UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR
DE
INGENIERÍA Y DISEÑO INDUSTRIAL

**ESTUDIO DE LOS PARÁMETROS ATÓMICOS NECESARIOS EN
LA DIAGNOSIS DE LOS PLASMAS FRÍOS GENERADOS EN
PROCESOS INDUSTRIALES**

TESIS DOCTORAL

Cristina Moreno Díaz
Máster en Tecnología Láser

2017

CAMPUS
DE EXCELENCIA
INTERNACIONAL

**DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA ELÉCTRICA,
ELECTRÓNICA, AUTOMÁTICA Y DE FÍSICA APLICADA**

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR
DE
INGENIERÍA Y DISEÑO INDUSTRIAL

**ESTUDIO DE LOS PARÁMETROS ATÓMICOS NECESARIOS EN
LA DIAGNOSIS DE LOS PLASMAS FRÍOS GENERADOS EN
PROCESOS INDUSTRIALES**

Presentada por
Cristina Moreno Díaz
Ingeniero Técnico Industrial
Máster en Tecnología Láser

Dirigida por
Aurelia Alonso Medina
Doctora en Ciencias Físicas

2017

LECTURA DE TESIS

Tribunal nombrado por el Sr. Rector Magnífico de la Universidad Politécnica de Madrid, el día _____ de _____ de 2017.

Presidente:

Secretario:

Vocal 1º:

Vocal 2º:

Vocal 3º:

Realizado el acto de defensa y lectura de la tesis el día _____ de _____ de 2017 en la E. T. S. de Ingeniería y Diseño Industrial.

Los miembros del tribunal han decidido otorgar la siguiente calificación:

Presidente

Secretario

Fdo.: _____

Fdo.: _____

Vocal 1º

Vocal 2º

Vocal 3º

Fdo.: _____

Fdo.: _____

Fdo.: _____

Agradecimientos

De todas las personas a las que debo expresar mi más sincero agradecimiento es justo comenzar con mi directora de tesis, la profesora Aurelia Alonso Medina. Gracias, Aurelia. Aunque empezamos con alguna que otra diferencia de opinión no puedo expresar más que mi enorme gratitud por todo lo que me has enseñado, de lo cual, esta tesis es sólo un ejemplo en lo académico, pero tú me has dado mucho más. Del mismo modo, sería injusto no nombrar al profesor Cristóbal Colón Hernández, cuya predisposición, ánimo e infatigable afán investigador se han convertido para mí en un modelo a seguir.

Debo agradecer al conjunto de la Escuela de Ingeniería y Diseño Industrial, mi antigua “EUITT”, su acogimiento, desde el sótano hasta la cuarta planta, he encontrado apoyo y comprensión donde haya ido. Julián Narbón, Cristina Alía y Rosa Ocaña me han enseñado que la mejor manera de afrontar un problema es con una sonrisa. La dedicación de Juan Mario García, el interés desde mis inicios en la escuela de Albino Arenas, los consejos de Isabel de Andrés, la confianza que han depositado en todos mis proyectos Pedro Armisén y Roberto D’Amato y la sinceridad y ánimos de Emilio Gómez. Son todos igual de importantes para mí. Gracias a todos vosotros.

Aunque ya le he nombrado, quiero dedicarle una mención especial a Julián Narbón, ya que si no me hubiera encontrado con él mi carrera hubiera sido totalmente distinta y no me hubiera planteado dar rienda suelta a ese lado investigador que tenía oculto y que me está llevando a conseguir tantos logros.

Me gustaría plasmar en esta tesis un especial recuerdo a otro profesor que ya no está con nosotros pero que siempre tuvo su despacho abierto para mí y tenía un buen consejo para darme, Sr. Cubeiro: gracias.

No puedo dejar de mencionar al Centro Láser de la UPM y en especial a Jose Luis Ocaña y a Juan Porro, quienes me ayudaron desde el comienzo de mis estudios de máster y que han tenido tanta paciencia conmigo.

Por último, la presente tesis es la culminación de varios años de formación y aprendizaje durante los cuales he recibido el apoyo de muchos profesores, compañeros y amigos. Sería imposible nombrarles a todos, pero sin duda ya saben de mi inmenso agradecimiento por todo su cariño, paciencia y comprensión. Pero sería injusto dejar de reconocer de un modo expreso la total confianza, el absoluto apoyo y la infinita paciencia que mis padres, mi hermano y mi pareja han demostrado desde el amor más sincero. Mamá, Papá, Borja, Alberto, Ramón, Dani, Ana, Juan Carlos... Sin vosotros hubiera sido imposible. Gracias.

Índice general

Resumen	1
Abstract	5
1. Tratamiento de materiales metálicos	9
1.1. Mejora de materiales metálicos. Tratamientos Superficiales	9
1.1.1. Shot Peening	11
1.1.2. Otros tratamientos superficiales	12
2. Laser Shock Processing	17
2.1. Introducción al proceso	17
2.1.1. Los inicios del LSP	19
2.1.2. Aplicaciones Industriales del LSP	20
2.2. Método LSP en el Centro Láser de la UPM	23
2.2.1. Modelo de simulación del LSP	25
2.2.2. Proceso experimental	29
2.3. Material objeto de investigación	33
2.3.1. El aluminio y sus aleaciones	33
3. Dispositivo experimental utilizado	41
3.1. Equipos utilizados	41
3.1.1. Láser de estado sólido de Nd:YAG	41
3.1.2. Espejos y lentes	44
3.1.3. Robot industrial	44
3.1.4. Fibra óptica	45
3.1.5. Monocromador	45
3.1.6. Cámara CCD	46
3.1.7. Sistema de recogida de datos (ordenador)	48
3.2. Montaje y método experimental	50
3.3. Calibración del montaje experimental	53
3.3.1. Calibración en intensidad o eficiencia del sistema	53
3.3.2. Calibración en Longitud de Onda	54
4. Diagnóstico del Plasma	57
4.1. Introducción	57
4.2. Método LIBS	57
4.3. Formación del plasma	59
4.4. Espectroscopía del plasma	62
4.4.1. Anchura y forma de las líneas	63
4.4.2. Evolución y homogeneidad del plasma en estudio	73
4.4.3. Efecto de la autoabsorción	77

5. Procedimiento - Estudio Cuantitativo del plasma	81
5.1. Introducción	81
5.2. Densidad de electrones	82
5.2.1. H-alpha	82
5.3. Temperatura: Gráficos de Boltzmann	83
5.4. Equilibrio Termodinámico Local	85
5.5. Resultados de los parámetros cuantitativos del plasma	86
5.5.1. Cálculo de la Densidad de Electrones	87
5.5.2. Obtención de la temperatura. Gráfico de Boltzman	90
5.6. Comprobación de los resultados: Ecuación de Saha	93
6. Procedimiento de cálculo de los parámetros atómicos	95
6.1. Introducción	95
6.2. Hamiltoniano de interacción y niveles de energía	95
6.2.1. Interacción electrostática	95
6.2.2. Interacción espín-órbita	96
6.2.3. Acoplamiento intermedio	97
6.2.4. Interacción de configuraciones	97
6.2.5. Ajuste de mínimos cuadrados	98
6.2.6. Operadores efectivos	98
6.3. Cálculos ab-initio. Hartree-Fock	99
6.3.1. Correcciones relativistas	100
6.4. Probabilidades de Transición y Vidas Medias	102
6.4.1. Cálculo de la parte radial en la probabilidad de transición	103
6.4.2. Cálculos semiempíricos. Aproximación de Coulomb.	104
6.4.3. Cálculo de la parte angular de la probabilidad de transición	105
6.5. Determinación experimental de probabilidad de transición	105
6.5.1. Razones de ramificación	106
6.5.2. Vidas medias	106
6.6. Anchuras Stark	107
6.7. Uso del programa Cowan	107
6.8. Resultados para las diferentes especies	109
6.8.1. Mg II	110
6.8.2. Mg III	113
7. Conclusiones	135
Bibliografía	137
Apéndices	147
A. Documentación Equipos	149
B. Publicaciones derivadas de la tesis doctoral	193

Índice de figuras

1.1. Ejemplo gráfico del tratamiento Shot Peening.	11
1.2. Bruñido por deformación.	12
1.3. LPB de Lambda Technologies en el tratamiento de álabes de turbina.	13
1.4. Esquema del funcionamiento del tratamiento WaterJet Peening.	13
1.5. Esquema del equipo para el tratamiento Ultrasonic Nano-crystal Surface Modification y del acabado de la superficie.	14
1.6. Imagen y esquema del proceso de Machine Hammer Peening.	15
2.1. Esquemas del proceso LSP en los casos de trabajar sin medio confinante y con este.	18
2.2. Tratamiento de LSP para el álabe de un F-119-PW-100. La trayectoria del haz láser en color rojo ha sido añadido para ilustrar el proceso.	20
2.3. Tratamiento realizado al gancho de parada del avión T-45 por la empresa MIC.	21
2.4. Tratamiento de LSP en barras para implantes de cirugía espinal, Mannava et al. (2011).	21
2.5. Ejemplo del tratamiento de LBI.	22
2.6. Estrategia de trabajo diseñada en el CLUPM para procesos LSP.	24
2.7. Esquemas del sistemas SHOCKLAS utilizado por Porro González (2010) en el CLUPM con la interconexión entre códigos.	26
2.8. Esquemas del sistemas SHOCKLAS utilizado por Correa Guinea (2014) en el CLUPM con la interconexión entre códigos.	27
2.9. Ejemplo de una simulación realizada con el software Helios.	28
2.10. (a) Esquema y (b) imagen del sistema LSP en el CLUPM.	30
2.11. Esquemas del solape de pulsos en el tratamiento de superficies planas para LSP.	32
2.12. (a) Imagen de una probeta tratada con diferentes solapes y los efectos de cada tratamiento en el acabado superficial. (b) Representación de la tensión residual mínima frente a la profundidad.	32
2.13. Series de las aleaciones de aluminio	34
3.1. Imágenes del láser Quanta-Ray Pro 350.	42
3.2. Esquema del interior de un láser de Nd-YAG con sistema Q-Switch.	43
3.3. Esquemas con las medidas características en mm del espejo y la lente utilizados.	44
3.4. Imagen y esquema del rango de movimientos en mm del robot IRB 120.	45
3.5. Imágenes y esquema del monocromador FHR1000.	46
3.6. (a) Imagen cámara CCD iStar 334T. (b) Esquema de funcionamiento de una CCD.	47
3.7. (a) Esquema de una iCCD. (b) Representación de la sensibilidad de una cámara con amplificador y sin amplificador.	47
3.8. Ejemplo de la visualización de los datos obtenidos en un experimento de medida de la línea H_{α}	48
3.9. Imagen de la pantalla con los diferentes parámetros de la cámara CCD que se pueden configurar.	49

3.10. Imagen de la pantalla con los diferentes parámetros de la ventana de medida que se pueden regular.	49
3.11. Imagen de la ventana de con los parámetros de control del monocromador. . . .	50
3.12. Diagrama de bloques del montaje experimental utilizado para la diagnosis del plasma producido en un proceso LSP.	51
3.13. Imagen de la superficie del cráter típico tras un pulso de un experimento LSP tomada en un microscopio confocal.	52
3.14. Fotografía del montaje experimental utilizado para la diagnosis del plasma en un proceso LSP.	52
3.15. Ventanas de medida centradas: (a) $\lambda = 199$ nm y (b) $\lambda = 201$ nm, para la determinación de la dispersión (Disp).	55
3.16. Ventanas de medida centrada en $\lambda = 199$ nm para la determinación del error de cero (ErrCero)).	56
4.1. Esquema de la secuencia de eventos después del impacto de un pulso láser corto enfocado sobre la superficie de una muestra sólida. Siendo: e^- electrones libres; i especies iónicas; a especies atómicas y m las especies moleculares.* Indica las especies excitadas.	60
4.2. Gráfico de la evolución temporal de un plasma inducido por láser.	62
4.3. Representación de un perfil Gaussiano.	68
4.4. Representación de un perfil Lorentziano.	68
4.5. Comparación de los perfiles Gaussiano y Lorentziano con su convolución, perfil de Voigt.	69
4.6. Imagen lámpara de Hg(Ar)	70
4.7. Perfil de la línea de Hg I, longitud de onda es 253.65 nm, para la determinación de la anchura instrumental con una lámpara de Hg (Ar).	71
4.8. Perfil de la línea de Hg I, longitud de onda es 275.28 nm, para la determinación de la anchura instrumental con una lámpara de Hg (Ar).	71
4.9. Perfil de la línea de Hg I, longitud de onda es 296.73 nm, para la determinación de la anchura instrumental con una lámpara de Hg (Ar).	72
4.10. Perfil para la calibración de la anchura instrumental en el rango de medida de la $H\alpha$ obtenido con línea de una lámpara de Ne.	72
4.11. Espectros para la determinación del tiempo y la venta de observación. (a) y (b) Espectros con ventana temporal de 100 ns a diferentes tiempos de retardo. (c) y (d) Espectros medidos con tiempo de retardo de 600 ns y 1000ns, respectivamente, a diferentes ventanas temporales.	73
4.12. Emisión de la línea H_α a diferentes tiempos de retardo después del pulso láser. .	74
4.13. (a) Imágenes de la ventana centrada en 281.6 nm tomada con un retardo después del pulso de $5\mu s$: (i) Resolución espacial del plasma. (ii) Espectro extraído de la misma exposición de las líneas de Mg I, Mg II y Al II en aire. (b) Imágenes de la ventana centrada en 655.8 nm tomada con un retardo después del pulso de $5\mu s$: (i) Resolución espacial del plasma. (ii) Espectro extraído de la misma exposición de las líneas del Cu I y H_α en aire.	75
4.14. Datos obtenidos a diferentes distancias del eje del plasma en una ventana de longitudes de onda de 270–290 nm para el plasma en aire y con un retardo de 1 μs después del pulso.	75
4.15. Perfiles de Voigt obtenidos a diferentes distancias del eje del plasma en una ventana de longitudes de onda de 653–658.5 nm para el plasma en aire y con un retardo de 4 μs después del pulso.	76

4.16. Ejemplo del ajuste a un perfil de Voigt de la ventana de longitudes de onda de 653–658.5 nm para el plasma en aire y con un retardo de 4 μ s después del pulso.	76
4.17. Ejemplo de un plasma no homogéneo donde se observan las diferencias entre las líneas, (Aguilera et al., 2009).	77
5.1. Línea de emisión de la línea H_{α} en las distintas condiciones experimentales con un tiempo de retardo de 5 μ s.	87
5.2. Ajuste de la línea H_{α} a un perfil de Voigt para los distintos tiempos de retardo (a) 5 μ s, (b) 6 μ s, (c) 7 μ s y (d) 8 μ s.	88
5.3. Gráfico de la resolución espacial de la medición de la densidad de electrones a partir del ensanchamiento Stark de la línea H_{α} de Balmer en condiciones LSP.	89
5.4. Espectro producido por el plasma en la ventana de longitud de onda de 281.6 nm a 5 μ s	90
5.5. Gráfico de Boltzman para la exposición de 281,6 nm	92
5.6. Medición de la anchura y desplazamiento experimental a través del ajuste a un perfil de Voigt de la línea H_{α} del plasma con una ventana de 500 ns a 4 μ s de retardo.	94
6.1. Programa Stark. (a) Ejemplo de las líneas de entrada de datos: longitud de onda y energía del nivel. (b) Ejemplo de salida de los datos	109
6.2. Diagrama de Gotrian parcial de los niveles del Mg II correspondientes a algunas líneas espectrales que han sido calculadas en este trabajo.	110
6.3. Diagrama de Gotrian parcial de los niveles de energía del Mg III correspondientes a líneas espectrales que han sido calculadas en este trabajo.	113

Índice de tablas

2.1. Parámetros de programación del robot para tratamientos superficiales con LSP.	31
2.4. Composición de la aleación de aluminio 2024 utilizada en esta tesis.	40
5.1. Densidad de electrones de los plasmas estudiados en este trabajo en diferentes medios y a diferentes tiempos.	88
5.2. Parámetros de autoabsorción calculados para las especies de la ventana de 281.6 nm.	91
5.3. Parámetros de las líneas del Mg II usadas para el cálculo de la temperatura electrónica del plasma en experimentos en aire.	92
5.4. Parámetros de las líneas del Mg I y Mg II usadas en los cálculos con la ecuación de Saha para el plasma en experimentos en aire.	93
6.1. Probabilidades de transición de varias líneas espectrales del Mg II que surgen de configuraciones de $2p^6ns$ ($n = 4 - 7$), $2p^6np$ ($n = 3 - 6$) y $2p^63d$ y vidas medias de los niveles de estas configuraciones. Las longitudes de onda, λ (nm), han sido obtenidas del NIST (Kramida et al. (2015)).	110
6.2. Ensanchamientos, ω (pm), y desplazamientos d (pm) normalizados a $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ para las líneas del Mg III $2p^6 - 2p^5ns$ ($3 - 5$), $2p^5np$ ($3, 4$) - $2p^5ns$ ($3 - 5$) y $2p^5ns$ ($3, 4$) - $2p^5np$ ($3, 4$). Las longitudes de onda, λ (nm), han sido obtenidas del NIST (Kramida et al. (2015)).	114
6.3. Probabilidades de transición de varias líneas espectrales del Mg III que surgen de configuraciones de $2p^5ns$ ($n = 3 - 5$) y $2p^5np$ ($n = 3, 4$) y vidas medias de los niveles de estas configuraciones. Las longitudes de onda, λ (nm), han sido obtenidas del NIST (Kramida et al. (2015)), exceptuando las que presentan un (*) que han sido recogidas del Moore (1958).	128

Resumen

Como es bien conocido, los láseres llevan ya suscitando un gran interés en muchos campos de la ciencia y cada vez son más importantes en la industria. Esta ya no sólo los utiliza en aplicaciones tradicionales como soldadura, corte o ablación, si no que se están implementando como fuente para análisis espectroscópicos; y por otro lado para nuevos tratamientos que mejoran las características de los materiales tanto a nivel superficial como estructural. En este último grupo se encuentra el Laser Shock Peening o Laser Shock Processing (LSP), que es una tecnología emergente para la mejora de propiedades de resistencia mecánica de materiales metálicos de interés estratégico. El desarrollo para su implantación a nivel industrial es objeto de estudio en importantes laboratorios y centros de investigación de todo el mundo, de manera que la misma está, sin duda, llamada a constituir una tecnología básica de tratamiento de componentes mecánicos de gran importancia y alta fiabilidad.

La técnica del LSP consiste en focalizar sobre una pieza metálica un pulso láser de alta energía ($I > 10^9 \text{ W/cm}^2$, $\tau < 50 \text{ ns}$) provocando la vaporización instantánea de su superficie y la generación de un plasma de alta densidad de electrones y temperatura compuesto por las distintas especies ionizadas de los elementos presentes en la pieza y en el ambiente. La alta presión del plasma genera una onda de choque que, por el principio de conservación del movimiento, acaba propagándose dentro de la pieza afectando así a sus propiedades mecánicas. Para aumentar la intensidad de la onda de choque se confina el plasma de tal forma que permanece más tiempo en contacto con la superficie del metal aumentando el impulso efectivo de la onda de choque. El medio confinante usado habitualmente es el agua, aunque también se ha estudiado el uso de vidrios y pinturas.

En los últimos años se ha realizado un importante trabajo experimental a nivel mundial, de cara a obtener las condiciones óptimas para la aplicación del tratamiento y determinar su capacidad de mejorar las propiedades mecánicas del material. Sin embargo, sigue existiendo un vacío importante a la hora de predecir cuáles son las condiciones óptimas de aplicación del LSP en nuevos materiales. Esto es debido en parte a la complejidad de los procesos físico-químicos implicados así como de las transformaciones que tienen lugar, considerando las propiedades reales de los materiales y la dinámica asociada a la interacción láser-materia.

Por ello, desde el Centro Láser de la Universidad Politécnica de Madrid (UPM) se están realizando trabajos orientados a la búsqueda de las condiciones óptimas para la aplicación de esta técnica en determinadas aleaciones industriales. Asimismo se llevan a cabo trabajos que estudian teóricamente algunos de los aspectos involucrados en los procesos físicos presentes, como son las tensiones residuales resultantes de las ondas de choque que se propagan por el interior del material, y que como se explicará más adelante son las causantes de la mejora de las propiedades mecánicas.

Sin embargo, un estudio puramente físico-mecánico del proceso dista de ser suficiente para caracterizarlo completamente y por ello otra de las líneas de investigación que se está desarro-

llo en el Centro Láser es el estudio en profundidad del plasma generado por la interacción del láser con la superficie metálica y la interacción de este con la superficie del material para ver cómo pueden afectar los fenómenos físico-químicos a la interacción mecánica con la onda de choque. Esta línea es la que ha dado lugar a la realización de esta Tesis.

El desarrollo de la presente Tesis se ha enfocado específicamente en la caracterización del plasma generado en un proceso LSP. En concreto el presente trabajo combina un estudio conjunto tanto experimental como teórico para poder diagnosticar los plasmas fríos generados en procesos industriales, en concreto el LSP sobre una aleación de aluminio de la serie 2024.

Esta Tesis está estructurada en 7 capítulos que se describirán brevemente a continuación:

- El *capítulo 1* contiene una breve introducción sobre el estado del arte de los procesos de tratamiento superficial para materiales metálicos, como son el Shot Peening o el Bruñido, indicando sus aplicaciones, ventajas e inconvenientes.
- El *capítulo 2* se centra en el proceso LSP. En la primera parte se describe el proceso y se presenta un histórico de su evolución. Tras esto se realiza una panorámica de las aplicaciones industriales de la tecnología LSP. El siguiente punto se centra en el trabajo que desde el Centro Láser de la UPM se realiza para el estudio del proceso. Aquí se describe la forma de trabajar tanto en la parte experimental como en la simulación del proceso. Por último se presenta una breve revisión sobre el material objeto de investigación.
- En el *capítulo 3* se describe el dispositivo experimental utilizado: láser, monocromador, CCD... También se explica el montaje experimental y el procedimiento de medida, así como todo lo relacionado con la calibración del dispositivo: eficiencia del sistema y calibración en longitud de onda.
- El *capítulo 4* está dedicado a la espectroscopia de ruptura inducida por láser o Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) que es el método escogido para realizar la caracterización del plasma producido. Se explica todo el proceso de formación del plasma y la caracterización espectroscópica de este. Detallándose los efectos que pueden modificar los resultados, como son: la anchura y forma de las líneas, la evolución y homogeneidad del plasma o el efecto de la autoabsorción en determinadas líneas espectrales.
- En el *capítulo 5* se detalla el procedimiento de estudio cuantitativo del plasma, es decir, el cálculo de la densidad electrónica y su temperatura. A continuación se justificará la elección de la línea H_α de la serie de Balmer para la determinación de la densidad de electrones y la elección del método de Boltzmann para la temperatura. Por último se corroborará que el plasma está en Equilibrio Termodinámico Local y se presentarán los resultados obtenidos.
- El *capítulo 6* muestra el procedimiento de cálculo de los parámetros atómicos, como son las probabilidades de transición, de las cuales se determinan las vidas medias, y de las anchuras y desplazamientos Stark con el programa Cowan. En concreto, se muestran los resultados de las líneas de los iones dos y tres del magnesio (Mg II y Mg III), ya que se necesitan para realizar los cálculos del capítulo anterior.
- El *capítulo 7* presenta las conclusiones y logros obtenidos en el desarrollo de esta Tesis, así como las posibles nuevas líneas de investigación.

Finalmente se han añadido dos apéndices:

-
- El *apéndice A* contiene toda la documentación relativa a los equipos utilizados en el desarrollo de esta Tesis. Desde el equipamiento experimental para los procesos de LSP del Centro Láser, hasta las lámparas de calibración y el microscópico confocal utilizados.
 - En el *apéndice B* se presentan las publicaciones que se han derivado de la realización de esta tesis. Estas se han desarrollado tanto en el ámbito ingenieril con publicaciones en el “Journal of Materials Processing Technology”, como en el ámbito de la física atómica, astronómica y astrofísica, y espectroscópica. Publicando en el “Atomic Data and Nuclear Data Tables” (ADNDT), “Monthly Notices of the Royal Astronomical Society” (MNRAS) y en “Physica Scripta”.

En resumen, el objetivo de este trabajo es conseguir realizar el estudio cuantitativo de los parámetros plasma generado en un proceso LSP y de esta forma contribuir a la implementación a nivel industrial de este proceso aumentando su uso en diferentes materiales metálicos.

Por último cabe destacar que gran parte del trabajo realizado y de los resultados obtenidos en esta Tesis se han desarrollado dentro de los Proyectos de Investigación:

- Análisis integrado teórico-experimental de la técnica LSP aplicada a la mejora de propiedades mecánicas y superficiales de componentes metálicos de alta fiabilidad (MAT-2012-37782).
- Tratamiento mediante LSP de aleaciones de magnesio biodegradables y bio-reabsorbibles como método de mejora de sus propiedades mecánicas (MAT-2015-63974-C4-2-R).

Abstract

As it is well known, lasers have been raising great interest in many fields of science and more important in industry. This one does not only use them in traditional applications such as welding, cut or ablation, but implemented as a source for spectroscopic analysis; moreover for new treatments which improve the characteristics of the materials either at a superficial level or at a structural one. In the last one, we can find the Laser Shock Peening or Laser Shock Processing (LSP), an emergent technology for the improvement of the properties of mechanical resistance of metallic materials of strategy interest. The development for its implementation at industrial level is being considered by important laboratories and investigation centres all around the world. Therefore it is undoubtedly going to be part of a basic technology of treatment of mechanical components of great importance and high reliability.

The LSP technique consists of focusing a laser pulse on a high energy metallic piece ($I > 10^9$ W/cm², $\tau < 50$ ns) causing instant vaporization of the surface and the generation of a high density and temperature plasma made of different ionised species of the elements present in the piece and in the environment. Due to the principle of movement conservation, a shock wave is generated by the high pressure of the plasma. This shock wave spreads inside the piece affecting its mechanical properties. In order to amplify the intensity of the shock wave, the plasma is confined so that it stays longer in contact with the surface of the metal what increases the effective impulse of the shock wave. The habitually used confining environment is water, although the use of glass and paint has also been studied.

In the last years, important experimental work has been realized worldwide so as to get the best conditions to apply the treatment and determine its capacity to improve the mechanical properties of the material. Nevertheless, there is an important gap when predicting the best application conditions of LSP in new materials. This is partly due to the complexity of the physicochemical processes implied, as well as the transformations taking place, accounting for the real properties of the materials and the dynamics associated to the interaction laser-material.

For all these reasons, in the Laser Centre of the Universidad Politécnica de Madrid (UPM) there are works on progress focused on the search of optimal conditions in order to apply this technique in certain industrial alloys. Likewise, we are accomplishing works which study theoretically some of the aspects involved in the present physical processes, such as residual stress resulting from the shock waves which spread in the interior of the material, and as it will be explained later, they are the cause of the improvement of the mechanical properties.

However, a research of the process which is purely physical-mechanical is far from being enough to characterize it completely and this is the reason why other line of research being developed in the Laser Centre is the in-depth study of the plasma generated by the interaction of the laser and the metallic surface and the interaction of this one with the surface of the material to see how the physical-chemical phenomenon can affect the mechanical interaction with the shock wave. This line has given rise to this Thesis.

The development of this Thesis has been focused specifically on the characterization of the plasma generated in an LSP process. In particular, this work combines a joint study either experimental or theoretical so as to diagnose cold plasmas generated in industrial processes, concretely the LSP on an aluminium alloy of the series 2024.

This Thesis is structured in 7 chapters briefly described below:

- *Chapter 1* contains a brief introduction about the state of the art of the processes of superficial treatment for metallic materials, such Shot Peening or the Burnishing, indicating the applications, advantages and disadvantages.
- *Chapter 2* is focused on the LSP process. In the first part the process is described and the background of the evolution is presented. After this, an overview of the industrial applications of the LSP technology is realised. The next point is focused on the work made in the Laser Centre of the UPM for the study of the process. Here is a description of the way of work either in the experimental part or in the simulation of the process. At last a brief revision is presented about the material subject of study.
- *Chapter 3* describes the experimental device used: laser, monochromator, CCD... It also explains the experimental assembly and the measure procedure, as well as everything dealing with the calibration of the device: efficiency of the system and calibration in wavelength.
- *Chapter 4* is about the breakdown spectroscopy induced by laser or Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) which is the method chosen for the characterization of the plasma produced. The whole process of the formation of the plasma is explained as well as the spectroscopy characterization. The effects that can modify the results have been described in detail: width and shape of the lines, evolution and homogeneity of the plasma or the effect of the self-absorption in certain spectral lines.
- *Chapter 5* describes in detail the procedure of the quantitative study of the plasma, it is, the calculation of electronic density and the temperature. Full justification will be given to choose line H_α of Balmer's series to determine density and the election of Boltzmann's method for the temperature. Finally, the plasma is confirmed to be on Local Thermodynamic Balance and the results obtained will be presented.
- *Chapter 6* shows the calculation process of the atomic parameters, such as the transition probabilities, whose average life is determined, and also the width and the Stark displacement with the Cowan programme, in particular, the results of the lines of the ions two and three of magnesium (Mg II and Mg III), because they are necessary to realize the calculations of the former chapter.
- *Chapter 7* presents the conclusions and achievements obtained throughout the development of this Thesis, as well as the possible new lines of investigation.

Finally two appendixes have been added:

- *Appendix A* contains the documentation related to the equipments used in the development of this Thesis: from experimental equipment for the LSP processes of the Laser Centre, to the calibration lamps and the confocal microscopy used.

-
- *Appendix B* presents the publications derived from the realization of this Thesis. They have been developed either in the area of engineering with publications in the “Journal of Materials Processing Technology”, or in the area of atomic, astronomic, astrophysical and spectroscopic physics, publishing in the “Atomic Data and Nuclear Data Tables” (ADNDT), “Monthly Notices of the Royal Astronomical Society” (MNRAS) and in “Physica Scripta”.

In sum, the aim of this work is to achieve to realize the quantitative study of the plasma parameters generated in an LSP process and thus to contribute to the implementation at industrial level of this process increasing its use in different metallic materials.

At last it should be noted that a big deal of the work realized and the results obtained in this Thesis have been developed within the Research Projects:

- Análisis integrado teórico-experimental de la técnica LSP aplicada a la mejora de propiedades mecánicas y superficiales de componentes metálicos de alta fiabilidad (MAT-2012-37782).
- Tratamiento mediante LSP de aleaciones de magnesio biodegradables y bio-reabsorbibles como método de mejora de sus propiedades mecánicas (MAT-2015-63974-C4-2-R).

Capítulo 1

Tratamiento de materiales metálicos

Desde los albores de la Humanidad el hombre ha intentado controlar su entorno. Según el antropólogo Service (1973) "...el alimento (y el agua, naturalmente) es la única necesidad material común a toda la humanidad". Para satisfacer esta necesidad las sociedades primitivas han desarrollado técnicas y herramientas que se han ido incorporando a la cultura común del hombre, y que durante miles de años ha formado la sociedad actual, en la que aunque parezca que aquella necesidad primaria está superada, necesitamos seguir avanzando en el desarrollo de nuevas técnicas, nuevas herramientas, expandiendo nuestro conocimiento. En cierto modo, el estudio científico de los materiales, cuya importancia capital en el desarrollo de la ciencia y la técnica son innegables, puede interpretarse como la continuación del interés de aquellas sociedades de cazadores – recolectores a las que se refería el profesor R. Service. Un hito fundamental en la historia reciente de la técnica es la aparición del láser en los años sesenta. Desde entonces, el procesado y tratamiento de los materiales cambió radicalmente. El estudio científico de los materiales y su tratamiento ha adoptado el láser como herramienta fundamental. Y, por supuesto, esto ha hecho que se creen nuevas técnicas capaces de sustituir viejas operaciones por alternativas más eficientes, económicas y sostenibles. Esta Tesis se centra en una de ellas: el tratamiento superficial mediante ondas de choque generadas por láser, o por su acrónimo LSP, del inglés Laser Shock Processing. En este capítulo se introduce la técnica del LSP, se describen los cambios que sufren los materiales al ser tratados con LSP y se compara con otras técnicas de tratamiento superficial que en cierta medida pueden ser tomadas como equivalentes.

1.1. Mejora de materiales metálicos. Tratamientos Superficiales

En el ámbito industrial los materiales sufren cargas de todo tipo y en todas las etapas de su vida útil: desde su conformado, pasando después por el proceso de fabricación de la pieza en el que estén implicados y finalmente en su puesta en servicio. Estas cargas son de naturaleza muy variada: esfuerzos mecánicos, cargas térmicas, agresiones químicas... Las cargas que pueden sufrir los materiales introducen tensiones residuales internas en la estructura del material. Esto es debido a que virtualmente, todos los procesos de conformado y fabricación (fundición, soldadura, laminado, mecanizado, moldeado, etc.) introducen tensiones residuales en los materiales del objeto tratado. También es común su aparición cuando se realizan reparaciones o modificaciones en el objeto durante su servicio, sobre cargas puntuales... Por su ubicuidad y comportamiento, los materiales metálicos son de interés fundamental en la industria. Estos materiales metálicos son habitualmente policristalinos, es decir, están formados por un número elevado de cristales o granos, cada uno con propiedades mecánicas y características propias. Cualquier perturbación en la norma cristalina de un metal se denomina defecto. Los defectos

alteran las propiedades iniciales de los cristales y aumentan la posibilidad de deslizamientos a nivel atómico. Generalmente los primeros deslizamientos se dan en aquellos granos cuyos planos reticulares coinciden en orientación con la de la fuerza aplicada que los causa. Estas fuerzas pueden ser producidas tanto por cargas estáticas como por cargas cíclicas que producen una alteración progresiva de la superficie hasta el fallo del material por rotura. El mecanismo de rotura por cargas cíclicas es conocido comúnmente como fallo por fatiga. Este tipo de fallo es el más usual en la industria Pedrero (2000), y por su interés existe una gran literatura en torno a su estudio, prevención y modelado.

Los efectos de las tensiones residuales pueden ser tanto beneficiosos como perjudiciales, dependiendo de factores tales como su magnitud, su signo y su distribución, comparados con las tensiones inducidas por cargas externas. Por lo general, las tensiones residuales se consideran perjudiciales, y hay muchos casos documentados en los que fueron el factor determinante que contribuyó al fallo por fatiga. Un aspecto particularmente insidioso de las tensiones residuales es que, aunque se puedan medir, no se detectan hasta después del fallo o mal funcionamiento del componente afectado. Esto es debido a que el fallo aparece necesariamente con la pieza en régimen de trabajo, y por lo tanto no resulta económico ni rentable desmontarla para proceder a un análisis. Existen múltiples criterios de fallo y modelos de fatiga *de alto ciclo* que se emplean en el diseño de máquinas para obtener una estimación de la duración hasta el fallo de una pieza. Estos modelos contemplan tanto el modo en que va a trabajar la pieza (tracción, flexión, cargas combinadas...) como las características del material. Y es precisamente el acabado superficial un aspecto determinante. A lo largo de la vida útil de una pieza, la superficie del material es una de las zonas donde más daños recibe, y por lo tanto, mayor es la posibilidad de que se cree un defecto superficial y que se propague a lo largo de toda la pieza.

Por todo lo anterior se deduce la importancia del estudio de los tratamientos superficiales, cuyo objetivo es inhibir el daño del material en servicio a través de la mejora de sus propiedades superficiales. Como en todo proceso técnico, es imprescindible no generar sobrecostos inasumibles en el proceso productivo ni efectos colaterales notablemente perjudiciales. Así se hace imperativo llegar a una solución de compromiso entre el coste del tratamiento superficial y el beneficio generado por el aumento de la vida útil del producto final. En general, y con el fin de eliminar las tensiones residuales, modificar sus propiedades o mejorar sus características, la superficie de los materiales puede ser tratada de diversas formas. Los tratamientos más comunes pueden clasificarse en las siguientes categorías: tratamientos térmicos, termo-mecánicos, termo-químicos y los tratamientos mecánicos en frío.

En los tratamientos térmicos se emplea un flujo calorífico controlado de forma que sólo afecte a un espesor pequeño de la pieza, para así modificar las propiedades superficiales del material. Este flujo calorífico puede ser aportado por una llama, por inducción, por láser, etc... El temple o el recocido son algunos ejemplos. Por otro lado, los tratamientos termo-mecánicos son aquellos en los que además de calentarse la pieza es modificada mecánicamente, como sucede en el laminado en caliente. Los tratamientos termo-químicos, como pueden ser: la cementación, la nitruración, la carbonitruración o la sulfinización; son tratamientos que modifican la composición química superficial del material mediante la adición de otros compuestos o elementos al tiempo que se aporta un flujo calorífico. El último tipo de tratamiento, el tratamiento mecánico en frío, consiste en deformar el material a temperatura ambiente, bien por impacto, por trefilado o por laminación. Unos de los procesos de mayor difusión en la industria es el perdigoneado o "Shot Peening", Kalpakjian and Schmid (2006). Más adelante se demuestra cómo la alternativa actual más interesante a este proceso es el LSP.

1.1.1. Shot Peening

El Shot Peening (SP), es una de las tecnologías de modificación de superficies desarrollada para mejorar la resistencia a la fatiga de componentes mecánicos, generalmente metálicos.

El shot peening, es un tratamiento superficial mecánico realizado en frío. Consiste en golpear la superficie de una pieza metálica con un haz de granalla proyectado de forma controlada, a alta velocidad (40 - 100 m/s). Un esquema de esta técnica se puede ver en la figura 1.1. La granalla suele constituirse por bolas esféricas o perdigones que pueden ser de diferentes materiales (metálicos, cerámicos, vidrios o sintéticos). El impacto de la granalla contra la superficie a tratar, provoca un deslizamiento plástico de sus capas superficiales. Generalmente, el resultado de este impacto afecta sólo a una profundidad de algunas décimas de milímetro, de tal modo que el resto del material no se ve afectado por la deformación plástica. Las capas superficiales, plastificadas, tenderán a alargarse, mientras que aquellas que quedan por debajo intentarán que las anteriores vuelvan a su estado inicial. De este equilibrio de fuerzas resulta que el estrato plástico superficial adopta un estado tensional de compresión que ayudará a la mejora de la vida a fatiga de la pieza tratada. Es decir, que bajo la huella que deja cada proyectil se genera un campo de tensiones residuales a compresión. Pese a sus múltiples similitudes, se entiende que el SP no debe ser confundido con el granallado convencional, pues el objetivo de éste es el acabado superficial, la limpieza y el pulido de materiales.

Figura 1.1: Ejemplo gráfico del tratamiento Shot Peening.

De la descripción anterior se desprende la importancia de realizar el proceso en condiciones de control y repetibilidad, ya que es de gran importancia controlar que tanto la granalla en sí, como su distribución, es decir, la cobertura del tratamiento, sean lo más uniformes posibles, Company (2005). Si no fuera así cada pieza o incluso cada zona de una misma pieza tratada podría manifestar propiedades mecánicas muy diferentes tras aplicar el proceso de manera no controlada. Además, hay otros aspectos que a nivel industrial son importantes, como puede ser el coste de la granalla. La aplicación de este método de manera absolutamente rigurosa conlleva el deshecho de la granalla una vez aplicada, debido a que en el proceso de impacto ésta tiende a deformarse formando aristas, e incluso llega a romperse. Además se debe considerar el uso de perdigones sobre materiales contaminantes o radiactivos que suponen un riesgo de contaminación que genera un residuo de alto riesgo biológico y ambiental. Por otro lado, el constante impacto de los perdigones sobre la pieza tratada genera una superficie rugosa que, dependiendo de la aplicación en la cual vaya a ser empleada, requerirá de algún tipo de mecanizado que conllevará la retirada de una parte de la capa donde el tratamiento es efectivo. Finalmente, como ya

se ha comentado antes, la profundidad alcanzada por el tratamiento no suele superar los 0.3 mm lo cual para determinadas piezas sujetas a severas condiciones de trabajo, puede ser insuficiente.

Las ventajas del SP, en comparación con el LSP y con otras tecnologías de las que se hablará a continuación, se resumen en que es un proceso con bajos costes de tratamiento, emplea equipos robustos y posee la capacidad de realizar barridos en regiones con gran diversidad de tamaños. Además, ya que la presión en la pieza se aplica durante un periodo de tiempo mayor (del orden de μ s frente a los pocos cientos de ns en el LSP), se genera un mayor número de dislocaciones en el material. De este modo se obtiene una mayor dureza en comparación con el resto de tecnologías, Clauer et al. (1981), Masse and Barreau (1995), Peyre et al. (1996), Peyre et al. (1998) y Fabbro and Chouf (2000).

1.1.2. Otros tratamientos superficiales

Los tratamientos LSP y SP no son los únicos empleados en el ámbito industrial, sino que en los últimos años se han ido desarrollando otros tratamientos superficiales de tipo mecánico. Caben destacar en este sentido: el “Low Plasticity Burnishing” (denominado en castellano “Bruñido de baja plasticidad”), el “Waterjet Peening” y el “Ultrasonic Nano-crystal Surface Modification”. Aunque menos conocidos, también son relevantes procesos como el Machine Hammer Peening (MHP), el Ballizing o el Autofrettage.

- El bruñido por deformación surgió como una operación de acabado superficial, principalmente aplicado a ejes rotativos y agujeros profundos para conseguir una mejora de su rugosidad superficial. Sin embargo, a partir de 1970 comenzó a emplearse como tratamiento superficial para la mejora de las propiedades mecánicas de componentes. A partir de entonces, el campo de aplicación del bruñido ha ido creciendo llegándose a aplicar en numerosos sectores como, por ejemplo, en automoción, fabricación de moldes y matrices, aeronáutica e implantes quirúrgicos.

El proceso consiste en presionar la herramienta de bruñido, o bruñidor, sobre las microirregularidades de la superficie y generar un deslizamiento y/o rodadura sobre la superficie a tratar para cubrir el área total de la pieza, ver figura 1.2. De esta forma se consigue una capa de material endurecido por deformación que presenta mejores características tanto físicas como mecánicas respecto al material base.

Figura 1.2: Bruñido por deformación.

Los efectos del bruñido sobre la superficie son la mejora de la rugosidad final, el aumento de la dureza superficial y la introducción de tensiones residuales de compresión. Estos efectos a su vez hacen que la pieza mejore sus propiedades en cuanto a vida a fatiga,

corrosión y resistencia al desgaste.

El bruñido de baja plasticidad, conocido en inglés como “Low Plasticity Burnishing” (LPB) y patentado por Lambda Technologies, es un probado tratamiento superficial para mejorar las propiedades mecánicas de componentes reduciendo daños superficiales, aumentando la vida a fatiga y la resistencia a la corrosión. Esta técnica fue utilizada por primera vez en 1996 por Lambda Technologies y su primera producción comercial comenzó en 2004. El LPB se basa en el principio de funcionamiento del bruñido hidrostático con bola, sin embargo difiere de técnicas convencionales en que se aplica una mínima cantidad de deformación plástica, suficiente para generar el nivel necesario de tensiones residuales que permitan la mejora del comportamiento mecánico del componente. Existen varias geometrías de herramientas de LPB. La más sencilla consiste en una única bola que presiona la superficie. Para el caso de álabes de turbina o paredes delgadas existen herramientas de doble contacto para compensar las fuerzas axiales y eliminar posibles deflexiones de la pieza, figura 1.3. Para el tratamiento de pequeños radios o geometrías restringidas también se diseñan y fabrican herramientas especiales.

Figura 1.3: LPB de Lambda Technologies en el tratamiento de álabes de turbina.

- El “Waterjet Peening” o “Water Peening” (WP) es un tratamiento que consiste en aplicar un chorro de agua a alta presión sobre la superficie del material a tratar, estando este previamente sumergido. El Waterjet Peening es parecido al Shot Peening, salvo en que la presión aplicada al material no proviene del impacto de perdigones sólidos, sino que se basa en el fenómeno de la cavitación. Cuando la superficie del material está sumergida y sobre la misma se aplica el chorro a alta presión, se producen fenómenos de cavitación. Las cavitaciones en el chorro colapsan casi de forma inmediata y se genera un pulso de presión sobre la superficie de la pieza que producen deformación plástica y tensiones residuales de compresión. El acabado superficial es mejor que el conseguido con el SP. Todo lo anterior se muestra en la figura 1.4.

Figura 1.4: Esquema del funcionamiento del tratamiento WaterJet Peening.

Se han realizado estudios comparativos entre el WP y el LSP, mostrando que la zona comprimida con LSP era el doble de profunda que la obtenida tras WP (0.6 mm frente a 0.3 mm, respectivamente). Por ejemplo, Gill et al. (2013). Aunque esta tecnología ya está siendo utilizada por la división de la compañía Mitsubishi, MNES (Mitsubishi Nuclear Energy Systems), y ha sido empleada con éxito para el tratamiento de componentes de reactores nucleares, la modelización matemática del proceso es muy compleja, como queda reflejado en el artículo escrito por Kunaporn et al. (2005) y requiere ser investigado con mayor profundidad en el futuro.

- Otra tecnología en auge es el “Ultrasonic Nano-crystal Surface Modification” (UNSM). Es similar al Shot Peening y al Low Plasticity Burnishing en el sentido de que hay un sólido en contacto con la superficie del material a tratar. El UNSM fue patentado y comercializado por DesignMecha a principios de la pasada década. El principio físico del UNSM se basa en una pequeña esfera de carburo de tungsteno fijada a un sistema ultrasónico capaz de comprimir la superficie del material a una frecuencia de repetición superior a $2 \cdot 10^4$ impactos por segundo, aplicando de 10^3 a 10^4 impactos/ mm^2 . Estos impactos, que pueden ser descritos como micro-trabajo en frío, inducen una deformación plástica severa sobre la superficie del material y la formación, por consiguiente, de una estructura nano-cristalina superficial con un tamaño de grano de 50-200 nm. Esto aumenta la dureza y la ductilidad de la superficie al mismo tiempo que se generan tensiones residuales de compresión, Khan et al. (2016).

Figura 1.5: Esquema del equipo para el tratamiento Ultrasonic Nano-crystal Surface Modification y del acabado de la superficie.

- El Machine Hammer Peening (MHP) se basa en generar pequeños impactos con una esfera de metal duro guiada por un vástago, al cual se le provee de un movimiento axial controlado de pequeña amplitud. Este movimiento se puede generar con un sistema neumático o mediante un actuador electromagnético. El conjunto de bola, vástago y actuador forma una unidad que puede ser implementada directamente en máquinas-herramienta o

dispuesta sobre brazos robotizados, de cara a automatizar el proceso de manufactura y generar trayectorias controladas. Un ejemplo de herramienta, sistema de accionamiento y superficie final se puede ver en la imagen obtenida de un trabajo de Bleicher et al. (2012).

Figura 1.6: Imagen y esquema del proceso de Machine Hammer Peening.

- El Ballizing y el Autofrettage son tecnologías similares. El Ballizing es un proceso de deformación plástica para dotar a diámetros interiores de unas propiedades superficiales y geométricas concretas. Se trata de introducir una esfera de metal duro o cerámica en el interior de un agujero de menor diámetro y hacerla pasar a través de él aplicando una fuerza. La diferencia dimensional entre el diámetro del agujero previo y el de la esfera utilizada es uno de los parámetros críticos del proceso. Un proceso similar en cuanto a concepto, pero en el cual no se emplea un sistema mecánico para generar la deformación, es el Autofrettage. Se trata de generar grandes presiones en el interior de la pieza, de forma que la superficie interior plastifique generando tensiones residuales de compresión una vez la presión se ha liberado. Estos procesos se aplican en la industria aeroespacial, de automoción y de componentes de elevada precisión; también en componentes de misiles, boquillas de inyección en motores de combustión interna, motores eléctricos e instrumentos electrónicos.
- Por último, el Laser Shock Processing (LSP), es un tratamiento superficial mediante ondas de choque generadas por láser en el cual se induce un campo de tensiones residuales de compresión con el objetivo de mejorar las propiedades mecánicas de los materiales metálicos tratados. La generación de ondas de choque mediante láser es posible gracias al empleo de equipos láser pulsados de alta energía. El impacto de un pulso láser de estas características enfocado sobre la superficie de un metal provoca la generación de un plasma de elevada temperatura, que inmediatamente se propaga en la dirección del haz y en sentido contrario. Por conservación de la cantidad de movimiento, la expansión del plasma provoca la generación de una onda de choque que se propaga hacia el interior del material, provocando así una deformación al tiempo que se genera un campo de tensiones residuales de compresión. En el capítulo siguiente se trata en detalle este tratamiento objeto central de estudio en esta tesis.

Capítulo 2

Laser Shock Processing

2.1. Introducción al proceso

Los procesos de tratamiento superficial mediante ondas de choque generadas por láser han demostrado ser una de las alternativas más eficaces a los procesos tradicionales de mejora de propiedades en materiales metálicos, como la resistencia a la fatiga y el desgaste, mencionados en el capítulo anterior. La denominación internacional más empleada del proceso es Laser Shock Processing. Es por ello que en la bibliografía y en la literatura especializada se empleen las siglas LSP, que serán también las que se empleen a lo largo de esta Tesis.

Tal y como ya se indicó, el LSP basa su funcionamiento en los efectos dinámicos asociados a la formación del plasma generado cuando un pulso láser de elevada intensidad (superior a 10^9 W/cm²) y anchura de pulso en el rango de los nanosegundos, es enfocado sobre la superficie del material metálico a tratar. Esto produce, por un efecto de transferencia de presión del plasma en expansión contra la superficie del sólido, una onda de choque que se propaga en el interior del material, alrededor de un milímetro por debajo de la superficie. Así, se inducen tensiones residuales que modifican de forma significativa las propiedades del material, ya que puede llegar a parar, cerrar e incluso dificultar el inicio y la propagación de grietas en la superficie.

La configuración convencional para la aplicación de este tratamiento consiste en la colocación de un recubrimiento sobre el material a tratar para mejorar la absorción y que evite los posibles efectos térmicos. Sobre este recubrimiento debe situarse un medio confinante, normalmente agua, que confiera de cierta inercia al tratamiento y mejore el acoplamiento mecánico de las ondas de choque que se generen. En la figura 2.1 se pueden ver dos esquemas simplificados del tratamiento, dependiendo de si se trabaja con medio confinante o no, y sus regiones características.

Debido al hecho de que el plasma generado en la superficie del material de recubrimiento queda atrapado entre el blanco y la capa de confinamiento, la duración y la amplitud del efecto de transmisión de presión al blanco objeto del tratamiento, quedan multiplicados por factores superiores a la unidad. El material irradiado no sufre un proceso de naturaleza térmica (que normalmente implica modificaciones microestructurales indeseables), sino que tan solo sufre un proceso de naturaleza mecánica cuando la amplitud de la onda de choque supera el límite elástico de Hugoniot (límite de fluencia bajo condiciones de choque).

Sumado a todo lo anterior, se debe tener la precaución de no superar el umbral de ruptura dieléctrica del medio confinante, ya que esto produce la absorción de parte de la radiación láser por el propio medio confinante Berthe et al. (1997), disminuyendo así el efecto del tratamiento.

Figura 2.1: Esquemas del proceso LSP en los casos de trabajar sin medio confinante y con este.

El resultado característico del tratamiento superficial de materiales por ondas de choque generadas por láser consiste en el endurecimiento de una capa de material, típicamente delgada en comparación con el espesor total, bajo la superficie del mismo, y en la inducción de un campo de tensiones residuales de compresión. Estas modificaciones propician una mejora significativa de las propiedades del material tratado, afectadas tanto por el inicio como por la propagación de grietas superficiales.

El principal beneficio que presenta el LSP en comparación con otros tratamientos es principalmente que puede dar lugar a efectos de inducción de tensiones residuales de compresión con penetración por encima de los dos milímetros. Y además, es capaz de generar niveles de tensión cercanos a los generados por chorreo con granalla (“shot peening”) pero sin la limitación de los 0.25 mm propios de la técnica del chorreado. Otro añadido más a considerar es el buen acabado superficial que ofrece en la mayoría de los materiales metálicos. La pequeña afectación de la superficie del material tratado le confiere una morfología exterior que evita, generalmente, la necesidad de cualquier otro tratamiento u operación adicional de mecanizado.

Otra ventaja notable del LSP es que genera una distribución de tensiones residuales sobre el volumen cubierto por la superficie uniforme. Esto ofrece la posibilidad de emplear el tratamiento sobre áreas extensas de material mediante un método de superposición programada de los pulsos del láser, evitando de este modo, la posible incertidumbre de procedimientos basados en el flujo de partículas. Asimismo, es posible controlar directamente la densidad de energía depositada sobre la pieza tratada y realizar tratamientos reiterativos para aumentar la profundidad afectada.

Por último, la naturaleza flexible del tratamiento LSP permite acomodarlo a distintas geometrías y tamaños. Además de poder usarse en combinación con tratamientos más tradicionales (chorreo con granalla, recubrimientos. . .) para conseguir las propiedades en la superficie del material más beneficiosas y al menor coste para cada proceso. Como se puede deducir de todo lo anterior, el tratamiento superficial de materiales de interés técnico e industrial por LSP aporta muchísimas ventajas, y el estudio y caracterización de los fenómenos implicados aporta información útil para su correcta aplicación.

2.1.1. Los inicios del LSP

La técnica LSP lleva siendo estudiada desde los años sesenta, cuando Askar'yan and Moroz (1963), White (1963) y Skeen and York (1968) descubrieron la posibilidad de que la focalización de un pulso de una fuente de elevada energía, ya fuera láser, haz de electrones, microondas, etc. . . generará ondas elásticas en los blancos. Se observaron grandes diferencias al irradiar materiales metálicos con láser con o sin Q-switch, los primeros vaporizaban un menor espesor de material, Ready (1965), y le transmitían una cantidad de movimiento muy superior, Neuman (1964).

El problema con el que se encontraron entonces los investigadores fue que las presiones alcanzadas en estos primeros experimentos no eran lo suficientemente altas, por lo que el rumbo de las investigaciones se centró en la búsqueda de nuevas configuraciones para obtener presiones del orden de 10^6 Pa, Anderholm (1970), y en el desarrollo de láseres capaces de proporcionar mayor intensidad. Posteriormente se planteó aumentar el pulso de presión mediante el empleo de un medio capaz de confinar el plasma pero que a la vez sea transparente a la radiación, como podía ser el cuarzo, Peercy et al. (1970). Los estudios también mostraron que no era necesario trabajar en vacío, lo que abrió las posibilidades de trabajar con otros medios confinantes como el agua, con lo que se pudo incrementar la duración y la presión máxima del pulso en casi un orden de magnitud, O'Keefe et al. (1969) o Yang (1974). Sin embargo se desaconsejó el uso de láseres de CO_2 al trabajar con medios confinantes debido a que la mayoría de los líquidos no son transparentes a la longitud de onda de 10.6 nm, propia de estos láseres, Fairand and Clauer (1979a). Además el láser de CO_2 ya había presentado problemas de ruptura dieléctrica del aire, Hetteche et al. (1973), por lo cual quedó prácticamente descartado para este uso.

En relación a los recubrimientos, también se planteó utilizar un recubrimiento absorbente de la radiación, como pintura, sobre la superficie del material para mejorar sus propiedades, Fox (1974), aunque al aumentar la potencia del láser y de este modo perder importancia las propiedades térmicas del material y/o recubrimiento, dejó de ser necesario, Fairand and Clauer (1976).

A mediados de la década de los setenta, en Estados Unidos se comenzaron a desarrollar los primeros prototipos para la implementación industrial del LSP. Estas primeras instalaciones se plantearon para la mejora de las propiedades de resistencia a fatiga de uniones por apriete, especialmente en el sector aeronáutico. Fue en ese momento cuando se comenzó a denominar "Tratamiento superficial por ondas de choque generadas por láser" (Laser Shock Processing, LSP), Fairand and Clauer (1979b), Clauer et al. (1981) y Clauer et al. (1983). Se inició la investigación de su efecto en diferentes materiales como: aleaciones de aluminio, titanio y aceros inoxidables. La falta de fuentes láser pulsadas de elevada intensidad hizo que a pesar de los buenos resultados obtenidos en las investigaciones, esta tecnología no se implantara a nivel industrial.

A partir de finales de los años ochenta fue cuando el LSP se ha ido implementando en diferentes sectores industriales, especialmente el aeronáutico y automovilístico, como se verá en la siguiente sección, y los trabajos de investigación se han ido orientando hacia el análisis detallado de la fenomenología del proceso, sus parámetros y su optimización, como es el caso de la presente tesis. Aunque inicialmente solo Estados Unidos de América, Francia y Japón se interesaron por el estudio de este nuevo tratamiento, enseguida se expandió su estudio a otros equipos de investigación de todo el mundo. Actualmente se celebra de manera anual un congreso internacional, "International Conference on Laser Peening and Related Phenomena", enfocado a la difusión de las nuevas aplicaciones, investigaciones realizadas, etc. sobre el LSP, cuya última edición ha tenido lugar en Sudáfrica, durante el mes de noviembre de 2016.

2.1.2. Aplicaciones Industriales del LSP

Entre las principales piezas mecánicas para las cuales el LSP aporta ventajas tecnológicas con relación a las técnicas convencionales, se encuentran componentes de alto valor añadido. Mejorar las prestaciones de elementos ya existentes o realizar tratamientos correctores en equipos en funcionamiento, supone a las empresas grandes beneficios tecnológicos.

Al hablar de aplicaciones industriales de los procesos LSP el área que más beneficios ha obtenido y que ha sido pionera en la investigación es la aeronáutica. El principal motivo es que la técnica del LSP aumenta la resistencia al fallo por fatiga que puede generar el impacto de objetos extraños a alta velocidad en el daño conocido como FOD (Foreign Object Damage) en los álabes de turbopropulsores.

En este área, ejemplos concretos de piezas que han sido tratadas mediante LSP y que ya han sido utilizadas con éxito son los álabes de los motores turbofán desarrollados por las compañías General Electric (GE) y Pratt&Whitney para aviones militares de fueron tratados por las empresas Metal Improvement Company (MIC) y LSP Technologies, como puede apreciarse en la imagen 2.2. Los más conocidos son: el turbofán F110-129, F110-100 y F-110-132 de GE para el caza F-16 o el turbofán F119 de Pratt-Whitney para el caza F-22. También se ha utilizado en los álabes de aviones comerciales como en los del turbofán Trent 500 producido por Rolls-Royce para el Airbus 340.

Figura 2.2: Tratamiento de LSP para el álabe de un F-119-PW-100. La trayectoria del haz láser en color rojo ha sido añadido para ilustrar el proceso.

Por otro lado también se está implantando con éxito para el conformado del fuselaje de las alas de los Boeing 787-8 y como se puede ver en la figura 2.3 en el tratamiento del gancho de parada o amonaje del caza F-35 y del avión de entrenamiento T-45,(Dane (2013)).

Figura 2.3: Tratamiento realizado al gancho de parada del avión T-45 por la empresa MIC.

Como es de esperar, en otros sectores industriales como el de la producción de energía eléctrica también ha sido implantado el tratamiento mediante LSP en los álabes de las turbinas de gas y de vapor, y en el rotor de generadores geotérmicos, Clauer (2013). Otra aplicación en este sector es el tratamiento de los aros de refuerzo y las vasijas de reactores nucleares de agua en ebullición, Sano et al. (1997). Actualmente se está trabajando para modificar el procedimiento e intentar transmitir los pulsos mediante fibra óptica para tratar la vasija y la soldadura en “J” de la base del reactor, Sano et al. (2006). También en el sector automovilístico está aplicando este tratamiento a diversos componentes, con vistas a su futura automatización y posterior inclusión a la cadena de montaje.

Se ha descubierto recientemente el gran potencial que tiene en los implantes biomédicos, Mannava et al. (2011) y Mannava (2013), por lo que se está evaluando su uso en barras para implantes en neuro-cirugía espinal.

Figura 2.4: Tratamiento de LSP en barras para implantes de cirugía espinal, Mannava et al. (2011).

Además de su utilización como alternativa al Shot Peening, también han surgido otro tipo de aplicaciones de carácter más específico como por ejemplo:

- Tratamientos de WLSP (Warm Laser Shock Peening), cuyo objetivo es mejorar el comportamiento a fatiga mediante la aplicación de tratamiento LSP a alta temperatura, alrededor de unos 250 °C.
- Tratamiento de LSP en micro-mecanizado, en el cual se realiza el tratamiento de LSP en microcomponentes para eliminar las tensiones residuales generadas en el proceso de micromecanizado.
- Macro y micro conformado por LSP, lo que es conocido como Macro o Microscale Laser Shock Forming. El primero permite embutir piezas sin necesidad de fuerzas externas, solo mediante el empleo de los pulsos LSP. Mientras que el segundo se emplea en fabricación de sistema micro-electromecánicos (MEMS) que requieren el uso de aleaciones metálicas.
- Laser Shock Assisted Direct Imprinting (LSADI), puesto que el pulso láser genera una gran fuerza de compresión, el LSP se utiliza para imprimir patrones superficiales en aleaciones con memoria de forma.
- Laser Bond Inspection (LBI), esta nueva tecnología de LSP Technologies, proporciona un método no destructivo, medible y eficaz para validar repetidamente la seguridad y la integridad de las uniones adhesivas. Las técnicas de inspección no destructivas convencionales, tales como ultrasonidos, no detectan la fuerza de adhesión relativa. Esto es debido a que la naturaleza de los materiales no cambia ni muestra anisotropías sensibles por los sistemas habituales de ecografía. El LBI ha demostrado ser muy eficaz en uniones enfrentadas (*kissing bonds*), ver figura 2.5.

Figura 2.5: Ejemplo del tratamiento de LBI.

Esta breve panorámica sobre las aplicaciones del LSP da una idea del crecimiento exponencial que tiene esta técnica, tanto en el número de componentes y materiales candidatos a ser sometidos a este tratamiento, como a nuevas posibles aplicaciones. Esto pone de manifiesto una vez más la importancia de realizar avances en los dominios más fundamentales del proceso, para comprender los principios físicos que afectan a la correcta aplicación del método y cuyo conocimiento proporcionará ventajas técnicas y económicas.

2.2. Método LSP en el Centro Láser de la UPM

El Centro Láser de la Universidad Politécnica de Madrid (CLUPM) lo forman un conjunto de instalaciones e investigadores centrados en la investigación y desarrollo de la tecnología láser y sus aplicaciones. Dentro de las múltiples líneas de investigación que tienen lugar en sus laboratorios, aquellas centradas en los tratamientos láser de materiales han generado multitud de publicaciones.

Paralelamente al desarrollo de nuevas aplicaciones industriales de los láseres y en concreto del LSP, tanto en el CLUPM como en el resto de la comunidad investigadora, se ha investigado la caracterización de los efectos producidos por la interacción láser-materia, lo cual ha posibilitado aumentar el conocimiento de los procesos físicos que tienen lugar en estos fenómenos. Sin embargo, hay pocos estudios que hayan tratado exhaustivamente la físico-química del proceso. Esto es debido a la gran complejidad de la fenomenología física involucrada en los procesos LSP, con comportamientos no lineales tanto en la generación y dinámica del plasma como en la propagación de las ondas de choque en el material.

Desde un punto de vista experimental, la optimización de parámetros en un proceso LSP no puede realizarse mediante un procedimiento de prueba y error, debido al elevado coste de los experimentos y su duración. Por tanto, la etapa experimental no puede definirse como una única parcela de trabajo, sino que debe estar integrada junto a otras etapas de estudio y modelado para garantizar la obtención de unos resultados adecuados en el menor tiempo y con el menor consumo de recursos posibles.

Viendo esta problemática desde el punto de vista teórico, incluso con los nuevos sistemas de cálculo, los cuales son cada vez más rápidos, y los programas de análisis de problemas no lineales por elementos finitos, que son cada vez más sofisticados; es muy complicada la parametrización de las variables del proceso LSP para llegar a implementar un método predictivo de cálculo o simulación. Especialmente compleja resulta el modelado de las variables relacionadas con la generación del plasma y los efectos hidrodinámicos asociados a su aparición.

Por todo lo anterior, la caracterización del proceso LSP se está intentando abordar desde una doble perspectiva, teórica y experimental, que debe proporcionar resultados compatibles y a su vez complementarios.

Para ello es indispensable establecer una estrategia de trabajo que incluya, además de la parte experimental, una etapa previa de simulación empleando un modelo predictivo y una etapa posterior de obtención y análisis de resultados provenientes de distintos ensayos físico-químicos de los materiales tratados. En la figura 2.6 se muestra un esquema de la estrategia de trabajo diseñada en el CLUPM para procesos LSP (Porro González (2010)).

Figura 2.6: Estrategia de trabajo diseñada en el CLUPM para procesos LSP.

Considerando como origen la etapa de simulación numérica, lo primero que se debe valorar son los fenómenos físicos que se producen durante el proceso de LSP. Estos fenómenos son muy variados por lo que se hace necesario emplear diferentes modelos numéricos para el estudio completo del proceso.

La forma de proceder para simplificar la etapa de cálculo es realizar una modelización por separado de los distintos fenómenos para poder conectarlos por aquellas magnitudes físicas más significativas que son el resultado de fases anteriores o precursoras de las siguientes.

El resultado final es un modelo global que integra diferentes etapas de análisis y que proporciona unos resultados que pueden ser directamente aprovechados en la etapa experimental, evitando de esta forma la realización de gran cantidad de ensayos prueba-error que no servirían para nada.

Al igual que en la etapa numérica, en la etapa experimental están implicados gran número de parámetros que modifican el resultado final del proceso. Basándose en los datos proporcionados por el cálculo numérico es posible reducir el número de experimentos, pero aun así es importante determinar, realizando estudios experimentales extensos, qué parámetros prácticos son los óptimos para cada tipo de material a tratar.

Una vez finalizados estos procesos es evidente que se hace necesaria una nueva etapa mediante la cual se comprueben cuáles son los resultados producidos por el proceso de LSP en los blancos utilizados y determinar la calidad del tratamiento realizado. Esta tercera etapa integra diferentes análisis mecánicos y químicos.

En las siguientes secciones se va a realizar una descripción del modelo de simulación empleado y del proceso experimental que se lleva a cabo en el Centro Láser de esta universidad.

2.2.1. Modelo de simulación del LSP

Para el estudio de los procesos LSP, en el CLUPM se ha desarrollado una metodología de simulación que tiene en cuenta los procesos físicos implicados. Estos fenómenos físicos relacionados con la interacción láser-materia que se producen en los procesos LSP se pueden describir esquemáticamente a través de las siguientes etapas:

- i) El láser incide sobre el material calentándolo hasta alcanzar temperaturas que producen vaporización.
- ii) El vapor se calienta al interactuar con la radiación hasta ionizarse convirtiéndose en plasma.
- iii) Los electrones libres presentes en el plasma absorben fuertemente la radiación aumentando la presión en el mismo. Si el plasma no se encontrase confinado se expandiría la conversión, de forma eficaz, de esta energía en un pulso de presión.
- iv) Cuando el pulso láser finaliza, el plasma comienza a enfriarse y a reducir su presión. La presencia de un medio confinante puede hacer que la presión decaiga más lentamente.
- v) El pulso de presión genera ondas de choque que se propagan en el seno del material, produciendo deformaciones plásticas y tensiones residuales de compresión.

