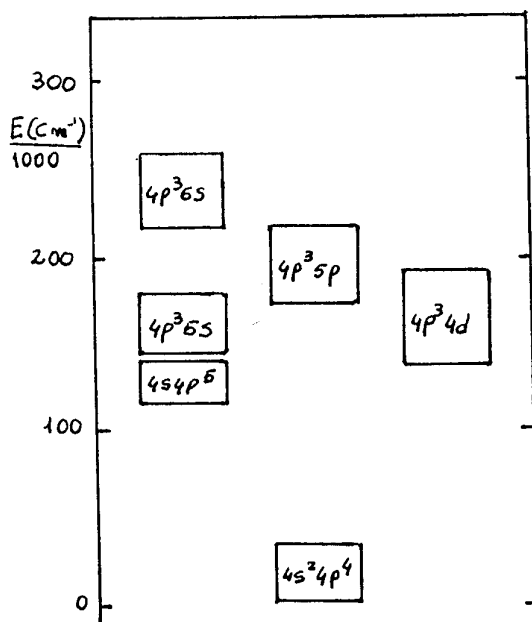


Tabla IV-1.5

IV-1.a DISTRIBUCION DE CONFIGURACIONES

El siguiente diagrama muestra esquemáticamente la distribución de las configuraciones estudiadas según su energía y su paridad.



IV-2 ANALISIS DE LAS CONFIGURACIONES

IV-2.a CONFIGURACION $4s^2 4p^4$ (Paridad: Par)

La fig. IV-2.a.1 muestra la secuencia isoelectrónica para la configuración $4s^2 4p^4$ en donde se observa el acuerdo que existe entre los valores de los niveles pertenecientes a

esta configuración ya conocidos, ref (6), con los interpolados de ésta, ref.(24, 25, 26, 27, 28) y con los cálculos teóricos, ref.(29).

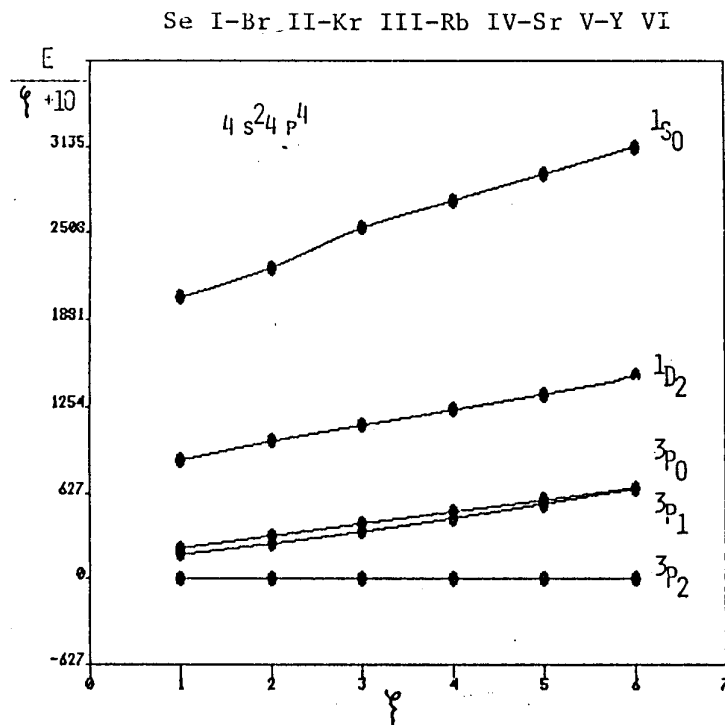


Fig. IV-2.a.1

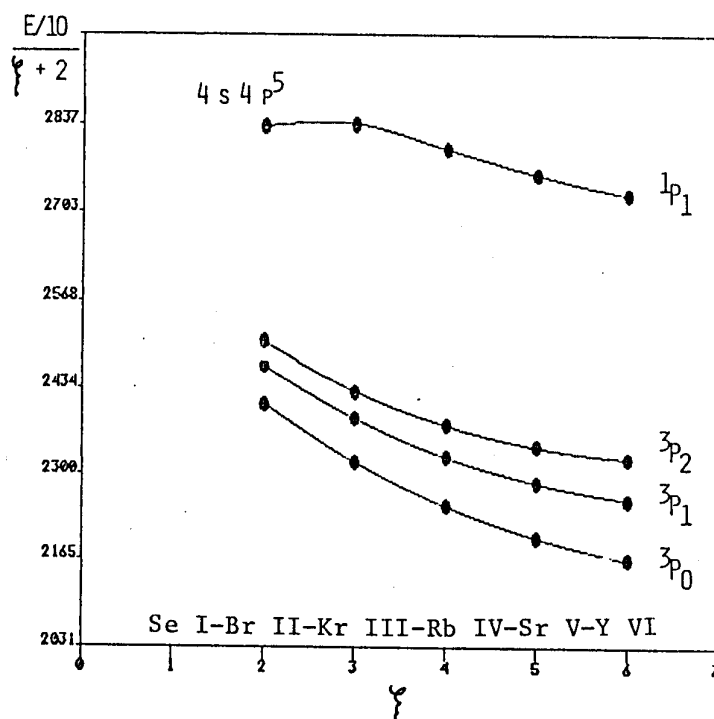
En el Apéndice B se listan los valores de los niveles de energía de esta configuración obtenidos en base a medidas mas precisas de las líneas de resonancia y de programas de ajuste de niveles

Como conclusión entonces puede decirse que los valores de los niveles de energía de esta configuración concuerdan tanto en valor como en designación con los obtenidos por otros autores, ref.(6).

IV-2.b CONFIGURACION $4s4p^5$ (Paridad: Impar)

Analogamente, de la secuencia isoelectrónica, ref.(24, 25, 26, 27, 28), y en base a predicciones teóricas, ref.(29), en la fig. IV-2.b.1 se observa que los valores ya conocidos, ref (6), para los niveles de la configuración $4s4p^5$ concuerdan bien con ella.

Fig.IV-2.b.1



En consecuencia, es posible afirmar que los valores obtenidos por otros autores, ref.(6), también son correctos para esta configuración tanto en valor como en designación

En base a nuevas medidas y con los ajustes correspondientes se han obtenido para estos niveles los valores que se citan en el Apéndice B.

IV-2.c CONFIGURACION $4s^2 4p^3 5s$ (Paridad: Impar)

Los niveles de esta configuración, ref(6), al igual que en las anteriores, concuerdan también correctamente con los valores interpolados de la secuencia isoelectrónica, ref.(24, 25, 26, 27, 28), como lo muestran las fig IV-2.c.1, IV-2.c.2 y IV-2.c.3 tanto en valor como así también en su designación, (esto último también puede inferirse de la pureza o composición de los niveles y de los valores calculados teóricamente para los mismos, ref.(29).).

Como conclusión entonces, los valores citados en ref.(6), son correctos tanto en valor como en designación.

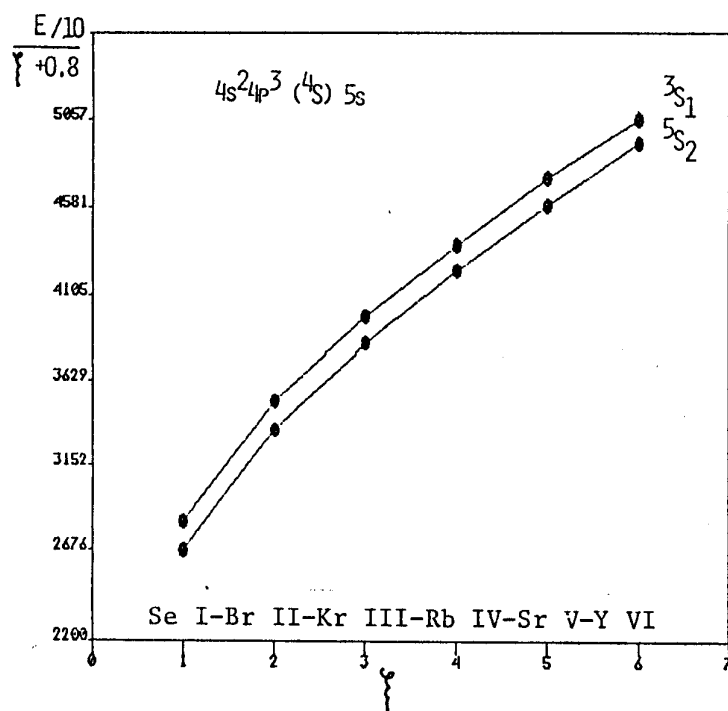


Fig.IV-2.c.1

Fig.IV-2.c.2

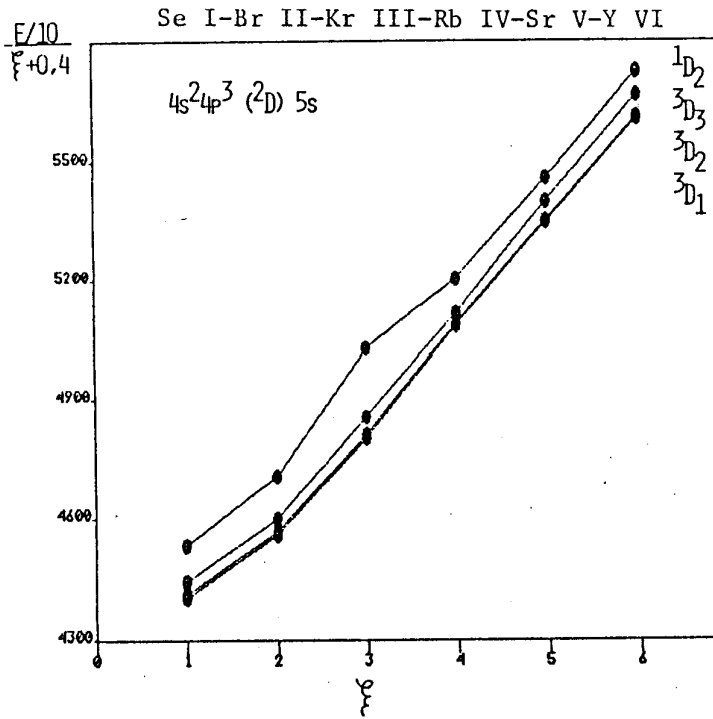
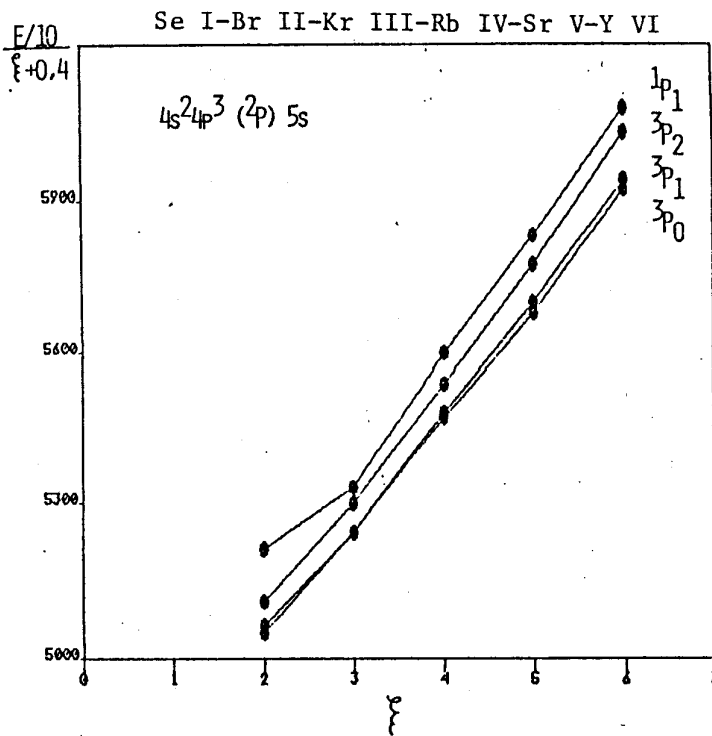


Fig.IV-2.c.3



Los valores ajustados de estos niveles se listan en el Apéndice B

IV-2.d CONFIGURACION $4s^2 4p^3 5p$ (Paridad: Par)

A esta configuración pertenecen 28 niveles, (ver tabla IV-4), de los cuales 26 se conocían previamente, ref (6), restando por determinar los niveles $(^4S)5p^3P_0$ y $(^2P)5p^1S_0$.

Del análisis de esta configuración ha sido posible determinar el nivel $(^4S)5p^3P_0$ en $180.237,12 \text{ cm}^{-1}$ en base a cinco líneas nuevas como muestra la tabla IV-2.d.1, en donde se destacan en la misma, la intensidad relativa de las líneas, los valores teóricos y experimentales de las mismas.

	$(^4S)4d^5D_1$	$(^4S)4d^3D_1$	$(^4S)5s^3S_1$	$(^2D)5s^3D_1$	$4s4p^5^3P_1$
$(^4S)5p^3P_0$	6	12	15	9	8
180237.12	41766.15	31165.27	28656.93	16968.20	60856.89
	.20	.20	.81	.38	.73

Tabla IV-2.d.1

Además, como muestra la fig IV-2.d.1, dicho valor se ajusta perfectamente a la curva de la secuencia isoelectrónica, ref.(24, 25, 26, 27, 28).

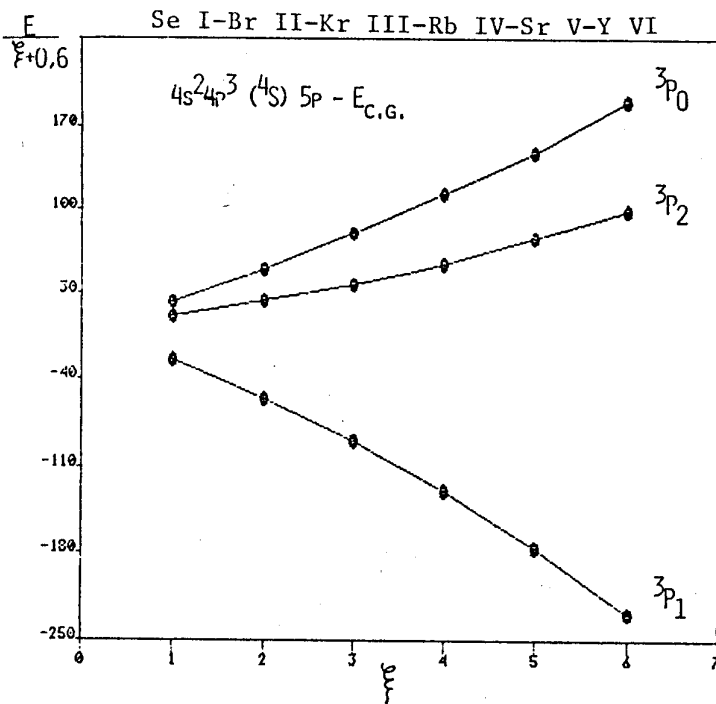


Fig. IV-2.d.1

A su vez queda corroborado teóricamente dado que el valor calculado por el método de Hartree-Fock con interacción de configuraciones prevé para este nivel el valor $180283.15 \text{ cm}^{-1}$ ref. (29).

Aunque también se han determinado algunos valores posibles para el nivel $(^2P)5p^1S_0$, no se ha podido confirmar aun dado que muy próximo a este se debe encontrar el nivel doblemente excitado $4s^0 4p^6 1S_0$ sin determinar también.

Del análisis de los restantes niveles varios han sido cambiados de designación, ya sea en base a predicciones teóricas o en base a la secuencia isoelectrónica.

La tabla IV-2.d.2 muestra los niveles que han sido cambiados de designación principalmente debido a la secuencia isoelectrónica y a las predicciones teóricas que surgen del cálculo de niveles por el método de Hartree Fock con interacción de configuraciones (HFCl), ref(29).

Nivel (Cm ⁻¹)	Designación	
	Anterior	Actual
192701.85	(² D)5p ³ D ₂	(² D)5p ³ F ₂
193825.10	(² D)5p ³ D ₃	(² D)5p ³ F ₃
193855.36	(² D)5p ³ F ₂	(² D)5p ³ D ₂
194962.81	(² D)5p ³ F ₃	(² D)5p ¹ F ₃
195478.00	(² D)5p ¹ F ₃	(² D)5p ³ D ₃
208284.41	(² P)5p ¹ P ₁	(² P)5p ³ P ₁
212263.76	(² P)5p ³ P ₁	(² P)5p ¹ P ₁

Tabla IV-2.d.2

Las figuras IV-2d.2 hasta la IV-2.d.8 muestran las secuencias isoelectrónicas correspondientes a los restantes niveles de esta configuración, en donde los niveles que han sido redesignados están graficados en base a su actual designación. Los valores de todos ellos se hallan citados en el Apéndice B.

