

# El cálculo de la temperatura óptima de excitación de las líneas espectrales en un arco de corriente directa

Jorge González Alonso, Ministerio de Educación Superior. Elieser González Pérez, Instituto Superior Pedagógico "Enrique José Varona". Fernando Berty Pérez, Centro Investigaciones Geológicas, Ministerio Industria Básica

## RESUMEN

Se presentan las temperaturas óptimas de excitación para las líneas espectrales últimas de 41 elementos en un plasma de corriente directa. Los cálculos siguen las ideas básicas descritas por Boumans aunque consideran la disociación en los óxidos de los elementos. Se elaboró un programa de computadora que calcula las temperaturas óptimas para tres valores opcionales de la presión electrónica ( $4E-4$ ,  $E-3$ ,  $4E-3$ ) y para otras tres posibles correlaciones de esta con la temperatura del plasma.

## ABSTRACT

Optimal excitation temperatures for the most sensitivity spectral lines of 41 elements in a d.c. plasma are presented. The calculations follows the basic ideas described by Boumans but consider the possible disociation of elements oxide. A computer program was developed and calculate the optimal temperatures for three optional electron pressure values ( $4E-4$ ,  $E-3$ ,  $4E-3$ ) and another three possible correlations with plasma temperature.

## 1. INTRODUCCIÓN

Desde el punto de vista teórico puede encontrarse que la intensidad de una línea espectral alcanza su máximo valor posible para un valor determinado de la temperatura del plasma.

Boumans y L. De Galán (1) calcularon las temperaturas óptimas para diferentes potenciales de excitación y de ionización y no para líneas analíticas de un elemento dado. En sus consideraciones supusieron la diso

ciación total de las moléculas, y tomaron en cuenta la relación establecida entre el denominado parámetro de transporte y el grado de ionización (2), (3).

En lo que sigue presentaremos nuestros resultados para el cálculo de la temperatura óptima de excitación de las líneas analíticas de diferentes elementos. Tomaremos en cuenta, además, el grado de disociación de las moléculas del elemento. Esto se basará en que la disociación de óxidos es el único proceso a tomar en cuenta en el rango de temperaturas usuales en un arco de corriente directa (5000 °K - 7000 °K), y resultará de interés solo para aquellos elementos que formen óxidos con potencial de disociación > 6 eV.

## 2. TEMPERATURA ÓPTIMA DE EXCITACIÓN DE LAS LÍNEAS ESPECTRALES

Para la intensidad relativa de una línea atómica (Y) se deriva:

$$Y = \log K + \log C + \log d - \alpha + \log [(1-\alpha)\beta] - \log [1-\alpha(1-\beta)] - \log Z_a - 5040 (Vq/T) \quad (1)$$

donde

- K - toma en cuenta todas las constantes de la línea
- C - la cantidad absoluta del elemento
- d - define el denominado diámetro efectivo del arco
- $\alpha$  - el grado de ionización
- $\beta$  - el grado de disociación
- $Z_a$  - la función de partición del átomo
- Vq - el potencial de excitación de la línea
- T - la temperatura efectiva del plasma

Las limitaciones de esta expresión se han discutido en (4).

Si derivamos esta expresión con respecto a T, hacemos  $dY/dT = 0$ , y despreciamos la variación del diámetro efectivo del plasma con respecto a la temperatura, se obtiene:

$$\begin{aligned} (5040/mT^2)Vq - (1/Z_a) \frac{dZ_a}{dT} &= (1/m) \frac{d\alpha}{dT} + \left\{ 1/(1-\alpha) \right\} \frac{d\alpha}{dT} - \\ &- (1/\beta) \frac{d\beta}{dT} - \left\{ (1-\beta)/[1-\alpha(1-\beta)] \right\} \frac{d\alpha}{dT} + \\ &+ \left\{ \alpha/[1-\alpha(1-\beta)] \right\} \frac{d\beta}{dT} \end{aligned} \quad (2)$$

Esta expresión es más general que la deducida por L. de Galan y Boumans (1), que se obtiene de esta para el caso  $\beta=1$  y con la aproximación con respecto al potencial de excitación aparente (5).

Para calcular la temperatura óptima de la expresión anterior resulta

atm) y para tres correlaciones de  $p_e$  con T:

a) correlación según Boumans:

$$\log p_e = 5.92(5040/T) + (5/2) \log T - 17.81$$

b) correlación positiva:

$$d(\log p_e)/dT = 0.05 \text{ para } 100 \text{ }^\circ\text{K}$$

c) correlación negativa:

$$d(\log p_e)/dT = - 0.05 \text{ para } 100 \text{ }^\circ\text{K}$$

Además el programa permite considerar o no, el grado de disociación y ocupa alrededor de 8,4 k en una minicomputadora SINCLAIR Zx - 81

De los resultados alcanzados puede concluirse:

1. Para determinados óxidos con  $V_d > 6,5$  eV no puede ignorarse la consideración de la disociación (tabla 1). La diferencia entre los valores de T óptimos calculados considerando la disociación y sin ella, disminuye a medida que aumenta  $p_e$ . Esta diferencia puede resultar grande ( $>100^\circ\text{K}$ ) para líneas de B, Si, La, W, Y. En estos casos el potencial de disociación de los óxidos de estos elementos es  $>7\text{eV}$ .
2. La diferencia entre las temperaturas óptimas calculadas con la correlación propuesta por Boumans y la positiva fue de unos 60 a 140  $^\circ\text{K}$ . La correlación negativa considerada implicó por lo general un aumento de T óptima del orden de los 500  $^\circ\text{K}$ . Esta última dependencia parece más impracticable experimentalmente.
3. En la tabla 3 se muestran los valores calculados para líneas atómicas (por lo general líneas últimas) de 41 elementos y para tres valores de  $p_e$ . Estimamos que ello puede resultar orientador para poder comparar las condiciones de excitación de diferentes elementos.

Tabla 1. Temperatura óptima, considerando disociación y sin considerar disociación

nm	Disociación (sí)			Disociación (no)			
	4E-4	E-3	4E-3	4E-4	E-3	4E-3	
B	249.77	6425	6715	7265	6330	6670	7255
Ge	303.91	5715	5995	6485	5685	5975	6475
La	593.97	5065	5175	5335	3865	4055	4380
P	253.56	6900	7230	7500	6895	7230	7500
Sc	391.18	4605	4765	5055	4555	4645	5005

(Continuación Tabla 1.)

	nm	Disociación (si)			Disociación (no)		
		AE-4	E-3	4E-3	4E-4	E-3	4E-3
Si	288.16	5985	6220	6675	5835	6130	6640
Ti	365.35	4340	4410	4475	3730	3860	4020
W	430.21	5480	5675	6030	5310	5560	5976
Y	467.49	5755	5860	6025	4475	4665	5050
Zr	360.12	5300	5410	5645	4700	4925	5320

Tabla 2. T óptima de las líneas últimas de 41 elementos para 3 valores de la presión de electrones

	nm	4E-4	E-3	4E-3
Ba	553.55	3555	3735	4030
Li	323.27	4170	4395	4785
Ca	422.67	4175	4385	4725
Ti	365.35	4340	4410	4475
Sc	391.18	4605	4765	5055
In	325.61	4605	4855	5305
Al	396.15	4725	4985	5435
Cr	425.43	4760	4995	5395
Nb	407.97	4805	5035	5430
Ga	294.36	4825	5095	5565
Mo	379.82	4925	5160	5555
Mn	403.08	5055	5305	5720
La	593.07	5065	5175	5335
Pb	283.31	5110	5370	5810
V	318.54	5150	5300	6150
Mg	285.21	5155	5395	5820
Fe	371.99	5220	5465	5885
Rh	343.49	5280	5545	6000
Zr	360.12	5300	5410	5645
Sn	283.99	5520	5590	6060
Ta	331.12	5345	5595	6035
Ag	328.07	5435	5715	6185
Co	345.35	5435	5695	6150
Pd	340.46	5455	5725	6190
Bi	306.77	5465	5750	6225
W	430.21	5480	5675	6030

(Continuación Tabla 2.)

	nm	4E-4	E-3	4E-3
Ni	341.48	5525	5785	6265
Cu	324.75	5545	5835	6305
Ge	303.91	5715	5995	6485
Y	467.49	5755	5860	6025
Os	290.91	5795	6080	6555
Cd	326.11	5820	6090	6540
Si	288.16	5985	6220	6675
Sb	323.25	6085	6380	6885
Be	234.86	6135	6425	6920
Pt	306.47	6215	6510	7010
Zn	328.23	6345	6655	7170
B	249.77	6425	6715	7265
Au	242.80	6475	6790	7315
As	278.02	6605	6915	7455
P	253.56	6900	7230	7500

#### BIBLIOGRAFÍA

1. Galán De L. and P.W.J.M.Boumans  
Z. Anal. Chem. 214, 161, 1965.
2. Boumans, P.W.J.M. and L. De Galán  
Anal. Chem. 38, 674, 1966.
3. Galán De L.  
J. Quant. Spectrox, Radiant. transfer, 5, 735, 1965.
4. Boumans, P.W.J.M.  
Spectrochim. Acta 23 B, 805, 1968.
5. \_\_\_\_\_  
Spectrochim. Acta 23 B, 559, 1968.
6. \_\_\_\_\_  
Theory of Spectrochemical Excitation, Hilger and Watts,  
London, 1966.
7. \_\_\_\_\_  
Analytical Emission Spectroscopy, Part II, Marcel Dekker INC,  
New York 9 1972.
8. Galán de L.; R.Smith and J.D.Winefordner  
Spectrochim. Acta 23 B, 521, 1968.

9. Boumans, P.W.J.M.  
Proc. IX Colloq. Spect. Int., Lyon, Vol.2, 84, 1962.
10. Boumans, P.W.J.M. and J.J.Rows  
Collect. Czhechoslov. Chem. Commun., 30, 1268, 1965.

Recibido: 11 de diciembre de 1984.