A partir de esta descripción han proliferado numerosos esquemas computacionales que van desde simples balances unidimensionales de masa, cantidad de movimiento o energía, mediante tratamientos analíticos que predicen órdenes de magnitud de variables macroscópicas, hasta simulaciones numéricas tridimensionales extremadamente complejas y con un alto grado de realismo, las cuales presentan una visión tan exacta como sea posible del fenómeno. Para tener una visión global de los distintos métodos empleados en el estudio de la interacción láser-materia en aplicaciones láser se puede consultar la referencia Ocaña (2013). En concreto la modelización que se está usando actualmente consta de tres partes bien diferenciadas:

- 1) Análisis de la ruptura dieléctrica del medio confinante.
- 2) Análisis de la interacción láser-materia, que incluye el estudio de la hidrodinámica del plasma y el cálculo del pulso de presión generado sobre la superficie del material.
- 3) Análisis de la propagación del pulso de presión en el material y sus permanentes sobre el mismo: Tensiones residuales y deformaciones plásticas.

Esta división del proceso según los distintos fenómenos que tienen lugar constituye la estructura básica sobre la que se han desarrollado y adaptado los distintos códigos numéricos que conforman el modelo y el intercambio de información entre los mismos. Esta metodología es necesaria y fundamental para simplificar la modelización del proceso LSP en su conjunto. El modelo global desarrollado en el CLUPM, denominado genéricamente SHOCKLAS (Ocaña et al. (2004), Morales (2004), Morales et al. (2008) y Porro González (2010)), se centra en la optimización de la predicción de la presión generada a través de las ondas de choque en el interior del material, debido a que es un parámetro fundamental a nivel industrial. Con ello se reducirían los tiempos y costes de producción, ya que no se tendrían que realizar ensayos previos ni para ajustar el proceso a las presiones y material deseado, ni para la determinación de las tensiones residuales que se obtendrían tras el proceso. Este modelo SHOCKLAS se ha ido mejorando y sofisticando a lo largo de los años y el desarrollo de esta tesis es un eslabón más en esta evolución.

Figura 2.7: Esquemas del sistemas SHOCKLAS utilizado por Porro González (2010) en el CLUMP con la interconexión entre códigos.

Como se puede ver en la figura 2.7, en Ocaña et al. (2004), Morales (2004), y Porro González (2010), el modelo SHOCKLAS estaba constituido por los siguientes códigos: El código DRUPT (Morales (2004)) para el análisis de la ruptura dieléctrica del agua como medio confinante; el código HYDRA (Ocaña et al. (1998), Molpeceres et al. (2000), Ocaña et al. (2000) Ocaña et al. (2000)) para el análisis de la interacción láser-materia, hidrodinámica del plasma; el código LSPSIM [Morales (2004)] para el cálculo de la variación temporal del pulso de presión y, por último, los códigos HARSHOCK 1D y HARSHOCK 3D (programado en ABAQUS®) (Morales (2004)) para la simulación de la propagación del pulso de presión en el material, determinando las tensiones residuales finales presentes en el blanco.

Respetando la misma metodología de modelización, Correa Guinea (2014) mejoró el sistema manteniendo o ampliando algunos códigos, mientras que otros han sido sustituidos por códigos más avanzados. El esquema de esta metodología de simulación se puede ver en la Figura 2.8, donde también aparecen representadas tanto las variables de entrada como las de salida. Esta metodología es la que se está siguiendo actualmente en el CLUMP.

Como se observa en la figura 2.8 se ha simplificado el modelo, de tal manera que se trabaja únicamente con tres códigos:

- i) DRUPT: analiza la ruptura dieléctrica del agua.
- ii) HELIOS®: simula los fenómenos hidrodinámicos que tienen lugar en este proceso de formación del plasma y su expansión entre el medio confinante y el blanco metálico, permitiendo

obtener el pulso de presión generado mediante LSP y los valores del resto de variables termodinámicas del plasma.

- iii) HARSHOCK 3D: el código, programado en ABAQUS®, permite analizar la propagación de la onda de choque en el material, así como la inducción de deformaciones y tensiones residuales que cambian propiedades del material. Permite el análisis tridimensional en geometrías reales a diferencia de códigos anteriores.

Figura 2.8: Esquemas del sistemas SHOCKLAS utilizado por Correa Guinea (2014) en el CLUPM con la interconexión entre códigos.

La introducción del programa HELIOS® supone una gran mejora en el proceso. Este paquete es un código radiativo-magnetohidrodinámico 1D que se utiliza para simular la dinámica de la evolución del plasma MacFarlane et al. (2006). Teniendo en cuenta como se ha mencionado anteriormente que nuestro modelo está orientado a la optimización en la predicción de la presión generada en el material durante el proceso LSP, la utilización que se ha realizado hasta el momento de el software HELIOS® ha sido orientada a tal propósito y ha demostrado su eficacia en la predicción de esta, Morales et al. (2009). Los resultados que se obtienen para este tipo de simulaciones se pueden ver en la figura 2.9.

Figura 2.9: Ejemplo de una simulación realizada con el software Helios.

El problema de este tipo de código es que asume la existencia de un plasma completamente ionizado (en promedio, con un electrón arrancado de cada átomo), es decir, no tiene en cuenta el proceso de generación del plasma. Además al ser un código hidrodinámico no tiene en cuenta las propiedades mecánicas de los medios y se encuentra limitado al estudio de ondas de presión de gran intensidad.

Todo lo anterior, sumado a otras limitaciones, como que el código del programa HELIOS® sea unidimensional, que no tenga en cuenta el ataque químico de las especies ionizadas, o que el enfoque que se ha llevado hasta el momento por parte del CLUPM haya sido el de centrarse en parámetros mecánicos; motiva el que aún puedan identificarse algunas discrepancias con relación a datos experimentales. Por ello, se abrió una nueva línea de investigación para la caracterización experimental de los parámetros del plasma en procesos LSP, la cual ha dado lugar a esta tesis.

Actualmente no hay valores experimentales de temperatura o de densidad de electrones del plasma para este tipo de procesos. Esto es debido a que en el LSP el plasma se genera en el medio confinante, como ya se ha explicado, y este lo apantalla, por lo que con las técnicas de análisis habituales inicialmente no se obtienen datos concluyentes.

Para corroborar los indicios de que los valores obtenidos en la simulación no eran del todo correctos se estudiaron las tres técnicas más habituales, las cuales son:

- i) El estudio de la evolución del plasma mediante una cámara CCD intensificada de alta velocidad [Mukai et al. (1995) y Berthe et al. (1997)]. Esta técnica permite la visualización de la expansión del plasma y obtener información de su velocidad. A partir de estos datos es posible determinar la presión del plasma y su temperatura.
- ii) El estudio de la evolución del plasma mediante la técnica de umbroscopía [Ocaña et al. (1998)]. Permite visualizar la expansión del plasma y de las ondas de choque. De estos datos y con un análisis teórico se puede inducir la presión y temperatura del plasma.

- iii) El estudio mediante espectroscopía de plasmas [Griem (1974)]. Esta técnica se utiliza en estudios de otras aplicaciones industriales de los láseres pero prácticamente no existe ningún trabajo en el que se emplee para estudiar los procesos LSP, Walters et al. (1987). Mediante su uso se puede obtener información de la composición de las especies presentes en el plasma y de sus temperatura y densidad de electrones. Con esta información y los modelos de simulación, es posible determinar con mayor precisión la presión generada en la interacción. El problema que presenta esta técnica es la necesidad del confinamiento del plasma.

A partir de la información obtenida de artículos en los que se realizan análisis mediante espectroscopia de plasmas (tercera técnica de la enumeración), se ha observado que en el caso de trabajar sin agua (experimentos LIBS), el software HELIOS® predice temperaturas más bajas que los medidas experimentalmente Sherbini et al. (2012), alrededor de un orden de magnitud menor, mientras que para los valores de densidad de electrones los valores que se obtienen son mucho más altos que los de la bibliografía, Sherbini et al. (2006). Esto, a priori confirma la presencia de inconsistencias en el método en el que se realiza el proceso de simulación en el programa y en la comparación de los resultados obtenidos con las observaciones experimentales.

En la presente tesis se ha desarrollado un sistema para la medida experimental de la densidad de electrones y la estimación de la temperatura del plasma en un proceso LSP, en el caso concreto de utilizar un flujo de agua como medio confinante. Este se explicará en los siguientes capítulos y permitirá próximamente una nueva etapa de mejora del modelo SHOCKLAS considerando los valores de temperatura y densidad de electrones obtenidos experimentalmente en este trabajo.

2.2.2. Proceso experimental

Para saber si los resultados que se han obtenido durante la etapa de simulación son correctos o no, se realizan ensayos experimentales. Varias probetas son tratadas mediante LSP con los parámetros que han resultados del proceso de modelización. Tras esto y dependiendo de los objetivos iniciales que se planteen, se realizan diferentes análisis químicos y mecánicos a dichas probetas. De esta forma se determina si se han obtenido los resultados esperados en las propiedades del material y su acabado. A continuación se va a describir el proceso experimental de realización de ensayos mediante el tratamiento de LSP que se lleva a cabo en el CLUPM.

Como en cualquier proceso LSP todo empieza con el láser, en este caso un láser de Nd: YAG con Q-switch. Normalmente se utiliza en la longitud de onda fundamental de 1064 nm, y las características del pulso pueden ser: varios nanosegundos de duración a una frecuencia de unos 10 Hz, la energía por pulso medida en la superficie de la muestra suele ser de varios julios y la irradiación láser en el blanco es superior a 10^8 W/cm^2 .

Como se puede ver en la figura 2.10(b) el pulso láser se redirige a través de un espejo y es seguidamente enfocado mediante una lente biconvexa de 20 cm de distancia focal hacia la muestra, ambos instrumentos ópticos presentan características adecuadas al láser. La muestra está acoplada a un brazo robótico que facilita su colocación y tratamiento. En el siguiente capítulo se hablará en detalle de la disposición y características de cada uno de los elementos que componen el proceso.

Una vez dispuesta la pieza, el pulso láser debe atravesar el medio confinante. La forma mediante la cual se confina el plasma es uno de los puntos críticos más importantes en el proceso de LSP. El recubrimiento empleado como medio confinante debe ser transparente a la

Figura 2.10: (a) Esquema y (b) imagen del sistema LSP en el CLUPM.

radiación láser. Por su disponibilidad y flexibilidad el agua es ideal para confinar el plasma en expansión. Una vez que se ha decidido emplear agua como medio confinante se hace necesario buscar la mejor forma de suministrarla a la zona de formación del plasma en el blanco. En el CLUPM se han estudiado varias alternativas de montaje hasta dar con la más eficiente, que es la utilizada actualmente. En el primer montaje experimental el confinamiento se realizaba sumergiendo completamente el blanco en una vasija llena de agua. El aspecto final de las probetas tratadas con esta configuración era bueno, pero los resultados posteriores de medida de tensiones residuales mostraban unos valores de compresión muy bajos o incluso nulos en algunos casos. Esto era debido a que el coeficiente de absorción del agua es muy elevado a 1064 nm y, por tanto, si existe un espesor de agua mayor de los 18 cm al blanco prácticamente no le llega energía y el tratamiento no produce los resultados esperados. En el caso de trabajar con el segundo armónico (532 nm) el problema se minimiza ya que el coeficiente de absorción del agua para esta longitud de onda es menor. Una alternativa a la inmersión de la probeta es la de suministrar un fino chorro de agua justo al lado del lugar donde se produce el impacto del pulso láser. De esta manera, se genera una película de agua en la zona de generación del plasma, suficiente como para ejercer su función confinante y reduciendo las pérdidas por absorción del agua al mínimo.

El montaje experimental que se utiliza actualmente para la realización del proceso LSP dispone de un caudalímetro que permite regular la cantidad de agua suministrada por la boquilla. Aunque el caudal no es un parámetro que influya sustancialmente en el tratamiento sí que debe estar dentro de unos márgenes determinados para que se garantice la formación de una película de agua que confine adecuadamente el plasma generado.

Una vez realizada la elección del medio confinante, el siguiente factor a tener en cuenta es el empleo de un recubrimiento de sacrificio absorbente. Este recubrimiento se deposita en la superficie a ensayar con el fin de mejorar la absorción del de la radiación láser incidente y proteger la superficie del material de los posibles efectos térmicos. En este punto no hay un acuerdo entre los diferentes grupos de investigación. Mientras los grupos que emplean para realizar el tratamiento LSP dispositivos láser de alta energía y trabajan sin superposición de pulsos han demostrado eficacia del empleo de un recubrimiento de sacrificio absorbente, [Company (2008)]. Por su parte, los grupos que realizan el proceso con láseres de menor energía, necesitan llevar a cabo la superposición programada de los pulsos para poder cubrir todo el área a tratar. En este caso cuando un pulso láser llega al recubrimiento absorbente lo elimina, por lo que el segundo pulso, el cual caerá en parte sobre la zona de impacto del anterior, se encontrará con una superficie en parte con recubrimiento y en parte sin él, lo que afecta a la uniformidad del tratamiento.

Debido a esta controversia, autores como Peyre et al. (2007) han realizado estudios para determinar las diferencias entre realizar el proceso de una manera o de otra, y aunque para la mejora de alguna característica puede ser mejor emplear recubrimiento o no, a grandes rasgos las diferencias no son demasiado significativas. Por otro lado, en industrias como la aeronáutica o la aeroespacial, donde como ya se ha comentado antes esta técnica tiene su mayor cuota de mercado, el empleo del recubrimiento no es recomendado ya que posteriormente necesitará ser eliminado retardando y aumentando el coste de fabricación. En el caso particular del CLUPM, la técnica empleada es la de sin recubrimiento y se han realizado varios estudios para saber la influencia de la forma del solape en la medida de las tensiones residuales y el acabado superficial de la muestra (Porro et al. (2007), Porro González (2010), Correa Guinea (2014)...).

Ya que la frecuencia de irradiación del láser del CLUPM es fija e igual a 10 Hz, es decir que el láser emite 10 pulsos por cada segundo, dependiendo del número de pulsos que se quieran introducir por unidad de área será necesario mover la pieza a tratar a una velocidad mayor o menor. De esta forma cuando se quiera introducir un número mayor de pulsos por unidad de área será necesario aumentar el solape, lo que se consigue disminuyendo la velocidad a la que se mueve el blanco y por tanto la distancia entre un pulso y el siguiente se verá recortada. En la tabla 2.1, se representan los parámetros típicos que se están utilizando para el tratamiento de placas planas mediante LSP, y en la figura 2.11(a), se muestra el esquema de solape correspondiente, y en (b) el recorrido que se debe programar en el robot para cubrir una determinada área. Se observa en la figura 2.11(b) que para garantizar la homogeneidad del tratamiento en la zona central se dejan unos milímetros en la entrada y la salida del pulso láser.

Tabla 2.1: Parámetros de programación del robot para tratamientos superficiales con LSP.

Solape (pulsos/cm ²)	Velocidad (mm/s)	x (mm)
625	4	0.4
900	3.33	0.33
2500	2	0.2

Figura 2.11: Esquemas del solape de pulsos en el tratamiento de superficies planas para LSP.

Una muestra de una probeta de aluminio 2024 tratada con estos parámetros se puede ver en la figura 2.12(a). Una vez estudiada mediante el método del taladro empleando bandas extensométricas, se determinaron las tensiones residuales de cada tipo de solape, Porro et al. (2007). Se puede decir que el tratamiento a 2500 pulsos/cm² es el que proporciona mayores valores de compresión, ver figura 2.12(b). Además hay que tener en cuenta que, dependiendo del material, el tratamiento puede afectar de manera significativa al acabado superficial. De esta forma, para algunas aplicaciones en las que se necesiten acabados superficiales concretos habrá que llegar a un compromiso entre la mejora de las propiedades mecánicas, el acabado superficial y los posibles sobrecostos por posteriores tratamientos.

Figura 2.12: (a) Imagen de una probeta tratada con diferentes solapes y los efectos de cada tratamiento en el acabado superficial. (b) Representación de la tensión residual mínima frente a la profundidad.

Por último la probeta a ensayar, como ya se ha dicho anteriormente, está colocada en un brazo robótico de seis ejes que nos permite no solo colocar la pieza en la posición adecuada respecto de la distancia focal de la lente, sino que nos permite programar su movimiento de tal forma que por un lado se pueda realizar el solape de los pulsos de la manera más uniforme posible, como se acaba de mencionar anteriormente, y por otro tratar piezas con cualquier geometría.

2.3. Material objeto de investigación

Los materiales metálicos más utilizados en la industria son las aleaciones de aluminio, titanio y aceros inoxidable. Por ello, cualquier tratamiento que mejore sus propiedades, ya de por sí bastante buenas, es bien recibido en el ámbito industrial y se fomenta su investigación y desarrollo.

Ya en los años setenta, basándose en los primeros experimentos sobre la propagación de ondas de choque en metales a partir de pulsos láser de elevada intensidad -los inicios del LSP- se demostró que estos pulsos podrían producir cambios beneficiosos en las propiedades y microestructura de aleaciones de aluminio Fairand et al. (1972). Además, las aleaciones de aluminio ya ocupaban en esa época un lugar destacado en la industria del transporte y la automoción, por sus características especiales de alta dureza, ligereza, resistencia mecánica y conductividad térmica, entre otras, y en la actualidad es uno de los materiales más usados en la creación de aeronaves.

Por lo anteriormente desarrollado y teniendo en cuenta la relación del Centro Láser con la industria aeronáutica a través la empresa Airbus, se decidió emplear para los ensayos probetas de aluminio.

2.3.1. El aluminio y sus aleaciones

El aluminio es un material de gran importancia en la industria actual. Es el tercer elemento más abundante en la corteza terrestre y desde las primeras civilizaciones se utilizaban abobes ricos en aluminio en la creación de cerámicas y sales de aluminio para la elaboración de medicinas y colorantes. Esto era así debido a que no se encuentra puro en la naturaleza, sino generalmente formando parte de minerales como la bauxita.

Pero hasta 1808 cuando Sir Humprey Davy le dio nombre como elemento y ochenta años más tarde, en 1886 simultáneamente Paul Heroult, francés, y Charles Martin Hall, estadounidense, hallaron el procedimiento industrial para su obtención mediante electrólisis. Hasta ese momento el aluminio era considerado un metal de lujo, cuyo precio se redujo notablemente al comenzar su producción industrial.

El aluminio puro es un metal blanco brillante, el cual cristaliza en red cúbica centrada en las caras (FCC. Refleja bien la radiación electromagnética del espectro visible e infrarrojo. Tiene un peso específico muy bajo, con una densidad de 2700 kg/m^3 . Su bajo punto de fusión (660°C) y una temperatura de ebullición de 2450°C facilitan su fundición y moldeo. Además es un buen conductor eléctrico (entre 35 y $38 \text{ m}/(\Omega \cdot \text{mm}^2)$) y térmico (80 a $230 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$), estos valores son alrededor de un 60% de los del cobre.

La propiedad química más destacada del aluminio es su gran afinidad con el oxígeno, esto es debido a que el estado normal de oxidación es Al^{+3} , lo que hace que reaccione con el oxígeno de la atmósfera formándose con rapidez una delgada capa gris mate de alúmina (Al_2O_3), de algunas centésimas de micra, que protege al resto del material de la oxidación. Por ello resiste a la intemperie, a la acción del vapor de agua, al ataque de ácido nítrico y a muchos otros compuestos químicos. Sin embargo le afecta el ataque con ácido sulfúrico, clorhídrico, y las soluciones salinas.

A nivel mecánico el aluminio puro es un material de débil resistencia mecánica y gran duc-

tilidad y maleabilidad, esto permite forjarlo, trefilarlo en hilos delgadísimos y laminarlo en láminas o panes muy finos, de hasta $0.4\ \mu\text{m}$. Para mejorar estas propiedades se suele alea con otros elementos, principalmente: magnesio, manganeso, cobre, zinc y silicio, a veces se añade también titanio y cromo. Esto mejora sus propiedades y lo hace un material aún más versátil.

Por otro lado, actualmente es un material muy económico, debido tanto a su gran abundancia, ya mencionada, como a que es 100 % reciclable, pudiéndose reciclar varias veces sin que pierda cualidades. Este último factor ha hecho que el aluminio adquiriera en los últimos años un gran atractivo en múltiples procesos de fabricación.

Según la norma UNE-EN 573 la clasificación y designación del aluminio y sus aleaciones debe estar constituida correlativamente de los siguientes elementos:

- el prefijo EN seguido de un espacio en blanco;
- la letra A, en referencia al aluminio;
- la letra W, que representa el hecho de ser productos de forja;
- un guión;
- una designación internacional consistente en cuatro dígitos que representan la composición química y, si fuese necesario, una letra que identifica una variante nacional; esta designación es otorgada por la *Aluminum Association* por el procedimiento del registro internacional.

EJEMPLOS: EN AW-5052
EN AW-5052A

El sistema de designación numérica de los cuatro dígitos que constituyen la composición de la aleación clasifica las aleaciones en series de la 1xxx a la 9xxx, se describe en la figura 2.13:

Figura 2.13: Series de las aleaciones de aluminio

De esta forma el primer número de la serie designa la composición principal de la muestra, mientras que el segundo dígito indica si hay modificaciones de esa aleación. Si el segundo dígito es un cero, indica que se trata de la aleación original; los números del 1 al 9, empleados

consecutivamente, designan sucesivas modificaciones de esta.

En la serie 1xxx, los dos últimos dígitos señalan el porcentaje mínimo de aluminio. Estos dos dígitos coinciden con los dígitos situados a la derecha de la coma en el porcentaje mínimo de aluminio, cuando éste se expresa con una precisión del 0.01 %. En el resto de series, de la 2xxx a la 8xxx, estas dos últimas cifras carecen de significación especial, sino que sirven tan sólo para identificar las diferentes aleaciones de aluminio dentro del grupo.

Las composiciones y características más importantes de cada serie son las siguientes (Castro (2016)):

Serie 1xxx - Aleaciones de Aluminio Puro (99.00 %). Tiene muchas aplicaciones, especialmente en los campos eléctrico y químico. Estos porcentajes en aluminio se caracterizan por una excelente resistencia a la corrosión, alta conductividad térmica y eléctrica, bajas propiedades mecánicas, y excelente trabajabilidad.

Serie 2xxx - Aleaciones de aluminio-cobre. En estas aleaciones el principal elemento aleante es el Cu, pero a veces también se le añade Mg. Las características de esta serie son: buena relación dureza-peso y mala resistencia a la corrosión. En lo referente a la primera característica es necesario añadir que algunas de las aleaciones de esta serie tienen que ser sometidas a tratamientos térmicos de solubilidad y a veces de envejecimiento, para mejorar sus propiedades mecánicas. De esta forma la aleación tiene unas propiedades mecánicas semejantes, incluso a veces superiores, a las de un acero bajo en carbono. Respecto a la segunda característica este material suele pasar por un proceso de galvanizado con aluminio de alta pureza o con aleaciones de la serie 6xxx, de modo que se protegen de la corrosión tanto superficial como intergranular. Estos aluminios se usan en aplicaciones en las que es necesario una alta relación dureza-peso y buena resistencia al calor, como en el fuselaje de aviones, turbinas. . .

Serie 3xxx – Aleaciones de aluminio-manganeso. Estas aleaciones presentan un 20 % más de dureza que el aluminio puro. Este bajo valor se debe a que el manganeso solo puede añadirse de forma efectiva en un 1.5 %. Estos aluminios son muy usados en aplicaciones que necesiten una dureza media y buena trabajabilidad, como son las botellas de bebidas, utensilios de cocina, intercambiadores de calor. . .

Serie 4xxx – Aleaciones de aluminio-silicio. El principal elemento de aleación es el silicio que suele variar del 5 al 20 %. El silicio endurece al aluminio y, sobre todo, aumenta su fluidez en la colada y su resistencia a la corrosión. Estas aleaciones son muy dúctiles y resistentes al choque; tienen un bajo coeficiente de dilatación y una elevada conductividad calorífica y eléctrica, pero son difíciles de mecanizar por la naturaleza abrasiva del silicio. Esta serie funde a más baja temperatura que el resto de aleaciones por lo que se emplea como elemento de soldadura. Además la principal aplicación es la fundición de piezas difíciles, por las buenas cualidades para el moldeo, y la fabricación de piezas para la marina, por su resistencia a la corrosión. Sin embargo no se emplea para piezas ornamentales porque se ennegrecen con el tiempo.

Serie 5xxx – Aleaciones de aluminio-magnesio. El magnesio es considerablemente más eficaz que el manganeso como endurecedor, aproximadamente un 0.8 % de magnesio produce el mismo efecto que un 1.25 % de manganeso, además puede ser añadido en cantidades mayores. Las principales características de estas aleaciones son una media a alta dureza, buena soldabilidad, buena resistencia a la corrosión en ambientes marinos y una baja capacidad de trabajo en frío. Estas características hacen que las aleaciones de aluminio-magnesio se usen

para adornos decorativos, ornamentales y arquitectónicos, en el hogar, iluminación de calles y carreteras, botes, barcos, partes de puentes grúa y estructuras de automóviles.

Serie 6xxx – Aleaciones de aluminio-magnesio-silicio. Las aleaciones de esta serie contienen silicio y magnesio en las proporciones requeridas para la formación de siliciuro de magnesio (Mg_2Si). Este compuesto las hace térmicamente tratables. Aunque son menos resistentes que el resto de aleaciones, a cambio tienen buena formabilidad, soldabilidad, maquinabilidad y resistencia a la corrosión. Su uso suele ser el de aplicaciones arquitectónicas, cuadros de bicicletas, pasamanos de puentes, estructuras soldadas. . .

Serie 7xxx – Aleaciones de aluminio-zinc. A estas aleaciones se les añaden cantidades variables de zinc, de entre un 1 a un 8 %, magnesio y cobre que al combinarse entre sí forman compuestos intermetálicos que elevan su índice de endurecimiento y además hacen a la aleación térmicamente tratable. La mayor importancia de esta serie está en que alcanza unas elevadas prestaciones mecánicas mediante envejecimiento natural; por lo que se utilizan ampliamente en estructuras de vehículos de transporte, principalmente en la industria aeronáutica.

Serie 8xxx- Adición de otros elementos. Son aleaciones con una amplia gama de composiciones químicas. Estas forman parte de aleaciones ternarias y cuaternaria: el hierro, el níquel, el titanio, el cromo, el cobalto. . . Por ejemplo, se consigue un rendimiento mejorado a elevadas temperaturas a través de la utilización de aleaciones Al-Fe-Ce reforzadas por dispersión (por ejemplo, 8019) o aleaciones Al-Fe-V-Si (por ejemplo, 8009, fabricadas por pulvimetalurgia). También se puede lograr una baja densidad y una rigidez mayor en aquellas aleaciones que contengan litio (por ejemplo, 8090).

Adicionalmente, en el aluminio y sus aleaciones, el tratamiento térmico está íntimamente relacionado con la composición del material y los procesos de deformación. De hecho, para aumentar las tensiones internas, elevar la resistencia a la tensión y el esfuerzo de fluencia, el material debe recibir procesos combinados de temperatura y deformación física, junto a un reposo o maduración al medio ambiente o en ambientes artificiales. La diferencia entre cada tratamiento estriba en la secuencia y la combinación de dichos procesos. La misma norma descrita anteriormente (UNE-EN 573) también especifica que, de realizarse algún tratamiento a la aleación, éste se deberá indicar designado la aleación seguida de un guión y el estado del tratamiento realizado, por ejemplo, EN AW-6082-T6.

La clasificación de los tratamientos por deformación más utilizados son (Obando (2016)):

Clasificación de aluminios según su deformación previa

F	En bruto. Es el material tal como sale del proceso de fabricación.
0	Recocido. Se aplica a materiales ya sea de forja como de fundición que han sufrido un recocido completo.
01	Recocido a elevada temperatura y enfriamiento lento.
02	Sometido a tratamiento termomecánico
03	Homogeneizado. Esta designación se aplica a los alambrones y a las bandas de colada continua, que son sometidos a un tratamiento de difusión a alta temperatura.
W	Solución tratada térmicamente. Se aplica a materiales que después de recibir un tratamiento térmico quedan con una estructura inestable y sufren envejecimiento natural.

H	Estado de acritud, es decir deformados. Viene con materiales a los que se ha realizado un endurecimiento por deformación.
H1	Sólo endurecimiento por deformación: aplica a productos que son deformados para endurecerlos hasta obtener la resistencia deseada sin necesidad de tratamiento térmico. El número que lo sigue indica el grado de deformación-endurecimiento.
H2	Endurecimiento por deformación y recocido parcial: aplica a productos que son endurecidos por deformación más allá de lo deseado y entonces se reduce su resistencia hasta el nivel requerido por recocido parcial. El número que sigue indica el grado de endurecimiento por deformación obtenido después del recocido parcial.
H3	Endurecimiento por deformación y estabilización: aplica a productos que son endurecidos por deformación y cuyas propiedades mecánicas se estabilizan por tratamiento térmico a baja temperatura o como resultado de introducir calor durante la fabricación. El número que sigue indica el grado de endurecimiento por deformación obtenido después del tratamiento de estabilización.

Y la clasificación de los tratamientos térmicos es (Obando (2016)):

Clasificación de aluminios según su tratamiento térmico

T1	<p>Tratamiento de temple desde la temperatura de extrusión y maduración. Significa que la pieza ha pasado por un proceso previo de extrusión a una temperatura de 600 °C, aproximadamente. Inmediatamente la barra de aluminio es extruida a dicha temperatura, se mete en un medio de agua fría o en líquido para temple, es decir se realiza un proceso de temple (-W). Luego la barra de aluminio es expuesta a maduración natural o envejecimiento por un periodo de 96 horas, tiempo en el cual la pieza adquiere su máxima dureza y queda designada mediante la condición T1. El tipo de tratamiento T1 se utiliza comúnmente en las aleaciones de la serie 2xxx, para la fabricación de vigas estructurales para aeronaves, enfriadores y en circuitos de avión.</p> <p>Aplicaciones. Utilizado en tuberías extruidas de aluminio 6061-T1 que necesiten fuertes deformaciones. Muy utilizado en piezas decorativas y que requieran resistencia a la corrosión.</p>
T2	<p>Tratamiento de temple desde la temperatura de extrusión y maduración natural. Se realiza el mismo proceso de extrusión anterior y se temple en agua o en líquido para temple. Posteriormente, se le aplica a la barra de aluminio un proceso de deformación en frío también conocido como acritud (a través de rodillos por ejemplo), con el fin reducir su diámetro. Luego, la pieza es dejada al aire para que envejezca y aumente su dureza. A medida que pasa el tiempo, la dureza aumenta progresivamente. El T1 y T2, por lo general, son procesos que ya vienen en esa condición desde la fábrica y no se adelantan.</p>

T3	<p>Tratamiento térmico de solución, temple, acritud y maduración natural. Generalmente, las piezas de aluminio en condición T3 pertenecen a la serie 2xxx y son muy utilizadas. El proceso consiste en que el material ya no es extruido, sino que se encuentra en condición de recocido (-0), luego se realiza el mecanizado, es decir, se da la forma a la pieza y posteriormente se envía a tratamiento térmico de solución a temperatura de 495 °C. Posteriormente, se lleva a cabo el temple en un medio de agua o líquido para temple y luego el proceso de acritud para reducir su área. Una vez realizados estos procesos, la pieza es sometida a maduración natural para que adquiera la dureza máxima. Este tipo de tratamiento se podría adelantar, pero normalmente, no se realizan procesos de acritud o deformación en frío, por lo que algunas empresas lo aplican, pero se saltan la etapa de acritud. En este sentido, la pieza ya no estaría en condición T3, sino en T4.</p> <p>Aplicaciones: 2024-T3 es la condición de mayor resistencia mecánica y resistencia a la fatiga de esta aleación, utilizado en pieles de aeronaves, como en piezas varias.</p>
T4	<p>Tratamiento de solución, temple y maduración natural. Como se mencionó en el anterior proceso, el tratamiento térmico T4 es similar al T3, con la diferencia que dentro de sus etapas, no se lleva a cabo el proceso de acritud o deformación en frío. Es decir, luego que la pieza fue sometida a disolución y temple, se deja a temperatura ambiente para que adquiera su dureza final. Es uno de los procesos que más se realizan para el medio aeronáutico. Es importante aclarar, dadas las confusiones que se presentan con este tipo de tratamiento, que cuando la empresa realiza al material un proceso T4 siempre va a entregar la pieza en estado de temple (w), pues la condición T4 únicamente se obtiene después que la pieza haya atravesado por el proceso de maduración o envejecimiento natural (exposición al medio ambiente por 96 horas).</p> <p>Aplicaciones: 2024-T4 piezas aeronáuticas varias.</p>
T5	<p>Tratamiento desde temperatura de extrusión y maduración artificial. Este tipo de tratamiento requiere extrusión y posterior temple. Luego, y a diferencia del T1, requiere de maduración artificial por medio de un horno a temperatura de 120 °C (la temperatura exacta depende de cada aleación) durante el tiempo necesario para que adquiera dureza.</p> <p>Aplicaciones: 6063-T5 aplicaciones en marcos de puertas, piezas arquitectónicas.</p>
T6	<p>Tratamiento de solución, temple y maduración artificial. Requiere de un proceso de disolución, temple y maduración artificial. Este tratamiento se realiza a piezas aeronáuticas que trabajan en condiciones de compresión y no están a tracción.</p> <p>Aplicaciones: aluminio 7075-T6 utilizado para moldes y piezas aeroespaciales que estén bajo esfuerzos a compresión.</p>

T7	Tratamiento térmico de solución, temple y sobre-maduración estabilizado. Requiere de los mismos procesos de disolución y temple del T3 y T4, la diferencia consiste en que en ese tipo de tratamiento se le debe aplicar a la pieza un sobre-envejecimiento. Dicho proceso se realiza volviendo a envejecer el material a temperatura de 175 °C. Aplicaciones: piezas aeronáuticas que no requieren elevada resistencia pero sí es crítica la fragilidad, ejemplo 7075-T7.
T8	Tratamiento de solución, temple acritud y maduración artificial: Requiere los mismos procesos de disolución, temple, acritud, pero a diferencia del T3, se realiza una maduración artificial (en horno) para adquirir la dureza máxima en el material. Aplicaciones: aluminio 2011-T8 se utiliza en piezas para relojería, partes de cámaras, partes de televisores, entre otros.
T9	Tratamiento de solución, temple maduración artificial y acritud: Es el mismo tratamiento del T8, pero el proceso de deformación en frío o acritud se realiza después de la maduración o endurecimiento artificial. Estos cambios aunque hipotéticamente deberían ser similares, generan cambios en la resistencia de la tensión del material. Aplicaciones: aluminio 6262-T9 utilizado en partes para válvulas, piezas decorativas, accesorios para tuberías de aceite, entre otros.
T10	Tratamiento de temple desde temperatura de extrusión, acritud y maduración artificial. Es similar el tratamiento T2, la diferencia consiste en que se realiza maduración artificial. Aplicaciones: aluminio 6061-T10 utilizado en mástiles de antenas de comunicación, y en piezas para bicicletas.

La clasificación no termina aquí, sino que continua con nuevas subdivisiones para cada tipo de tratamiento. Esta segunda o hasta tercera cifra indica variaciones en el tratamiento que alteran de manera significativa las propiedades de los productos. La segunda cifra añadida nunca puede ser 0.

En el caso concreto en esta tesis doctoral, el aluminio elegido ha sido el AA2024-T351. Esta denominación, AA, viene dada porque las muestras están certificadas por la Aluminum Association.

La composición del aluminio se puede ver en la siguiente tabla 2.4. Este aluminio presenta una alta resistencia en tensión y excelente resistencia a la fatiga. Dado que la resistencia a la corrosión es relativamente baja, viene con un acabado anodizado. Además el tratamiento T351 es un tratamiento térmico de solución, estirado controlado. El aluminio no recibe ningún enderezamiento adicional tras el estirado. Sirve para aliviar tensiones y es envejecido naturalmente.

Tabla 2.4: Composición de la aleación de aluminio 2024 utilizada en esta tesis.

	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Cr	Ni	Zn	Ti
C. Mínima			3.8	0.3	1.2				
C. Máxima	0.5	0.5	4.9	0.9	1.8	0.1	0.05	0.25	0.15

La elección de esta aleación no ha sido al azar, ya que el Centro Láser realiza multitud de ensayos con este material para Airbus y es un material de suma importancia a nivel industrial y aeronáutico.

Capítulo 3

Dispositivo experimental utilizado

El dispositivo experimental que se ha empleado en todas las medidas es el mismo que el utilizado en el Centro Láser para realizar el proceso de LSP de manera industrial con la implementación de un módulo de espectroscopía para llevar a cabo las mediciones, esto quiere decir que la atmósfera no está controlada como suele ser habitual en este tipo de ensayos para la diagnosis de plasmas fríos.

Dicho dispositivo experimental consta principalmente de siete sistemas:

- Sistema láser
- Sistema de enfoque de la emisión láser en la muestra: espejos y lentes
- Sistema de posicionamiento: robot industrial
- Sistema de recogida de la luz emitida por el plasma: fibra óptica
- Sistema de análisis y detección: monocromador y CCD
- Sistema de toma de datos: ordenador

A continuación se pasa a detallar cada componente de los diferentes sistemas, de manera que en la siguiente sección se explica el funcionamiento del dispositivo experimental.

Para ampliar la información sobre cualquiera de los equipos citados, en el Apéndice A se han incluido todas las hojas de características pertinentes.

3.1. Equipos utilizados

3.1.1. Láser de estado sólido de Nd:YAG

El láser, fabricado por la empresa Spectra-Physics, modelo Quanta-Ray Pro 350, es de la familia de los denominados de estado sólido y es del tipo Nd:YAG pulsado (Q-switch). Estos láseres consiguen la inversión de población gracias a una fuente de luz externa y son de cuatro niveles, siendo más eficientes que los de rubí de tres niveles, y pueden operar con una onda continua.

Figura 3.1: Imágenes del láser Quanta-Ray Pro 350.

El elemento activo es el neodimio triplemente ionizado en un cristal o en una matriz cristalina. La estructura cristalina más común para el Neodimio, y que es la que se encuentra en este dispositivo, es el cristal sintético $Y_3Al_5O_{12}$ o granate, conocido por el acrónimo de YAG (Yttrium Aluminium Garnet). Es un material duro y quebradizo que presenta propiedades ópticas, mecánicas y, sobre todo, térmicas muy apropiadas para conseguir un haz continuo de alta calidad a temperatura ambiente.

La inversión óptica del neodimio triplemente ionizado se lleva a cabo por un sistema de bombeo óptico de lámparas de destello de xenón situadas a lo largo de la cavidad. En su interior, se encuentra también una célula Pockels activada por un sistema electrónico de control que es la encargada de la conmutación del haz (Figura 3.2). Esta célula Pockels es esencialmente un polarizador que está “apagado” hasta que la transición del láser está completada y, a partir de entonces, se “enciende” y la ganancia se incrementa de tal forma que el nivel de población alcanza el equilibrio en unos pocos nanosegundos. Este fenómeno es lo que se conoce como Q-switching y produce pulsos de luz de corta duración, del orden de nanosegundos, con temperaturas extremadamente elevadas y altas potencias, es decir, picos de potencia muy superior a lo que se produciría con el mismo láser en el modo de operación continuo. El conmutador, por tanto, tiene la finalidad de obturar la cavidad durante el disparo de las lámparas de destello, evitando así, la emisión láser en ese intervalo de tiempo y permitiendo la mayor concentración posible de energía en la inversión de población.

Finalizado el bombeo, el control envía un impulso a la célula para hacerla transparente y producir una emisión láser de gran energía y elevada potencia gracias a que el conmutador permite obtener impulsos de muy corta duración.

Cuando la luz que incide en un material es suficientemente intensa se comienzan a manifestar una serie de fenómenos no lineales, en el sentido de que la respuesta óptica del material deja de depender linealmente con el campo eléctrico aplicado. En tal caso la polarización eléctrica que se induce en el material es:

$$P(t) = \chi_1 E(t) + \chi_2 E^2(t) + \chi_3 E^3(t) + \dots$$

Figura 3.2: Esquema del interior de un láser de Nd-YAG con sistema Q-Switch.

donde χ_2 es la susceptibilidad no lineal de segundo orden, χ_3 la de tercer orden y así sucesivamente. La respuesta no lineal del material es evidente cuando algún término χ_i , a partir de $i = 2$, es distinto de cero y la amplitud del campo eléctrico incidente es suficientemente grande como para hacerlo evidente.

La susceptibilidad de segundo orden χ_2 es responsable del proceso de generación del segundo armónico (SHG), en el que la intensidad de la luz generada aumenta cuadráticamente con la intensidad incidente del haz fundamental.

Bajo ciertas condiciones el proceso de SHG puede ser muy eficiente, llegando a convertir gran parte de la potencia de fundamental a segundo armónico. Por ejemplo, el láser de Nd:YAG de este proceso utiliza un cristal de generación de segundo armónico, fosfato de didio de potasio (KDP), para convertir la longitud de onda de 1064 nm, en el infrarrojo cercano, a 532 nm luz verde en el espectro visible, con una eficiencia de alrededor del 50 %. En concreto con este láser y el mismo cristal se puede conseguir el tercer armónico haciendo pasar la onda resultante de 532 nm por un segundo cristal, de esta forma se produce una onda de 266 nm. También puede mezclarse en el cristal con el residuo de la onda fundamental de 1064 nm para producir una onda de 355 nm. Estas cuatro longitudes de onda (1064, 532, 355 y 266 nm) cubren el espectro electromagnético desde el infrarrojo cercano hasta el ultravioleta, lo cual aumenta la utilidad de este láser:

- Las líneas de 532 y 355 nm pueden bombardear láseres de colorante con una elevada eficiencia de conversión.
- Las líneas de 355 y 266 nm son usadas para disociación y estudios foto destructivos de muchas moléculas.
- 1064 y 266 nm son ampliamente usadas para modificaciones ópticas de materiales e investigación de semiconductores.

Un aspecto a destacar del láser de Nd:YAG es su relativa inmunidad a los problemas térmicos; la potencia de pico en un impulso emitido tiende a decrecer al aumentar las repeticiones

y, además, cuanto mayor es esa potencia, más tiempo se necesita entre los diferentes impulsos para disipar el exceso de calor que, de otra forma, distorsionaría las propiedades ópticas de la varilla de elemento activo y degradaría la calidad del haz saliente. No se deben olvidar tampoco los efectos de saturación que limitan la cantidad de energía que se puede almacenar y extraer de la varilla.

3.1.2. Espejos y lentes

Al utilizar un láser de elevada intensidad, como es este caso, no se puede usar fibra óptica para guiar el haz láser hasta la pieza. Por ello se ha optado por un sistema óptico tradicional constituido por un espejo y una lente.

En el caso de los experimentos realizados en esta tesis siempre se ha utilizado el láser en su primer armónico, 1064 nm, luego tanto el espejo como la lente son específicos para soportar la alta intensidad del pulso generado por el láser y trabajar a la longitud de onda indicada.

En concreto, el espejo es de la marca “CVI Laser Optics” modelo Y1-1537-45-UNP. El espejo está diseñado para reflejar un haz láser con ángulo de incidencia de 45° . Por su colocación, como se observa en la figura 3.12, se consigue una desviación del haz de 90° para que el haz láser esté en el eje óptico de la posterior lente y de la pieza a tratar. Las geometrías de espejo y lente se muestran en 3.3.

Figura 3.3: Esquemas con las medidas características en mm del espejo y la lente utilizados.

La lente es también de la marca “CVI Laser Optics” modelo BICX-25.4-205.6-C. Es una lente esférica biconvexa de 20 cm de distancia focal y 25.4 mm de diámetro, que nos permite reducir el diámetro del pulso y enfocarlo debidamente sobre la superficie del blanco.

3.1.3. Robot industrial

Este equipo no es un elemento fundamental en el caso concreto de nuestro estudio, ya que solo se necesita colocar la pieza a la distancia focal adecuada y a partir de ahí solo hay que moverla en el plano YZ unos milímetros para cada experimento. Sin embargo, para la realización de tratamiento en áreas extensas es un elemento imprescindible, puesto que es necesario realizar una superposición programada de los pulsos, Así es posible controlar el número de pulsos que

llegan a la pieza por unidad de área y en consecuencia modificar la intensidad del tratamiento.

Figura 3.4: Imagen y esquema del rango de movimientos en mm del robot IRB 120.

En concreto el robot modelo IRB 120 de la marca ABB, cuenta con movilidad en seis ejes, solo pesa 25 kg y puede manejar una carga útil de 3 kg con un alcance de 580 mm. Viene equipado con el controlador IRC5 el cual garantiza un óptimo movimiento del recorrido, una programación FlexPendant de fácil uso, un lenguaje RAPID flexible y una potente interfaz de comunicación.

3.1.4. Fibra óptica

La utilización de una fibra óptica para enviar la luz al espectrómetro o monocromador permite evitar la alineación a la entrada de este, además de la posibilidad del desarrollo de un equipo portátil y compacto para mediciones fuera del laboratorio. A la hora de elegir la fibra adecuada para la aplicación se debe tener en cuenta el rango del espectro a observar: UV, visible, o IR.

En este caso la fibra utilizada ha sido una fibra óptica de cuarzo multimodo de 0.5 mm de diámetro y 2 m de longitud. La fibra empleada permite trabajar desde el espectro ultra-violeta al visible en un rango de temperaturas comprendido entre los 0°C y los 50°C. Además, el cable es resistente a la radiación y viene equipado con conectores SMA905.

3.1.5. Monocromador

El monocromador es esencialmente un filtro paso-banda sintonizado mecánicamente, basado en una rejilla dispersiva. De forma simple se podría decir que el monocromador separa las frecuencias de manera similar a como lo haría un prisma, es decir, espacialmente. Uno de los monocromadores más habituales y, el usado en esta investigación, es el tipo Czerny-Turner que está representado en el esquema de la figura 3.5 (b). La luz, que pasa a través de una rendija

de entrada está en el plano focal del primer espejo cóncavo, consiguiendo reflejarla como haces paralelos hacia la red de difracción. Esta red de difracción está formada por un elevado número de rendijas equidistantes, que dispersan los diferentes componentes de longitud de onda angularmente. Según la colocación de la red, cierta longitud de onda será refractada hacia el segundo espejo y según la rotación de dicha red se puede seleccionar la longitud de onda deseada. Como puede deducirse para poder obtener el espectro completo hay que ir rotando la rendija, produciéndose de este modo un cambio continuo en la longitud de onda. Por último un segundo espejo focaliza los componentes dispersados hacia la rendija de salida.

Figura 3.5: Imágenes y esquema del monocromador FHR1000.

Se define la resolución de un monocromador como su capacidad para distinguir señales espectrales adyacentes. Esta capacidad depende de la red de difracción utilizada, es decir, posee mayor resolución si se iluminan un mayor número de líneas en la red; y de la focal, poseerá mayor resolución si la focal es más larga.

En particular para esta tesis se ha utilizado un monocromador modelo FHR1000 de la marca Horiba Jovin Ybon con una focal de 1 m y apertura $f/9$. Está equipado con dos redes de difracción móviles: 600 y 1800 líneas/mm. Se ha trabajado siempre con la red de 1800 líneas/mm la cual proporciona una dispersión focal de 0.8 nm/mm y una resolución espectral de 0.03 nm, en un rango de 100 nm a 700 nm para una rendija motorizada de aproximadamente $50 \mu\text{m}$. En comparación con la red de 600 líneas/mm, esta proporciona mayor resolución aunque menor rango espectral de análisis por barrido.

3.1.6. Cámara CCD

La detección es la última fase en el instrumental espectroscópico tras la dispersión de la luz en sus distintas longitudes de onda. Los detectores más comunes son el fotomultiplicador o PMT y los de acoplamiento de carga (CCD). En el caso del presente trabajo se dispuso de una CCD bidimensional, modelo iStar 334T de la marca Andor, de 1024×1024 píxeles, con un tamaño por cada pixel de $26 \times 26 \mu\text{m}^2$. Esto ha permitido estudiar espacialmente el plasma. Además la cámara controla tanto en la ventana como en el retardo con una resolución máxima de 100 ns.

Figura 3.6: (a) Imagen cámara CCD iStar 334T. (b) Esquema de funcionamiento de una CCD.

La CCD bidimensional es un dispositivo de carga acoplado, basado en el efecto fotoeléctrico, diseñado para convertir los fotones dispersados en una señal analógica que posteriormente es digitalizada. Los detectores CCD consisten en una matriz de píxeles formados por condensadores MOS de material semiconductor. Cuando los fotones inciden en los píxeles de esa matriz se generan pares electrón-hueco. La carga acumulada se lee de forma secuencial para finalmente obtener la imagen final mediante el tratamiento electrónico de la señal. Los fotones de cada longitud de onda colisionan en una columna diferente, siendo necesario sumar las intensidades de todos los píxeles de una columna para poder obtener un espectro de emisión. Un esquema de una CCD se puede observar en la figura 3.6(b). Al ser una matriz de píxeles, la CCD permite hacer medidas de un rango preciso de longitudes de onda proporcionando una mayor versatilidad. Dicho rango de longitudes de onda viene definido por el tamaño de la CCD y la configuración del monocromador (red de difracción, distancia focal...).

La componente de ruido más importante que se da en este tipo de detectores es el generado durante la lectura y digitalización de la señal. Para reducir su efecto es mejor trabajar con tiempos largos de adquisición e intensidades de señal elevadas que promediar un elevado número de lecturas.

Existe una variación de los detectores CCD para conseguir una mayor sensibilidad mediante la amplificación electrónica de la señal incidente. Este tipo de dispositivos se denominan CCD intensificadas o simplemente iCCD, ver figura 3.7. Permiten trabajar, a parte de espacialmente, temporalmente. Esto en algunos estudios es de gran utilidad, pero en nuestro caso particular es prescindible.

Figura 3.7: (a) Esquema de una iCCD. (b) Representación de la sensibilidad de una cámara con amplificador y sin amplificador.

3.1.7. Sistema de recogida de datos (ordenador)

El sistema de recogida de datos se hace a través de un software que proporciona la cámara CCD (Solis Software) y que está instalado en un ordenador anexo al resto de los equipos. Este software no solo permite: visualizar, hacer un estudio preliminar de los datos para saber si nos serán de utilidad o por el contrario hay que realizar nuevas medidas, exportar ...; sino que también es el software con el que se controla la cámara.

En la imagen 3.8 se puede observar la visualización de una de las medidas realizadas de la línea H_{α} sin medio confinante con la ventana centrada en la longitud de onda de 655.8 nm, en la cual también se observa cómo se describirá más adelante la aparición de la línea de segundo orden del Cu I a 654.78 nm.

Figura 3.8: Ejemplo de la visualización de los datos obtenidos en un experimento de medida de la línea H_{α} .

En las siguientes imágenes se visualizan las opciones que se pueden manejar en el software para el control de la cámara CCD y la adquisición de los datos. De esta forma se puede trabajar en rangos de longitudes de onda y de condiciones del plasma muy amplios, los cuales han permitido realizar un estudio completo y preciso del plasma producido mediante LSP.

Ambas imágenes visualizan la ventana de Configuración de la adquisición (Setup acquisition). En esta ventana, aparte de de la configuración general como: el Modo de adquisición (Acquisition mode), el Modo de la ventana de medida (Gate Mode) o si se quiere Auto-guardado (Auto-Save); también configura a través de diferentes pestañas las opciones de la CCD (Setup CCD), de la ventana de medida (Setup Gater), del contador de fotones (Photon Counting) y del Step 'n' Glue el cual permite adquirir automáticamente espectros de luz blanca en rangos determinados de longitud de onda. Para el desarrollo de esta tesis solo se ha trabajado con la configuración de la CCD, imagen 3.9 y de la ventana de medida 3.10.

Figura 3.9: Imagen de la pantalla con los diferentes parámetros de la cámara CCD que se pueden configurar.

La primera de ellas, Figura 3.9, es la medida de la línea del Ne I en 653.29 nm con la ventana centrada en 655.8 nm, de una lámpara de Ne que se utilizó, como se verá más adelante, para la medida de la anchura instrumental en esa zona. En la ventana de la Configuración de la adquisición se pueden observar los parámetros que aparecen en la pestaña de configuración de la CCD como el modo de lectura (Readout frame as), el tiempo de lectura por pixel (Readout time per pixel) o la cadencia de la CCD, es decir, el tiempo de exposición (CCD timings).

Figura 3.10: Imagen de la pantalla con los diferentes parámetros de la ventana de medida que se pueden regular.

En la segunda, Figura 3.10, se muestra la medida de la línea de H_{α} con medio confinante, es decir, en condiciones de LSP. Esta medida, al igual que las anteriores, también está centrada en la longitud de onda de 655.8 nm. En este caso la pestaña que está seleccionada dentro de

la Configuración de la adquisición es la de las opciones de la ventana de medida, en la cual se pueden elegir las características de Generador digital de retardo (Digital delay generator), es decir, el tiempo de retardo en el que se realiza la medida (Gate pulse delay) o el tiempo que dura la medida, a lo cual se denomina anchura de la ventana de medida (Gate pulse width). También se pueden configurar opciones de la placa microcanal (MCP) y si se trabajara en el modo de adquisición de multi escaneo, el tiempo de paso de cada ventana (Gate step).

Además, este software también permite el control de las rendijas del monocromador, de tal forma que como se observa en la ventana de la imagen 3.11, especificando el controlador (Active Controller), y la forma en que se quiere que se mueva el monocromador (Monochromator Commands y Command to Execute), se puede seleccionar directamente la longitud de onda en nanómetros donde se quiere la medida del espectro.

Figura 3.11: Imagen de la ventana de con los parámetros de control del monocromador.

3.2. Montaje y método experimental

A continuación se va a desarrollar tanto el montaje como el funcionamiento del dispositivo experimental que se acaba de describir técnicamente en el apartado anterior. En la figura 3.12 se puede observar el diagrama de bloques del montaje utilizado.

El láser de Nd: YAG con Q-switched usado genera un pulso de longitud de onda fundamental de 1064 nm, 10 ns de duración a una frecuencia de 10 Hz y energía por pulso medida en la superficie de la muestra de 2.5 J. La irradiación láser en el blanco fue de 8.01 GW/cm². Los valores de los parámetros más importantes se listan a continuación:

- Longitud de onda de 1064 nm, correspondiente con el infrarrojo.

- Energía máxima de los pulsos 2500 mJ.
- Duración de los pulsos de 10 ns.
- Frecuencia de los pulsos de 10 Hz.
- Diámetro del haz a la salida de 0.7 mm con forma prácticamente gaussiana.

Figura 3.12: Diagrama de bloques del montaje experimental utilizado para la diagnosis del plasma producido en un proceso LSP.

En concreto, el valor de la longitud de onda, de la energía máxima y de la duración de los pulsos son determinantes en la interacción del láser con la materia, cuestión que se tratará en el siguiente capítulo.

Como se había comentado previamente, para que el haz incida sobre la muestra y debido al espacio disponible, éste tiene que ser redirigido por un espejo hacia la lente biconvexa que focaliza el haz sobre el blanco. Al igual que se haría en el tratamiento LSP a nivel industrial, la muestra se coloca en el brazo robótico, con cuyo sistema de posicionamiento se coloca la muestra a la distancia adecuada respecto de la focal de la lente, esto es, a unos 20 cm de separación. Como ya se ha mencionado, la muestra con la que se ha llevado a cabo toda la investigación es una pieza de una aleación de aluminio 2024. Una vez colocada la pieza como se acaba de describir, el pulso láser al interaccionar con el material metálico lo vaporiza, arrancando parte de su superficie, esto produce un cráter de diámetro normalizado ~ 2 mm, el cual se puede ver en la imagen 3.13 tomada con un microscopio confocal de la marca Leica modelo DCM 3D, cuyos datos técnicos se presentan en el anexo.

Figura 3.13: Imagen de la superficie del cráter típico tras un pulso de un experimento LSP tomada en un microscopio confocal.

Como era de esperar, el cráter no tiene unos bordes perfectamente definidos. Además se observan crestas y material depositado por el proceso de vaporización y re-solidificación del material hacia el radio exterior del cráter.

El siguiente paso es colocar la fibra óptica en la posición en la que se ha encontrado una mejor relación señal/ruido, en este caso en concreto es alrededor de los 2 mm del plasma y a 2 mm de la muestra de aluminio. Dependiendo del experimento y para observar la homogeneidad del plasma, la distancia con respecto al blanco se irá moviendo de manera controlada gracias al sistema de posicionamiento del robot.

Figura 3.14: Fotografía del montaje experimental utilizado para la diagnosis del plasma en un proceso LSP.

La atmósfera en la que se realiza el proceso es un parámetro muy importante, tanto para el tratamiento en sí, como ya se ha comentado, como para la realización del análisis espectroscó-

pico del plasma, que se verá más adelante.

Por ello, aunque en el proceso industrial se realiza en flujo continuo de agua como se observa en la fotografía (figura 3.14), donde la muestra está colocada en el interior de una cubeta y el flujo de agua continuo es suministrado a través de una manguera, en esta tesis se han realizado tres tipos de ensayos diferentes:

1. Sin medio confinante: es decir, sin el aporte del chorro de agua. Esto sería un ensayo tipo LIBS tradicional en aire a presión atmosférica.
2. Con la probeta mojada: a la hora de hacer la medida el suministro de agua se corta por lo que la muestra está mojada pero no hay medio confinante como tal.
3. Con agua como medio confinante: lo que es un ensayo LSP habitual.

Por otro lado, para evitar que se condense el posible vapor de agua que se pueda producir y se manche la lente se ha dispuesto un sistema de extracción.

Una vez producido el plasma, la luz es recogida mediante una fibra óptica que ya había sido posicionada anteriormente y la señal pasa por el monocromador a cuya la salida se ha colocado la cámara CCD bidimensional que se describió más arriba. Como también se explicó, esta cámara viene equipada con un software que directamente facilita los resultados a través de un ordenador. Estos dos últimos equipos no se aprecian en la fotografía puesto que están colocados en la parte posterior del monocromador.

Para realizar todos los ensayos necesarios el procedimiento a seguir dentro del método experimental explicado ha sido el siguiente: el brazo robótico se posiciona en la posición de origen donde la pieza de Aluminio 2024 es colocada. Mediante el software del robot la pieza se mueve hasta que queda a las distancias de la lente y de la fibra óptica, que se describieron en el apartado anterior. A partir de ahí cada vez que se realiza un ensayo, es decir cada vez que se realiza un pulso con el láser, el robot se encarga de mover 6 mm en el “eje y” la muestra, de tal forma que no hay solapamiento de pulsos y cada experimento es independiente.

3.3. Calibración del montaje experimental

Para llegar a la obtención de unos resultados lo más precisos posibles el sistema debe ser calibrado. La CCD nos proporciona las imágenes en píxeles por lo que para determinar la posición de las líneas de emisión a lo largo de todo el espectro habrá que buscar la relación entre estos y las longitudes de onda con las que trabaja el monocromador. Por ello el sistema, desde que el plasma es recogido por la fibra óptica, pasa por el monocromador y es recogida por la CCD, debe ser calibrado a dos niveles:

- Calibración en intensidad.
- Calibración en longitud de onda.

3.3.1. Calibración en intensidad o eficiencia del sistema

Como los equipos reales no son transmisores perfectos, cada dispositivo tendrá una eficiencia espectral determinada en la transmisión de radiación. Para obtener la curva de eficiencia de todo el sistema se mide su respuesta en el número de cuentas de cada píxel del canal $N_0(\lambda)$

para una fuente de radiancia espectral conocida $R(\lambda)$; así la eficiencia espectral $E(\lambda)$ será el cociente de ambas magnitudes:

$$E(\lambda) = \frac{N_0(\lambda)}{R(\lambda)} \quad (3.1)$$

Se han usado lámparas de cátodo de deuterio para el rango de medida 180 nm a 400 nm y de cátodo de tungsteno para el rango de 300 nm a 2600 nm. Para asegurarse la eficiencia estas medidas deben repetirse varias veces.

Se ha comprobado que el dispositivo experimental de esta tesis es eficiente entre las longitudes de onda de 200 nm y 700 nm. Para los propósitos de este experimento se ha trabajado con dos ventanas de 100 nm y de longitud de onda central 281.6 nm y 655.8 nm, ambas incluidas en el rango de eficiencia establecido y que además van a servir para propósitos diferentes e independientes. De tal forma que en cada ventana la eficiencia se puede considerar constante.

Este método de trabajo con ventanas independientes es además el usado habitualmente en condiciones industriales por la imposibilidad de parar la producción el tiempo que requiere realizar la calibración en todo el rango de longitud de onda.

3.3.2. Calibración en Longitud de Onda

En los inicios de esta investigación no se conocía exactamente qué ventanas de medida iban a resultar de mayor utilidad, de esta forma se optó por realizar la calibración en longitud de onda a lo largo de todo el espectro en un rango muy amplio de longitudes onda, en concreto de 199 nm a 660 nm. Tomando ventanas de medida cada 2 nm o 3 nm, según se han ido solapando los espectros e identificando todas las líneas de emisión del Al I, Al II, Mg I, Mg II, Mn I, Mn II, Cu I y Cu II del propio espectro del plasma generado con la muestra del Al 2024. Si se compara la longitud de onda teórica (proporcionada por el NIST, Kramida et al. (2015)) con la correspondiente a cada longitud de onda aparente medida, se obtienen la dispersión y error de cero del equipo, llegando a una ecuación que proporciona la longitud de onda real medida en función de la aparente. Si se tiene en cuenta que la cámara utilizada en estos experimentos tiene 1024 píxeles y que la ventana de medida se mueve en función de la longitud de onda que se le asigna al píxel central, es decir, al píxel 512, la ecuación a la que se quiere llegar tiene la siguiente forma:

$$\lambda_{real}(pixel) = \lambda_{nominal}(512) + ErrCero + (pixel - 512)Disp \quad (3.2)$$

Siendo: $\lambda_{real}(pixel)$ la longitud de onda real para el píxel correspondiente, $\lambda_{nominal}(512)$ la longitud de onda a la que se ha centrado la ventana de medida, el $ErrCero$ es el error entre las medidas y los datos reales del Nist, este error no tiene por qué ser necesariamente constante a lo largo de toda la calibración, debido a que se produce por la holgura de los engranajes y el movimiento que estos provocan en el monocromador, pero está acotado en un rango de tolerancia muy estrecho. La variable $pixel$ es el número de píxel en el cual se quiere determinar la longitud de onda real y por último la $Disp$ que se observa al mover la ventana de medida los 3 nm ya mencionados.

Cálculo de la Dispersión (Disp):

Se ha observado que a lo largo de la toma de datos se producía una desviación en la lectura de la imagen por lo que se realizó el cálculo de la dispersión en la medida por cada píxel con

la ecuación (3.3)

$$Disp = \frac{1pixel}{|p_2 - p_1| / |\lambda_{nominal_2}(512) - \lambda_{nominal_1}(512)|} \left(\frac{nm}{pixel} \right) \quad (3.3)$$

Donde p_1 y p_2 son las posiciones del mismo pico en las distintas ventanas en píxeles y la diferencia $|\lambda_{nominal_2}(512) - \lambda_{nominal_1}(512)|$ la distancia que se mueve el monocromador para tomar cada imagen en nanómetros (nm).

A continuación se pone como ejemplo el cálculo de la dispersión para la primera ventana de medida centrada en 199 nm, tomando esta y la siguiente ventana centrada en 201 nm, ya que son dos exposiciones sin muchos elementos y bastante limpias. Como se puede apreciar en las imágenes 3.15, se han escogido estas exposiciones por su sencillez en el análisis ya que presentan una de las líneas más características del aluminio (Al II = 199.054 nm).

Figura 3.15: Ventanas de medida centradas: (a) $\lambda = 199$ nm y (b) $\lambda = 201$ nm, para la determinación de la dispersión (Disp).

Para el ejemplo de la figura sería:

$$Disp = \frac{1pixel}{|p_2 - p_1| / |\lambda_{nominal_2}(512) - \lambda_{nominal_1}(512)|} = \frac{1pixel}{|169.57 - 458.39| / |201 - 199|} = 0.006925 \frac{nm}{pixel} \quad (3.4)$$

Como se verá en los resultados, para las dos ventanas de trabajo 281.6 nm y 655.8 nm la dispersión disminuye ligeramente según se va aproximando al infrarrojo.

Cálculo del Error de Cero (ErrCero):

El error de cero se ha calculado comparando las longitudes de onda de los picos del espectro obtenido, con la longitud de onda de referencia tomada del NIST. Un ejemplo de cómo se han realizado los cálculos para la misma ventana utilizada anteriormente, figura 3.16:

Para este caso la ventana de medida se centró según el monocromador en la longitud de onda de 199 nm, esto quiere decir que según el sistema experimental al píxel 512 le corresponde la longitud de onda de 199 nm. Tras identificar los picos, como en el caso anterior:

- Línea de Al II con longitud de onda según el NIST de 199.054 nm al que le corresponde el píxel 158.39.

Figura 3.16: Ventanas de medida centrada en $\lambda = 199$ nm para la determinación del error de cero (ErrCero)).

- Línea de Cu II con longitud de onda según el NIST de 199.999 nm al que le corresponde el píxel 593.74.

Se observa que hay un error en el cero del equipo. Este error se calcula mediante la diferencia entre la longitud que marca el monocromador y la longitud calculada con los datos del NIST, que en este caso será:

$$ErrCero = \lambda_{NIST}(512) - \lambda_{nominal}(512) = 199.4247 - 199 = 0.4247nm \quad (3.5)$$

Por lo tanto, para la ventana centrada en 199 nm la calibración en longitud de onda quedaría:

$$\begin{aligned} \lambda_{real}(pixel) &= \lambda_{nominal}(512) + ErrCero + (pixel - 512)Disp \\ &= 199 + 0.4247 + (pixel - 512) \cdot 0.006925 \end{aligned} \quad (3.6)$$

Como se verá a lo largo de los siguientes capítulos, finalmente solo se ha trabajado con dos ventanas de medida, y aunque la calibración se ha realizado para todo el rango de longitud de onda, realmente las ventanas más interesantes son las centradas en 281.6 nm y 655.8 nm, cuyas calibraciones son:

- Ventana 281.6 nm:

$$\lambda_{real}(pixel) = 281.6 + 0.4373 + (pixel - 512) \cdot 0.00684 \quad (3.7)$$

- Ventana 655.8 nm:

$$\lambda_{real}(pixel) = 655.8 + 0.579 + (pixel - 512) \cdot 0.00544 \quad (3.8)$$

Capítulo 4

Diagnosís del Plasma

4.1. Introducción

Una forma adecuada de caracterizar el plasma en el proceso LSP es mediante la técnica de Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) o como se denomina en castellano “Espectroscopía de ruptura inducida por láser”. Esto es debido a que, como se verá a continuación, el propio proceso industrial es en sí mismo la fuente espectroscópica que necesita esta técnica. De esta forma, para el análisis del plasma sólo hay que añadir al dispositivo experimental un módulo espectroscópico (fibra óptica, cámara CCD y monocromador) para realizar la caracterización.