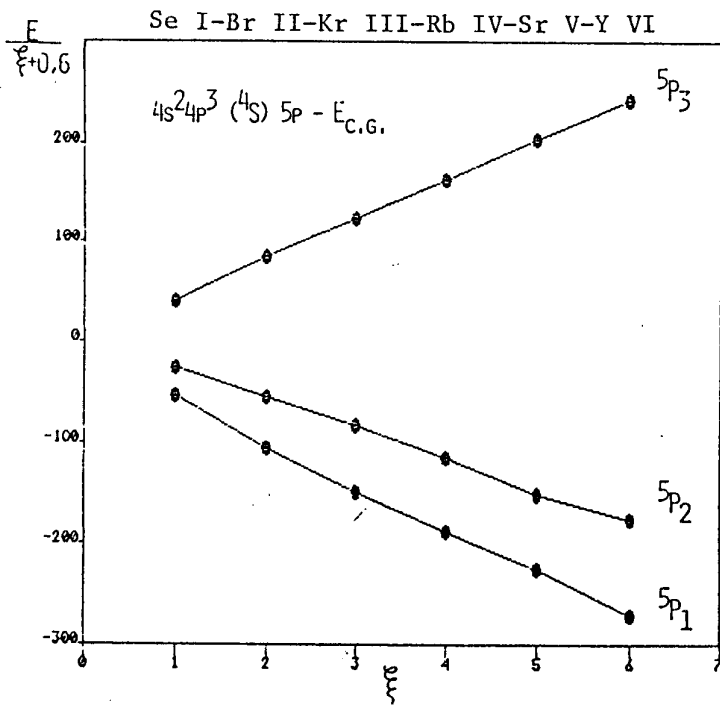


Fig.IV-2.d.2

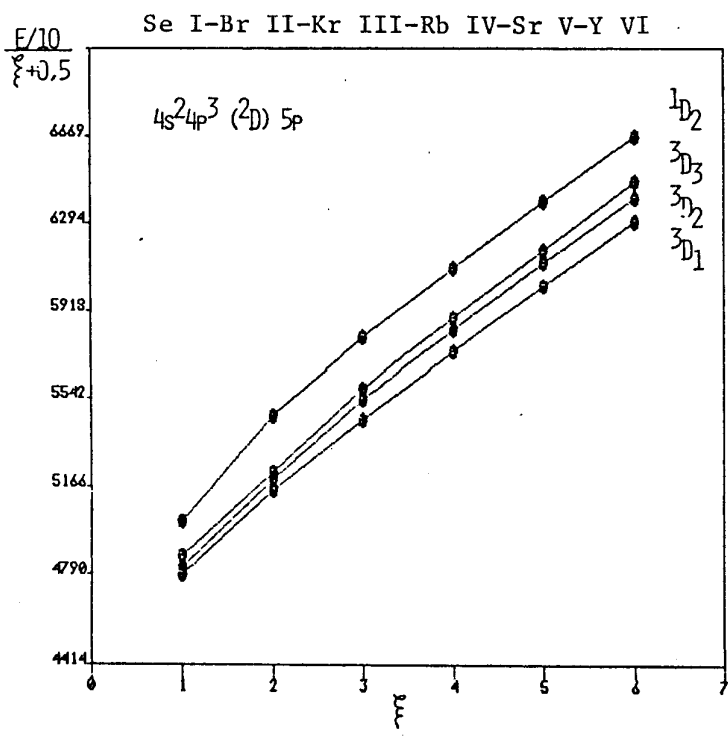


Fig.IV-2.d.3

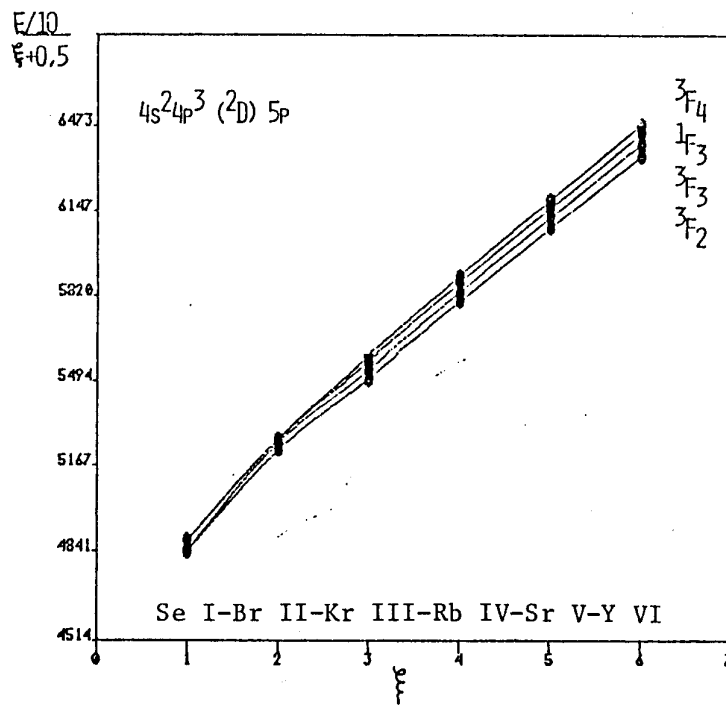


Fig.IV-2.d.4

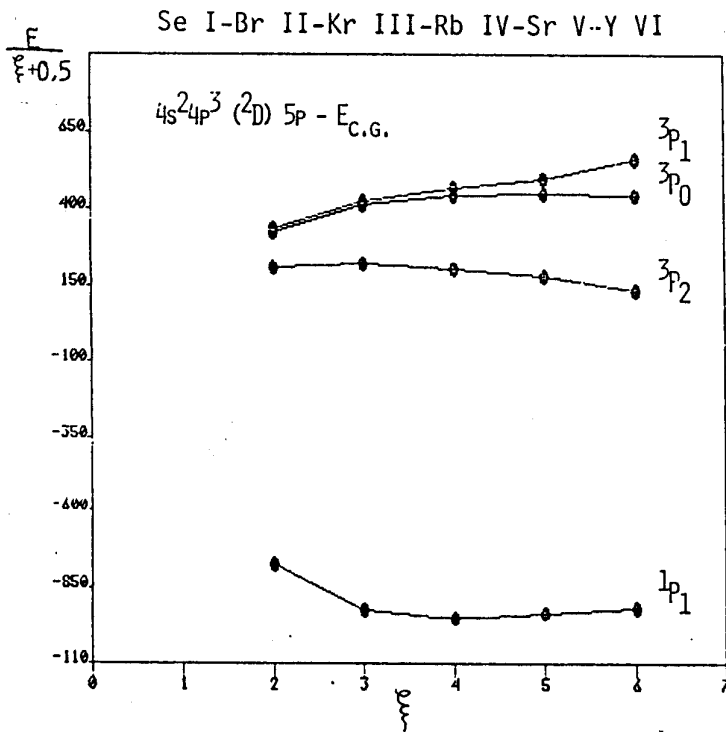


Fig.IV-2.d.5

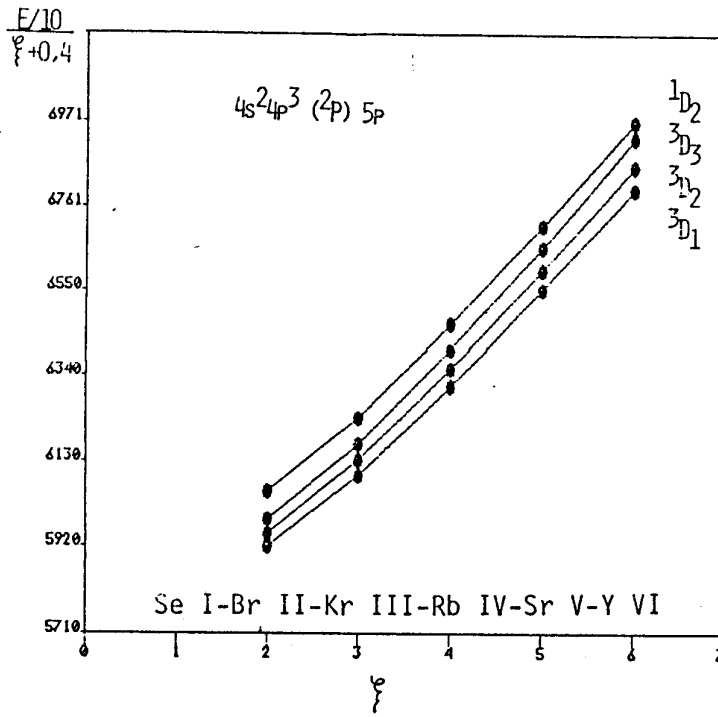


Fig.IV-2.d.6

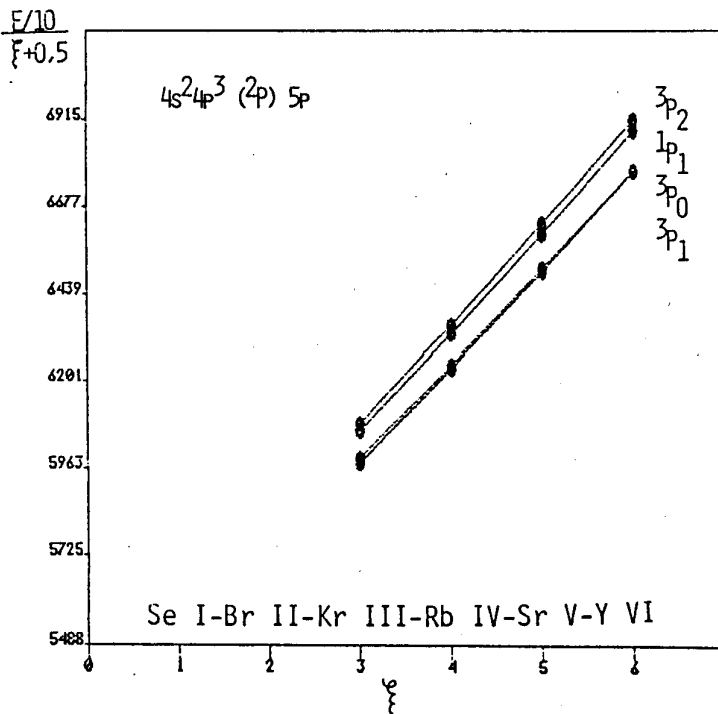


Fig.IV-2.d.7

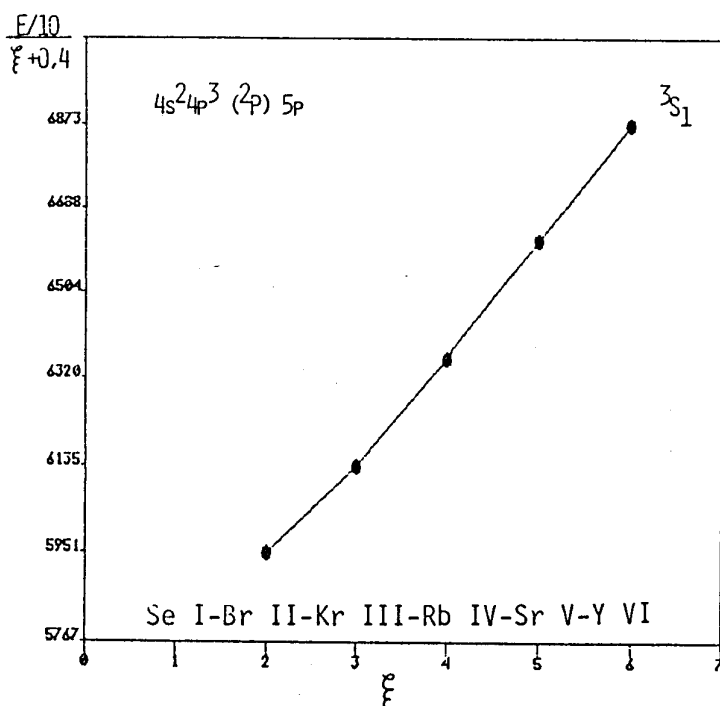


Fig. IV-2.d.8

IV-2.e CONFIGURACION $4s^2 4p^3 4d$ (Paridad: Impar)

Como se indica en la tabla IV-5 corresponden a esta configuración 38 niveles, conociéndose al inicio del presente trabajo 32 de ellos, restando por determinar los niveles $(^2D)4d^1F_3$, $(^2D)4d^1S_0$, $(^2D)4d^3P_2$, $(^2D)4d^3P_1$, $(^2D)4d^3P_0$ y $(^2P)4d^3P_0$.

Para el nivel $(^2D)4d^1F_3$ se encontro el valor $196286,23 \text{ cm}^{-1}$, este nivel fue determinado en base a tres líneas nuevas como se indica en la tabla IV-2.e.1

	$4s^2 4p^4 \ ^1D_2$	$(^2P)5p \ ^1D_2$	$(^2P)5p \ ^3D_2$
$(^2D)4d \ ^1F_3$	5	6	2
196286.23	181641.93	15837.18	12223.76
	3.42	6.65	.56

Tabla IV-2.e.1

Se observa también que este valor para el nivel $(^2D)4d \ ^1F_3$ concuerda muy bien con el predicho por la secuencia isoelectrónica, fig IV-2.e.1

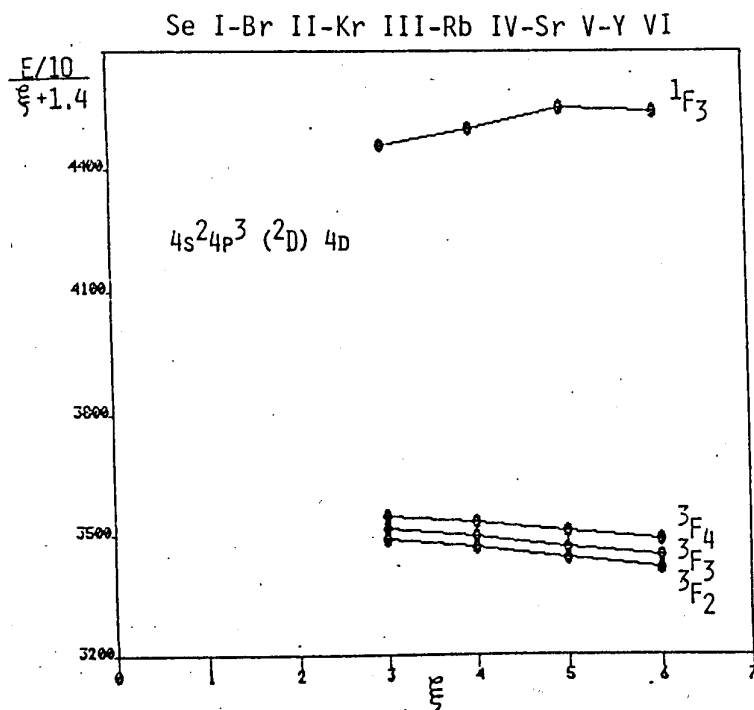


Fig. IV-2.e.1

Para el nivel $(^2D)4d^1S_0$ se encontró el valor $154399.71 \text{ cm}^{-1}$; este nivel quedó determinado por cinco líneas nuevas como se indica en la tabla IV-2.e.2

	$(^2D)5p^1P_1$	$(^2P)5p^3D_1$	$(^2P)5p^3P_1$	$(^2P)5p^1P_1$	$4s^24p^4^3P_1$
$(^2D)4d^1S_0$	12	8	8	9	2
154399.71	39720.54	52847.30	54844.70	57864.03	149851.31
	.80	.22	.81	3.88	.07

Tabla IV-2.e.2

El valor de este nivel es aproximadamente 2000 cm^{-1} mas bajo que el calculado teoricamente, ref (29). Similares discrepancias entre los valores del $(^2D)4d^1S_0$ observados y calculados se encuentran en Rb IV, ref.(26), Sr V, ref. (27) y Y VI, ref.(28).

Para el nivel $(^2D)4d^3P_2$ se se determinó su valor en $185688,63 \text{ cm}^{-1}$ por medio de ocho líneas nuevas como se indica en la tabla IV-2.e.3

	$(^2P)5p^3P_2$	$(^2D)5p^1D_2$	$(^2P)5p^3D_3$	$(^2P)5p^3P_2$	$(^2P)5p^3S_1$
$(^2D)4d^3P_2$	3	6	9	6	1
185688,63	12419.15	17207.31	24179.90	27368.90	22920.91
	8.84	.29	.52	.69	.87

$(^2P)5p^1P_1$	$4s^24p^4^1D_2$	$4s^24p^4^3P_2$
3	5	4
26575.11	171044.33	185688.63
4.69	3.77	6.55

Tabla IV.2.e.3

La fig IV-2.e.2 muestra la posición de este nivel dentro de su secuencia isoelectrónica.

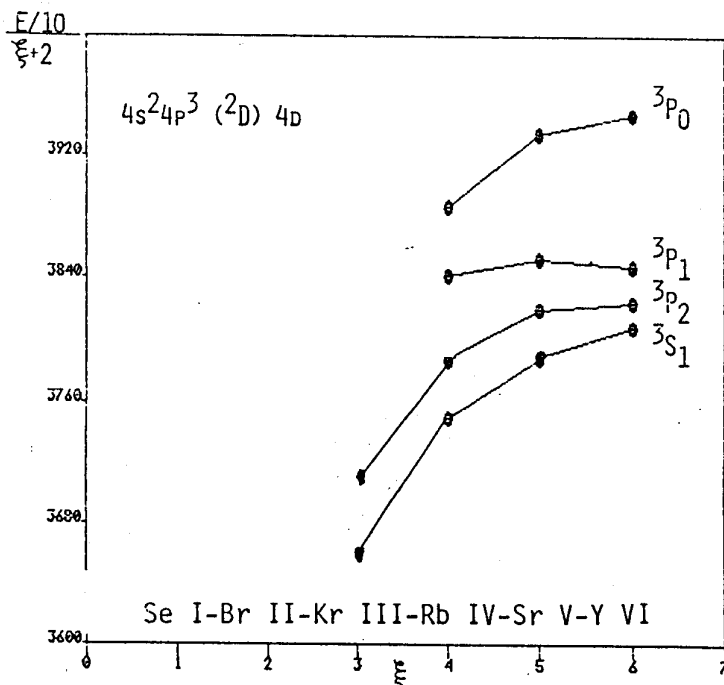


Fig. IV-2.e.2

En base al análisis de los restantes niveles mediante el uso de la secuencia isoelectrónica, ref.(24, 25, 26, 27, 28) y de cálculos teóricos, ref.(29), se redesignaron catorce de ellos. Para el nivel $(^2D)4d^1P_1$ se le cambió el valor de J además del "parent" y la multiplicidad, en base a la secuencia isoelectrónica y a las transiciones de este nivel con los de la configuración $4s^24p^35p$, siendo ahora su nueva designación $(^2P)4d^3P_0$. Al nivel $(^2P)4d^1P_1$ se le cambió la

designación por $(^2D)4d^1P_1$ en base a las consideraciones ya mencionadas, por lo que quedó el nivel $(^2P)4d^1P_1$ sin determinar.

Para el nivel $(^2P)4d^3F_3$, se propone la designación $(^2P)4d^3D_3$, en este caso la extrapolación gráfica concuerda solo con Sr V, ref.(27), e Y VI, ref.(28). En el Rb IV, ref.(26), el nivel $(^2D)4d^3D_3$ esta muy mezclado con el nivel $(^2P)4d^3D_3$, pero si intercambiamos estos niveles entre si, nuestra designación para el nivel $(^2P)4d^3P_3$ del Kr III se ajusta perfectamente a la gráfica correspondiente a toda la secuencia isoelectrónica.

Si se considera que para la configuración $4s^24p^34d$ la mezcla entre los términos $(^2D)^3D$ y $(^4S)^3D$ en Sr V, ref.(27), e Y VI, ref.(28), es grande, los cambios entre si de estos términos no son físicamente significantes.

La tabla IV-2.e.4 muestra los niveles de la configuración $4s^24p^34d$ que han sido cambiados de designación.

Nivel (Cm ⁻¹)	Designación	
	Anterior	Actual
165463.40	(² D)4d ¹ D ₂	(² P)4d ¹ D ₂
170202.30	(² D)4d ³ D ₁	(² P)4d ³ D ₁
171995.87	(² D)4d ¹ P ₁	(² P)4d ³ P ₀
172465.48	(² D)4d ³ D ₂	(² P)4d ³ D ₂
172983.11	(² D)4d ³ S ₁	(² P)4d ³ P ₁
174450.95	(² D)4d ³ D ₃	(² P)4d ³ F ₃
174830.66	(² P)4d ³ F ₃	(² P)4d ³ D ₃
176790.75	(² P)4d ³ D ₂	(² P)4d ³ P ₂
182264.93	(² P)4d ³ D ₁	(² D)4d ³ S ₁
184891.82	(² P)4d ³ D ₃	(² D)4d ³ D ₃
188233.20	(² P)4d ¹ P ₁	(² D)4d ¹ P ₁
188569.14	(² P)4d ¹ D ₂	(² D)4d ³ D ₂
190226.21	(² P)4d ³ P ₁	(² D)4d ³ D ₁
193651.72	(² P)4d ³ P ₂	(² D)4d ¹ D ₂

Tabla IV-2.e.4

Las figuras IV-2.e.3 hasta la IV-2.e.10 muestran las secuencias isoelectrónicas correspondientes a los restantes niveles en donde los que han sido cambiados de designación están graficados en función de se actual designación.