El láser es una fuente luminosa basada en la emisión estimulada de radiación por la materia que se caracteriza por sus propiedades de monocromaticidad, coherencia y emisión de la luz en un haz de dirección bien determinada. La elección del láser adecuado permite la ablación de un material, es decir, su extracción y vaporización donde se genera el plasma.

4.2. Método LIBS

La espectroscopía de ruptura inducida por láser (Laser Induced Breakdown Spectroscopy, LIBS) es una técnica muy atractiva debido a su simplicidad, ya que casi cualquier material es susceptible de ser analizado por este método, con poca o ninguna preparación de la muestra y la capacidad de llevarlo a cabo tanto en atmósferas controladas como en condiciones normales. Como la técnica LIBS permite obtener información cualitativa y cuantitativa de materiales en cualquier estado (sólido, líquido o gaseoso), es una técnica espectroscópica cuya aplicación ha aumentado significativamente en los últimos años tanto para la determinación de parámetros físicos del plasma, como en la realización de estudios analíticos para la determinación de abundancia de un determinado elemento o especie iónica en una muestra, lo que es de gran utilidad en otras aplicaciones en multitud de campos: industria, medicina, arqueología, oceanografía. . . :

A nivel del estudio de parámetros atómicos del plasma se puede destacar su aplicación en la determinación de parámetros atómicos como: probabilidades de transición (con lo que se pueden estudiar también las vidas medias), anchuras y desplazamientos de diferentes líneas espectrales de las diferentes especies del plasma analizado, etc. En lo referente a esta parte, los cálculos y la experiencia demuestran que, para conocer con precisión la estructura atómica no es suficiente con reproducir adecuadamente sus niveles de energía, sino que es necesario dar cuenta de las probabilidades de transición de las líneas que se producen entre dichos niveles. Aparte de su importancia práctica, las probabilidades de transición constituyen parámetros atómicos muy sensibles a la forma concreta de las funciones de onda, de modo que su conocimiento, así

como el de las vidas medias, constituye una de las piedras angulares de la teoría atómica. Estas aplicaciones son las que se llevan desarrollando durante más tiempo y varios ejemplos de este tipo de estudios son:

- Sobre el estudio de probabilidades de transición: Alonso-Medina (2014), Mayo and Ortiz (2008) o Alonso-Medina et al. (2001).
- Sobre fuerzas de oscilador: Ortiz and Mayo-García (2012).
- Sobre el estudio de anchuras y desplazamiento de líneas espectrales: Aragón et al. (2011), Alonso-Medina (2010), Mayo et al. (2007), Bredice et al. (2007) o Martínez and Blanco (1999).

Con respecto a las demás aplicaciones cabe destacar su utilidad en:

- La exploración planetaria in situ (Giacomo et al. (2008), Sallé et al. (2005a), Sallé et al. (2005b)) y de meteoritos (Longo et al. (2016), Dell’Aglia et al. (2014)).
- El análisis elemental (Sabsabi et al. (2005), St-Onge et al. (2004), Detalle et al. (2001), Drogoff et al. (2001)...).
- Los controles de producción de aceros (Barrette and Turmel (2001)). En concreto en la determinación de pequeñas concentraciones de elementos como el carbono, azufre o níquel en aceros Aragón et al. (1993), González et al. (1995), Cremers and Radziemski (2006).
- El estudio de terrenos (Lazic et al. (2001), Capitelli et al. (2002), Senesi et al. (2009)).
- Estudios oceanográficos Pandhija and Rai (2009) o Michel et al. (2006). Para la determinación de contaminantes Michel and Sonnichsen (2016)
- Estudios arqueológicos y de limpieza y restauración de obras de arte: Klein et al. (2000), Colao et al. (2004), Corsi et al. (2005), Arafat et al. (2013), Abdel-Kareem et al. (2016)
- La caracterización de materiales preciosos para joyería (García-Ayuso et al. (2002), Jurado-López and Luque de Castro (2003),...).
- El control de calidad de productos farmacéuticos (St-Onge et al. (2002), Dubey et al. (2011)).
- Análisis médicos: como para la detección de elementos cancerígenos Corsi et al. (2003) o la detección de piedras en el riñón Shameem et al. (2016).

Frente a otros métodos, los plasmas producidos por láser (PPL) ofrecen grandes ventajas como el elevado poder emisor que presentan. Además, las altas temperaturas que se alcanzan garantizan en la mayoría de casos la existencia de Equilibrio Termodinámico Local (ETL), lo cual facilita la determinación de probabilidades de transición en escala absoluta. Se trata también de una técnica la cual puede no ser destructiva para las muestras que se analizan, que como ya se ha mencionado, no necesita de su preparación previa. Esto permite la realización de estudios de la superficie de las muestras con resolución espacial a partir del cráter que se forma debido al impacto del haz láser enfocado.

No obstante, el método presenta también algunos inconvenientes. Debido a la gran irradiancia de los láseres utilizados, la cantidad de material evaporado en la muestra es muy elevada, por lo que puede ocurrir que el plasma creado no se comporte como una fuente de luz ópticamente delgada, pudiéndose observar en algunos casos la absorción de las líneas más intensas,

especialmente las resonantes y las que decaen a un nivel metaestable. Por otro lado debido a las elevadas densidades de electrones, aparecen campos electrostáticos muy intensos, por lo que las líneas espectrales pueden verse absorbidas, presentando grandes ensanchamientos, antisimetrías o formas irregulares, como también cierto desplazamiento. En cualquier caso la densidad de electrones del plasma va disminuyendo en el tiempo y de igual modo lo van a hacer el resto de efectos. Por ello se puede elegir una ventana de tiempos apropiada en la cual estos efectos no sean demasiado grandes y, a la vez, no comprometamos la intensidad de las líneas. Con respecto a la resolución espacial, por lo que se ha comentado anteriormente, este tipo de medidas están sujetas a variaciones debidas a las inhomogeneidades locales de la muestra, que también afectan a la cantidad de luz recogida por el sistema experimental. Todo lo anterior puede ser salvado realizando un número suficiente de medidas en diferentes puntos de la muestra.

4.3. Formación del plasma

La formación del plasma se origina en la emisión de electrones y su crecimiento a raíz de la interacción de un pulso láser de alta energía con un material. Esto es común para todos los materiales con independencia de su estado (sólido, líquido o gaseoso), aunque en concreto, es de gran interés la interacción del pulso láser con materiales sólidos en los cuales parte del material es arrancado de la superficie produciendo lo que se conoce como ablación láser, que es el estudio llevado a cabo en esta Tesis. Los mecanismos de interacción láser-materia son muchos y muy complejos y como se ha mencionado en las secciones anteriores, hoy en día todavía no existe una teoría universalmente aceptada al respecto. Además hay diferencias significativas en el mecanismo de la creación y evolución del plasma mediante la variación del montaje experimental.

La interacción de un pulso láser con una muestra sólida produce, si la energía depositada es suficientemente alta y el material es absorbente o posee lugares de absorción microscópicos, un rápido incremento de la temperatura de la superficie llegando a vaporizarse parte del material mediante diferentes mecanismos de absorción de radiación. Para que esto suceda, la irradiancia del láser, definida como la potencia aplicada por unidad de superficie (W/cm^2), es un parámetro clave que tiene un impacto sobre los efectos causados por el láser en la muestra y que también puede afectar a la evolución del plasma. Esta debe superar cierto umbral que depende fuertemente del material en cuestión pero que suele encontrarse entre los 10^7 y los $10^{10} \text{ W}/\text{cm}^2$. De esto se desprende que el fenómeno de la ablación depende fuertemente de los parámetros del láser junto con de las propiedades físicas y químicas del material y de la composición de la atmósfera.

En general, la ablación láser se rige por una variedad de distintos mecanismos no lineales. Una vez que el rayo láser incide sobre la superficie de la muestra parte de su energía se transforma en calor, el cual eleva la energía de los electrones de la superficie del material, de tal manera que parte de su masa se desprende en forma de electrones, iones, átomos, moléculas y partículas, cada uno de estos procesos separados en el tiempo y el espacio. La comprensión de los mecanismos fundamentales implicados en cada uno de estos procesos es crítica para realizar la elección correcta de las características del láser para que la ablación se dé de la forma más apropiada para el análisis que se quiera realizar. Esta comprensión de la interacción láser-materia permitirá la ablación del vapor estequiométrico y el control de las propiedades plasmáticas inducidas por láser para un rendimiento óptimo de LIBS. En general el proceso de ablación está acompañado por otros dos fenómenos: la generación de luz (el plasma) y la de sonido (onda de choque).

La ablación con láser se dividirá en tres procesos principales para la discusión en este capítulo:

- Vaporización del material e inicio del plasma.
- Expansión y enfriamiento del plasma.
- Expulsión y condensación de partículas.

Estos procesos de ablación con láser ocurren a lo largo de varios órdenes de magnitud en el tiempo, comenzando con la absorción electrónica de la energía óptica láser, a los 10^{-15} segundos de haberse producido el impacto del pulso láser, y hasta la condensación de partículas a los 10^{-3} segundos.

La figura 4.1 muestra un resumen de estos tres procesos y diversos mecanismos que ocurren durante cada uno. Durante el proceso de ignición del plasma, los mecanismos y las propiedades del plasma dependen fuertemente de la irradiación del láser y de la duración del pulso. Para un pulso láser de nanosegundos con irradiancias inferiores a 10^8 W/cm^2 , el mecanismo dominante es la vaporización térmica: la temperatura de la superficie sólida aumenta, y se produce una transición de fase bien definida, de sólido a líquido, de líquido a vapor y de vapor a plasma. Para un pulso láser de picosegundos con irradiancia entre $10^{10} - 10^{13} \text{ W/cm}^2$, existen mecanismos térmicos y no térmicos tales como la explosión de Coulomb. Para irradiaciones superiores a 10^{13} W/cm^2 con un pulso láser de femtosegundos, la explosión de Coulomb es el principal mecanismo de rotura de enlaces.

Figura 4.1: Esquema de la secuencia de eventos después del impacto de un pulso láser corto enfocado sobre la superficie de una muestra sólida. Siendo: e^- electrones libres; i especies iónicas; a especies atómicas y m las especies moleculares.* Indica las especies excitadas.

Cuando la duración del pulso láser está en la región de tiempo del nanosegundo, la iniciación de la formación de plasma sobre la superficie del material comienza en el calentamiento del vapor generado en la superficie. La radiación láser en este momento es absorbida mayormente por el mecanismo llamado *Bremsstrahlung inverso*, en el cual los fotones del haz láser son absorbidos por electrones libres durante la colisión con otros átomos. Los electrones muy energéticos generados por *Bremsstrahlung inverso* producirán a su vez más electrones en cascada al colisionar con otras partículas obteniéndose un incremento en la densidad electrónica. Llegados

a un punto crítico de densidad electrónica, la luz láser puede verse apantallada por dichos electrones formándose el denominado “plasma shielding”, Kunze (2009). A tiempos inferiores a 100 ns el efecto conjunto de la recombinación y la radiación de frenado “*Bremsstrahlung inverso*” produce un espectro continuo donde las líneas de emisión son anchas y muy poco distinguibles.

Para la ablación con láseres pulsados de picosegundos, el pulso láser es demasiado corto como para ser absorbido por el plasma. El “plasma shielding” influirá en la cantidad de masa de la superficie que se convierte en vapor y en las propiedades de este. Sin embargo, el plasma producido por láser se expande en el vacío o en la atmósfera del medio circundante, donde los electrones libres presentes en el plasma modifican la propagación de la luz láser; este plasma puede absorber parte del pulso de picosegundos. Con los pulsos de láseres de femtosegundos, el “plasma shielding” puede despreciarse ya que ninguna masa puede ser expulsada de la superficie con una duración del pulso tan corto.

La expansión del plasma comienza después del proceso de encendido por plasma. Este proceso se regirá por las propiedades iniciales del plasma y atmósfera donde se produce la expansión, una vez finalizado el pulso láser. Las propiedades del plasma (densidad de electrones, temperatura y velocidad de expansión), al inicio dependen fuertemente de las propiedades del láser. La expansión del plasma estará relacionada con la masa y la energía iniciales en la pluma de vapor formada y el medio en el que se trabaje. La expansión del plasma será adiabática hasta aproximadamente 1 microsegundo tras el pulso láser, esto es una conversión de la energía térmica en energía cinética de los elementos de la pluma del plasma. Después de ese tiempo, la temperatura disminuye con lo que también se produce una disminución del continuo en el espectro.

Las partículas nanométricas se formarán a partir de la condensación del vapor. Este fenómeno comienza cuando la temperatura de la pluma alcanza la temperatura de ebullición del material ($\sim 3000\text{ K}$) y se detiene a la temperatura de condensación del material ($< 2000\text{ K}$). La expulsión de partículas líquidas puede ocurrir por el gradiente de presiones a la cual está sometida la pluma del plasma al expandirse y que actúa sobre la superficie fundida. La pérdida de masa puede ocurrir por los grandes gradientes de tensión térmica debido al rápido proceso de calentamiento; las tensiones térmicas pueden romper la muestra en partículas de forma irregular, expulsándolas de la superficie.

Como se acaba de describir el **ancho del pulso** y la **irradiancia** del láser son dos de los parámetros más importantes a la hora de estudiar la ablación de material sólido. Además, la interacción del láser con el material también depende fuertemente de la **longitud de onda** utilizada y de las **propiedades del material** a tratar, como pueden ser la reflectividad, la densidad, la conductividad térmica, la orientación de la red cristalina. . . Esto es debido a que es muy importante que el material en el que se enfoca el haz láser sea capaz de absorber la energía depositada ya que en caso contrario podría dañarse la muestra.

La **atmósfera** en la que se lleva a cabo la ablación también es un parámetro relevante, por ello existen varios estudios acerca del efecto de la presión y del gas circundante en plasmas inducidos por láser, como por ejemplo Cristoforetti et al. (2004). En general la pluma del plasma en condiciones de vacío ($< 1\text{ mbar}$) se expande libremente, pero cuando la ablación se lleva a cabo en un gas (o en un líquido) con presiones mayores de 1 mbar el material arrancado comprime el medio circundante formando las ondas de choque. Se ha observado que cuando la presión a la que se realiza la ablación aumenta, el plasma experimenta cierto confinamiento espacial en las proximidades de la muestra y la velocidad de expansión de la pluma disminuye.

El confinamiento produce plasmas más densos y calientes que pueden ver incrementadas las intensidades de emisión, aunque también podría observarse una mayor emisión del continuo y mayores efectos de autoabsorción.

4.4. Espectroscopía del plasma

Como ya se ha mencionado, en los plasmas producidos por láser el medio formado por la materia arrancada presenta un alto grado de ionización y una alta velocidad de expansión. Debido a la emisión de estas especies ionizadas y a fenómenos de recombinación y radiación de frenado o *bremsstrahlung* se suele observar un destello en la región del plasma.

Estos plasmas son fuentes espectroscópicas de gran poder emisor que permiten la observación del espectro de los átomos neutros e iones de las especies presentes. Mediante el estudio de estos espectros se puede deducir gran cantidad de datos de la estructura atómica así como las condiciones en las que se encuentran las partículas (átomos neutros, iones y electrones) que forman el plasma, además de caracterizar el plasma, ya que el estudio de estas líneas permite la determinación de la temperatura y de su densidad de electrones.

En la emisión de los plasmas producidos por láser pueden observarse líneas espectrales características de los elementos que forman el plasma como sucede en cualquier otra fuente espectroscópica, pero a diferencia de otros medios emisivos, en éstos aparece un continuo de emisión relativamente intenso en los primeros microsegundos.

El espectro continuo observado en estos plasmas procede de dos tipos de procesos fundamentales, por una parte la recombinación de iones y por otra de la radiación de frenado que emiten los electrones del plasma Lochte-Holtgreven and Malamud (1970), Tondello (1986) y Konjević (1999). Si la emisión del plasma se adquiere cerca del inicio del plasma (≤ 100 ns), el espectro presentará un alto continuo de emisión o también llamado ruido de fondo, y las líneas de emisión serán anchas y muy poco distinguibles. Sin embargo, si se realiza la medición en tiempos del orden de los microsegundos, el enfriamiento hará disminuir el continuo lo cual refleja la importancia de una buena elección del tiempo y la ventana de medida en los experimentos LIBS.

Figura 4.2: Gráfico de la evolución temporal de un plasma inducido por láser.

Como puede observarse en la figura 4.2 es importante para la detección con resolución temporal fijar el parámetro denominado “tiempo de retardo” o “delay” el cual nos indica el tiempo transcurrido desde el inicio del pulso láser hasta el inicio de la adquisición de la señal. Debido a

la rápida evolución de este tipo de plasmas es también importante definir el “ancho de ventana” o “tiempo de adquisición”, es decir, la cantidad de tiempo durante el cual se adquiere dicha señal o dicho de otra manera, el tiempo entre el inicio de la adquisición, fijado por el retardo, y el final de la adquisición.

Por otro lado, debido a que en este tipo de plasmas se alcanzan temperaturas muy elevadas, generalmente es apreciable la densidad de población de niveles de alta energía, por lo se pueden observar gran cantidad de líneas provenientes de estos niveles, que no aparecen o son muy débiles cuando se emplean otras fuentes espectroscópicas. Además, como es de esperar las energías implicadas son muy altas por lo que el grado de ionización de los iones que forman el plasma es relativamente alto, lo que facilita frente a otras técnicas la observación de líneas de primer y segundo, e incluso en algunos casos, del tercer ión.

4.4.1. Anchura y forma de las líneas

Las líneas de emisión de un espectro de cualquier plasma no son perfectamente monocromáticas, sino que tienen una distribución de intensidades alrededor de la longitud de onda central. Los ensanchamientos de las líneas de emisión se deben a los diferentes procesos en el plasma siendo por tanto, en el caso de los plasmas inducidos por láser, dependientes del tiempo en el que se adquirieron. A continuación se van a detallar los fenómenos más notables que producen el ensanchamiento de las líneas en este tipo de plasmas como son: la anchura natural, el efecto Doppler, las colisiones y el ensanchamiento Stark. Los dos últimos son casos específicos de ensanchamientos por colisiones. Por otro lado también hay que tener en cuenta en este apartado, la anchura instrumental del equipo de medida, esto es debido a que las líneas espectrales observadas experimentalmente tienen una forma que resulta de la convolución del perfil instrumental con el perfil propio de la línea.

• Ensanchamiento natural

El ensanchamiento natural se relaciona con el principio de incertidumbre y con el hecho de que los niveles energéticos no tienen una energía perfectamente definida. Es decir, como la relación de incertidumbre entre la energía y el tiempo establece que:

$$\Delta E \Delta t \approx \hbar \quad (4.1)$$

lo que exige que la anchura, medida en energías, de un estado electrónico del átomo sea inversamente proporcional a la incertidumbre en tiempos asociada a la posibilidad de encontrar al átomo en dicho estado. Al expresar la anchura natural en longitudes de onda mediante la relación $\frac{\Delta E}{E} = \frac{\Delta \lambda}{\lambda}$ resulta:

$$\Delta \lambda = \frac{\lambda}{E} \frac{\hbar}{\tau} \quad (4.2)$$

siendo τ la vida media del nivel superior de la transmisión. La ecuación de la anchura para una transición entre los estados i y j :

$$\Delta \lambda_{Nat} = \lambda^2 \frac{\left(\sum_{j'} A_{j'j} + \sum_{i'} A_{ii'} \right)}{2\pi c} \quad (4.3)$$

donde $A_{j'j}$ es la probabilidad de transición entre los estados j y cualquier nivel j' “permitido”. El ensanchamiento natural es mayor cuando uno de los dos niveles está acoplado dipolo al estado

fundamental. Aun así este tipo de ensanchamientos suelen ser despreciable (del orden de 10^{-4} nm, para longitudes de onda del orden de los 400 nm) frente a otros más importantes en la emisión de un plasma inducido por láser. El ensanchamiento natural presenta más importancia en la emisión de plasmas en descargas a baja presión por tener éstos una densidad electrónica baja. Si se hiciera un estudio más detallado se llegaría a que este tipo de ensanchamientos conducen a perfiles lorentzianos, los cuales se describirán próximamente, Thorne (1988) y Konjević (1999).

• Ensanchamiento Doppler

El ensanchamiento Doppler se produce por el efecto del mismo nombre, en el cual una diferente agitación térmica de las partículas puede producir pequeños corrimientos en la intensidad adquirida alrededor de la longitud de onda central. Este tipo de ensanchamiento se deduce de la suposición de que la distribución de velocidades de las partículas que forman el plasma sigue una distribución de Maxwell:

$$\frac{dN(v_x)}{N} = \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{-(v_x/\alpha)^2} dv_x \quad (4.4)$$

donde la fracción de partículas con velocidades comprendidas entre v_x y v_x+dv_x para una temperatura T es la anterior, ecuación (4.4). Siendo α es la velocidad central de la distribución definida por:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \quad (4.5)$$

en la que k_B es la constante de Boltzmann (J/K), T la temperatura absoluta en K y m la masa atómica.

Como el desplazamiento Doppler viene dado por:

$$-\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} = \frac{v_x}{c} \quad (4.6)$$

la ecuación (4.4) queda como

$$\frac{dN(v_x)}{N} = \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{-c^2(\Delta v)^2/v_0^2\alpha^2} \frac{c}{v_0} dv \quad (4.7)$$

por lo que el perfil observado es de tipo gaussiano con la siguiente forma

$$I(v) = I_0 e^{-[c(\Delta v)/v_0\alpha]^2} \quad (4.8)$$

Este ensanchamiento está relacionado con la temperatura del plasma, la masa del átomo radiante y la longitud de onda; en el plasma analizado en este trabajo se han obtenidos valores de la milésima de nm y es, por tanto, despreciable en comparación con otros efectos, según las aproximaciones de Griem (1964) y Konjević (1999). El perfil de línea debido a la presencia de efectos Doppler puede describirse bien mediante un perfil gaussiano con un FWHM (nm):

$$\Delta\lambda_{Dop} = \lambda_0 \sqrt{\frac{8k_B T \ln 2}{mc^2}} \cong 7.16 \cdot 10^{-7} \lambda_0 \sqrt{\frac{T}{m}} \quad (4.9)$$

donde λ_0 (nm) es la longitud de onda en el centro de la línea, k_B es la constante de Boltzmann (J/K), T la temperatura absoluta en K , m la masa atómica del emisor y c la velocidad de la luz expresada en m/s.

• Ensanchamiento colisional

En plasmas de alta densidad, tanto el ensanchamiento natural como el Doppler son despreciables frente al ensanchamiento que tiene lugar, en este caso, como consecuencia de la interacción de los átomos e iones emisores con las partículas circundantes. También es conocido como ensanchamiento por presión y es el que se produce por el desplazamiento de los niveles de energía de átomos e iones que se encuentran próximos en el plasma debido a la interacción entre ambos. Este desplazamiento depende de la distancia media entre partículas y, por tanto, de la presión.

Este tipo de interacción no afecta por igual a todos los niveles de energía, sino que depende a su vez de las interacciones que tenga cada configuración dentro del átomo o ion con las otras configuraciones que lo forman. Por lo tanto, además de un ensanchamiento también se puede producir un desplazamiento de las longitudes de onda observadas.

Casos particular de este ensanchamiento colisional o por presión son: el ensanchamientos resonante, el ensanchamiento de Van der Waals y el ensanchamiento Stark. Este último es el que más afecta a los perfiles de línea observados en los plasmas producidos por láser y es objeto de estudio de esta tesis.

– Ensanchamiento resonante y el ensanchamiento Van der Waals

Estos ensanchamientos ocurren por las interacciones del átomo radiante con otros átomos circundantes de la misma especie y de otras especies respectivamente. Ambos son prácticamente despreciables (del orden de 10^{-3} nm) en comparación a otros ensanchamientos, Konjević (1999).

Ensanchamiento resonante

El ensanchamiento resonante ocurre en las transiciones que implican a un nivel que es dipolo-acoplado y al estado fundamental. Griem (1997) derivaron una ecuación para la evaluación de la anchura:

$$\Delta\lambda_{Res} \cong \frac{3e^2}{16\pi\epsilon_0 m_e c^2} \lambda^2 \lambda_R f_R N_i \sqrt{\frac{g_i}{g_j}} \cong 1.63 \cdot 10^{-13} \lambda^2 \lambda_R f_R N_i \sqrt{\frac{g_i}{g_j}} \quad (4.10)$$

donde e y m_e son la carga y masa del electrón respectivamente, ϵ_0 es la permeabilidad del vacío, c la velocidad de la luz, λ es la longitud de onda de la radiación observada, λ_R y f_R son respectivamente la longitud de onda y la fuerza de oscilador de la línea resonante, N_i es la densidad del nivel superior (i) y por último g_i y g_j que son los pesos estadísticos. Los ensanchamientos resonantes tienen un perfil lorentziano.

Ensanchamiento de Van der Waals

El ensanchamiento de Van der Waals es el resultado de la interacción dipolar entre un átomo excitado y el dipolo inducido de una partícula neutra de estado fundamental con densidad N_i . El ensanchamiento de Van der Waals tiene una forma lorentziana y la expresión aproximada para el FWHM puede ser dada como (Griem (1964)):

$$\Delta\lambda_{Van} = \frac{\lambda_{ij}^2}{2\pi c} 8.16 \left(\frac{C_6}{\hbar} \right)^{2/5} \bar{\nu}^{3/5} N_i \quad (4.11)$$

siendo $\bar{\nu}$ la velocidad relativa media entre el átomo y el átomo excitado:

$$\bar{\nu} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi \mu}} \quad (4.12)$$

con μ como la masa reducida del átomo excitado.

En la ecuación (4.11) C_6 representa la constante de Van der Waals relacionada con la interacción de corto alcance y puede medirse o calcularse como:

$$C_6 = e^2 \alpha a_0^2 \left[\overline{R_i^2} - \overline{R_j^2} \right] \quad (4.13)$$

donde α y a_0 son la polarizabilidad dipolar media de los excitados y el radio de Bohr, respectivamente. $\overline{R_i^2}$ y $\overline{R_j^2}$ son los radios medios al cuadrado de los niveles i y j de la transición, respectivamente, estos se pueden calcular, para cada caso, a partir de:

$$\overline{R_i^2} = \frac{n_i^{*2}}{2} \left[5n_i^{*2} + 1 - 3l_i(l_i + 1) \right] \quad (4.14)$$

con l_i el número de orbital cuántico y n_i^{*2} el cuadrado del número cuántico efectivo del nivel i .

$$n_i^{*2} = \left(\frac{E_{Ryd}}{E_{ion} - E_i} \right) \quad (4.15)$$

En esta ecuación E_{Ryd} es la constante de Rydberg, E_{ion} es el nivel de ionización y E_i la energía del nivel superior o inferior de la línea de transición.

– Ensanchamiento Stark

El origen de este ensanchamiento es el efecto Stark cuántico provocado por las interacciones del átomo emisor con las partículas cargadas del plasma, es decir, con iones y electrones. Estos campos, que a partir de 10^6 o 10^7 V/m pueden producir variaciones de unas pocas décimas en el número de onda, afectan a la energía de los niveles atómicos los cuales se desdoblán en varios si son degenerados.

Dadas las altas densidades de iones que se alcanzan en estos plasmas, los campos que intervienen son tan elevados que éste es el tipo de ensanchamiento más importante en los plasmas formados por láser, variando las anchuras características en el rango de 0.01 a 0.1 nm.

El estudio teórico de este fenómeno es complicado y puede seguirse en el libro de Griem (1964), pero en líneas generales se puede resumir que el ensanchamiento es proporcional a la densidad de electrones con un factor conocido como parámetro de ensanchamiento Stark que varía en muchos casos con la raíz cuadrada de la temperatura, aunque el comportamiento general es de la forma $\omega \propto T$.

Ensanchamiento Stark para líneas de átomos neutros:

Según la teoría de Stark, la forma de las líneas no hidrogenadas aisladas se determinan principalmente por impactos de electrones con el átomo y en una menor contribución por los microcampos eléctricos generados por iones de plasma esencialmente estáticos. El efecto Stark cuadrático debido al campo cuasiestático de los iones desplaza la energía del nivel superior e inferior en una cantidad que depende de la intensidad instantánea del campo local. La distribución de los campos en el plasma hacen que la línea del átomo neutro se amplíe asimétricamente, siendo la anchura total máxima a media altura, $\Delta\lambda_{Stark}$ (FWHM):

$$\Delta\lambda_{Stark}(N_e, T_e) \cong 2w_e(T_e) [1 + gDA_N(T_e)] N_e 10^{-16} \quad (4.16)$$

donde:

$$g = 1.75(1 - 0.75R)$$

$$g_1 = g/1.75$$

$$A_N(T_e) = A(T_e) N_e^{1/4} 10^{-4}$$

$$R = 8.99 \times 10^{-2} N_e^{1/6} T_e^{1/2} \leq 0.8$$

$$0.05 \leq A(T_e) N_e^{1/4} 10^{-4} \leq 0.5$$

$w_e(T_e)$ y $A(T_e)$ son valores de la anchura media del impacto de electrones (HWHM) y el parámetro de ensanchamiento iónico tabulada a una densidad de electrones de 10^{16} cm^{-3} en Griem (1974). Además D es el parámetro dinámico del ión. Por otro lado el parámetro de protección de Debye, R , se define como una relación entre la distancia promedio inter-ion y el radio de Debye. Para más detalles acerca de la determinación simultánea de $w_e(T_e)$, $A(T_e)$ y D , se puede encontrar en Ivković et al. (2006).

Ensanchamiento Stark para líneas de átomos ionizados:

El ensanchamiento total a media altura $\Delta\lambda_{Stark}$ de átomos una vez ionizados puede ser calculado por:

$$\Delta\lambda_{Stark}(N_e, T_e) \cong 2w_e(T_e) 10^{-17} N_e \quad (4.17)$$

donde $w_e(T_e)$ es el valor de la anchura media del impacto de electrones a una densidad de electrones de 10^{16} cm^{-3} (HWHM). En este caso, se estima que el ensanchamiento de iones es insignificante. Esta omisión de la contribución de iones puede ser fácilmente justificada en la mayoría de las aplicaciones.

Convolución de las líneas

Una vez conocidos los efectos que se acusan en la forma de las líneas, se suele considerar el perfil de la línea obtenida como un perfil de Voigt que es la convolución de los perfiles lorentziano y gaussiano. Por ejemplo, en muchos casos, cuando una línea se puede representar por una lorentziana, la combinación de la presión y el ensanchamiento natural es, de nuevo, una lorentziana y, como el efecto Doppler origina un perfil gaussiano, prácticamente toda línea es una combinación, en distintas proporciones en cada ocasión, de formas lorentziana y gaussiana. Los perfiles gaussianos vienen definidos por la siguiente ecuación (4.18):

$$y = y_0 + \frac{A}{\omega_G \sqrt{\frac{\pi}{2}}} e^{\frac{-2(x - x_c)^2}{\omega_G^2}} \quad (4.18)$$

donde y_0 es el nivel de fondo, A es el área bajo el perfil gaussiano y x_c la longitud de onda en donde se alcanzaría el máximo. Como puede verse en la Figura la anchura a mitad de altura para un perfil Gaussiano se denota FWHM y su relación con la magnitud ω_G de la ecuación está resumida en la figura 4.3.

Figura 4.3: Representación de un perfil Gaussiano.

En el caso del ensanchamiento Stark el perfil de línea obtenido es de tipo lorentziano, cuya distribución $(y_c - y_0)/2$ atiende a la siguiente ecuación:

$$y = y_0 + \frac{2A}{\pi} \frac{\omega_L}{4(x - x_c)^2 + \omega_G^2} \quad (4.19)$$

en ella y_0 es el nivel de fondo, A es el área bajo el perfil Lorentziano, ω_L es la anchura del perfil a mitad de altura y x_c la longitud de onda en donde se alcanzaría el máximo. Estas magnitudes se encuentran esquematizadas en la Figura 4.4

Figura 4.4: Representación de un perfil Lorentziano.

Lo más habitual es que la línea de emisión sufra ambas perturbaciones dando lugar al denominado perfil de Voigt que se define como la convolución del perfil gaussiano y el perfil lorentziano y cuya definición se recoge en la ecuación (4.20), donde $f(x)$ representa un perfil gaussiano y $g(x)$ un perfil lorentziano.

$$\begin{aligned}
f(x) \otimes g(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x) g(x-y) dy \\
&= y_0 + A \frac{2 \ln 2}{\pi^{3/2}} \frac{\omega_L}{\omega_G^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{\left(\left(\sqrt{\ln 2} \frac{\omega_L}{\omega_G} \right)^2 + \left(\sqrt{4 \ln 2} \frac{x - x_c}{\omega_G} - t \right)^2 \right)^2} dt
\end{aligned} \tag{4.20}$$

La integral que define al perfil de Voigt no es resoluble analíticamente, aunque sí se puede tabular numéricamente, pero esta circunstancia no impide conocer algunas de sus propiedades referentes a la convolución de cualquier número de distribuciones $f(x)$ o $g(x)$:

- Se produce de nuevo una integral de Voigt cuya semianchura FWHM es la suma de las semianchuras de los perfiles de Lorentz.
- El cuadrado de su anchura gaussiana es la suma del cuadrado de las componentes de Gauss.

La característica principal de un perfil de Voigt es que las alas de la línea se determinan por la componente lorentziana, mientras que la parte central alrededor del pico y la anchura FWHM lo hacen por la gaussiana, como se puede apreciar en la figura 4.5.

Figura 4.5: Comparación de los perfiles Gaussiano y Lorentziano con su convolución, perfil de Voigt.

Una vez adquirido un espectro de emisión proveniente de un plasma inducido por láser es posible deducir de la intensidad, área y forma de las líneas de emisión información sobre parámetros físicos del plasma. Este es el caso de la temperatura y la densidad electrónica que se explicarán más adelante.

El caso concreto del estudio de la anchura y forma de las líneas del plasma generado por el proceso LSP del Centro Láser de la UPM, se tienen que tener en cuenta dos cosas:

1. El fenómeno más notable para este tipo de plasmas es el colisional y en concreto el ensanchamiento Stark, por lo que dentro de la convolución con el resto de fenómenos, será más importante la parte lorentziana dentro del perfil de Voigt.
2. Como ya se ha comentado anteriormente hay que conocer perfectamente la anchura del perfil instrumental del equipo utilizado. Es muy normal tener que ajustar el perfil obtenido y restarle la anchura instrumental para ser rigurosos en los cálculos posteriores.

Además, mencionar que todos los ajustes de los datos experimentales realizados en esta tesis para la obtención de ensanchamientos, desplazamientos o intensidades, comparación de líneas... se han hecho con el software OriginPro.

Anchura Instrumental

Para determinar correctamente las anchuras reales y los perfiles de las líneas es preciso distinguir el perfil instrumental del monocromador del espectro experimental obtenido en las medidas. Esto es debido a que podría llegar a contribuir en el ensanchamiento de las líneas de interés. En un espectrómetro ideal con rendijas absolutamente paralelas y alineadas, el perfil instrumental sería de forma triangular. No obstante, debido a los defectos de construcción de las rendijas, este perfil triangular tiende a redondearse en los bordes aproximándose a líneas gaussianas o lorentzianas.

Figura 4.6: Imagen lámpara de Hg(Ar)

El ancho de banda de un monocromador es medido mediante el registro del perfil de una línea de emisión estrecha, como por ejemplo de un láser o de una lámpara de descarga de baja presión. En este caso se ha medido el perfil instrumental mediante una lámpara de calibración espectral de Hg (Ar) y otra de Ne, ambas de la marca Oriel (Figura 4.6), cuyas características se pueden ver en el Apéndice A. Las líneas de emisión de estas lámparas se corresponden con sus especies neutras, Hg I y Ne I respectivamente, las cuales presentan ensanchamientos menores que el instrumental, siendo posible así fijar la contribución experimental para otras líneas más anchas. Este es el motivo de su elección para este proceso.

La realización de la calibración ha consistido en la obtención de los perfiles de diferentes líneas del Hg I y Ne I en diferentes intervalos de longitudes de onda. Como se explicará en siguientes capítulos para la realización de los cálculos de esta tesis se eligieron las ventanas centradas en 281 nm y 656 nm, por lo que las líneas que se muestran a continuación son las más cercanas a estas exposiciones.

Al tratarse en ambos casos de lámparas de descarga, se ha procedido de la misma forma ajustado a un perfil de Voigt, obteniendo una parte gaussiana y otra lorentziana, como pueden verse en las figuras 4.7, 4.8, 4.9 y 4.10.

Figura 4.7: Perfil de la línea de Hg I, longitud de onda es 253.65 nm, para la determinación de la anchura instrumental con una lámpara de Hg (Ar).

Como se observa en las figuras, al realizar el ajuste, el software proporciona los valores de la línea base (y_0), el píxel en el que está centrada la línea (x_c), el área (A), la anchura gaussiana (wG), la anchura lorentziana (wL) y la anchura total a media altura ($FWHM$).

Figura 4.8: Perfil de la línea de Hg I, longitud de onda es 275.28 nm, para la determinación de la anchura instrumental con una lámpara de Hg (Ar).

En concreto se ha medido la anchura instrumental del equipo en las líneas 253.65 nm, 275.28 nm y 296.73 nm del espectro del Hg I, para el estudio de la ventana centrada en la longitud de onda de 281.6 nm. Puesto que esta es la ventana que se utilizará para la determinación de la temperatura del plasma más adelante.

Figura 4.9: Perfil de la línea de Hg I, longitud de onda es 296.73 nm, para la determinación de la anchura instrumental con una lámpara de Hg (Ar).

Analizando los resultados obtenidos se puede observar que la anchura gaussiana varía entre (15 - 19) píxeles lo que equivaldría a (0.10 - 0.12) nm y la anchura lorentziana está entre (0 - 2) píxeles que en valores de longitud de onda serían (0 - 0.014) nm. Con estos datos se puede realizar el ajuste en las medidas posteriores en los espectros relaizados en este rango de longitudes de onda. Para la medida de la anchura instrumental en la otra ventana de trabajo centrada en 655.8 nm, se escogió la línea 653.29 nm del Ne I.

Figura 4.10: Perfil para la calibración de la anchura instrumental en el rango de medida de la $H\alpha$ obtenido con línea de una lámpara de Ne.

Los valores resultantes del análisis son muy similares a los obtenidos con la lámpara de Hg (Ar) en la otra ventana de medida. Con la lámpara de Ne se obtiene un valor de la anchura

gaussiana de 11.2 píxeles lo cual equivale a 0.06 nm y una anchura lorentziana de 2.7 píxeles que serían 0.015 nm. Por lo que las correcciones son similares en ambos casos.

4.4.2. Evolución y homogeneidad del plasma en estudio

Un aspecto relevante en la técnica LIBS es el relativo a la forma en que evolucionan los plasmas generados por láseres pulsados y, si en dichos plasmas, existen regiones donde la distribución de ciertas especies sean más abundantes que en otras.

Pueden surgir graves dificultades en la diagnosis del plasma por la falta de homogeneidad espacial y temporal de sus parámetros, ver Konjević et al. (2010). Estas dificultades son aún más pronunciadas si se pretende realizar medidas resueltas en estas dos variables. En ese caso, es de la mayor importancia elegir el retardo óptimo entre el pulso láser y la medida y la ventana temporal que dura dicha medida. Por ello se han recogido datos de ventanas de tiempo de 100, 400 y 1000 ns y tiempos de observación o retardo respecto al impacto del láser sobre la muestra de 200, 400, 600, 800 y 1000 ns. Con ello se ha realizado un análisis comparativo, que se muestra en las figuras 4.11, para determinar en qué condiciones se obtienen mejores espectros.

Figura 4.11: Espectros para la determinación del tiempo y la venta de observación. (a) y (b) Espectros con ventana temporal de 100 ns a diferentes tiempos de retardo. (c) y (d) Espectros medidos con tiempo de retardo de 600 ns y 1000ns, respectivamente, a diferentes ventanas temporales.

En cualquier rango de longitud de onda se ha obtenido que los mejores resultados con ventanas de $1\ \mu\text{s}$, mientras que la variación del tiempo de retardo es más sensible. En el caso de la ventana de medida centrada en la longitud de onda de $281.6\ \text{nm}$, que se usará para el cálculo de la temperatura del plasma, el espectro presenta líneas bien definidas y relativamente resultas para retardos superiores a $1\ \mu\text{s}$. Sin embargo en la ventana de la línea de la H_α centrada en la longitud de onda de $655.8\ \text{nm}$, la cual se empleará en la determinación de la densidad del plasma, la línea H_α y la línea $327.39\ \text{nm}$ (segundo orden) de Cu I sólo aparecen a partir de los $4\ \mu\text{s}$ después del pulso láser. Además, en presencia de agua (condiciones LSP) la línea Cu I desaparece debido al apantallamiento que produce el agua. Aunque se esperaba que el agua afectara a las condiciones del plasma, se observa que a los $5\ \mu\text{s}$ después del pulso láser, el perfil y la posición de la línea H_α se han mantenido sin cambios, como se puede ver en la figura 4.12.

Figura 4.12: Emisión de la línea H_α a diferentes tiempos de retardo después del pulso láser.

Para comprobar la homogeneidad en las figuras 4.13, se pueden ver las imágenes de las trazas plasmáticas de las ventanas centradas en $281.6\ \text{nm}$ y $655.8\ \text{nm}$. La distribución radial de la señal se obtuvo directamente a partir de los datos integrados mediante el proceso de inversión de Abbel. Se observa que en ambos casos la dimensión y la forma del plasma se extienden lentamente, lo que es necesario para nuestro propósito.

Figura 4.13: (a) Imágenes de la ventana centrada en 281.6 nm tomada con un retardo después del pulso de $5\mu\text{s}$: (i) Resolución espacial del plasma. (ii) Espectro extraído de la misma exposición de las líneas de Mg I, Mg II y Al II en aire. (b) Imágenes de la ventana centrada en 655.8 nm tomada con un retardo después del pulso de $5\mu\text{s}$: (i) Resolución espacial del plasma. (ii) Espectro extraído de la misma exposición de las líneas del Cu I y H α en aire.

La figura 4.14 muestra los espectros medidos a diferentes distancias del eje del plasma en la ventana de 281.6 nm. Como se puede ver, a excepción de las diferencias ligadas a la menor intensidad de las líneas mientras se aleja del eje del plasma, los perfiles de todas las líneas son similares dentro de las incertidumbres experimentales.

Figura 4.14: Datos obtenidos a diferentes distancias del eje del plasma en una ventana de longitudes de onda de 270–290 nm para el plasma en aire y con un retardo de $1\mu\text{s}$ después del pulso.

Resultado similar se ha encontrado en la ventana de 655.8 nm para la línea H_α , figura 4.15.

Figura 4.15: Perfiles de Voigt obtenidos a diferentes distancias del eje del plasma en una ventana de longitudes de onda de 653–658.5 nm para el plasma en aire y con un retardo de $4 \mu\text{s}$ después del pulso.

En este caso no se muestra el espectro, sino el ajuste realizado mediante un perfil de Voigt (línea roja) como se observa en la figura 4.16, esto es debido a que en caso contrario no se apreciarían bien cada una de las líneas. Teniendo en cuenta este análisis, se comprobó que al utilizar los datos originales integrados para realizar la inversión de Abel, los resultados una vez realizada la inversión dan un perfil de línea que no difiere, dentro de las incertidumbres experimentales, de los resultados obtenidos trabajando directamente con los datos originales, sin integrar.

Figura 4.16: Ejemplo del ajuste a un perfil de Voigt de la ventana de longitudes de onda de 653–658.5 nm para el plasma en aire y con un retardo de $4 \mu\text{s}$ después del pulso.

Este tipo de estudio ya ha sido utilizado por otros autores como Colón et al. (1993) y para que se observe la diferencia con un espectro donde la inversión de Abel es una parte importante

del estudio, en el espectro obtenido por Aguilera et al. (2009), figura 4.17 se pueden apreciar las diferencias entre las líneas.

Figura 4.17: Ejemplo de un plasma no homogéneo donde se observan las diferencias entre las líneas, (Aguilera et al., 2009).

4.4.3. Efecto de la autoabsorción

Es importante la verificación de que las líneas que se estén utilizando para la diagnosis de un plasma sean ópticamente delgadas. Esto es debido a que puede existir una diferencia en la forma de línea entre la señal observada y la señal verdaderamente emitida en algunos plasmas. En estos plasmas, la radiación de un átomo puede ser fácilmente reabsorbida por otros átomos del mismo elemento en niveles de estado de baja energía. Esta interacción se conoce como autoabsorción y produce distorsión y amplía las líneas espectrales, lo cual conduce a una sobrestimación de la densidad electrónica calculada a partir de las anchuras de las líneas auto-absorbidas si no se realiza una corrección de los perfiles registrados, Konjević (1999), lo que también influirá en el cálculo de la temperatura del plasma.

El problema de la autoabsorción en la espectroscopía de emisión óptica ha sido objeto de numerosos trabajos. Se han propuesto varios métodos para evaluar la reducción de intensidad de línea debido a este efecto. Omenetto et al. (1979) ha estudiado experimentalmente el fenómeno de autoabsorción en Plasma Inductivamente Acoplado (ICP) y discutió las principales ecuaciones que describen el proceso de autoabsorción en una llama, Omenetto et al. (1975). Los resultados se interpretaron por medio del método de la Curva de Crecimiento (COG), Gornushkin et al. (1999), que fue utilizado por Bulajic et al. (2002) y Corsi et al. (2001) para corregir el efecto de autoabsorción en LIBS sin calibración (CF-LIBS), Lazic et al. (2001).

Todos los enfoques mencionados se basan en modelos de los parámetros plasmáticos inducidos por láser (tamaño, temperatura, densidad de electrones) para obtener información sobre el

efecto de la autoabsorción en las líneas de emisión. Sin embargo, la complejidad del mecanismo de interacción láser-objetivo, como se lleva mencionando a lo largo de todo el trabajo, y la solidez de la evolución del plasma; reducen la aplicabilidad de la mayoría de estos modelos, en situaciones reales, a las mediciones analíticas cuantitativas de LIBS.

Por lo tanto, se han buscado otros métodos que permitan la evaluación del efecto de autoabsorción, o bien a través de métodos experimentales donde la técnica más habitual es el uso de un espejo cóncavo detrás del plasma para duplicar la longitud de la trayectoria óptica y registrar la intensidad de la señal con y sin espejo. A medida que la autoabsorción se hace más importante cerca del centro de la línea, donde la intensidad es mayor, una simple prueba de autoabsorción consiste en medir la proporción de intensidades entre ambas señales, con y sin espejo, a lo largo del perfil completo. Si la proporción se reduce a medida que nos acercamos al centro de la línea, entonces hay autoabsorción y el perfil medido puede ser corregido si la profundidad óptica no es grande, como hicieron Wiese (1965), Radziemski and Cremers (1989) o Moon et al. (2009); o bien directamente del análisis del espectro de LIBS. Sherbini et al. (2005) presentó un método por el cual, siempre que la densidad de electrones pueda derivarse del espectro, la medición de la anchura de Lorentziano de la línea de emisión permite evaluar el efecto de autoabsorción. Este procedimiento fue el seguido por ejemplo por Bredice et al. (2006), en el cálculo de los coeficientes de autoabsorción en líneas de manganeso.

De esta forma en este trabajo se va a calcular la densidad electrónica mediante la línea de emisión del hidrógeno H_α , como esta línea no presenta autoabsorción, como se explicará a continuación, también va a servir para poder corregir la autoabsorción de las líneas del espectro obtenido en la ventana centrada en la longitud de onda 281.6nm y estimar con ellas la temperatura del plasma.

La emisión de hidrógeno siempre está presente en el espectro LIBS tomado en el aire ambiente, debido al vapor de agua que está presente en la humedad natural del aire. El uso de la línea de H-alpha para la medición de la densidad electrónica tiene la clara ventaja de proporcionar un resultado que no se ve afectado por la autoabsorción. Por otra parte, el efecto Stark lineal que actúa sobre líneas de hidrógeno da como resultado un amplio ensanchamiento que reduce la incertidumbre relativa de la medida en comparación con los casos de las líneas emitidas por otros elementos.

Cálculo de la autoabsorción

Para el cálculo de la autoabsorción, los modelos asumen que se tiene un plasma homogéneo y donde se desprecian los gradientes de densidad electrónica y de temperatura, particularmente su efecto sobre los perfiles de las líneas.

Según Lochte-Holtgreven and Malamud (1970) la intensidad de emisión (W cm^{-2}) a lo largo del perfil de línea correspondiente a la transición entre dos niveles atómicos o iónicos superiores (i) e inferiores (j) es:

$$I(\lambda) = \frac{8\pi hc^2}{\lambda_0^5} \frac{n_i g_j}{n_j g_i} (1 - e^{-k(\lambda)l}) \quad (4.21)$$

siendo h la constante de Planck (J s), c la velocidad de la luz (m s^{-1}), λ_0 la longitud de onda central de la transición (m), n_i y n_j la densidad (cm^{-3}), g_i y g_j la degeneración de los niveles superiores e inferiores, respectivamente, $k(\lambda)$ el coeficiente de absorción (cm^{-1}) y l la absorción de la longitud del camino óptico (cm).

En general, el coeficiente de absorción $k(\lambda)$ se ajusta bien a una función Voigt (convolución de una curva gaussiana y una curva lorentziana), cuya anchura lorentziana está dominada por el ensanchamiento Stark y la anchura gaussiana está asociada al ensanchamiento Doppler. En condiciones típicas de LIBS, la componente gaussiana del ancho de línea es despreciable con respecto a la lorentziana ($\Delta\lambda_G \ll \Delta\lambda_L$), por lo tanto la profundidad óptica $k(\lambda)l$ puede expresarse como:

$$k(\lambda)l \approx K \frac{\Delta\lambda_0}{4(\lambda - \lambda_0)^2 + \Delta\lambda_0^2} \quad (4.22)$$

donde $K = 2 \frac{e^2}{mc^2} n_i f \lambda_0^2 l$, siendo e y m la carga (C) y la masa (g) del electrón, f es la fuerza de oscilador de la transición (adimensional) y $\Delta\lambda_0$ ($=\Delta\lambda_L$) es la anchura a media altura del perfil de la línea (FWHM). Para valores de profundidad óptica muy inferiores a 1 ($k(\lambda)l \ll 1$) la ecuación (4.21) se puede aproximar a:

$$I_0(\lambda) \approx \frac{8\pi hc^2}{\lambda_0^5} \frac{n_i g_j}{n_j g_i} k(\lambda)l \quad (4.23)$$

De esta forma $I_0(\lambda)$ representa el perfil de línea cuando las condiciones hagan que la autoabsorción sea despreciable. De las ecuaciones (4.21) y (4.23), queda constatado que, en presencia de autoabsorción, la intensidad de la línea en su máximo (es decir para $\lambda = \lambda_0$) es menor que cuando se cumplan las condiciones de plasma ópticamente delgado, según la relación, Sherbini et al. (2012):

$$\frac{I(\lambda_0)}{I_0(\lambda_0)} = \frac{1 - e^{-k(\lambda_0)l}}{k(\lambda_0)l} = \Delta\lambda_0 \frac{\left(1 - e^{-\frac{k}{\Delta\lambda_0}}\right)}{K} = SA \quad (4.24)$$

El coeficiente de autoabsorción SA se define así como la relación entre la medida de la altura del pico y el valor del pico de la línea en ausencia de autoabsorción. SA es igual a uno si la línea es ópticamente delgada, mientras que disminuye hasta cero cuando la línea se vuelve ópticamente gruesa.

El valor del ancho de línea también se ve afectado por la autoabsorción. Con el fin de conocer la expresión de la FWHM $\Delta\lambda$ de una línea ópticamente gruesa en términos de SA y $\Delta\lambda_0$, se puede utilizar la relación:

$$\frac{I(\lambda)}{I(\lambda_0)} = \left(\frac{1 - e^{-K \frac{\Delta\lambda_0}{4(\lambda - \lambda_0)^2 + \Delta\lambda_0^2}}}{1 - e^{-\frac{K}{\Delta\lambda_0}}} \right) \quad (4.25)$$

La ecuación (4.25) puede resolverse numéricamente para un $\Delta\lambda$ considerando que, por la definición de FWHM, para $\lambda = \lambda_0 \pm \Delta\lambda/2$ la intensidad $I(\lambda)$ debe ser igual a $I(\lambda_0)/2$. La relación exacta entre las anchuras de la línea observada ($\Delta\lambda$) y la correspondiente con la que no presenta autoabsorción ($\Delta\lambda_0$) puede ser parametrizada usando la ecuación (4.24), como:

$$\frac{\Delta\lambda}{\Delta\lambda_0} = (SA)^{\frac{1}{\alpha}} \quad (4.26)$$

siendo para este caso α un valor constante igual a -0.56, Sherbini et al. (2012).

Una vez alcanzado este punto, la teoría estándar del ensanchamiento de Stark permite correlacionar la anchura de línea verdadera, $\Delta\lambda_0$, con la densidad de electrones del plasma n_e

(cm_3). Cuando la contribución del impacto de átomos e iones para el ensanchamiento puede ser considerada insignificante, puede adoptarse la siguiente aproximación lineal:

$$\Delta\lambda = 2w_s n_e \quad (4.27)$$

donde w_s es la anchura media Stark. Por sustitución en la ecuación (4.26) se obtiene:

$$\Delta\lambda = \Delta\lambda_0 (SA)^\alpha = 2w_s n_e (SA)^\alpha \quad (4.28)$$

De acuerdo con la ecuación (4.28), la cantidad $\frac{\Delta\lambda}{2w_s} = n_e (SA)^\alpha$ puede interpretarse como una especie de “densidad electrónica equivalente” (n_e^*) que coincide con la densidad electrónica de plasma real, n_e cuando la línea de emisión es ópticamente delgada, y que se incrementa por el factor SA^α , cuando la profundidad óptica aumenta. Por lo tanto, cuando $\Delta\lambda$ y n_e pueden medirse a partir del espectro y el parámetro w_s de la línea de interés está en la bibliografía, el uso de la ecuación (4.28) permite alcanzar la evaluación del coeficiente SA como:

$$(SA) = \left(\frac{\Delta\lambda}{2w_s} \frac{1}{n_e} \right)^{1/\alpha} = \left(\frac{n_e}{n_{e(H\alpha)}} \right)^{1/\alpha} \quad (4.29)$$

A su vez, el conocimiento del coeficiente SA permite corregir la intensidad de la línea, según la relación (4.24). La evaluación de n_e a través de la medida del ensanchamiento Stark de líneas atómicas o iónicas requiere el uso de líneas de emisión no autoabsorbidas. Con este fin, y teniendo en cuenta los resultados obtenidos por Sherbini et al. (2006), se ha realizado el análisis del espectro objeto de investigación de esta tesis, una aleación de Al 2024, mediante el uso de la línea de H_α a 656.27 nm, como describen los autores Griem (1974) y Ashkenazy et al. (1991).

Capítulo 5

Procedimiento - Estudio Cuantitativo del plasma

5.1. Introducción

El conocimiento de la densidad de electrones y de la temperatura del plasma es vital para comprender los procesos de disociación, atomización, ionización y excitación que ocurren en el plasma y que son útiles en su caracterización y para maximizar el potencial de operación en el LSP, finalidad de este trabajo.

Este estudio se ha realizado en la suposición de que el plasma está en equilibrio termodinámico local (ETL). En este equilibrio se considera que los procesos colisionales son más importantes que los radiativos, de esta forma las temperaturas que definen las distribuciones de energía cinética, energía de excitación y energía de ionización tienen que ser iguales. La suposición de ETL se justifica por el cumplimiento del criterio de Mc Whirter, por el cual, para que exista ETL en el plasma, la densidad electrónica debe ser lo suficientemente alta para que las tasas de colisión excedan a las tasas radiativas. Este criterio es una condición necesaria pero no suficiente.

Para la medición de la densidad de electrones a través del ensanchamiento Stark se requiere una línea que esté libre de auto absorción. Por ello, se escogió la línea H_α de Balmer que como se explicará a continuación es una línea aislada y que no presenta autoabsorción, Sherbini et al. (2005), Sherbini et al. (2006) y Bulajic et al. (2002).

La temperatura del plasma se determina a partir de las intensidades relativas de las líneas espectrales de las diferentes especies presentes. Por ello, se ha de tener en cuenta que las líneas utilizadas no presenten autoabsorción y en el caso de que lo hubiera, corregirlo como se describió en la sección 4.4.3.

La principal dificultad en el desarrollo de esta tesis, la cual marca la diferencia con el resto de trabajos de caracterización de plasmas que se han descrito anteriormente, es el hecho de no tener una atmósfera controlada en la que se genera el plasma a analizar. Sino que en el caso concreto del tratamiento LSP se tiene un flujo de agua que en el proceso sirve como medio confinante, pero que a nivel espectroscópico apantalla el espectro de emisión de las especies presentes en el plasma, salvo las líneas de emisión del hidrógeno.

De ahí el hecho de que se haya realizado el estudio de la densidad y temperatura en diferentes condiciones:

- En aire: en este caso se ha realizado un pulso láser de las mismas características que

en el tratamiento por LSP pero sin medio confinante, lo que convierte al ensayo en un procedimiento de medición LIBS tradicional.

- En mojado: es similar al caso anterior pero en este caso la muestra a analizar se encuentra mojada.
- En condiciones de LSP: es el caso del tratamiento real en el que se realiza la medición con el medio confinante.

5.2. Densidad de electrones

Uno de los métodos más utilizados en los plasmas inducidos por láser para el cálculo de la densidad electrónica, se basa en los ensanchamientos Stark de las líneas de emisión. Como se ha explicado anteriormente, es necesario tener en cuenta los ensanchamientos debidos a otros mecanismos aunque en general se considera el efecto Stark el principal mecanismo de ensanchamiento. El ensanchamiento en sí se debe a la interacción del emisor con partículas cargadas, bien iones y/o electrones, provocando no sólo el propio ensanchamiento en forma de distribución lorentziana, sino también un desplazamiento en la longitud de onda central.

Según Griem (1964) la densidad de electrones es proporcional a la anchura a la semialtura del perfil de la línea, según la siguiente expresión:

$$\Delta\lambda_{Stark} = \omega \left(\frac{N_e}{10^{16}} \right) + 1.75\alpha \left(\frac{N_e}{10^{16}} \right)^{1/4} (1 - 1.2\rho)\omega \quad (5.1)$$

siendo $\Delta\lambda_{Stark}$ la anchura a la semialtura (FWHM) de la transición, ω es el parámetro de impacto calculado o medido por otros autores, α es el parámetro de ensanchamiento iónico y ρ es el parámetro de apantallamiento de Debye, en unidades de cm^{-3} para la densidad de electrones, N_e .

Por otro lado, los cálculos teóricos de los ensanchamientos Stark para átomos de hidrógeno y átomos con dos o más electrones están recogidos en detalle en los libros de Griem (1964) y Griem (1974). Estos ensanchamientos en las líneas de emisión se producen principalmente por impactos electrónicos, y por tanto están íntimamente relacionados con la densidad electrónica del plasma. En concreto, los ensanchamientos Stark de los átomos de hidrogenoides se relacionan con la densidad de electrones por una constante débilmente dependiente de la temperatura. Los ensanchamientos de las líneas del hidrógeno de las series H_α , H_β y H_γ han sido ampliamente estudiados y tabulados siendo de especial uso como líneas de referencia, ya que su ensanchamiento es mayor y es posible medirlo con gran precisión, Thorne (1988).

5.2.1. H-alpha

Al conjunto de líneas que resultan de la emisión del átomo de hidrógeno se conocen como serie de Balmer. Las más conocidas son las que se corresponden con las transiciones entre los cinco primeros números cuánticos principales referentes al nivel de energía del electrón (n). Las transiciones son denominadas secuencialmente por letras griegas: desde $n = 3$ a $n = 2$ es llamada H-alpha (H_α), 4 a 2 es H-beta (H_β), 5 a 2 es H-gamma (H_γ), etc.

La forma de las líneas de hidrógeno y los parámetros de ensanchamiento asociados han sido objeto de muchos estudios teóricos. La teoría del impacto de electrones de Griem (1964) considera los ensanchamientos como resultado de los impactos de los electrones libres en el plasma (aproximación de impacto). Como consecuencia, la magnitud del ensanchamiento depende de

la concentración de electrones y de un factor logarítmico que disminuye con un aumento de la densidad electrónica. En una aproximación cuasi-estática, la ampliación depende de la densidad de electrones para iones ionizados individualmente a la potencia de dos tercios. Esto da como resultado la siguiente expresión para la densidad electrónica (Ashkenazy et al. (1991)):

$$N_e = 8.02 \cdot 10^{12} \left(\frac{\Delta\lambda_{1/2}}{\alpha_{1/2}} \right)^{3/2} \text{ cm}^{-3} \quad (5.2)$$

siendo $\Delta\lambda_{1/2}$ la anchura a la semialtura de la línea (FWHM) en nm y $\alpha_{1/2}$ la mitad de la anchura del perfil Stark reducido en nm. Este último parámetro depende débilmente de la densidad y temperatura de los electrones como resultado de la correlación ion-ion, la corrección de Debye y la dependencia de la velocidad del ensanchamiento del impacto. Valores de $\alpha_{1/2}$ para la serie de Balmer se pueden encontrar en Griem (1974) y en Kepple and Griem (1968).

En concreto, la línea que se ha observado en los experimentos aquí presentes es la línea H_α . Esta se encuentra centrada en una longitud de onda de 656.27 nm y es visible en la parte roja del espectro electromagnético. Históricamente ha sido ampliamente usada para la diagnosis de muchos tipos de plasmas. Una de las primeras experiencias en las que se detectó esta línea fue por Bogen and Lie (1980) y años después Ashkenazy et al. (1991) la usaron para medidas en el vacío. Ya en los años 2000 la línea H_α ha sido usada para la determinación de la densidad de electrones en medios acuosos (Escarguel et al. (2000)), con muestras sólidas sumergidas en el mar (Giacomo et al. (2004)), en aire húmedo (Sherbini et al. (2006)) y en aire atmosférico (Giacomo et al. (2008)).

5.3. Temperatura: Gráficos de Boltzmann

Para poder calcular la temperatura (T), la cual será común en todas las distribuciones de energía, se ha de realizar inicialmente la suposición de que el plasma está en Equilibrio Termodinámico Local, lo cual se corroborará más adelante. Esto quiere decir que la temperatura de la distribución energética de excitación (definida por la ecuación de Boltzmann) y la temperatura de la distribución energética de ionización (definida por la ecuación de Saha) son iguales a la temperatura que describe la energía cinética de los electrones (definida por la ecuación de Maxwell):

- Ecuación de Boltzman:

$$\frac{N_i(Z)}{N(Z)} = \frac{g_i(Z)}{P(Z)} e^{\left(\frac{-E_i(Z)}{kT}\right)} \quad (5.3)$$

Donde Z se refiere al grado de ionización del átomo siendo $Z = 0$ el valor para el átomo neutro, $Z = 1$ al ionizado, $Z = 2$ al doblemente ionizado... e i al nivel energético en el que se encuentran las partículas. $N(Z)$ es la densidad total de la especie Z , $N_i(Z)$ es la densidad de partículas de la especie Z en el nivel i , $g_i(Z)$ es la degeneración del nivel, $P(Z)$ es la función de partición, $\chi_i(Z)$ es la energía del nivel i de la especie Z , k es la constante de Boltzmann y T la temperatura que se quiere calcular.

- Ecuación de Saha:

$$\frac{I_{ij}(Z)}{I_{ij}(Z-1)} = \frac{(2\pi m_e k)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{3}{2}}}{h^3} \frac{g_i(Z)}{g_i(Z-1)} e^{\frac{\chi_{ion}}{kT_i}} e^{\frac{[\chi_i(Z-1) - \chi_i(Z)]}{kT_i}} \frac{A_{ij}(Z)}{A_{ij}(Z-1)} \frac{\lambda_{ij}(Z-1)}{\lambda_{ij}(Z)} \quad (5.4)$$

Siendo I_{ij} las intensidades de las líneas de emisión entre el nivel superior i y el inferior j , mientras Z , se refiere al grado de ionización del átomo siendo $Z = 0$ el valor para el

átomo neutro, $Z = 1$ al ionizado, $Z = 2$ al doblemente ionizado... , m_e la masa de un electrón (kg), h la constante de Planck (J/s), k la constante de Boltzmann (J/K), T es la temperatura del plasma que al estar en condiciones de equilibrio local termodinámico debe coincidir con la temperatura iónica T_i (K), N_e la densidad de electrones aparente (cm^3).

- Ecuación de Maxwell:

$$n_v dv = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} 4\pi v^2 dv \quad (5.5)$$

Con n siendo el número de partículas, v la velocidad, k la constante de Boltzmann (J/K), T es la temperatura (K) y m la masa de las partículas (kg).

La determinación de la temperatura basada en la medición de las líneas del espectro y en el método del diagrama de Boltzmann es una forma sencilla y por tanto ampliamente aplicada cuando el plasma se encuentra en ETL. En condiciones de equilibrio térmico local la distribución de las poblaciones de los estados atómicos viene definida por la ecuación de Boltzmann, como ya se ha descrito, (5.3).

Como la intensidad por ángulo sólido I^{ij} en una transición, donde i es el nivel superior y j el inferior, se puede expresar mediante

$$I^{ij} = \frac{A_{ij} N_i(Z) hc}{4\pi \lambda} \quad (5.6)$$

siendo A_{ij} la probabilidad de transición dada por la línea, c la velocidad de la luz, h la constante de Planck y λ la longitud de onda de la citada transición. De forma que uniendo las expresiones se llega a que en aproximación a ETL, la línea de intensidad correspondiente a la transición entre dos niveles E_i y E_j de una especie atómica Z puede ser expresada como:

$$I_{\lambda}^{ij} = N(Z) A_{ij} \frac{g_i e^{-\left(\frac{E_i}{kT}\right)}}{U_Z(T)} \quad (5.7)$$

donde las únicas variables que quedarían por describir son g_i es la degeneración del nivel i y $U_Z(T)$ que es la función de partición para la emisión de las especies a la temperatura del plasma. En las mediciones reales, la eficiencia del sistema instrumental afecta como factor de escala a la intensidad medida de la línea, de modo que se puede escribir

$$\overline{I}_{\lambda}^{ij} = FC_Z A_{ij} \frac{g_i e^{-\left(\frac{E_i}{kT}\right)}}{U_Z(T)} \quad (5.8)$$

$\overline{I}_{\lambda}^{ij}$ representa la medida de la intensidad relativa, C_Z es la concentración de especies atómicas emitidas y F es un parámetro experimental que tiene en cuenta la eficiencia óptica del sistema instrumental, así como la densidad y el volumen del plasma. Si se necesita realizar diferentes ensayos sucesivos para cubrir todo el rango de longitud de onda preciso o se necesita un promedio de varias medidas, es necesario tener un gran cuidado en mantener fijos los parámetros experimentales (energía láser, focalización, etc.) durante todo el tiempo de medición, para mantener constante el parámetro F .

Teniendo en cuenta que $\overline{I}_{\lambda}^{ij}$ es el resultado de las medidas realizadas, los parámetros A_{ij} , g_i y E_i se pueden obtener generalmente de bibliografía (NIST, Kramida et al. (2015)) y F ,

C_Z y T son valores que tienen que ser determinados desde datos experimentales. Por último la función de partición de cada especie puede ser calculada a través de datos espectroscópicos una vez sea conocida la temperatura. Algunas de ellas están tabuladas en la referencias Allen (1976).

Definiendo ahora las siguientes variables:

$$\begin{aligned} y &= \ln \frac{\overline{I_{\lambda}^{ij}}}{g_i A_{ij}} & x &= E_i \\ m &= -\frac{1}{kT} & q_Z &= \ln \frac{C_Z F}{U_Z(T)} \end{aligned} \quad (5.9)$$

y sustituyéndolas estas en la ecuación (5.8), tomando en esta logaritmos previamente, se obtiene la siguiente expresión que nos relaciona x e y a través de una línea recta:

$$y = mx + q_Z \quad (5.10)$$

Utilizando las definiciones de la ecuación (5.9), se puede representar cada línea del espectro obtenido experimentalmente como un punto en el gráfico de Boltzmann. Así, el conjunto completo de datos de intensidad de varias líneas de emisión de un mismo elemento pueden representarse gráficamente como un diagrama de Boltzmann, con líneas de pendiente m y que interceptan en el eje de ordenadas en q_Z . El valor de la temperatura se puede calcular directamente una vez conocido el valor de la pendiente.

Como se observa, son necesarias varias líneas de emisión de un mismo elemento, que provengan de diferentes niveles superiores (siendo más fiable el método cuanto mayor sea el incremento de energía entre ellas), y asegurarse de que en la medida de cada emisión se cumplen las condiciones de un plasma ópticamente delgado, es decir con una autoabsorción nula o despreciable, de ahí la importancia del apartado anterior en el que se ha abordado la autoabsorción de las líneas (Sección 4.4.3).

5.4. Equilibrio Termodinámico Local

En general, un plasma se encuentra fuera del equilibrio entre energía cinética, población de niveles excitados y radiación emitida. Sin embargo, existe una situación intermedia conocida por Equilibrio Termodinámico Local (ETL) en que las temperaturas de población determinadas por las distribuciones de Saha y los gráficos de Boltzmann coinciden y la velocidad de las partículas determinada con la estadística de Maxwell es consistente con estas.

Esta aproximación de ETL es la más usada en el estudio de plasmas y emplea el hecho de definir a la temperatura electrónica como la que describe el estado de ionización y de excitación del plasma. Además, considera que los procesos por colisión son predominantes por encima de los radiativos, de tal forma que las pérdidas de energía por radiación son poco importantes Griem (1968) y, como se ha indicado, establece una distribución de Boltzmann entre los niveles de energía discretos. Se pueden seguir varios criterios para establecer la existencia o no de ETL.

Partiendo de las ecuaciones de McWhirter (1965), un estudio detallado de las secciones eficaces de excitación por colisiones con electrones Thorne (1988) conduce al siguiente criterio

para verificar la existencia de Equilibrio Termodinámico Local:

$$N_e \gg 1.6 \cdot 10^{12} \sqrt{T(K)} [\Delta E]^3 \text{ cm}^{-3} \quad (5.11)$$

Donde N_e es la densidad de electrones en el plasma, T es la temperatura expresada en K y ΔE es la diferencia de energías en eV entre el estado estudiado y cualquier otro estado al que éste pueda realizar una transición.

Otro criterio basado en los mismos principios pero algo más débil es el propuesto por Griem (1968)

$$N_e \geq 9 \cdot 10^{23} \sqrt{\frac{k(eV K^{-1})T(K)}{13.6}} \left[\frac{\Delta E(eV)}{13.6} \right]^3 \text{ cm}^{-3} \quad (5.12)$$

debido a que este sólo exige que los procesos colisionales tengan unas frecuencias un orden de magnitud superiores a los procesos radiativos, mientras que el criterio desarrollado por Thorne (1988) se deduce de suponer que la tasa de transiciones radiativas es mucho menor que la de transiciones colisionales.

5.5. Resultados de los parámetros cuantitativos del plasma

Para la obtención de la densidad de electrones y temperatura del plasma se tomaron las líneas de dos ventanas independientes de medida. Por un lado la ventana centrada en 655.8 nm donde se encuentra la línea H_α de Balmer con la cual se realizará el cálculo de la densidad de electrones, y por otro la ventana centrada en 281.6 nm donde se observan líneas de emisión del magnesio y aluminio con las cuales se determinará la temperatura.

En la figura 4.12 que se expuso en el capítulo anterior, ya se observó la evolución del plasma en esta ventana, pudiéndose destacar que la línea H_α aparece en todas las condiciones de medida (aire, mojado y LSP) a partir de los 4 μs de retardo después del pulso láser con una ventana de medida de 1 μs . Además, en todos los casos la línea H_α es perfectamente simétrica y no presenta disminución en el centro, esto confirma la ausencia de autoabsorción para esta línea, este hecho ya había sido enfatizado por Sherbini et al. (2006). Por lo tanto esta línea va a servir para determinar la densidad de electrones en diferentes condiciones y realizar los cálculos del coeficiente de autoabsorción para el resto del espectro, como ya se ha mencionado en el capítulo anterior.

En concreto, como se puede observar en la figura 5.1 que a pesar de que el agua debe afectar las condiciones plasmáticas, se ha descubierto que a 5 μs después del pulso láser, el perfil y la posición de la línea H_α se ha mantenido sin cambios en las tres condiciones de medida, indicando que en ese momento la densidad de electrones y la temperatura electrónica del plasma serán similares dentro las incertidumbres experimentales.

Figura 5.1: Línea de emisión de la línea H_{α} en las distintas condiciones experimentales con un tiempo de retardo de $5 \mu s$.

A partir del comentario anterior se desarrolló la idea de calcular la temperatura utilizando el método del gráfico de Boltzmann con las medidas de las intensidades de varias líneas espectrales del Mg II del plasma en aire. Para ello inicialmente se obtuvo todo el espectro de emisión del plasma en un rango desde los 200 nm a los 700 nm con diferentes tiempos de retardo, como se ha descrito a lo largo de los capítulos anteriores, eligiéndose la ventana centrada en 281.6 nm. Esta ventana ya ha sido usada por otros autores para el cálculo de la temperatura en condiciones similares, Sherbini et al. (2012).

5.5.1. Cálculo de la Densidad de Electrones

El cálculo de la densidad de electrones del plasma se va a realizar a partir del análisis de la línea H_{α} , usando la ecuación (5.2) descrita anteriormente:

$$N_e = 8.02 \cdot 10^{12} \left(\frac{\Delta\lambda_{1/2}}{\alpha_{1/2}} \right)^{3/2} cm^{-3}$$

Como se puede ver en las referencias ya mencionadas, un parámetro $\alpha_{1/2}$ es poco sensible a la temperatura. Para plasmas estudiados por otros autores, Sherbini et al. (2006) o Giacomo et al. (2008), en condiciones de trabajo análogas la temperatura estará entre 7000 y 13000 K. En este trabajo se ha escogido el parámetro dado por Griem a una temperatura de 10000 K, este supuesto se justificará posteriormente. Para calcular el ensanchamiento de la línea, $\Delta\lambda_{1/2}$, se realizó un ajuste de las líneas a un perfil de Voigt, como se puede ver en la figura 5.2 para el caso de los experimentos realizados en condiciones de LSP. De esta forma se han podido tener

en cuenta todos los mecanismos de ensanchamientos posibles. Como se puede observar en los datos de la figura, la componente gaussiana es muy pequeña, lo que viene a decir que en estas condiciones el ensanchamiento con más contribución es el Stark y el resto, incluido el efecto Doppler, son irrelevantes:

Figura 5.2: Ajuste de la línea H_α a un perfil de Voigt para los distintos tiempos de retardo (a) 5 μs , (b) 6 μs , (c) 7 μs y (d) 8 μs .

Tras este análisis se descontó el perfil instrumental a todas las medidas, obteniéndose los resultados de ensanchamientos y densidades de electrones de la tabla 5.1 para todas las condiciones de medida y los diferentes tiempos de retardo:

Tabla 5.1: Densidad de electrones de los plasmas estudiados en este trabajo en diferentes medios y a diferentes tiempos.

Tiempo de retardo, τ (μs)	FWHM, $\Delta\lambda_{1/2}$ (nm)			$N_e(10^{17} \text{ cm}^{-3})$		
	Aire	Mojado	LSP	Aire	Mojado	LSP
4	$1.433 \pm 3 \%$	$1.453 \pm 3 \%$		$1.72 \pm 3 \%$	$1.75 \pm 3 \%$	
5	$1.311 \pm 3 \%$	$1.318 \pm 5 \%$	$1.230 \pm 4 \%$	$1.50 \pm 3 \%$	$1.51 \pm 5 \%$	$1.36 \pm 4 \%$
6			$1.179 \pm 3 \%$			$1.28 \pm 3 \%$
7			$0.913 \pm 3 \%$			$0.87 \pm 3 \%$
8			$0.906 \pm 3 \%$			$0.86 \pm 3 \%$

En la primera columna se indican los diferentes tiempos de retardo del pulso láser en los que se realizaron los ensayos. En la segunda columna, se muestra el ensanchamiento de cada línea en las condiciones estudiadas. Y por último, en la tercera columna se muestran las densidades electrónicas correspondientes.

Figura 5.3: Gráfico de la resolución espacial de la medición de la densidad de electrones a partir del ensanchamiento Stark de la línea H_{α} de Balmer en condiciones LSP.

Con el fin de optimizar la detección del plasma es relevante ver si existen regiones donde la distribución de ciertas especies sean más abundantes que en otras. Se ha estimado la densidad electrónica en función de la distancia al eje del plasma (eje z , descrito en el montaje experimental en la figura 3.12). La densidad de electrones a lo largo del eje z con un tiempo de retardo de $5 \mu\text{s}$ después del pulso láser y en condiciones LSP, se muestran en la figura 5.3. La incertidumbre presente en esta figura está subestimada, ya que incluye el error sobre el valor de FWHM determinado por ajuste (3-5 %) pero no el error posible proporcionado por la aproximación del coeficiente $\alpha_{1/2}$. Esto corrobora que la distribución espacial de la densidad electrónica es prácticamente constante.

Otros autores, Ashkenazy et al. (1991), han observado que para densidades de electrones superiores a $30 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, comienzan a aparecer los procesos de autoabsorción. Por lo tanto, las densidades electrónicas obtenidas en nuestro trabajo son coherentes con nuestra explicación anterior de que la línea H_{α} no presenta autoabsorción.

Por otro lado se han realizado intentos para verificar la densidad electrónica en el caso del plasma en aire usando la línea 281.62 nm de Al II que es usualmente utilizado en plasmas de

aluminio. Entonces, hemos utilizado la expresión de Griem:

$$N_e = \frac{\Delta\lambda_{1/2}}{\omega_{ref}} \cdot 10^{16} \quad (5.13)$$

Donde $\Delta\lambda_{1/2}$ es el FWHM de la línea en Å, y ω_{ref} es el factor de ensanchamiento colisional (normalizado a 10^{16} cm^{-3}) y N_e es la densidad de electrones. Utilizando el factor de ensanchamiento del impacto medido por Colón et al. (1993), se obtiene un valor $\sim 4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Este valor es aproximadamente el doble que el obtenido anteriormente con la línea H_α . Esta discrepancia vuelve a indicar que las líneas de la ventana centrada en 281.6 nm presentan autoabsorción.

5.5.2. Obtención de la temperatura. Gráfico de Boltzman

En condiciones de LSP reales, la temperatura no puede ser determinada directamente mediante el método de los gráficos de Boltzman descrito en la sección anterior 5.3. El agua en flujo que se utiliza como medio confinante en el tratamiento apantalla las líneas de emisión de todas las especies, menos la del hidrógeno. Sin embargo, puede ser estimada con los resultados obtenidos en los experimentos realizados sin medio confinante, es decir, en aire, manteniendo constante el resto de variables. De esta forma, como el perfil de la línea H_α es prácticamente idéntico con las distintas condiciones, figura 5.1, se puede extrapolar el resultado de la temperatura obtenida en aire.

Con el fin de obtener la temperatura en aire mediante el método del gráfico de Boltzman, se han tomado las intensidades de varias las líneas espectrales del Mg II que aparecen en la ventana espectral centrada en 281.6 nm con un tiempo de retardo de $5\mu\text{s}$, ver figura 5.4.

Figura 5.4: Espectro producido por el plasma en la ventana de longitud de onda de 281.6 nm a $5\mu\text{s}$

Antes de proceder directamente con el cálculo se tuvo que realizar la corrección de la intensidad de las líneas dado que presentaban autoabsorción. El cálculo del coeficiente de autoabsorción se realizó como se describió en el capítulo anterior a través de la ecuación (4.29). Los datos que se han utilizado, así como el valor del coeficiente de autoabsorción, se pueden ver en la tabla 5.2:

$$(SA) = \left(\frac{\Delta\lambda}{2w_s} \frac{1}{n_e} \right)^{1/\alpha} = \left(\frac{n_e}{n_{e(H\alpha)}} \right)^{1/\alpha}$$

Tabla 5.2: Parámetros de autoabsorción calculados para las especies de la ventana de 281.6 nm.

Especie	Transición Superior → Inferior	λ (nm)	ω_{ref} (pm)	ω_{exp} (pm)	n_e (10^{17}cm^3)	SA
Mg II	$2p^6 3d \ ^2D_{3/2} \rightarrow 2p^6 3p \ ^2P_{1/2}$	279.08	$16.6 \pm 12\% \ ^a$	75.7	4.56	0.163
Mg II	$2p^6 3p \ ^2P_{3/2} \rightarrow 2p^6 3s \ ^2S_{1/2}$	279.55	$4.7 \pm 4\% \ ^b$	59.2	13.16	0.025
Mg II	$2p^6 3d \ ^2D_{5/2} \rightarrow 2p^6 3p \ ^2P_{3/2}$	279.79	$16.6 \pm 12\% \ ^a$	59.7	3.59	0.249
Mg II	$2p^6 3p \ ^2P_{1/2} \rightarrow 2p^6 3s \ ^2S_{1/2}$	280.27	$3.9 \pm 5.5\% \ ^b$	46.9	11.43	0.032
Al II	$3s 4s \ ^1S_0 \rightarrow 3s 3p \ ^1P_1$	281.62	$4.2 \pm 7\% \ ^c$	43.3	10.21	0.039
Mg I	$3s 3p \ ^1P_1 \rightarrow 2p^6 3s \ ^2S_0$	285.21	$5.5 \pm 4\% \ ^b$	25.6	4.75	0.151

^aDjeniže et al. (2004)

^bGoldbach et al. (1982)

^cColón et al. (1993)

En esta tabla se puede observar en la primera columna la especie a la que pertenece la línea, en la segunda la transición del nivel superior al inferior, en la tercera la longitud de onda (λ) a la que se produce dicha transición, en las dos siguientes los ensanchamientos de referencia (obtenidos de bibliografía, ω_{ref}) y los ensanchamientos medidos experimentalmente (ω_{exp}), a continuación las densidades de electrones de electrones de cada una de las líneas (n_e) y por último el cálculo del coeficiente de autoabsorción (SA).

Tras esto se escogieron las líneas de Mg II para la realización del cálculo de la temperatura mediante el diagrama de Boltzmann. De esta forma se tienen cuatro puntos para trazar la recta descrita anteriormente en la misma ventana de medida, ecuaciones (5.9) y (5.10):

$$\ln \frac{\overline{I_{\lambda}^{ij}}}{g_i A_{ij}} = \frac{1}{kT} \cdot E_i + \ln \frac{C_Z F}{U_Z(T)}$$

$\Downarrow$

$$y = m \cdot x + q_Z$$

En la tabla 5.3 se muestran las transiciones de las líneas escogidas. En el resto de columnas se observan la longitud de onda de cada transición (λ), la energía del nivel superior (E_i), su degeneración (g_i), el área de la línea medida en unidades arbitrarias (I) y la corrección realizada tras el cálculo de la autoabsorción (I_{SA}). En la última columna se listan las probabilidades de transición (A_{ij}). En este trabajo se calcularon estas probabilidades obteniéndose resultados muy similares a los valores de la bibliografía, que son los mostrados en esta tabla:

Tabla 5.3: Parámetros de las líneas del Mg II usadas para el cálculo de la temperatura electrónica del plasma en experimentos en aire.

Transición Superior → Inferior	λ (nm)	E_i^a (eV)	g_i	I	I_{SA}	A_{ij}^b (10^8 s^{-1})
$2p^6 3p \ ^2P_{1/2} \rightarrow 2p^6 3s \ ^2S_{1/2}$	280.27	4.4223	2	$3.067 \cdot 10^5$	$1.104 \cdot 10^7$	2.57
$2p^6 3p \ ^2P_{3/2} \rightarrow 2p^6 3s \ ^2S_{1/2}$	279.55	4.4337	4	$4.584 \cdot 10^5$	$2.144 \cdot 10^7$	2.60
$2p^6 3d \ ^2D_{5/2} \rightarrow 2p^6 3p \ ^2P_{3/2}$	279.79	8.8463	6	$1.008 \cdot 10^5$	$4.265 \cdot 10^5$	4.01
$2p^6 3d \ ^2D_{3/2} \rightarrow 2p^6 3p \ ^2P_{1/2}$	279.08	8.8636	4	$5.983 \cdot 10^4$	$3.932 \cdot 10^5$	4.79

^aMoore (1958)

^bNIST, Kramida et al. (2015). Los valores calculados en esta tesis se pueden consultar en la tabla 6.1

Sustituyendo estos valores en la ecuación anterior se obtienen los valores de x e y para 4 puntos con los cuales se ha realizado el gráfico de Boltzmann, figura 5.5. Para observar la diferencia entre tener o no tener autoabsorción se realizaron los cálculos con los datos de intensidad originales (I) y los datos una vez corregida la autoabsorción (I_{SA}), observándose en la figura una diferencia de casi 10000 K entre ambas:

Figura 5.5: Gráfico de Boltzman para la exposición de 281,6 nm

La temperatura del plasma en aire con un retardo de $5 \mu\text{s}$ es de $10900 \pm 1000 \text{ K}$. Como se ha explicado anteriormente, esta temperatura es una buena aproximación a la temperatura real del plasma generado en un proceso LSP con medio confinante, debido a que como ya se ha mencionado el perfil de la línea H_α no varía con las distintas condiciones.

5.6. Comprobación de los resultados: Ecuación de Saha

La ecuación de Saha se ha utilizado en este estudio para corroborar que los resultados dados en el caso de las medidas realizadas con LSP en aire, con un retardo de 5 μ s, son correctos. Ya que, como se ha comentado anteriormente, esta ecuación describe el grado de ionización del plasma en función de la temperatura, la densidad de electrones y la energía de ionización de los átomos (Ecuación (5.4)):

$$\frac{I_{ij}(Z)}{I_{ij}(Z-1)} = \frac{(2\pi m_e k)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{3}{2}}}{h^3} 2 \frac{g_i(Z)}{g_i(Z-1)} e^{\frac{x_{ion}}{kT_i}} e^{\frac{[x_i(Z-1) - x_i(Z)]}{kT_i}} \frac{A_{ij}(Z)}{A_{ij}(Z-1)} \frac{\lambda_{ij}(Z-1)}{\lambda_{ij}(Z)}$$

Para ello se ha tomado de nuevo la ventana de medida centrada en 281.6 nm con la cual se ha realizado el cálculo de la temperatura y en la que aparecen varias líneas del Mg I y Mg II. En concreto se han escogido las líneas de longitud de onda 285.21 nm para el Mg I y de longitud de onda 279.55 nm para el Mg II, cuyos parámetros se encuentran en la siguiente tabla 5.4:

Tabla 5.4: Parámetros de las líneas del Mg I y Mg II usadas en los cálculos con la ecuación de Saha para el plasma en experimentos en aire.

Especie	Transición	λ (nm)	E_i^a (eV)	E_j^a (eV)	g_i	g_j	I_{SA}	A_{ij}^b (10^8 s^{-1})
Mg II	$2p^6 3p \ ^2P_{3/2} \rightarrow 2p^6 3s \ ^2S_{1/2}$	279.55	4.4337	0.0000	4	2	$2.144 \cdot 10^7$	2.60
Mg I	$3s 3p \ ^1P_1 \rightarrow 2p^6 3s \ ^1S_0$	285.21	4.3457	0.0000	3	1	$5.89 \cdot 10^5$	4.91

^aMoore (1958)

^bNIST, Kramida et al. (2015)

Se han realizado dos comprobaciones:

1. Con los datos de la tabla anterior y considerando la temperatura de 10900 K calculada en la sección anterior, se ha obtenido una densidad de electrones de $1.4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ cuyo valor sería compatible con el calculado a través de la línea H_α teniendo en cuenta su error.
2. Se ha confirmado que el grado de ionización es el mismo, por un lado experimentalmente, dividiendo las intensidades relativas de las líneas una vez corregida la autoabsorción y por otro, haciendo el cálculo con la temperatura y la densidad de electrones halladas en las secciones anteriores.

Con todo ello se puede asegurar que los cálculos de temperatura y densidad de electrones realizados a lo largo de este trabajo son válidos.

Además, durante estos últimos meses se ha seguido investigando para encontrar un método de cálculo de la temperatura en condiciones reales de LSP a través de la línea del hidrógeno. Esto se ha conseguido a partir de los datos de ensanchamientos y desplazamientos Stark de la línea H_α de Balmer medidos a diferentes tiempos de retardo (2 a 5 μ s) y con diferentes ventanas de medida (100 ns, 200 ns, 300 ns, 500 ns y 1000 ns) en condiciones de LSP. Un ejemplo de los resultados de desplazamientos experimentales obtenidos se observa en la figura 5.6, donde se aprecia claramente el desplazamiento de la emisión máxima de la línea H_α para una ventana de 500 ns y a un tiempo de retardo de 4 μ s.

Figura 5.6: Medición de la anchura y desplazamiento experimental a través del ajuste a un perfil de Voigt de la línea H_α del plasma con una ventana de 500 ns a 4 μ s de retardo.

A través del cruce de estos datos experimentales con datos teóricos proporcionados por Griem (1974) y más recientemente por Oks (2006), se ha obtenido un rango de densidades de electrones de $1.2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ a $3.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y un rango de temperaturas de 10000 K a 30000 K. Dando lugar a un artículo que está en proceso de revisión, como se detalla en el Apéndice B.

Los valores obtenidos en este nuevo trabajo también ratifican todas las medidas, cálculos y suposiciones expuestas en este capítulo.

Capítulo 6

Procedimiento de cálculo de los parámetros atómicos

6.1. Introducción

Para realizar el análisis cuantitativo del plasma es necesario conocer parámetros atómicos de las líneas espectrales de las especies presentes, como pueden ser: probabilidades de transición, vidas medias, anchuras y desplazamientos de dichas líneas. Debido a lo anterior, en este trabajo se han realizado los cálculos teóricos pertinentes para la determinación de dichos parámetros para líneas del Mg II y del Mg III. Incluso aunque haya datos experimentales de algunas de las líneas aquí estudiadas no hay que olvidar que los cálculos teóricos pueden ayudar a describir la estructura del átomo o ion estudiado.

Por ello, se dedica este capítulo a la descripción breve de los conceptos teóricos que se han venido utilizando en este trabajo para calcular las probabilidades de transición y ensanchamientos Stark teóricos. El proceso matemático de cálculo que se ha utilizado ha sido llevado a cabo mediante un potente software de ordenador desarrollado por Cowan (1981).

6.2. Hamiltoniano de interacción y niveles de energía

6.2.1. Interacción electrostática

El hamiltoniano de interacción electrostática comprende la interacción repulsiva entre cada par de electrones del átomo, y en unidades atómicas se expresa como:

$$H_{elec} = \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (6.1)$$

en donde r_{ij} representa la distancia entre cada par de electrones.

Si se evalúa este hamiltoniano usando funciones de onda en la base de Russell-Saunders, o LS, y se desarrolla, como ya hizo Sobelman (1979), en función de los símbolos $3j$ y $6j$ del álgebra de Racah, se puede escribir:

$$\langle LSM_L M_S | H_{elec} | LSM_L M_S \rangle = \sum_k (f_k F^k \pm g_k G^k) \quad (6.2)$$

con F^k y G^k las integrales de Slater-Condon, esto es,

$$F^k(i, j) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{<}^k}{r_{<}^{k+1}} |P_i(r_1)|^2 |P_j(r_2)|^2 dr_1 dr_2 \quad (6.3)$$

$$G^k(i, j) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{<}^k}{r_{<}^{k+1}} P_i^*(r_1) P_j^*(r_2) P_j(r_1) P_i(r_2) dr_1 dr_2 \quad (6.4)$$

donde $P_i(r)$ son las partes radiales reducidas de la función de onda, es decir, $rPR_i(r)$, y f_k y g_k son factores que en el caso de una configuración de dos electrones se expresan en función de los elementos del álgebra de Racah como

$$f^k = (-1)^{l+l'+L} (2l_1 + 1) (2l_2 + 1) \begin{pmatrix} l_1 & l_1 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l_2 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ l_2 & l_1 & k \end{Bmatrix} \quad (6.5)$$

$$g^k = (2l_1 + 1) (2l_2 + 1) \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ l_1 & l_2 & k \end{Bmatrix} \quad (6.6)$$

Este hamiltoniano de interacción electrostática es diagonal en la base de Russell-Saunders.

6.2.2. Interacción espín-órbita

El hamiltoniano de interacción espín-órbita se expresa, también en unidades atómicas, como

$$H_{SO} = \sum_i \zeta_i(r_i) l_i s_i \quad (6.7)$$

en donde ζ representa

$$\zeta_i(r_i) = \frac{\alpha^2}{2r} \frac{d}{dr} V_i(r_i) \quad (6.8)$$

con α siendo la constante de estructura fina.

El hamiltoniano de espín-órbita también se escribe como

$$H_{SO} = A(L, S) \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (6.9)$$

siendo $A(L, S)$ la constante de espín-órbita que satisface la relación

$$M_L M_S \sum A(L, S) = \sum_{L, S} \sum_i m_i m_{s(i)} \zeta_i \quad (6.10)$$

Estas sumas se extienden a todos los determinantes de Slater que forman cada término electrostático con unos determinados M_L y M_S . Además, ζ son las integrales de espín-órbita

$$\zeta_{nl} = \frac{\alpha^2}{2} \int_0^\infty \frac{1}{r} \left(\frac{dV}{dr} \right) |P_{nl}(r)|^2 dr \quad (6.11)$$

Esta interacción no es diagonal en la base LS, pero sin embargo, sí lo es en la LSJ.

6.2.3. Acoplamiento intermedio

Sumando los dos hamiltonianos anteriores, esto es, el de interacción electrostática y el de interacción espín-órbita, se tiene la expresión que designa al acoplamiento intermedio y que es la que se ha utilizado en este trabajo para realizar los cálculos.

Como ya se ha indicado anteriormente, sólo la parte de interacción electrostática es diagonal en la base Russell Saunders, por lo que sólo si ésta es grande frente a la de espín-órbita, se podrá disponer de tal propiedad.

Sin embargo, el caso general se aleja de esta aproximación y no es será disponible una base de funciones de onda puras en la que el hamiltoniano sea diagonal; por tanto, los autovectores del hamiltoniano que describan los estados de energía del átomo serán una combinación lineal de las funciones de la base elegida para la representación.

6.2.4. Interacción de configuraciones

En todo lo expresado hasta el momento, no se ha considerado aún el efecto que sobre los niveles de energía de cada término puede tener la interacción con otros términos provenientes de configuraciones de la misma paridad. Este efecto aumenta la distancia en energías entre los términos que interaccionan produciéndose así un resultado final de repulsión electrostática entre las configuraciones.

Así, para considerar esta circunstancia, es necesario añadir a las interacciones electrostática y espín-órbita de cada configuración ya descritas unos términos en los elementos de matriz que ligan una configuración con otra. De esta forma, se conseguirá dar cuenta de la interacción entre estas configuraciones.

Estos términos no son más que unas integrales que, para el caso de dos configuraciones de dos electrones, la primera expresada como $n_1 l_1 - n_2 l_2$, y la segunda descrita por $n'_1 l'_1 - n'_2 l'_2$, son del tipo

$$R_k(i, j; i', j') = \int \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_i(r_1) P_{i'}(r_1) P_j(r_2) P_{j'}(r_2) dr_1 dr_2 \quad (6.12)$$

$$R_k(i, j; j', i') = \int \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_i(r_1) P_{j'}(r_1) P_j(r_2) P_{i'}(r_2) dr_1 dr_2 \quad (6.13)$$

La primera de estas integrales se llama integral directa, y la segunda integral de intercambio. Ambas aparecen en el hamiltoniano con coeficientes α^k , para las directas, y β^k , para las de intercambio. Estos coeficientes se expresan como:

$$\alpha^k = (-1)^{l_2+l'_1+L} \sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l'_1+1)(2l'_2+1)} \begin{pmatrix} l_1 & l'_1 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l'_2 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ l'_2 & l'_1 & k \end{Bmatrix} \quad (6.14)$$

$$\beta^k = (-1)^{l_1+l'_2} \sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l'_1+1)(2l'_2+1)} \begin{pmatrix} l_1 & l'_2 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l'_1 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ l'_1 & l'_2 & k \end{Bmatrix} \quad (6.15)$$

Con todo ello, las integrales de Slater-Condon F^K y G^K pueden expresarse en función de las integrales R^K de la forma

$$F^k(i, j) = R_k(i, j; i, j) \quad (6.16)$$

$$G^k(i, j) = R_k(i, j; j, i) \quad (6.17)$$

6.2.5. Ajuste de mínimos cuadrados

En el caso de no atenerse únicamente a orbitales calculados para evaluar los valores de las integrales de Slater-Condon y de interacción espín-órbita, es decir, si se utilizan además datos experimentales de los niveles de energía, es posible obtener con mayor exactitud la descripción de estos niveles en acoplamiento intermedio. Para ello, conocido el hamiltoniano de interacción, y partiendo de los valores de las integrales F^k , G^k y ζ_{nl} dados, por ejemplo, por un cálculo Hartree-Fock, se pueden ir variando éstos e ir calculando los autovalores del hamiltoniano de energía. En cada paso del proceso, se calcula la desviación cuadrática media de los autovalores obtenidos respecto a las energías experimentales de la configuración y se continúan variando hasta alcanzar una desviación mínima.

Con este método, empleado cuando se conoce un número suficiente de niveles de energía, se consigue reducir la desviación inicial entre los autovalores del hamiltoniano y las integrales de Slater-Condon y de espín-órbita, desde los $500\text{-}1000\text{ cm}^{-1}$ hasta menos de los 100 cm^{-1} si los cálculos se han hecho mediante Hartree-Fock. Es por ello que este procedimiento de cálculo es el más extendido cuando se cumple la premisa anteriormente escrita de tener un conocimiento de un número suficiente de niveles de energía.

6.2.6. Operadores efectivos

En muchos casos no es posible obtener buenos resultados al intentar realizar un ajuste de mínimos cuadrados como el descrito anteriormente. Esto sucede generalmente cuando los efectos de interacción de configuraciones empiezan a ser apreciables y la aproximación mono-configuracional comienza a perder validez.

En la mayoría de los casos no es fácil llegar a una solución acertada mediante la introducción en el cálculo de las configuraciones que, a priori, tienden más fuertemente a interaccionar. Esto se debe a que en ocasiones alguna configuración que interacciona débilmente puede variar sensiblemente los resultados, especialmente, aquellos relacionados con las líneas más débiles. De igual modo también sucede que en algunas ocasiones configuraciones que parecen interaccionar fuertemente en los cálculos no lo hacen así en realidad.

Por estas razones, para realizar este tipo de cálculos sería necesario conocer con exactitud todo del esquema de configuraciones que interaccionan, lo cual es imposible en la práctica.

Para mejorar la calidad de los cálculos tanto mono-configuracionales como multi-configuracionales, se han introducido unos operadores efectivos que añadidos a determinados elementos del hamiltoniano de interacción tienden a simular estos efectos y mejoran, en general, los resultados.

El primero de estos operadores fue introducido por Trees (1951) y aparece en los términos diagonales del hamiltoniano de interacción en la forma $\alpha L(L + 1)$, donde α es el parámetro ajustable y L es el momento angular orbital total. Este operador daría cuenta de efectos de

correlación de órbitas, esto es, de interacción órbita-órbita (Cowan (1981)). En su trabajo, Trees encontró que la inclusión de este parámetro en la configuración d^5s del Fe III reducía la desviación media para veintiún niveles experimentales de 857 cm^{-1} a 105 cm^{-1} .

Otro tipo de operadores efectivos que se pueden introducir serían integrales de Slater-Condon ficticias F^k y G^k para valores de k prohibidos con coeficientes f^k y g^k dados por sus expresiones, pero sin tener en cuenta los símbolos 3j que son los que seleccionan los posibles valores de k . Estos operadores fueron usados con éxito por Goldschmidt and Starkand (1970) para configuraciones $d^n p$ de varios elementos. Según notación del National Bureau of Standards, en la actualidad NIST, dichos operadores suelen denotarse por D^k y XD^k , que representan al operador efectivo directo y de intercambio. Estos operadores pueden simular el efecto de las integrales de Slater- Condon R^k y darían, por tanto, cuenta de efectos de interacción de configuraciones (Cowan (1981)).

En este trabajo sólo se utilizan los operadores descritos hasta ahora. Pero además de estos operadores efectivos, existen algunos otros. Sin embargo, la interpretación teórica de estos no es a día de hoy muy clara, sin embargo su uso es comúnmente aceptado en una base empírica, ya que la mejora en calidad de los resultados que proporcionan justifica su uso.

6.3. Cálculos ab-initio. Hartree-Fock

Existen varios métodos para determinar orbitales atómicos y sus energías de ligadura, quizás el más extendido y más exacto es el método consistente de Hartree-Fock. Este método suele dar resultados que están dentro del 5 % respecto a los resultados experimentales, aunque cuando se trabaja con átomos con $Z > 30$, comienzan a aparecer efectos relativistas que hacen que los cálculos se alejen de la realidad, aumentando las diferencias respecto de los valores experimentales hasta un 15 %. Para evitar esta pérdida de precisión, como se explica más adelante, se introducen términos de corrección relativista en el potencial que solucionan este problema.

Los métodos de Hartree y de Hartree-Fock para la determinación de energías de ligadura y de orbitales atómicos se basa en la aproximación del potencial atómico a un potencial central con simetría esférica del tipo

$$V_i(r) = -\frac{Z}{r_i} + \sum_j \int \frac{|\varphi_j(r')|^2}{|r - r'|} d\bar{r} \quad (6.18)$$

donde el primer sumando representa la atracción del núcleo y el segundo la repulsión con el resto de los electrones del átomo. Con este potencial, la ecuación de Schrödinger para cada uno de los electrones queda

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_i(r_i) \right) \varphi_i(r_i) = \varepsilon_i \varphi_i(r_i) \quad (6.19)$$

formándose de esta manera un sistema de n ecuaciones con n funciones de onda φ_i desconocidas y sus N energías de ligadura ε_i .

El problema se resuelve planteando la ecuación variacional que minimice la energía de ligadura de cada orbital y aplicando un método autoconsistente que utilice la solución de cada paso iterativo como parámetro de entrada en el siguiente, hasta que se alcance una solución estable. Se requiere, no obstante, de un primer dato para empezar el proceso. Para este punto de partida se toman a las funciones hidrogenoideas y se realizan las iteraciones hasta alcanzar

una solución estacionaria de la ecuación variacional. Lo expuesto hasta aquí sería propiamente el método de Hartree.

Ahora bien, el método es susceptible de mejoras. Utilizando funciones de onda formadas por determinantes de Slater de los orbitales electrónicos, se consigue introducir el principio de exclusión de Pauli en las ecuaciones. Esto no es más que el método de Hartree-Fock formulado bajo las expresiones:

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{2}\nabla_i^2\phi_i(r_1) - \frac{Z}{r_1}\phi_i(r_1) + \sum_{j \neq i} \int dr_2 \frac{|\phi_j(r_2)|^2}{r_{12}}\phi_i(r_1) - \\
 - \sum_{j \neq i} \delta(m_{s(i)}, m_{s(j)}) \int dr_2 \frac{\phi_j^*(r_2)\phi_i(r_2)}{r_{12}}\phi_j(r_1) = -\varepsilon_i\phi_i(r_1) \quad (6.20)
 \end{aligned}$$

La parte de espín queda en el término multiplicado por $\delta(m_{s(i)}, m_{s(j)})$ que se conoce como término de canje y que aparece al utilizar los determinantes de Slater como funciones de onda.

Una vez obtenidos los orbitales se pueden calcular las integrales F^k , G^k y ζ_{nl} y, con ello, determinar los niveles de energía de los diferentes términos electrostáticos del átomo, ya que el hamiltoniano de acoplo intermedio se escribe fácilmente en función de estas integrales. Los efectos de interacción de configuraciones se representan con las integrales de interacción directa y de intercambio $R^k(i, j; i', j')$ y $R^k(i, j; j', i')$.

Al utilizar la aproximación de Hartree-Fock, se observa que los valores de las integrales de Slater-Condon calculados con los orbitales obtenidos por esta aproximación son mayores que los datos experimentales, circunstancia que también puede darse en las integrales de interacción espín-órbita. En la práctica, los resultados se mejoran reduciendo a un 80 % los valores de las integrales de Slater-Condon. Este porcentaje es un valor típico para átomos neutros e iones de bajo grado de ionización; sin embargo, los valores dados por el cálculo de Hartree-Fock tienden a aproximarse a los valores reales cuando el grado de ionización aumenta. Todo este procedimiento sólo se puede justificar empíricamente.

6.3.1. Correcciones relativistas

A todas las consideraciones hechas hasta el momento hay que añadir el concepto relativista que se ha mencionado más arriba. No obstante, como se verá a continuación, ya la interacción espín-órbita es relativista. Para ello, se usan las funciones de Schrödinger como funciones de orden cero en teoría de perturbaciones y quedándose hasta términos v^2/c^2 en la expansión del hamiltoniano de Dirac en potencias de v/c ; estas funciones no son más que aquellas que solucionan la ecuación de Schrödinger, pero con el espín añadido (aunque éste sin interactuar con la órbita) y factorizado respecto de la parte espacial, esto es:

$$\Psi_{n,l,m(l),m(s)} = \Psi_{n,l,m(l)}\chi(m_s) \quad (6.21)$$

Por tanto, además de la energía cinética y el potencial de Coulomb, en la ecuación de Schrödinger hay tres pequeños términos que son los tratados como teoría de perturbaciones a primer orden.

El primer término se deduce de la expresión relativista de la energía total en un campo central:

$$H = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} + V(r) \quad (6.22)$$

de donde la energía cinética es

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2 \quad (6.23)$$

que desarrollada en serie queda finalmente como

$$T = T_0 - \frac{1}{2m_0 c^2} (H_0 - V(r))^2 \quad (6.24)$$

en donde el subíndice cero se refiere al hamiltoniano de Schrödinger y el segundo sumando es la corrección (igual que la que se obtiene desarrollando la ecuación de Dirac). Evaluando a este último con las funciones de Schrödinger para ver la variación de energía a primer orden

$$\Delta E'_n = -\frac{1}{2m_0 c^2} \langle (H_0 - V(r))^2 \rangle \quad (6.25)$$

y haciendo un breve cálculo se llega a

$$\Delta E'_n = -\frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l + 1/2} \right) \quad (6.26)$$

Este término depende tanto de l como de n y es más pequeño que E_n en un factor $\alpha^2 Z^2 \approx v^2/c^2$.

El segundo término de corrección relativista ya ha sido tratado y aparece al moverse un electrón en un campo eléctrico, que para el caso de campo central toma la forma general:

$$\vec{E} = \frac{1}{e} \frac{\vec{r}}{r} \frac{dV}{dr} \quad (6.27)$$

Así, si el término de corrección es proporcional a $\vec{s} \cdot (\vec{E} \times \vec{p})$, en donde ya aparece la dependencia con el espín, el resultado de éste al introducir el campo eléctrico es

$$\frac{\hbar^2}{2m_0^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{s} \cdot \vec{l} \quad (6.28)$$

Esta expresión se llama de interacción espín-órbita y se deduce del movimiento orbital relativista de un electrón con espín a través de un campo eléctrico cuya fuente es la carga nuclear. Se puede estimar introduciendo una interacción magnética como la perturbación

$$H' = -\mu_s \cdot \vec{B} \quad (6.29)$$

donde aparece el campo magnético que sufre el electrón derivado del campo eléctrico y donde $\mu_s = -2\mu_B \vec{s}$. El resultado de (6.28) es el doble del que aparecería en la ecuación de Dirac, lo que se corrige al introducir la precesión de Thomas que considera la carga central total que sufre el electrón. La variación de energía que se obtiene, proceso análogo al explicado para la variación relativista de la masa, para esta corrección se expresa junto a la anterior como

$$\Delta E' + \Delta E'' = -\frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} E_n \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j + 1/2} \right), \quad j = l \pm \frac{1}{2}, \quad l \neq 0 \quad (6.30)$$

Por último, la tercera corrección relativista sólo se aplica en el caso $l = 0$, lo que produce dificultades porque entonces la función de onda no se anula en el origen. Se denomina término de Darwin y no tiene correspondencia clásica. Su expresión es:

$$-\frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} e \vec{E} \cdot \Delta \quad (6.31)$$

que da una variación de energía

$$\Delta E''' = \frac{\pi Z e^2 \hbar^2}{2m_0^2 c^2} |\Psi(0)|^2, \quad l = 0 \quad (6.32)$$

que es justo, al calcular Ψ :

$$\Delta E''' = -\frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} E_n n \quad (6.33)$$

Como la interacción espín-órbita no aparece si l es cero y si l no es cero, el término de Darwin se anula, podemos escribir una expresión final de variación de la energía válida para todo l

$$\Delta E' + \Delta E'' + \Delta E''' = -\frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} E_n \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+1/2} \right) \quad (6.34)$$

que origina una energía total

$$\Delta E_{n,j} = \frac{\alpha^2 m_0 e^4 Z^4}{2\hbar^2 n^4} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+1/2} \right) \quad (6.35)$$

Estos cálculos se deducen del átomo de hidrógeno, lo que significa que estos tres efectos relativistas tienen el mismo orden de magnitud. Sin embargo, para átomos multi-electrónicos, el término de espín-órbita es el más importante con diferencia, y por eso es el que hemos tratado con anterioridad en más detalle, siendo luego el término de corrección de masa el que más se incrementa para masas atómicas mayores a 30.

6.4. Probabilidades de Transición y Vidas Medias

Podemos expresar la probabilidad de transición en aproximación dipolar eléctrica de un electrón de un estado inicial j a uno final i , A_{ji} en s^{-1} , como:

$$A_{ji} = \frac{64\pi^4 \omega^3}{3\hbar c^3 g_j} S_{ij} \quad (6.36)$$

con λ la longitud de onda de la transición y g_j el peso estadístico del nivel inicial ($2J_j + 1$). S_{ji} es la fuerza de línea, es decir,

$$S_{ji} = |\langle \gamma J \| \vec{D} \| \gamma' J' \rangle|^2 \quad (6.37)$$

siendo $\vec{D} = -e \vec{r}$ el operador dipolar eléctrico y e la carga del electrón. Gracias a la base Russell-Saunders y al álgebra de Racah, para estados puros LSJ podemos escribir mediante la composición de momentos

$$\langle \gamma L S J \| \vec{D} \| \gamma' L' S' J' \rangle = (-1)^{S+L+J'+1} \delta(S, S') \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \begin{Bmatrix} L & J & S \\ J' & L' & 1 \end{Bmatrix} \langle \gamma L \| \vec{D} \| \gamma' L' \rangle \quad (6.38)$$

expresión (6.38) que al aplicarle el teorema de Wigner-Eckart (Sobelman (1979)) se convierte en

$$\langle \alpha L_c l L \| \vec{D} \| \alpha' L'_c l' L' \rangle = (-1)^{L_c+L+l'+1} \sqrt{(2L+1)(2L'+1)} \begin{Bmatrix} l & L & L_c \\ L' & l' & 1 \end{Bmatrix} \langle \alpha l \| D_z \| \alpha' l' \rangle \quad (6.39)$$

Como además,

$$\langle \alpha l \| D_z \| \alpha' l' \rangle = \langle \alpha l \| z \| \alpha' l' \rangle = (-1)^{l'-l+1} \sqrt{l_{max}} \int_0^\infty r P_{nl}(r) P_{n'l'}(r) dr \quad (6.40)$$

se puede llegar al resultado para la fuerza de línea

$$S_{JJ'} = (2J+1)(2J'+1)(2L+1)(2L'+1) \left\{ \begin{matrix} l & L & L_c \\ L' & l' & 1 \end{matrix} \right\}^2 \left\{ \begin{matrix} L & J & S \\ J' & L' & 1 \end{matrix} \right\}^2 \cdot \left[\sqrt{l_{max}} \int_0^\infty r P_{nl}(r) P_{n'l'}(r) dr \right]^2 \quad (6.41)$$

La parte entre corchetes de (6.41) es la parte radial de la probabilidad de transición, que puede calcularse una vez obtenidos los orbitales de los niveles entre los que tiene lugar la transición, como veremos a continuación. El resto es la parte angular, que se determina mediante los números cuánticos que caracterizan a los niveles.

Si se trabajase con mezcla de configuraciones en la expresión de la fuerza de línea, aparecen tantas partes radiales como diferentes configuraciones se viesan implicadas, con un signo dado por

$$\rho_{ll'} = (-1)^{l'+l_{max}} \sqrt{l_{max}} \int_0^\infty r P_{nl}(r) P_{n'l'}(r) dr \quad (6.42)$$

La probabilidad de transición, con la longitud de onda en (Å) y la fuerza de línea en unidades atómicas ($a_0^2 e_0^2$) se escribe de la siguiente forma en s^{-1} :

$$A_{ji} = \frac{2.026 \cdot 10^{18}}{\lambda^3 g_j} S_{ij} \quad (6.43)$$

donde S_{ij} se expresará como el elemento de matriz $|\langle i' | \vec{r} | i \rangle|^2$, en las expresiones de Griem como se verá posteriormente.

6.4.1. Cálculo de la parte radial en la probabilidad de transición

Varios factores afectan a la determinación de la parte radial de la probabilidad de transición, siendo el principal la obtención de unos orbitales adecuados con los que calcular la integral. Generalmente se suelen utilizar los orbitales resultantes de un cálculo de Hartree-Fock, ya que la auto-consistencia del método garantiza unos buenos resultados.

Además, se pueden usar otros métodos, como el que emplea potenciales paramétricos que, una vez ajustados al átomo en cuestión, se pueden utilizar para resolver la ecuación de Schrödinger numéricamente. Uno de ellos es el potencial de Green (Green et al. (1969)):

$$V(r) = -\frac{1}{r} \left[(Z-1) \frac{1}{H(e^{r/d}-1)+1} + 1 \right] \quad (6.44)$$

que está expresado en unidades atómicas y en donde H y d son parámetros que se ajustan para cada átomo.

La parte radial de la probabilidad de transición se puede obtener por integración numérica de la expresión correspondiente una vez obtenidos los orbitales atómicos necesarios. Sin embargo, existen varias formulaciones de la parte radial que son equivalentes entre sí.

La más habitual es la que ya hemos descrito y que se conoce como aproximación longitud, esto es,

$$\rho_{ll'} = \sqrt{l_{max}} \int_0^\infty r P_{nl}(r) P_{n'l'}(r) dr \quad (6.45)$$

Además de la expresión 6.45, existen otras dos formulaciones equivalentes. A saber, la aproximación velocidad:

$$\rho_{ll'} = \sqrt{l_{max}} \frac{1}{E_{nl} - E_{n'l'}} \int_0^\infty P_{nl}(r) \left(\frac{dP_{n'l'}}{dr} \pm l_{max} \frac{P_{n'l'}}{r} \right) dr \quad (6.46)$$

y la aproximación aceleración:

$$\rho_{ll'} = \sqrt{l_{max}} \frac{Z}{(E_{nl} - E_{n'l'})^2} \int_0^\infty \frac{1}{r^2} P_{nl}(r) P_{n'l'}(r) dr \quad (6.47)$$

Si los orbitales utilizados en las tres aproximaciones son soluciones de la misma ecuación de Schrödinger radial, el trabajar con una u otra es equivalente. Propiedad que no sucede si en el cálculo numérico de los orbitales se varía el potencial atómico. En la práctica, en los cálculos auto-consistentes de Hartree-Fock no se mantiene un potencial constante para todos los orbitales, sino que éste se varía según exija la convergencia de los cálculos. Por tanto, para saber la bondad de este método, es bueno comparar la semejanza entre las partes radiales en las diferentes aproximaciones. No obstante, la obtención de valores precisos de la parte radial por medio de la aproximación aceleración es difícil debido a que se requiere conocer con mucha precisión los orbitales en el origen debido a su dependencia con r^{-2} , por lo que apenas se usa en la práctica.

6.4.2. Cálculos semiempíricos. Aproximación de Coulomb.

Si se utilizan datos conocidos experimentalmente, es posible evaluar la parte radial de la probabilidad de transición. Para ello, se utilizan los valores de la energía de ionización ε_i y se intenta resolver una ecuación de la que resulten los orbitales radiales.

A diferencia de las ecuaciones de Hartree-Fock, en la que aparecen ecuaciones acopladas, en este método se usa una ecuación independiente para cada orbital, cuya expresión es:

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) - \varepsilon_i \right] P_i(r) = 0 \quad (6.48)$$

donde el parámetro ε_i es igual a la diferencia de energía total del átomo (E_a) y la energía del core (E'_i).

La aproximación semiempírica consiste en tomar el parámetro de energía igual a la energía de ionización experimental. Por ello, la exactitud de la aproximación depende de cuál sea la diferencia entre este parámetro y $|E_a - E'_i|$. Dado que el valor utilizado para el parámetro no es, en general, un autovalor de la ecuación, sus soluciones no cumplirán las condiciones de contorno de los orbitales atómicos $P(0) = 0$ y $P(\infty) = 0$.

En la mayoría de los casos, la integral radial depende fundamentalmente de la parte radial de los orbitales para grandes valores de r , así que la aproximación de Coulomb consiste en calcular dicha integral para esta parte radial de las funciones de onda radiales donde pueden aproximarse con exponenciales.

Los efectos de polarización del core no se tienen en cuenta en esta aproximación, por lo que cuando las funciones de onda del electrón óptico y las de los del core se solapan, esta aproximación comienza a fallar y los resultados del método auto-consistente de Hartree-Fock son más apropiados.

El método precisa que los orbitales implicados en el cálculo de la parte radial tengan su parte más importante fuera del core. Es necesario por lo tanto que los números cuánticos principales de los orbitales sean mayores que el más alto de los números cuánticos de los electrones del core. Además, es necesario que se cumpla $n* > l + 1/2$ para cualquiera de los orbitales estudiados, con $n*$ dado por

$$E = -R \frac{z^2}{n*^2} \quad (6.49)$$

siendo E la energía de ligadura del orbital y $z = Z - N$ la carga neta que afecta al electrón óptico.

6.4.3. Cálculo de la parte angular de la probabilidad de transición

La parte angular de la probabilidad de transición se calcula sin más que evaluar los símbolos 6j que aparecen en la expresión (6.41) de la fuerza de línea. El acoplamiento intermedio es el caso más general, por lo que si se tienen dos niveles

$$|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |L_i S_i J\rangle \quad (6.50)$$

$$|\Psi'\rangle = \sum_i \alpha'_i |L_i S'_i J'\rangle \quad (6.51)$$

la fuerza de línea se calcula evaluando

$$S_{JJ'} = \left| \sum_i a_i a'_i \langle L_i S_i J \| \vec{D} \| L'_i S'_i J' \rangle \right|^2 \quad (6.52)$$

lo que resulta:

$$S_{JJ'} = \left| \sum_i a_i a'_i \sqrt{(2J+1)(2J'+1)(2L+1)(2L'+1)} \begin{Bmatrix} l & L & L_c \\ L' & l' & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & J & S \\ J' & L' & 1 \end{Bmatrix} \right|^2 \rho_w^2 \quad (6.53)$$

en donde la parte radial es común a todos los términos y el problema se reduce a conocer la composición de las funciones de onda, lo que se resuelve con las auto-funciones del hamiltoniano de interacción.

6.5. Determinación experimental de probabilidad de transición

La intensidad de las líneas espectrales es proporcional a la probabilidad de transición según la ecuación

$$I_{ji} = K g_j e^{-E_j/kT} A_{ji} \quad (6.54)$$

siendo K una constante para todas las líneas del mismo espectro.

Como experimentalmente lo que se mide es la intensidad de las líneas espectrales, esta relación permite la determinación de las probabilidades de transición relativas. Ahora bien, lo que interesa es obtener una escala absoluta, por lo que se puede acudir a varios métodos que se expondrán a continuación.

6.5.1. Razones de ramificación

Según la ecuación (6.54) es necesario conocer la temperatura del plasma y la energía y peso estadístico del nivel superior, así como determinar la constante K . Un primer paso para hallar el valor absoluto de la probabilidad de transición es calcular las razones de ramificación o probabilidades de transición relativas, que indican en qué proporción de intensidades se encuentran todas las líneas que parten de un mismo nivel superior, esto es, que pertenecen al mismo multiplete.

La razón de ramificación de una línea de un multiplete se define como

$$\beta_{ji} = \frac{A_{ji}}{\sum_k A_{jk}} = \frac{I_{ji}}{\sum_k I_{jk}} \quad (6.55)$$

donde el índice k se extiende a todos los posibles niveles de llegada de la transición desde el nivel superior j .

6.5.2. Vidas medias

Si la vida media de los niveles de energía es conocida y está disponible en la literatura, es posible expresar las probabilidades de transición en escala absoluta utilizando las razones de ramificación encontradas experimentalmente.

Dado que la vida media no es más que la inversa de la suma de las probabilidades de transición, es decir,

$$\tau_j = \frac{1}{\sum_k A_{jk}} \quad (6.56)$$

aunando esta expresión con la ecuación (6.55) se puede llegar a

$$A_{ji} = \frac{I_{ji}}{\sum_k I_{jk}} \frac{1}{\tau_j} = \frac{\beta_{ji}}{\tau_j} \quad (6.57)$$

Cuando no existen datos disponibles de vidas medias puede utilizarse la vida media obtenida mediante alguno de los métodos anteriores, pero esta determinación estará sujeta, lógicamente, a la incertidumbre de los cálculos. También, las vidas medias se pueden hallar por métodos experimentales totalmente independientes del conocimiento de las probabilidades de transición

6.6. Anchuras Stark

Para el cálculo de los ensachamientos y desplazamientos de las líneas se ha utilizado el enfoque semi-empírico sugerido por Griem (1968).

$$\omega_{se} \approx 8 \left(\frac{\pi}{3} \right)^{3/2} \frac{\hbar}{ma_0} N_e \left(\frac{E_H}{kT} \right)^{1/2} \left[\sum_{i'} |\langle i' | \vec{r} | i \rangle|^2 g_{se} \times \left(\frac{E}{\Delta E_{i'i}} \right) + \sum_{j'} |\langle j' | \vec{r} | j \rangle|^2 g_{se} \left(\frac{E}{\Delta E_{j'j}} \right) \right] \quad (6.58)$$

$$d \approx -8 \left(\frac{\pi}{3} \right)^{3/2} \frac{\hbar}{ma_0} N_e \left(\frac{E_H}{kT} \right)^{1/2} \left[\sum_{i'} \left(\frac{\Delta E_{i'i}}{|\Delta E_{i'i}|} \right) |\langle i' | \vec{r} | i \rangle|^2 g_{sh} \times \left(\frac{E}{\Delta E_{i'i}} \right) - \sum_{j'} \left(\frac{\Delta E_{j'j}}{|\Delta E_{j'j}|} \right) |\langle j' | \vec{r} | j \rangle|^2 g_{sh} \left(\frac{E}{\Delta E_{j'j}} \right) \right] \quad (6.59)$$

En las ecuaciones anteriores ω_{se} y d representa respectivamente el ensanchamiento y el desplazamiento de las líneas Stark en unidades de frecuencia angular, N_e es la densidad de electrones, T la temperatura electrónica, $E = \frac{2}{3}kT$ la energía del electrón y E_H la energía de ionización del hidrógeno. Los índices 'i' y 'j' denotan los niveles de transición inicial (superior) y final (inferior). ω_{se} es la semi-anchura a media altura (HWHM) del perfil lorentziano, es proporcional a la anchura a media altura (FWHM) de la línea, ω en unidades de longitud de onda, según la expresión:

$$\omega = \omega_{se} \frac{\lambda^2}{\pi c} \quad (6.60)$$

Las fórmulas (6.58) y (6.59) están basados en la formulación original de Baranger (1958) y el uso de los factores de Gaunt g_{se} y g_{sh} , propuestos por Seaton (1962), van Regemorter (1962), Niemann et al. (2003)... Estos factores son funciones que varían lentamente de $x_{i'i} = E/\Delta E_{i'i}$, donde $\Delta E_{i'i}$ es la diferencia de energía entre un nivel i' y el nivel i .

Los elementos de matriz ($|\langle i' | \vec{r} | i \rangle|^2$, $|\langle j' | \vec{r} | j \rangle|^2$) requeridos en estas fórmulas se calculan utilizando acoplamiento intermedio (IC) mediante los programas informáticos de Cowan (1981).

6.7. Uso del programa Cowan

Como se ha observado en los apartados anteriores la diagnosis del plasma en este trabajo ha sido semi-empírica, por lo que no se podrían haber calculado ni la temperatura del plasma ni la densidad de electrones sin los cálculos previos de las probabilidades de transición y ensanchamientos Stark del Mg II. El cálculo de las probabilidades de transición se ha realizado mediante el código de Cowan (1981) y a partir de dichas probabilidades de transición se calculan los elementos de matriz necesarios para calcular los ensanchamientos Stark.

Una vez alcanzado este punto, es apropiado explicar someramente cómo trabaja el código Cowan. Básicamente el código emplea tres programas iniciales que están encargados de distintos aspectos:

- RCN, que calcula las funciones de onda radiales mono-configuracionales. Su salida proporciona los valores de la energía E_{av} de la configuración y las integrales F_k , G_k , y ζ necesarias para obtener los niveles de energía.

En este programa existen cuatro aproximaciones diferentes al método Hartree-Fock:

- Hartree (H)
- Hartree-Fock-Slater (HFS)
- Hartree más intercambio estadístico (HX)
- Hartree-Fock relativista (HFR)

De todas ellas, la opción que proporciona una mayor eficiencia computacional es la Hartree-Fock relativista.

- RCN2, que calcula las integrales radiales mono-configuracionales, integrales dipolares e integrales de Bessel a raíz de un fichero originado por RCN.
- RCG, que calcula entre otras cosas, a partir de un fichero de salida del RCN2, factores angulares, niveles energéticos y probabilidades de transición E1, E2, M1.

Además de estos programas iniciales, y cuando se desea obtener una mayor precisión, existe un cuarto programa:

- RCE, que permite variar los valores anteriores de RCN y RCN2 para hacer un ajuste de mínimos cuadrados de los niveles energéticos a través de un proceso iterativo. Los nuevos valores ajustados pueden ser de nuevo introducidos como datos en RCG.

Los pasos que hay que seguir son los siguientes:

1. Se introducen por orden las configuraciones de cada paridad de todos los niveles de la especie a analizar en el archivo IN36.
2. Ejecutar el código RCN, el cual necesita ese primer archivo IN36 de entrada. Obteniéndose los archivos OUT36 y TAPE2N, este último es el archivo de entrada del siguiente paso.
3. Se corre el programa RCN2.
4. Del paso anterior se obtiene el fichero ING11 que necesita como entrada el programa RCG. Como resultado del RCG se dan los archivos OUTG11, OUTGINE y TAPE2E.
5. En el archivo OUTG11 se encuentran las probabilidades de transición de todos los niveles.

Según se vayan obteniendo los resultados los archivos ING11 y OUTGINE se pueden editar para ajustar los datos y obtener mejores soluciones.

El cálculo de los ensanchamientos Stark se realizó mediante un programa en Fortran ya editado por uno de los investigadores del grupo, el cual calcula la aproximación semiempírica de Griem. Este da los resultados de ensanchamientos y desplazamientos para diferentes temperaturas de una línea. Para ello, el código necesita de los datos de los elementos de matriz que calcula a partir de las probabilidades de transición recogidas en el fichero de salida del código Cowan, OUTG11, y los almacena en la memoria interna del software. Posteriormente, al ejecutar el programa, este pide la longitud de onda y las energías de cada transición (Figura 6.1(a)) y aplica para esa transición las expresiones de Griem con dichos elementos de matriz, los factores

de Gaunt propuestos por otros autores (van Regemorter (1962), Niemann et al. (2003)...) y diferentes temperaturas. Se obtiene entonces un listado de ensanchamientos y desplazamientos en función de las temperaturas pedidas. Estos resultados se muestran en pantalla (Figura 6.1 b) y son guardados en un archivo de texto que el software nombra como “Resultados”.

Figura 6.1: Programa Stark. (a) Ejemplo de las líneas de entrada de datos: longitud de onda y energía del nivel. (b) Ejemplo de salida de los datos

6.8. Resultados para las diferentes especies

En esta sección se van a mostrar los resultados obtenidos en los cálculos de probabilidades de transición, vidas medias, ensanchamientos y desplazamientos Stark descritos anteriormente para diferentes líneas del Mg II y del Mg III.

En concreto se ha realizado un cálculo exhaustivo de las probabilidades de transición para líneas de Mg II, cuatro de ellas son las utilizadas para la determinación de la temperatura del plasma en el capítulo anterior, como se puede ver en la tabla 5.3. Para el Mg II existen varios estudios teóricos de las probabilidades de transición recogidos en la bibliografía, NIST (Kramida et al. (2015)), pero en cambio no se han encontrado valores experimentales, de ahí el motivo de la realización de estos cálculos.

En el caso del Mg III se observó que prácticamente no existían valores ni de probabilidades ni de parámetros Stark en la bibliografía. Ya que inicialmente se pensó en realizar las medidas experimentales a tiempos cortos de retardo, donde se han llegado a observar líneas dos veces ionizadas, por ejemplo Alonso-Medina (2010), Alonso-Medina (2011) o Mayo et al. (2005); se realizaron cálculos muy completos tanto de las probabilidades de transición como de los parámetros Stark del Mg III. Los pocos valores experimentales recogidos en la bibliografía han sido comparados con los obtenidos en este trabajo. Esto dio lugar a las primeras publicaciones derivadas de esta tesis.

6.8.1. Mg II

En la figura 6.2 se presenta un diagrama parcial de los niveles de energía para el Mg II. Se han resaltado las líneas que se han utilizado para la obtención de la temperatura en el capítulo anterior.

Figura 6.2: Diagrama de Gotrian parcial de los niveles del Mg II correspondientes a algunas líneas espectrales que han sido calculadas en este trabajo.

Los cálculos de las probabilidades de transición y las vidas medias se han determinado a partir de 46 configuraciones del Mg II: $2s^2 2p^6 ns$ ($n = 3 - 10$), $2s^2 2p^6 nd$ ($n = 3 - 9$), $2s^2 2p^6 ng$ ($n = 5 - 11$) y $2p^6 ni$ ($n = 7 - 10$) para la paridad impar y $2s^2 2p^6 np$ ($n = 3 - 9$), $2s^2 2p^6 nf$ ($n = 4 - 10$), $2p^6 nh$ ($n = 6 - 11$) para la par. A continuación se muestran 61 probabilidades de transición y 14 vidas medias, en la tabla 6.1.

Tabla 6.1: Probabilidades de transición de varias líneas espectrales del Mg II que surgen de configuraciones de $2p^6 ns$ ($n = 4 - 7$), $2p^6 np$ ($n = 3 - 6$) y $2p^6 3d$ y vidas medias de los niveles de estas configuraciones. Las longitudes de onda, λ (nm), han sido obtenidas del NIST (Kramida et al. (2015)).

Niveles de Transición		Longitud de onda	Probabilidades de transición	Vidas medias
Superior	Inferior	λ (nm)	A_{ij} (10^7 s^{-1})	τ (nm)
$2p^6 4s \ ^2S_{1/2}$	$2p^6 3p \ ^2P_{1/2}$	292.86	10.90	3.08
	$2p^6 3p \ ^2P_{3/2}$	293.65	21.60	
$2p^6 5s \ ^2S_{1/2}$	$2p^6 3p \ ^2P_{1/2}$	175.06	3.89	5.17
	$2p^6 3p \ ^2P_{3/2}$	175.34	7.80	

Tabla 6.1. Continuación.

Niveles de Transición		Longitud de onda	Probabilidades de transición	Vidas medias
Superior	Inferior	λ (nm)	A_{ij} (10^7 s^{-1})	τ (nm)
$2p^6 6s \ ^2S_{1/2}$	$2p^6 4p \ ^2P_{1/2}$	821.39	2.58	8.88
	$2p^6 4p \ ^2P_{3/2}$	823.46	5.13	
	$2p^6 3p \ ^2P_{1/2}$	148.09	1.89	
	$2p^6 3p \ ^2P_{3/2}$	148.29	3.77	
	$2p^6 4p \ ^2P_{1/2}$	442.79	1.04	
	$2p^6 4p \ ^2P_{3/2}$	443.39	2.07	
$2p^6 7s \ ^2S_{1/2}$	$2p^6 5p \ ^2P_{1/2}$	741.19	0.834	14.4
	$2p^6 5p \ ^2P_{3/2}$	745.39	1.66	
	$2p^6 3p \ ^2P_{1/2}$	136.77	1.07	
	$2p^6 3p \ ^2P_{3/2}$	136.94	2.13	
	$2p^6 4p \ ^2P_{1/2}$	354.95	0.557	
	$2p^6 4p \ ^2P_{3/2}$	355.34	1.11	
	$2p^6 5p \ ^2P_{1/2}$	882.43	0.367	
	$2p^6 5p \ ^2P_{3/2}$	883.51	0.732	
	$2p^6 6p \ ^2P_{1/2}$	3162.57	0.331	
	$2p^6 6p \ ^2P_{3/2}$	3169.97	0.658	
$2p^6 3p \ ^2P_{1/2}$	$2p^6 3s \ ^2S_{1/2}$	280.27	25.9	3.734
$2p^6 3p \ ^2P_{3/2}$	$2p^6 3s \ ^2S_{1/2}$	279.55	26.2	3.710
$2p^6 4p \ ^2P_{1/2}$	$2p^6 3s \ ^2S_{1/2}$	124.04	0.0611	18.90
	$2p^6 4s \ ^2S_{1/2}$	924.43	3.65	
	$2p^6 3d \ ^2D_{3/2}$	1095.18	1.58	
$2p^6 4p \ ^2P_{3/2}$	$2p^6 3s^2 \ ^2S_{1/2}$	123.99	0.0061	18.77
	$2p^6 4s \ ^2S_{1/2}$	921.82	3.675	
	$2p^6 3d \ ^2D_{3/2}$	1091.53	0.159	
	$2p^6 4p^2 P_{1/2}$	1091.42	1.435	
	$2p^6 5p \ ^2P_{1/2}$	102.61	0.246	
$2p^6 5p \ ^2P_{1/2}$	$2p^6 4s \ ^2S_{1/2}$	361.56	0.0142	45.99
	$2p^6 3d \ ^2D_{3/2}$	385.04	0.3695	
	$2p^6 5s \ ^2S_{1/2}$	2143.79	0.886	
	$2p^6 4d \ ^2D_{3/2}$	2413.10	0.66	
	$2p^6 3s \ ^2S_{1/2}$	102.59	0.2465	
	$2p^6 4s \ ^2S_{1/2}$	361.38	0.01425	

Tabla 6.1. Continuación.