Fig. IV-2.e.3

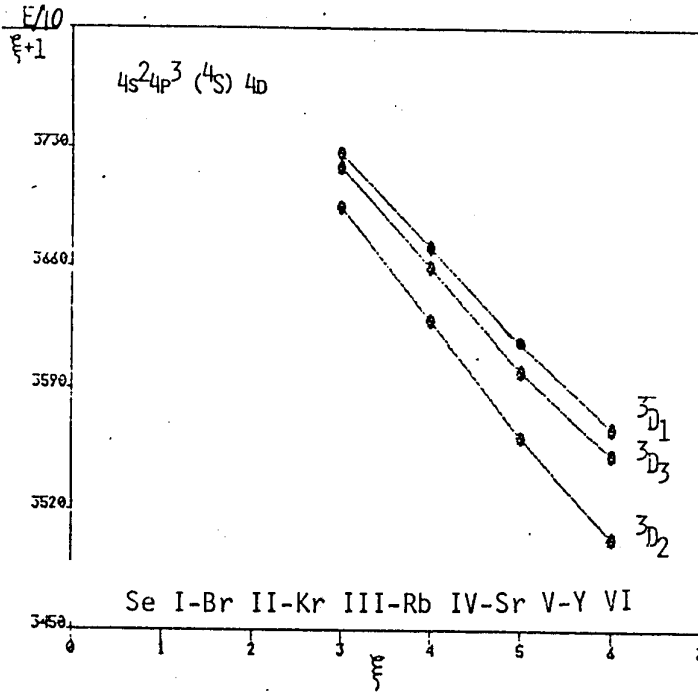


Fig. IV-2.e.4

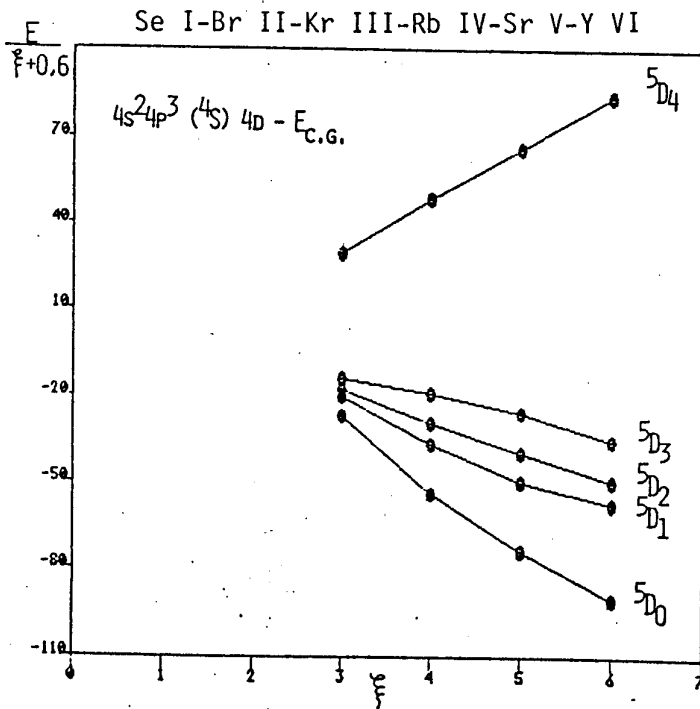


Fig. IV-2.e.5

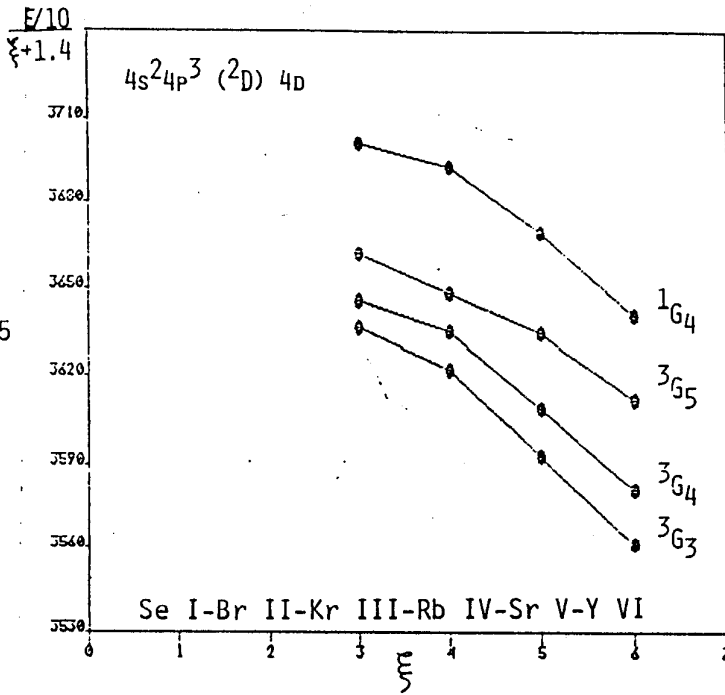


Fig. IV-2.e.6

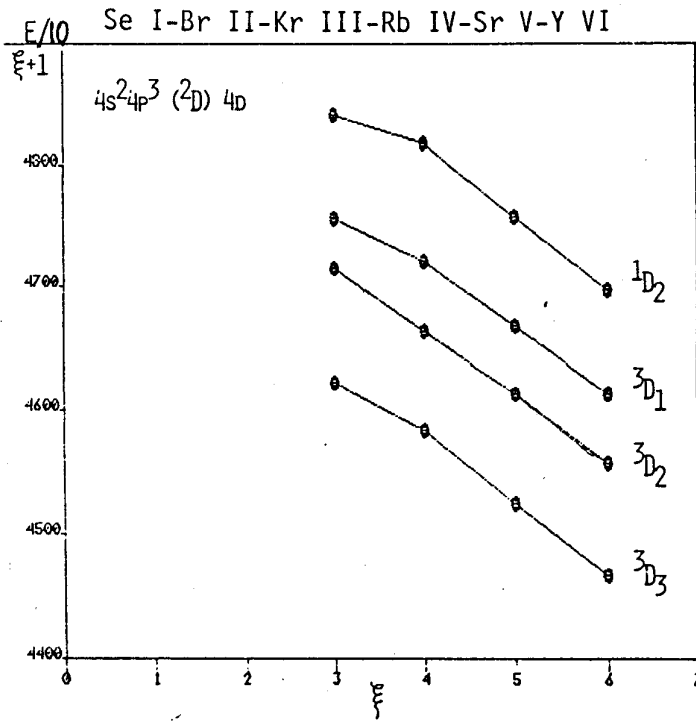


Fig. IV-2.e.7

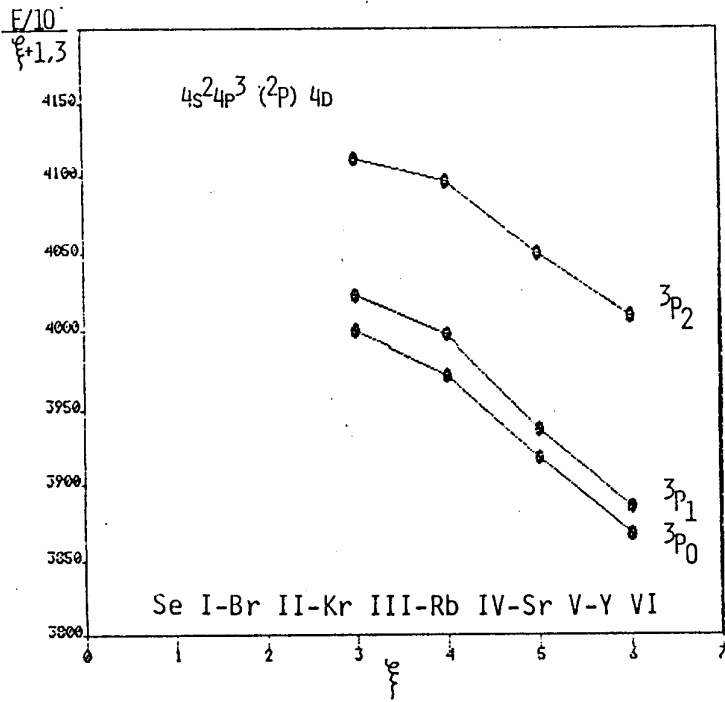
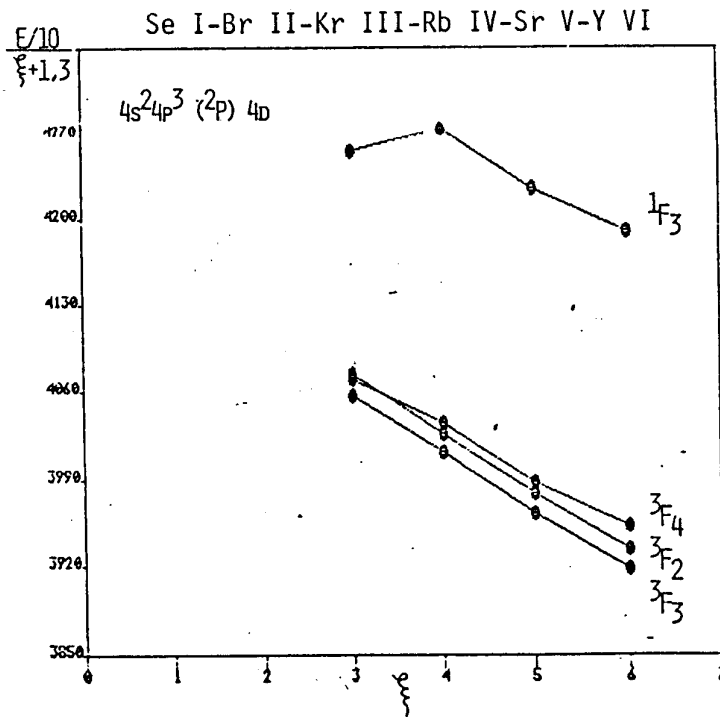


Fig. IV-2.e.8



Para los niveles $(^2D)4d^3P_0$, $(^2D)4d^3P_1$ y $(^2P)4d^1P_1$, con los cuales queda completa la configuración $4s^24p^34d$, aun no han sido determinados experimentalmente, sus valores probables según la secuencias isoelectrónicas son 189.000 cm^{-1} , 190.000 cm^{-1} , y 212.000 cm^{-1} respectivamente. Los valores de los niveles de esta configuración se detallan en el Apéndice B.

IV.2.f CONFIGURACION $4s^24p^36s$ (Paridad: Impar)

Como ya se ha visto en la Tabla IV.3, pertenecen a las configuraciones $4s^2 4p^3 ns$ diez niveles de energía correspondientes a los "carozos" (4S), (2D) y (2P).

Para el caso particular de la configuración $4s^24p^36s$, ocho de los diez niveles ya habían sido determinados según ref.(6), restando por determinar los niveles $(^2D)6s^3D_1$ y $(^2P)6s^1P_1$.

Del análisis de esta configuración se determinó el nivel $(^2D)6s^3D_1$ en $232898,6 \text{ cm}^{-1}$ en base a cuatro líneas nuevas como muestra la tabla IV.2.f.1. Por otro lado se observa en la fig.IV.2.f.1 el ajuste perfecto de este valor a la secuencia isoelectrónica.

	$(^2D)5p\ ^3P_0$	$(^2D)5p\ ^3D_1$	$(^2D)5p\ ^3F_2$	$(^2P)5p\ ^3D_2$
$(^2D)6s\ ^3D_1$	5	1	1	0
232897.12	34108.86	42174.14	40195.87	24388.73
	.54	.70	.82	.73

Tabla IV-2.f.1

Del análisis que en base a la secuencia isoelectrónica se realizó para los restantes niveles ya conocidos, ref.(6), surge que éstos han sido bien determinados tanto en valor como en designación, a excepción del nivel $(^2D)6s\ ^1D_2$ en donde se observa una marcada discrepancia con respecto a su secuencia. El valor correcto del mismo aún no ha sido hallado. Las fig. IV.2.f.1, IV.2.f.2 y IV.2.f.3 muestran las secuencias pertenecientes a estos niveles donde se puede observar el perfecto ajuste de los que han sido bien designados a las mismas. Dichos valores se detallan en el Apéndice B.

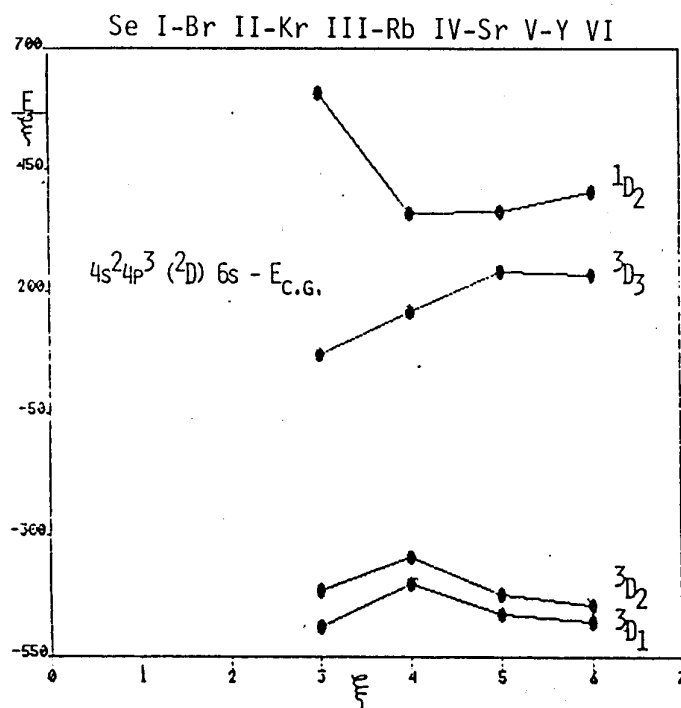


Fig. IV-2.f.2

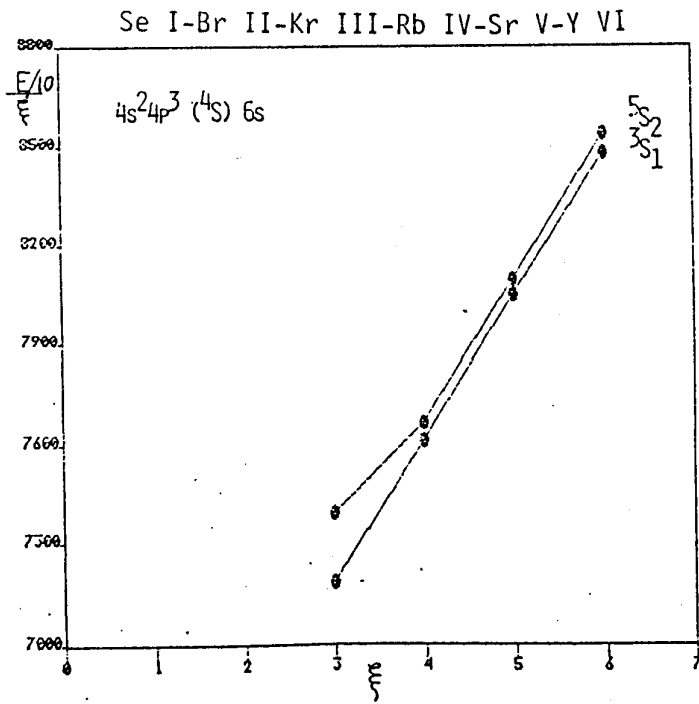
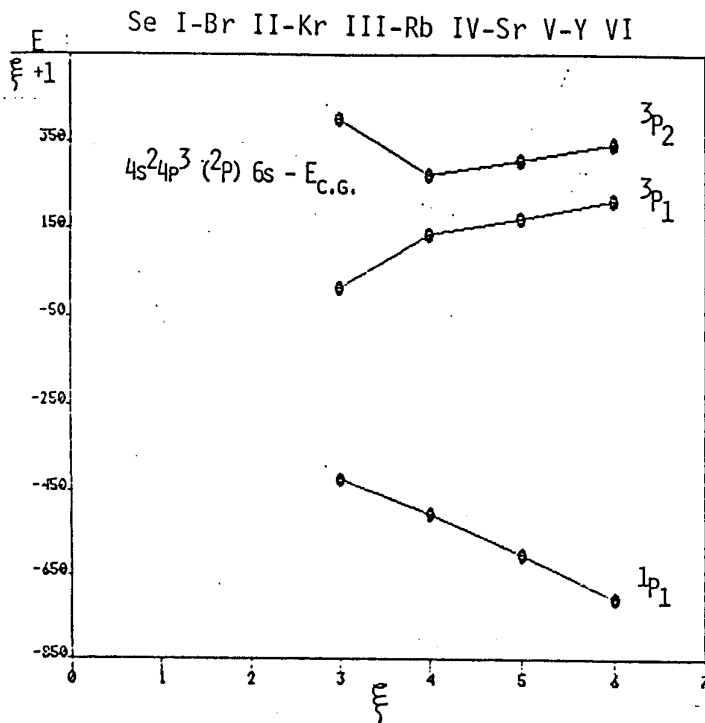


Fig. IV-2.f.3



Para el nivel $(^2P)6s^1P_1$ no se ha podido determinar aún su valor debido fundamentalmente a que no se conocen la mayoría de los niveles pertenecientes a su secuencia lo cual genera una gran incerteza acerca de la posición relativa del mismo.

IV.3 ANALISIS DE LA CONFIGURACION $4s^2 4p^2 5s$ DEL Kr IV, (Paridad: Impar)

INTRODUCCION

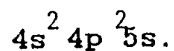
El Kr tres veces ionizado, (Kr IV), es isoelectrónico con el As I, siendo su configuración fundamental $4s^2 4p^3$ y la primera excitada $4s 4p^4$, las cuales ya han sido estudiadas completamente por Persson y otros, ref.(5).

Este análisis comprende la configuración $4s^2 4p^2 5s$ totalmente desconocida al inicio del presente análisis.

Para establecer los niveles de energía de esta configuración fueron realizados cálculos teóricos y extrapolaciones de la secuencia isoelectrónica, ref.(30, 31, 32, 33, 34, 35, 36), como soporte a los datos experimentales. Los cálculos teóricos fueron hechos utilizando valores estimados para la energía promedio y las integrales directas

y de intercambio así como de la interacción spin órbita, ref.(16), en base a las regularidades isoelectrónicas y otras.

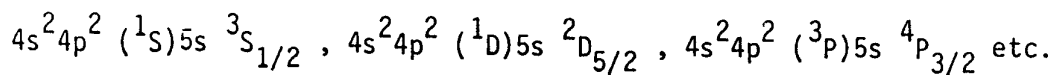
IV.3.a ESTRUCTURA DE NIVELES DE LA CONFIGURACION



Los niveles que se generan a partir de configuraciones del tipo $np^2 n's$ son los siguientes:

$$4s^2 4p^2 \left\{ \begin{array}{l} ({}^1S) \\ ({}^1D) \\ ({}^3P) \end{array} \right\} + n's \left\{ \begin{array}{l} ({}^1S) ns \rightarrow \begin{array}{l} {}^2S_{1/2} \\ {}^2D_{3/2} \\ {}^2D_{5/2} \end{array} \\ ({}^3P) ns \left\{ \begin{array}{l} {}^2P_{1/2}, 3/2 \\ {}^4P_{5/2}, 3/2, 1/2 \end{array} \right. \end{array} \right.$$

por lo que en este caso en particular con $n=4$ y $n'=5$, los niveles son designados del siguiente modo, (notación LS),



IV.3.b CALCULO TEORICO DE LOS NIVELES DE ENERGIA,
(en cm^{-1}), DE LA CONFIGURACION $4s^2 4p^2 5s$

Es conveniente, en primer lugar, determinar la energía promedio de esta configuración a fin de simplificar las expresiones de los elementos de las matrices de energía. De la expresión (II.39) se tiene que

$$E_{av} = \frac{\sum_{\text{niveles}} (2j+1)E_j}{\sum_{\text{niveles}} (2j+1)}$$

por lo que para esta configuración se tiene:

$$E_{av} = 1/30 \left[2E(^2S_{1/2}) + 4E(^2D_{3/2}) + 6E(^2D_{5/2}) + 2E(^2P_{1/2}) + 4E(^2P_{3/2}) + 2E(^4P_{1/2}) + 4E(^4P_{3/2}) + 6E(^4P_{5/2}) \right]$$

Para realizar este cálculo es posible reemplazar la energía de los niveles por la de sus términos correspondientes, pues estos no presentan corrimientos por la interacción spin órbita en la aproximación LS.

Reemplazando entonces por las expresiones de la tabla II.1 se tiene que:

$$E_{av} = F_0 + 2F'_0 - 2F_2 - G_1$$

donde $F_0 = F_0(4p, 4p)$; $F'_0 = F_0(5s, 4p)$; $F_2 = F_2(4p, 4p)$ y $G_1 = G_1(5s, 4p)$

en consecuencia, las energías de los términos de esta configuración quedan expresadas de la siguiente manera:

$$({}^2S) = E_{av} + 12F_2$$

$$({}^2D) = E_{av} + 3F_2$$

$$({}^2P) = E_{av} - 3F_2 + 2G_1$$

$$({}^4P) = E_{av} - 3F_2 - G_1$$

El cálculo de los elementos de matriz spin órbita de configuraciones que contienen electrones no equivalentes es mucho mas complicado que el caso de electrones equivalentes como el desarrollado en el punto II.8. Las expresiones de las cuales se determinan dichos elementos se encuentran en la ref. (16).