Niveles de Transición		Longitud de onda	Probabilidades de transición	Vidas medias
Superior	Inferior	λ (nm)	A_{ij} (10^7 s^{-1})	τ (nm)
$2p^6 6p \ ^2P_{1/2}$	$2p^6 3d \ ^2D_{5/2}$	384.82	0.332	87.84
	$2p^6 3d \ ^2D_{3/2}$	384.83	0.037	
	$2p^6 5s \ ^2S_{1/2}$	2137.47	0.892	
	$2p^6 4d \ ^2D_{5/2}$	2404.79	0.5975	
	$2p^6 4d \ ^2D_{3/2}$	2405.10	0.0664	
	$2p^6 3s \ ^2S_{1/2}$	94.6769	0.207	
	$2p^6 4s \ ^2S_{1/2}$	279.11	0.0004575	
	$2p^6 3d \ ^2D_{3/2}$	292.90	0.0185	
	$2p^6 5s \ ^2S_{1/2}$	779.09	0.0154	
	$2p^6 4d \ ^2D_{3/2}$	812.04	0.155	
$2p^6 6p \ ^2P_{3/2}$	$2p^6 6s \ ^2S_{1/2}$	4122.68	0.294	87.13
	$2p^6 5d \ ^2S_{3/2}$	4540.57	0.277	
	$2p^6 3s \ ^2S_{1/2}$	94.67	0.207	
	$2p^6 4s \ ^2S_{1/2}$	279.05	0.00458	
	$2p^6 3d \ ^2D_{3/2}$	292.83	0.167	
	$2p^6 5s \ ^2S_{1/2}$	292.84	0.0185	
	$2p^6 5s \ ^2S_{1/2}$	778.65	0.0154	
	$2p^6 4d \ ^2D_{5/2}$	811.52	0.144	
	$2p^6 4d \ ^2D_{3/2}$	811.55	0.016	
	$2p^6 6s \ ^2S_{1/2}$	4110.18	0.297	
$2p^6 3d \ ^2D_{3/2}$	$2p^6 5d \ ^2D_{5/2}$	4524.79	0.252	2.06
	$2p^6 5d \ ^2D_{3/2}$	4525.41	0.0280	
	$2p^6 3p \ ^2P_{1/2}$	279.08	40.5	
	$2p^6 3p \ ^2P_{3/2}$	279.79	8.04	
$2p^6 3d \ ^2D_{5/2}$	$2p^6 3p \ ^2P_{3/2}$	279.80	48.0	2.07

6.8.2. Mg III

En la figura 6.2 se presenta un diagrama parcial de los niveles de energía para el Mg III.

Figura 6.3: Diagrama de Gotrian parcial de los niveles de energía del Mg III correspondientes a líneas espectrales que han sido calculadas en este trabajo.

En esta sección se presentan parte de los ensanchamientos Stark y los desplazamientos calculados utilizando el método semiempírico de Griem (Tabla 6.2), correspondientes a líneas espectrales de Mg III. Las tablas completas se pueden consultar en el Apéndice B. Los datos se presentan para una densidad electrónica de 10^{17} cm^3 y temperaturas de 500 K a 50000 K. Los elementos de matriz utilizados en estos cálculos se han determinado a partir de 23 configuraciones de Mg III: $2s^2 2p^6$, $2s^2 2p^5 3p$, $2s^2 2p^5 4p$, $2s^2 2p^5 4f$ y $2s^2 2p^5 5f$ para paridad par y $2s^2 2p^5 ns$ ($n = 3 - 6$), $2s^2 2p^5 nd$ ($n = 3 - 9$), $2s^2 2p^5 5g$ y $2s^2 2p^6 np$ ($n = 3 - 8$), para la paridad impar. Para los cálculos de acoplamiento intermedio (IC), se utiliza el método estándar de ajuste de mínimos cuadrados de los niveles de energía experimental mediante el código informático de Cowan, anteriormente explicado. En este caso en concreto, para el cálculo de los ensanchamientos y de los desplazamientos se escogieron los factores de Gaunt sugeridos por Niemann et al. (2003), ya que estos factores dan valores teóricos más cercanos a los valores experimentales encontrados en bibliografía.

Además, se presentan algunos valores calculados de probabilidades de transición y vidas medias de líneas espectrales de Mg III, a modo de ejemplo en la tabla 6.3. Como en el caso anterior en el Apéndice B se encuentran los artículos con las tablas completas.

Tabla 6.2: Ensanchamientos, ω (pm), y desplazamientos d (pm) normalizados a $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ para las líneas del Mg III $2p^6 - 2p^5ns$ ($3 - 5$), $2p^5np$ ($3, 4$) - $2p^5ns$ ($3 - 5$) y $2p^5ns$ ($3, 4$) - $2p^5np$ ($3, 4$). Las longitudes de onda, λ (nm), han sido obtenidas del NIST (Kramida et al. (2015)).

Longitud de onda	Nivel de transición (cm^{-1})		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10^4 K)	(pm)	(pm)
23.43	$2p^53s \ ^3P_1$	$2p^6 \ ^1S_0$	0.5	0.105	-0.101
			1	0.065	-0.062
			2	0.040	-0.039
			5	0.022	-0.022
23.17	$2p^53s \ ^1P_1$	$2p^6 \ ^1S_0$	0.5	0.103	-0.103
			1	0.063	-0.063
			2	0.040	-0.039
			5	0.022	-0.022
127.48	$2p^5(^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_2$	$2p^53p \ ^3S_1$	0.5	21.2	-16.6
			1	13.4	-10.5
			2	8.66	-6.89
			5	5.11	-4.12
139.34	$2p^5(^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_2$	$2p^53p \ ^3D_3$	0.5	31.5	-23.2
			1	19.8	-14.6
			2	12.7	-9.49
			5	7.41	-5.63
140.52	$2p^5(^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_2$	$2p^53p \ ^3D_2$	0.5	29.0	-21.9
			1	18.2	-13.9
			2	11.7	-9.04
			5	6.89	-5.39
142.21	$2p^5(^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_2$	$2p^53p \ ^3D_1$	0.5	26.5	-20.8
			1	16.7	-13.2
			2	10.8	-8.63
			5	6.39	-5.17
146.23	$2p^5(^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_2$	$2p^53p \ ^1D_2$	0.5	31.5	-23.8
			1	19.8	-15.1
			2	12.8	-9.81
			5	7.49	-5.85
148.27	$2p^5(^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_2$	$2p^53p \ ^1P_1$	0.5	28.9	-22.6
			1	18.2	-14.4
			2	11.8	-9.4

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm ⁻¹)		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10 ⁴ K)	(pm)	(pm)
149.31	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^3P_2$	5	6.96	-5.64
			0.5	32.8	-24.8
			1	20.6	-15.7
			2	13.3	-10.3
150.68	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^3P_1$	5	7.81	-6.11
			0.5	29.9	-23.4
			1	18.8	-14.9
			2	12.2	-9.71
18.30	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_2$	$2p^6\ ^1S_0$	5	7.19	-5.83
			0.5	0.23	-0.19
			1	0.14	-0.12
			2	0.09	-0.08
126.34	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^3S_1$	5	0.06	-0.05
			0.5	14.1	-10.4
			1	8.83	-6.58
			2	5.69	-4.28
139.13	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^3D_2$	5	3.34	-2.55
			0.5	20.2	-14.4
			1	12.6	-9.07
			2	8.10	-5.87
140.79	$2p^5(^2P_{3/2})4s$	$^2[3/2]_2$	5	4.71	-3.47
			0.5	17.6	-13.1
			1	11.0	-8.28
			2	7.11	-5.39
144.73	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^1D_2$	5	4.17	-3.21
			0.5	21.9	-15.6
			1	13.7	-9.83
			2	8.81	-6.37
146.72	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^1P_1$	5	5.13	-3.77
			0.5	19.2	-14.3
			1	12.0	-9.03
			2	7.76	-5.88

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm^{-1})		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10^4 K)	(pm)	(pm)
148.66	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^3P_0$	5	4.55	-3.51
			0.5	16.2	-12.8
			1	10.2	-8.14
			2	6.63	-5.33
			5	3.93	-3.21
197.94	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^1S_0$	0.5	29.9	-23.7
			1	18.9	-15.1
			2	12.2	-9.88
			5	7.24	-5.94
			0.5	6.82	-4.55
123.98	$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_0$	$2p^53p\ ^3S_1$	1	4.25	-2.85
			2	2.71	-1.83
			5	1.56	-1.07
			0.5	8.53	-5.79
			1	5.32	-3.63
137.87	$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_0$	$2p^53p\ ^3D_1$	2	3.39	-2.34
			5	1.95	-1.37
			0.5	9.33	-6.33
			1	5.81	-3.97
			2	3.71	-2.56
143.56	$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_0$	$2p^53p\ ^1P_1$	5	2.14	-1.5
			0.5	9.63	-6.54
			1	6.00	-4.1
			2	3.83	-2.64
			5	2.21	-1.55
145.82	$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_0$	$2p^53p\ ^3P_1$	0.5	0.23	-0.18
			1	0.14	-0.12
			2	0.09	-0.08
			5	0.05	-0.05
			0.5	13.4	-9.8
18.22	$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_1$	$2p^6\ ^1S_0$	1	8.40	-6.20
			2	5.41	-4.04
122.94	$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_1$	$2p^53p\ ^3S_1$	0.5	13.4	-9.8
			1	8.40	-6.20
			2	5.41	-4.04

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm^{-1})		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10^4 K)	(pm)	(pm)
135.02	$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_1$	$2p^53p\ ^3D_2$	5	3.17	-2.40
			0.5	19.1	-13.5
			1	11.9	-8.50
			2	7.65	-5.51
136.58	$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_1$	$2p^53p\ ^3D_1$	5	4.45	-3.26
			0.5	16.6	-12.3
			1	10.4	-7.76
			2	6.72	-5.05
142.15	$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_1$	$2p^53p\ ^1P_1$	5	3.94	-3.01
			0.5	18.1	-13.3
			1	11.4	-8.44
			2	7.31	-5.5
143.11	$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_1$	$2p^53p\ ^3P_2$	5	4.29	-3.28
			0.5	21.5	-15.2
			1	13.5	-9.61
			2	8.65	-6.23
143.98	$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_1$	$2p^53p\ ^3P_0$	5	5.03	-3.68
			0.5	15.3	-11.9
			1	9.63	-7.59
			2	6.25	-4.98
144.37	$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_1$	$2p^53p\ ^3P_1$	5	3.70	-3.00
			0.5	18.6	-13.8
			1	11.7	-8.71
			2	7.54	-5.67
82.38	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^3S_1$	5	4.42	-3.38
			0.5	4.10	1.73
			1	2.54	1.09
			2	1.61	0.71
87.17	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^3D_3$	5	0.92	0.42
			0.5	7.00	0.62
			1	4.32	0.42
			2	2.72	0.29

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm^{-1})		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10^4 K)	(pm)	(pm)
87.63	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^3D_2$	5	1.54	0.20
			0.5	5.88	1.26
			1	3.64	0.81
			2	2.30	0.53
			5	1.31	0.33
89.82	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^1D_2$	0.5	6.22	1.31
			1	3.85	0.84
			2	2.43	0.55
			5	1.38	0.34
			0.5	6.38	1.33
90.97	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^3P_2$	1	3.95	0.85
			2	2.50	0.56
			5	1.42	0.34
			0.5	150.3	6.58
			1	94.5	4.25
347.34	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_2$	$2p^5(^2P_{3/2})4p\ ^2[1/2]_1$	2	60.9	2.84
			5	35.8	1.74
			0.5	328.3	-51.6
			1	206.6	-32.4
			2	133.5	-20.8
370.67	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_2$	$2p^5(^2P_{3/2})4p\ ^2[5/2]_3$	5	78.7	-12.2
			0.5	255.1	-22.1
			1	160.5	-14.0
			2	103.6	-9.06
			5	61.1	-5.38
375.37	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_2$	$2p^5(^2P_{3/2})4p\ ^2[5/2]_2$	0.5	269.8	-22.9
			1	169.8	-14.6
			2	109.7	-9.67
			5	64.7	-5.90
			0.5	0.07	0.05
387.05	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_2$	$2p^5(^2P_{3/2})4p\ ^2[3/2]_1$	1	0.04	0.03
			2	0.03	0.02
			0.5	0.07	0.05
16.97	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_1$	$2p^6\ ^1S_0$	1	0.04	0.03
			2	0.03	0.02
			0.5	0.07	0.05

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm^{-1})		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10^4 K)	(pm)	(pm)
82.14	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_1$	$2p^53p^3S_1$	5	0.02	0.01
			0.5	3.00	0.64
			1	1.86	0.42
			2	1.17	0.28
			5	0.67	0.17
87.36	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_1$	$2p^53p\ ^3D_2$	0.5	4.62	0.03
			1	2.86	0.04
			2	1.80	0.05
			5	1.02	0.05
			0.5	3.48	0.67
88.01	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_1$	$2p^53p\ ^3D_1$	1	2.16	0.43
			2	1.36	0.29
			5	0.77	0.18
			0.5	4.90	0.02
			1	3.03	0.03
89.53	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_1$	$2p^53p\ ^1D_2$	2	1.91	0.04
			5	1.08	0.04
			0.5	3.70	0.69
			1	2.29	0.44
			2	1.45	0.29
90.29	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_1$	$2p^53p\ ^1P_1$	5	0.82	0.18
			0.5	127.8	-12.4
			1	80.4	-7.60
			2	51.9	-4.72
			5	30.6	-2.63
343.08	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_1$	$2p^5(^2P_{3/2})4p\ ^2[1/2]_1$	0.5	226.4	-43.5
			1	142.6	-27.3
			2	92.1	-17.6
			5	54.4	-10.3
			0.5	153.1	-14.8
370.39	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_1$	$2p^5(^2P_{3/2})4p\ ^2[5/2]_2$	1	96.4	-9.32
			2	62.3	-6.05
			5	30.6	-2.63
377.36	$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_1$	$2p^5(^2P_{3/2})4p\ ^2[3/2]_1$	0.5	153.1	-14.8
			1	96.4	-9.32
			2	62.3	-6.05

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm^{-1})		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10^4 K)	(pm)	(pm)
381.76	$2p^5(^2P_{3/2})5s^2[3/2]_1$	$2p^5(^2P_{3/2})4p^2[3/2]_2$	5	36.7	-3.60
			0.5	239.1	-45.6
			1	150.6	-28.8
			2	97.4	-18.7
			5	57.5	-11.1
86.59	$2p^5(^2P_{3/2})5s^2[3/2]_1$	$2p^53p^3D_1$	0.5	2.31	-0.37
			1	1.43	-0.22
			2	0.89	-0.13
			5	0.50	-0.06
			0.5	2.51	-0.42
89.66	$2p^5(^2P_{3/2})5s^2[3/2]_1$	$2p^53p^3P_1$	1	1.55	-0.25
			2	0.97	-0.15
			5	0.55	-0.08
			0.5	131.0	-33.7
			1	82.5	-21.1
374.50	$2p^5(^2P_{3/2})5s^2[3/2]_1$	$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[3/2]_1$	2	53.4	-13.6
			5	31.5	-8.00
			0.5	135.0	-34.9
			1	85.1	-22.0
			2	55.0	-14.2
380.81	$2p^5(^2P_{3/2})5s^2[3/2]_1$	$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[1/2]_1$	5	32.5	-8.41
			0.5	0.07	0.06
			1	0.04	0.03
			2	0.03	0.02
			5	0.02	0.01
16.91	$2p^5(^2P_{1/2})5s^2[1/2]_1$	$2p^6^1S_0$	0.5	4.72	0.05
			1	2.92	0.05
			2	1.84	0.05
			5	1.04	0.05
			0.5	3.57	0.69
87.88	$2p^5(^2P_{1/2})5s^2[1/2]_1$	$2p^53p^1D_2$	1	2.21	0.44
			2	1.40	0.29
88.62	$2p^5(^2P_{1/2})5s^2[1/2]_1$	$2p^53p^1P_1$			

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm^{-1})		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10^4 K)	(pm)	(pm)
88.99	$2p^5(^2P_{1/2})5s\ ^2[1/2]_1$	$2p^53p\ ^3P_2$	5	0.79	0.18
			0.5	4.84	0.03
			1	2.99	0.04
			2	1.89	0.04
			5	1.07	0.04
89.47	$2p^5(^2P_{1/2})5s\ ^2[1/2]_1$	$2p^53p\ ^3P_1$	0.5	3.64	0.70
			1	2.25	0.45
			2	1.42	0.30
			5	0.81	0.18
			0.5	69.1	14.9
371.35	$2p^5(^2P_{1/2})5s\ ^2[1/2]_1$	$2p^5(^2P_{3/2})4p^2[1/2]_0$	1	43.4	9.22
			2	28.0	5.83
			5	16.4	3.33
			0.5	205.1	-38.7
			1	129.2	-24.4
353.49	$2p^5(^2P_{1/2})5s\ ^2[1/2]_1$	$2p^5(^2P_{3/2})4p^2[3/2]_2$	2	83.5	-15.9
			5	49.3	-9.4
			0.5	233.0	-43.5
			1	146.8	-27.4
			2	94.9	-17.7
376.45	$2p^5(^2P_{1/2})5s\ ^2[1/2]_1$	$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[3/2]_2$	5	56.1	-10.5
			0.5	152.9	-14.3
			1	96.2	-9.13
			2	62.2	-6.00
			5	36.7	-3.62
377.41	$2p^5(^2P_{1/2})5s\ ^2[1/2]_1$	$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[1/2]_1$	0.5	28.99	-22.53
			1	17.82	-13.83
			2	11.14	-8.63
			5	6.22	-4.79
			0.5	24.05	-17.16
239.59	$2p^53p\ ^3S_1$	$2p^53s\ ^3P_2$	1	14.78	-10.52
			2	9.23	-6.55
			0.5	24.05	-17.16
			1	14.78	-10.52
			2	9.23	-6.55
246.85	$2p^53p\ ^3S_1$	$2p^53s\ ^3P_1$	0.5	24.05	-17.16
			1	14.78	-10.52
			2	9.23	-6.55
			0.5	24.05	-17.16
			1	14.78	-10.52

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm^{-1})		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10^4 K)	(pm)	(pm)
252.99	$2p^5 3p \ ^3S_1$	$2p^5 3s \ ^3P_0$	5	5.14	-3.62
			0.5	18.13	-10.92
			1	11.13	-6.68
			2	6.94	-4.14
			5	3.86	-2.27
278.95	$2p^5 3p \ ^3S_1$	$2p^5 3s \ ^1P_1$	0.5	31.34	-22.00
			1	19.26	-13.49
			2	12.02	-8.40
			5	6.69	-4.65
			0.5	35.04	-24.15
206.56	$2p^5 3p \ ^3D_3$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	1	21.53	-14.82
			2	13.45	-9.24
			5	7.49	-5.13
			0.5	27.74	-20.14
			1	17.05	-12.37
204.02	$2p^5 3p \ ^3D_2$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	2	10.65	-7.72
			5	5.94	-4.29
			0.5	24.35	-16.33
			1	14.96	-10.02
			2	9.34	-6.24
209.26	$2p^5 3p \ ^3D_2$	$2p^5 3s \ ^3P_1$	5	5.20	-3.46
			0.5	30.33	-20.11
			1	18.63	-12.34
			2	11.63	-7.69
			5	6.48	-4.27
231.88	$2p^5 3p \ ^3D_2$	$2p^5 3s \ ^1P_1$	0.5	20.54	-16.14
			1	12.63	-9.92
			2	7.90	-6.20
			5	4.41	-3.46
			0.5	16.93	-12.28
200.55	$2p^5 3p \ ^3D_1$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	1	10.40	-7.54
			2	6.50	-4.71
			5	4.41	-3.46
			0.5	16.93	-12.28
			1	10.40	-7.54
205.61	$2p^5 3p \ ^3D_1$	$2p^5 3s \ ^3P_1$	2	6.50	-4.71
			5	4.41	-3.46
			0.5	16.93	-12.28
			1	10.40	-7.54
			2	6.50	-4.71

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm^{-1})		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10^4 K)	(pm)	(pm)
209.86	$2p^5 3p \ ^3D_1$	$2p^5 3s \ ^3P_0$	5	3.63	-2.62
			0.5	12.72	-7.90
			1	7.81	-4.84
			2	4.88	-3.01
			5	2.71	-1.67
227.41	$2p^5 3p \ ^3D_1$	$2p^5 3s \ ^1P_1$	0.5	21.12	-15.08
			1	12.98	-9.26
			2	8.11	-5.78
			5	4.52	-3.22
			0.5	25.04	-18.09
193.07	$2p^5 3p \ ^1D_2$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	1	15.39	-11.12
			2	9.62	-6.94
			5	5.37	-3.87
			0.5	21.95	-14.65
			1	13.49	-8.99
197.75	$2p^5 3p \ ^1D_2$	$2p^5 3s \ ^3P_1$	2	8.43	-5.61
			5	4.70	-3.12
			0.5	27.02	-17.82
			1	16.61	-10.94
			2	10.37	-6.83
217.84	$2p^5 3p \ ^1D_2$	$2p^5 3s \ ^1P_1$	5	5.78	-3.80
			0.5	18.49	-14.52
			1	11.37	-8.93
			2	7.11	-5.58
			5	3.98	-3.12
189.63	$2p^5 3p \ ^1P_1$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	0.5	15.22	-11.04
			1	9.36	-6.78
			2	5.85	-4.24
			5	3.27	-2.36
			0.5	11.45	-7.12
194.15	$2p^5 3p \ ^1P_1$	$2p^5 3s \ ^3P_1$	1	7.04	-4.37
			2	4.40	-2.72
			0.5	11.45	-7.12
197.93	$2p^5 3p \ ^1P_1$	$2p^5 3s \ ^3P_0$	1	7.04	-4.37
			2	4.40	-2.72
			0.5	11.45	-7.12

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm^{-1})		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10^4 K)	(pm)	(pm)
213.47	$2p^5 3p \ ^1P_1$	$2p^5 3s \ ^1P_1$	5	2.45	-1.51
			0.5	18.77	-13.39
			1	11.54	-8.23
			2	7.21	-5.14
			5	4.02	-2.87
187.95	$2p^5 3p \ ^3P_2$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	0.5	23.74	-17.22
			1	14.60	-10.59
			2	9.12	-6.61
			5	5.09	-3.69
			0.5	20.79	-13.94
192.39	$2p^5 3p \ ^3P_2$	$2p^5 3s \ ^3P_1$	1	12.78	-8.57
			2	7.98	-5.35
			5	4.45	-2.98
			0.5	25.45	-16.87
			1	15.64	-10.37
211.34	$2p^5 3p \ ^3P_2$	$2p^5 3s \ ^1P_1$	2	9.77	-6.47
			5	5.45	-3.60
			0.5	8.97	-7.61
			1	5.52	-4.68
			2	3.45	-2.93
190.85	$2p^5 3p \ ^3P_0$	$2p^5 3s \ ^3P_1$	5	1.93	-1.64
			0.5	11.16	-9.22
			1	6.86	-5.67
			2	4.29	-3.55
			5	2.40	-1.99
209.15	$2p^5 3p \ ^3P_0$	$2p^5 3s \ ^1P_1$	0.5	17.76	-13.95
			1	10.93	-8.58
			2	6.83	-5.36
			5	3.82	-3.00
			0.5	14.61	-10.60
185.82	$2p^5 3p \ ^3P_1$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	1	8.98	-6.52
			2	5.62	-4.07
190.16	$2p^5 3p \ ^3P_1$	$2p^5 3s \ ^3P_1$			

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm^{-1})		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10^4 K)	(pm)	(pm)
193.78	$2p^5 3p \ ^3P_1$	$2p^5 3s \ ^3P_0$	5	3.14	-2.27
			0.5	10.99	-6.84
			1	6.75	-4.20
			2	4.22	-2.62
208.65	$2p^5 3p \ ^3P_1$	$2p^5 3s \ ^1P_1$	5	2.35	-1.45
			0.5	17.94	-12.81
			1	11.03	-7.87
			2	6.89	-4.92
73.44	$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4p^2[5/2]_3$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	5	3.85	-2.75
			0.5	12.34	-5.52
			1	7.76	-3.44
			2	5.00	-2.19
330.73	$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4p^2[5/2]_3$	$2p^5 3d \ ^3F_4$	5	2.94	-1.27
			0.5	324.69	-126.93
			1	203.05	-79.06
			2	130.06	-50.37
333.72	$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4p^2[5/2]_3$	$2p^5 3d \ ^3F_3$	5	75.63	-29.08
			0.5	307.51	-119.33
			1	192.55	-74.38
			2	123.54	-47.44
346.89	$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4p^2[5/2]_3$	$2p^5 3d \ ^1F_3$	5	72.04	-27.43
			0.5	334.20	-130.53
			1	209.26	-81.36
			2	134.26	-51.88
372.09	$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4p^2[5/2]_3$	$2p^5 3d \ ^3D_3$	5	78.29	-30.00
			0.5	384.97	-150.71
			1	241.05	-93.94
			2	154.65	-59.91
625.85	$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4p^2[5/2]_3$	$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4s^2[3/2]_2$	5	90.18	-34.64
			0.5	1209.97	-645.95
			1	764.06	-408.67
			2	495.85	-265.91

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm^{-1})		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10^4 K)	(pm)	(pm)
73.26	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[5/2]_2$	$2p^53s\ ^3P_2$	5	294.25	-158.51
			0.5	9.18	-4.32
			1	5.76	-2.69
			2	3.71	-1.71
			5	2.18	-0.99
73.93	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[5/2]_2$	$2p^53s\ ^3P_1$	0.5	8.74	-3.79
			1	5.50	-2.37
			2	3.55	-1.51
			5	2.09	-0.87
			0.5	9.43	-4.08
76.57	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[5/2]_2$	$2p^53s\ ^1P_1$	1	5.93	-2.54
			2	3.82	-1.62
			5	2.25	-0.94
			0.5	237.73	-92.95
			1	148.62	-57.90
330.00	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[5/2]_2$	$2p^53d\ ^3F_3$	2	95.15	-36.89
			5	55.28	-21.29
			0.5	228.06	-88.39
			1	142.82	-55.12
			2	91.65	-35.17
340.02	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[5/2]_2$	$2p^53d\ ^3F_2$	5	53.45	-20.35
			0.5	264.80	-103.19
			1	165.83	-64.34
			2	106.41	-41.05
			5	62.06	-23.76
365.51	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[5/2]_2$	$2p^53d\ ^1D_2$	0.5	943.22	-537.63
			1	595.96	-340.76
			2	387.06	-222.25
			5	229.92	-132.93
			0.5	856.59	-436.81
612.91	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[5/2]_2$	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4s^2[3/2]_2$	1	540.77	-276.19
			2	350.83	-179.57
			0.5	856.59	-436.81
640.84	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[5/2]_2$	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4s^2[3/2]_1$	1	540.77	-276.19
			2	350.83	-179.57
			0.5	856.59	-436.81

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm^{-1})		T	ω	d
λ (nm)	Superior	Inferior	(10^4 K)	(pm)	(pm)
72.83	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[3/2]_2$	$2p^53s\ ^3P_2$	5	208.09	-106.93
			0.5	9.02	-4.25
			1	5.67	-2.65
			2	3.65	-1.69
			5	2.14	-0.98
76.10	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[3/2]_2$	$2p^53s\ ^1P_1$	0.5	9.25	-4.00
			1	5.82	-2.50
			2	3.76	-1.61
			5	2.21	-0.94
312.73	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[3/2]_2$	$2p^53d\ ^3P_2$	0.5	189.70	-72.79
			1	118.84	-45.52
			2	76.29	-29.16
			5	44.53	-16.97
321.48	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[3/2]_2$	$2p^53d\ ^3F_3$	0.5	224.59	-87.76
			1	140.44	-54.80
			2	89.94	-35.04
			5	52.29	-20.33
333.68	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[3/2]_2$	$2p^53d\ ^1F_3$	0.5	243.76	-96.01
			1	152.43	-59.96
			2	97.62	-38.33
			5	56.75	-22.23
356.94	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[3/2]_2$	$2p^53d\ ^3D_3$	0.5	279.33	-110.35
			1	174.67	-68.91
			2	111.86	-44.05
			5	65.03	-25.56
360.23	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[3/2]_2$	$2p^53d\ ^3D_2$	0.5	256.50	-100.19
			1	160.67	-62.65
			2	103.14	-40.13
			5	60.19	-23.35
584.14	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4p^2[3/2]_2$	$2p^5(^2P_{3/2})\ 4s^2[3/2]_2$	0.5	853.41	-486.83
			1	539.35	-309.05
			2	350.40	-201.99

Tabla 6.2. Continuación.

Longitud de onda	Nivel de transición (cm ⁻¹)		T	ω	d		
λ (nm)	Superior	Inferior	(10 ⁴ K)	(pm)	(pm)		
609.46	2p ⁵ (² P _{3/2})	4p ² [3/2] ₂	2p ⁵ (² P _{3/2})	4s ² [3/2] ₁	5	208.25	-121.15
					0.5	771.11	-393.43
					1	486.94	-249.29
					2	316.03	-162.53
					5	187.57	-97.16

Tabla 6.3: Probabilidades de transición de varias líneas espectrales del Mg III que surgen de configuraciones de $2p^5ns$ ($n = 3 - 5$) y $2p^5np$ ($n = 3, 4$) y vidas medias de los niveles de estas configuraciones. Las longitudes de onda, λ (nm), han sido obtenidas del NIST (Kramida et al. (2015)), exceptuando las que presentan un (*) que han sido recogidas del Moore (1958).

Niveles de transición		Longitud de onda	Probabilidades de transición	Vidas medias
Superior	Inferior	λ (nm)	A_{ij} (10^7 s^{-1})	τ (ns)
$2p^53s \ ^3P_1$	$2p^6 \ ^1S_0$	23.43	85.3	1.17
$2p^53s \ ^1P_1$	$2p^6 \ ^1S_0$	23.17	1315.4	0.076
$2p^5(^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_2$	$2p^53p \ ^3S_1$	127.48	21.9	0.79
	$2p^53p \ ^3D_3$	139.34	60.3	
	$2p^53p \ ^3D_2$	140.52	14.5	
	$2p^53p \ ^3D_1$	142.21	1.6	
	$2p^53p \ ^1D_2$	146.23	10.3	
	$2p^53p \ ^1P_1$	148.27	1.9	
	$2p^53p \ ^3P_2$	149.31	11.5	
	$2p^53p \ ^3P_1$	150.68	3.6	
	$2p^6 \ ^1S_0$	18.30	124.5	0.40
	$2p^53p \ ^3S_1$	126.34	12.0	
$2p^5(^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_2$	$2p^53p \ ^3D_2$	139.13	42.6	
	$2p^53p \ ^3D_1$	140.79	18.6	
	$2p^53p \ ^1D_2$	144.73	23.6	
	$2p^53p \ ^1P_1$	146.72	10.5	
	$2p^53p \ ^3P_2$	147.74	2.2	
	$2p^53p \ ^3P_0$	148.66	7.7	

Niveles de transición		Longitud de onda	Probabilidades de transición	Vidas medias
Superior	Inferior	λ (nm)	A_{ij} (10^7 s $^{-1}$)	τ (ns)
$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_0$	$2p^53p\ ^3P_1$	149.09*	0.017	0.80
	$2p^53p\ ^1S_0$	197.94	7.3	
	$2p^53p\ ^3S_1$	123.98	15.4	
	$2p^53p\ ^3D_1$	137.87	53.4	
	$2p^53p\ ^1P_1$	143.56	29.5	
$2p^5(^2P_{1/2})4s\ ^2[1/2]_1$	$2p^53p\ ^3P_1$	145.82	27.2	0.43
	$2p^6\ ^1S_0$	18.22	231.5	
	$2p^53p\ ^3S_1$	122.94	5.4	
	$2p^53p\ ^3D_2$	135.02	5.0	
	$2p^53p\ ^3D_1$	136.58	3.7	
	$2p^53p\ ^1D_2$	140.28	24.6	
	$2p^53p\ ^1P_1$	142.15	10.3	
	$2p^53p\ ^3P_2$	143.11	38.6	
	$2p^53p\ ^3P_0$	143.98	3.5	
	$2p^53p\ ^3P_1$	144.37	18.4	
	$2p^53p\ ^1S_0$	189.72	14.2	
	$2p^53p\ ^3S_1$	82.38	13.2	
	$2p^53p\ ^3D_3$	87.17	27.8	
	$2p^53p\ ^3D_2$	87.63	6.4	
	$2p^53p\ ^1D_2$	89.82	3.8	
$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_2$	$2p^53p\ ^3P_2$	90.97	3.9	
	$2p^53p\ ^3P_1$	91.48*	1.2	
	$2p^5(^2P_{3/2})4p\ ^2[1/2]_1$	347.34	7.2	
	$2p^5(^2P_{3/2})4p\ ^2[5/2]_3$	370.67	16.4	
	$2p^5(^2P_{3/2})4p\ ^2[5/2]_2$	375.37	4.3	
	$2p^5(^2P_{3/2})4p\ ^2[3/2]_1$	387.05	4.9	
	$2p^5(^2P_{1/2})4p\ ^2[3/2]_2$	414.75	0.27	
	$2p^5(^2P_{1/2})4p\ ^2[1/2]_1$	415.90	0.31	
	$2p^6\ ^1S_0$	16.97	0.35	
	$2p^53p\ ^3S_1$	82.14	5.6	
$2p^5(^2P_{3/2})5s\ ^2[3/2]_1$				1.29

Niveles de transición		Longitud de onda	Probabilidades de transición	Vidas medias
Superior	Inferior	λ (nm)	A_{ij} (10^7 s $^{-1}$)	τ (ns)
	$2p^5 3p \ ^3D_2$	87.36	15.9	
	$2p^5 3p \ ^3D_1$	88.01	6.6	
	$2p^5 3p \ ^1D_2$	89.53	10.6	
	$2p^5 3p \ ^1P_1$	90.29	4.9	
	$2p^5 3p \ ^3P_0$	91.02*	1.7	
	$2p^5 3p \ ^1S_0$	107.39*	1.2	
	$2p^5(^2P_{3/2})4p \ ^2[1/2]_1$	343.076	2.8	
	$2p^5(^2P_{3/2})4p \ ^2[5/2]_2$	370.39	10.9	
	$2p^5(^2P_{3/2})4p \ ^2[3/2]_1$	377.36	7.3	
	$2p^5(^2P_{3/2})4p^2[3/2]_2$	381.76	6.7	
$2p^5(^2P_{1/2})5s \ ^2[1/2]_0$	$2p^5 3p \ ^3S_1$	80.90*	10.4	1.09
	$2p^5 3p \ ^3D_1$	86.59	25.6	
	$2p^5 3p \ ^1P_1$	88.80*	11.6	
	$2p^5 3p \ ^3P_1$	89.66	10.1	
	$2p^5(^2P_{3/2})4p^2[1/2]_1$	322.51*	3.1	
	$2p^5(^2P_{3/2})4p^2[3/2]_1$	352.63*	3.4	
	$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[3/2]_1$	374.50	18.6	
	$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[1/2]_1$	380.81	9.1	
$2p^5(^2P_{1/2})5s \ ^2[1/2]_1$	$2p^6 \ ^1S_0$	16.91	4.4	1.18
	$2p^5 3p \ ^3S_1$	80.75*	5.6	
	$2p^5 3p \ ^3D_2$	85.79*	5.9	
	$2p^5 3p \ ^3D_1$	86.42*	3.4	
	$2p^5 3p \ ^1D_2$	87.88	6.2	
	$2p^5 3p \ ^1P_1$	88.62	2.7	
	$2p^5 3p \ ^3P_2$	88.99	15.2	
	$2p^5 3p \ ^3P_0$	89.32*	2.3	
	$2p^5 3p \ ^3P_1$	89.47	6.8	
	$2p^5(^2P_{3/2})4p^2[1/2]_1$	320.07*	1.6	
	$2p^5(^2P_{3/2})4p^2[1/2]_0$	371.35	1.2	
	$2p^5(^2P_{3/2})4p^2[3/2]_2$	353.49	0.62	

Niveles de transición		Longitud de onda	Probabilidades de transición	Vidas medias
Superior	Inferior	λ (nm)	A_{ij} (10^7 s^{-1})	τ (ns)
	$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[3/2]_1$	371.21*	3.6	
	$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[3/2]_2$	376.45	16.5	
	$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[1/2]_1$	377.41	5.5	
	$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[1/2]_1$	473.61	1.3	
$2p^53p \ ^3S_1$	$2p^53s \ ^3P_2$	239.59	18.9	3.44
	$2p^53s \ ^3P_1$	246.85	7.85	
	$2p^53s \ ^3P_0$	252.99	2.17	
	$2p^53s \ ^1P_1$	278.95	0.16	
$2p^53p \ ^3D_3$	$2p^53s \ ^3P_2$	206.56	42.7	2.34
$2p^53p \ ^3D_2$	$2p^53s \ ^3P_2$	204.02	15.4	2.35
	$2p^53s \ ^3P_1$	209.26	26.9	
	$2p^53s \ ^1P_1$	231.88	0.18	
$2p^53p \ ^3D_1$	$2p^53s \ ^3P_2$	200.55	3.10	2.34
	$2p^53s \ ^3P_1$	205.61	23.3	
	$2p^53s \ ^3P_0$	209.86	16.3	
	$2p^53s \ ^1P_1$	227.41	0.0064	
$2p^53p \ ^1D_2$	$2p^53s \ ^3P_2$	193.07	15.4	2.24
	$2p^53s \ ^3P_1$	197.75	5.30	
	$2p^53s \ ^1P_1$	217.84	24.0	
$2p^53p \ ^1P_1$	$2p^53s \ ^3P_2$	189.63	5.63	2.15
	$2p^53s \ ^3P_1$	194.15	5.38	
	$2p^53s \ ^3P_0$	197.93	13.1	
	$2p^53s \ ^1P_1$	213.47	22.4	
$2p^53p \ ^3P_2$	$2p^53s \ ^3P_2$	187.95	20.9	2.00
	$2p^53s \ ^3P_1$	192.39	13.2	
	$2p^53s \ ^1P_1$	211.34	16.7	
$2p^53p \ ^3P_0$	$2p^53s \ ^3P_1$	190.85	53.2	1.82
	$2p^53s \ ^1P_1$	209.15	1.58	
$2p^53p \ ^3P_1$	$2p^53s \ ^3P_2$	185.82	12.2	1.97
	$2p^53s \ ^3P_1$	190.16	4.66	

Niveles de transición		Longitud de onda	Probabilidades de transición	Vidas medias
Superior	Inferior	λ (nm)	A_{ij} (10^7 s^{-1})	τ (ns)
$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4p^2[5/2]_3$	$2p^53s \ ^3P_0$	193.78	13.6	3.49
	$2p^53s \ ^1P_1$	208.65	20.2	
	$2p^53s \ ^3P_2$	73.44	7.25	
	$2p^53d \ ^3P_2$	324.30	0.034	
	$2p^53d \ ^3F_4$	330.73	11.5	
	$2p^53d \ ^3F_3$	333.72	0.96	
	$2p^53d \ ^3F_2$	343.96	0.096	
	$2p^53d \ ^1F_3$	346.89	1.48	
	$2p^53d \ ^3D_3$	372.09	0.39	
	$2p^53d \ ^3D_2$	375.67	0.12	
	$2p^53d \ ^1D_2$	370.07	0.024	
$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4p^2[5/2]_2$	$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4s^2[3/2]_2$	625.85	6.88	3.43
	$2p^53s \ ^3P_2$	73.26	2.50	
	$2p^53s \ ^3P_1$	73.93	4.25	
	$2p^53s \ ^1P_1$	76.57	0. 74	
	$2p^53d \ ^3P_1$	315.30	0. 17	
	$2p^53d \ ^3P_2$	320.79	0. 36	
	$2p^53d \ ^3F_3$	330.00	10.9	
	$2p^53d \ ^3F_2$	340.02	2.56	
	$2p^53d \ ^1F_3$	342.88	0.0034	
	$2p^53d \ ^3D_1$	357.93	0.218	
	$2p^53d \ ^3D_3$	367.48	0.0518	
	$2p^53d \ ^3D_2$	370.97	0.189	
	$2p^53d \ ^1D_2$	365.51	0.324	
	$2p^53d \ ^1P_1$	384.85	0.0493	
	$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4s^2[3/2]_2$	612.91	2.90	
	$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4s^2[3/2]_1$	640.84	3.99	
	$2p^53s \ ^3P_2$	72.83	2.39	
	$2p^53s \ ^3P_1$	73.49	1.00	
	$2p^53s \ ^1P_1$	76.10	2.35	

Niveles de transición		Longitud de onda	Probabilidades de transición	Vidas medias
Superior	Inferior	λ (nm)	A_{ij} (10^7 s $^{-1}$)	τ (ns)
	$2p^5 3d \ ^3P_1$	307.51	1.01	
	$2p^5 3d \ ^3P_2$	312.73	4.02	
	$2p^5 3d \ ^3F_3$	321.48	0.402	
	$2p^5 3d \ ^3F_2$	330.97	0.0157	
	$2p^5 3d \ ^1F_3$	333.68	9.70	
	$2p^5 3d \ ^3D_1$	347.92	0.0260	
	$2p^5 3d \ ^3D_3$	356.94	0.493	
	$2p^5 3d \ ^3D_2$	360.23	0.837	
	$2p^5 3d \ ^1P_1$	373.31	0.0083	
	$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4s^2[3/2]_2$	584.14	4.53	
	$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4s^2[3/2]_1$	609.46	2.85	
	$2p^5(^2P_{3/2}) \ 4s^2[1/2]_1$	703.29	0.422	

Capítulo 7

Conclusiones

A lo largo de la presente Tesis se ha diagnosticado el plasma generado por un láser pulsado de Nd-YAG en un proceso de Laser Shock Processing. Para ello se ha empleado una muestra de aluminio de la serie 2024, de amplio uso en las industrias de automoción y aeroespacial. Este proceso se ha llevado a cabo en el Centro Láser de la Universidad Politécnica de Madrid.

Se han determinado los parámetros del plasma: densidad de electrones y temperatura electrónica; así como se ha realizado un estudio de la distribución temporal y espacial de dichos parámetros. Además, se han realizado cálculos de los parámetros atómicos de las distintas especies presentes en el plasma.

A continuación se resumen las conclusiones más importantes obtenidas en este trabajo:

1. Se ha llevado a cabo la puesta a punto de la adquisición de los plasmas producidos por láser dentro del proceso industrial de tratamiento de LSP. Obteniendo una respuesta espectral del citado sistema en el rango de 200 nm a 700 nm, con una ventana temporal de 1000 ns.
2. Se ha calibrado el dispositivo de medida en longitud de onda y se ha obtenido su eficiencia.
3. Se ha realizado un estudio espectroscópico del plasma generado con una muestra de la aleación de aluminio 2024. De esta forma se han determinado los parámetros: densidad de electrones, temperatura y la autoabsorción que presentaban las líneas para la determinación de esta última. También, y gracias a los parámetros mencionados se ha estudiado si el plasma estaba en Equilibrio Termodinámico Local y si era ópticamente delgado.
4. Se ha trabajado con dos ventanas de medida comprendidas entre (278.5 - 285.5) nm y (652.8 - 658.8) nm. En estas ventanas se ha visto la evolución temporal del plasma y se han identificado las líneas presentes provenientes de distintas especies iónicas: aluminio, magnesio y cobre, así como la línea H_{α} de Balmer.
5. El estudio del plasma se ha llevado a cabo en tres condiciones: en aire, en mojado y en condiciones de LSP.
 - En aire se observan las líneas de las especies, tanto neutras como ionizadas, presentes en el plasma, así como la línea H_{α} .
 - En mojado, dicho apantallamiento es menor.
 - El empleo de agua como medio confinante apantalla cualquier especie ionizada presente en el plasma. Apareciendo únicamente la línea H_{α} .

6. Se ha observado que la H_α aparece alrededor de $2 \mu s$ de retardo.
7. Para una misma ventana de medida y tiempo de retardo el perfil y la posición de la línea H_α se ha mantenido sin cambios en las tres condiciones de medida, indicando que la densidad de electrones y la temperatura electrónica del plasma serán similares dentro de las incertidumbre experimentales.
8. La densidad de electrones del plasma en condiciones de LSP obtenida mediante el estudio de la línea H_α está en el rango de $(1.36 - 0.86) \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ para tiempos de retardo desde 5 a 8 μs .
9. La densidad de electrones del plasma en condiciones de LSP se mantiene constante a lo largo del eje axial del plasma.
10. Se ha calculado la autoabsorción de las líneas del Mg I, Mg II y Al II presentes en la ventana de medida de (278.5 - 285.5) nm.
11. La temperatura se ha obtenido en aire utilizando líneas del Mg II. El resultado obtenido ha sido de $10900 \pm 1000 \text{ K}$.
12. Se ha corroborado la temperatura y la densidad de electrones mediante la ecuación de Saha con las líneas de Mg I y Mg II.
13. Se ha medido el desplazamiento de la línea H_α en condiciones de LSP en la ventana de medida de 1000 ns y un tiempo de retardo de 5 μs . Con este desplazamiento y su anchura se ha obtenido una densidad de electrones de $(1.4 \pm 0.1) \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y una temperatura de $12000 \pm 1000 \text{ K}$. Estos valores están de acuerdo con el resto de conclusiones y están en proceso de revisión para su publicación.
14. Los resultados obtenidos en esta tesis de densidad de electrones y temperatura corroboran la presencia de inconsistencias en el método en el que se realiza el proceso de simulación en el programa HELIOS®.
15. Se han presentados los valores calculados en aproximación Hartree-Fock, utilizando el programa Cowan, de las probabilidades de transición de 61 líneas y 14 vidas medias del Mg II correspondientes a los niveles $2p^6ns$ ($n = 4 - 7$), $2p^6np$ ($n = 3 - 6$) y $2p^63d$.
16. Se han estudiado más detalladamente las líneas del Mg II que corresponden a las transiciones $3d$ y $3p$ utilizadas en la obtención de la temperatura del plasma.
17. Se han calculado en aproximación Hartree-Fock las probabilidades de transición de 365 líneas y 89 vidas medias del MgIII correspondientes a los niveles $2p^5ns$ ($n = 3 - 5$), $2p^5np$ ($n = 3, 4$), $2p^5nd$ ($n = 3, 4$), $2p^5nf$ ($n = 4, 5$) $2p^55g$ utilizando el programa Cowan. Asimismo se han calculado los ensanchamientos. Los resultados relativos al Mg III están publicados en las revistas: "Atomic Data and Nuclear Data Tables" (ADNDT), "Monthly Notices of the Royal Astronomical Society" (MNRAS) y "Physica Scripta".

Bibliografía

- Abdel-Kareem, O., Al-Zahrani, A., Khedr, A., and Harith, M. (2016). Evaluating the use of laser in analysis and cleaning of the islamic marine archaeological coins excavated from the red sea. International Journal of Conservation Science, 7:511–522.
- Aguilera, J., Aragón, C., Cristoforetti, G., and Tognoni, E. (2009). Application of calibration-free laser-induced breakdown spectroscopy to radially resolved spectra from a copper-based alloy laser-induced plasma. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 64(7):685 – 689.
- Allen, C. W. (1976). Astrophysical Quantities. The Athlone Press University of London.
- Alonso-Medina, A. (2010). A spectroscopic study of laser- induced tin-lead plasma:transition probabilities for spectral lines of sn i. Spectrochimica Acta, Part B: Atomic Spectroscopy, 65(2):158–166.
- Alonso-Medina, A. (2011). Measured stark widths of several spectral lines of pb {III}. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 66(6):439 – 443.
- Alonso-Medina, A. (2014). Application of laser induced plasma spectroscopy to the measurement of transition probabilities of ca i. Journal of Spectroscopy and Dinamics, 4(15):1–9.
- Alonso-Medina, A., Colón, C., and Herrán-Martínez, C. (2001). Experimentally determined transition probabilities for lines of pb i and the 2203.5 Å line of pb {II}. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 68(4):351 – 362.
- Anderholm, N. C. (1970). Laser-generated stress waves. Applied Physics Letters, 16(3):113–115.
- Arafat, A., Na'es, M., Kantarelou, V., Haddad, N., Giakoumaki, A., Argyropoulos, V., Anglos, D., and Karydas, A.-G. (2013). Combined in situ micro-xrf, {LIBS} and sem-eds analysis of base metal and corrosion products for islamic copper alloyed artefacts from umm qais museum, jordan. Journal of Cultural Heritage, 14(3):261 – 269.
- Aragón, C., Vega, P., and Aguilera, J. A. (2011). Stark width measurements of fe ii lines with wavelengths in the range 260–300 nm. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 44(5):055002.
- Aragón, C., Aguilera, J. A., and Campos, J. (1993). Determination of carbon content in molten steel using laser breakdown spectroscopy. Applied Spectroscopy, 47(5):606–608.
- Ashkenazy, J., Kipper, R., and Caner, M. (1991). Spectroscopic measurements of electron density of capillary plasma based on stark broadening of hydrogen lines. Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics, 43(10):5568–5574.
- Askar'yan, G. A. and Moroz, E. M. (1963). Pressure on evaporation of matter in a radiation beam. Journal of Experimental and Theoretical Physics, 16(6):1638–1644.

- Baranger, M. (1958). General impact theory of pressure broadening. Physical Review, 112:855–865.
- Barrette, L. and Turmel, S. (2001). On-line iron-ore slurry monitoring for real-time process control of pellet making processes using laser-induced breakdown spectroscopy: graphitic vs. total carbon detection. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 56(6):715–723.
- Berthe, L., Fabbro, R., Peyre, P., Tollier, L., and Bartnicki, E. (1997). Shock waves from a water-confined laser-generated plasma. Journal of Applied Physics, 82(6):2826.
- Bleicher, F., Lechner, C., Habersohn, C., Kozeschnik, E., Adjassoho, B., and Kaminski, H. (2012). Mechanism of surface modification using machine hammer peening technology. CIRP Annals - Manufacturing Technology, 61(1):375–378.
- Bogen, P. and Lie, Y. (1980). Detection of atomic hydrogen by resonance fluorescence using two-step excitation with $L\alpha$ and $H\alpha$ radiation. Journal of Nuclear Materials, 93-94:363–367.
- Bredice, F., Borges, F., Sobral, H., Villagran-Muniz, M., Rocco, H. D., Cristoforetti, G., Legnaioli, S., Palleschi, V., Pardini, L., Salvetti, A., and Tognoni, E. (2006). Evaluation of self-absorption of manganese emission lines in laser induced breakdown spectroscopy measurements. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 61(12):1294–1303.
- Bredice, F., Borges, F., Sobral, H., Villagran-Muniz, M., Rocco, H. D., Cristoforetti, G., Legnaioli, S., Palleschi, V., Salvetti, A., and Tognoni, E. (2007). Measurement of stark broadening of Mn I and Mn II spectral lines in plasmas used for laser-induced breakdown spectroscopy. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 62(11):1237 – 1245.
- Bulajic, D., Corsi, M., Cristoforetti, G., Legnaioli, S., Palleschi, V., Salvetti, A., and Tognoni, E. (2002). A procedure for correcting self-absorption in calibration free-laser induced breakdown spectroscopy. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 57(2):339–353.
- Capitelli, F., Colao, F., Provenzano, M., Fantoni, R., Brunetti, G., and Senesi, N. (2002). Determination of heavy metals in soils by laser induced breakdown spectroscopy. Geoderma, 106(1-2):45–62.
- Castro, L. F. (2016). Aleaciones de aluminio y su importancia en la industria aeroespacial. Metal Actual.
- Clauer, A. (2013). Laser shock processing, past, present and future. In 4th International Conference on Laser Peening and Related Phenomena.
- Clauer, A., Holbrook, J. H., and Fairand, B. P. (1981). Shock waves and high-strain-rate phenomena in metals. In Meyers, M. A. and Murr, L. E., editors, Shock Waves and High-Strain-Rate Phenomena in Metals, chapter 38, pages 675–702. Springer Science Business Media.
- Clauer, A., T., W. C., and C., F. S. (1983). The effects of laser shock processing on the fatigue properties of 2024-t3 aluminum. Lasers in Materials Processing, pages 7–22.
- Colao, F., Fantoni, R., Lazic, V., Caneve, L., Giardini, A., and Spizzichino, V. (2004). LIBS as a diagnostic tool during the laser cleaning of copper based alloys: experimental results. J. Anal. At. Spectrom., 19:502–504.
- Colón, C., Hatem, G., Verdugo, E., Ruiz, P., and Campos, J. (1993). Measurement of the stark broadening and shift parameters for several ultraviolet lines of singly ionized aluminum. Journal of Applied Physics, 73(10):4752–4758.

- Company, M. I., editor (2005). Shot peening applications, number 9 in 1. Metal Improvement Company, Metal Improvement Company.
- Company, M. I. (2008). First international conference on laser peening. In First International Conference on Laser Peening, Houston, E. U. A.
- Correa Guinea, C. (2014). Desarrollo de métodos para la caracterización predictiva acoplada de tensiones y deformaciones en procesos de tratamiento superficial mediante ondas de choque generadas por láser. PhD thesis, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales. Universidad Politécnica de Madrid.
- Corsi, M., Cristoforetti, G., Giuffrida, M., Hidalgo, M., Legnaioli, S., Masotti, L., Palleschi, V., Salvetti, A., Tognoni, E., Vallebona, C., and Zanini, A. (2005). Archaeometric analysis of ancient copper artefacts by laser-induced breakdown spectroscopy technique. Microchimica Acta, 152(1):105–111.
- Corsi, M., Cristoforetti, G., Hidalgo, M., Legnaioli, S., Palleschi, V., Salvetti, A., Tognoni, E., and Vallebona, C. (2003). Application of laser-induced breakdown spectroscopy technique to hair tissue mineral analysis. Appl. Opt., 42(30):6133–6137.
- Corsi, M., Cristoforetti, G., Palleschi, V., Salvetti, A., and Tognoni, E. (2001). A fast and accurate method for the determination of precious alloys caratage by laser induced plasma spectroscopy. The European Physical Journal D, 13(3):373–377.
- Cowan, R. (1981). The theory of atomic struture and spectra. University of California Press.
- Cremers, D. A. and Radziemski, L. J. (2006). Handbook of Laser-Induced Breakdown Spectroscopy. Wiley-Blackwell.
- Cristoforetti, G., Legnaioli, S., Palleschi, V., Salvetti, A., and Tognoni, E. (2004). Influence of ambient gas pressure on laser-induced breakdown spectroscopy technique in the parallel double-pulse configuration. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 59(12):1907 – 1917.
- Dane, C. (2013). Recent progress in laser technology for industrial laser peening. In 4th International Conference on Laser Peening and Related Phenomena.
- Dell’Aglio, M., Giacomo, A. D., Gaudiuso, R., Pascale, O. D., and Longo, S. (2014). Laser induced breakdown spectroscopy of meteorites as a probe of the early solar system. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 101:68 – 75.
- Detalle, V., Héon, R., Sabsabi, M., and St-Onge, L. (2001). An evaluation of a commercial échelle spectrometer with intensified charge-coupled device detector for materials analysis by laser-induced plasma spectroscopy. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 56(6):1011–1025.
- Djeniže, S., Bukvić, S., Srećković, A., and Platiša, M. (2004). Mg ii spectral line broadening in helium, oxygen and argon-helium plasmas. Astronomy & Astrophysics, 424(2):561–564.
- Drogoff, B. L., Margot, J., Chaker, M., Sabsabi, M., Barthélemy, O., Johnston, T., Laville, S., Vidal, F., and von Kaenel, Y. (2001). Temporal characterization of femtosecond laser pulses induced plasma for spectrochemical analysis of aluminum alloys. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 56(6):987–1002.

- Dubey, A., Keyvan, G., Hsia, R., Saranteas, K., Brone, D., Misra, T., and Muzzio, F. J. (2011). Analysis of pharmaceutical tablet coating uniformity by laser-induced breakdown spectroscopy (libs). Journal of Pharmaceutical Innovation, 6(2):77–87.
- Escarguel, A., Ferha, B., Lesage, A., and Richou, J. (2000). A single laser spark in aqueous medium. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 64(4):353–361.
- Fabbro, R. and Chouf, K. (2000). Keyhole description in deep-penetration laser welding. In Chen, X., Fujioka, T., and Matsunawa, A., editors, High-Power Lasers in Manufacturing, volume 3888, pages 104–112. SPIE-Intl Soc Optical Eng.
- Fairand, B. and Clauer, A. (1976). Effect of water and paint coatings on the magnitude of laser-generated shocks. Optics Communications, 18(4):588 – 591.
- Fairand, B. and Clauer, A. (1979a). Laser generated stress waves: Their characteristics and their effects to materials. In Proc. American Inst. of Physics Conf. on 'Laser Solid Interactions and Laser Processing'. AIP Publishing.
- Fairand, B. and Clauer, A. (1979b). Laser generation of high-amplitude stress waves in materials. Journal of Applied Physics, 50(3):1497–1502.
- Fairand, B., Wilcox, B., Gallagher, W., and Willians, D. (1972). Laser shock-induced microstructural and mechanical property changes in 7075 aluminum. Journal of Applied Physics, 43(9):3893–3895.
- Fox, J. A. (1974). Effect of water and paint coatings on laser-irradiated targets. Applied Physics Letters, 24(10):461–464.
- García-Ayuso, L., Amador-Hernández, J., Fernández-Romero, J., and de Castro, M. L. (2002). Characterization of jewellery products by laser-induced breakdown spectroscopy. Analytica Chimica Acta, 457(2):247–256.
- Giacomo, A. D., Dell’Aglío, M., Colao, F., and Fantoni, R. (2004). Double pulse laser produced plasma on metallic target in sea water basic aspects and analytical approach. Spectrochimica Acta, Part B: Atomic Spectroscopy, 59(9):1431–1438.
- Giacomo, A. D., Dell’Aglío, M., Gaudiuso, R., Cristoforetti, G., Legnaioli, S., Palleschi, V., and Tognoni, E. (2008). Spatial distribution of hydrogen and other emitters in aluminum laser-induced plasma in air and consequences on spatially integrated laser-induced breakdown spectroscopy measurements. Spectrochimica Acta, Part B: Atomic Spectroscopy, 63(9):980–987.
- Gill, A., Telang, A., Mannava, S., Qian, D., Pyoun, Y.-S., Soyama, H., and Vasudevan, V. K. (2013). Comparison of mechanisms of advanced mechanical surface treatments in nickel-based superalloy. Materials Science and Engineering: A, 576:346–355.
- Goldbach, C., Nollez, G., Plomdeur, P., and Zimmermann, J.-P. (1982). Stark-width measurements of neutral and singly ionized magnesium resonance lines in a wall-stabilized arc. Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics, 25(5):2596–2605.
- Goldschmidt, Z. B. and Starkand, J. (1970). Two- and three-electron electrostatic effective interactions in $1\ n\ 1'$ configurations. Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics, 3(11):L141.

- González, A., Ortiz, M., and Campos, J. (1995). Determination of sulfur content in steel by laser-produced plasma atomic emission spectroscopy. Applied Spectroscopy, 49(11):1632–1635.
- Gornushkin, I., Anzano, J., King, L., Smith, B., Omenetto, N., and Winefordner, J. (1999). Curve of growth methodology applied to laser-induced plasma emission spectroscopy. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 54(3-4):491–503.
- Green, A. E. S., Sellin, D. L., and Zachor, A. S. (1969). Analytic independent-particle model for atoms. Physical Review, 184:1–9.
- Griem, H. R. (1964). Plasma spectroscopy. New York : McGraw-Hill.
- Griem, H. R. (1974). Spectral line broadening by plasmas. Academic Press.
- Griem, H. R. (1997). Principles of Plasma Spectroscopy. Cambridge University Press (CUP).
- Griem, H. T. (1968). Semiempirical formulas for the electron-impact widths and shifts of isolated ion lines in plasmas. Physical Review, 165(1):258–266.
- Hetteche, L. R., Schriempf, J. T., and Stegman, R. L. (1973). Impulse reaction resulting from the in-air irradiation of aluminum by a pulsed CO₂ laser. Journal of Applied Physics, 44(9):4079.
- Ivković, M., Zikic, R., Jovičević, S., and Konjević, N. (2006). On simultaneous determination of electron impact width, ion-broadening and ion-dynamic parameter from the shape of plasma broadened non-hydrogenic atom line. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 39(7):1773.
- Jurado-López, A. and Luque de Castro, M. (2003). Laser-induced breakdown spectrometry in jewellery industry. part ii: quantitative characterisation of goldfilled interface. Talanta, 59(2):409–415.
- Kalpajian, S. and Schmid, S. R. (2006). Manufacturing engineering and technology. Prentice Hall.
- Kepple, P. and Griem, H. R. (1968). Improved stark profile calculations for the hydrogen lines $H\alpha$, $H\beta$, $H\gamma$, and $H\delta$. Phys. Rev., 173:317–325.
- Khan, M. K., Liu, Y. J., Wang, Q. Y., Pyun, Y. S., and Kayumov, R. (2016). Effect of ultrasonic nanocrystal surface modification on the characteristics of aisi 310 stainless steel up to very high cycle fatigue. Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures, 39(4):427–438.
- Klein, S., Hildenhagen, J., Dickmann, K., Stratoudaki, T., and Zafiropulos, V. (2000). LIBS-spectroscopy for monitoring and control of the laser cleaning process of stone and medieval glass. Journal of Cultural Heritage, 1:S287–S292.
- Konjević, N. (1999). Plasma broadening and shifting of non-hydrogenic spectral lines: present status and applications. Physics Reports, 316(6):339 – 401.
- Konjević, N., Ivković, M., and Jovičević, S. (2010). Spectroscopic diagnostics of laser-induced plasmas. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 65(8):593–602.
- Kramida, A., Ralchenko, Y., Reader, J., and Team, N. A. (2015). NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.3). National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.

- Kunaporn, S., Ramulu, M., and Hashish, M. (2005). Mathematical modeling of ultra-high-pressure waterjet peening. J. Eng. Mater. Technol., 127(2):186.
- Kunze, H. J. (2009). Introduction to Plasma Spectroscopy. Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics 56. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1 edition.
- Lazic, V., Barbini, R., Colao, F., Fantoni, R., and Palucci, A. (2001). Self-absorption model in quantitative laser induced breakdown spectroscopy measurements on soils and sediments. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 56(6):807–820.
- Lochte-Holtgreven, W. and Malamud, H. (1970). Plasma diagnostics. Physics Today, 23(7):72.
- Longo, S., de Giacomo, A., Dell’Aglia, M., Gaudiuso, R., and Longo, G. M. (2016). Line emission from ionized meteorite surfaces: experiments and models. Meteoritics & Planetary Science, 51:A420.
- MacFarlane, J., Golovkin, I., and Woodruff, P. (2006). HELIOS-CR – a 1-D radiation-magnetohydrodynamics code with inline atomic kinetics modeling. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 99(1-3):381–397.
- Mannava, S. (2013). Lsp in biomedical applications. In 4th International Conference on Laser Peening and Related Phenomena.
- Mannava, S., Bhamare, S., Chaswal, V., Felon, L., Kirschman, D., Lahrman, D., Tenaglia, R., Qian, D., and Vasudevan, V. (2011). Application of laser shock peening for spinal implant rods. International Journal of Structural Integrity, 2(1):101–113.
- Martínez, B. and Blanco, F. (1999). Experimental and theoretical stark width and shift parameters of neutral and singly ionized tin lines. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 32(2):241.
- Masse, J.-E. and Barreau, G. (1995). Laser generation of stress waves in metal. Surface and Coatings Technology, 70(2-3):231–234.
- Mayo, R. and Ortiz, M. (2008). Experimental stark widths of six uv lines of znii. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 41(22):225702.
- Mayo, R., Ortiz, M., and Campos, J. (2005). Experimental transition probabilities for lines arising from the 4d5p and 4d5d configurations of zrii. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 94(1):109 – 116.
- Mayo, R., Ortiz, M., Parente, F., and Santos, J. P. (2007). Experimental and theoretical transition probabilities for lines arising from the 6p configurations of au ii. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 40(24):4651.
- McWhirter, R. (1965). Plasma diagnostic techniques. Academic Press.
- Michel, A., Lawrence-Snyder, M., Angel, S., and Chave, A. (2006). Oceanic applications of laser induced breakdown spectroscopy: laboratory validation. In OCEANS, 2005. Proceedings of MTS/IEEE.
- Michel, A. P. and Sonnichsen, F. (2016). Laser induced breakdown spectroscopy for heavy metal detection in a sand matrix. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 125:177 – 183.

- Molpeceres, C., Morales, M., Nicolás, G., Medina, P., and Ocaña, J. (2000). Caracterización de procesos hidrodinámicos inducidos por láser de elevada intensidad en el dominio uv. In Actas de VI Reunión Nacional de Óptica, pages 547–548.
- Moon, H.-Y., Herrera, K. K., Omenetto, N., Smith, B. W., and Winefordner, J. (2009). On the usefulness of a duplicating mirror to evaluate self-absorption effects in laser induced breakdown spectroscopy. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 64(7):702 – 713.
- Moore, C. E. (1958). Atomic energy levels as derived from the analyses of optical spectra, volume 3. US Dept. of Commerce, National Bureau of Standards.
- Morales, M. (2004). Desarrollo de un modelo para la caracterización predictiva de procesos de tratamiento superficial de materiales metálicos con ondas de choque generadas por láser. PhD thesis, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales.
- Morales, M., Ocaña, J., Molpeceres, C., Porro, J., and García-Beltrán, A. (2008). Model based optimization criteria for the generation of deep compressive residual stress fields in high elastic limit metallic alloys by ns-laser shock processing. Surface and Coatings Technology, 202(11):2257–2262.
- Morales, M., Porro, J., Blasco, M., Molpeceres, C., and Ocaña, J. (2009). Numerical simulation of plasma dynamics in laser shock processing experiments. Applied Surface Science, 255(10):5181–5185.
- Mukai, N., Aoki, N., Obata, M., Ito, A., Sano, Y., and Konagai, C. (1995). Laser processing for underwater maintenance in nuclear plants. In ICONE-3: Proceedings of the 3rd JSME/ASME joint international conference on nuclear engineering, volume 3, pages 1489–1494.
- Neuman, F. (1964). Momentum transfer and cratering effects produced by giant laser pulses. Applied Physics Letters, 4(9):167–169.
- Niemann, C., Rosmej, F. B., Tauschwitz, A., Neff, S., Penache, D., Birkner, R., Constantin, C., Knobloch, R., Presura, R., Hoffmann, D. H. H., Yu, S. S., and Lee, R. W. (2003). Spectroscopic density and temperature measurements and modelling of a discharge plasma for neutralized ion-beam transport. Journal of Physics D: Applied Physics, 36(17):2102.
- Obando, J. F. (2016). Tratamientos térmicos para aluminios. Metal Actual.
- Ocaña, J. (2013). Experimental implementation of lsp processes and associated diagnosis with q-switched ns-pulsed laser. In 4th International Conference on Laser Peening and Related Phenomena.
- Ocaña, J., Molpeceres, C., Morales, M., and García-Beltrán, A. (2000). A model for the coupled predictive assessment of plasma expansion and material compression in laser shock processing applications. In Phipps, C. R. and Niino, M., editors, High-Power Laser Ablation II, volume 3885, page 252. SPIE-Intl Soc Optical Eng.
- Ocaña, J., Molpeceres, C., Porro, J., Gómez, G., and Morales, M. (2004). Experimental assessment of the influence of irradiation parameters on surface deformation and residual stresses in laser shock processed metallic alloys. Applied Surface Science, 238(1-4):501–505.
- Ocaña, J., Nicolás, G., Autric, M. L., García-Beltrán, A., and Molpeceres, C. (1998). Ablation processes induced by UV lasers in metals and ceramics. In Phipps, C. R., editor, High-Power Laser Ablation. SPIE-Intl Soc Optical Eng.