Para la configuración $4s^2 4p^2 5s$ los elementos de matriz spin órbita son los siguientes:

	${}^2S_{1/2}$	${}^2P_{1/2}$	${}^4P_{1/2}$	${}^4P_{3/2}$	${}^2D_{3/2}$	${}^2P_{3/2}$	${}^2D_{5/2}$	${}^4P_{5/2}$
${}^2S_{1/2}$		$\frac{2}{\sqrt{6}} \xi_p$	$-\frac{2}{\sqrt{3}} \xi_p$					
${}^2P_{1/2}$	$\frac{2}{\sqrt{6}} \xi_p$		$-\frac{2}{3} \xi_p$	$\frac{\sqrt{8}}{12} \xi_p$				
${}^4P_{1/2}$	$-\frac{2}{\sqrt{3}} \xi_p$	$\frac{\sqrt{8}}{12} \xi_p$		$-\frac{5}{6} \xi_p$				
${}^4P_{3/2}$				$-\frac{1}{3} \xi_p$	$\frac{1}{\sqrt{12}} \xi_p$	$\frac{3}{8} \xi_p$		
${}^2D_{3/2}$				$\frac{1}{\sqrt{12}} \xi_p$		$\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{12}} \xi_p$		
${}^2P_{3/2}$				$\frac{3}{8} \xi_p$	$\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{12}} \xi_p$	$\frac{1}{3} \xi_p$		
${}^2D_{5/2}$								$\frac{1}{\sqrt{2}} \xi_p$
${}^2P_{5/2}$							$\frac{1}{\sqrt{2}} \xi_p$	$\frac{1}{2} \xi_p$

por lo que la ecuación secular (II.40) separada en submatrices queda de la forma:

Para $J = 1/2$

$$\begin{array}{c}
 {}^2S_{1/2} \\
 {}^2P_{1/2} \\
 {}^4P_{1/2}
 \end{array}
 \begin{vmatrix}
 E_{av} + 12F_2 - \epsilon & \frac{2\xi_p}{\sqrt{6}} & -\frac{2\xi_p}{\sqrt{3}} \\
 \frac{2\xi_p}{\sqrt{6}} & E_{av} - 3F_2 + 2G_1 - \frac{2\xi_p}{3} - \epsilon & \frac{\sqrt{8}\xi_p}{12} \\
 -\frac{2\xi_p}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{8}\xi_p}{12} & E_{av} - 3F_2 - G_1 - \frac{5\xi_p}{6} - \epsilon
 \end{vmatrix} = 0$$

Para $J = 3/2$

$$\begin{array}{c}
 {}^4P_{3/2} \\
 {}^2D_{3/2} \\
 {}^2P_{3/2}
 \end{array}
 \begin{array}{ccc}
 {}^4P_{3/2} & {}^2D_{3/2} & {}^2P_{3/2} \\
 \left| \begin{array}{ccc}
 E_{av} - 3F_2 - G_1 - \frac{1}{3}\xi_p - \epsilon & \frac{1}{\sqrt{12}}\xi_p & \frac{3}{8}\xi_p \\
 \frac{1}{\sqrt{12}}\xi_p & E_{av} + 3F_2 - \epsilon & \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{12}}\xi_p \\
 \frac{3}{8}\xi_p & \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{12}}\xi_p & E_{av} - 3F_2 + 2G_1 + \frac{1}{3}\xi_p - \epsilon
 \end{array} \right| = 0
 \end{array}$$

Para $J = 5/2$

$$\begin{array}{c}
 {}^2D_{5/2} \\
 {}^4P_{5/2}
 \end{array}
 \begin{array}{cc}
 {}^2D_{5/2} & {}^4P_{5/2} \\
 \left| \begin{array}{cc}
 E_{av} + 3F_2 - \epsilon & \frac{1}{\sqrt{2}}\xi_p \\
 \frac{1}{\sqrt{2}}\xi_p & E_{av} - 3F_2 - G_1 + \frac{1}{2}\xi_p - \epsilon
 \end{array} \right| = 0
 \end{array}$$

Los valores para E_{av} , F_2 , G_1 y ξ_p estimados en base a la secuencia isoelectrónica y a la secuencia homóloga son los siguientes:

$$\begin{aligned}
 E_{av} &= 215.000 \text{ cm}^{-1} \\
 F_2 &= 2.550 \text{ cm}^{-1} \\
 G_1 &= 2.000 \text{ cm}^{-1} \\
 \xi_p &= 4.400 \text{ cm}^{-1}
 \end{aligned}$$

Reemplazando estos valores en las distintas submatrices

de la ecuación secular, se tienen los siguientes valores para los niveles de energía, los que a su vez están en buen acuerdo con los extrapolados de la secuencia isoelectrónica

	CALC. (cm ⁻¹)	EXTRAP. (cm ⁻¹)
$4s^2 4p^2 ({}^1S) 5s^2 S_{1/2}$	246.523	241.425
$({}^3P) 5s^2 P_{1/2}$	208.834	208.875
${}^4P_{1/2}$	200.864	201.840
${}^4P_{3/2}$	203.555	205.357
${}^2P_{3/2}$	212.232	212.550
${}^4P_{5/2}$	206.928	208.507
$4s^2 4p^2 ({}^1D) 5s^2 D_{3/2}$	223.556	221.650
${}^2D_{5/2}$	223.271	220.600

La fig. IV.3.b.1 muestra la secuencia isoelectrónica de los niveles de la configuración $4s^2 4p^2 5s$.

Tomando como referencia los valores de los niveles calculados y extrapolados, y analizando las transiciones que cabrían esperar entre esta configuración y la fundamental, se hallaron seis de los ocho niveles que la conforman exclusivamente en base a líneas nuevas, hecho que implica la clasificación automática de las mismas.

En la tabla IV.3.b.1 se destacan los niveles encontrados

y sus transiciones con la configuración fundamental.

La tabla IV.3.b.2 muestra los niveles de la configuración primera excitada, $4s4p^4$, y sus transiciones con la configuración fundamental determinados por W. Persson y otros, ref.(5).

	$4S_{3/2}$	$2D_{3/2}$	$2D_{7/2}$	$2P_{1/2}$	$2P_{3/2}$
	0.00	17036.8	18699.9	31055.2	34404.9
$4s^2 4p^2 5s$	7	6		7	3d
201424 $4P_{1/2}$	201424.6	184387.2 6.5		170368.8 3.1	168019.1 23.2
	1d	8	9	7	6
205397 $4P_{3/2}$	205397 402.5	188360.8 1.7	186697.7	174342.4 1.9	171992.7 1.9
	6	3	8		9
207594.6 $4P_{5/2}$	207594.6 .4	190557.8	188894.7 6.0		174189.7 .9
		5			8
219416.9 $2D_{3/2}$		202380.1 72.1			188361.7
	2	6		2d	2d
208062.2 $2P_{1/2}$	208062.2	191025 16		177007 2	174657 5
		2	1d	5	4
211684 $2P_{3/2}$		194647.2 50.2	192984.1 .6	180628.8 32.3	178279.1 6.9

Tabla IV-3.b.1

$4s_{3/2}$	$2D_{3/2}$	$2D_{5/2}$	$2P_{1/2}$	$2P_{3/2}$
0.00	17036.8	18699.9	31055.2	33404.9

$4s4p^4$ $4P_{1/2}$	15 124109.3 .0	8 107072.5 .1		9 93054.1 .4	1 90704.4 .2
$4P_{3/2}$	15 122426.4 .6	8 105389.6 90.2	10 103726.5 .3		9 89021.5 .2
$4P_{5/2}$	18 118760.4 .6	10 101723.6 .3	12 100060.5 .3		9 85355.5 .7
$2D_{3/2}$		12 128734.6 .2	8 127071.5 .7	10 114716.2 .1	9 112366.5 7.4
$2D_{5/2}$	4 146644.1 3.8	10 129607.3 .5	12 127944.2 .0		12 113239.2 5.1
$2P_{1/2}$	2dd 166159.7 61.9	9 149122.9 .8		10 135104.5 .2	2 132754.8 5.1
$2P_{3/2}$	3 163443.5 .7	7 146406.7 7.0	12 144743.6 4.4	10 132388.3 .0	9 130038.6 .0
$2S_{1/2}$	6 173951.3 .6	1 156914.5 3.9		10 142896.1 5.5	10 140546.4 7.3

Tabla IV-3.b.2

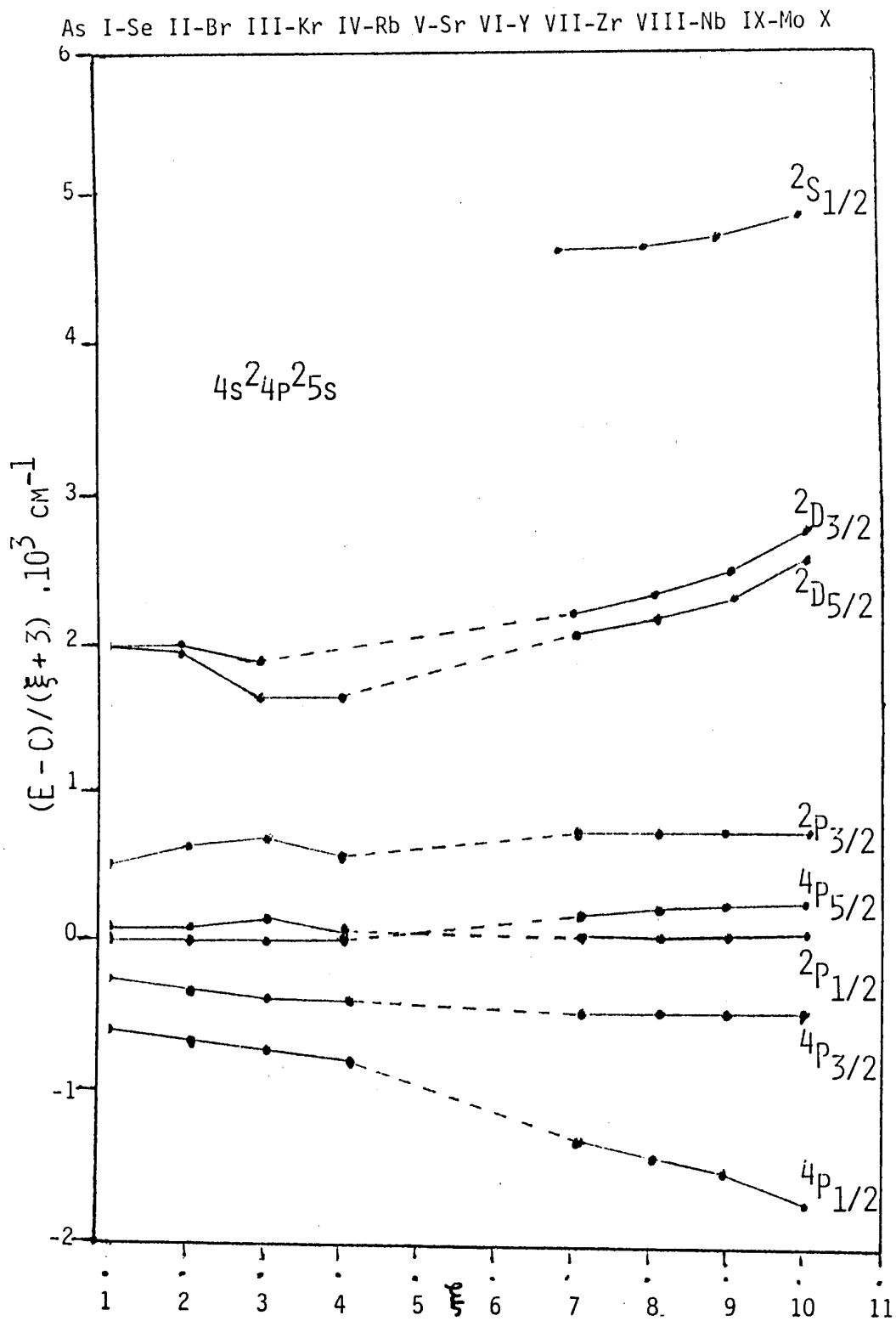


Fig. IV-3.b.1

CAPITULO V

CONCLUSIONES

CAPITULO V

CONCLUSIONES

V.1 INTRODUCCION

En este capítulo se resumen los aspectos mas importantes de lo presentado en el resto del trabajo.

En primer lugar se resume el análisis realizado sobre las configuraciones $4s^2 4p^4$, $4s4p^5$, $4s^2 4p^3 5s$, $4s^2 4p^3 5p$, $4s^2 4p^3 4d$, $4s^2 4p^3 6s$ del kriptón dos veces ionizado, (Kr III), y la configuración $4s^2 4p^2 5s$ del kriptón tres veces ionizado, (Kr IV), luego se trata el tema de la fuente espectral y sus características mas sobresalientes y, por último la asignación iónica, la clasificación de las líneas espectrales y la labor futura que se pretende desarrollar.

V.2 CONFIGURACIONES $4s^2 4p^4$, $4s4p^5$ y $4s^2 4p^3 5s$

Como ya fuera mencionado en el capítulo IV, el análisis de éstas configuraciones del Kr III realizado en base a la secuencia isoelectrónica, ref.(24, 25, 26, 27, 28), y predicciones teóricas por medio de un Hartree Fock con interacción de configuraciones, (HFCl), ref.(29), permitió

confirmar los valores de los niveles de dichas configuraciones, ref.(6), y reajustar los mismos en base a medidas mas precisas de las líneas de resonancia.

V.3 CONFIGURACION $4s^2 4p^3 5p$

En esta configuración se determinó el valor del nivel $(S)5p^3 P_0$ en 180237 cm^{-1} en base a cinco líneas nuevas, a la interpolación de la secuencia isoelectrónica, ref.(24, 25, 26, 27, 28), y a las predicciones del HFCl, ref.(29).

Del análisis de los restantes niveles, siete de ellos han sido cambiados de designación, ya sea en base a la secuencia isoelectrónica o a las predicciones del HFCl. Las tablas IV.2.d.2 y IV.2.d.3 muestran los niveles que han sido redesignados.

IV.4 CONFIGURACION $4s^2 4p^3 4d$

Aquí fueron determinados tres niveles de los seis faltantes en 196286 cm^{-1} , $154399.71 \text{ cm}^{-1}$ y $185688.63 \text{ cm}^{-1}$ para el $(^2D)4d^1 F_3$, $(^2D)4d^1 S_0$ y $(^2D)4d^3 P_2$ respectivamente. También fueron cambiados de designación catorce niveles, dentro de los cuales, para el caso del nivel $(^2D)4d^1 P_1$ se le cambió el valor de J además del "parent" y la multiplicidad, siendo

ahora su nueva designación $(^2P)4d^3P_0$, como siempre, todo esto en base a la secuencia isoelectrónica y a predicciones del HFCl. En la tabla IV.2.e.4 se listan los niveles redesignados.

IV.5 CONFIGURACION $4s^2 4p^3 6s$

Del análisis de esta configuración se determinó el valor del nivel $(^2D)6s^3D_1$ en 232898 cm^{-1} , restando determinar el nivel $(^2P)6s^1P_1$ para completarla. Se desprende también que los restantes niveles ya conocidos están bien determinados tanto en valor como en designación.

V.6 CONFIGURACION $4s^2 4p^2 5s$

Para establecer los niveles de energía de esta configuración, todos desconocidos al momento de comenzar su análisis, fueron realizados cálculos teóricos y extrapolaciones de la secuencia isoelectrónica, ref.(30, 31, 32, 33, 34, 35, 36), como soporte a los datos experimentales.

Los cálculos teóricos fueron hechos utilizando valores estimados para la energía promedio y las integrales directas y de intercambio así como de la interacción spin órbita.

Como resultado final, fueron determinados seis de los

ocho niveles que conforman esta configuración, y por ende se clasificaron líneas nuevas entre ésta y la configuración fundamental. En la tabla IV.3.b.1 se destacan los niveles encontrados y sus transiciones con la configuración fundamental.

V.7 LA FUENTE ESPECTRAL

Como ha sido puntualizado en el capítulo III, las características mas importantes de esta fuente no convencional, diseñada y desarrollada en el CIOp, son el alto grado de ionización al cual alcanza (hasta Kr VIII en la zona de los 500 Å), su gran luminosidad, por lo que se han podido identificar centenares de líneas nuevas pertenecientes a los distintos grados de ionización, y la formas de las líneas espectrales que de ella se obtienen, las cuales están relacionadas con el grado de ionización de los iones a los cuales pertenecen, ref.(23).

Otro fenómeno observado en esta fuente y actualmente en estudio, es un corrimiento sistemático de las líneas espectrales, del orden de unas décimas de cm^{-1} , el cual se deba posiblemente a un efecto Stark interiónico, además el sentido de dicho corrimiento depende de las configuraciones a las cuales pertenecen las transiciones involucradas, razón

por la cual se transforma este efecto en un elemento de decisión más a la hora de analizar las configuraciones.

V.8 ASIGNACION IONICA Y CLASIFICACION DE LINEAS ESPECTRALES

El espectro del Kr varias veces ionizado fue estudiado en el rango de los 430 Å hasta los 8700 Å aproximadamente realizando la asignación iónica de todas las líneas observadas utilizando el método de variación de capacidad en el circuito de descarga.

Como consecuencia de esto, se detectaron mas de quinientas líneas nuevas pertenecientes principalmente a los espectros del Kr II, Kr III y Kr IV. De ellas, medio centenar se clasificaron como transiciones entre niveles del Kr II, ref.(8), mas de ciento cuarenta como transiciones entre los niveles de las configuraciones estudiadas del Kr III, ref.(7), y otro medio centenar como transiciones pertenecientes a niveles del Kr IV, principalmente entre la configuración $4s^2 4p^2 5s$ y la fundamental. Resta en consecuencia una apreciable cantidad de líneas nuevas, ya asignadas ionicamente, con las que se prevé determinar los niveles de energía de las configuraciones mas excitadas.

V.9 TRABAJO FUTURO

Las actividades que se pretenden desarrollar en un futuro inmediato estarán centradas principalmente en el análisis de las configuraciones mas excitadas tanto en el Kr III como en el Kr IV, y paralelamente continuar con los estudios sobre la fuente espectral para que en un futuro no muy lejano se esté en condiciones de acceder al análisis de los gases nobles en altos estados de ionización, tema éste de gran importancia por su aplicabilidad a estudios relacionados con fusión nuclear y plasmas de interés astrofísico.

REFERENCIAS

- 1.- J. C. Boyce, Phys. Rev. 47, 718 (1935)
- 2.- C. J. Humphreys, Phys. Rev. 47, 712 (1935)
- 3.- J. C. Boyce, Phys. Rev. 47, 720 (1935)
- 4.- B. C. Fawcett y G. E. Bromage, J. Phys. B 13, 2711 (1980)
- 5.- W. Persson y S. G. Pettersson, Phys. Scripta 29, 308 (1984)
- 6.- C. E. Moore, Atomic Energy Levels, Natl. Bur. Stand., Circ. 467 (U. S. Government Printing Office, Washington D. C. 1957)
- 7.- F. Bredice y otros, J. Opt. Soc. Am. B, Vol 5, N 2, 222 (1988)
- 8.- F. Bredice y otros, Spectroscopy Letters, Vol 21, N 1, 11 (1988)
- 9.- M. Weissbluth: "Atoms and Molecules". Academic Press (1978)
- 10.-D. R. Hartree: "The Calculation of Atomic Structures". John Wiley and Sons Inc. Nueva York (1957)
- 11.-J. Slater: "Quantum Theory of Atomic Structure". Vol I y II, Mc. Graw Hill (1960)
- 12.-H. Bethe y E. Salpeter: "Quantum Mechanic of One and Two Electron Sistem". Handbuch der Physik Vol XXXV, Springer (1957)

- 13.-B. Edlen: "Atomic Spectra". Handbuch der Physik , 27, Springer (1964)
- 14.-I. Sobelman: "An Introduction to the Theory of Atomic Spectra". Ed. Pergamon
- 15.-C. Nielson y G. Koster: "Spectroscopic Coefficients for P , d and f Configurations". M. I. T. Press
- 16.-R. Cowan: "The Theory of Atomic Structure and Spectra". Univ. of California Press 1981
- 17.-Ch. Froese Fischer: "The Hartree Fock Method for Atoms". John Wiley (1977)
- 18.-H. E. White: "Introduction to Atomic Spectra". Mc. Graw Hill (1934)
- 19.-H. O. Di Rocco y M. Gallardo, Opt. Pur. Apl. Vol 19, N 1 (1986)
- 20.-C. J. Humphreys, J. Res. Nat. Bur. Stand., Vol 22, 19 (1939)
- 21.-C. J. Humphreys, Comunicación Privada
- 22.-T. L. De Bruin. C. J. Humphreys y W. F. Meggers, J. Res. Nat. Bur. Stand. Vol 11, 409 (1933)
- 23.-G. J. Reyna Almandos y otros, Opt. Pur. Apl. Vol 18 N 2, 99 (1985)
- 24.-C. Morillon y J. Verjes, Phys. Scripta, Vol 10, 227 (1974)
- 25.-Y. Bhupala Rao, Ind. J. Phys. Vol 32, 497 (1958)

- 26.-W. Persson y C. G. Wahlstrom, Phys. Scripta Vol 31, 487
(1985)
- 27.-W. Persson y C. G. Wahlstrom, Phys. Scripta Vol 30, 169
(1984)
- 28.-W. Persson y J. Reader, J. Opt. Soc. Am. B, Vol 3, 959
(1986)
- 29.-W. Persson, Comunicación Privada
- 30.-W. Persson y S. G. Pettersson, Phys. Scripta, Vol 29, 308
(1984)
- 31.-L. E. Howard y K. L. Andrew, J. Opt. Soc. Am. B, Vol 2, N
7 (1985)
- 32.-Ch. E. Moore, A. E. L. Nat. Bur. Stand. (1958)
- 33.-Y. Bhupala Rao, Ind. J. Phys. Vol 30, 371 (1956)
- 34.-K. Rahimullah, M. Chagthai y S. Katoon, Phys. Scripta,
Vol 14, 221 (1976)
- 35.-J. Reader y N. Acquista, J. Opt. Soc. Am. B. Vol 71, N 4
(1981)

APENDICE A

LISTA DE LÍNEAS CLASIFICADAS DEL Kr III ENTRE 430 Å Y 8700 Å

Tabla I.- Cont.

6	5809.88	17207.29	.31	$(^2D)4d^3P_2-(^2D)5p^1D_2$	b
1h	5715.80	17490.52	.69	$(^2P)4d^3F_2-(^2D)5p^3F_2$	a,c
9	5597.32	17860.86	.69	$(^2P)5s^3P_2-(^2D)5p^3P_2$	
3	5552.69	18004.30	.12	$(^2D)4d^3D_3-(^2D)5p^1D_2$	b
9	5501.37	18172.25	.06	$(^2P)4d^3P_2-(^2D)5p^1F_3$	c
6	5477.64	18250.96	.90	$(^2P)4d^3F_3-(^2D)5p^3F_2$	c
1	5475.47	18258.22	.10	$(^2P)4d^3D_2-(^2D)5p^3D_1$	c
6	5467.75	18283.99	.78	$(^2D)4d^3D_1-(^2P)5p^3D_2$	b
9	5438.20	18383.34	.33	$(^2D)4d^3D_1-(^2P)5p^3S_1$	c
9	5412.20	18471.63	.69	$(^2D)4d^1D_2-(^2P)5p^1D_2$	c
6	5381.38	18577.42	.26	$(^2P)5s^3P_2-(^2D)5p^3P_1$	
9	5371.37	18612.05	.02	$(^2D)4d^1D_2-(^2P)5p^1P_1$	c
1	5362.06	18644.36	.20	$(^2P)4d^3F_2-(^2D)5p^3D_2$	c
6	5349.75	18637.28	.25	$(^2P)4d^3P_2-(^2D)5p^3D_3$	c
6	5338.17	18727.81	.71	$(^2P)4d^3P_0-(^2D)5p^3D_1$	c
3	5287.02	18908.98	9.09	$(^2P)4d^3F_2-(^2D)5p^1P_1$	b
1	5263.20	18994.55	.44	$(^2P)4d^3D_3-(^2D)5p^3F_3$	c
6	5257.85	19013.88	.78	$(^2D)4d^1P_1-(^2P)5p^3D_1$	c
3	5160.09	19374.10	.15	$(^2P)4d^3F_3-(^2D)5p^3F_3$	c
6	5151.99	19404.57	.41	$(^2P)4d^3F_3-(^2D)5p^3D_2$	c
3	5151.69	19405.69	.81	$(^2D)4d^1D_2-(^2P)5p^3P_2$	c
3	5110.99	19560.25	.13	$(^2D)4d^3D_1-(^2P)5p^3P_0$	c
6	5069.88	19718.85	.74	$(^2P)4d^3P_1-(^2D)5p^3F_2$	c
3	5061.43	19751.77	.65	$(^2P)4d^3F_2-(^2D)5p^1F_3$	c
9	5042.80	19824.74	.64	$(^2D)5s^1D_2-(^2D)5p^3D_1$	
9	5036.65	19848.95	.77	$(^2P)5s^3P_1-(^2D)5p^3P_2$	b
2h	5018.72	19919.86	.83	$(^2P)4d^3F_4-(^2D)5p^1F_3$	a,c
15	5016.36	19929.21	.11	$(^2P)4d^1F_3-(^2D)5p^1D_2$	
9	4988.46	20040.68	.40	$(^2D)4d^3D_2-(^2P)5p^3S_1$	c
3	4977.01	20086.77	.52	$(^2D)4d^3G_3-(^4S)5p^3P_2$	

Tablę I.- Cont.

6	4965.69	20132.59	.15	$(^2P)4d^3D_3-(^2D)5p^1F_3$	c
3	4940.17	20236.59	.37	$(^2P)4d^3D_2-(^2D)5p^3F_2$	c
6	4930.26	20277.27	6.76	$(^2D)4d^1P_1-(^2P)5p^3D_2$	b
6h	4906.28	20376.36	.31	$(^2D)4d^1P_1-(^2P)5p^3S_1$	a,c
5h	4892.21	20434.97	5.02	$(^2P)4d^3F_4-(^2D)5p^3D_3$	a,c
1h	4873.87	20511.86	.86	$(^2P)4d^3F_3-(^2D)5p^1F_3$	a,c
2	4845.62	20631.45	.52	$(^2P)4d^3F_4-(^2D)5p^3F_4$	d
1	4841.90	20647.30	.34	$(^2P)4d^3D_3-(^2D)5p^3D_3$	a,c
2h	4826.08	20714.98	5.27	$(^2D)4d^3D_2-(^2P)5p^3P_1$	a,c
7	4789.74	20872.14	.25	$(^2P)4d^3P_1-(^2D)5p^3D_2$	a,c
1	4754.45	21027.04	.05	$(^2P)4d^3F_3-(^2D)5p^3D_3$	c
2h	4749.00	21051.20	.18	$(^2D)4d^1P_1-(^2P)5p^3P_1$	a,c
4	4729.72	21137.01	.14	$(^2P)4d^3P_1-(^2D)5p^1P_1$	a,c
1	4710.45	21223.44	.55	$(^2P)4d^3F_3-(^2D)5p^3F_4$	c
3h	4693.65	21299.44	.39	$(^2D)4d^3D_2-(^2P)5p^3D_3$	a,c
1	4673.75	21390.08	89.88	$(^2P)4d^3D_2-(^2D)5d^3D_2$	c
1h	4621.40	21632.42	.48	$(^2P)5s^1P_1-(^2D)5p^1D_2$	d
1h	4565.51	21897.24	.20	$(^2D)4d^3D_1-(^2P)5p^1D_2$	a,c
6	4537.25	22033.62	.60	$(^2P)4d^3P_2-(^2D)5p^3P_1$	a,c
10	4536.46	22037.46	.53	$(^2D)4d^3D_1-(^2P)5p^1P_1$	a,c
2	4518.64	22124.37	.38	$(^2P)4d^3P_0-(^2D)5p^1P_1$	a,c
3	4443.72	22497.37	.33	$(^2P)4d^3D_2-(^2D)5p^1F_3$	a,c
3	4443.28	22499.59	.55	$(^2P)4d^3D_1-(^2D)5p^3F_2$	c
8	4378.68	22831.54	.32	$(^2D)4d^3D_1-(^2P)5p^3P_2$	a,c
1	4361.61	22920.87	.91	$(^2D)4d^3P_2-(^2P)5p^3S_1$	b
1	4360.63	22926.04	.16	$(^2D)5s^1D_2-(^2D)5p^3F_3$	a,c
3	4354.93	22956.01	.42	$(^2D)5s^1D_2-(^2D)5p^1D_2$	b
1	4344.25	23012.48	.52	$(^2P)4d^3D_2-(^2D)5p^3D_3$	c
3	4305.22	23221.08	.31	$(^2D)5s^1D_2-(^2D)5p^1P_1$	
6	4294.83	23277.24	.12	$(^2P)4d^3D_3-(^2D)5p^3P_2$	c

Tabla I.- Cont.

1	4244.32	23554.25	.27	$(^2D)4d^3D_2-(^2P)5p^1D_2$	c
1h	4233.72	23613.26	.19	$(^2P)4d^3F_2-(^2D)5p^3P_1$	d
2	4232.82	23618.28	.17	$(^2D)4d^3D_3-(^2P)5p^3D_2$	a,c
9	4226.59	23653.10	.06	$(^2P)4d^3D_1-(^2D)5p^3D_2$	c
9	4225.92	23656.81	.83	$(^2P)4d^3F_3-(^2D)5p^3P_2$	c
2h	4184.59	23890.49	.18	$(^2D)4d^1P_1-(^2P)5p^1D_2$	a,c
9	4171.81	23963.68	.63	$(^4S)5s^3S_1-(^4S)5p^5P_1$	
1	4160.21	24030.48	.51	$(^2D)4d^1P_1-(^2P)5p^1P_1$	c
12	4154.44	24063.83	.87	$(^2D)5s^1D_2-(^2D)5p^1F_3$	c
9	4134.56	24179.52	.90	$(^2D)4d^3P_2-(^2P)5p^3D_3$	b
9	4131.32	24198.48	.45	$(^4S)5s^3S_1-(^4S)5p^5P_2$	
9	4082.43	24488.29	.39	$(^2D)4d^3D_2-(^2P)5p^3P_2$	b
12	4067.39	24578.86	9.06	$(^2D)5s^1D_2-(^2D)5p^3D_3$	c
3	4027.17	24824.32	.30	$(^2D)4d^1P_1-(^2P)5p^3P_2$	c
9	4002.60	24976.69	.71	$(^2D)4d^3D_3-(^2P)5p^3D_3$	c
1	3979.06	25124.46	.67	$(^2P)4d^3P_1-(^2D)5p^3P_2$	c
12	3957.69	25260.09	.18	$(^2P)4d^1D_2-(^2D)5p^3D_1$	c
3	3938.54	25382.93	3.09	$(^2D)4d^3F_3-(^4S)5p^3P_2$	
3	3913.90	25542.70	3.16	$(^2P)4d^1F_3-(^2P)5p^3D_2$	
6	3898.71	25642.24	.30	$(^2P)4d^3D_2-(^2D)5p^3P_2$	c
6	3874.10	25805.73	.75	$(^2P)4d^3P_1-(^2D)5p^3P_0$	c
6	3868.70	25841.16	.24	$(^2P)4d^3P_1-(^2D)5p^3P_1$	c
6	3847.49	25983.61	.55	$(^2P)5s^1P_1-(^2P)5p^3D_1$	
3	3835.35	26065.86	.63	$(^2D)4d^3F_2-(^4S)5p^3P_1$	
1	3829.57	26105.21	.19	$(^2P)4d^3P_2-(^2D)5p^1D_2$	a,c
6	3809.16	26245.06	.06	$(^2D)4d^3S_1-(^2P)5p^3D_2$	c
12	3792.70	26358.97	.87	$(^2P)4d^3D_2-(^2D)5p^3P_1$	c
6	3776.58	26471.46	.97	$(^4S)4d^3D_1-(^4S)5p^5P_1$	b
1	3769.66	26520.07	19.75	$(^2D)4d^3F_2-(^4S)5p^3P_2$	
3	3761.91	26574.69	5.11	$(^2D)4d^3P_2-(^2P)5p^1P_1$	b

Tabla I.- Cont.

9	3726.31	26828.53	.48	$(^2P)4d^3P_0-(^2D)5p^3P_1$	c
6	3702.68	26999.78	.92	$(^2P)5s^3P_2-(^2P)5p^3D_1$	b
3	3699.98	27019.46	.48	$(^2D)4d^3S_1-(^2P)5p^3P_1$	c
12	3690.66	27087.71	.74	$(^2D)5s^3D_2-(^2D)5p^3D_1$	
6	3674.24	27208.79	.84	$(^2D)5s^1D_2-(^2D)5p^3P_2$	
3	3671.15	27231.63	.59	$(^2D)4d^3D_3-(^2P)5p^1D_2$	c
9	3670.24	27238.40	.45	$(^2P)4d^1D_2-(^2D)5p^3F_2$	c
1	3669.14	27246.56	.53	$(^2P)5s^1P_1-(^2P)5p^3D_2$	b
3	3655.78	27346.14	.08	$(^2P)5s^1P_1-(^2P)5p^3S_1$	
6	3652.77	27368.69	.90	$(^2D)4d^3P_2-(^2P)5p^3P_2$	b
15	3641.35	27454.53	.66	$(^2D)5s^3D_1-(^2D)5p^3D_1$	
6	3632.49	27521.51	.41	$(^2D)4d^3S_1-(^2P)5p^3P_0$	c
9	3615.83	27648.27	.40	$(^2D)5s^3D_3-(^2D)5p^3F_2$	c
9	3611.05	27684.90	.78	$(^2P)4d^3F_2-(^2P)5p^1D_2$	c
3	3603.95	27739.42	.27	$(^4S)4d^3D_2-(^4S)5p^5P_1$	
1	3598.02	27785.10	4.70	$(^4S)4d^3D_3-(^4S)5p^5P_3$	
1	3582.49	27905.57	.48	$(^2P)4d^3D_1-(^2D)5p^3P_2$	c
1	3579.94	27925.47	.41	$(^2D)5s^1D_2-(^2D)5p^3P_1$	
3	3573.66	27974.53	.09	$(^4S)4d^3D_2-(^4S)5p^5P_2$	b
6	3567.72	28021.08	0.95	$(^2P)5s^1P_1-(^2P)5p^3P_1$	c
15	3564.22	28048.64	.64	$(^4S)5s^3S_1-(^4S)5p^3P_1$	
3	3562.06	28065.64	.28	$(^2P)4d^3D_3-(^2D)5p^1D_2$	c
9	3549.41	28165.62	.71	$(^2D)4d^3D_3-(^2P)5p^3P_2$	c
1	3537.19	28262.94	.90	$(^2P)5s^3P_2-(^2P)5p^3D_2$	
3	3524.77	28362.54	.45	$(^2P)5s^3P_2-(^2P)5p^3S_1$	
6	3521.11	28391.98	.96	$(^2P)4d^1D_2-(^2D)5p^3D_2$	c
9	3514.55	28445.03	.03	$(^2P)4d^3F_3-(^2D)5p^1D_2$	c
15	3507.44	28502.68	.76	$(^4S)5s^3S_1-(^4S)5p^3P_2$	
9	3497.12	28586.78	.56	$(^2P)4d^3D_1-(^2D)5p^3P_0$	c
9	3492.80	28622.12	.05	$(^2P)4d^3D_1-(^2D)5p^3P_1$	c

Tabla I.- Cont.

15	3488.57	28656.81	$\left\{ \begin{array}{l} .85 \\ .93 \end{array} \right.$	$(^2P)4d^1D_2 - (^2D)5p^1P_1$	c
				$(^4S)5s^3S_1 - (^4S)5p^3P_0$	
15	3474.66	28771.57	.65	$(^2D)5s^3D_3 - (^2D)5p^3F_3$	c
6	3471.01	28801.83	.91	$(^2D)5s^3D_3 - (^2D)5p^3D_2$	c
9	3448.71	28988.03	.00	$(^2P)5s^3P_1 - (^2P)5p^3D_1$	
9	3446.86	29003.64	.49	$(^2P)5s^3P_0 - (^2P)5p^3D_1$	
6	3442.85	29037.39	.32	$(^2P)5s^3P_2 - (^2P)5p^3P_1$	c
15	3439.46	29066.03	.01	$(^2D)5s^3D_2 - (^2D)5p^3F_2$	c
6	3428.80	29156.35	.58	$(^2P)4d^1F_3 - (^2P)5p^1D_2$	
9	3389.67	29432.93	.93	$(^2D)5s^3D_1 - (^2D)5p^3F_2$	c
9	3388.92	29499.48	.41	$(^2P)4d^1D_2 - (^2D)5p^1F_3$	c
12	3374.95	29621.59	.44	$(^2P)5s^3P_2 - (^2P)5p^3D_3$	
15	3351.93	29824.95	.95	$(^4S)5s^5S_2 - (^4S)5p^5P_1$	
9	3348.16	29858.55	.48	$(^2D)4d^3S_1 - (^2P)5p^1D_2$	c
12	3342.48	29909.31	.36	$(^2D)5s^3D_3 - (^2D)5p^1F_3$	c
6	3332.51	29998.83	.81	$(^2D)4d^3S_1 - (^2P)5p^1P_1$	c
12	3330.76	30014.59	.60	$(^2P)4d^1D_2 - (^2D)5p^1D_3$	c
15	3325.75	30059.72	.77	$(^4S)5s^5S_2 - (^4S)5p^5P_2$	
6	3322.27	30091.24	0.70	$(^2P)4d^1F_3 - (^2P)5p^3P_2$	b
12	3311.47	30189.39	.26	$(^2D)5s^3D_2 - (^2D)5p^3F_3$	c
9	3308.16	30219.59	.52	$(^2D)5s^3D_2 - (^2D)5p^3D_2$	c
12	3304.73	30250.91	.98	$(^2P)5s^3P_1 - (^2P)5p^3D_2$	
1	3293.89	30350.52	.53	$(^2P)5s^3P_1 - (^2P)5p^3S_1$	
1	3292.21	30366.02	.02	$(^2P)5s^3P_0 - (^2P)5p^3S_1$	a
9	3285.89	30424.39	.55	$(^2D)5s^3D_3 - (^2D)5p^3D_3$	c
3	3285.25	30430.35	.46	$(^2P)4d^3D_2 - (^2D)5p^1D_2$	a, c
2	3279.42	30484.44	.41	$(^2D)5s^3D_2 - (^2D)5p^1P_1$	a
9	3271.62	30557.06	6.98	$(^4S)4d^3D_1 - (^4S)5p^3P_1$	
12	3268.46	30586.61	.44	$(^2D)5s^3D_1 - (^2D)5p^3D_2$	c
12	3264.79	30621.01	.05	$(^2D)5s^3D_3 - (^2D)5p^3F_4$	

Tabla I.- Cont.

6	3246.59	30792.70	.60	$(^2D)4d^3S_1-(^2P)5p^3P_2$	c
15	3245.66	30801.47	.15	$(^4S)5s^5S_2-(^4S)5p^5P_3$	
9	3240.41	30851.10	.33	$(^2D)5s^3D_1-(^2D)5p^1P_1$	
9	3239.48	30860.21	59.95	$(^2P)5s^1P_1-(^2P)5p^1D_2$	
20	3224.85	31000.27	.28	$(^2P)5s^1P_1-(^2P)5p^1P_1$	a,c
3	3223.74	31010.94	1.10	$(^4S)4d^3D_1-(^4S)5p^3P_2$	a
10	3222.24	31025.38	.40	$(^2P)5s^3P_1-(^2P)5p^3P_1$	a,c
20	3220.62	31040.99	.89	$(^2P)5s^3P_0-(^2P)5p^3P_1$	a,c
12	3207.78	31165.20	.27	$(^4S)4d^3D_1-(^4S)5p^3P_0$	b
80	3191.21	31327.05	6.97	$(^2D)5s^3D_2-(^2D)5p^1F_3$	a,c
100	3189.11	31347.68	.63	$(^4S)4d^3D_3-(^4S)5p^3P_2$	a
20	3170.93	31527.40	.33	$(^2P)5s^3P_1-(^2P)5p^3P_0$	a
10	3151.75	31719.25	.24	$(^2P)4d^3P_2-(^2P)5p^3D_2$	a,c
9	3144.32	31794.20	.07	$(^2P)5s^1P_1-(^2P)5p^3P_2$	a
20	3141.88	31818.89	.79	$(^2P)4d^3P_2-(^2P)5p^3S_1$	a,c
60	3141.35	31824.26	.28	$(^4S)4d^3D_2-(^4S)5p^3P_1$	a
15	3139.58	31842.20	.16	$(^2D)5s^3D_2-(^2D)5p^3D_3$	a,c
10	3136.20	31876.51	.32	$(^2P)5s^3P_2-(^2P)5p^1D_2$	a
100	3124.39	31997.00	.00	$(^2D)5s^1D_2-(^2D)5p^1D_2$	a
20	3122.46	32016.78	.65	$(^2P)5s^3P_2-(^2P)5p^1P_1$	a,c
30	3120.61	32035.76	.85	$(^2P)4d^3F_2-(^2P)5p^3D_1$	a
60	3112.25	32121.81	.76	$(^2D)4d^1G_4-(^2D)5p^1F_3$	a,c
40	3097.16	32278.30	.40	$(^4S)4d^3D_2-(^4S)5p^3P_2$	a
60	3063.13	32636.89	.95	$(^2D)4d^1G_4-(^2D)5p^3D_3$	a,c
3	3062.43	32644.35	.38	$(^2P)4d^1D_2-(^2D)5p^3P_2$	a,c
30	3056.72	32705.33	.42	$(^2D)4d^3G_3-(^2D)5p^3F_2$	a,c
50	3046.93	32810.40	.44	$(^2P)5s^3P_2-(^2P)5p^3P_2$	a
6	3044.80	32833.36	.45	$(^2D)4d^1G_4-(^2D)5p^3F_4$	a
80	3024.45	33054.27	.33	$(^2D)5s^3D_3-(^2D)5p^3P_2$	a
50	3022.30	33077.78	.78	$(^2P)4d^3P_2-(^2P)5p^3D_3$	a,c

Tabla I.- Cont.