- O'Keefe, J., Crouse, D., Skeen, C., and York, C. (1969). Dynamics of inertially confined laser induced plasmas. Bulletin of the American Physical Society, 14(8):839.
- Oks, E. (2006). Stark broadening of hydrogen and hydrogenlike spectral lines in plasmas. Alpha Science International Limited.
- Omenetto, N., Nikdel, S., Bradshaw, J. D., Epstein, M. S., Reeves, R. D., and Winefordner, J. D. (1979). Diagnostic and analytical studies of the inductively coupled plasma by atomic fluorescence spectrometry. Analytical Chemistry, 51(9):1521–1525.
- Omenetto, N., Winefordner, J., and Alkemade, C. (1975). An expression for the atomic fluorescence and thermal-emission intensity under conditions of near saturation and arbitrary self-absorption. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 30(9):335–341.
- Ortiz, M. and Mayo-García, R. (2012). Experimental oscillator strengths in rei. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 45(5):055701.
- Pandhija, S. and Rai, A. K. (2009). In situ multielemental monitoring in coral skeleton by cf-labs. Applied Physics B, 94(3):545–552.
- Pedrero, J. (2000). Fundamentos del diseño de máquinas. UNED. Universidad Nacional de Educación a Distancia.
- Peercy, P. S., Jones, E. D., Bushnell, J. C., and Gobeli, G. W. (1970). Ultrafast rise time laser-induced stress waves. Applied Physics Letters, 16(3):120–122.
- Peyre, P., Carboni, C., Forget, P., Beranger, G., Lemaitre, C., and Stuart, D. (2007). Influence of thermal and mechanical surface modifications induced by laser shock processing on the initiation of corrosion pits in 316l stainless steel. Journal of Materials Science, 42(16):6866–6877.
- Peyre, P., Fabbro, R., Merrien, P., and Lieurade, H. (1996). Laser shock processing of aluminium alloys. application to high cycle fatigue behaviour. Materials Science and Engineering: A, 210(1-2):102–113.
- Peyre, P., Scherpereel, X., Berthe, L., and Fabbro, R. (1998). Current trends in laser shock processing. Surface Engineering, 14(5):377–380.
- Porro, J., Molpeceres, C., Morales, M., and na, J. O. (2007). Generación de un campo de tensiones residuales de compresión en aluminio 2024-t351 mediante tratamiento por onda de choque generada por láser (laser shock processing). Óptica Pura y Aplicada, 40(1):73–78.
- Porro González, J. (2010). Optimización de campo de tensiones residuales en procesos de tratamiento superficial de materiales metálicos mediante ondas de choque generadas por láser. PhD thesis, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales.
- Radziemski, L. and Cremers, A. (1989). Laser-induced plasma and applications. CRC Press.
- Ready, J. F. (1965). Effects due to absorption of laser radiation. Journal of Applied Physics, 36(2):462.
- Sabsabi, M., Héon, R., and St-Onge, L. (2005). Critical evaluation of gated ccd detectors for laser-induced breakdown spectroscopy analysis. Spectrochimica Acta, Part B: Atomic Spectroscopy, 60(7-8):1211–1216.

- Sallé, B., Cremers, D. A., Maurice, S., and Wiens, R. C. (2005a). Laser-induced breakdown spectroscopy for space exploration applications: Influence of the ambient pressure on the calibration curves prepared from soil and clay samples. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 60(4):479 – 490.
- Sallé, B., Cremers, D. A., Maurice, S., Wiens, R. C., and Fichet, P. (2005b). Evaluation of a compact spectrograph for in-situ and stand-off laser-induced breakdown spectroscopy analyses of geological samples on mars missions. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 60(6):805 – 815.
- Sano, Y., Akita, K., Ochi, K. M. Y., Altenberger, I., and Scholtes, B. (2006). Laser peening without coating as a surface enhancement technology. Journal of Laser Micro/Nanoengineering, 1(3):161–166.
- Sano, Y., Mukai, N., Okazaki, K., and Obata, M. (1997). Residual stress improvement in metal surface by underwater laser irradiation. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 121(1-4):432–436.
- Seaton, M. J. (1962). Atomic and Molecular Processes, chapter The theory of excitation and ionization by electron impact, pages 374–420. New York Academic.
- Senesi, G., Dell’Aglia, M., Gaudiuso, R., Giacomo, A. D., Zaccone, C., Pascale, O. D., Miano, T., and Capitelli, M. (2009). Heavy metal concentrations in soils as determined by laser-induced breakdown spectroscopy (libs), with special emphasis on chromium. Environmental Research, 109(4):413 – 420.
- Service, E. R. (1973). The Hunters. Prentice Hall.
- Shameem, K. M. M., Chawla, A., Bankapur, A., Unnikrishnan, V. K., and Santhosh, C. (2016). Application of spectroscopic techniques for the analysis of kidney stones: a pilot study. In Coté, G. L., editor, Optical Diagnostics and Sensing XVI: Toward Point-of-Care Diagnostics, volume 9715, pages 97151E–97151E–5.
- Sherbini, A. E., Amer, A. A., Hassan, A., and Sherbini, T. E. (2012). Measurements of plasma electron temperature utilizing magnesium lines appeared in laser produced aluminum plasma in air. Optics and Photonics Journal, 2(04):278–285.
- Sherbini, A. E., Hegazy, H., and Sherbini, T. E. (2006). Measurement of electron density utilizing the H α -line from laser produced plasma in air. Spectrochimica Acta, Part B: Atomic Spectroscopy, 61(5):532–539.
- Sherbini, A. E., Sherbini, T. E., Hegazy, H., Cristoforetti, G., Legnaioli, S., Palleschi, V., Pardi-
ni, L., Salvetti, A., and Tognoni, E. (2005). Evaluation of self-absorption coefficients of aluminum emission lines in laser-induced breakdown spectroscopy measurements. Spectrochimica Acta, Part B: Atomic Spectroscopy, 60(12):1573–1579.
- Skeen, C. H. and York, C. M. (1968). Laser-induced “blow-off” phenomena. Applied Physics Letters, 12(11):369–371.
- Sobelman, I. I. (1979). Atomic Spectra and Radiative Transitions. Springer Series in Chemical Physics 1. Springer Berlin Heidelberg.
- St-Onge, L., Kwong, E., Sabsabi, M., and Vadas, E. (2002). Quantitative analysis of pharmaceutical products by laser-induced breakdown spectroscopy. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 57(7):1131–1140.

- St-Onge, L., Kwong, E., Sabsabi, M., and Vadas, E. B. (2004). Rapid analysis of liquid formulations containing sodium chloride using laser-induced breakdown spectroscopy. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 36(2):277–284.
- Thorne, A. P. (1988). Spectrophysics. Springer Netherlands.
- Tondello, G. (1986). Fast electrical and optical measurements: Volume I-Current and voltage measurements / Volume II-Optical measurements, chapter Spectroscopy of Laser-Produced Plasmas, pages 911 – 950. Springer Science Business Media, Dordrecht.
- Trees, R. E. (1951). Configuration interaction in mn ii. Physical Review, 83(4):756.
- van Regemorter, H. (1962). Rate of collisional excitation in stellar atmospheres. Astrophysical Journal, 136:906.
- Walters, C. T., Clauer, A. H., and Campbell, B. E. (1987). Laser shock effects in stressed structural materials - experimental results. In Proceedings of the Sixth DOD Conference on DEW Vulnerability, Survivability and Effects.
- White, R. M. (1963). Elastic wave generation by electron bombardment or electromagnetic wave absorption. Journal of Applied Physics, 34(7):2123–2124.
- Wiese, W. (1965). Plasma Diagnostic Techniques, chapter Line Broadening, page 268. Academic Press, New York.
- Yang, L. C. (1974). Stress waves generated in thin metallic films by a q-switched ruby laser. Journal of Applied Physics, 45(6):2601–2608.

Apéndice

Apéndice A

Documentación Equipos

En las siguientes páginas se presentan las hojas de características de todos los equipos utilizados en el desarrollo de esta tesis.

Quanta-Ray® Nd:YAG Laser Family

The Quanta-Ray Advantage

- Repetition rates from 1 to 100 Hz with energies in excess of 2.5 J per pulse
- Gold elliptical pump chambers
- Sealed beam paths
- High-quality, high-damage-threshold optics from Spectra-Physics' dedicated in-house coating lab
- Single-rod and dual-rod oscillators
- Support by Newport's global services with worldwide local support

UNSURPASSED PERFORMANCE, RELIABILITY, AND QUALITY

Spectra-Physics® Quanta-Ray® high-pulse energy Nd:YAG lasers are recognized world wide for their unsurpassed performance, reliability and quality. They incorporate pioneering technologies such as dual-rod oscillators, gold-coated elliptical pump chambers, internal sealed beam paths, and high-damage-threshold optics from Spectra-Physics' advanced coatings lab—all combine to create the best beam quality and highest energies in the industry.

The heart of the Quanta-Ray laser is its unique pump chamber. The chamber strikes the perfect balance between efficiency and beam mode quality by employing elliptical goldcoated reflectors to couple the lamps into the Nd:YAG rod. The gold surfaces provide high reflectivity at pump wavelengths while attenuating UV wavelengths. Proprietary diffusion techniques ensure uniform illumination of the Nd:YAG rod.

Quanta-Ray lasers are also the only lasers on the market to feature completely sealed internal beam paths through the use of nitrogen-purged beam tubes. Sealed beam paths greatly extend the longevity of optical coatings by shielding all optical components from harmful contaminants in even the harshest of environments. Spectra-Physics uses only Sol-Gel coated pockels cells. This coating greatly enhances the lifetime of the cells and improves the performance of the laser system. BBO FHGs give highest energies, best beam quality and highest damage thresholds. These features lead to the best "bumper-to-bumper" one-year warranty on all optics, mechanics and electronics available from a pulsed YAG supplier.

Newly incorporated modern digital signal processing (DSP) electronics in all Quanta-Ray Nd:YAG lasers provide a modern control system for the user. Direct digital interface and Graphical User Interface (GUI) enables intuitive control of the system and simplified integration with complex systems.

Applications

- Pumping of dye lasers, Ti:Sapphire lasers, OPAs and OPOs
- LIDAR
- Remote sensing
- LIBS
- Laser-induced fluorescence
- CARS
- Flow visualization
- Plastic and ceramic components marking
- Laser cleaning and ablation

Quanta-Ray® Pro Series

The Quanta-Ray® Pro series represents Spectra-Physics' highest pulse energy Nd:YAG lasers. They incorporate the Lab series single or dual-rod oscillators with two amplifier stages resulting in output energies up to 2.5 J per pulse. The patented intra-oscillator birefringence compensation design in the Lab series is the key to producing the superior beam quality that allows the Pro series to achieve higher repetition rates and higher average powers than any other high-power Nd:YAG laser on the market.

Options include BeamLok® for active beam pointing stabilization and D-Lok®. BeamLok enables the user to specify long-term pointing stability at less than ± 25 μ rad over an 8 hour period—all through a PC. D-Lok suppresses the problem of increasing divergence with aging flash-lamps resulting in guaranteed longer flash-lamp lifetimes and fewer downstream optical alignments. D-Lok also stabilizes any thermal imbalance in the Nd:YAG gain medium eliminating fluctuations in output beam polarization. Its high polarization purity enables high-efficiency harmonic generation and stable harmonic beam shapes.

Quanta-Ray Pro Series Specifications

Product ¹	Pro-230-			Pro-250-			Pro-270-			Pro-290-			Pro-350-
Repetition Rate	10 Hz	30 Hz	50 Hz	10 Hz	30 Hz	50 Hz	10 Hz	30 Hz	50 Hz	10 Hz ⁴	30 Hz	50 Hz	10 Hz
Energy (mJ/p) ²													
1064 nm	1250 mJ	950 mJ	650 mJ	1500 mJ	1100 mJ	750 mJ	1750 mJ	1300 mJ	900 mJ	2000 mJ	1600 mJ	1000 mJ	2500 mJ
532 nm	650 mJ	475 mJ	300 mJ	800 mJ	550 mJ	350 mJ	900 mJ	600 mJ	400 mJ	1000 mJ	800 mJ	500 mJ	1400 mJ
355 nm ²³	375 mJ	300 mJ	140 mJ	425 mJ	325 mJ	160 mJ	475 mJ	350 mJ	225 mJ	550 mJ	375 mJ	275 mJ	750 mJ
EEO-355 nm ^{3, 23}	400 mJ	320 mJ	160 mJ	475 mJ	350 mJ	180 mJ	550 mJ	400 mJ	250 mJ	650 mJ	425 mJ	300 mJ	850 mJ
266 nm	140 mJ	80 mJ	40 mJ	165 mJ	85 mJ	55 mJ	175 mJ	90 mJ	65 mJ	200 mJ	110 mJ	80 mJ	250 mJ
Performance Specifications													
Wavelength	Pulse Width ⁵			Short Term Energy Stability ⁶			Long Term Power Drift ⁷						
1064 nm	8–12 ns			±2%			<3%						
532 nm	1–2 ns <1064 nm			±3%			<5%						
355 nm	2–3 ns <1064 nm			±4%			<6%						
266 nm	3–4 ns <1064 nm			±8%			<10%						
Beam Specifications													
Spatial Mode Profile ⁸	Standard Fit			ESM Fit ⁹									
Near Field (1 m)	>70%			Contact Spectra-Physics									
Far Field (∞)	>95%			Contact Spectra-Physics									
Modulation ¹⁰	<40%			Contact Spectra-Physics									
Beam Diameter ¹¹	Pro-200 <10 mm			Pro-300 <13 mm									
BeamLok Specifications	Standard Pro Series			With BeamLok/D-Lok									
Beam Pointing Stability ¹²	<±50 μrad			<±25 μrad									
Beam Divergence ¹³	<0.5 mrad			<2 x initial level									
Lamp Lifetimes ¹⁴	30 million pulses			40 million pulses									
Linewidth													
Standard				<1.0 cm ⁻¹									
Injection Seeded ¹⁵				<0.003 cm ⁻¹									
Timing Jitter ¹⁶				<0.5 ns									

Notes for specifications are on page 5.

Quanta-Ray Pro Laser Dimensions

Dimensions are in inches (cm)

Quanta-Ray® Lab Series

The Quanta-Ray® Lab series represent the intermediate range of oscillator-only lasers with output energies up to 1 J at 1064 nm. The Lab laser stands above its competitors because of its dual Nd:YAG rod and dual pump chamber oscillator configuration. This proprietary design provides intra-oscillator compensation for thermally-induced birefringence in the Nd:YAG rod, greatly reducing beam depolarization. This results in higher repetition rates, higher average powers and superior output beam quality than any other oscillator-only Nd:YAG laser on the market.

Quanta-Ray Lab Series Specifications

Product ¹	Lab-130-			Lab-150-			Lab-170-			Lab-190-			
Repetition Rate	10 Hz	30 Hz	50 Hz	10 Hz	30 Hz	50 Hz	10 Hz	30 Hz	50 Hz	10 Hz ⁴	30 Hz	50 Hz	100 Hz
Energy (mJ/p) ²													
1064 nm	450 mJ	275 mJ	200 mJ	650 mJ	500 mJ	300 mJ	850 mJ	700 mJ	550 mJ	1000 mJ	800 mJ	600 mJ	325 mJ
532 nm	200 mJ	100 mJ	70 mJ	300 mJ	200 mJ	100 mJ	450 mJ	325 mJ	210 mJ	500 mJ	400 mJ	250 mJ	120 mJ
355 nm ²³	90 mJ	40 mJ	30 mJ	150 mJ	100 mJ	40 mJ	220 mJ	175 mJ	100 mJ	250 mJ	200 mJ	100 mJ	50 mJ
EEO-355 nm ^{3, 23}	--	--	--	--	--	--	240 mJ	--	--	300 mJ	--	--	--
266 nm	55 mJ	25 mJ	15 mJ	75 mJ	35 mJ	25 mJ	100 mJ	65 mJ	30 mJ	120 mJ	65 mJ	25 mJ	20 mJ
Performance Specifications													
Wavelength	Pulse Width ⁵			Short Term Energy Stability ⁶			Long Term Power Drift ⁷						
1064 nm	8–12 ns			±2%			<3%						
532 nm	1–2 ns <1064 nm			±3%			<5%						
355 nm	2–3 ns <1064 nm			±4%			<6%						
266 nm	3–4 ns <1064 nm			±8%			<10%						
Beam Specifications													
Spatial Mode Profile ⁸	Standard Fit			ESM Fit ⁹									
Near Field (1 m)	>70%			Contact Spectra-Physics									
Far Field (∞)	>95%			Contact Spectra-Physics									
Modulation ¹⁰	<40%			Contact Spectra-Physics									
Beam Diameter ¹¹	<10 mm												
Beam Pointing Stability ¹²	<±50 μrad												
Beam Divergence ¹³	<0.5 mrad												
Lamp Lifetimes ¹⁴	30 million pulses												
Linewidth													
Standard	<1.0 cm ⁻¹												
Injection Seeded ¹⁵	<0.003 cm ⁻¹												
Timing Jitter ¹⁶	<0.5 ns												

Notes for specifications are on page 5.

Quanta-Ray Lab Laser Dimensions

Dimensions are in inches (cm)

Quanta-Ray® INDI Series

The Quanta-Ray INDI series are single-rod oscillator-only Nd:YAG lasers. They offer pulse energies up to 450 mJ at 1064 nm. The INDI is the most compact of the Quanta-Ray lasers, and is based upon the Quanta-Ray's unique combination of proprietary resonator design with gold-coated elliptical pump chambers to produce an output beam quality that is superior to other low-energy pulsed lasers available on the market.

Quanta-Ray INDI Series Specifications

Product ¹	INDI-40-10	INDI-40-20
Repetition Rate	10 Hz	20 Hz
Energy (mJ/p) ²		
1064 nm	450 mJ	420 mJ
532 nm	200 mJ	160 mJ
355 nm ²³	100 mJ	100 mJ
266 nm	55 mJ	40 mJ
Performance Specifications		
Pulse Width	6–9 ns	
Short Term energy Stability ⁶	±2%	
Long Term Power Drift ⁷	<3%	
Beam Specifications		
Spatial Mode Profile ⁸	Standard Fit	
Near Field (1 m) ²⁰	>70%	
Far Field (∞) ²⁰	>95%	
Modulation ^{10, 20, 21}	<30%	
Beam Diameter ¹¹	<10 mm	
Beam Pointing Stability ¹²	<±100 μrad	
Beam Divergence ¹³	<0.5 mrad	
Timing Jitter ¹⁶	<0.5 ns	

Notes for specifications are on page 5.

Quanta-Ray INDI Laser Dimensions

Dimensions are in inches (cm)

Quanta-Ray Service Requirements

	Quanta-Ray Pro	Quanta-Ray Lab	Quanta-Ray INDI
Water Service ^{17, 18}	10 Hz – 3.8 liters/min (1.0 US gallons/min) 30 Hz and 50 Hz – 7.6 liters/min (2.0 US gallons/min)	10 Hz, 30 Hz and 50 Hz – 7.6 liters/min (2.0 US gallons/min)	N/A
Electrical Service ²²	10/30/50 Hz: <30 A/<40 A/<50 A	10/30/50 Hz: <30 A/<40 A/<50 A	10/20 Hz: <15 A/<20 A
Voltage ¹⁹	190–260 V, single phase, 50/60 Hz		
Umbilical Length	3 m (10 ft)		
Remote Cord Length	3 m (10 ft)		
Weight	Laser Head 84 kg (185 lb) Power Supply 114 kg (250 lb)	Laser Head 55 kg (120 lb) Power Supply 68 kg (150 lb)	Laser Head 11 kg (25 lb) (IR); 15 kg (34 lb) (HG) Power Supply 60 kg (132 lb)
Power Supply Dimensions (L x W x H)	76.99 x 64.00 x 75.74 cm (30.3 x 25.2 x 29.8 in)	76.9 x 63.9 x 50.2 cm (30.31 x 25.18 x 19.75 in)	64.7 x 33.4 x 55.4 cm (25.46 x 13.13 x 21.81 in)

1. All specifications, unless otherwise stated, are for Q-switched 1064 nm operation and are subject to change without notice.
2. Harmonic energies are specified after separation using dichroic mirror pairs. It is also assumed that polarization of measured harmonic is in vertical polarization, making an "S" polarized reflection from dichroics. 532 nm energies are specified using Type II SHG. 355 nm energies are specified using Type II doubler. Using a Type I doubler in tripling process will result in a 10% increase in published 355 nm specification except for the following models: INDI, Lab-130-10, Lab-190-10, Pro-250-10, Pro-230-10.
3. High UV output option designed for OPO pumping, including injection seeder, harmonic generator, 355 nm dichroic separators, and beam dump.
4. The Lab-190-10 is configured on a Quanta-Ray Pro platform. This allows for BeamLok in this model. For laser head size, please refer to Quanta-Ray Pro specifications.
5. Normal full width half maximum (FWHM) pulse width 8-10 ns for all Lab series lasers except Lab 130-10 and Lab 190-10 versions, which is 9-12 ns. FWHM for Pro series lasers is 10-12 ns except for Pro 270-10, Pro 290-10, and Pro 350-10 versions which is 8-10 ns. The optional short pulse mode reduces the 1064 nm pulse width to approximately 2.5 ns and reduces the energy by approximately 10%. (Short pulse mode available on seeded versions on special request only).
6. Pulse-to-pulse stability for >99% of pulses, measured over a 1 hour period.
7. Over 8 hour period with temperature variations of $\pm 3^{\circ}\text{C}$.
8. Near field spatial profiles measured <1 m from laser using commercially available beam diagnostic system. 70% refers to correlation between actual beam profile and least squares best fit Gaussian profile. Far field profiles are measured at focal plane of a 2 m focal length lens and measured between FWHM points. Specifications based on 10 Hz lasers.
9. Enhanced spatial mode options can be tailored to meet your application needs. To obtain >85% Gaussian fits, energy can be reduced by 50%. Contact Spectra-Physics to establish specifications.
10. Refers to maximum deviation from best fit Gaussian profile measured in near field (1 m) between FWHM points.
11. Actual beam diameter will vary depending on laser configuration.
12. Long term average pointing drift after warm up, over 8 hours $\pm 3^{\circ}\text{C}$. Shot-to-shot pointing stability $\leq \pm 25 \mu\text{rad}$. Angle measured is polar angle.
13. Full angle measured at FWHM points.
14. IR energy within 10% of specified value.
15. Insertion losses for systems using model 6350 injection seeder are <15% at 1064 nm, 532 nm, and 266 nm.
16. RMS jitter from Q-switched sync pulse at 10 Hz. Jitter is ≤ 1 ns RMS when using model 6350 injection seeder at 10 Hz and ≤ 1.5 ns at 30 Hz. INDI cannot be seeded.
17. INDI, Lab 130-10 and Lab 150-10 units are air cooled as standard. Water-cooled versions of INDI require WAT 50 (3.8 liters/min or 1.0 US gal/min). Water-cooled versions of Lab 130-10 and Lab 150-10 require PS101 (3.8 liters/min or 1.0 US gal/min). All seeded lasers must be water cooled.
18. Minimum pressure 40 psi. maximum pressure 60 psi.
19. Input transformer has taps at 190, 200, 210, 220, 230, 240, 250, and 260 V. Once tap is chosen, actual input voltage differing by more than $\pm 10\%$ may affect operation of laser.
20. Measured on request.
21. Fit to flat-top central 80% of beam near field.
22. Max current draw of laser.
23. Addition of LBP option for pumping Scan Series OPOs can result in a 5% loss of 355 nm energy.

www.spectra-physics.com

3635 Peterson Way, Santa Clara, CA 95054, USA
PHONE: 1-800-775-5273 1-408-980-4300 FAX: 1-408-980-6921 EMAIL: sales@spectra-physics.com

China	+86-10-6267-0065	china@newport.com	Belgium	+32-(0)0800-11 257	belgium@newport.com
France	+33-(0)1-60-91-68-68	france@newport.com	Netherlands	+31-(0)30 6592111	netherlands@newport.com
Japan	+81-3-3794-5511	spectra-physics@splasers.co.jp	United Kingdom	+44-1235-432-710	uk@newport.com
Taiwan	+886-(0)2-2508-4977	sales@newport.com.tw	Germany / Austria / Switzerland	+49-(0)6151-708-0	germany@newport.com
Singapore	+65-6664-0400	sales.sg@newport.com			

© 2014 Newport Corporation. All Rights Reserved. Quanta-Ray, BeamLok, D-Lok, Spectra-Physics and the Spectra-Physics logo are registered trademarks of Newport Corporation. DivergenceLok is a trademark of Newport Corporation. Spectra-Physics Santa Clara, California, Stahnsdorf, Germany and Rankweil, Austria have all been certified compliant with ISO 9001.

SP-DS-20140925-15

Nd:YAG Laser Mirrors

High Power Nd:YAG Laser Mirrors

The Y Series of Nd:YAG laser line mirrors utilize durable, dielectric coatings to achieve both high damage threshold and high reflectivity. These mirrors are readily available in a variety of substrate sizes with curved or flat surfaces, and at either 0° or 45°. For multiwavelength reflectance mirrors, please choose from our other Nd:YAG laser mirror product lines, including HM, YD, YH, DPY and BBDS.

- Very high damage threshold
- High reflectivity > 99.5% at 0° incidence
- Flat, convex and concave substrates
- Contact us for OEM quantities
- Mirror mounts are available

SPECIFICATIONS:

High Power Nd:YAG Laser Mirrors

Substrate Material	$\lambda < 450$ nm: UV-grade fused silica $\lambda \geq 450$ nm: N-BK7 glass
S1 Surface Figure	$\lambda/10$ @ 633 nm before coating
S1 Surface Quality	10-5 scratch and dig
S2 Surface Quality	Commercial polish
Diameter Tolerance	+0/-0.25 mm
Thickness Tolerance	± 0.25 mm
Wedge	≤ 5 arc min
Concentricity	± 0.05 mm
Radius Tolerance	$\pm 0.5\%$
Coating Technology	Electron beam multilayer dielectric
Adhesion and Durability	Per MIL-C-675C. Insoluble in lab solvents.
Clear Aperture	$\geq 85\%$ of central diameter
Damage Threshold	
Pulsed	20 J/cm ² , 20 nsec, 20 Hz @ 1064 nm
cw	10 MW/cm ² @ 1064 nm
Coated Surface Figure	$\lambda/10$ @ 633 nm on select substrates

Reflectivity vs wavelength of Y1 series 1064 nm Nd:YAG laser mirror for 0° and 45° incidence angle designs

Reflectivity vs wavelength of Y2 series 532 nm Nd:YAG laser mirror for 0° and 45° incidence angle designs

Reflectivity vs wavelength of Y3 series 355 nm Nd:YAG laser mirror for 0° and 45° incidence angle designs

Reflectivity vs wavelength of Y4 series 266 nm Nd:YAG laser mirror for 0° and 45° incidence angle designs

Reflectivity vs wavelength of Y5 series 213 nm Nd:YAG laser mirror for 0° and 45° incidence angle designs

Reflectivity vs wavelength of Y13 series 1319 nm CW Nd:YAG laser mirror for 0° and 45° incidence angle designs

Build Your Own

Product Code	Laser Type	Wavelength (nm)
Y1	Nd:YAG	1064
Y2	Nd:YAG	532
Y3	Nd:YAG	355
Y4	Nd:YAG	266
Y5	Nd:YAG	213
Y13	Nd:YAG	1319

Size Code	Diameter	Thickness	1025	1032	1037	1537	5010M	2037	3050	4050
0537	0.50"	0.375"	1.00"	0.25"	5010M	50.0 mm	10.0 mm			
0643	15.0 mm	11.0 mm	1.00"	8.0 mm	2037	2.00"	0.375"			
0737	0.75"	0.375"	1.00"	0.375"	3050	3.00"	0.50"			
2506M	25.0 mm	6.0 mm	1.50"	0.375"	4050	4.00"	0.50"			

Angle of Incidence in Degrees with Polarization

0	Normal incidence
45S	45 degrees, <i>s</i> polarization
45P	45 degrees, <i>p</i> polarization
45UNP	45 degrees, Unpolarized

Radius of Curvature (m) (CC=concave, CX=convex, omit for flat mirror)

0.025	0.10	0.25	0.75	1.5	4.0	7.0	10.0
0.05	0.15	0.30	1.0	2.0	5.0	8.0	15.0
0.075	0.20	0.50	1.2	3.0	6.0	9.0	20.0

Y1 — 1537 — 45S — 5.00CC

LASER QUALITY N-BK7 BI-CONVEX LENSES

Spherical biconvex lenses are equiconvex: $r_1 = r_2$.
Other dimensions and focal lengths are available for OEM applications. Contact us for pricing and delivery.

- ▶ For 1:1 imaging and relay applications
- ▶ Laser quality: $\lambda/10$ surface figure, 10-5 surface quality
- ▶ Low-loss, high-energy AR coatings

Specifications

Product Code: BICX-C

Optical Material: N-BK7

Surface Figure: $\lambda/10$ p-v at 633 nm before coating

Surface Quality: 10-5 scratch and dig

Diameter: $\varnothing \pm 0/-0.25$ mm

Center Thickness: $t_c \pm 0.25$ mm

Chamfer: 0.35 mm at 45° typical

Concentricity: ≤ 0.05 mm

Paraxial Focal Length: $f \pm 0.5\%$ typical

Antireflection Coating: Wavelength user specified

Narrowband: $R \leq 0.25\%$ per surface

Broadband: $R_{avg} \leq 0.5\%$ per surface

Clear Aperture (CA): $\geq 85\%$ of central diameter

Damage Threshold:

Pulsed, Narrowband: 15 J/cm², 20 nsec,
20 Hz @ 1064 nm

Pulsed, Broadband: 10 J/cm², 20 nsec,
20 Hz @ 1064 nm

cw: 1 MW/cm² @ 1064 nm

Bi-convex lens

Semi Custom

Add a coating to a Standard Uncoated Product

YOUR CUSTOM PART NUMBER BICX-25.4-102.4-C — 1064

WAVELENGTH OF AR COATING (nm); for uncoated leave blank

415-700	780	1050-1600	1550
532	800	1053	
633	808	1064	
633-1064	1030	1064/532	

BI-CONVEX SPHERICAL LENSES

Standard Uncoated Products

f (mm)	$\varnothing$ (mm)	$f/\#$	f_{c} (mm)	t_{c} (mm)	t_{e} (mm)	r (mm)	$f@$ 532 nm	$f@$ 633 nm	$f@$ 1064 nm	$f@$ 1319 nm	PART NUMBER
Laser Quality N-BK7 Bi-Convex Lenses											
20.0	15.0	1.6	18.3	4.9	1.9	19.7	19.8	20.0	20.3	20.4	BICX-15.0-19.7-C
25.0	12.7	2.3	23.9	3.3	1.7	25.2	24.8	25.0	25.4	25.6	BICX-12.7-25.2-C
25.0	25.4	1.2	21.4	10.0	2.7	23.9	24.8	25.0	25.4	25.2	BICX-25.4-23.9-C
40.0	25.0	1.9	38.0	5.9	1.9	40.2	39.7	40.0	40.7	40.9	BICX-25.0-40.2-C
50.0	25.4	2.3	48.3	5.1	1.9	50.6	49.6	50.0	50.8	51.1	BICX-25.4-50.6-C
50.0	50.8	1.2	44.9	14.6	0.4	48.9	49.6	50.0	50.8	51.1	BICX-50.8-48.9-C
75.0	25.4	3.5	73.6	4.1	2.0	76.6	74.4	75.0	76.3	76.7	BICX-25.4-76.6-C
100.0	25.4	4.6	98.6	4.2	2.6	102.4	99.3	100.1	101.8	102.1	BICX-25.4-102.4-C
150.0	25.4	6.9	148.6	4.2	3.2	154.0	148.9	150.2	152.7	153.6	BICX-25.4-154.0-C
150.0	50.8	3.5	147.2	8.3	4.2	153.4	148.8	150.0	152.5	153.5	BICX-50.8-153.4-C
200.0	25.4	9.3	198.6	4.2	3.4	205.6	198.5	200.2	203.5	204.8	BICX-25.4-205.6-C
250.0	25.4	11.6	248.6	4.2	3.6	257.1	247.9	250.0	254.2	256.7	BICX-25.4-257.1-C
300.0	25.4	13.9	298.7	4.0	3.5	308.5	297.3	299.8	304.8	307.1	BICX-25.4-308.5-C
300.0	50.8	6.9	297.2	8.3	6.3	308.5	297.6	300.2	305.2	307.8	BICX-50.8-308.5-C
400.0	50.8	9.3	397.7	7.0	5.4	411.5	396.7	400.0	406.7	409.1	BICX-50.8-411.5-C
500.0	50.8	11.6	497.7	7.0	5.7	514.6	495.9	500.1	508.4	511.5	BICX-50.8-514.6-C

IRB 120 Industrial Robot ABB's smallest robot – for flexible and compact production

The IRB 120 robot is the latest addition to ABB's new fourth-generation of robotic technology and ABB's smallest robot ever produced. Ideal for material handling and assembly applications, the new IRB 120 robot provides an agile, compact and lightweight solution with superior control and path accuracy.

Compact and lightweight

As the smallest robot from ABB, the IRB 120 offers all the functionality and expertise of the ABB range in a much smaller package. Its reduced weight of only 25kg and compact design enables it to be mounted virtually anywhere, whether it is inside a cell, on top of a machine or close to other robots on the production line.

Multipurpose

Ideal for a wide range of industries including the electronic, food and beverage, machinery, solar, pharmaceutical, medical and research sectors, the IRB 120 joins ABB's fourth-generation of new robotic technology.

A white finish Clean Room ISO class 5 version enhances this versatility by making it suitable for environment with stringent cleanliness standard.

The six-axis robot handles a payload of up to 3kg (4kg with its wrist down) and with a reach of 580 mm, the robot is able to carry out a series of operations using flexible rather than hard automated solutions. The IRB 120 is the perfect building block to design cost effective applications – especially when space is at a premium.

Easy to integrate

Weighing in at only 25kg, this robot arm is truly the most portable and easy to integrate on the market. It can be mounted at any angle without any restriction. The smooth surfaces are easy to clean and the cables for air and customer signals are internally routed, all the way from the foot to the wrist, ensuring that integration is effortless.

Optimized working range

In addition to a horizontal reach of 580 mm, the robot has best in class stroke and the ability to reach 112 mm below its base. Furthermore, the IRB 120 has a very compact turning radius, which is enabled by the robots symmetric architecture, without offset on axis 2. This ensures the robot can be mounted close to other equipment and the slim wrist enables the arm to reach closer to its application.

Fast, accurate and agile

Designed with a light, aluminum structure, the powerful compact motors ensure the robot is enabled with a fast acceleration, and can deliver accuracy and agility in any application. Using the IRB 120T variant, cycle-times can be reduced up to 25% where the work piece needs extensive re-orientation and axis 4, 5 and 6 are predominantly used. This faster versions is well suited for pick and packing applications and guided operations together with PickMaster 3™.

IRC5 Compact controller – optimised for small robots

ABB's new IRC5 Compact controller takes the capabilities of the extremely powerful IRC5 controller and presents them in a truly compact format. The new Compact controller brings accuracy and motion control to applications, which previously had been exclusive to large installations.

In addition to space saving benefits, the new controller also enables easy commissioning through one phase power input, external connectors for all signals and a built-in expandable 16 in, 16 out, I/O system.

RobotStudio for offline programming enables manufacturers to simulate a production cell to find the optimal position for the robot, and provide offline programming to prevent costly downtime and delays to production.

Reduced footprint

For applications where floor space is crucial, the combination of the new compact, lightweight architecture of the IRB 120 with the new IRC5 Compact controller introduces a significantly reduced footprint.

IRB 120

Specification

Variants	Reach	Payload	Armload
IRB 120-3/0.6	580 mm	3 kg (4kg)*	0.3 kg

Features

Integrated signal supply	10 signals on wrist
Integrated air supply	4 air on wrist (5 bar)
Position repeatability	0.01 mm
Robot mounting	Any angle
Degree of protection	IP30
Controllers	IRC5 Compact / IRC5 Single cabinet

Movement

Axis movements	Working range	Maximum speed	
		IRB 120	IRB 120T
Axis 1 Rotation	+165° to -165°	250 °/s	250 °/s
Axis 2 Arm	+110° to -110°	250 °/s	250 °/s
Axis 3 Arm	+70° to -110°	250 °/s	250 °/s
Axis 4 Wrist	+160° to -160°	320 °/s	420 °/s
Axis 5 Bend	+120° to -120°	320 °/s	590 °/s
Axis 6 Turn	+400° to -400°	420 °/s	600 °/s

Performance

	IRB 120	IRB 120T
1 kg picking cycle		
25 x 300 x 25 mm	0.58 s	0.52 s
25 x 300 x 25 with	0.92 s	0.69 s
180° axis 6 reorientation		
Acceleration time 0-1 m/s	0.07 s	0.07 s

Electrical connections

Supply voltage	200–600 V, 50/60 Hz
Rated power	
Transformer rating	3.0 kVA
Power consumption	0.25 kW

Physical

Dimension robot base	180 x 180 mm
Dimension robot height	700 mm
Weight	25 kg

Environment

Ambient temperature for Robot manipulator:

During operation	+5°C (41°F) to +45°C (122°F)
Relative transportation and storage	-25°C (-13°F) to +55°C (131°F)
For short periods	up to +70°C (158°F)
Relative humidity	Max 95%
Options	Clean Room ISO class 5 (certified by IPA)**
Noise level	Max 70 dB (A)
Safety	Safety and emergency stops 2-channel safety circuits supervision 3-position enabling device
Emission	EMC/EMI-shielded

* With vertical wrist

** ISO class 4 can be reached under certain conditions

Data and dimensions may be changed without notice

Working range at wrist center & load diagram

© Copyright ABB Robotics. ROB0149EN_D May 2012

Fiber Optic Cables for UV-VIS-NIR

- **Single strand, multimode fiber optic cables** are available with SMA905 connectors, ¼ inch dia. steel mono-coil armor with black PVC jacket. Sizes include 400, 600, or 1000µm core diameters
- **Standard lengths** are 1 and 2 meters
- **Custom lengths** are available with a minimum price of a 1 meter fiber (extra delivery time also)
- **Solarization resistant** fibers available for deep UV applications below 300nm in all diameters
- **High OH fibers (190-850 nm)** are needed for UV and UV-VIS applications below 400nm
- **Low OH fibers (400-2200 nm)** are needed for VIS-NIR applications. They offer lowest possible internal light attenuation. Intended for applications with long fiber lengths.

➤ Specialty fibers for various applications

- Y-cables to couple 2 spectrometer systems
- Y-bundled cables to couple 2 light sources
- 1 to 3 splitter cable
- Custom fibers to meet your application

Armored Fiber Optic Cable Splitter 1-TO-3

400 µm Fibers

Item	Description	Price
F400-UVVis-SR	Armored, 2 meters, Solarization Resistant fiber optic cable	\$175
F400-VISNIR	Armored, 2 meters, fiber optic cable	\$155
F400-per meter	Price per additional meter, armored with black PVC jacket	\$70
F400YBNIRUVSR	Y-cable bundle, 0.5 meter, 4 SR & 3 NIR fibers connects SL1+SL3 lamps	\$380

600 µm Fibers

Item	Description	Price
F600-UVVis-SR	Armored, 2 meters, Solarization Resistant fiber optic cable	\$190
F600-VisNIR	Armored, 2 meters, fiber optic cable	\$160
F600-per meter	Price per additional meter, armored with black PVC jacket	\$110
F600-Y-VISNIR	Armored Y cable, 1 meter, 1 SMA to 2 SMA, all for NIR	\$280
F600-Y-UVSRNIR	Armored Y cable, 1 meter, 1 SMA to 2 SMA, SR+NIR	\$380
F600-1TO3-SR	Armored splitter, 1 meter, 1 SMA to 3 SMA, all Solarization Resistant	\$365

1000 µm Fibers

Item	Description	Price
F1000-UVVis-SR-1	Armored, 1 meter, 1000um, Solarization Resistant fiber optic cable	\$210
F1000-VISNIR-1	Armored, 1 meter, 1000um fiber optic cable	\$180
F1000-per meter	Price per additional meter, armored with black PVC jacket	\$150

Specifications			
Weight	Varies on length/diameter	Fiber material	Silica core - silica clad
Length	1 – 2 meter, or custom	Diameter	400 µm or 600 um or 1000 µm
Spectral range	190 – 2200nm	Connectors	SMA 905
Numerical aperture	0.22 NA	Temperature range	0 – 50 Deg C

+1-813-855-8687 • www.StellarNet-Inc.com

FHR Spectrometer

The Ultimate Performance Spectrometer

The new FHR 640 and FHR 1000 spectrometers offer a unique combination of drive speed, precision and high resolution, completely revolutionizing the large spectrometer market. The latest modifications in FHR technology are based on over ten years of testing by industrial and analytical systems specialists at HORIBA Jobin Yvon.

Designed for researchers who require high accuracy with immediate results, the versatility of the FHR allows for utilization over a wide spectral range, extending from the UV to the IR. The instrument's cast body design accounts for temperature induced stress and expansion, preventing any significant wavelength shifts or signal loss and allowing for optimal performance.

FHR 1000 Spectrometer

The direct grating drive features a grating speed of greater than 300 nm/second, offering users significantly reduced experiment times. Equipped with a fully automated wavelength drive and automated slits, the FHR is available in multiple monochromator and spectrograph configurations, offering a dual field at the exit for array detectors and compatibility with HORIBA Jobin Yvon's full line of accessories. Superior in design, the FHR is the ideal long focal length spectrometer for performing fast acquisitions with high quality results.

Features	Benefits
High speed	Reduced experiment times
Robust cast body construction	Provides optimal performance without wavelength shifts and signal loss
Specially designed, fully automated direct grating drive	Exceptional repeatability and accuracy without compromising speed
Automated slits	Full software control of experiments
Dual grating turret capability	Convenience of two gratings
Swing away mirror option	Allows for lateral port selection
Integrates with full line of HORIBA Jobin Yvon accessories	For easy configuration of spectroscopy systems
Compatible with HORIBA Jobin Yvon SynerJY® Software, LabVIEW VIs available	Simple and complete instrument control with full analysis capabilities

Specifications			
Model		FHR 640	FHR 1000
Focal Length		640 mm	1000 mm
Entrance Aperture Ratio (single grating)		f/5.4	f/9.0
Grating Size	Single grating	110 mm x 110 mm	
	Dual grating	80 mm x 110 mm	
Scanning Range		0 – 1500 nm	
Scanning Speed		> 300 nm/second	
Spectral Dispersion		1.2 nm/mm	0.8 nm/mm
Spectral Resolution w/ 10 µm slits		0.016 nm	0.010 nm
Wavelength Position Accuracy		± 0.03 nm	
Wavelength Repeatability		± 0.015 nm	
Slits	Automated, Standard	0 – 2 mm	
	Automated, Option	0 – 7 mm	
Dimensions	Length	29.13 in (740 mm)	45.67 in (1160 mm)
	Width	13.78 in (350 mm)	16.93 in (430 mm)
	Height	13.78 in (350 mm)	13.78 in (350 mm)
Weight		143.3 lb (65 kg)	154.3 lb (70 kg)

*All specifications with 1200 gr/mm grating.

Specifications subject to change without notice.

Ordering information:

- FHR640-1MS: FHR640 with one single grating, one entrance slit and one exit port.
- FHR640-1MS-2X: FHR640 with one single grating, one entrance slit and two exit ports.
- FHR640-2MS: FHR640 with two gratings in turret, one entrance slit and one exit port.
- FHR640-2MS-2X: FHR640 with two gratings in turret, one entrance slit and two exit ports.
- FHR1000-1MS: FHR1000 with one single grating, one entrance slit and one exit port.
- FHR1000-1MS-2X: FHR1000 with one single grating, one entrance slit and two exit ports.
- FHR1000-2MS: FHR1000 with two gratings in turret, one entrance slit and one exit port.
- FHR1000-2MS-2X: FHR1000 with two gratings in turret, one entrance slit and two exit ports.

HORIBAJOBIN YVON

(All HORIBA Jobin Yvon companies were formerly known as Jobin Yvon)

Find us at www.jobinyvon.com or telephone:

USA: +1-732-494-8660
Germany: +49 (0) 8462317-0
China: +86 (0)10 6849 2216

France: +33 (0) 1 64 54 13 00
UK: +44 (0) 20 8204 8142
Other Countries: +33 (0) 1 64 54 13 00

Japan: +81 (0) 3 3861 8231
Italy: +39 0 2 57603050

P/N: OSD-0046 REV. C

Explore the future

HORIBA

iStar CCD series

Fast gated ICCD solutions

Intensified CCDs for Nanosecond Time-resolved Imaging

Key Specifications

- < 2 ns true optical gate
- Up to 3,450 spectra/s
- Integrated triple output DDG
- Photocathode peak QE up to 50%
- Integrate-On-Chip gating up to 500 kHz
- -40°C TE cooling
- USB2 interface

Key Applications

- ✓ Plasma studies
- ✓ Time-resolved Fluorescence (LIF, PLIF)
- ✓ Quantum Optics
- ✓ Hyperspectral Imaging
- ✓ Transient Absorption
- ✓ Photon Counting

iStarIntensified CCDs for
Time Resolved Imaging**ANDOR**
an Oxford Instruments company

Introducing iStar for Imaging

Andor's iStar extracts the very best from CCD sensor and image intensifier technologies

Exceptional detection performances are accessed through high quantum-efficiency image intensifiers, thermo-electric cooling to -40°C , 500 kHz photocathode gating rates and enhanced intensifier EBI noise reduction.

Low jitter, low insertion delay gating electronics and nanosecond-scale optical gating provide excellent timing accuracy down to a few 10's of picoseconds, allowing ultra-precise synchronization of complex experiments through iStar's comprehensive range of input/output triggering options.

Meet the family- key specifications*¹

	iStar 312T	iStar 334T
Array format	512 x 512 24 μm	1024 x 1024 13 μm
Effective active area (vs image intensifier $\varnothing$)
Frame rate (max, at 16-bit digitization)	15.8 fps 1,031 fps (crop mode) 55,250 fps (fast kinetic)	4.2 fps 333 fps (crop mode) 29,850 fps (fast kinetic)
Pixel well depth	320,000 e^-	100,000 e^-
Min read noise (e^- , typical)* ²	5.4	5
Minimum cooling temperature	-40°C	
Image Intensifier options	Gen 2 - Broadband, moderate VUV-NIR QE Gen 3 - VIS-NIR, high QE Gating down to < 2 ns (Fast Gen 2 or Gen 3) or < 100 ns (High QE Gen 2) Phosphor P43 (fast decay) or P46 (ultrafast decay) options	
Recommended Applications	<ul style="list-style-type: none"> High dynamic range imaging Ultra-fast kinetics 	<ul style="list-style-type: none"> High resolution imaging Extended fast kinetic series

NEW The iStar sCMOS is Andor's new ultrafast platform for ns time-resolved imaging & spectroscopy.

It features high frame rates up to 40 fps (4,000 with ROI) through a USB3 interface, with the high accuracy gating performance that you would expect from an iStar.

It is the ideal platform for ultrafast, ns time-resolved imaging.

Features & Benefits

Feature	Benefit
High-resolution sensors and image intensifiers	Sharpest images and spectrum definition, 100% fill factor for maximum signal collection efficiency.
True optical gating < 2 ns	Billionth of a second time-resolution for accurate transient phenomena study.
5 MHz readout platform	Rapid frame and spectral rates for superior characterization of dynamic phenomena. Single readout amplifier for best image digitization uniformity.
Superfast readout options Crop & Fast Kinetic mode	Fully customizable binning sequences for highest spectral and image rates. Greater than 6,667 spectra/s continuous rates, up to 55,250 spectra/s in burst mode.
High QE Gen 2 & 3 image intensifiers	Superior photon capture, with peak QE up to 50% and spectral coverage from 120 to 1,100 nm.
Low jitter, on-board Digital Delay Generator (DDG™)	Highest gating timing accuracy with lowest propagation delay. Software controlled 3x triggering outputs with 10 ps setup accuracy for complex experiment integration.
500 kHz sustained photocathode gating	Maximizes signal-to-noise ratio in high repetition rate laser-based applications.
TE-cooling to -40°C	Efficient minimization of CCD dark current and pixel blemishes.
Photocathode EBI minimization	Dry gas purge interface for further efficient EBI reduction.
Intelligate™	Intelligent and accurate MCP gating for better than 1:10 ⁸ shuttering efficiency in the UV.
Insertion delay as low as 19 ns	Minimum delay between experiment signal generation and actual image intensifier triggering.
USB 2.0 interface	Industry-standard plug-and-play, lockable and rugged interface Seamless multi-camera control from single PC or laptop.
Real-time control interface	On-the-fly software control of intensifier gain, gating and 3x outputs trigger parameters for real-time detection optimization.
2 year warranty	Reliability and guaranteed performance over time.

Deep TE-cooling to -40°C – lowest sensor dark current

- ✓ Experiments involving multi-kHz lasers and extremely weak sample emission, where multiple photocathode gatings can be set within a single CCD exposure. This exposure is typically set to a few seconds to allow for hundreds of thousands of accumulations to occur. During these extended CCD exposures, sensor deep cooling is of the greatest importance.
- ✓ Photon counting, where any noise contribution from any element of the ICCD has to be minimized to allow access to the lowest detection threshold. As Image Intensifiers are fibre coupled to the CCD, the photocathode will see some degree of conductive cooling, which will contribute to minimize the EBI. Further thermal noise reduction can be achieved through the iStar's dry gas purge interface.

Focus on frame rates^{*1}

	312T	334T
Sensor array size	512 x 512	1024 x 1024
Pixel size	24 x 24 μm	13 x 13 μm
Max. readout speed	5 MHz	5 MHz
Frame rates 1x1 full frame 2x2 binning	15.8 fps 28.5 fps	4.2 fps 7.3 fps
Spectral rates (FVB)	323 sps	145 sps
Crop mode rates (spectral, binned) [number of rows equivalent to a 130 μm high channel]	3,571 sps [5 rows]	3,450 sps [10 rows]
Fast Kinetics rates vs. channel heights		
26 μm	37,990 Hz [1 row]	48,780 Hz [2 rows]
50 μm	26,590 Hz [2 rows]	29,850 Hz [4 rows]
100 μm	16,615 Hz [4 rows]	16,805 Hz [8 rows]
200 μm	9,495 Hz [8 rows]	9,525 Hz [15 rows]

Crop mode: Pushing frame and spectral rates further...

The active imaging area of the sensor is defined in a way that only a small section of the entire chip is used for imaging or spectral acquisition.

The remaining area has to be optically masked to prevent light leakage and charge spill-over that would compromise the signal from the imaging area.

By cropping the sensor, one achieves faster frame and spectral rates because the temporal resolution will be dictated only by the time it requires to read out the small section of the sensor.

... and beyond with fast kinetic mode

T1 - CCD "Keep Clean" sequence is interrupted, and useful signal builds-up on the user-defined top portion of a sensor

T2 - At the end of the exposure time, signal is rapidly shifted down by a pre-defined number of rows, and a second exposure takes place

T3 - This process is repeated until the number of acquisitions equals the series length set by user

T4 - The sequence moves into the readout phase by shifting in turn the individual acquisitions to the readout register, which is then read out

Advanced camera specifications

	312T	334T
Array format	512 x 512 24 μm pixels	1024 x 1024 13 μm pixels
Effective active area	12.3 x 12.3 mm	13.3 x 13.3 mm
Register well depth	480,000 e ⁻	150,000 e ⁻
Minimum cooling temperature [dark current, e ⁻ /pix/s] Air cooled Coolant chiller @ 10°C, 0.75 l/min	-30°C [0.25] -40°C [0.12]	-30°C [0.2] -40°C [0.1]
Vertical shift speeds	6.5 to 25.7 μs	6.5 to 12.9 μs
Sensitivity	2.2 to 8.7 e ⁻ /count	1 to 5 e ⁻ /count
Sensor linearity *3	Better than 99%	
Digitization	16-bit	

Camera and Internal Digital Delay Generator (DDG) Inputs/Outputs

Gate pulse delay & width	Adjustable from 0 ns to 10 s in 10 ps steps
Trigger Outputs	
Output A, B and C	+5V CMOS level with 50 Ω source impedance; can drive 5V into a non-terminating load or 2.5V into 50 Ω load; output synchronized triggers for auxiliary equipment, e.g. lasers, flash lamps, National Instrument™ hardware Individual delays control from 0 ns to 10 s in 10 ps steps Configurable Polarity
Fire	5V CMOS level reference signal for beginning and end of individual sensor exposure
Arm monitor	5V CMOS level reference signal to indicate when system is ready to accept external triggers. Signal goes high when system is ready to accept external triggers (after a readout has finished or sooner if in overlap mode) and goes low when the exposure is finished
Gate & output A, B and C jitter	35 ps rms (relative to external trigger or to each other)
Trigger Inputs	
External trigger	Trigger input for sensor and Digital Delay Generator Up to 500 kHz for Integrate-On-Chip mode
Direct gate	TTL input for exact external control of photocathode width and timing with smallest insertion delay.
Additional Controls	
Gate monitoring	AC coupling from photocathode to monitor exact photocathode on/off switching and timings
Insertion delay	< 19 ns in direct gate operation

Intelligent gating modes

Integrate-On-Chip: 500,000 times more signal per 1 sec CCD exposure

The iStar's Integrate-On-Chip (IOC) mode enables accumulation of useful signal from laser-induced phenomena at frequencies up to 500 kHz, providing greatly improved signal-to-noise, and minimising experiment time. The latter greatly benefits setups where photobleaching-sensitive biological samples are probed. This translates into the possibility to accumulate 500,000 times more signal per 1 second CCD exposure time.

Integrate-On-Chip is fully software-configurable and can be used through extensive kinetic series involving up to 1,000 pre-programmed incremental delays from laser trigger for unrivalled combination of sensitivity and ultra-precise transient phenomena analysis.

Intelligate™: Superior gating in the UV-VUV region

One of the key functions of an image intensifier is to provide high optical shuttering (ON/OFF) ratio. By switching photocathode voltage to a higher or lower level relative to the MCP voltage, photo-electrons can be either directed towards or repelled from the MCP to avoid detection. ON/OFF values of $1:10^8$ are typically measured for Visible/NIR incident light on the photocathode.

However photocathode "leakage" becomes more pronounced in the UV-VUV region (< 300 nm), where more energetic photons have a greater probability to go through the photocathode turned "OFF", reach the MCP to generate an electron that can be detected. This can lead to shuttering efficiency as low as $1:10^4$.

Andor's exclusive Intelligate™ simultaneously gates the photocathode and the MCP. The ultra fast rising edge of the MCP gate pulse switches on the correct potential in a nanosecond timeframe, coinciding precisely with the photocathode gating pulse. This enables ON/OFF ratios as high as 10^8 in the UV-VUV region.

Creating the optimum product for you

 DH **334** T-18- **F** - **03**
example shown

Step 1. Choose the CCD matrix size

CCD matrix	Code
512 x 512 CCD matrix, 24 µm pixel	312
1024 x 1024 CCD matrix, 13 µm pixel	334

CCD Matrix

Step 2. Choose the intensifier diameter

There is one intensifier option available for the iStar 312 and 334.

Intensifier diameter
Ø 18 mm intensifier (18)

Intensifier Diameter

Step 3. Choose a minimum gating speed

Gating Speed	Code
High QE, slow gating	H
Fast Gating	F
Ultra Fast Gating	U

Gating Speed

Step 4. Select an image intensifier option

Gen 2 Intensifier option	Code
W-AGT photocathode, P43 phosphor	03
W-AGT photocathode, P46 phosphor	04
W-AGT photocathode, MgF ₂ window, P43 phosphor	05
WR photocathode, P43 phosphor	13
UW photocathode, P43 phosphor	83
WE-AGT photocathode, P43 phosphor	E3

Gen 3 Intensifier option	Code
HVS photocathode, P43 phosphor	63
VIH photocathode, P43 phosphor	73
NIR photocathode, P43 phosphor	93
EVS photocathode, P43 phosphor	A3
BGT photocathode, P43 phosphor	C3

Intensifier

All photocathode types can be combined with a fast-decay P46 phosphor – please contact your local Andor representative for further information

Step 5. Select the required accessories and adapters

Description	Order Code
C-mount lens adaptor	LM-C
F-mount lens adaptor	LM-NIKON-F
UV-VIS 105mm SLR lens, 250 - 650 nm transmission, F-mount	OL-AF10-F45-#UV
Oasis 160 Ultra compact chiller unit	ACC-XW-CHIL-160
6 mm tubing option for ACC-XW-CHIL-160	ACC-6MM-TUBING-2xxxxM
i ² c to BNC cable for Shamrock shutter control	ELC-05323
Metric Bracket	ACC-ISTAR-METRIC ADP

Accessories & Adapters

Step 6. Select the required software

The iStar ICCD requires at least one of the following software options:

Solis for Time-Resolved A 32-bit and fully 64-bit enabled application for Windows (XP, Vista, 7 and 8) offering rich functionality for data acquisition and processing. AndorBasic provides macro language control of data acquisition, processing, display and export.

Andor SDK2 A software development kit that allows you to control the Andor range of cameras from your own application. Available as 32 and 64-bit libraries for Windows (7 and 8) and Linux. Compatible with C/C++, LabView and Matlab.

Software

iStar

Intensified CCDs for
Time Resolved Imaging

ANDOR
an Oxford Instruments company

Product drawings

Dimensions in mm [inches]

Weight: 4.2 kg [9 lb 4 oz]

■ = position of pixel 1,1

Connecting to the iStar

Camera Control

Connector type: USB 2.0

Logic Input / Output

Connector type: SMA, provided with SMA - BNC cable

5x outputs: FIRE pulse, Output A, B, C from DDG™ and ARM

2x inputs: Camera trigger from 3rd party source & direct gate for complete, direct external control of intensifier gating

I²C connector

Compatible with Fischer SC102A054-130, pin-outs as follow:

1 = Shutter (5V CMOS level with 50 Ω impedance), 2 = I²C Clock (5V), 3 = I²C Data (5V), 4 = +5 Vdc, 5 = Ground

Gate Monitor

1x output: AC coupling to photocathode

Mounting hole locations

Gate monitor

AC coupling to photocathode provides the most reliable timing information on actual gating occurrence

Dry gas purge

Minimizes Electron Background Illumination (EBI) thermally generated at the photocathode to improve detection threshold

ORDER TODAY

Need more information? At Andor we are committed to finding the correct solution for you. With a dedicated team of technical advisors, we are able to offer you one-to-one guidance and technical support on all Andor products. For a full listing of our regional sales offices, please see: andor.com/contact

Our regional headquarters are:

EUROPE

Belfast, Northern Ireland
Phone +44 (28) 9023 7126
Fax +44 (28) 9031 0792

JAPAN

Tokyo
Phone +81 (3) 6732 8968
Fax +81 (3) 6732 8939

NORTH AMERICA

Concord, MA, USA
Phone +1 (860) 290 9211
Fax +1 (860) 290 9566

CHINA

Beijing
Phone +86 (10) 8271 9066
Fax +86 (10) 8271 9055

ITEMS SHIPPED WITH YOUR CAMERA

Power Brick, 12V, 120W single line
2x 2m BNC to SMA cable
1x Gate Monitor cable
3 Metre USB cable A to B type, shielded (10ft)
1x Quick launch guide
1x CD containing Andor user guides
1x Individual system performance booklet

Regulatory Compliance

Compliant with the requirements of the
EU EMC and LV Directives through testing to
EN 61326-1 and EN 61010-1.
External power supply PSE-approved

Footnotes: Specifications are subject to change without notice

- Figures are typical unless otherwise stated.
- Measured for the entire system. Combination of CCD readout noise and A/D noise - measurement is for single pixel readout with -30°C CCD cooling and at minimum exposure time under dark conditions. Values quoted are measured with highest available PAG setting.
- Linearity is measured from a plot of counts vs exposure time under constant photon flux up to the saturation point of the system.
- The On/Off ratio of the 'E3' image intensifier in the UV with MCP gating is typically 10^5 .
- Typical photocathode Quantum Efficiency and input window transmission as measured by the tube manufacturer.
- Typical resolution of the image intensifier tube only, not the overall resolution of the system. As a rough guide, the smallest resolvable FWHM feature will be approximately 2x the CCD pixel size. This is a very important consideration for optical resolution calculations in spectrograph-based systems.
- Gen 2 High QE (H) option - Photocathode QE is inherently linked to the gating speed of the intensifier. High QE option (H) offers higher peak QE than Ultrafast (U) or Fast (F) intensifiers, while exhibiting minimum gating speed one order of magnitude slower.
- Actual measured minimum optical gating of the photocathode, reflecting not only the electrical pulse width applied to the photocathode but also its inherent iris time.
- Gain is software-selectable through a 12-bit DAC and varies exponentially with DAC setting. Value refers to the ratio of max to min intensifier gain as measured for individual cameras. Actual optical gain (counts/photon) for a DAC setting is accessed by the multiplication of the relative gain (at that DAC value) by the minimum system gain (at DAC = 0, CCD e⁻/photon) and divided by the sensitivity (CCD e⁻/count) at a given CCD PAG. Sensitivities are individually measured and reported for each system.
- Combination of -73 GaAsP photocathode with a lumogen-coated fibre-optic plate and protective MgF₂ window. The latter additional optical interfaces are the reason for the lowered QE in the visible NIR region, for the -C3 model.

Minimum Computer Requirements:

- 3.0 GHz single core or 2.4 GHz multi core processor
- 2 GB RAM
- 100 MB free hard disc to install software (at least 1 GB recommended for data spooling)
- USB 2.0 High Speed Host Controller capable of sustained rate of 40 MB/s
- Windows (XP, Vista, 7 and 8) or Linux

Operating & Storage Conditions

- Operating Temperature: 0°C to 40°C ambient
- Relative Humidity: < 70% (non-condensing)
- Storage Temperature: -20°C to 55°C

Power Requirements

- 100 - 240 VAC, 50 - 60 Hz

Windows is a registered trademark of Microsoft Corporation.
Labview is a registered trademark of National Instruments.
Matlab is a registered trademark of The MathWorks Inc.

Leica DCM 3D

El perfilómetro tridimensional de tecnología dual combina la adquisición de imágenes confocales con la interferometría

Living up to Life

Leica
MICROSYSTEMS

Especificaciones generales

Principio de medición	Perfilometría óptica de tecnología dual (confocal e interferometría) sin contacto, tridimensional				
Mantenimiento	Exento de mantenimiento				
Preparación de muestras	No se requiere ninguna preparación específica de la muestra				
Funciones	Adquisición de imágenes, topografía tridimensional, perfiles, coordenadas, capas y recubrimientos transparentes, rugosidad, volumen, textura de la superficie, etc.				
Modos de contraste	Confocal, interferometría (PSI, ePSI, VSI), campo claro en color, campo claro en escala de grises (alta resolución), campo oscuro.				
Objetivos	de 2.5× a 150× en confocal de 5× a 50× en interferometría				
Revólver	Revólver para 6 objetivos manual / revólver para 6 objetivos motorizado				
Rango de desplazamiento de la platina (x,y)	Manual: 200×100 mm (otros previa solicitud). Confección manual de imágenes panorámicas disponible Motorizada: De 114×75 mm a 302×302 mm (otros previa solicitud). Confección automática de imágenes panorámicas disponible en todo el margen de escaneo de la platina Platinas codificadas de lazo cerrado para la confección de alta precisión de imágenes panorámicas				
Iluminación	Diodo luminoso blanco de alta potencia de 530 nm para luz coaxial, controlable Diodo luminoso azul de alta potencia de 460 nm para luz coaxial, controlable				
Adquisición de imágenes	2 sensores: Sensor metrológico (blanco y negro), sensor cromático (ambos CCD de alta resolución)				
Margen de detección vertical	40 mm				
Reflectividad de la muestra	De 0.1% a 100%				
Temperatura de servicio	5°C a 40°C				
Humedad ambiental	< 80% de humedad relativa				
Aislamiento antivibraciones	activo o pasivo (recomendado para interferometría)				
Modo confocal					
Aumentos	5×	10×	20×	50×	150×
Apertura numérica	0.15	0.30	0.50	0.90	0.95
Campo de visión (µm)	2550×1910	1270×950	636.61×477.25	254.64×190.90	84.83×63.60
Resolución óptica (X/Y) (µm)	0.94	0.47	0.28	0.16	0.14
Resolución vertical (nm)	<150	<30	<15	<3	<2
Velocidad de escaneado vertical (µm/s)	20 – 320	10 – 160	5 – 80	1 – 16	0.5 – 8
Frecuencia de cambio de imágenes	(confocal de resolución completa) 12.5 fps				
Tiempo medio de medición	3 – 5 segundos				
Modo de interferometría					
Aumentos	5×	10×	20×	50×	
Apertura numérica	0.15	0.30	0.40	0.50	
Campo visual (µm)	2550×1910	1270×950	630×460	254.64×190.90	
Resolución óptica, azul (X/Y) (µm)	0.94	0.47		0.28	
Resolución óptica, blanca (X/Y) (µm)	1.08	0.56		0.34	
Resolución vertical (nm)	PSI < 0.1 / ePSI < 1.0 / VSI < 4.0				
Rango vertical	PSI: 5 µm; ePSI 100 µm; VSI 10 mm				
Velocidad de escaneado vertical (µm/s)	VSI/ePSI: 4 – 18 µm/s				
Tiempo medio de medición	PSI: 3 – 6s; VSI: 10s; ePSI: 30s

Dimensiones en mm

“Con el usuario, para el usuario” – Leica Microsystems

Leica Microsystems opera a nivel global en cuatro divisiones, ocupando puestos líderes del mercado.

• Life Science Division

La división de Ciencias de la Vida de Leica Microsystems satisface las necesidades de captura y procesamiento de imágenes de la comunidad científica, gracias a un elevado grado de innovación y a una gran experiencia técnica en lo que a visualización, medición y análisis de microestructuras se refiere. Nuestro gran afán por comprender las aplicaciones científicas ha propiciado que los clientes de Leica Microsystems se sitúen a la vanguardia de la investigación científica.