6	3002.24	33298.78	.83	$(^2P)4d^3F_2-(^2P)5p^3D_2$	a
20	2996.60	33361.45	0.95	$(^2P)4d^1D_2-(^2D)5p^3P_1$	a,c
2	2993.27	33398.57	.38	$(^2P)4d^3F_2-(^2P)5p^3S_1$	a
60	2992.22	33410.29	.24	$(^2D)4d^3G_4-(^2D)5p^3F_3$	a,c
20	2968.31	33679.40	.33	$(^2P)4d^3D_3-(^2P)5p^3D_2$	a,c
3	2955.20	33828.80	.67	$(^2D)4d^3G_3-(^2D)5p^3F_3$	a,c
50	2952.56	33859.05	8.93	$(^2D)4d^3G_3-(^2D)5p^3D_2$	a,c
4	2952.09	33864.44	.40	$(^2P)5s^3P_1-(^2P)5p^1D_2$	a
10	2948.13	33909.92	.96	$(^4S)5s^5S_2-(^4S)5p^3P_1$	a
15	2939.91	34004.73	.73	$(^2P)5s^3P_1-(^2P)5p^1P_1$	c
4	2938.56	34020.35	.22	$(^2P)5s^3P_0-(^2P)5p^1P_1$	a,c
20	2935.23	34058.95	9.04	$(^2P)4d^3F_3-(^2P)5p^3D_2$	a,c
10	2934.00	34073.22	.25	$(^2P)4d^3F_2-(^2P)5p^3P_1$	a,c
10	2917.67	34263.92	.90	$(^2P)4d^3P_1-(^2P)5p^3D_1$	a,c
30	2909.17	34364.02	.08	$(^4S)5s^5S_2-(^4S)5p^3P_2$	a
20	2900.04	34472.21	.94	$(^2D)5s^3D_2-(^2D)5p^3P_2$	a
40	2893.68	34547.97	.95	$(^2D)4d^3G_4-(^2D)5p^1F_3$	a,c
100	2892.18	34565.89	.89	$(^2D)4d^3G_5-(^2D)5p^3F_4$	a
2	2884.55	34657.31	.37	$(^2P)4d^3F_2-(^2P)5p^3D_3$	a
2	2874.24	34781.62	.53	$(^2P)4d^3D_2-(^2P)5p^3D_1$	a,c
5	2872.85	34798.45	.52	$(^2P)5s^3P_1-(^2P)5p^3P_2$	a
50	2870.61	34825.60	.55	$(^2P)4d^3F_4-(^2P)5p^3D_3$	a
4	2859.05	34996.40	.38	$(^2D)4d^3G_3-(^2D)5p^1F_3$	a,c
2	2853.22	35037.85	.87	$(^2P)4d^3D_3-(^2P)5p^3D_3$	a,c
30	2851.16	35063.16	.14	$(^2D)4d^3G_4-(^2D)5p^3D_3$	a,c
30	2841.00	35188.55	.51	$(^2D)5s^3D_2-(^2D)5p^3P_1$	a
6	2835.94	35251.33	.14	$(^2P)4d^3P_0-(^2P)5p^3D_1$	a,c
6	2829.41	35332.69	.66	$(^2P)4d^3P_2-(^2P)5p^1D_2$	a,c
6	2822.63	35417.55	.52	$(^2P)4d^3F_3-(^2P)5p^3D_3$	a,c
2	2817.53	35481.66	.57	$(^2D)4d^3G_3-(^2D)5p^3D_3$	a,c

Tabla I.- Cont.

15	2814.48	35520.10	19.94	$(^2D)5s^3D_1-(^2D)5p^3P_0$	a
15	2813.97	35526.54	.88	$(^2P)4d^3P_1-(^2P)5p^3D_2$	a,c
25	2811.67	35555.60	.43	$(^2D)5s^3D_1-(^2D)5p^3P_1$	a
20	2806.07	35626.56	.43	$(^2P)4d^3P_1-(^2P)5p^3S_1$	a,c
2	2765.90	36143.94	4.06	$(^2P)4d^3D_2-(^2P)5p^3S_1$	a,c
8	2756.53	36266.80	.78	$(^2P)4d^3P_2-(^2P)5p^3P_2$	a,c
9	2750.35	36348.21	.07	$(^2D)5s^1D_2-(^2P)5p^3D_1$	
6	2730.41	36613.71	.67	$(^2P)4d^3P_0-(^2P)5p^3S_1$	c
7	2715.19	36818.94	.93	$(^2P)4d^3D_2-(^2P)5p^3P_1$	a,c
3	2708.35	36911.88	2.25	$(^2P)4d^3F_2-(^2P)5p^1D_2$	
6	2698.08	37052.39	.58	$(^2P)4d^3F_2-(^2P)5p^1P_1$	c
25	2697.30	37063.13	.22	$(^4S)4d^5D_2-(^4S)5p^5P_1$	a
25	2696.59	37072.89	.85	$(^4S)4d^5D_1-(^4S)5p^5P_1$	a
9	2694.84	37097.01	.13	$(^4S)4d^5D_0-(^4S)5p^5P_1$	
9	2690.25	37160.21	.38	$(^2D)4d^3F_2-(^2D)5p^3D_1$	
40H	2681.19	37285.95	6.09	$(^4S)4d^5D_3-(^4S)5p^5P_2$	a
7	2680.72	37292.35	.75	$(^2P)4d^3D_3-(^2P)5p^1D_2$	a,c
12	2680.31	37298.00	.04	$(^4S)4d^5D_2-(^4S)5p^5P_2$	
9	2679.63	37307.46	.67	$(^4S)4d^5D_1-(^4S)5p^5P_2$	
6	2672.81	37402.73	3.05	$(^2P)4d^3D_2-(^2P)5p^3D_3$	c
12	2670.67	37432.63	.54	$(^2P)4d^1D_2-(^2D)5p^1D_2$	c
3	2658.01	37610.95	1.05	$(^2D)5s^1D_2-(^2P)5p^3D_2$	
3	2653.65	37672.72	.46	$(^2P)4d^3F_3-(^2P)5p^1D_2$	c
1	2650.96	37711.00	0.60	$(^2D)5s^1D_2-(^2P)5p^3S_1$	
9	2648.71	37743.06	.14	$(^2D)4d^3F_4-(^2D)5p^3F_3$	c
3	2641.73	37842.69	.49	$(^2D)5s^3D_3-(^2D)5p^1D_2$	
15	2639.76	37870.92	.87	$(^4S)4d^5D_4-(^4S)5p^5P_3$	
12	2630.66	38001.99	.99	$(^2D)4d^3F_3-(^2D)5p^3F_2$	c
12	2628.93	38026.91	7.47	$(^4S)4d^5D_3-(^4S)5p^5P_3$	
3	2628.04	38039.80	.42	$(^4S)4d^5D_2-(^4S)5p^5P_3$	

Tabla I.- Cont.

1	2623.11	38111.33	.35	$(^2D)4d^3G_3-(^2D)5p^3P_2$	a
3	2615.21	38226.42	.87	$(^2P)4d^3D_3-(^2P)5p^3P_2$	c
1	2609.64	38307.96	.69	$(^2P)4d^3D_1-(^2P)5p^3D_2$	c
8	2604.35	38385.84	.47	$(^2D)5s^1D_2-(^2P)5p^3P_1$	a,c
3	2589.48	38606.30	.58	$(^2P)4d^3F_3-(^2P)5p^3P_2$	c
6	2571.18	38880.97	.85	$(^2D)4d^3F_4-(^2D)5p^1F_3$	c
6	2558.00	39081.32	2.11	$(^2P)4d^3D_1-(^2P)5p^3P_1$	c
6	2555.14	39125.06	.24	$(^2D)4d^3F_3-(^2D)5p^3F_3$	c
6	2554.27	39138.39	.65	$(^2D)4d^3F_2-(^2D)5p^3F_2$	c
6	2553.18	39155.10	.50	$(^2D)4d^3F_3-(^2D)5p^3D_2$	c
1	2546.36	39259.96	60.10	$(^2D)5s^3D_2-(^2D)5p^1D_2$	
6	2537.56	39396.10	.04	$(^2D)4d^3F_4-(^2D)5p^3D_3$	c
3	2525.52	39583.90	4.84	$(^2P)4d^3D_1-(^2P)5p^3P_0$	c
9	2524.97	39592.52	.54	$(^2D)4d^3F_4-(^2D)5p^3F_4$	
12	2516.81	39720.80	.54	$(^2D)4d^1S_0-(^2D)5p^1P_1$	b
3	2511.94	39797.88	8.26	$(^2P)4d^3D_2-(^2P)5p^1P_1$	c
8b1	2494.61	40074.39	.42	$(^2P)4d^3P_1-(^2P)5p^3P_2$	b
2	2482.99	40261.87	.90	$(^2D)4d^3F_2-(^2D)5p^3F_3$	a,c
6	2482.63	40267.62	.87	$(^2P)4d^3P_0-(^2P)5p^1P_1$	b
10	2481.11	40292.36	.16	$(^2D)4d^3F_2-(^2D)5p^3D_2$	c
12	2464.92	40557.03	.05	$(^2D)4d^3F_2-(^2D)5p^1P_1$	b
10	2462.79	40592.01	.05	$(^2P)4d^3D_2-(^2P)5p^3P_2$	c
3	2451.55	40778.17	.14	$(^2D)4d^3F_3-(^2D)5p^3D_3$	c
12b1	2439.79	40974.66	.64	$(^2D)4d^3F_3-(^2D)5p^3F_4$	
10	2431.07	41121.66	.66	$(^4S)5s^3S_1-(^2D)5p^3F_2$	c
10	2428.93	41157.82	.86	$(^4S)4d^5D_1-(^4S)5p^3P_1$	
1	2427.49	41182.31	.14	$(^4S)4d^5D_0-(^4S)5p^3P_1$	
11b1	2403.67	41590.36	.40	$(^4S)4d^5D_3-(^4S)5p^5P_2$	
11w	2402.97	41602.42	.35	$(^4S)4d^5D_2-(^4S)5p^3P_2$	
11us	2402.43	41611.83	.98	$(^4S)4d^5D_1-(^4S)5p^3P_2$	

Tabla I.- Cont.

11	2400.13	41651.81	.73	$(^4S)4d^3D_1-(^2D)5p^3D_1$	
6	2393.55	41766.20	.15	$(^4S)4d^5D_1-(^4S)5p^3P_0$	b
6	2384.70	41921.29	.11	$(^2P)4d^3D_1-(^2P)5p^1D_2$	b
11	2364.72	42275.31	.17	$(^4S)5s^3S_1-(^2D)5p^3D_2$	c
10bl	2349.98	42540.58	.06	$(^4S)5s^3S_1-(^2D)5p^1D_1$	b
2d	2332.72	42855.24	.23	$(^2P)4d^3D_1-(^2P)5p^3P_2$	b
8	2330.30	42899.84	.51	$(^2D)4d^3G_3-(^2D)5p^1D_2$	b
1	2329.25	42919.10	.03	$(^4S)4d^3D_2-(^2D)5p^3D_1$	
11	2322.35	43046.60	.59	$(^2P)4d^1D_2-(^2P)5p^3D_2$	c
8	2317.01	43145.79	6.14	$(^2P)4d^1D_2-(^2P)5p^3S_1$	b
11	2303.01	43408.16	7.92	$(^2D)4d^3F_3-(^2D)5p^3P_2$	
10	2292.29	43611.08	.17	$(^2D)5s^3D_2-(^2P)5p^3D_1$	
11	2291.28	43630.19	.00	$(^4S)4d^3D_1-(^2D)5p^3F_2$	c
3	2281.31	43820.89	1.01	$(^2P)4d^1D_2-(^2P)5p^3P_1$	b
11	2273.74	43966.73	.53	$(^4S)4d^3D_3-(^2D)5p^3F_2$	c
3	2251.31	44404.89	5.13	$(^2P)4d^1D_2-(^2P)5p^3D_3$	b
10	2244.24	44544.78	.58	$(^2D)4d^3F_2-(^2D)5p^3P_2$	b
11	2232.30	44782.90	3.51	$(^4S)4d^3D_1-(^2D)5p^3D_2$	b
11	2230.70	44814.97	5.08	$(^2D)5s^3D_3-(^2P)5p^3D_3$	
10	2227.77	44873.98	4.15	$(^2D)5s^3D_2-(^2P)5p^3D_2$	b
11us	2219.15	45048.25	.40	$(^4S)4d^3D_1-(^2D)5p^1P_1$	
11	2215.61	45120.16	.04	$(^4S)4d^3D_3-(^2D)5p^3D_2$	c
9	2209.70	45240.93	1.07	$(^2D)5s^3D_1-(^2P)5p^3D_2$	b
10	2208.70	45261.40	.15	$(^2D)4d^3F_2-(^2D)5p^3P_1$	b
5	2204.85	45340.37	.62	$(^2D)5s^3D_1-(^2P)5p^3S_1$	b
9	2189.96	45648.58	.57	$(^2D)5s^3D_2-(^2P)5p^3P_1$	b
7	2172.51	46015.30	.49	$(^2D)5s^3D_1-(^2P)5p^3P_1$	b
11	2171.80	46020.37	.55	$(^4S)4d^3D_2-(^2D)5p^3F_3$	c
11w	2170.84	46050.71	.81	$(^4S)4d^3D_2-(^2D)5p^3D_2$	c
15	2162.53	46227.57	.49	$(^4S)4d^3D_3-(^2D)5p^1F_3$	c

Tabla I.- Cont.

9	2162.30	46232.54	.69	(² D)5s ³ D ₂ -(² P)5p ³ D ₃	b
20w	2158.40	46316.16	5.70	(⁴ S)4d ⁵ D ₂ -(² D)5p ¹ P ₁	
12w	2148.59	46527.42	.59	(⁴ S)5s ³ S ₁ -(² D)5p ³ P ₂	
11bl	2142.50	46659.74	60.01	(² P)4d ¹ D ₂ -(² P)5p ¹ D ₂	c
10	2138.70	46742.72	.68	(⁴ S)4d ³ D ₃ -(² D)5p ³ D ₃	c
5	2136.07	46800.21	.34	(² P)4d ¹ D ₂ -(² P)5p ¹ P ₁	b
15w	2129.76	46938.81	9.18	(⁴ S)4d ⁵ D ₃ -(² D)5p ³ F ₄	
11	2117.59	47208.65	.67	(⁴ S)5s ³ S ₁ -(² D)5p ³ P ₀	
12	2116.00	47244.06	.16	(⁴ S)5s ³ S ₁ -(² D)5p ³ P ₁	
9	2100.44	47593.98	4.13	(² P)4d ¹ D ₂ -(² P)5p ³ P ₂	b
11	2096.94	47673.42	.45	(⁴ S)4d ³ D ₂ -(² D)5p ³ D ₃	b
9	2082.50	48003.93	4.08	(² D)5s ³ D ₃ -(² P)5p ³ P ₂	b
4	2078.10	48105.45	6.23	(⁴ S)5s ⁵ S ₂ -(² D)5p ³ F ₃	b
3d	2074.20	48195.91	6.08	(² D)4d ³ F ₃ -(² D)5p ¹ D ₂	b
10	2061.73	48487.40	.57	(² D)5s ³ D ₂ -(² P)5p ¹ D ₂	b
2	2060.62	48513.55	.56	(² D)4d ³ G ₃ -(² P)5p ³ D ₂	b
15w	2046.55	48847.05	.42	4s4p ⁵ ¹ P ₁ -(² D)5p ³ D ₁	b
8	2038.67	49035.91	.93	(⁴ S)4d ³ D ₁ -(² D)5p ³ P ₂	b
3	2026.39	49332.99	.90	(² D)4d ³ P ₂ -(² D)5p ¹ D ₂	b
15w	2024.79	49371.92	2.46	(⁴ S)4d ³ D ₃ -(² D)5p ³ P ₂	b
10	2021.45	49453.60	.67	(² D)4d ³ G ₄ -(² P)5p ³ D ₃	b
11	2010.73	49716.95	7.01	(⁴ S)4d ³ D ₁ -(² D)5p ³ P ₀	b
10	2009.30	49752.45	.50	(⁴ S)4d ³ D ₁ -(² D)5p ³ P ₁	b
	<u>Long. de onda</u>				
	<u>en vacío (Å)</u>				
11	1987.94	50303.18	.23	(⁴ S)4d ³ D ₂ -(² D)5p ³ P ₂	b
10	1960.02	51019.81	.80	(⁴ S)4d ³ D ₂ -(² D)5p ³ P ₁	b
4	1923.84	51979.15	.20	4s4p ⁵ ¹ P ₁ -(² D)5p ³ D ₂	c
6	1918.40	52126.75	.98	(² D)4d ³ G ₃ -(² P)5p ¹ D ₂	b
9	1914.10	52243.67	4.09	4s4p ⁵ ¹ P ₁ -(² D)5p ¹ P ₁	

Table I.- Cont.

8	1892.24	52847.22	.30	$(^2D)4d^1S_0-(^2P)5p^3D_1$	b
9b1	1862.77	53683.24	.81	$(^2D)4d^3F_2-(^2P)5p^3D_1$	b
9	1859.20	53786.52	.57	$(^2D)4d^3F_4-(^2P)5p^3D_3$	b
9	1858.39	53809.96	10.13	$(^2D)4d^3F_3-(^2P)5p^3D_2$	b
9	1851.83	54000.62	.86	$4s4p^5\ ^3P_0-(^4S)5p^5P_1$	b
10us	1846.37	54160.18	.62	$(^4S)4d^3D_3-(^2D)5p^1D_2$	b
6	1844.23	54223.17	2.31	$(^4S)4d^5D_2-(^2D)5p^3F_2$	b
8	1821.99	54884.81	.70	$(^2D)4d^1S_0-(^2P)5p^3P_1$	b
2	1806.86	55344.43	.50	$(^4S)4d^5D_2-(^2D)5p^3F_3$	b
1d	1806.25	55363.19	2.81	$(^4S)4d^5D_3-(^2D)5p^3D_2$	b
3	1805.87	55374.93	.76	$(^4S)4d^5D_2-(^2D)5p^3D_2$	b
7	1794.63	55721.59	.21	$(^2D)4d^3F_2-(^2P)5p^3P_1$	b
50w	1780.47	56164.83	3.59	$4s4p^5\ ^3P_1-(^4S)5p^5P_1$	b
1d	1778.35	56231.60	.62	$4s4p^5\ ^1P_1-(^2D)5p^3P_2$	b
1d	1776.02	56305.62	.33	$(^2D)4d^3F_2-(^2P)5p^3D_3$	b
1	1775.77	56313.50	.66	$(^4S)4d^5D_4-(^2D)5p^1F_3$	b
9	1773.10	56398.19	.41	$4s4p^5\ ^3P_1-(^4S)5p^5P_2$	b
2	1756.54	56930.08	29.80	$(^4S)5s^3S_1-(^2P)5p^3D_2$	b
6	1753.60	57025.47	.35	$(^4S)4d^5D_4-(^2D)5p^3F_4$	
7	1753.47	57029.64	.35	$(^4S)5s^3S_1-(^2P)5p^3S_1$	b
6	1748.79	57182.35	1.95	$(^4S)4d^5D_3-(^2D)5p^3F_4$	b
5	1741.44	57423.50	.55	$(^2D)4d^3F_3-(^2P)5p^1D_2$	b
7	1732.98	57704.01	.22	$(^4S)5s^3S_1-(^2P)5p^3P_1$	b
9	1728.19	57863.88	4.03	$(^2D)4d^1S_0-(^2P)5p^1P_1$	b
10	1718.93	58175.41	.16	$(^4S)4d^3D_1-(^2P)5p^3D_1$	b
8	1718.04	58205.62	6.15	$(^4S)5s^3S_1-(^2P)5p^3P_0$	b
8	1682.42	59438.12	.14	$(^4S)4d^3D_1-(^2P)5p^3D_2$	b
1d	1682.31	59442.04	.46	$(^4S)4d^3D_2-(^2P)5p^3D_1$	b
2	1679.60	59537.86	.69	$(^4S)4d^3D_1-(^2P)5p^3S_1$	b
5	1677.48	59612.97	.89	$4s4p^5\ ^3P_2-(^4S)5p^5P_1$	b

Table I.- Cont.

8	1677.06	59628.12	7.18	$(^4S)4d^5D_2-(^2D)5p^3P_2$	b
3	1676.80	59637.15	6.81	$(^4S)4d^5D_1-(^2D)5p^3P_2$	b
3d	1672.95	59774.48	.67	$(^4S)4d^3D_3-(^2P)5p^3D_2$	b
10	1670.90	59847.96	.71	$4s4p^5\ ^3P_2-(^4S)5p^5P_2$	b
30w,b1	1659.80	60247.88	8.60	$4s4p^5\ ^3P_1-(^4S)5p^3P_1$	
2	1657.87	60318.29	7.89	$(^4S)4d^5D_1-(^2D)5p^3P_0$	b
2	1657.17	60343.65	.75	$(^4S)4d^5D_2-(^2D)5p^3P_1$	b
4	1656.93	60352.54	3.38	$(^4S)4d^5D_1-(^2D)5p^3P_1$	
9	1656.26	60376.87	7.66	$(^4S)4d^5D_0-(^2D)5p^3P_1$	b
3	1651.71	60543.17	.22	$(^4S)5s^3S_1-(^2P)5p^1D_2$	b
6	1647.89	60683.44	.55	$(^4S)5s^3S_1-(^2P)5p^1P_1$	b
100w	1647.36	60702.97	.72	$4s4p^5\ ^3P_1-(^4S)5p^3P_2$	
4	1647.04	60714.68	.49	$(^4S)4d^3D_1-(^2P)5p^3P_0$	b
8	1643.20	60856.73	.89	$4s4p^5\ ^3P_1-(^4S)5p^3P_0$	b
30w	1638.81	61019.59	.78	$4s4p^5\ ^1P_1-(^2D)5p^1D_2$	
10w,us	1635.77	61133.28	.21	$(^4S)4d^3D_3-(^2P)5p^3D_3$	b
8	1626.61	61477.50	.34	$(^4S)5s^3S_1-(^2P)5p^3P_2$	b
8	1611.24	62063.95	.98	$(^4S)4d^3D_2-(^2P)5p^3D_3$	b
5	1586.01	63051.18	.56	$(^4S)4d^3D_1-(^2P)5p^1D_2$	b
8	1582.48	63191.93	.89	$(^4S)4d^3D_1-(^2P)5p^1P_1$	b
3	1573.18	63565.38	.54	$(^4S)5s^5S_2-(^2P)5p^3P_1$	b
2	1569.88	63698.9	7.90	$4s4p^5\ ^3P_2-(^4S)5p^3P_1$	e
8	1562.85	63985.81	.68	$(^4S)4d^3D_1-(^2P)5p^3P_2$	b
10w	1558.79	64151.96	2.02	$4s4p^5\ ^3P_2-(^4S)5p^3P_2$	
50w	1554.74	64319.37	8.86	$(^4S)4d^3D_2-(^2P)5p^1D_2$	b
7	1532.50	65252.63	.98	$(^4S)4d^3D_2-(^2P)5p^3P_2$	b
2	1505.91	66404.98	.54	$(^4S)5s^5S_2-(^2P)5p^1D_2$	b
8	1498.50	66733.35	.38	$4s4p^5\ ^1P_1-(^2P)5p^3S_1$	b
1d	1453.48	68800.18	.32	$(^4S)4d^5D_0-(^2P)5p^3D_1$	b
10w	1427.76	70039.55	.02	$(^4S)4d^5D_1-(^2P)5p^3D_2$	b

Tabla I.- Cont.

8	1425.75	70138.43	.57	(⁴ S)4d ⁵ D ₁ -(² P)5p ³ S ₁	b
9	1423.54	70247.32	.25	4s4p ⁵ 1P ₁ -(² P)5p ¹ D ₂	
30w	1420.70	70387.77	.58	4s4p ⁵ 1P ₁ -(² P)5p ¹ P ₁	b
1d	1412.34	70804.13	3.81	(⁴ S)4d ⁵ D ₂ -(² P)5p ³ P ₁	b
15w	1401.67	71343.25	.35	4s4p ⁵ 3P ₁ -(² D)5p ³ D ₁	b
8	1377.83	72577.86	.29	4s4p ⁵ 3P ₀ -(² D)5p ¹ P ₁	
8	1363.84	73322.15	1.62	4s4p ⁵ 3P ₁ -(² D)5p ³ F ₂	c
6	1355.31	73783.71	.14	(⁴ S)4d ⁵ D ₂ -(² P)5p ¹ P ₁	b
8	1342.73	74474.83	5.13	4s4p ⁵ 3P ₁ -(² D)5p ³ D ₂	c
8	1302.57	76770.93	.92	4s4p ⁵ 3P ₂ -(² D)5p ³ F ₂	c
8	1293.98	77280.69	1.39	4s4p ⁵ 3P ₀ -(² D)5p ³ P ₁	
8	1283.78	77894.39	.17	4s4p ⁵ 3P ₂ -(² D)5p ³ F ₃	c
8	1283.30	77923.70	4.43	4s4p ⁵ 3P ₂ -(² D)5p ³ D ₂	c
6	1278.95	78188.76	9.32	4s4p ⁵ 3P ₂ -(² D)5p ¹ P ₁	
30w	1270.21	78726.98	7.55	4s4p ⁵ 3P ₁ -(² D)5p ³ P ₂	
8	1265.31	79031.51	.88	4s4p ⁵ 3P ₂ -(² D)5p ¹ F ₃	c
8b1	1258.74	79444.41	.12	4s4p ⁵ 3P ₁ -(² D)5p ³ P ₁	
8w	1216.89	82176.33	.85	4s4p ⁵ 3P ₂ -(² D)5p ³ P ₂	
5	1206.34	82894.9	3.42	4s4p ⁵ 3P ₂ -(² D)5p ³ P ₁	e
7	1158.73	86300.72	.63	4s ² 4p ⁴ 1S ₀ -4s4p ⁵ 3P ₁	
6	1148.55	87066.04	.58	4s4p ⁵ 3P ₀ -(² P)5p ³ S ₁	b
3	1106.11	90406.20	.11	4s4p ⁵ 3P ₁ -(² P)5p ³ P ₀	b
2d	1080.15	92579.16	.06	4s4p ⁵ 3P ₂ -(² P)5p ³ D ₂	b
3d	1076.61	92883.96	.51	4s4p ⁵ 3P ₁ -(² P)5p ¹ P ₁	b
6	1071.19	93353.57	.48	4s4p ⁵ 3P ₂ -(² P)5p ³ P ₁	b
2d	1067.49	93677.67	.30	4s4p ⁵ 3P ₁ -(² P)5p ³ P ₂	b
2d	1029.58	97126.78	.60	4s4p ⁵ 3P ₂ -(² P)5p ³ P ₂	b
10	987.30	101286.67	.63	4s ² 4p ⁴ 1D ₂ -4s4p ⁵ 3P ₂	
9	954.78	104736.11	5.93	4s ² 4p ⁴ 1D ₂ -4s4p ⁵ 3P ₁	
8	948.86	105389.26	91.37	4s ² 4p ⁴ 1S ₀ -(⁴ S)4d ⁵ D ₁	

Tabla I.- Cont.

8	919.14	108797.12	6.56	$4s^2 4p^4 {}^1S_0 - ({}^4S) 4d^1 P_1$	
9	897.81	111382.53	.53	$4s^2 4p^4 {}^3P_1 - 4s 4p^5 {}^3P_2$	
9	876.67	114067.39	.33	$4s^2 4p^4 {}^3P_0 - 4s 4p^5 {}^3P_1$	
9	870.84	114831.84	.83	$4s^2 4p^4 {}^3P_1 - 4s 4p^5 {}^3P_1$	
8	862.58	115930.84	.93	$4s^2 4p^4 {}^3P_2 - 4s 4p^5 {}^3P_2$	
9	854.74	116994.14	.56	$4s^2 4p^4 {}^3P_1 - 4s 4p^5 {}^3P_0$	b
9	837.66	119379.56	80.23	$4s^2 4p^4 {}^3P_2 - 4s 4p^5 {}^3P_1$	
2	807.52	123836.42	.30	$4s^2 4p^4 {}^1D_2 - ({}^4S) 4d^5 D_2$	b
9	785.97	127231.58	.86	$4s^2 4p^4 {}^1D_2 - 4s 4p^5 {}^1P_1$	
3d	768.11	130190.26	89.32	$4s^2 4p^4 {}^1S_0 - ({}^2D) 5s^3 D_1$	
5	750.99	133157.72	8.07	$4s^2 4p^4 {}^3P_0 - ({}^4S) 4d^5 D_1$	
7	746.84	133897.75	8.29	$4s^2 4p^4 {}^3P_1 - ({}^4S) 4d^5 D_0$	
8	746.70	133923.04	2.57	$4s^2 4p^4 {}^3P_1 - ({}^4S) 4d^5 D_1$	c
4b1	745.77	134089.89	91.02	$4s^2 4p^4 {}^1D_2 - ({}^4S) 4d^3 D_3$	
4	743.90	134427.07	.55	$4s^2 4p^4 {}^1D_2 - ({}^4S) 4d^3 D_1$	
6	732.26	136562.95	3.26	$4s^2 4p^4 {}^3P_0 - 4s 4p^5 {}^1P_1$	
5	730.27	136935.45	.89	$4s^2 4p^4 {}^1D_2 - ({}^4S) 5s^3 S_1$	
5	729.27	137122.61	.70	$4s^2 4p^4 {}^1S_0 - ({}^2P) 4d^3 D_1$	b
9	722.21	138482.25	80.60	$4s^2 4p^4 {}^3P_2 - ({}^4S) 4d^5 D_2$	
9	722.04	138497.	.00	$4s^2 4p^4 {}^3P_2 - ({}^4S) 4d^5 D_3$	c, e
1	719.85	138918.41	.90	$4s^2 4p^4 {}^1D_2 - ({}^2D) 4d^3 F_2$	e
1d	714.79	139901.41	3.51	$4s^2 4p^4 {}^1S_0 - ({}^2P) 4d^3 P_1$	c
7	714.00	140055.02	.56	$4s^2 4p^4 {}^1D_2 - ({}^2D) 4d^3 F_3$	
7	708.84	141170.44	.47	$4s^2 4p^4 {}^3P_1 - ({}^4S) 5s^5 S_2$	
4	704.84	141875.43	6.16	$4s^2 4p^4 {}^3P_2 - 4s 4p^5 {}^1P_1$	
8	698.05	143255.86	6.15	$4s^2 4p^4 {}^3P_1 - ({}^4S) 4d^3 D_2$	
8	695.61	143759.28	8.95	$4s^2 4p^4 {}^3P_0 - ({}^4S) 4d^3 D_1$	
8b1	691.92	144525.52	3.45	$4s^2 4p^4 {}^3P_1 - ({}^4S) 4d^3 D_1$	
7	687.98	145352.75	.13	$4s^2 4p^4 {}^1D_2 - ({}^2D) 4d^3 G_3$	
8b1	686.26	145717.39	8.87	$4s^2 4p^4 {}^3P_2 - ({}^4S) 5s^5 S_2$	

Tablę I.- Cont.

8	683.68	146267.47	.29	$4s^2 4p^4 3P_0 - ({}^4S)5s^3 S_1$	
8	680.12	147031.67	.79	$4s^2 4p^4 3P_1 - ({}^4S)5s^3 S_1$	
8	676.57	147804.46	.55	$4s^2 4p^4 3P_2 - ({}^4S)4d^3 D_2$	
7	674.84	148183.89	.86	$4s^2 4p^4 1S_0 - ({}^2P)5s^3 P_1$	
7	672.84	148624.44	.62	$4s^2 4p^4 1D_2 - ({}^2D)5s^3 D_1$	
8	672.33	148735.59	.32	$4s^2 4p^4 3P_2 - ({}^4S)4d^3 D_3$	
7	671.17	148992.44	1.54	$4s^2 4p^4 1D_2 - ({}^2D)5s^3 D_2$	
7	671.07	149015.13	4.80	$4s^2 4p^4 3P_1 - ({}^2D)4d^3 F_2$	
4	670.82	149071.90	.85	$4s^2 4p^4 3P_2 - ({}^4S)4d^3 D_1$	
6	670.31	149184.94	5.33	$4s^2 4p^4 1S_0 - ({}^2D)4d^3 S_1$	c
2	667.33	149851.07	.31	$4s^2 4p^4 3P_1 - ({}^2D)4d^1 S_0$	b
7	664.86	150408.34	9.15	$4s^2 4p^4 1D_2 - ({}^2D)5s^3 D_3$	
8	663.05	150818.82	19.10	$4s^2 4p^4 1D_2 - ({}^2P)4d^1 D_2$	c
8	659.72	151579.49	80.19	$4s^2 4p^4 3P_2 - ({}^4S)5s^3 S_1$	
6	651.12	153563.06	.20	$4s^2 4p^4 3P_2 - ({}^2D)4d^3 F_2$	
7	646.41	154699.85	.86	$4s^2 4p^4 3P_2 - ({}^2D)4d^3 F_3$	
1	644.52	155154	3.63	$4s^2 4p^4 1S_0 - ({}^2D)4d^1 P_1$	c, e
1	642.84	155559	8.00	$4s^2 4p^4 1D_2 - ({}^2P)4d^3 D_1$	c, e
7	639.99	156253.37	4.64	$4s^2 4p^4 1D_2 - ({}^2D)5s^3 D_2$	
2d	636.35	157146.79	.61	$4s^2 4p^4 1S_0 - ({}^2D)4d^3 D_1$	c
6	633.63	157821.42	.18	$4s^2 4p^4 1D_2 - ({}^2P)4d^3 D_2$	c
6	633.09	157955.66	6.02	$4s^2 4p^4 3P_0 - ({}^2D)5s^3 D_1$	
5	631.56	158338.97	.81	$4s^2 4p^4 1D_2 - ({}^2P)4d^3 P_1$	c
6	630.04	158719.26	20.52	$4s^2 4p^4 3P_1 - ({}^2D)5s^3 D_1$	
6	628.58	159087.42	.44	$4s^2 4p^4 3P_1 - ({}^2D)5s^3 D_2$	
6	625.75	159806.98	.65	$4s^2 4p^4 1D_2 - ({}^2P)4d^3 F_3$	c
6	625.01	159996.90	.43	$4s^2 4p^4 3P_2 - ({}^2D)4d^3 G_3$	
4	624.27	160186.56	.36	$4s^2 4p^4 1D_2 - ({}^2P)4d^3 D_3$	c
6	622.79	160567.21	6.86	$4s^2 4p^4 1D_2 - ({}^2P)4d^3 F_2$	
6	621.44	160915.01	.00	$4s^2 4p^4 3P_1 - ({}^2P)4d^1 D_2$	c

Tabla I.- Cont.

5	616.72	162147.61	6.45	$4s^2 4p^4 1D_2 - (2P) 4d^3 P_2$	c
5	612.48	163270.26	68.92	$4s^2 4p^2 3P_2 - (2D) 5s^3 D_1$	
5b1	611.18	163618.02	4.74	$4s^2 4p^2 1D_2 - (2P) 5s^3 P_1$	
9	611.10	163639.0	5.84	$4s^2 4p^4 3P_2 - (2D) 5s^3 D_2$	e
5	606.47	164888.98	9.40	$4s^2 4p^4 3P_0 - (2P) 4d^3 D_1$	c
6	605.87	165052.75	3.45	$4s^2 4p^4 3P_2 - (2D) 5s^3 D_3$	
3	604.36	165464.39	3.40	$4s^2 4p^4 3P_2 - (2P) 4d^1 D_2$	c
5	603.85	165603.94	2.79	$4s^2 4p^2 1D_2 - (2P) 5s^3 P_2$	
5b1	603.68	165649.41	53.90	$4s^2 4p^4 3P_1 - (2P) 4d^3 D_1$	c
4	601.14	166350.71	.54	$4s^2 4p^4 3P_1 - (2D) 5s^1 D_2$	
3	600.18	166616.95	9.16	$4s^2 4p^4 1D_2 - (2P) 5s^1 P_1$	
3	597.20	167447.50	.47	$4s^2 4p^4 3P_1 - (2P) 4d^3 P_0$	c
3	596.59	167619.88	20.63	$4s^2 4p^4 1D_2 - (2D) 4d^3 S_1$	c
3	596.41	167669.14	70.21	$4s^2 4p^4 3P_0 - (2P) 4d^3 P_1$	c
3d	595.52	167919.15	7.08	$4s^2 4p^4 3P_1 - (2P) 4d^3 D_2$	c
5	594.10	168321.93	2.53	$4s^2 4p^4 1D_2 - (2P) 4d^1 F_3$	
4	593.70	168434.20	.71	$4s^2 4p^4 3P_1 - (2P) 4d^3 P_1$	c
4	587.53	170202.59	.30	$4s^2 4p^4 3P_2 - (2P) 4d^3 D_1$	c
4	587.38	170248.57	7.52	$4s^2 4p^4 1D_2 - (2D) 4d^3 D_3$	c
4	585.95	170662.35	.76	$4s^2 4p^4 3P_1 - (2P) 4d^3 F_2$	
4	585.14	170899.00	8.94	$4s^2 4p^4 3P_2 - (2D) 5s^1 D_2$	
5	584.64	171043.77	4.33	$4s^2 4p^4 1D_2 - (2D) 4d^3 P_2$	b
6	580.58	172242	.35	$4s^2 4p^4 3P_1 - (2P) 4d^3 P_2$	c, e
4	579.83	172463.10	5.48	$4s^2 4p^4 3P_2 - (2P) 4d^3 D_2$	c
2d	578.21	172946.68	.11	$4s^2 4p^4 3P_0 - (2P) 5s^3 P_1$	
0	578.09	172983	.08	$4s^2 4p^4 1D_2 - (2P) 4d^3 P_1$	c, e
2d	576.06	173591.63	88.96	$4s^2 4p^4 1D_2 - (2D) 4d^1 P_1$	c
2d	575.72	173695.81	.12	$4s^2 4p^4 3P_1 - (2P) 5s^3 P_0$	c
2d	574.95	173927.16	4.84	$4s^2 4p^4 1D_2 - (2D) 4d^3 D_2$	c
5	573.23	174449.21	50.95	$4s^2 4p^4 3P_2 - (2P) 4d^3 F_3$	c

Tabla I.- Cont.