• Industry Division

El principal interés de la división de Industria de Leica Microsystems consiste en ayudar a los clientes a conseguir resultados de la mayor calidad posible, gracias a los mejores y más innovadores sistemas de captura y procesamiento de imágenes para así observar, medir y analizar las microestructuras en aplicaciones industriales tanto rutinarias como de investigación, en la Ciencia de materiales y el control de calidad, en investigaciones forenses y en aplicaciones educativas.

• Biosystems Division

La división de Biosistemas de Leica Microsystems pone al servicio tanto de los laboratorios de histopatología como de los investigadores en este ámbito, la gama de productos más amplia y de mayor calidad del sector. Desde los propios pacientes hasta los profesionales de la patología, dicha gama incluye el producto ideal para cada uno de los procesos histológicos, así como soluciones de flujo de trabajo para el laboratorio en su conjunto, caracterizadas por su alto nivel de productividad. Gracias a sus completos sistemas para histología, que incorporan una serie de funciones automatizadas innovadoras, así como reactivos Novocastra™, la División de Biosistemas garantiza una atención de mayor calidad al paciente, a través de un tiempo de respuesta reducido, de un diagnóstico de confianza y de una estrecha colaboración con los clientes.

• Surgical Division

El principal objetivo de la división quirúrgica de Leica Microsystems es asociarse con los microcirujanos para proporcionarles asistencia en el cuidado de sus pacientes gracias a la tecnología quirúrgica de mayor calidad y más innovadora en materia de microscopía, tanto en la actualidad como en un futuro.

La fructífera colaboración “con el usuario, para el usuario” ha sido siempre la base del poder innovador de Leica Microsystems. Sobre esta base hemos desarrollado los cinco valores de nuestra empresa: Pioneering, High-end Quality, Team Spirit, Dedication to Science y Continuous Improvement. Darle vida a estos valores significa para nosotros: **Living up to Life**.

Presencia mundial

Alemania:	Wetzlar	Tel. +49 64 41 29 40 00	Fax +49 64 41 29 41 55
Australia:	North Ryde	Tel. +61 2 8870 3500	Fax +61 2 9878 1055
Austria:	Viena	Tel. +43 1 486 80 50 0	Fax +43 1 486 80 50 30
Bélgica:	Groot Bijgaarden	Tel. +32 2 790 98 50	Fax +32 2 790 98 68
Canadá:	Richmond Hill/Ontario	Tel. +1 905 762 2000	Fax +1 905 762 8937
Corea del Sur:	Seúl	Tel. +82 2 514 65 43	Fax +82 2 514 65 48
Dinamarca:	Ballerup	Tel. +45 4454 0101	Fax +45 4454 0111
EE.UU.:	Bannockburn/Illinois	Tel. +1 847 405 0123	Fax +1 847 405 0164
España:	Barcelona	Tel. +34 93 494 95 30	Fax +34 93 494 95 32
Francia:	Nanterre Cedex	Tel. +33 811 000 664	Fax +33 1 56 05 23 23
Holanda:	Rijswijk	Tel. +31 70 4132 100	Fax +31 70 4132 109
Inglaterra:	Milton Keynes	Tel. +44 1908 246 246	Fax +44 1908 609 992
Italia:	Milan	Tel. +39 02 574 861	Fax +39 02 574 03392
Japón:	Tokyo	Tel. +81 3 5421 2800	Fax +81 3 5421 2896
Suecia:	Kista	Tel. +46 8 625 45 45	Fax +46 8 625 45 10
Portugal:	Lisboa	Tel. +351 21 388 9112	Fax +351 21 385 4668
República Popular de China:	Hong Kong	Tel. +852 2564 6699	Fax +852 2564 4163
Singapur		Tel. +65 6779 7823	Fax +65 6773 0628
Suiza:	Heerbrugg	Tel. +41 71 726 34 34	Fax +41 71 726 34 44

y representaciones en más de 100 países

Según el certificado ISO 9001, Leica Microsystems (Switzerland) Ltd, Industry Division, cuenta con un sistema de gestión que cumple los requisitos de la normativa internacional referente a la gestión de calidad. Asimismo, la producción cumple con los requisitos de la norma internacional ISO 14001 referente a la gestión medioambiental.

www.leica-microsystems.com

Leica
MICROSYSTEMS

Typical Spectra of
DRIEL
INSTRUMENTS
Spectral Calibration Lamps

Oriel INSTRUMENTS LAMP SAFETY AND CHARACTERISTICS

Our Spectral Calibration Lamps are compact and convenient to use. Both AC and DC Power Supplies are offered to run the lamps at various operating currents, and a rod mounted holder is available to support the lamps. Several lamp shields are also offered to aperture the lamps or for spectral filtering and conversion.

These lamps and their accessories are described in detail in Volume II, pages 27 to 30. This booklet contains their spectral output. We offer the following types:

- Argon
- Krypton
- Neon
- Xenon
- Mercury (Argon)
- Mercury-Neon

6035 Hg(Ar) Lamp in 63670 Lamp Holder, with 6047 Power Supply.

SAFETY

Although these are not considered powerful lamps, some of them have a strong ultraviolet output. You should avoid unnecessary exposure of the eyes or skin to shortwave ultraviolet. Apart from the possible mutagenic effects of ultraviolet radiation, you can suffer delayed corneal burns ("welder's eye") from working close to some of the mercury lamps for an hour or so. These burns are at the least extremely uncomfortable, and possibly worse.

You may not notice anything amiss (except perhaps watery eyes), while working with one of the ultraviolet emitting lamps. If you get too much exposure, and this has happened in our laboratories, several hours later you will have difficulty focusing and considerable eye discomfort. This can persist for many hours and in addition to the discomfort, it is extremely frightening. So, if you need the ultraviolet output, make sure you use goggles and gloves. (We carry these in Volume II.) If you do not need the ultraviolet, then we recommend you use the 6057 Glass Safety Filter on the lamps. The 6057 absorbs the ultraviolet while transmitting the visible and infrared calibration lines.

Fig. 1 Typical Irradiance at 50 cm from 6035 Hg(Ar) Lamp operated at 18 mA.

LAMP CHARACTERISTICS

The Hg (Ar) and Hg-Ne lamps contain a small amount of mercury which dominates the output spectrum, and argon or neon as a starter gas. The spectral output of the 6035 Hg(Ar) lamp is effectively that of the mercury lines. These lamps are insensitive to temperature. With the 18 mA power supplies, 90% of the output is in the 253.7 nm line; with the 30 mA power supplies, intensity shifts to the visible lines and only 30% is left in the 253.7 nm line.

The Hg-Ne lamp, model 6034, is temperature sensitive. In normal lab ambient, the output is similar to the 6035, i.e. dominated by mercury lines. To produce the neon lines, forced air cooling is required. Operate the 6034 at 18 mA only.

The rare gas calibration lamps operate at 6 or 10 mA.

Table 1, on the following page, lists the useful wavelengths for our spectral calibration lamps.

USEFUL WAVELENGTHS

Table 1 Useful Wavelengths for Spectral Calibration Lamps

Wavelength (nm)	Lamp	Model No.	Wavelength (nm)	Lamp	Model No.
184.91	Hg*	6035	433.36	Ar	6030
194.17	Hg*	6035	433.92	Hg*	6035
226.22	Hg*	6035	434.52	Ar	6030
237.83	Hg*	6035	434.75	Hg*	6035
248.2	Hg*	6035	435.14	Kr	6031
253.65	Hg*	6035	435.84	Hg*	6035
265.2	Hg*	6035	436.26	Kr	6031
275.28	Hg*	6035	437.61	Kr	6031
280.35	Hg*	6035	440.0	Kr	6031
289.36	Hg*	6035	442.52	Kr	6031
296.73	Hg*	6035	445.39	Kr	6031
302.15	Hg*	6035	446.37	Kr	6031
312.57	Hg*	6035	450.1	Xe	6033
313.17	Hg*	6035	450.24	Kr	6031
334.15	Hg*	6035	452.47	Xe	6031
336.99	Ne	6032	458.28	Xe	6033
341.79	Ne†	6032	462.43	Xe	6033
344.77	Ne†	6032	467.12	Xe	6033
345.42	Ne	6032	469.7	Xe	6033
346.66	Ne	6032	470.44	Ne	6032
347.26	Ne†	6032	473.42	Xe	6033
349.81	Ne	6032	480.7	Xe	6033
350.12	Ne	6032	482.97	Xe	6033
351.52	Ne	6032	484.33	Xe	6033
352.05	Ne†	6032	491.6	Hg*	6035
355.43	Ar	6030	491.65	Xe	6033
359.35	Ne†	6032	492.32	Xe	6033
360.02	Ne	6032	502.83	Xe	6033
363.37	Ne	6032	503.78	Ne	6032
365.02	Hg*	6035	508.04	Ne	6032
365.48	Hg*	6035	511.65	Ne	6032
366.33	Hg*	6035	514.5	Ne	6032
366.53	Kr	6031	520.39	Ne	6032
367.96	Kr	6031	533.08	Ne†	6032
377.34	Kr	6031	534.11	Ne†	6032
394.9	Ar	6030	534.33	Ne†	6032
404.44	Ar	6030	540.06	Ne†	6032
404.66	Hg*	6035	546.07	Hg*	6035
407.78	Hg*	6035	549.09	Kr	6031
415.86	Ar	6030	550.07	Kr	6031
416.4	Ar	6030	556.22	Kr	6031
418.19	Ar	6030	557.03	Kr	6031
419.1	Ar	6030	558.04	Kr	6031
419.8	Ar	6030	564.96	Kr	6031
420.07	Ar	6030	565.67	Ne	6032
425.12	Ar	6030	567.25	Kr	6031
425.94	Ar	6030	574.83	Ne	6032
426.63	Ar	6030	576.44	Ne	6032
427.22	Ar	6030	576.96	Hg*	6035
427.4	Ar	6030	579.07	Hg*	6035
428.3	Kr	6031	580.45	Ne	6032
430.01	Ar	6030	582.02	Ne	6032
431.96	Kr	6031	583.29	Kr	6031
432.0	Ar	6030	585.25	Ne	6032

* These lines appear with the Hg(Ar) and Hg-Ne lamps.

† These lines also appear with the Hg-Ne lamp.

ORIEL **INSTRUMENTS** **USEFUL WAVELENGTHS**

Wavelength (nm)	Lamp	Model No.
587.09	Kr	6031
587.99	Kr	6031
588.19	Ne†	6032
590.25	Ne	6032
594.48	Ne†	6032
597.55	Ne†	6032
598.79	Ne	6032
599.39	Kr	6031
601.22	Kr	6031
603.0	Ne	6032
605.61	Kr	6031
607.43	Ne	6032
609.62	Ne	6032
612.85	Ne	6032
614.31	Ne	6032
616.36	Ne	6032
618.22	Ne	6032
618.24	Xe	6033
621.73	Ne	6032
626.65	Ne	6032
630.48	Ne	6032
631.81	Xe	6033
633.44	Ne	6032
638.3	Ne	6032
640.23	Ne	6032
641.63	Ar	6030
642.1	Kr	6031
645.63	Kr	6031
646.97	Xe	6033
650.65	Ne	6032
653.29	Ne	6032
659.9	Ne	6032
665.21	Ne	6032
666.89	Xe	6033
667.73	Ar	6030
667.83	Ne†	6032
669.92	Kr	6031
671.7	Ne	6032
672.8	Xe	6033
675.28	Ar	6030
681.31	Kr	6031
682.73	Xe	6033
687.13	Ar	6030
688.22	Xe	6033
690.47	Kr	6031
692.95	Ne	6032
693.77	Ar	6030
696.54	Ar	6030
702.41	Ne	6032
703.03	Ar	6030
703.24	Ne	6032
705.3	Ne	6032
705.91	Ne	6032
706.72	Ar	6030
711.96	Xe	6033
714.70	Ar	6030
717.39	Ne	6032

Wavelength (nm)	Lamp	Model No.
722.41	Kr	6031
724.52	Ne†	6032
727.29	Ar	6030
728.53	Xe	6033
728.98	Kr	6031
737.21	Ar	6030
738.4	Ar	6030
742.55	Kr	6031
743.89	Ne†	6032
747.24	Ne	6032
748.61	Kr	6031
748.89	Ne†	6032
750.39	Ar	6030
751.46	Ar	6030
753.58	Ne	6032
754.41	Ne	6032
758.47	Xe	6033
758.74	Kr	6031
760.15	Kr	6031
763.51	Ar	6030
764.2	Xe	6033
768.52	Kr	6031
769.45	Kr	6031
772.38	Ar	6030
774.68	Kr	6031
785.48	Kr	6031
791.34	Kr	6031
794.32	Ne	6032
794.82	Ar	6030
800.62	Ar	6030
801.48	Ar	6030
805.95	Kr	6031
808.25	Ne	6032
810.37	Ar	6030
810.44	Kr	6031
811.29	Kr	6031
811.53	Ar	6030
813.64	Ne	6032
819.01	Kr	6031
823.16	Xe	6033
826.32	Kr	6031
826.45	Ar	6030
828.01	Xe	6033
828.11	Kr	6031
829.81	Kr	6031
830.03	Ne	6032
834.68	Xe	6033
837.76	Ne	6032
840.82	Ar	6030
840.92	Xe	6033
841.84	Ne	6032
842.46	Ar	6030
849.54	Ne	6032
850.89	Kr	6031
877.67	Kr	6031
892.87	Kr	6031

† These lines also appear with the Hg-Ne lamp.

250 Long Beach Boulevard, Stratford, CT 06497-0872 U.S.A. Tel: 203-377-8282 Fax: 203-378-2457 E-Mail: res_sales@oriel.com
URL: <http://www.oriel.com>

Oriel Instruments SPECTRAL CALIBRATION LAMP POWER SUPPLIES

6035 Hg(Ar) Lamp in 63670 Lamp Mount, on rod and rod holder, with 6060 DC Power Supply.

Our power supplies provide a high starting voltage to ignite the lamp, then the voltage drops to the normal operating voltage. We offer 115 V, 60 Hz and 220 V, 50/60 Hz supplies.

Choose an AC supply for general calibration, and a DC supply for applications where frequency modulation is a problem.

The 6060 "DC" Supply is switchable to AC, and has a variable current adjust. Although more expensive than the AC supply it has much better performance, as shown in Fig. 2 on the right, and can operate any Spectral Calibration Lamp.

With the switch on "AC" the light output is as shown in Fig. 3. The lamp is driven by an alternating square wave current so the output consists of 30 ms "plateaus" of fairly constant output with a fast (10 μ s) negative spike between plateaus. A typical spike is shown in the expanded graphic.

AC mode has the advantage of current reversal which prevents unidirectional migration of the gas. With the switch in the DC position the current is true DC, but the polarity should be reversed occasionally to change the migration.

Table 2 Spectral Calibration Lamp Power Supply Specifications

Lamp Model No.	Type	Operating Current (mA)	Rated Life* (Hrs)	AC Power Supply		DC Power Supply**	
				110V	220V	110V	220V
6034	Hg-Ne	18	500	6047	6048	6060	6061
6035	Hg(Ar)	10	5000	6045	6046	6060	6061
		18	5000	6047	6048	6060	6061
		30	4500	6049	6050	6060	6061
6030	Ar	10	500	6045	6046	6060	6061
6031	Kr	10	1000	6045	6046	6060	6061
6032	Ne	6	250	6043	6044	6060	6061
6033	Xe	6	250	6043	6044	6060	6061

* In AC operation.

** Is also switchable to AC.

Fig. 1 Output intensity variation of 6035 Lamp operated by 6047 Power Supply.

Fig. 2 Output intensity variation of 6035 Lamp operated by 6060 Power Supply with the switch set on "DC". The 20X expanded sensitivity scale shows the low ripple.

Fig. 3 Output intensity variation of 6035 Lamp operated by 6060 Power Supply with switch set on "AC".

Oriel INSTRUMENTS SPECTRAL CALIBRATION LAMP ACCESSORIES

LAMP HOLDER

6035 Spectral Calibration Lamp being inserted in 63670 Lamp Holder, on rod and rod holder.

The 63670 is a convenient and inexpensive rod mount that holds any of our spectral calibration lamps in a vertical position. A 1.75 inch (44.5 mm) long optical rod is included. See Volume II, page 29 for ordering information for the 63670.

SPECTRAL CALIBRATION LAMP SETS

These sets include the following:

- 6030 Argon Lamp
- 6031 Krypton Lamp
- 6032 Neon Lamp
- 6033 Xenon Lamp
- 6035 Mercury (Argon) Lamp
- 6040 Shield
- 6043 115 V Power Supply or 6044 220 V Power Supply
- 6045 115 V Power Supply or 6046 220 V Power Supply
- Carrying Case and Booklet of Spectra

LAMP HOLDER TO CALIBRATE ORIEL MONOCHROMATORS

77251 Calibration Lamp Holder with lamp mounted to 77250 1/8 m Monochromator.

The 77251 holds a spectral calibration lamp in front of the entrance slit of our 1/4 m or 1/8 m monochromators to calibrate the monochromator. See Volume II, page 201.

LAMP SHIELDS/FILTERS AND FIBER OPTIC ADAPTER

6058 Fiber Optic Adapter on rod and rod holder with Spectral Calibration Lamps and various Lamp Shields.

Lamp shields to aperture the radiating region and filters to absorb the ultraviolet lines while transmitting the visible are offered for these lamps. The 6058 Fiber Optic Adapter lets you collect and carry a portion of the lamp output via an SMA terminated single fiber. See Volume II, page 29 for information on these accessories.

Fig. 15 Typical line output of 6032 Neon Lamp. Relative intensities vary with operating conditions.

Fig. 16 Typical line output of 6032 Neon Lamp. Relative intensities vary with operating conditions.

Fig. 17 Typical line output of 6032 Neon Lamp. Relative intensities vary with operating conditions.

Fig. 18 Typical line output of 6032 Neon Lamp. Relative intensities vary with operating conditions.

Fig. 19 Typical line output of 6032 Neon Lamp. Relative intensities vary with operating conditions.

Fig. 20 Typical line output of 6032 Neon Lamp. Relative intensities vary with operating conditions.

Oriel
INSTRUMENTS

NEON/XENON LAMPS: SPECTRAL OUTPUT

Fig. 21 Typical line output of 6032 Neon Lamp. Relative intensities vary with operating conditions.

Fig. 22 Typical line output of 6033 Xenon Lamp. Relative intensities vary with operating conditions.

Oriel Instruments OTHER LITERATURE

Volume I

This volume describes the support hardware for our electro-optical equipment. Optical tables and benches, manual and motorized positioning equipment, fully programmable stand alone or computer driven micropositioning controllers, and a comprehensive line of optical mounts are just some of the products featured in this catalog.

Volume II

This catalog is the most valuable reference source for research with light. It is 528 pages full of technical data, application notes, detailed product listings, and complete spectral output curves on all our light sources. Volume II covers UV to IR light sources, monochromators/spectrographs, and detection systems.

Volume III

This catalog features a large selection of fiber optics and optical components as well as a wealth of practical information to help you design your own optical system. UV-IR lenses, filters, windows, beam splitters, polarizing components, prisms, and reflectors are offered.

New Products For Light Research

This new product guide features the latest instruments for making, moving and measuring light. You'll find pulsed sources, nitrogen lasers, calibrated irradiance sources, low cost to fully featured imaging monochromators and spectrographs, a full line of UV-IR detectors and detection systems including a digital lock-in and CCDs and ICCDs, and fiber optics. The catalog is filled with application notes, technical notes and detailed descriptions and specifications.

Making Light

Moving Light

Measuring Light

Oriel
INSTRUMENTS

250 Long Beach Blvd., Stratford, CT, U.S.A. Tel: (203)377-8282 Fax: (203)378-2457 E-Mail: res_sales@oriel.com URL: <http://www.oriel.com>

Apéndice B

Publicaciones derivadas de la tesis doctoral

Del trabajo realizado en esta tesis se han derivado cuatro publicaciones. La primera de las listadas más abajo, “Measurement of plasma electron density generated in an experiment of Laser Shock Processing, utilizing the $H\alpha$ -line”, es la que recoge los resultados obtenidos en esta investigación, mientras que las siguientes publicaciones fueron artículos que surgieron a partir de los cálculos y estudios requeridos de física teórica.

A todo lo anterior, hay que añadir una quinta publicación que está en fase de revisión:

- de Andrés-García, I., Moreno-Díaz, C., Porro, J.A., Alonso-Medina, A., Colón, C., and Ocaña, J.L. (2017) Diagnosis of plasma generated in an experiment of Laser Shock Processing, utilizing the $H\alpha$ -line. Journal of Materials Processing Technology.

Diagnosis of plasma generated in an experiment of Laser Shock Processing, utilizing the $H\alpha$ -line

I de Andrés-García¹, C Moreno-Díaz¹, J A Porro², A Alonso-Medina¹, C Colón¹ and J L Ocaña²

¹ Department of Applied Physics, ETSIDI, Universidad Politécnica de Madrid, Ronda de Valencia 3, 28012, Madrid, Spain

² Department of Applied Physics, ETSII, Universidad Politécnica de Madrid, José Gutiérrez Abascal 2, 28006, Madrid, Spain

E-mail: cristobal.colon@upm.es

ABSTRACT

Diagnosis of laser-induced plasma using the Balmer $H\alpha$ -line (656.27 nm) was performed, in this work, by emission spectroscopy in a laser shock processing experiment (LSP). A Q-switched laser of Nd:YAG) was focused on an aluminum sample (Al2024) in LSP conditions (water flow). The Stark width and shift of Balmer $H\alpha$ -line were used so as to determine the electron density and also the temperature in each of the cases studied. The novelty is that the measurement of the electronic temperature has been performed directly in the LSP experiments, without using a Boltzman plot in air. In order to obtain the best working conditions, different delay times after the pulse of the laser (2 to 5 μ s) and several light integration time windows (100 ns, 200 ns, 300 ns, 500 ns and 1000 ns), were used. In these experiments the electron density and the temperatures ranged between $1.2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ to $3.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ and 10000 K to 30000 K respectively.

Keywords: laser shock processing, plasma diagnosis, electron density, electronic temperature, hydrogen

A continuación se listan cronológicamente desde la más actual:

- Moreno-Díaz, C., Alonso-Medina, A., Colón, C., Porro, J.A., and Ocaña, J.L. (2016) Measurement of plasma electron density generated in an experiment of Laser Shock Processing, utilizing the $H\alpha$ -line. Journal of Materials Processing Technology, 232:9-18.
- Alonso-Medina, A., Colón, C., and Moreno-Díaz, C. (2015). Transition probabilities and radiative lifetimes of Mg III. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 102:64-78.
- Moreno-Díaz, C., Alonso-Medina, A., and Colón, C.(2014) Stark widths and shifts of spectral lines of $2p^5nf$ and $2p^55g$ configurations of Mg III Physica Scripta, 89:115401-115414.
- Colón, C., Moreno-Díaz, C., and Alonso-Medina, A. (2013). Theoretical Stark broadening parameters for spectral lines arising from the $2p^5ns$, $2p^5np$ and $2p^5nd$ electronic configurations of MgIII. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 435:1749-1757.

Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Materials Processing Technology

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jmatprotec

Measurement of plasma electron density generated in an experiment of Laser Shock Processing, utilizing the H α -line

C. Moreno-Díaz^a, A. Alonso-Medina^a, C. Colón^{a,*}, J.A. Porro^b, J.L. Ocaña^b^a Department of Applied Physics, ETSIDI, Universidad Politécnica de Madrid, Ronda de Valencia 3, 28012 Madrid, Spain^b Department of Applied Physics, ETSII, Universidad Politécnica de Madrid, José Gutiérrez Abascal 2, 28006 Madrid, Spain

ARTICLE INFO

Article history:

Received 8 September 2015

Received in revised form 21 January 2016

Accepted 26 January 2016

Available online 29 January 2016

Keywords:

Laser Shock Processing

Plasma diagnosis

Electron density

Hydrogen

ABSTRACT

In this work we have realized plasma diagnosis produced by Laser (LPP), by means of emission spectroscopy in a Laser Shock Processing (LSP). The LSP has been proposed as an alternative technology, competitive with classical surface treatments. The ionic species present in the plasma together with electron density and its temperature provide significant indicators of the degree of surface effect of the treated material. In order to analyze these indicators, we have realized spectroscopic studies of optical emission in the laser-generated plasmas in different situations. We have worked focusing on an aluminum sample (Al2024) in air and/or in LSP conditions (water flow) a Q-switched laser of Nd:YAG ($\lambda = 1.06 \mu\text{m}$, 10 ns of pulse duration, running at 10 Hz repetition rate). The pulse energy was set at 2.5 J per pulse. The electron density has been measured using, in every case, the Stark broadening of H Balmer α line (656.27 nm). In the case of the air, this measure has been contrasted with the value obtained with the line of 281.62 nm of Al II. Special attention has been paid to the self-absorption of the spectral lines used. The measures were realized with different delay times after the pulse of the laser (1–8 μs) and with a time window of 1 μs . In LSP the electron density obtained was between 10^{17} cm^{-3} for the shortest delays (4–6 μs), and 10^{16} cm^{-3} for the greatest delays (7.8 μs).

© 2016 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

The “Laser Shock Processing” (LSP) technique is based on focusing a high energy laser pulse ($I > 10^9 \text{ W/cm}^2$, $\tau < 50 \text{ ns}$) on a metallic piece what results in instant vaporization of its surface and the generation of high temperature and density plasma made of different ionized species of the elements present in the piece and in the atmosphere. The high pressure of plasma generates a shock wave which spreads into the piece affecting its mechanical features.

Since the early stages in the 70's, LSP has been consolidated as a competitive technique to improve the already mentioned features and the resistance to the corrosion of those metal surfaces used in the industry, which has turned it into a technique of practical use in industry and in engineering: stress waves generated by a giant pulsed laser were used by Fairand et al. (1972) to change in depth the microstructural and mechanical properties of 7075 aluminum. Pressures of about 10 GPa in air environment at standard conditions were obtained by using a pulsed laser of about 10^9 W/cm^2 , by Fairand and Clauer (1979), confirming that the confinement of the

surface with a transparent overlay provides an effective method of generating high-amplitude laser induced stress waves in the target material. The Laser Shock Processing of water-immersed material was developed, by Sano et al. (1997), for improving the residual surface stress of metal.

There are works focused on finding the best application conditions of the technique. Fabbro et al. (1990) established the three fundamental stages of evolution of plasma in an experiment of laser-produced plasma in confined geometry. In that study it indicated that during a time period of about twice the duration of the laser pulse is detected on the target high pressure. It is further noted that for later times, and while the plasma cools adiabatically, the pressure decreases and is too small to produce plastic deformation in the material. Berthe et al. (1997) indicated that this decrease in pressure was due to parasitic effects of the dielectric breakdown of the water when the laser irradiance exceeds 10 GW/cm^2 . Ocaña et al. (2004) presented a summary of different experimental results obtained from the LSP experiments, with some conclusions for the assessment of LSP technology as a profitable method for the extension of fatigue life in critical heavy duty components.

There are also works aimed to study theoretically some of the aspects involved in the physical processes present in LSP. A theoretical model was presented by Ocaña et al. (2000), in order to found

* Corresponding author.

E-mail addresses: cristobal.colon@upm.es, ccolonh@terra.es (C. Colón).

Fig. 1. (a) Experimental setup in an irradiation LSP experiment. (b) Detail indicating the relative movement of the sample to the measuring system.

the practical criteria to optimization of process. This model was later refined by [Morales et al. \(2008\)](#). A self closed thermal model for laser peening under water confinement regime was presented by [Wu and Shin \(2005\)](#). In this work the authors present several comparisons between their model and the experimental results for the peak pressure claiming that their model predicts number densities of electron that agree reasonable well with the experimental results. Nevertheless, theoretical works are far from being complete, since there is an important gap at predicting which the best conditions of application of LSP will be when trying to apply the technique to materials different from those previously studied. This is partly due to the physical processes involved.

One of the physical processes that should be deeply studied consists of the interaction between plasma and the surface of the material and how it can be affected by mechanisms different from the mere mechanical interaction with the shock wave. It is evi-

dent that the ionized species in the plasma will cause chemical attack on the surface of the sample. The presence of hydrogen in the plasma is a test of these chemical mechanisms. To study such process, it is necessary to know the properties of plasma generated by the interaction between the laser and the metallic surface. From the knowledge of electron density and electron temperature of the plasma it is possible to establish a balance of the relative presence of different ions in the plasma.

This type of plasma studies has been realized for years and they are known as Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS). A detailed study of laser induced plasmas and its applications were submitted by [Radziemski and Cremers \(1989\)](#). A earlier compilation of the applications of plasmas produced by laser for spectroscopic techniques was presented by [Noll \(2012\)](#). A more recent collection of experiments and applications of the LIBS technique were presented by [Musazzi and Perini \(2014\)](#).

LIBS is one of the most versatile methods which can be applied in multiple fields of science. [Cremers and Chinni \(2009\)](#), present an overview of the LIBS method, discussing its many advantages and some important limitations as an analytical method and how these relate to potential applications. It also outstands as an analytical technique in different industrial applications ([Noll et al., 2008](#)).

LIBS is based on the spectroscopic study of the emission of the present species in the plasma, and the advantage consists of obtaining its parameters and has been used by these authors in several works. Before, we have obtained temperature, electron density, atomic parameters and Stark broadening parameters in different laser induced plasma as: several parameter in aluminum plasma ([Colón et al., 1993](#)); transition probabilities of Pb III in lead plasma ([Colón et al., 1999](#)); Stark widths of spectral lines of Pb II in lead plasma ([Colón and Alonso-Medina, 2006](#)); transition probabilities of Pb Sn II in tin plasma ([Alonso-Medina et al., 2003](#)); Stark widths of several Pb III spectral lines in lead plasma ([Alonso-Medina and Colón, 2007](#)); Stark widths of several Sn I and Sn II spectral lines in tin plasma ([Alonso-Medina and Colón, 2008](#)); transition probabilities of Sn I in tin-lead plasma ([Alonso-Medina, 2010](#)) and recently the transition probabilities of Ca I in calcium-lead plasma ([Alonso-Medina, 2014](#)).

There are some thermo-fluid-dynamic models, which try and predict the temperature, the density of electrons of plasma and the pressure of the shock wave, such as the HELIOS package. This package is a “radiation-hydrodynamics 1-D code” used to simulate the dynamics of evolution of plasma ([Lyon and Johnson, 1992](#)). This code has proved its capacity to predict the pressure of the shock wave. However, this model fails spectacularly when diagnosing the plasma, because in case of working without water (LIBS experiments) it predicts lower temperatures than those measured, one order of magnitude lower than the experimentally measured ones, and electron densities much higher than the ones found. Possibly this code fails by not taking into account the different chemical mechanisms that take place in the plasma, and between the plasma and the target material. Therefore, in case of working in water flow,

Fig. 2. Photographic view of the LSP irradiation experimental setup.

this makes the measures of the parameters of plasma estimated by the HELIOS package do not look reliable a priori.

The difference, between the study presented in this paper and the studies mentioned, depends on the shielding the flow water applies on the emission of every present species in the plasma with a exception: the Hydrogen emission. Historically, the $H\alpha$ -line was successfully used to diagnose several kinds of plasmas. The earlier detection of $H\alpha$ -line was made by [Bogen and Lie \(1980\)](#) and was used for several measurements in vacuum by [Ashkenazy et al. \(1991\)](#). The same line was used to determine the electron density in a laser produced plasma in different conditions: in air (humid air by [El Sherbini et al., 2006](#) and atmospheric air by [De Giacomo et al., 2008](#)), in aqueous medium ([Escarguel et al., 2000](#)) and in a solid target in a liquid medium (water) (titanium target and sea water by [De Giacomo et al., 2004](#)).

In this work, by using the classical LIBS technique, the plasma density has been measured using $H\alpha$ -line. $H\alpha$ -line is a well isolated line, it gives large signal to background ratio, it lasts a long time after

Fig. 3. Image obtained via scanning confocal microscopy. A typical surface changed after a LSP experiment.

the termination of the laser (up to 10 μs), its Stark width is relatively large and does not exhibit self-absorption. This procedure has been realized in experiments with a sample of aluminum (Al2024) in every air, wet air and water flow. Also, where possible (air and wet air) other species have been used (Al II, Cu I, Mg I and Mg II) in an attempt to estimate the plasma temperature. All measures were realized with different delay times after the laser (4–8 μs) and with a measure time window of 1 μs .

In this paper we provide a method of experimental measurement of plasma parameters in LSP conditions, so they can be compared with the predictions of theoretical models and they can be tuned. That is why our study is carried out for long time, when the plasma is adiabatic cooling, the $\text{H}\alpha$ -line appears and we can measure using spectroscopic techniques.

2. Procedure and experimental setup

When a target is irradiated by an intense ($>1\text{ GW}/\text{cm}^2$) laser pulse, the surface layer vaporizes into a high temperature and pressure (1–10 GPa) plasma. The plasma induces shock waves during expansion from the irradiated surface and mechanical impulses are transferred to the target. If the plasma is confined by water or other medium, the shock pressure into the material can be magnified by a factor of 5 or more compared with the open air condition. These pressures are well above the yield stress of most metals, thus plastic deformation can be induced. As a result, if the peak shock pressure is over the Hugoniot elastic limit (HEL) of the target material for a sufficient time, compressive residual stress distribution in the surface of the irradiated volume can be induced as a consequence of the plastic. Water is usually used as a confining condition.

The experimental device is analogous to the one used by those authors in the LIBS experiments [12–17]. But we have to take into account the confining presence of water in the experiments for the plasma diagnosis in LSP conditions. A schematic diagram of the experimental set-up is shown in Fig. 1.

A Q-switched Nd-YAG laser (Quanta-Ray PRO 350 de Spectra-Physics) was used at the fundamental wavelength of 1.06 μm . The energy per pulse (10 ns width) was measured at the target surface and was found to be 2.5 J. An autofocus system with a simple lens ($f=20\text{ cm}$, biconvex) focuses the laser light on the sample. There is also a vessel a water supply system via hose connection, which offers a confining environment in permanent circulation and a programmable 3D positioning system, the sample is over it, which allows us to control the distances between the lens and the sample and thus the spot size. A photographic view can be seen in Fig. 2.

The target used is a certified aluminum based alloy (Al2024) with a Mg content of $\sim 1.5\%$. In our experiment, the spot size, measured at the target surface, was a circle of diameter $\sim 2\text{ mm}$. A typical surface changed after a LSP experiment can be seen in Fig. 3. It deduces that the irradiance of laser was around $10\text{ GW}/\text{cm}^2$.

The laser energy was monitored using a calibrated powermeter Ophir (F100A-HE-RP), utilizing the reflected part from a quartz beam splitter. The reflectance and absorption of the splitter were measured at the laser wavelength and found to be 5% and 3%, respectively. Emission spectra were acquired using a spectrograph (Horiba Jobin Yvon FHR1000) equipped with a CCD camera (Andor, model iStar 334T). This camera's CCD is bidimensional, 1024×1024 pixels ($26 \times 26\text{ }\mu\text{m}^2$ size per pixel) which has allowed us to study the plasma spatially. The camera is time controlled both in gate and delay with a maximum resolution of 100 ns. The spectrometer is equipped with a diffraction grating of 1800 grooves/mm and covers a wavelength region from 200 to 700 nm. The light emitted is transferred to the spectrograph using a quartz fiber cable of 0.5 mm diameter. The data was taken at the surface of the target up to 2 mm normal to the target surface (where the signal/noise ratio

Fig. 4. (a) Spectrally resolved image of the plasma at 5 μs after laser pulse with a wavelength range 653–659 nm and (b) Spectra extracted from this image of the $\text{H}\alpha$ -line in air.

was the best found). The wavelength scale was calibrated with a low pressure Hg-lamp (Oriel). The instrumental bandwidth (measured with the Hg-lamp) was found on the average to be $0.03 \pm 0.01\text{ nm}$ over the different wavelength regions. Also, we have calibrated the spectral response of the system (efficiency) between a 200 and 700 nm wavelength range by means of previously calibrated lamps which are a deuterium lamp used in the range of 190–400 nm and a tungsten lamp for the 350–700 nm range.

As an example of the spatial resolution of the images obtained, in Fig. 4a and b, we can see images of the plasma trace at 5 μs after laser pulse whose measures have been realized in air.

The obtained spectra were stored in a computer for further analysis. The radial distribution of the signal was obtained from the integrated data, obtained directly, using Abel inversion process. The spectra line analysis was performed by fitting the observed line shapes to numerically generated Voigt profiles, which consists of the convolution obtained with the Lorentz and Gauss profiles. For the plasma diagnostic, the area under each line profile from the aforementioned fitting represents the relative intensity. The identification of lines was realized using the NIST Tables (Kramida et al., 2014). The self-absorption analysis of the used spectral lines received special attention.

3. Results and discussion

We have obtained the plasma emission spectra in the range of 200–700 nm at different times after the laser pulse (1–8 μs). The

Fig. 5. Typical spectra for 278–286 nm in air at 5 μ s after laser pulse.

spectra were obtained in air, in air with a wet sample and also in LSP conditions (flow water over the sample). The main characteristic is that in the first two cases the spectra presents the emission of several atoms and species (Al I, Al II, Mg I, Mg II, Cu I, Cu II, H I . . .). A typical section of the spectra in these two first cases can be seen in Fig. 5, and as shown, it is analogous to the one presented by other authors in works realized in similar conditions (El Sherbini et al., 2012).

In Fig. 6a, you can see the spectra emitted by the plasma in the emission area of H α -line at different times and several conditions (air and LSP) after the laser pulse. As can be seen a long time in all cases appears the H α -line of Hydrogen. The hydrogen emission from metallic samples in air has already been found by other authors and has been widely discussed in the literature. Also, in LSP conditions the hydrogen H α -line, appears clearly at 4 μ s after the laser pulse. For example, In Fig. 6b, this very area is presented at 5 μ s after the laser pulse in different conditions: Plasma in air, plasma in air with a wet sample and plasma in LSP conditions (water flow).

As shown, the H α -line and the line 327.39 nm (second order) of Cu I only appear at long times (4 μ s after the laser pulse). Furthermore, in the presence of water in LSP conditions, the Cu I line disappears due to the shielding above mentioned. In air, and with wet target, traces of the emission of Cu I are still observed. Although expected the water should affect the plasma conditions, we have found, that at 5 μ s after the laser pulse, the profile and the position of the H α -line has remained unchanged indicating that at that time the electron density and the electron temperature plasma are identical within the experimental uncertainties.

As previously mentioned, the lines of interest in this work have been studied while fitting numerically Voigt profile in order to deduce its area and the Lorentz component of the width as shown in Fig. 7a, where the red solid curve is the fit of the experimental data (black color).

Fig. 7b shows the fittings obtained for the spectra measured at different distances from the plasma axis in the area of H α -line. As you can see, except for the differences linked to the lower intensity of the lines while going farther from the plasma axis, the profiles of H α -line (position of maximum and Full Width at Half

Maximum—FWHM) are similar within the experimental uncertainties. Similar result has been found in the area of 281 nm in case of plasma in air. As an example, Fig. 8a and b present the results obtained. Owing to this, when using the original data integrated to do Abel's inversion, the results of this treatment give us results in the profile of the lines which do not differ within the experimental uncertainties of the results obtained with the original data. These are the integrated data which have been used along the whole subsequent study.

Once this first step has been done, in order to estimate electrons temperature and density, we have studied possible self-absorptions of the lines.

3.1. Self-Absorption analysis

The self-absorption (SA) coefficient focused on line (λ_0) results from the expression (Lochte-Holtgreven, 1968; Griem, 1974; Konjevic, 1999).

$$SA = \frac{I(\lambda_0)}{I_0(\lambda_0)} = \frac{[1 - e^{-\kappa(\lambda_0)\ell}]}{[\kappa(\lambda_0)\ell]} \quad (1)$$

where $I(\lambda_0)$ is the relative intensity subject to self-absorption, $I_0(\lambda_0)$ is the same as the former, but without self-absorption, and $\kappa(\lambda_0)\ell = \tau(\lambda_0)$ is the plasma optical path until the center of the line.

On the other hand, as the self-absorption process affects FWHM $\Delta\lambda_0$ the SA in terms of ratio of the Lorentzian is given by El Sherbini et al. (2005):

$$SA = \left(\frac{\Delta\lambda}{\Delta\lambda_0} \right)^{1/\alpha} = \left(\frac{N_e(\text{line})}{N_e^*} \right)^{1/\alpha} \quad (2)$$

where $\alpha = -0.56$, $\Delta\lambda_0$ is the FWHM of the Lorentzian component without self absorption, $\Delta\lambda$ is the FWHM of the Lorentzian component distorted for the self absorption, N_e is the apparent electron density deduced from the self absorption distorted line and N_e^* is the real electron density.

Fig. 6. (a) H α -line emission at different delay times from laser pulse and (b) H α -line emission at 5 μ s after laser pulse.

Fig. 7. (a) Fitting from a Voigt profile to the experimental data and (b) Voigt profiles obtained at different distances away from the plasma axis. (For interpretation of the references to color in the text, the reader is referred to the web version of this article.)

In this work, you can observe that H α -line of Hydrogen is present in every spectrum obtained from different conditions, and it is the only one in the water flow case. In addition, in every case H α -line is perfectly symmetrical and does not present decrease in the center, this confirms self-absorption absence for this line (as shown in Fig. 6b). This fact had already been emphasized by El Sherbini et al. (2006). Besides, according to Griem, (1974), in plasmas with electron densities over 10^{17} cm^{-3} using this line is advantageous over using H β -line whose broadening can hardly be discerned from the ground.

Due to all this, H α -line is going to be used to estimate the real density of electrons in LSP experiments. Such a line will be also used to calculate SA coefficients of spectral lines of different species which can be of interest in successive analysis in this work.

In Fig. 6b, we can also see that in all three cases presented (5 μ s after laser pulse) H α -line does not widen or shift. This means that the electron density and the temperature are the same within the

experimental uncertainties in both three cases regardless of the amount of water.

3.2. Electron number density determination

In order to obtain the electron density from the H α -line, we have used the following expression, Ashkenazy et al., 1991:

$$N_e = 8.02 \times 10^{12} \left(\frac{\Delta\lambda_{1/2}}{\alpha_{1/2}} \right)^{3/2} \text{ cm}^{-3} \quad (3)$$

where $\Delta\lambda_{1/2}$ is the FWHM of the line in $\text{\AA}$, and $\alpha_{1/2}$ is half the width of the reduced Stark profiles in $\text{\AA}$ and it is a weak function of electron density and temperature through the ion-ion correlation and Debye-shielding correction and the velocity dependence of the impact broadening. Precise values of $(\alpha_{1/2})$ for the Balmer series can be found in (Griem, 1974; Kepple and Griem, 1968).

Fig. 8. (a) and (b) Data obtained at different distances from the plasma axis in the range of 270–290 nm for plasma in air 1 μ s after the laser pulse. Due to scale reasons, the results are presented in two sections.

As can be seen in the already mentioned references, $\alpha_{1/2}$ parameter is little sensitive to temperature. It is well known that for plasmas in air in experimental conditions analog to those in this work, temperature will be between 7000 and 13,000 K (El Sherbini et al., 2006; De Giacomo et al., 2008). In this work we have used the parameter given by Griem at a temperature of 10,000 K. This assumption will be justified later.

In order to calculate the Stark contribution, $\Delta\lambda_{1/2}$, to the measured lines width, a fitting of the lines to the Voigt profile was carried out. This has allowed us to find the Lorentz component where we discounted the Lorentz part of the instrumental profile. In addition, we have taken into account the different broadening mechanisms. The most important mechanism, the Doppler broadening, was discounted to dispense with the Gauss profile of the Voigt. In our conditions, other broadening mechanisms are irrelevant.

In addition, with this expression, we have estimated the electron density profile in the plasma axis (z axis, see Fig. 1a) verifying again the possibility of working just with integrated values. The spatially resolved profiles of the electron density along the z axis at 5 μ s delay from the laser pulse (in LSP conditions) are shown in Fig. 9. The uncertainty present in this figure is underestimated: includes the error on the value of FWHM determined by fitting (3–5%) and does not include the possible error provided by the approximation of the coefficient $\alpha_{1/2}$. The result obtained with integrated values for 5 μ s (in LSP conditions) as shown hereafter in Table 1 is $1.36 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. This result, obtained from the integrated values, is a correct supposition, as supports Fig. 9. For the rest of the delay times, we have only worked with integrated values.

The results achieved through this procedure are shown in Table 1. In the first column we have different delay times from the laser pulse. In the second column, the broadening of those studied conditions is displayed. At last, in the third column the corresponding electron densities are shown. It is well known that for electron densities over $30 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, other authors (Ashkenazy et al., 1991) have seen how self-absorption processes start to appear. Therefore, the electron densities obtained in our work are

coherent with our former explanation: H α -line does not present self-absorption.

Attempts have been made to verify the electron density in the case of plasma in air using line 281.62 nm of Al II which is usually used in aluminum plasmas. Then, we have used Griem expression:

$$N_e = \frac{\Delta\lambda_{1/2}}{\omega_{\text{ref}}} \times 10^{16} \quad (4)$$

where $\Delta\lambda_{1/2}$ is the FWHM of the line in Å, and ω_{ref} is the impact broadening factor (normalized at 10^{16} cm^{-3}) and N_e is the electron number density. By using the impact broadening factor measured by Colón et al. (1993), we obtain a value $\sim 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. This value is about twice higher that obtained with the H α -line. This discrepancy seems to indicate that the lines of Al II are self-absorbed what is not advisable to be used in our case. As conditions of self-absorption of lines of different species are different, the lines of Al II may be self-absorbed, although it is not the case of H α -line. The difference between the electron densities obtained with the H α -line and electron densities obtained with the lines of Al II, allow us, as shown below, correct the self-absorption of the intensity of these lines.

3.3. Electron temperature

Electron temperature could be estimated through the Boltzmann plot method under the assumption that the plasma is in local thermodynamic equilibrium (LTE) (Griem, 1974; Griem, 1997) by using:

$$I_{ij}^{\lambda} = \frac{A_{ij}g_i}{U(T)} N \exp\left(\frac{-E_i}{kT}\right) \quad (5)$$

$$\ln\left(\frac{I_{ij}^{\lambda}}{A_{ij}g_i}\right) = \ln\left(\frac{N}{U(T)}\right) - \frac{E_i}{kT}$$

for a transition from a higher state i to a lower state j , I_{ij}^{λ} is the integrated measured integral line intensity in counts per second, A_{ij}

Fig. 9. Space-resolved of the plasma electron density measurement from the Stark broadening of H Balmer α line in LSP conditions.

Table 1

Density of plasma electrons studied in this work in different (air, wet target and LSP) and at different times.

Delay time after laser pulse, τ (μs)	FWHM ($\Delta\lambda_{1/2}$) $\text{\AA}$			$N_e (10^{17} \text{ cm}^{-3})$		
	Air	Wet target	LSP	Air	Wet target	LSP
4	$14.33 \pm 3\%$	$14.53 \pm 3\%$		$1.72 \pm 3\%$	$1.75 \pm 3\%$	
5	$13.11 \pm 3\%$	$13.18 \pm 5\%$	$12.30 \pm 4\%$	$1.50 \pm 3\%$	$1.51 \pm 5\%$	$1.36 \pm 4\%$
6			$11.79 \pm 3\%$			$1.28 \pm 3\%$
7			$9.13 \pm 3\%$			$0.87 \pm 3\%$
8			$9.06 \pm 3\%$			$0.86 \pm 3\%$

is the transition probability, λ is the wavelength of the transition, E_i is the excited level energy and g_i is the energy and statistical weight of level i , $U(T)$ is the atomic species partition function, N is the total density of emitting atoms, k is the Boltzmann constant and T is the temperature in K. If we were to plot $\ln(I_{ij}\lambda/A_{ij}g_i)$ vs. E_i , for lines of known transition probability (Boltzmann plot), the resulting straight line would have a slope $-1/kT$, and therefore the temperature could be obtained without having to know the total density of atoms or the atomic species partition function.

In LSP experiments, temperature cannot be directly determined through this procedure because as already mentioned, the presence of flow water shields, the emission of every species but hydrogen. However, it will be estimated with the results obtained from an experiment in air in identical conditions as the LSP experiment. As we mentioned above, the profile and the position H α -line is identical in both cases, Fig. 6b, what, as mentioned before, allows us to extrapolate the temperatures from one to the other. Therefore, temperature in air has been estimated. In order to estimate the temperature in air, we have used, as usual, the spectra in the range of 270–290 nm, where several lines of Mg II appear. Spectral lines used in the Boltzmann plot along with the transition probabilities and the energies corresponding to different starting levels, are presented in Table 2. Also, Table 2 shows the ω_{ref} (impact broadening

factors) measured by different authors and necessary for the line self-absorption corrections.

To estimate absorption, we have adjusted Voigt profiles to such lines to determine its Lorentz broadening and to get, through equation (1) apparent electron densities (N_e^*). Thus, and compared with the electron density and the H α -line (N_e), we will get, using equation (2), the corresponding self-absorption coefficients (SA) in every line. Finally, with these coefficients, we will estimate the relative intensity in the limit of nule self-absorption (negligible self-absorption), $I_0(\lambda_0)$.

In this work, when there are 5 μs after laser pulse, the result (using values $I(\lambda_0)$) before correcting the lines self-absorption has been $19,400 \pm 1000$ K for $\Delta E = 4.442$ eV. Once the self-absorption has been corrected (using $I_0(\lambda_0)$) we have obtained $10,900 \pm 1000$ K. These results can be seen in Fig. 10. In our calculations the uncertainty present includes the statistical error on the fitting in the temperature value and the statistical uncertainty in the intensities ($\sim 3\%$).

This procedure has been repeated for different times (4–8 μs) obtaining temperatures between 12,000 and 9000 K. These results are consistent choosing $\alpha_{1/2}$ parameter which is used to determine the electron density since H α -line. These values, obtained in air, are considered to be an estimate of the LSP case.

Table 2

Parameters of Mg II spectral lines used for electron temperature determination and for the line self-absorption corrections (experiments in air).

Transition	λ (nm)	E_i (eV) ^b	$A_{ij}(10^8 \text{ s}^{-1})^a$	$\omega_{\text{ref}}(\text{pm}) N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
$2p^6 3p \ ^2P_{1/2} \rightarrow 2p^6 3s \ ^2S_{1/2}$	280.270	4.422	2.57	$3.9 \pm 5.5\%$ ($T = 14,260$) ^c
$2p^6 3p \ ^2P_{3/2} \rightarrow 2p^6 3s \ ^2S_{1/2}$	279.553	4.434	2.60	$4.7 \pm 4\%$ ($T = 14,260$) ^c
$2p^6 3d \ ^2D_{3/2} \rightarrow 2p^6 3p \ ^2P_{3/2}$	279.799	8.863	4.79	$16.6 \pm 12\%$ ($T = 30,000$) ^d
$2p^6 3d \ ^2D_{3/2} \rightarrow 2p^6 3p \ ^2P_{1/2}$	270.078	8.864	4.01	$16.6 \pm 12\%$ ($T = 30,000$) ^d

^a Kramida et al., 2014.^b Moore, 1958.^c Goldbach et al., 1982.^d Djeniže et al., 2004. **Fig. 10.** Boltzmann plot for Mg II spectral lines from laser induced plasma (Al 2024 target) in air. Spectra was recorded at 5 μs delay time from laser pulse.

McWhirter's criterion (McWhirter, 1965) was used to check the condition for the validity of the LTE. The electron number densities determined in our experiments are well within the range where the LTE conditions are valid, equation:

$$N_e \geq 1.6 \times 10^{12} T^{1/2} (\Delta E)^3 \quad (6)$$

with $N_e(\text{cm}^{-3})$ the electron number density, $T(\text{K})$ the plasma temperature and $\Delta E(\text{eV})$ the difference in the energy between the upper and lower state of all the investigated transitions.

4. Conclusion

A Q-switched laser of Nd:YAG (of 2.5 J per pulse) focused on an aluminum sample (Al2024), in different situations (in air, wet sample and LSP conditions), has been used for the plasma diagnosis produced by laser (LPP). The Stark broadening of the H α -line of Hydrogen (656.27 nm) has been used to estimate the electron density of plasmas obtained in different conditions and particularly in LSP conditions.

In the case of air, we have tried measured the electron densities with the profile of the 281.62 nm line of Al II. The results indicate us that this line, in our conditions, presents self-absorption and its usage is inadvisable. In order to make temperature estimation Mg II in air lines have been used, prior self-absorption quantification.

The measures were realized with different delay times after the laser pulse (1–8 μs) and with a time window measure of 1 μs . The electron density obtained in the LSP case was in the range of

10^{17} cm^{-3} for the shortest delays until 10^{16} cm^{-3} for greater delays. We have found, at 5 μs after the laser pulse, the profile and the position of the H α -line has remained unchanged indicating that at that time the electron density and the electron temperature plasma are identical within the experimental uncertainties. A temperature around 11,000 K at 5 μs after delay pulse has been estimated for plasmas in LSP conditions through extrapolation of temperatures in air.

Acknowledgment

This work has been supported by the Spanish DGI project MAT2012-37782.

References

- Alonso-Medina, A., Colón, C., Herrán-Martínez, C., 2003. Transition from autoionized single-ionized tin states: a theoretical study of the $5s5p \ ^3P^o \ n\ell$ ($n\ell = 5d, 6s$) levels of Sn II. *Astrophys. J.* 595, 550–554.
- Alonso-Medina, A., Colón, C., 2007. Stark widths of several Pb III spectral lines in a laser-induced lead plasma. *A&A* 466, 399–402.
- Alonso-Medina, A., Colón, C., 2008. Measured Stark widths of several Sn I and Sn II spectral lines in a laser induced plasma. *Astrophys. J.* 672, 1286–1291.
- Alonso-Medina, A., 2010. A spectroscopic study of laser-induced tin-lead plasma: transition probabilities for spectral lines of Sn I. *Spectrochim. Acta B* 65, 158–166.
- Alonso-Medina, A., 2014. Application of laser induced plasma spectroscopy to the measurement of transition probabilities of Ca I. *J. Spectrosc. Dynamics* 4, 15.

- Ashkenazy, J., Kipper, R., Cane, R.M., 1991. Spectroscopic measurements of electron density of capillary plasma based on Stark broadening of hydrogen lines. *Phys. Rev. A* 43 (10), 5568–5574.
- Bogen, P., Lie, Y.T., 1980. Detection of atomic hydrogen by resonance fluorescence using two-step excitation with $\text{Ly}\alpha$ and $\text{H}\alpha$ radiation. *J. Nucl. Mater.* 93–94, 363–367.
- Berthe, L., Fabbro, R., Peyre, P., Tollier, L., Bartnicki, E., 1997. Shock waves from a water-confined laser-generated plasma. *J. Appl. Phys.* 82 (6), 2826–2833.
- Colón, C., Hatem, G., Verdugo, E., Ruiz, P., Campos, J., 1993. Measurement of the Stark broadening and shift parameters for several ultraviolet lines of singly ionized aluminum. *J. Appl. Phys.* 73 (10), 4752–4758.
- Colón, C., Alonso-Medina, A., Herrán-Martínez, C., 1999. Spectroscopic study of a laser-produced lead plasma: experimental atomic transitions probabilities for Pb III lines. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* 32, 3887–3897.
- Colón, C., Alonso-Medina, A., 2006. Application of a laser produced plasma: experimental Stark widths of single ionized lead lines. *Spectrochim. Acta B* 61, 856–863.
- Cremers, A.D., Chinni, R.C., 2009. Laser-induced breakdown spectroscopy—capabilities and limitations. *App. Spectrosc. Rev.* 44, 457–506.
- De Giacomo, A., Dell’Aglio, M., Colao, F., Fantoni, R., 2004. Double pulse laser produced plasma on metallic target in sea water basic aspects and analytical approach. *Spectrochim. Acta Part B* 59, 1431–1438.
- De Giacomo, A., Dell’Aglio, M., Gaudioso, R., Cristoforetti, G., Legnaioli, S., Palleschi, V., Tognoni, E., 2008. Spatial distribution of hydrogen and other emitters in aluminum laser-induced plasma in air and consequences on spatially integrated laser-induced breakdown spectroscopy measurements. *Spectrochim. Acta B* 63 (3), 980–987.
- Djenize, S., Bukvić, S., Srećković, A., Platiša, M., 2004. Mg II spectral line broadening in helium, oxygen and argon-helium plasmas. *A&A* 424, 561–564.
- El Sherbini, A., El Sherbini, M., Th.M. Heagzy, H., Cristoforetti, G., Legnaioli, S., Palleschi, V., Pardini, L., Salvetti, A., Tognoni, E., 2005. Evaluation of self-absorption of aluminum emission lines in laser-induced breakdown spectroscopy measurements. *Spectrochim. Acta B* 60, 1573–1579.
- El Sherbini, A.M., Heagzy, H., El Sherbini, Th. M., 2006. Measurement of electron density utilizing the $\text{H}\alpha$ -line from laser produced plasma in air. *Spectrochim. Acta B* 61, 532–539.
- El Sherbini, A.M., Al Amer, A.A.S., Hassan, A.T., El Sherbini, Th. M., 2012. Measurements of plasma electron temperature utilizing magnesium lines appeared in laser produced aluminum plasma in air. *Optics Photonics J.* 2, 278–285.
- Escarguel, A., Ferha, B., Lesage, A., Richou, J., 2000. A single laser spark in aqueous medium. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 64, 353–361.
- Fabbro, R., Fournier, J., Ballard, P., Devaux, D., Virmont, J., 1990. Physical study of laser-produced plasma in confined geometry. *J. Appl. Phys.* 68 (2), 775–784.
- Fairand, B.P., Wilcox, B.A., Gallagher, W.J., Williams, D.N., 1972. Laser shock-induced microstructural and mechanical property changes in 7075 aluminum. *J. Appl. Phys.* 43, 3893–3895.
- Fairand, B.P., Clauer, A.H., 1979. Laser generation of high-amplitude stress waves in materials. *J. Appl. Phys.* 50, 1497–1502.
- Goldbach, C., Nollez, G., Plomdeur, P., Zimmermann, J.P., 1982. Stark-width measurements of neutral and singly ionized magnesium resonance lines in a wall-stabilized arc. *Phys. Rev. A* 25, 2596–2605.
- Griem, H.R., 1974. *Spectral Line Broadening by Plasmas*. Academic Press, New York.
- Griem, H.R., 1997. *Principles of Plasma Spectroscopy*. Cambridge University Press, United Kingdom.
- Kepple, P., Griem, H.R., 1968. Improved Stark profile calculations for the hydrogen lines H_α , H_β , H_γ and H_δ . *Phys. Rev.* 173, 317–325.
- Konjevic, N., 1999. Plasma broadening and shifting of non hydrogenic spectral line: present status and applications. *Phys. Rep.* 316, 339–401.
- Kramida, A., Ralchenko, Y., Reader, J., 2014. NIST ASD team. In: NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.2). National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD [Online Available 2015, January 15] <http://physics.nist.gov/asd>.
- Lochte-Holtgreven, W., 1968. *Plasma Diagnostics*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam.
- Lyon, S.P., Johnson, J.D., 1992. *SESAME: The Los Alamos National Laboratory Equation of State Database*, Technical Report, LA-UR-92-3407. Los Alamos National Laboratory, Los Alamos NM.
- McWhirter, R.W.P., 1965. In: Huddleston, R.H., Leonard, S.L. (Eds.), *Plasma Diagnostic Techniques*. Academic, New York, Chapter 5.
- Moore, C.E., 1958. *Atomic energy levels*. In: NBS 467. U. S. GPO, Washington DC.
- Morales, M., Ocaña, J.L., Molpeceres, C., Porro, J.A., García-Beltrán, A., 2008. Model based optimization criteria for the generation of deep compressive residual stress fields in high elastic limit metallic alloys by ns-laser shock processing. *Surf. Coat. Tech.* 202, 2257–2262.
- Musazzi, S., Perini, U., 2014. *Laser Induced Breakdown Spectroscopy Theory and Applications*. Springer-Verlag, Berlin.
- Noll, R., Sturm, V., Aydin, Ü., Eilers, D., Gehlen, C., Höhne, M., Lamott, A., Makowe, J., Vrenegor, J., 2008. Laser-induced breakdown spectroscopy—from research to industry, new frontiers for process control. *Spectrochim. Acta B* 63, 1159–1166.
- Noll, R., 2012. *Laser-induced Breakdown Spectroscopy*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- Ocaña, J.L., Molpeceres, C., Morales, M., García-Beltrán, A., 2000. Model for the coupled predictive assessment of plasma expansion and material compression in laser shock processing applications high-power laser ablation. *II Proc. SPIE* 3885, 252–265.
- Ocaña, J.L., Molpeceres, C., Porro, J.A., Gómez, G., Morales, M., 2004. Experimental assessment of the influence of irradiation parameters on surface deformation and residual stresses in laser shock processed metallic alloys. *Appl. Surf. Sci.* 238, 501–505.
- Radziemski, L.J., Cremers, D.A., 1989. *Laser-induced Plasma and Applications*. Dekker, New York.
- Sano, Y., Mukai, N., Okazaki, K., Obata, M., 1997. Residual stress improvement in metal surface by underwater laser irradiation. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 121, 432–436.
- Wu, B., Shin, C., 2005. A self-closed thermal model for laser shock peening under the water confinement regime configuration and comparisons to experiments. *J. App. Phys.* 97, 113517.

Contents lists available at ScienceDirect

Atomic Data and Nuclear Data Tables

journal homepage: www.elsevier.com/locate/adt

Transition probabilities and radiative lifetimes of Mg III

A. Alonso-Medina, C. Colón*, C. Moreno-Díaz

Dpto. de Física Aplicada, E.T.S.I.D.I. (old EUIT Industrial), Universidad Politécnica de Madrid, Calle Ronda de Valencia 3, C.P.28012 Madrid, Spain

ARTICLE INFO

Article history:

Received 11 July 2014

Received in revised form

12 December 2014

Accepted 13 December 2014

Available online 12 January 2015

Keywords:

Atomic data

Atomic processes

Transition probabilities

ABSTRACT

There have been calculated transition probabilities for 365 lines arising from $2p^5ns$ ($n = 3, 4, 5$), $2p^5np$ ($n = 3, 4$), $2p^5nd$ ($n = 3, 4$), $2p^5nf$ ($n = 4, 5$) and $2p^55g$ configurations of Mg III and radiative lifetimes corresponding to 89 levels. These values were obtained in intermediate coupling (IC) by using *ab initio* relativistic Hartree–Fock (HFR) calculations. Later, we use the standard method of least square fitting of experimental energy levels for the IC calculations by means of Cowan's computer codes. The vast majority of the calculated transition probabilities correspond to lines lying in the ultraviolet range (UV) which are of high interest in astrophysics. Our results are compared to those previously reported in the literature. Furthermore, the values of transition probabilities of configuration levels $2p^54d$, $2p^5nf$ ($n = 4, 5$) and $2p^55g$ are presented for the first time. In light of these findings, it is possible to extend the range of wavelengths which allows us to estimate the temperature in plasma diagnostic. In addition, our results for radiative lifetimes have been compared to the available experimental values.

© 2014 Elsevier Inc. All rights reserved.

* Corresponding author.

E-mail address: crisobal.colon@upm.es (C. Colón).<http://dx.doi.org/10.1016/j.adt.2014.12.004>

0092-640X/© 2014 Elsevier Inc. All rights reserved.

Contents

1. Introduction.....	65
2. Method of calculation	66
3. Results.....	66
4. Conclusions.....	67
Acknowledgment	67
References.....	67
Explanation of Tables	68
Table 1. Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^5ns$ ($n = 3, 4, 5$) configurations of Mg III.....	68
Table 2. Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^5np$ ($n = 3, 4$) configurations of Mg III.....	68
Table 3. Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^5nd$ ($n = 3, 4$) configurations of Mg III.....	68
Table 4. Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^5nf$ ($n = 4, 5$) configurations of Mg III.....	68
Table 5. Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^55g$ configurations of Mg III.....	68
Table 6. Radiative lifetimes (τ in ns) of Mg III levels.....	68

1. Introduction

Atomic data, for the neutral and ionized species of the neon isoelectronic sequence, play a significant role in a variety of physical processes occurring in astrophysical applications and also in many industrial applications. Transition probabilities of different lines for several elements have been used in the analysis of stellar abundances. Magnesium has been detected in the solar spectra [1, 2] and is also present in the atmosphere and surface of Europa [3]. It is also one of the best observed elements in late-type stars and magnesium seems to be an important element to study the history of nucleosynthesis in the universe [4]. Przybilla et al. [5] indicate that, more specifically, magnesium is a choice specie for the determination of stellar α -elements abundance. It is well known that the ionization equilibrium of MgI/II is a sensible temperature indicator for early A-stars at all luminosities. Moreover, the determination of the abundance of magnesium in astrophysical plasmas by non-LTE calculations [6] are affected by the depopulation of excited Mg II levels which produce an overpopulation of Mg III states. A good knowledge of the levels and of the atomic parameters of Mg III may shed light into the depopulation processes of Mg II and adjust the load balancing based on Mg I/II. Very recent studies show the presence of the UV lines of Mg I, 285.3 nm, and Mg II, 279.6 nm and 280.3 nm, in galaxies [7]. Then, a further study of the Mg III at extended wavelengths should be performed to estimate the parameters of stellar plasmas.

In addition, it is one of the most abundant elements on earth, with multiple applications. At industrial level, magnesium improves the industrial properties of several materials [8]. It is, therefore, present in many alloys of industrial interest which turns it into a good candidate for the diagnosis of the properties of plasmas produced by laser (LSP) with these materials. The LSP technique has been recently used in the study of biodegradable implants made with Mg-Ca alloys, adding interest to the behavior of the atomic parameters of magnesium species [9].

The spectrum of Mg III has been previously studied by several authors. Andersson and Johannesson [10] completed an earlier work made by Söderqvist [11] and Sulmont and Felenbok [12] using an extended analysis of the spectrum of Mg III. Subsequently, Lundström [13] made the accurate measurements of ns and nd ground term combinations. Autoionization spectra of Mg III were studied by Esteva and Mehman [14] and Kastner et al. [15]. An exhaustive compilation of experimental wavelengths and energy levels of Mg III was carried out by Martin and Zalubas [16] and Kaufman and Martin [17]. Later, new lines of Mg III between 156 and 166 Å were presented by Brown et al. [18].

According to Moore [19], in their compilation Martin and Zalubas used the most appropriate notation to describe the energy levels: jI coupling or LS coupling. This notation has been adopted in this manuscript.

We have been able to find theoretical values of transition probabilities for the oscillator strengths in the literature. Gruzdev and Loginov [20] obtained oscillator strengths of the resonance series $2p^6-2p^5ns$ of Mg III ions. Later, they calculated [21], by using Hartree-Fock functions, the transition probabilities of $2p^5np-2p^5ms$ ($n = 3, 4$; $m = 3, 4, 5$) of Mg III. Besides, Ganas and Green [22] obtained oscillator strengths using a potential model. Afterwards, Hibbert et al. [23], Hibbert et al. [24], Verner et al. [25], Das [26], Verner et al. [27], Savukov [28], Froese Fischer and Tachiev [29] calculated oscillator strengths or transition probabilities of some lines of Mg III. Also Kelleher and Podobedova [30] presented a work compiling the different values. Very recently, Jönsson et al. [31], published new relativistic calculations including core-core correlations and core-valence effects.