4	571.99	174828.50	30.66	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2P) 4d^3 D_3$	c
4	570.74	175212	1.16	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2P) 4d^3 F_2$	e
7	569.15	175699	8.69	$4s^2 4p^4 \ ^3P_1 - (^2P) 5s^3 P_2$	e
2	565.88	176715.82	.06	$4s^2 4p^2 \ ^3P_1 - (^2P) 5s^1 P_1$	
5	565.64	176791.25	90.75	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2P) 4d^3 P_2$	c
4	565.12	176952	.03	$4s^2 4p^4 \ ^3P_0 - (^2D) 4d^3 S_1$	c,e
2d	562.70	177715.37	6.51	$4s^2 4p^4 \ ^3P_1 - (^2D) 4d^3 S_1$	c
5	560.98	178258	9.01	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2P) 5s^3 P_1$	e
4	558.64	179006.51	7.42	$4s^2 4p^4 \ ^1D_2 - (^2D) 4d^1 D_2$	c
5d	554.79	180249.22	7.09	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2P) 5s^3 P_2$	
4	552.06	181140.08	.23	$4s^2 4p^4 \ ^3P_1 - (^2D) 4d^3 P_2$	b
5	550.53	181643.42	1.93	$4s^2 4p^4 \ ^1D_2 - (^2D) 4d^1 F_3$	b
3d	548.66	182261.26	4.93	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2D) 4d^3 S_1$	c
5	546.69	182920	.36	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2D) 4d^1 P_1$	c,e
4	546.55	182965.48	6.83	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2P) 4d^1 F_3$	
5	544.41	183684	.83	$4s^2 4p^4 \ ^3P_1 - (^2D) 4d^1 P_1$	c,e
8	543.42	184020	.74	$4s^2 4p^4 \ ^3P_1 - (^2D) 4d^3 D_2$	c,e
4us	540.86	184888.70	91.82	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2D) 4d^3 D_3$	c
5	540.79	184915	3.31	$4s^2 4p^4 \ ^3P_0 - (^2D) 4d^3 D_1$	c,e
4	538.54	185686.55	8.63	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2D) 4d^3 P_2$	c
2	531.25	188235.03	3.23	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2D) 4d^1 P_1$	c
6	530.31	188570	69.14	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2D) 4d^3 D_2$	c,e
2d	528.80	189105.30	3.32	$4s^2 4p^4 \ ^3P_1 - (^2D) 4d^1 D_2$	c
4	525.69	190227	6.21	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2D) 4d^3 D_1$	c,e
4	516.38	193654	1.72	$4s^2 4p^4 \ ^3P_2 - (^2D) 4d^1 D_2$	c,e

Símbolos: w, ancha; bl, superpuesta; d, difusa; us, asimétrica hacia las long. de onda cortas

a: Líneas de Humphreys, ref.(2)

b: Línea nueva

c: Línea reclasificada

e: Líneas de Boyce, ref.(1)

f: Nueva asignación

APENDICE B

LISTA DE NIVELES DEL Kr III DE LAS CONFIGURACIONES ESTUDIADAS

Tabla II... Niveles de energía impares del Kr III

Designación	E (cm ⁻¹)
<u>4s4p⁵</u> ³ P ₂	115930.93
³ P ₁	119380.23
³ P ₀	121542.96
¹ P ₁	141876.16
<u>4s²4p³4d</u>	
(⁴ S)4d ⁵ D ₀	138446.69
⁵ D ₁	138470.97
⁵ D ₂	138480.60
⁵ D ₃	138492.55
⁵ D ₄	138649.15
(⁴ S)4d ³ D ₂	147804.55
³ D ₃	148735.32
³ D ₁	149071.85
(² D)4d ³ F ₂	153563.20
¹ S ₀	154399.71
³ F ₃	154699.86
³ F ₄	156081.96
³ G ₃	159996.43
³ G ₄	160414.86
³ G ₅	161108.61
¹ G ₄	162841.05
(² P)4d ¹ D ₂	165463.40
³ D ₁	170202.30
³ P ₀	171995.87
³ D ₂	172465.48
³ P ₁	172983.11
³ F ₃	174450.95

Tabla II.- cont.

	3D_3	174830.66	
	3F_4	175042.98	
	3F_2	175211.16	
	3P_2	176790.75	
	$(^2D)4d^3S_1$	182264.93	
	$(^2P)4d^1F_3$	182966.83	
	$(^2D)4d^3D_3$	184891.82	
	3P_2	185688.63	
	1P_1	188233.23	
	$(^2D)4d^3D_2$	188569.14	
	3D_1	190226.21	
	1D_2	193651.72	
	1F_3	196286.23	
<u>$4s^24p^35s$</u>			<u>$4s^24p^36s$</u>
	$(^4S)5s^5S_2$	145718.87	215522.57
	3S_1	151580.19	221843.40
	$(^2D)5s^3D_1$	163268.92	232898.60
	3D_2	163635.84	233111.63
	3D_3	165053.45	234567.20
	1D_2	170898.94	236183.67?
	$(^2P)5s^3P_0$	178243.52	---
	3P_1	178259.01	249167.98
	3P_2	180247.09	250911.83
	1P_1	181263.46	252461.12

Tabla III.- Niveles de energía pares del Kr III

Designación	E (cm ⁻¹)
<u>4s²4p⁴</u> ³ P ₂	0.0
³ P ₁	4548.4
³ P ₀	5312.9
¹ D ₂	14644.3
¹ S ₀	33079.6
 <u>4s²4p³5p</u>	
(⁴ S)5p ⁵ P ₁	175543.82
⁵ P ₂	175778.64
⁵ P ₃	176520.02
³ P ₁	179628.83
³ P ₂	180082.95
³ P ₀	180237.12
(² D)5p ³ D ₁	190723.58
³ F ₂	192701.85
³ F ₃	193825.10
³ D ₂	193855.36
¹ P ₁	194120.25
¹ F ₃	194962.81
³ D ₃	195478.00
³ F ₄	195674.50
³ P ₂	198107.78
³ P ₀	198788.86
³ P ₁	198824.35
¹ D ₂	202895.94
(² P)5p ³ D ₁	207247.01
³ D ₂	208508.99
³ S ₁	208609.54

Tabla III.- cont.

3P_1	209284.41
3P_0	209786.34
3D_3	209868.53
1D_2	212123.41
1P_1	212263.74
3P_2	213057.53

APENDICE C

LISTA DE LÍNEAS DEL Xe III, Kr II Y Kr III, Y SUS
CORRIMIENTOS POR EFECTO STARK

Tabla IV. Líneas y sus corrimientos para diferentes transiciones del Xe III

Transition	$\sigma_{\text{obs}} [\text{cm}^{-1}]$	$\sigma_{\text{Hum}} [\text{cm}^{-1}]$	$\Delta\sigma [\text{cm}^{-1}]$
$(^2\text{D})5\text{d } ^1\text{P}_1 - (^4\text{S})6\text{p } ^3\text{P}_1$	31275.11	.08	0.03
$(^2\text{P})5\text{d } ^1\text{D}_2 - (^2\text{D})6\text{p } ^3\text{D}_3$	30331.65	.72	-0.07
$(^2\text{P})5\text{d } ^3\text{D}_3 - (^2\text{P})6\text{p } ^3\text{P}_2$	29928.23	.02	0.21
$(^2\text{D})5\text{d } ^3\text{D}_3 - (^2\text{D})6\text{p } ^1\text{D}_2$	28833.32	.46	-0.14
$(^2\text{P})5\text{d } ^1\text{D}_2 - (^2\text{D})6\text{p } ^1\text{F}_3$	28071.09	70.99	0.10
$(^2\text{D})5\text{d } ^3\text{D}_2 - (^2\text{D})6\text{p } ^3\text{P}_2$	25002.02	.06	-0.04
$(^2\text{D})5\text{d } ^3\text{G}_3 - (^4\text{S})6\text{p } ^3\text{P}_2$	23708.53	.27	0.26
$(^2\text{P})5\text{d } ^3\text{D}_1 - (^2\text{P})6\text{p } ^3\text{P}_1$	22628.50	.68	-0.18
$(^2\text{P})5\text{d } ^3\text{D}_2 - (^2\text{P})6\text{p } ^3\text{D}_1$	21337.87	.97	-0.10
$(^2\text{D})5\text{d } ^3\text{S}_1 - (^2\text{D})6\text{p } ^3\text{P}_1$	20288.55	.48	0.07
$(^2\text{P})5\text{d } ^3\text{D}_2 - (^2\text{D})6\text{p } ^1\text{D}_2$	18096.73	.55	0.18
$(^2\text{D})5\text{d } ^1\text{F}_3 - (^2\text{D})6\text{p } ^1\text{F}_3$	16025.88	.70	0.18
$(^4\text{S})6\text{s } ^5\text{S}_2 - (^4\text{S})6\text{p } ^3\text{P}_2$	30581.79	.95	-0.16
$(^4\text{S})6\text{s } ^5\text{S}_2 - (^4\text{S})6\text{p } ^3\text{P}_1$	28825.01	.23	-0.22
$(^2\text{P})6\text{s } ^3\text{P}_1 - (^2\text{P})6\text{p } ^3\text{D}_2$	26473.31	.43	-0.12
$(^4\text{S})6\text{s } ^5\text{S}_2 - (^4\text{S})6\text{p } ^5\text{P}_2$	25486.43	.53	-0.10
$(^4\text{S})6\text{s } ^3\text{S}_1 - (^4\text{S})6\text{p } ^3\text{P}_1$	24683.98	4.08	-0.10
$(^2\text{P})6\text{s } ^1\text{P}_1 - (^2\text{P})6\text{p } ^3\text{S}_1$	22745.84	6.12	-0.28
$(^2\text{D})6\text{s } ^1\text{D}_2 - (^2\text{D})6\text{p } ^1\text{F}_3$	21390.46	.52	-0.06
$(^2\text{D})6\text{s } ^3\text{D}_1 - (^2\text{D})6\text{p } ^3\text{D}_1$	20851.44	.49	-0.05
$(^2\text{D})6\text{p } ^1\text{D}_2 - (^2\text{D})6\text{d } ^1\text{D}_2$	31386.06	5.73	0.33

Tabla IV.- cont.

$(^4S)6p\ ^3P_2 - (^4S)6d\ ^5D_1$	30493.55	.15	0.40
$(^4S)6p\ ^3P_2 - (^4S)6d\ ^5D_2$	30280.20	79.63	0.57
$(^2D)6p\ ^1D_2 - (^2D)6d\ ^3D_2$	29522.92	.28	0.64
$(^2D)6p\ ^3P_1 - (^2D)6d\ ^3D_1$	28790.72	.12	0.60
$(^2D)6p\ ^1P_1 - (^4S)6d\ ^3D_1$	22077.47	6.81	0.66
$(^2D)6p\ ^3F_4 - (^4S)6d\ ^5D_3$	15909.68	.21	0.47
$(^4S)6p\ ^3P_0 - (^4S)7s\ ^3S_1$	30978.08	7.29	0.79
$(^4S)6p\ ^3P_2 - (^4S)6s\ ^5S_2$	30425.07	4.39	0.68
$(^2D)6p\ ^3P_0 - (^2D)7s\ ^3D_1$	29965.27	4.62	0.65
$(^2D)6p\ ^3P_1 - (^2D)7s\ ^3D_1$	27821.04	20.47	0.57
$(^2P)6p\ ^3D_2 - (^2D)7s\ ^3D_3$	22077.47	6.81	0.66
$(^2D)6p\ ^3D_2 - (^4S)7s\ ^3S_1$	21526.33	5.93	0.40
$(^2D)6p\ ^3P_2 - (^4S)7s\ ^5S_2$	15416.46	5.89	0.57

Tabla V.- Líneas y sus corrimientos para diferentes transiciones del Kr II

Transition	$\sigma_{\text{obs}} [\text{cm}^{-1}]$	$\sigma_{\text{Hum}} [\text{cm}^{-1}]$	$\Delta\sigma [\text{cm}^{-1}]$
$(^3\text{P})4\text{d } ^4\text{P}_{3/2} - (^1\text{S})5\text{p } ^2\text{P}_{1/2}$	37367.88	.76	0.12
$(^3\text{P})4\text{d } ^4\text{P}_{5/2} - (^1\text{S})5\text{p } ^2\text{P}_{1/2}$	36885.76	.78	-0.02
$(^3\text{P})4\text{d } ^2\text{D}_{3/2} - (^1\text{S})5\text{p } ^2\text{P}_{3/2}$	35971.74	2.15	-0.41
$(^3\text{P})4\text{d } ^2\text{P}_{3/2} - (^1\text{S})5\text{p } ^2\text{P}_{3/2}$	34316.23	.14	0.09
$(^3\text{P})4\text{d } ^4\text{D}_{1/2} - (^1\text{D})5\text{p } ^2\text{P}_{3/2}$	28421.88	2.24	-0.36
$(^3\text{P})4\text{d } ^4\text{D}_{1/2} - (^3\text{P})5\text{p } ^2\text{S}_{1/2}$	20582.20	.26	-0.06
$(^3\text{P})5\text{s } ^4\text{P}_{3/2} - (^1\text{D})5\text{p } ^2\text{P}_{3/2}$	35109.81	.96	-0.15
$(^3\text{P})5\text{s } ^4\text{P}_{5/2} - (^3\text{P})5\text{p } ^2\text{D}_{3/2}$	29165.46	.66	-0.20
$(^3\text{P})5\text{s } ^4\text{P}_{5/2} - (^3\text{P})5\text{p } ^2\text{P}_{3/2}$	27306.94	7.19	-0.25
$(^3\text{P})5\text{s } ^4\text{P}_{5/2} - (^3\text{P})5\text{p } ^4\text{D}_{3/2}$	25551.02	.31	-0.29
$(^1\text{D})5\text{s } ^2\text{D}_{5/2} - (^1\text{D})5\text{p } ^2\text{D}_{3/2}$	24328.42	.62	-0.20
$(^1\text{S})5\text{s } ^2\text{S}_{1/2} - (^1\text{S})5\text{p } ^2\text{P}_{3/2}$	23125.53	.71	-0.18
$(^3\text{P})5\text{s } ^4\text{P}_{1/2} - (^3\text{P})5\text{p } ^2\text{P}_{3/2}$	22532.29	.41	-0.12
$(^1\text{D})5\text{s } ^2\text{D}_{5/2} - (^1\text{D})5\text{p } ^2\text{F}_{7/2}$	21841.15	.32	-0.17
$(^3\text{P})5\text{s } ^2\text{P}_{1/2} - (^3\text{P})5\text{p } ^2\text{D}_{3/2}$	20991.68	.83	-0.15
$(^3\text{P})5\text{s } ^2\text{P}_{3/2} - (^3\text{P})5\text{p } ^2\text{P}_{1/2}$	20627.13	.28	-0.15
$(^3\text{P})5\text{p } ^4\text{P}_{3/2} - (^3\text{P})5\text{d } ^2\text{F}_{5/2}$	33230.91	.38	0.53
$(^3\text{P})5\text{p } ^4\text{P}_{1/2} - (^3\text{P})5\text{d } ^2\text{P}_{3/2}$	29359.03	8.80	0.23
$(^1\text{D})5\text{p } ^2\text{F}_{5/2} - (^1\text{D})5\text{d } ^2\text{F}_{5/2}$	28537.08	6.79	0.29
$(^1\text{D})5\text{p } ^2\text{P}_{3/2} - (^1\text{D})5\text{d } ^2\text{F}_{5/2}$	27507.17	6.89	0.28
$(^3\text{P})5\text{p } ^2\text{P}_{3/2} - (^3\text{P})5\text{d } ^2\text{F}_{5/2}$	27381.96	.83	0.13

Tabla V.- cont.

$(^3P)5p\ ^4D_{1/2} - (^3P)5d\ ^2P_{1/2}$	26790.25	.06	0.19
$(^1D)5p\ ^2F_{5/2} - (^1D)5d\ ^2G_{7/2}$	26718.44	.32	0.12
$(^3P)5p\ ^2P_{1/2} - (^3P)5d\ ^2P_{3/2}$	26038.76	.58	0.18
$(^1D)5p\ ^2P_{1/2} - (^1D)5d\ ^2P_{3/2}$	25443.08	2.91	0.17
$(^3P)5p\ ^4D_{3/2} - (^3P)5d\ ^4D_{5/2}$	23070.61	.42	0.19
$(^3P)5p\ ^2D_{3/2} - (^3P)5d\ ^4D_{1/2}$	21038.11	7.82	0.29
$(^3P)5p\ ^4P_{3/2} - (^1S)6s\ ^2S_{1/2}$	30150.96	.72	0.24
$(^3P)5p\ ^4S_{3/2} - (^1D)6s\ ^2D_{5/2}$	28848.60	.38	0.22
$(^3P)5p\ ^4P_{3/2} - (^3P)6s\ ^4P_{1/2}$	27589.08	8.95	0.13
$(^3P)5p\ ^4D_{3/2} - (^1S)6s\ ^2S_{1/2}$	26057.96	.79	0.17
$(^3P)5p\ ^4P_{5/2} - (^3P)6s\ ^4P_{3/2}$	23959.87	.66	0.21
$(^3P)5p\ ^4P_{5/2} - (^3P)6s\ ^4P_{5/2}$	23153.59	.40	0.19
$(^3P)5p\ ^4P_{1/2} - (^3P)6s\ ^4P_{3/2}$	22102.58	.36	0.22
$(^3P)5p\ ^4D_{5/2} - (^3P)6s\ ^4P_{3/2}$	21814.61	.39	0.22
$(^3P)5p\ ^4D_{1/2} - (^3P)6s\ ^4P_{1/2}$	21714.30	.09	0.21

Tabla VI.- Líneas y sus corrimientos para diferentes transiciones del Kr III

Transition	σ_{obs} [cm ⁻¹]	σ_{Hum} [cm ⁻¹]	$\Delta\sigma$ [cm ⁻¹]
(² P)4d ³ D ₁ - (² P)5p ³ P ₁	29998.83	.90	-0.07
(² P)4d ¹ F ₃ - (² P)5p ¹ D ₂	29156.35	.14	0.21
(² D)4d ¹ D ₂ - (² D)5p ³ F ₂	28391.98	2.05	-0.07
(² P)4d ³ F ₃ - (² D)5p ¹ D ₂	28065.64	.50	0.14
(² D)4d ¹ D ₂ - (² D)5p ³ D ₂	27238.40	.52	-0.12
(² D)4d ³ F ₂ - (⁴ S)5p ³ P ₁	26065.86	.73	0.13
(² D)4d ¹ D ₂ - (² D)5p ³ D ₁	25260.09	60.27	-0.18
(² D)4d ³ D ₁ - (² D)5p ³ F ₂	23653.10	3.15	-0.05
(² D)4d ³ D ₂ - (² D)5p ³ F ₂	21390.08	89.90	0.18
(² P)5s ³ P ₁ - (² P)5p ³ S ₁	30350.52	.62	-0.10
(⁴ S)5s ⁵ S ₂ - (⁴ S)5p ⁵ P ₂	30059.72	.79	-0.07
(⁴ S)5s ⁵ S ₂ - (⁴ S)5p ⁵ P ₁	29824.95	5.02	-0.07
(² P)5s ³ P ₀ - (² P)5p ³ D ₁	29003.64	.72	-0.08
(² D)5s ³ D ₃ - (² D)5p ³ D ₃	28771.57	.67	-0.10
(² D)5s ³ D ₃ - (² D)5p ³ D ₂	27648.27	.39	-0.12
(² D)5s ³ D ₂ - (² D)5p ³ D ₁	27087.71	.81	-0.10
(² D)5s ¹ D ₂ - (² D)5p ¹ F ₃	24578.86	.99	-0.13
(² D)5s ¹ D ₂ - (² D)5p ¹ P ₁	23221.08	.22	-0.14
(⁴ S)5p ⁵ P ₁ - (⁴ S)5d ⁵ D ₁	40970.68	.34	0.34
(⁴ S)5p ⁵ P ₂ - (⁴ S)5d ⁵ D ₃	40766.20	5.86	0.34
(⁴ S)5p ⁵ P ₂ - (⁴ S)5d ⁵ D ₁	40735.97	.47	0.50
(² D)5p ³ F ₃ - (² D)5d ¹ G ₄	40393.80	.47	0.33

Tabla VI.- cont.

$(^4S)5p\ ^5P_3 - (^4S)5d\ ^5D_3$	40024.77	.50	0.27
$(^2D)5p\ ^3F_4 - (^2D)5d\ ^1G_4$	39682.26	1.78	0.48
$(^4S)5p\ ^3P_2 - (^4S)5d\ ^3D_2$	37292.47	.35	0.12
$(^4S)5p\ ^3P_2 - (^4S)5d\ ^5D_2$	36445.39	.14	0.25
$(^4S)5p\ ^5P_1 - (^4S)6s\ ^5S_2$	39978.19	7.71	0.48
$(^4S)5p\ ^5P_3 - (^4S)6s\ ^5S_2$	39002.04	1.29	0.75
$(^2D)5p\ ^3P_1 - (^2D)6s\ ^3P_2$	38647.14	6.55	0.59
$(^2D)5p\ ^3P_2 - (^2D)6s\ ^1D_2$	38074.89	.61	0.28
$(^2D)5p\ ^3P_1 - (^2D)6s\ ^1D_2$	37358.25	.12	0.13
$(^2P)5p\ ^3P_2 - (^2P)6s\ ^3P_1$	36109.72	.48	0.24
$(^4S)5p\ ^3P_2 - (^4S)6s\ ^5S_2$	35439.00	8.64	0.36

RECONOCIMIENTOS

- Deseo expresar mi más sincero reconocimiento a los doctores Mario O. Gallardo y Jorge G. Reyna Almandos por la dirección de los trabajos realizados y la experiencia brindada a lo largo de estos años.
- Al Centro de Investigaciones Ópticas, a su director, Dr. Mario J. Garavaglia, y a todos sus miembros por el clima de compañerismo y amistad que permitió desarrollar gratamente esta tarea.
- Al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, (CONICET), por la ayuda proporcionada a través de sus becas.
- Por último, y en especial, a mis padres, a mi esposa y a mis hijas, que sin su sacrificio y su apoyo hubiera sido imposible la realización de esta Tesis.



El autor