Theoretical lifetimes of levels of Mg III corresponding to $2p^5ns$ ($n = 3, 4, 5$), $2p^5mp$ ($m = 3, 4, 5$), $2p^5nd$ ($n = 3, 4$) and $2p^54f$ configurations, were calculated by Gruzdev and Loginov [32]. Besides, Bureeva and Safronova [33] and Ceyzeriat [34] have also published several works on this subject. Andersen et al. [35] presented experimental radiative lifetimes, measured by using the beam-foil excitation technique, of eight levels of $2p^53p$ configuration of Mg III. Moreover, in Andersen et al. [36] six of these values were revised and were also provided new measures eliminating the cascade contribution. Five levels of the $2p^54p$ and $2p^53s$ configurations were obtained from the investigation of beam-foil spectra of Mg III by using a heavy ion accelerator by Lundin et al. [37]. Later, Buchet et al. [38] and Träbert [39] made new measures of the levels and lifetimes of the $2p^53s$ configuration. Curtis et al. [40] presented measurements and database predictions for the $\Delta n = 1$ resonance and intercombination transitions in the Ne sequences.

In this work, we present the calculation of the transition probabilities for 365 lines of Mg III arising from levels corresponding to $2p^5ns$ ($n = 3, 4, 5$), $2p^5np$ ($n = 3, 4$), $2p^5nd$ ($n = 3, 4$), $2p^5nf$ ($n = 4, 5$) and $2p^55g$ configurations. The vast majority of the transition probabilities correspond to lines lying in the ultraviolet range (UV) which are of high interest in astrophysics. Then, we have calculated transition probabilities for lines arising from $2p^5nf$ ($n = 4, 5$) and with wavelengths 132.9583, 134.8342, 134.9132, 186.5636, 188.2308, 190.0043 and 193.8249 nm. These lines, with high transition probabilities, are mentioned at NIST [41] and a priori, seem easily measurable and may be, therefore, of high interest for astrophysical and industrial applications.

With the results obtained from these calculations, it is possible to obtain other spectroscopic parameters, such as the Stark broadening parameters. It is well known that the calculations of these parameters, can be carried out using the semiempirical approach if an exhaustive set of the transition probabilities is available. In this way, we have used our results in Moreno-Díaz et al. [42].

We also include the lifetimes of several levels corresponding to the configuration mentioned above. These lifetimes have been compared to the available experimental values.

Fig. 2. Measured and calculated lifetime values versus effective quantum numbers for $2p^5 3p$ and $2p^5 4p$ states.

$2p^5 4p$ states. In this figure, we can observe that our values are in good agreement with the experimental values and that the lifetimes of these states display an almost exponential decrease with the increase of effective quantum numbers n^* .

Transition probabilities, calculated in this work, allow us to extend the wavelength range, where we can estimate the plasma temperature by using Mg III lines (under the assumption of local thermodynamic equilibrium (LTE) and by using the Boltzmann plot method). Thus, for example, in the wavelength range of 132–145 nm, we find the lines 132.9583, 134.8342 and 134.9132 nm (arising from levels of $2p^5 5f$ configuration), the lines 135.0156, 136.5788, 137.8700, 139.3391 and 140.5170 nm (arising from levels of $2p^5 4s$ configuration) and the line 144.6254 nm (arising from levels of $2p^5 3p$ configuration) which represent an energy difference between its upper levels of ~ 7.5 eV. Also in the wavelength range of 185 nm at 195 nm, we can find the lines 186.5636, 188.2308, 189.0380, 190.0043 and 193.8249 nm (arising from levels of the $2p^5 4f$ configuration), the lines 185.8186, 187.9492 and 190.8500 nm (arising from levels of the $2p^5 3p$ configuration) and the lines 186.8225, 188.7308 and 191.8777 nm (arising from the $2p^5 3d$ levels of configuration) with an energy difference between its upper levels of ~ 6.5 eV.

Calculated Stark broadening parameters [49] are available for several above mentioned lines. These values and the results of this paper can enable us to extend the wavelength range where there is a possible diagnosis of the temperature as well as the electron density of plasmas in LSP experiments.

4. Conclusions

We present theoretical transition probabilities for 365 lines and lifetimes corresponding to 89 levels of Mg III with focus on the ultraviolet range of wavelengths. Our values for lifetimes are in reasonable agreement with experimental values. We have reported,

for the first time, the values of transition probabilities of levels of $2p^5 4d$, $2p^5 nf$ ($n = 4, 5$) and $2p^5 5g$ configurations. With the values calculated for the $2p^5 nf$ ($n = 4, 5$) we can extend the wavelength range where it is possible to estimate plasma temperature. This is quite important, because the UV range can be required in some experiments, especially when specific experimental equipment is available or when very intense UV lines are present.

Acknowledgment

This work has been supported by the Spanish DGI project MAT2012-37782.

References

- [1] G.A. Doschek, R.D. Cowan, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 56 (1984) 67.
- [2] K.K. Larsen, A. Trinquier, Ch. Paton, M. Schiller, D. Wielandt, M.A. Ivanova, J.N. Connelly, Å. Nordlund, A.N. Krot, M. Bizzarro, *Astrophys. J. Lett.* (2011) 735.
- [3] S.M. Höst, M.E. Brown, *Astrophys. J. Lett.* 764 (2013) L28.
- [4] L. Mashonkina, *A&A* 550 (2013) A28.
- [5] N. Przybilla, K. Butler, S.R. Becker, R.P. Kudritzki, *A&A* 369 (2001) 1009.
- [6] N. Przybilla, K. Butler, S.R. Becker, R.P. Kudritzki, *A&A* 445 (2006) 1099.
- [7] D.K. Erb, A.M. Quider, A.L. Henry, C.L. Martin, *Astrophys. J.* 759 (2012) 26.
- [8] A. Singh, S.P. Harimpkar, *J. Mineral Metals Mater. Soc.* 64 (2012) 716.
- [9] M.P. Sealy, Y.B. Guo, *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* 3 (2010) 288.
- [10] E. Andersson, G.-Å. Johannesson, *Phys. Scr.* 3 (1971) 203.
- [11] J. Söderqvist, *Nova Acta Reg. Soc. Sci. Upsalien* 9 (1934) 1.
- [12] M.C. Sulmont, P. Felenbok, *Annales Astrophys.* 30 (1967) 315.
- [13] T. Lundström, *Phys. Scr.* 7 (1973) 62.
- [14] J.M. Esteva, G. Mehlman, *Astrophys. J.* 193 (1974) 747.
- [15] S.O. Kastner, A.M. Crooker, W.E. Behring, L. Cohen, *Phys. Rev. A* 16 (1977) 577.
- [16] W.C. Martin, R. Zalubas, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 9 (1980) 20.
- [17] V. Kaufman, C. Martin, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 20 (1991) 105.
- [18] C.M. Brown, A.E. Kramida, U. Feldman, J. Reader, *Phys. Scr.* 80 (2009) 065302.
- [19] C.E. Moore, *Atomic Energy Levels* 213 (1958) NBS Circular, Washington DC.
- [20] P.F. Gruzdev, A.V. Loginov, *Opt. Spektrosk.* 33 (1972) 558.
- [21] P.F. Gruzdev, A.V. Loginov, *Opt. Spektrosk.* 44 (1978) 353.
- [22] P.S. Ganas, A.E.S. Green, *J. Chem. Phys.* 73 (1980) 3891.
- [23] A. Hibbert, M. Le Dourneuf, M. Mohan, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 53 (1993) 23.
- [24] A. Hibbert, M.P. Scott, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 27 (1994) 1315.
- [25] D.A. Verner, P.D. Barthel, D. Tytler, *A&A Suppl. Ser.* 108 (1994) 287.
- [26] K. Das, *Astrophys. J.* 468 (1996) 445.
- [27] D.A. Verner, E.M. Verner, G.J. Ferland, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 64 (1996) 1.
- [28] I.M. Savukov, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 36 (2003) 4789.
- [29] C. Froese Fischer, G. Tachiev, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 87 (2004) 1.
- [30] D.E. Kelleher, L.I. Podobedova, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 37 (2008) 559.
- [31] P. Jönsson, P. Bengtsson, J. Ekman, S. Gustafsson, L.B. Karlsson, G. Gaigalas, C. Froese Fischer, D. Kato, I. Murakami, H.A. Sakae, H. Hara, T. Watanabe, N. Nakamura, N. Yamamoto, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 100 (2014) 1.
- [32] P.F. Gruzdev, A.V. Loginov, *Opt. Spektrosk.* 45 (1978) 1050.
- [33] L.A. Bureeva, U.I. Safronova, *Phys. Scr.* 20 (1979) 81.
- [34] P. Ceyzeriat, *J. Opt. Soc. Am.* 72 (1982) 110.
- [35] T. Andersen, J. Dessesquelles, K.A. Jensen, G. Sørensen, *Phys. Rev. A* 1 (1970) 1294.
- [36] T. Andersen, A. Petrakiev Petkov, G. Sørensen, *Phys. Scr.* 12 (1975) 283.
- [37] L. Lundin, B. Engman, J. Hilke, I. Martinson, *Phys. Scr.* 8 (1973) 274.
- [38] J.P. Buchet, M.C. Buchet-Poulizac, P. Ceyzeriat, *Phys. Lett.* 77 (1980) 424.
- [39] E. Träbert, *Phys. Scr.* 53 (1996) 167.
- [40] L.J. Curtis, S.T. Maniak, R.W. Ghrist, R.E. Irving, D.G. Ellis, M. Henderson, M.H. Kacher, E. Träbert, J. Granzow, P. Bengtsson, L. Engström, *Phys. Rev. A* 51 (1995) 4575.
- [41] A. Kramida, Y. Ralchenko, J. Reader, NIST ASD Team, *NIST Atomic Spectra Database* (ver. 5.1), [Online]. Available: 2014, January 29. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (2013).
- [42] C. Moreno-Díaz, A. Alonso-Medina, C. Colón, *Phys. Scr.* 89 (2014) 115401.
- [43] C. Colón, A. Alonso-Medina, *A&A* 422 (2004) 1109.
- [44] C. Colón, A. Alonso-Medina, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 43 (2010) 165001.
- [45] A. Alonso-Medina, C. Colón, A. Zanón, *MNRAS* 395 (2009) 567.
- [46] C. Colón, A. Alonso-Medina, P. Porcher, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 100 (2014) 272.
- [47] R.D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, Los Angeles, 1981.
- [48] W.C. Martin, W.L. Wiese, *Atomic, Molecular and Optical Physics Handbook, Atomic Spectroscopy*, AIP Press, Woodbury, NY, 1996, (Chapter 10).
- [49] C. Colón, C. Moreno-Díaz, A. Alonso-Medina, *MNRAS* 435 (2013) 1749.

Explanation of Tables

Table 1.	Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^5ns$ ($n = 3, 4, 5$) configurations of Mg III.
First and Second columns	Transition levels, the lower and upper levels.
Third column	Wavelength, in nm.
Fourth column	Our transition probabilities in s^{-1} .
Fifth, Sixth, Seventh and Eighth columns	Other authors transition probabilities in s^{-1} .
Ninth column	Relationship between our value and the value provided by Fischer & Tachiev [29].
Table 2.	Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^5np$ ($n = 3, 4$) configurations of Mg III.
First and Second columns	Transition levels, the lower and upper levels.
Third column	Wavelength, in nm.
Fourth column	Our transition probabilities in s^{-1} .
Fifth, Sixth, Seventh and Eighth columns	Other authors transition probabilities in s^{-1} .
Ninth column	Relationship between our value and the value provided by Fischer & Tachiev [29].
Table 3.	Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^5nd$ ($n = 3, 4$) configurations of Mg III.
First and Second columns	Transition levels, the lower and upper levels.
Third column	Wavelength, in nm.
Fourth column	Our transition probabilities in s^{-1} .
Fifth, Sixth, Seventh and Eighth columns	Other authors transition probabilities in s^{-1} .
Ninth column	Relationship between our value and the value provided by Fischer & Tachiev [29].
Table 4.	Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^5nf$ ($n = 4, 5$) configurations of Mg III.
First and Second columns	Transition levels, the lower and upper levels.
Third column	Wavelength, in nm.
Fourth column	Our transition probabilities in s^{-1} .
Table 5.	Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^55g$ configurations of Mg III.
First and Second columns	Transition levels, the lower and upper levels.
Third column	Wavelength, in nm.
Fourth column	Our transition probabilities in s^{-1} .
Table 6.	Radiative lifetimes (τ in ns) of Mg III levels.
First column	Numbers assigned to each level.
Second column	Energy of each level, in cm^{-1} .
Third column	Our radiative lifetimes.
Fourth column	Other authors radiative lifetimes.
Fifth column	Relationship between our calculated values and the values provided by Andersen et al. [36] and Buchet et al. [38].

Table 1

 Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^5ns$ ($n = 3, 4, 5$) configurations of Mg III.

Transition		Wavelength	Transition probabilities, A_{ki} (10^8 s^{-1})				$\frac{A_{ki}^{[4]}}{A_{ki}^{[ref]}}$
Upper level	Lower level	$\lambda(\text{nm})^{[1]}$	This work	Other authors			
$2p^5 3s \ ^3P_1$	$2p^6 \ ^1S_0$	23.42631	8.53		4.7 ^[4]		0.55
$2p^5 3s \ ^1P_1$	$2p^6 \ ^1S_0$	23.17333	131.54	99.0 ^[3]	91.6 ^[4]	4.98 ^[5]	0.69
$2p^5 ({}^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_2$	$2p^5 3p \ ^3S_1$	127.4831	2.19		2.52 ^[4]		1.15
	$2p^5 3p \ ^3D_3$	139.3391	6.03		6.38 ^[4]		1.06
	$2p^5 3p \ ^3D_2$	140.5170	1.45		1.54 ^[4]		1.06
	$2p^5 3p \ ^3D_1$	142.2118	0.16		0.18 ^[4]		0.89
	$2p^5 3p \ ^1D_2$	146.2305	1.03		1.21 ^[4]		1.17
	$2p^5 3p \ ^1P_1$	148.2670	0.19		0.16 ^[4]		0.84
	$2p^5 3p \ ^3P_2$	149.3097	1.15		1.02 ^[4]		0.89
	$2p^5 3p \ ^3P_1$	150.6826	0.36		0.39 ^[4]		1.08
	$2p^6 \ ^1S_0$	18.29717	12.45		8.22 ^[4]		0.66
	$2p^5 3p \ ^3S_1$	126.3375	1.20		1.47 ^[4]		1.22
$2p^5 ({}^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_1$	$2p^5 3p \ ^3D_2$	139.1271	4.26		4.62 ^[4]		1.08
	$2p^5 3p \ ^3D_1$	140.7880	1.86		2.15 ^[4]		1.16
	$2p^5 3p \ ^1D_2$	144.7260	2.36		2.21 ^[4]		0.94
	$2p^5 3p \ ^1P_1$	146.7188	1.05		0.94 ^[4]		0.89
	$2p^5 3p \ ^3P_2$	147.7416	0.22		0.28 ^[4]		1.27
	$2p^5 3p \ ^3P_0$	148.6624	0.77		0.80 ^[4]		1.04
	$2p^5 3p \ ^3P_1$	149.0855 ^a	0.0017		0.017 ^[4]		10
	$2p^5 3p \ ^1S_0$	197.9430	0.73		0.41 ^[4]		0.56
	$2p^5 3p \ ^3S_1$	123.9827	1.54		1.82 ^[4]		1.18
	$2p^5 3p \ ^3D_1$	137.8700	5.34		5.32 ^[4]		0.99
$2p^5 ({}^2P_{1/2})4s \ ^2[1/2]_0$	$2p^5 3p \ ^1P_1$	143.5550	2.95		3.03 ^[4]		1.03
	$2p^5 3p \ ^3P_1$	145.8172	2.72		3.21 ^[4]		1.18
	$2p^6 \ ^1S_0$	18.22415	23.15		17.27 ^[4]		0.75
	$2p^5 3p \ ^3S_1$	122.9389	0.54		0.57 ^[4]		1.06
	$2p^5 3p \ ^3D_2$	135.0156	0.50		0.35 ^[4]		0.70
	$2p^5 3p \ ^3D_1$	136.5788 ^b	0.37		0.28 ^[4]		0.76
	$2p^5 3p \ ^1D_2$	140.2820	2.46		2.43 ^[4]		0.99
	$2p^5 3p \ ^1P_1$	142.1538	1.03		1.46 ^[4]		1.42
	$2p^5 3p \ ^3P_2$	143.1136	3.86		4.29 ^[4]		1.11
	$2p^5 3p \ ^3P_0$	143.9770	0.35		0.35 ^[4]		1.00
$2p^5 ({}^2P_{1/2})4s \ ^2[1/2]_1$	$2p^5 3p \ ^3P_1$	144.3738	1.84		1.81 ^[4]		0.98
	$2p^5 3p \ ^1S_0$	189.7226	1.42		1.02 ^[4]		0.72
	$2p^5 3p \ ^3S_1$	82.3788	1.32				
	$2p^5 3p \ ^3D_3$	87.1720	2.78				
	$2p^5 3p \ ^3D_2$	87.6312	0.64				
	$2p^5 3p \ ^1D_2$	89.8207	0.38				
	$2p^5 3p \ ^3P_2$	90.9730	0.39				
	$2p^5 3p \ ^3P_1$	91.4805 ^a	0.12				
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[1/2]_1$	347.3424	0.72				
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[5/2]_3$	370.6745	1.64				
$2p^5 ({}^2P_{3/2})5s \ ^2[3/2]_2$	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[5/2]_3$	375.3714	0.43				
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[3/2]_1$	387.0456	0.49				
	$2p^5 ({}^2P_{1/2})4p \ ^2[3/2]_2$	414.7487	0.027				
	$2p^5 ({}^2P_{1/2})4p \ ^2[1/2]_1$	415.9041	0.031				
	$2p^6 \ ^1S_0$	16.97411	0.035				
	$2p^5 3p \ ^3S_1$	82.1369	0.56				
	$2p^5 3p \ ^3D_2$	87.3580	1.59				
	$2p^5 3p \ ^3D_1$	88.0107	0.66				
	$2p^5 3p \ ^1D_2$	89.5324	1.06				
	$2p^5 3p \ ^1P_1$	90.2923	0.49				
$2p^5 ({}^2P_{3/2})5s \ ^2[3/2]_1$	$2p^5 3p \ ^3P_0$	91.0237 ^a	0.17				
	$2p^5 3p \ ^1S_0$	107.3944 ^a	0.12				
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[1/2]_1$	343.076	0.28				
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[5/2]_2$	370.3930	1.09				
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[3/2]_1$	377.3572	0.73				
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[3/2]_2$	381.7575	0.67				
	$2p^5 3p \ ^3S_1$	80.9024 ^a	1.04				
	$2p^5 3p \ ^3D_1$	86.5935	2.56				
	$2p^5 3p \ ^1P_1$	88.8023 ^a	1.16				
	$2p^5 3p \ ^3P_1$	89.6640	1.01				
$2p^5 ({}^2P_{1/2})5s \ ^2[1/2]_0$	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[1/2]_1$	322.5141 ^a	0.31				
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[3/2]_1$	352.6279 ^a	0.34				
	$2p^5 ({}^2P_{1/2})4p \ ^2[3/2]_1$	374.5030	1.86				
	$2p^5 ({}^2P_{1/2})4p \ ^2[1/2]_1$	380.8073	0.91				
	$2p^6 \ ^1S_0$	16.91406	0.44				
	$2p^5 3p \ ^3S_1$	80.7479 ^a	0.56				
	$2p^5 3p \ ^3D_2$	85.7885 ^a	0.59				

(continued on next page)

Table 1 (continued)

Transition		Wavelength	Transition probabilities, A_{ki} (10^8 s^{-1})		$\frac{A_{ki}^{[4]}}{A_{ki}^{Ritz}}$
Upper level	Lower level	$\lambda(\text{nm})^{[1]}$	This work	Other authors	
	$2p^5 3p \ ^3D_1$	86.4171 ^a	0.34		
	$2p^5 3p \ ^1D_2$	87.8847	0.62		
	$2p^5 3p \ ^1P_1$	88.6158	0.27		
	$2p^5 3p \ ^3P_2$	88.9888	1.52		
	$2p^5 3p \ ^3P_0$	89.3213 ^a	0.23		
	$2p^5 3p \ ^3P_1$	89.4744	0.68		
	$2p^5 ({}^2P_{3/2}) 4p \ ^2[1/2]_1$	320.0720 ^a	0.16		
	$2p^5 ({}^2P_{3/2}) 4p \ ^2[1/2]_0$	371.350	0.12		
	$2p^5 ({}^2P_{3/2}) 4p \ ^2[3/2]_2$	353.491	0.062		
	$2p^5 ({}^2P_{1/2}) 4p \ ^2[3/2]_1$	371.2093 ^a	0.36		
	$2p^5 ({}^2P_{1/2}) 4p \ ^2[3/2]_2$	376.4539	1.65		
	$2p^5 ({}^2P_{1/2}) 4p \ ^2[1/2]_1$	377.406	0.55		
	$2p^5 ({}^2P_{1/2}) 4p \ ^2[1/2]_0$	473.6142 ^a	0.13		

^[1] NIST [41] observed; ^[3] Verner et al. [27]; ^[4] Froese Fischer & Tachiev [29]; ^[5] Kelleher & Podobedova [30]; ^[6] Jönsson et al. [31].

^a Theoretical wavelengths obtained from energy levels of Martin & Zalubas [16].

^b NIST [41] Ritz.

Table 2

Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^5np$ ($n = 3, 4$) configurations of Mg III.

Transition		Wavelength	Transition Probabilities, A_{ki} (10^8 s^{-1})				$\frac{A_{ki}^{[4]}}{A_{ki}^{[5]}}$
Upper level	Lower level	$\lambda(\text{nm})^{[1]}$	This work	Other authors			
$2p^5 3p \ ^3S_1$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	239.5149	1.89	1.67 ^[4]	1.67 ^[5]	1.74 ^[6]	0.88
	$2p^5 3s \ ^3P_1$	246.7751	0.78	0.69 ^[4]	0.69 ^[5]	0.72 ^[6]	0.88
	$2p^5 3s \ ^3P_0$	252.9190	0.22	0.19 ^[4]	0.19 ^[5]	0.20 ^[6]	0.86
	$2p^5 3s \ ^1P_1$	278.869 ^b	0.017	0.0097 ^[4]	0.0097 ^[5]	0.010 ^[6]	0.57
$2p^5 3p \ ^3D_3$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	206.4902	4.27	4.21 ^[4]	4.21 ^[5]	4.26 ^[6]	0.99
$2p^5 3p \ ^3D_2$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	203.9553	1.54	1.54 ^[4]	1.54 ^[5]	1.55 ^[6]	1.00
	$2p^5 3s \ ^3P_1$	209.1963	2.69	2.58 ^[4]	2.57 ^[5]	2.61 ^[6]	0.96
$2p^5 3p \ ^3D_1$	$2p^5 3s \ ^1P_1$	231.8125	0.018	0.044 ^[4]	0.044 ^[5]	0.045 ^[6]	2.44
	$2p^5 3s \ ^3P_2$	200.4860	0.31	0.33 ^[4]	0.33 ^[5]	0.34 ^[6]	1.06
	$2p^5 3s \ ^3P_1$	205.5491	2.33	2.35 ^[4]	2.35 ^[5]	2.38 ^[6]	1.01
	$2p^5 3s \ ^3P_0$	209.7936	1.63	1.50 ^[4]	1.50 ^[5]	1.51 ^[6]	0.92
	$2p^5 3s \ ^1P_1$	227.3414	0.00064	0.013 ^[4]	0.013 ^[5]	0.013 ^[6]	203
$2p^5 3p \ ^1D_2$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	193.0672	1.54	1.69 ^[4]	1.70 ^[5]	1.72 ^[6]	1.09
	$2p^5 3s \ ^3P_1$	197.7554	0.53	0.49 ^[4]	0.49 ^[5]	0.51 ^[6]	0.92
	$2p^5 3s \ ^1P_1$	217.7694	2.40	2.12 ^[4]	2.12 ^[5]	2.11 ^[6]	0.88
$2p^5 3p \ ^1P_1$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	189.6304	0.56	0.42 ^[4]	0.42 ^[5]	0.41 ^[6]	0.75
	$2p^5 3s \ ^3P_1$	194.1500	0.54	0.33 ^[4]	0.33 ^[5]	0.32 ^[6]	0.61
	$2p^5 3s \ ^3P_0$	197.9327	1.31	1.22 ^[4]	1.22 ^[5]	1.23 ^[6]	0.93
	$2p^5 3s \ ^1P_1$	213.4054	2.24	2.36 ^[4]	2.36 ^[5]	2.36 ^[6]	1.05
$2p^5 3p \ ^3P_2$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	187.9492	2.09	1.76 ^[4]	1.76 ^[5]	1.72 ^[6]	0.84
	$2p^5 3s \ ^3P_1$	192.3896	1.32	1.38 ^[4]	1.37 ^[5]	1.36 ^[6]	1.05
	$2p^5 3s \ ^1P_1$	211.2773	1.67	1.68 ^[4]	1.69 ^[5]	1.73 ^[6]	1.01
$2p^5 3p \ ^3P_0$	$2p^5 3s \ ^3P_1$	190.8500	5.32	5.16 ^[4]	5.15 ^[5]	5.16 ^[6]	0.97
	$2p^5 3s \ ^1P_1$	209.4207	0.16	0.12 ^[4]	0.12 ^[5]	0.12 ^[6]	0.75
$2p^5 3p \ ^3P_1$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	185.8186	1.22	1.28 ^[4]	1.28 ^[5]	1.27 ^[6]	1.05
	$2p^5 3s \ ^3P_1$	190.1572	0.47	0.55 ^[4]	0.55 ^[5]	0.55 ^[6]	1.17
	$2p^5 3s \ ^3P_0$	193.7843	1.36	1.46 ^[4]	1.46 ^[5]	1.46 ^[6]	1.07
	$2p^5 3s \ ^1P_1$	208.5891	2.02	1.61 ^[4]	1.61 ^[5]	1.61 ^[6]	0.80
$2p^5 3p \ ^1S_0$	$2p^5 3s \ ^3P_1$	144.6254	0.52		0.41 ^[5]	0.44 ^[6]	
	$2p^5 3s \ ^1P_1$	155.082	10.68	10.54 ^[2]	10.40 ^[5]	11.14 ^[6]	
$2p^5 (^2P_{3/2})4p \ ^2[1/2]_1$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	74.4342	0.72				
	$2p^5 3s \ ^3P_1$	75.1207	0.29				
	$2p^5 3s \ ^3P_0$	75.6808	0.077				
	$2p^5 3d \ ^3P_0$	335.3729	0.19				
	$2p^5 3d \ ^3P_1$	338.1236	0.48				
	$2p^5 3d \ ^3P_2$	344.4409	0.52				
	$2p^5 (^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_2$	705.6876	0.39				
	$2p^5 (^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_1$	742.9846	0.095				
	$2p^5 3d \ ^3P_1$	295.0773	0.37				
	$2p^5 3d \ ^3D_1$	332.1060	1.07				
$2p^5 (^2P_{3/2})4p \ ^2[1/2]_0$	$2p^5 3d \ ^1P_1$	355.1638	0.26				
	$2p^5 (^2P_{3/2})4s \ ^2[1/2]_1$	641.7036	0.14				
	$2p^5 3s \ ^3P_2$	73.4441	0.72				
	$2p^5 3d \ ^3F_4$	330.6392	1.15				
	$2p^5 3d \ ^3F_3$	333.6190	0.096				
	$2p^5 3d \ ^3F_2$	343.8623	0.0096				
	$2p^5 3d \ ^1F_3$	346.7912	0.15				
	$2p^5 3d \ ^3D_3$	371.9838	0.039				
	$2p^5 3d \ ^3D_2$	375.5606	0.012				
	$2p^5 (^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_2$	625.6750	0.69				
$2p^5 (^2P_{3/2})4p \ ^2[5/2]_3$	$2p^5 3s \ ^3P_2$	73.2625	0.25				
	$2p^5 3s \ ^3P_1$	73.9276	0.42				
	$2p^5 3s \ ^1P_1$	76.5655	0.074				
	$2p^5 3d \ ^3P_2$	320.6948	0.037				
	$2p^5 3d \ ^3F_3$	329.9050	1.09				
	$2p^5 3d \ ^3F_2$	339.9188	0.26				
	$2p^5 3d \ ^1F_3$	342.7794	0.00034				
	$2p^5 3d \ ^3D_1$	357.8273	0.022				
	$2p^5 3d \ ^3D_2$	370.8609	0.019				
	$2p^5 3d \ ^1D_2$	365.4040	0.032				
$2p^5 (^2P_{3/2})4p \ ^2[3/2]_1$	$2p^5 (^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_2$	612.7392	0.29				
	$2p^5 (^2P_{3/2})4s \ ^2[3/2]_1$	640.6619	0.40				
	$2p^5 3s \ ^3P_1$	73.6563	0.41				
	$2p^5 3s \ ^3P_0$	74.1932	0.082				
	$2p^5 3s \ ^1P_1$	76.2756	0.14				
	$2p^5 3d \ ^3P_0$	308.0208	0.037				
	$2p^5 3d \ ^3P_2$	315.6506	0.069				
	$2p^5 3d \ ^3F_2$	334.2577	0.99				
	$2p^5 3d \ ^3D_1$	351.5602	0.40				

(continued on next page)

Table 2 (continued)

Transition		Wavelength	Transition Probabilities, A_{ki} (10^8 s^{-1})		$\frac{A_{ki}^{[4]}}{A_{ki}^{diff}}$
Upper level	Lower level	λ (nm) ^[1]	This work	Other authors	
$2p^5(^2P_{3/2})4p^2[3/2]_2$	$2p^53d^3D_2$	364.1320	0.022		
	$2p^5(^2P_{3/2})4s^2[3/2]_2$	594.5873	0.11		
	$2p^5(^2P_{3/2})4s^2[3/2]_1$	620.8440	0.55		
	$2p^53s^3P_2$	72.8337	0.24		
	$2p^53s^1P_1$	76.0981	0.23		
	$2p^53d^3P_1$	307.423	0.10		
	$2p^53d^3P_2$	312.6380	0.40		
	$2p^53d^3F_3$	321.3845	0.040		
	$2p^53d^1F_3$	333.5905	0.97		
	$2p^53d^3D_3$	356.8385	0.049		
$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[3/2]_1$	$2p^53d^3D_2$	360.1288	0.084		
	$2p^5(^2P_{3/2})4s^2[3/2]_2$	583.9820	0.45		
	$2p^5(^2P_{3/2})4s^2[3/2]_1$	609.2912	0.29		
	$2p^53s^3P_1$	75.3247	0.34		
	$2p^53d^3P_2$	299.9710	0.033		
	$2p^53d^3F_2$	316.7251	0.042		
	$2p^53d^3D_2$	343.4236	0.0041		
	$2p^53d^1D_2$	338.7368	1.25		
	$2p^53d^1P_1$	355.2933	0.16		
	$2p^5(^2P_{1/2})4s^2[1/2]_0$	615.0082	0.41		
$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[3/2]_2$	$2p^5(^2P_{1/2})4s^2[1/2]_1$	642.1224	0.25		
	$2p^53s^1P_1$	75.1121	0.53		
	$2p^53d^3P_1$	291.9351	0.035		
	$2p^53d^3P_2$	296.6338	0.094		
	$2p^53d^1F_3$	315.4336	0.11		
	$2p^53d^3D_3$	336.1412	1.16		
	$2p^53d^3D_2$	339.0577	0.072		
	$2p^53d^1D_2$	334.4899	0.11		
	$2p^5(^2P_{3/2})4s^2[3/2]_2$	530.5206	0.051		
	$2p^5(^2P_{3/2})4s^2[3/2]_1$	551.3255	0.022		
$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[1/2]_1$	$2p^5(^2P_{3/2})4s^2[1/2]_1$	627.0250	0.66		
	$2p^53s^3P_1$	72.5347	0.062		
	$2p^53d^3P_0$	289.3221	0.070		
	$2p^53d^3P_1$	291.3657	0.059		
	$2p^53d^3P_2$	296.0453	0.079		
	$2p^53d^3D_2$	338.2901	1.16		
	$2p^53d^1P_1$	349.7994	0.28		
	$2p^5(^2P_{3/2})4s^2[3/2]_2$	528.6389	0.12		
	$2p^5(^2P_{3/2})4s^2[1/2]_0$	598.7370	0.24		
	$2p^5(^2P_{3/2})4s^2[1/2]_1$	624.4024	0.40		
$2p^5(^2P_{1/2})4p^2[1/2]_0$	$2p^53s^1P_1$	72.1592	1.22		
	$2p^53d^3D_1$	278.352	0.20		
	$2p^53d^1P_1$	294.3707	1.07		
	$2p^5(^2P_{3/2})4s^2[3/2]_1$	423.9468	0.48		
	$2p^5(^2P_{3/2})4s^2[1/2]_1$	467.3303	1.27		

^[1] NIST [41] observed; ^[2] Hibbert et al. [23]; ^[4] Froese Fischer & Tachiev [29]; ^[5] Kelleher & Podobedova [30]; ^[6] Jönsson et al. [31]^aTheoretical wavelengths obtained from energy levels of Martin & Zalubas [16].^b NIST [41] Ritz.

Table 3

 Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^5nd$ ($n = 3, 4$) configurations of Mg III.

Transition		Wavelength	Transition probabilities, A_{ki} (10^8 s^{-1})				$\frac{A_{ki}^{[4]}}{A_{ki}^{[6]}}$
Upper level	Lower level	$\lambda(\text{nm})^{[1]}$	This work	Other authors			
$2p^53d \ ^3P_0$	$2p^53p \ ^3S_1$	159.2360	8.57	8.53 ^[4]	8.53 ^[5]	8.51 ^[6]	0.99
	$2p^53p \ ^3D_1$	182.8974	0.47	0.50 ^[4]	0.49 ^[5]	0.57 ^[6]	1.06
	$2p^53p \ ^1P_1$	193.0374	1.04	0.83 ^[4]	0.83 ^[5]	0.78 ^[6]	0.8
	$2p^53p \ ^3P_1$	197.1514	1.90	2.06 ^[4]	2.06 ^[5]	1.99 ^[6]	1.08
$2p^53d \ ^3P_1$	$2p^6 \ ^1S_0$	18.85296	2.69	2.0 ^[4]	2.5 ^[5]	1.9 ^[6]	0.74
	$2p^53p \ ^3S_1$	158.6237	8.05	8.01 ^[4]	8.02 ^[5]	8.01 ^[6]	0.99
	$2p^53p \ ^3D_2$	179.3207	0.36	0.33 ^[4]	0.34 ^[5]	0.41 ^[6]	0.92
	$2p^53p \ ^3D_1$	182.0896	0.026	0.030 ^[4]	0.031 ^[5]	0.023 ^[6]	1.15
	$2p^53p \ ^1D_2$	188.7308	0.67	0.76 ^[4]	0.76 ^[5]	0.76 ^[6]	1.13
	$2p^53p \ ^1P_1$	192.1374	0.30	0.23 ^[4]	0.23 ^[5]	0.23 ^[6]	0.77
	$2p^53p \ ^3P_2$	193.8936	1.004	0.89 ^[4]	0.89 ^[5]	0.83 ^[6]	0.89
	$2p^53p \ ^3P_0$	195.4831	0.77	0.80 ^[4]	0.79 ^[5]	0.74 ^[6]	1.04
	$2p^53p \ ^3P_1$	196.2145	0.72	0.78 ^[4]	0.78 ^[5]	0.76 ^[6]	1.08
	$2p^53p \ ^1S_0$	290.5419	0.0056	0.0068 ^[2]	0.0068 ^[5]	0.0052 ^[6]	
	$2p^53p \ ^3S_1$	157.2712	6.52	6.92 ^[4]	6.92 ^[5]	6.93 ^[6]	0.94
	$2p^53p \ ^3D_3$	175.7176	0.23	0.20 ^[4]	0.20 ^[5]	0.28 ^[6]	0.87
$2p^53d \ ^3P_2$	$2p^53p \ ^3D_2$	177.5942	0.13	0.13 ^[4]	0.13 ^[5]	0.11 ^[6]	1.00
	$2p^53p \ ^3D_1$	180.3087	0.084	0.10 ^[4]	0.10 ^[5]	0.10 ^[6]	1.19
	$2p^53p \ ^1D_2$	186.8225	1.78	1.94 ^[4]	1.94 ^[5]	1.94 ^[6]	1.09
	$2p^53p \ ^1P_1$	190.1572	0.39	0.38 ^[4]	0.38 ^[5]	0.37 ^[6]	0.97
	$2p^53p \ ^3P_2$	191.8777	2.21	1.98 ^[4]	1.98 ^[5]	1.88 ^[6]	0.89
	$2p^53p \ ^3P_1$	194.1500	0.082	0.12 ^[4]	0.12 ^[5]	0.099 ^[6]	1.46
	$2p^53p \ ^3D_3$	173.8835	11.93	11.37 ^[4]	11.4 ^[5]	11.40 ^[6]	0.95
	$2p^53p \ ^3D_3$	173.0733	1.32	1.03 ^[2]	1.04 ^[5]		
	$2p^53p \ ^3D_2$	174.8932	9.29	8.71 ^[4]	8.71 ^[5]	8.73 ^[6]	0.94
	$2p^53p \ ^1D_2$	183.8336	0.81	1.09 ^[4]	1.09 ^[5]	1.08 ^[6]	1.35
	$2p^53p \ ^3P_2$	188.7255 ^a	0.24			0.25 ^[6]	
	$2p^53p \ ^3D_3$	170.4368	0.19	0.18 ^[4]	0.18 ^[5]	0.18 ^[6]	0.95
$2p^53d \ ^3F_2$	$2p^53p \ ^3D_2$	172.2041	3.44	3.23 ^[4]	3.23 ^[5]	3.26 ^[6]	0.94
	$2p^53p \ ^3D_1$	174.7561	7.22	7.38 ^[4]	7.38 ^[5]	7.35 ^[6]	1.02
	$2p^53p \ ^1D_2$	180.865 ^b	0.0050	0.00085 ^[4]	0.00086 ^[5]	0.0007 ^[6]	0.17
	$2p^53p \ ^1P_1$	183.9878	0.76	0.45 ^[4]	0.46 ^[5]	0.47 ^[6]	0.60
	$2p^53p \ ^3P_2$	185.599	0.13		0.093 ^[5]	0.094 ^[6]	
	$2p^53p \ ^3D_3$	169.7282	2.22	2.14 ^[4]	2.14 ^[5]	2.19 ^[6]	0.96
$2p^53d \ ^1F_3$	$2p^53p \ ^3D_2$	171.4783	0.20	0.47 ^[4]	0.48 ^[5]	0.45 ^[6]	2.35
	$2p^53p \ ^1D_2$	180.0662	8.74	8.21 ^[4]	8.21 ^[5]	8.24 ^[6]	0.94
	$2p^53p \ ^3P_2$	184.7561	0.042	0.037 ^[4]	0.037 ^[5]	0.029 ^[6]	0.88
	$2p^6 \ ^1S_0$	18.71977	148.13	113.6 ^[2]	125.7 ^[4]	125.7 ^[5]	0.85
$2p^53d \ ^3D_1$	$2p^53p \ ^3D_2$	167.9470	0.63	0.59 ^[4]	0.59 ^[5]	0.60 ^[6]	0.94
	$2p^53p \ ^3D_1$	170.3731	3.06	2.98 ^[4]	2.98 ^[5]	3.02 ^[6]	0.97
	$2p^53p \ ^1D_2$	176.1740	0.0072	0.0031 ^[4]	0.0032 ^[5]	0.0018 ^[6]	2.32
	$2p^53p \ ^1P_1$	179.1375	2.24	2.33 ^[4]	2.32 ^[5]	2.20 ^[6]	1.04
	$2p^53p \ ^3P_2$	180.663 ^b	0.037	0.044 ^[4]	0.044 ^[5]	0.045 ^[6]	1.19
	$2p^53p \ ^3P_0$	182.0421	3.56	2.98 ^[4]	2.98 ^[5]	3.10 ^[6]	0.84
	$2p^53p \ ^3P_1$	182.6750	0.20	0.13 ^[4]	0.13 ^[5]	0.16 ^[6]	0.65
	$2p^53p \ ^1S_0$	261.8011	0.62	0.87 ^[4]	0.88 ^[5]	0.69 ^[6]	1.40
	$2p^53p \ ^3S_1$	148.3715 ^b	0.00028	0.0095 ^[4]	0.0095 ^[5]	0.011 ^[6]	33.9
	$2p^53d \ ^3D_3$	164.6803 ^b	0.059	0.039 ^[4]	0.039 ^[5]	0.039 ^[6]	0.66
	$2p^53p \ ^3D_2$	166.3287	0.18	0.17 ^[4]	0.17 ^[5]	0.15 ^[6]	0.94
	$2p^53p \ ^3D_1$	168.7091	2.31	1.41 ^[4]	1.41 ^[5]	1.44 ^[6]	0.61
$2p^53d \ ^1D_2$	$2p^53p \ ^1D_2$	174.3947	0.26	0.38 ^[4]	0.37 ^[5]	0.38 ^[6]	1.46
	$2p^53p \ ^1P_1$	177.2982	7.34	7.67 ^[4]	7.67 ^[5]	7.66 ^[6]	1.04
	$2p^53p \ ^3P_2$	178.7927	1.31	1.46 ^[4]	1.46 ^[5]	1.47 ^[6]	1.11
	$2p^53p \ ^3D_3$	164.2826	0.69	0.91 ^[4]	0.92 ^[5]	0.90 ^[6]	1.32
	$2p^53p \ ^3D_2$	165.9244	1.10	0.85 ^[4]	0.85 ^[5]	0.86 ^[6]	0.77
	$2p^53p \ ^1D_2$	173.9475	0.20	0.0032 ^[4]	0.0032 ^[5]	0.085 ^[6]	0.02
$2p^53d \ ^3D_3$	$2p^53p \ ^3P_2$	178.3253	9.35	9.38 ^[4]	9.39 ^[5]	9.42 ^[6]	1.01
	$2p^53p \ ^3S_1$	147.4898	0.28		0.24 ^[5]	0.27 ^[6]	
	$2p^53p \ ^3D_3$	163.5946	0.20	0.24 ^[4]	0.24 ^[5]	0.21 ^[6]	1.2
	$2p^53p \ ^3D_2$	165.2218	0.80	0.91 ^[4]	0.91 ^[5]	0.94 ^[6]	1.14
	$2p^53p \ ^3D_1$	167.5710	0.27	0.42 ^[4]	0.42 ^[5]	0.43 ^[6]	1.56
	$2p^53p \ ^1D_2$	173.1786	1.78	1.60 ^[4]	1.60 ^[5]	1.59 ^[6]	0.90
	$2p^53p \ ^1P_1$	176.0405	0.00092	0.041 ^[4]	0.041 ^[5]	0.052 ^[6]	44.6
	$2p^53p \ ^3P_2$	177.5143 ^b	0.099	0.045 ^[4]	0.045 ^[5]	0.046 ^[6]	0.45
	$2p^53p \ ^3P_1$	179.4582	7.83	7.73 ^[4]	7.73 ^[5]	7.72 ^[6]	0.99
	$2p^6 \ ^1S_0$	18.65149	335.0	167.9 ^[2]	186.1 ^[4]	188.3 ^[6]	0.56
	$2p^53p \ ^3S_1$	145.4048 ^b	0.045	0.050 ^[4]	0.050 ^[5]	0.055 ^[6]	1.11
	$2p^53p \ ^3D_2$	162.6093	0.13	0.18 ^[4]	0.18 ^[5]	0.14 ^[6]	1.38
	$2p^53p \ ^3D_1$	164.8822	0.37	0.54 ^[4]	0.54 ^[5]	0.53 ^[6]	1.46

(continued on next page)

Table 3 (continued)

Transition		Wavelength	Transition probabilities, A_{ki} (10^8 s^{-1})					$\frac{A_{ki}^{[4]}}{A_{ki}^{[6]}}$
Upper level	Lower level	$\lambda(\text{nm})^{[1]}$	This work	Other authors				
	$2p^5 3p \ ^1D_2$	170.3108	0.15		0.17 ^[4]	0.17 ^[5]	0.20 ^[6]	1.13
	$2p^5 3p \ ^1P_1$	173.0778	1.54		1.44 ^[4]	1.44 ^[5]	1.44 ^[6]	0.94
	$2p^5 3p \ ^3P_2$	174.5009	0.045		0.053 ^[4]	0.054 ^[5]	0.061 ^[6]	1.18
	$2p^5 3p \ ^3P_0$	175.7888	1.57		2.09 ^[4]	2.10 ^[5]	1.99 ^[6]	1.33
	$2p^5 3p \ ^3P_1$	176.3805	3.33		3.17 ^[4]	3.17 ^[5]	3.11 ^[6]	0.95
	$2p^5 3p \ ^1S_0$	249.0534	1.96	1.81 ^[2]	1.61 ^[4]		1.50 ^[6]	0.82
$2p^5 ({}^2P_{3/2})4d \ ^2[1/2]_0$	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[1/2]_1$	463.2531	1.79					
$2p^5 ({}^2P_{3/2})4d \ ^2[1/2]_1$	$2p^6 \ ^1S_0$	17.18984	3.50					
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[1/2]_1$	459.6916	1.58					
$2p^5 ({}^2P_{3/2})4d \ ^2[3/2]_2$	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[1/2]_1$	452.6223	1.13					
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[3/2]_2$	522.4593	0.74					
$2p^5 ({}^2P_{3/2})4d \ ^2[3/2]_1$	$2p^6 \ ^1S_0$	17.13946	133.33					
	$2p^5 3p \ ^1S_0$	114.3662 ^a	1.39					
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[3/2]_1$	480.2601	0.94					
$2p^5 ({}^2P_{3/2})4d \ ^2[7/2]_3$	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[5/2]_4$	491.6002	2.18					
$2p^5 ({}^2P_{3/2})4d \ ^2[7/2]_3$	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[5/2]_3$	487.8729	0.25					
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[5/2]_2$	496.0409	1.77					
$2p^5 ({}^2P_{3/2})4d \ ^2[5/2]_2$	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[5/2]_2$	485.0385	0.73					
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[3/2]_1$	497.0511	1.28					
$2p^5 ({}^2P_{3/2})4d \ ^2[5/2]_3$	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[3/2]_2$	502.3668	1.52					
$2p^5 ({}^2P_{1/2})4d \ ^2[5/2]_2$	$2p^5 ({}^2P_{1/2})4p \ ^2[3/2]_1$	491.5349	1.81					
	$2p^5 ({}^2P_{1/2})4p \ ^2[3/2]_2$	500.7638	0.21					
$2p^5 ({}^2P_{1/2})4d \ ^2[5/2]_3$	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[5/2]_3$	435.8979	0.022					
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[5/2]_2$	442.4071	0.076					
	$2p^5 ({}^2P_{1/2})4p \ ^2[3/2]_2$	498.1452	1.96					
$2p^5 ({}^2P_{1/2})4d \ ^2[3/2]_2$	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[1/2]_1$	403.9135	0.090					
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[5/2]_3$	435.8138	0.024					
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[5/2]_2$	442.3182	0.048					
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[3/2]_2$	458.6200	0.089					
	$2p^5 ({}^2P_{1/2})4p \ ^2[3/2]_2$	498.0248 ^a	0.23					
	$2p^5 ({}^2P_{1/2})4p \ ^2[1/2]_1$	499.7038	1.56					
$2p^5 ({}^2P_{1/2})4d \ ^2[3/2]_1$	$2p^6 \ ^1S_0$	17.08050	213.8					
	$2p^5 3p \ ^1S_0$	111.7892 ^a	2.25					
	$2p^5 ({}^2P_{1/2})4p \ ^2[3/2]_1$	472.0936	0.39					
	$2p^5 ({}^2P_{3/2})4p \ ^2[1/2]_0$	472.3204	0.32					
	$2p^5 ({}^2P_{1/2})4p \ ^2[1/2]_1$	482.1516	0.61					
	$2p^5 ({}^2P_{1/2})4p \ ^2[1/2]_0$	651.1429	0.34					

^[1] NIST [41] observed; ^[2] Hibbert et al. [23]; ^[4] Froese Fischer & Tachiev [29]; ^[5] Kelleher & Podobedova [30]; ^[6] Jönsson et al. [31].

^a Theoretical wavelengths obtained from energy levels of Martin & Zalubas [16].

^b NIST [41] Ritz.

Table 4

 Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^5nf$ ($n = 4, 5$) configurations of Mg III.

Transition		Wavelength	Transition probabilities, A_{ki} (10^8 s^{-1})
Upper level	Lower level	$\lambda(\text{nm})^{(1)}$	This work
$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[3/2]_1$	$2p^53d^3P_0$	184.6121	5.71
	$2p^53d^3P_1$	185.4424 ^a	4.83
$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[3/2]_2$	$2p^53d^3P_1$	185.4139	5.19
	$2p^53d^3P_2$	187.2956	2.46
	$2p^53d^3D_1$	199.3759	2.16
	$2p^53d^1P_1$	207.3976 ^a	1.16
	$2p^53d^3F_4$	189.0380	11.94
$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[9/2]_5$	$2p^53d^3F_3$	190.0043	10.63
$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[5/2]_3$	$2p^53d^3P_2$	186.5636	7.62
	$2p^53d^1F_3$	193.8249	2.14
	$2p^53d^3D_2$	202.4285	1.32
$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[5/2]_2$	$2p^53d^3P_1$	184.6707	1.59
	$2p^53d^3F_2$	192.8811	1.99
	$2p^53d^3D_1$	198.5173	5.89
$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[7/2]_3$	$2p^53d^3F_3$	189.1970	1.93
	$2p^53d^3F_2$	192.4479	7.93
	$2p^53d^1D_2$	200.2917	1.59
$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[7/2]_4$	$2p^53d^3F_4$	188.2308	1.65
	$2p^53d^1F_3$	193.3563	8.76
	$2p^53d^3D_3$	200.87714	1.00
$2p^5(^2P_{1/2})4f^2[7/2]_3$	$2p^53d^3F_2$	185.0060	2.08
	$2p^53d^1D_2$	192.3042	9.18
$2p^5(^2P_{1/2})4f^2[7/2]_4$	$2p^53d^1F_3$	185.8451	1.12
	$2p^53d^3D_3$	192.8424	10.31
$2p^5(^2P_{1/2})4f^2[5/2]_3$	$2p^53d^3P_2$	179.1402 ^b	2.00
	$2p^53d^3D_2$	193.7778 ^b	9.02
$2p^5(^2P_{1/2})4f^2[5/2]_2$	$2p^53d^3D_1$	190.1360	1.21
	$2p^53d^1P_1$	197.4737	7.95
$2p^5(^2P_{3/2})5f^2[3/2]_1$	$2p^53d^3P_0$	130.659	2.17
	$2p^53d^3P_1$	131.0720	1.83
$2p^5(^2P_{3/2})5f^2[3/2]_2$	$2p^53d^3P_1$	131.0633	2.00
$2p^5(^2P_{3/2})5f^2[9/2]_5$	$2p^53d^3F_4$	132.9583	4.49
	$2p^5(^2P_{3/2})4d^2[7/2]_4$	405.7350	2.01
$2p^5(^2P_{3/2})5f^2[9/2]_4$	$2p^53d^3F_3$	133.4359	3.97
	$2p^5(^2P_{3/2})4d^2[7/2]_3$	408.2939	1.86
$2p^5(^2P_{3/2})5f^2[5/2]_3$	$2p^53d^3P_2$	131.8078	2.77
	$2p^5(^2P_{3/2})4d^2[3/2]_2$	403.8255	1.42
$2p^5(^2P_{3/2})5f^2[5/2]_2$	$2p^53d^3D_1$	137.6713	2.27
	$2p^5(^2P_{3/2})4d^2[3/2]_1$	427.5201	1.10
$2p^5(^2P_{3/2})5f^2[7/2]_3$	$2p^53d^3F_2$	134.8342	2.88
	$2p^5(^2P_{3/2})4d^2[5/2]_2$	414.0688	1.63
$2p^5(^2P_{3/2})5f^2[7/2]_4$	$2p^53d^1F_3$	135.280	3.21
	$2p^5(^2P_{3/2})4d^2[5/2]_3$	415.6475	1.71
$2p^5(^2P_{1/2})5f^2[5/2]_3$	$2p^53d^3D_2$	135.3804	3.28
	$2p^5(^2P_{1/2})4d^2[3/2]_2$	411.2835	1.78
$2p^5(^2P_{1/2})5f^2[5/2]_2$	$2p^53d^1P_1$	137.1769	2.91
	$2p^5(^2P_{1/2})4d^2[3/2]_1$	423.8916	1.57
$2p^5(^2P_{1/2})5f^2[7/2]_3$	$2p^53d^1D_2$	134.646	3.37
	$2p^5(^2P_{1/2})4d^2[5/2]_2$	409.4375	1.88
$2p^5(^2P_{1/2})5f^2[7/2]_4$	$2p^53d^3D_3$	134.9132	3.79
	$2p^5(^2P_{1/2})4d^2[5/2]_3$	411.1992	2.00

⁽¹⁾ NIST [41] observed.

^a Theoretical wavelengths obtained from energy levels of Martin & Zalubas [16].

^b NIST [41] Ritz.

Table 5Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^55g$ configurations of Mg III.

Transition		Wavelength	Transition probabilities, A_{ki} (10^8 s^{-1})
Upper level	Lower level	$\lambda(\text{nm})^{[1]}$	This work
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[5/2]_2$	$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[3/2]_1$	444.3947	2.66
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[5/2]_3$	$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[3/2]_2$	444.5577	2.92
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[11/2]_5$	$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[9/2]_4$	446.3404	3.37
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[11/2]_6$	$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[9/2]_5$	446.3404	3.43
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[7/2]_3$	$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[5/2]_2$	447.7853	2.79
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[7/2]_4$	$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[5/2]_3$	447.6490	2.93
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[9/2]_4$	$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[7/2]_3$	449.7566	3.03
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[9/2]_5$	$2p^5(^2P_{3/2})4f^2[7/2]_4$	449.7566	3.12
$2p^5(^2P_{1/2})5g^2[9/2]_4$	$2p^5(^2P_{1/2})4f^2[7/2]_3$	447.6490	3.32
$2p^5(^2P_{1/2})5g^2[9/2]_5$	$2p^5(^2P_{1/2})4f^2[7/2]_4$	447.6490	3.42
$2p^5(^2P_{1/2})5g^2[7/2]_3$	$2p^5(^2P_{1/2})4f^2[5/2]_2$	447.9030	3.13
$2p^5(^2P_{1/2})5g^2[7/2]_4$	$2p^5(^2P_{1/2})4f^2[5/2]_3$	447.7853	3.29

^[1] NIST [41] observed.

Table 6
Radiative lifetimes (τ in ns) of Mg III levels.

Level	Energy (cm ⁻¹) ^[a]	This work	Other authors	$\tau_{\text{exp}}/\tau_{\text{this work}}$
2p ⁵ 3s ³ P ₁	426 868.1	1.17	3.8 ± 0.3 ^[c] , 1.9 ± 0.1 ^[e] , 1.9 ± 0.19 ^[f]	1.62 ^[e]
2p ⁵ 3s ¹ P ₁	431 530.0	0.076	2.8 ± 0.3 ^[c] , 0.1 ± 0.1 ^[e] , 0.11 ± 0.15 ^[f]	1.32 ^[e]
2p ⁵ (² P _{1/2})4s ² [1/2] ₁	548 720.7	0.43		
2p ⁵ (² P _{3/2})4s ² [3/2] ₂	545 820.4	0.79		
2p ⁵ (² P _{3/2})4s ² [3/2] ₁	546 531.6	0.40		
2p ⁵ (² P _{1/2})4s ² [1/2] ₀	548 034.4	0.80		
2p ⁵ (² P _{3/2})5s ² [3/2] ₂	588 768.9	1.09		
2p ⁵ (² P _{3/2})5s ² [3/2] ₁	589 126.8	1.29		
2p ⁵ (² P _{1/2})5s ² [1/2] ₀	590 984.2	1.09		
2p ⁵ (² P _{1/2})5s ² [1/2] ₁	591 220.7	1.18		
2p ⁵ 3p ³ S ₁	467 378.5	3.44	4.95 ± 0.1 ^[b] , 5.1 ± 0.15 ^[b]	
2p ⁵ 3p ³ D ₃	474 053.2	2.34	3.6 ± 0.15 ^[b] , 2.4 ± 0.4 ^[d]	1.03 ^[d]
2p ⁵ 3p ³ D ₂	474 655.0	2.35	3.35 ± 0.15 ^[b] , 2.3 ± 0.3 ^[d]	0.98 ^[d]
2p ⁵ 3p ³ D ₁	475 502.9	2.34	3.10 ± 0.15 ^[b] , 3.30 ± 0.15 ^[b]	
2p ⁵ 3p ¹ D ₂	477 435.7	2.24	3.35 ± 0.10 ^[b] , 2.2 ± 0.3 ^[d]	0.98 ^[d]
2p ⁵ 3p ¹ P ₁	478 374.5	2.15	3.0 ± 0.10 ^[b] , 2.1 ± 0.2 ^[d]	0.98 ^[d]
2p ⁵ 3p ³ P ₂	478 846.1	1.97	3.0 ± 0.10 ^[b] , 2.1 ± 0.2 ^[d]	1.07 ^[d]
2p ⁵ 3p ³ P ₀	479 265.3	1.82	3.1 ± 0.10 ^[b]	
2p ⁵ 3p ³ P ₁	479 456.0	1.97		
2p ⁵ 3p ¹ S ₀	496 012.1	0.89		
2p ⁵ (² P _{3/2})4p ² [1/2] ₁	559 987.1	5.86		
2p ⁵ (² P _{3/2})4p ² [1/2] ₀	564 300.0	3.33		
2p ⁵ (² P _{3/2})4p ² [5/2] ₃	561 798.7	3.49	7.6 ± 0.7 ^[c]	
2p ⁵ (² P _{3/2})4p ² [5/2] ₂	562 136.1	3.43	6.6 ± 0.5 ^[c]	
2p ⁵ (² P _{3/2})4p ² [3/2] ₁	562 634.2	3.41		
2p ⁵ (² P _{3/2})4p ² [3/2] ₂	562 939.5	3.33	7.9 ± 0.8 ^[c]	
2p ⁵ (² P _{1/2})4p ² [3/2] ₁	564 289.8	3.37		
2p ⁵ (² P _{1/2})4p ² [3/2] ₂	564 664.6	3.34		
2p ⁵ (² P _{1/2})4p ² [1/2] ₁	564 731.6	3.32		
2p ⁵ (² P _{1/2})4p ² [1/2] ₀	570 112.8	2.27		
2p ⁵ 3d ³ P ₀	530 178.2	0.834		
2p ⁵ 3d ³ P ₁	530 420.6	0.68		
2p ⁵ 3d ³ P ₂	530 962.9	0.84		
2p ⁵ 3d ³ F ₄	531 563.0	0.84		
2p ⁵ 3d ³ F ₃	531 833.1	0.86		
2p ⁵ 3d ³ F ₂	532 725.7	0.89		
2p ⁵ 3d ¹ F ₃	532 971.2	0.90		
2p ⁵ 3d ³ D ₁	534 197.7	0.063		
2p ⁵ 3d ¹ D ₂	534 776.9	0.87		
2p ⁵ 3d ³ D ₃	534 923.6	0.882		
2p ⁵ 3d ³ D ₂	535 179.6	0.89		
2p ⁵ 3d ¹ P ₁	536 152.0	0.029		
2p ⁵ (² P _{3/2})4d ² [1/2] ₀	581 567.5	4.21		
2p ⁵ (² P _{3/2})4d ² [1/2] ₁	581 734.7	1.7		
2p ⁵ (² P _{3/2})4d ² [3/2] ₂	582 074.4	4.39		
2p ⁵ (² P _{3/2})4d ² [3/2] ₁	583 450.5	0.0073		
2p ⁵ (² P _{3/2})4d ² [7/2] ₄	582 134.8	4.56		
2p ⁵ (² P _{3/2})4d ² [7/2] ₃	582 290.1	4.74		
2p ⁵ (² P _{3/2})4d ² [5/2] ₂	582 747.3	4.77		
2p ⁵ (² P _{3/2})4d ² [5/2] ₃	582 839.7	4.87		
2p ⁵ (² P _{1/2})4d ² [5/2] ₂	584 628.5	4.68		
2p ⁵ (² P _{1/2})4d ² [5/2] ₃	584 733.4	4.82		
2p ⁵ (² P _{1/2})4d ² [3/2] ₂	584 737.9	4.74		
2p ⁵ (² P _{3/2})4f ² [3/2] ₁	584 345.7	0.82		
2p ⁵ (² P _{3/2})4f ² [3/2] ₂	584 354.1	0.84		
2p ⁵ (² P _{3/2})4f ² [9/2] ₅	584 462.4	0.84		
2p ⁵ (² P _{3/2})4f ² [9/2] ₄	584 463.5	0.84		
2p ⁵ (² P _{3/2})4f ² [5/2] ₃	584 563.9	0.84		
2p ⁵ (² P _{3/2})4f ² [5/2] ₂	584 571.1	0.86		
2p ⁵ (² P _{3/2})4f ² [7/2] ₃	582 290.1	1.55		
2p ⁵ (² P _{3/2})4f ² [7/2] ₄	582 134.8	0.86		
2p ⁵ (² P _{1/2})4f ² [7/2] ₃	584 687.9	1.54		
2p ⁵ (² P _{1/2})4f ² [7/2] ₄	584 689.2	1.55		
2p ⁵ (² P _{1/2})4f ² [5/2] ₃	584 733.4	0.84		
2p ⁵ (² P _{1/2})4f ² [5/2] ₂	584 628.5	0.85		
2p ⁵ (² P _{3/2})5f ² [3/2] ₁	606 713.1	1.52		
2p ⁵ (² P _{3/2})5f ² [3/2] ₂	606 719.4	1.56		
2p ⁵ (² P _{3/2})5f ² [9/2] ₅	606 774.5	1.54		
2p ⁵ (² P _{3/2})5f ² [9/2] ₄	606 775.4	1.55		
2p ⁵ (² P _{3/2})5f ² [5/2] ₃	606 830.7	1.54		
2p ⁵ (² P _{3/2})5f ² [5/2] ₂	606 834.7	1.57		

(continued on next page)

Table 6 (continued)

Level	Energy (cm ⁻¹) ^[a]	This work	Other authors	$\tau_{\text{exp}}/\tau_{\text{this work}}$
$2p^5(^2P_{3/2})5f^2[7/2]_3$	606 891.1	1.55		
$2p^5(^2P_{3/2})5f^2[7/2]_4$	606 891.8	1.55		
$2p^5(^2P_{1/2})5f^2[5/2]_3$	609 045.2	1.54		
$2p^5(^2P_{1/2})5f^2[5/2]_2$	609 050.5	1.57		
$2p^5(^2P_{1/2})5f^2[7/2]_3$	609 045.4	1.54		
$2p^5(^2P_{1/2})5f^2[7/2]_4$	609 045.7	1.55		
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[5/2]_2$	606 841.9	2.91		
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[5/2]_3$	606 841.9	2.91		
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[11/2]_5$	606 861.0	2.91		
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[11/2]_6$	606 861.0	2.91		
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[7/2]_3$	606 896.8	2.92		
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[7/2]_4$	606 896.8	2.93		
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[9/2]_4$	606 916.6	2.93		
$2p^5(^2P_{3/2})5g^2[9/2]_5$	606 916.6	2.93		
$2p^5(^2P_{1/2})5g^2[9/2]_4$	606 111.4	2.92		
$2p^5(^2P_{1/2})5g^2[9/2]_5$	606 111.4	2.92		
$2p^5(^2P_{1/2})5g^2[7/2]_3$	606 111.6	2.92		
$2p^5(^2P_{1/2})5g^2[7/2]_4$	606 111.6	2.92		

^[a]Martin & Zalubas [16]; ^[b] Andersen et al. [35]; ^[c] Lundin et al. [37]; ^[d] Andersen et al. [36]; ^[e] Buchet et al. [38]; ^[f] Träbert [39].

Theoretical Stark widths and shifts of spectral lines of $2p^5nf$ and $2p^55g$ configurations of Mg III

Cristina Moreno-Díaz, Aurelia Alonso-Medina and Cristóbal Colón

Dpto. Física Aplicada, ETSID Industrial (old EUITI), Universidad Politécnica de Madrid, Ronda de Valencia 3, Madrid E-28012, Spain

E-mail: cristobal.colon@upm.es

Received 7 March 2014, revised 31 July 2014

Accepted for publication 2 September 2014

Published 13 October 2014

Abstract

In this paper, we report theoretical Stark widths and shifts calculated using the Griem semi-empirical approach, which corresponds to 111 spectral lines of Mg III. The values of these Stark broadening parameters of spectral lines that arise from levels of $2p^5nf$ and $2p^55g$ configurations of Mg III are presented in the literature for the first time. The aim of this work is to provide values to estimate the electron density of plasma Mg III in astrophysics and industrial applications. The data are presented for the temperatures $T=0.5\text{--}10.0$ (10^4 K) and for an electron density of 10^{17} cm^{-3} . The matrix of elements used in these calculations has been determined from 23 configurations of Mg III: $2s^22p^6$, $2s^22p^53p$, $2s^22p^54p$, $2s^22p^54f$ and $2s^22p^55f$ for the even parity and $2s^22p^5ns$ ($n=3\text{--}6$), $2s^22p^5nd$ ($n=3\text{--}9$), $2s^22p^55g$ and $2s2p^6np$ ($n=3\text{--}8$) for the odd parity. For the intermediate coupling calculations, we use the standard method of least square fitting from experimental energy levels by means of Cowan's computer code. Lines with wavelengths of 134.6460, 135.2800, 189.0380, 190.0043, 192.8424, 408.2939 and 409.4375 nm have high probabilities and also have high values of broadening. Therefore, these lines can be used in some applications. A common regularity for the Stark width of the 189.038 nm spectral line of Mg III is discussed.

Keywords: atomic data, atomic processes, plasma physics

1. Introduction

The data on Stark widths of spectral lines are relevant not only for atomic structure research but also for astrophysics and analytical techniques of plasma diagnosis. Stark broadening data for a large number of transitions in many atomic and ionic spectra are needed for the modelling of stellar plasma, the investigation of its physical properties and for abundance determinations. When calculating opacities of large-scale plasmas of stellar atmospheres, the Stark-broadened line profiles of resonance transitions are of the utmost importance because they give a relatively large contribution to radiative energy transport. Magnesium is present as an impurity in many alloys of industrial interest, making it a good candidate for the diagnosis of the properties of laser produced plasmas (LSP) with these alloys. The LSP technique has recently begun to be used in the study of biodegradable implants made with Mg–Ca alloys, adding

interest to the knowledge of the behavior of the atomic parameters of the species magnesium [1].

Mg III is a member of the neon-like sequence. An exhaustive compilation of experimental wavelengths and energy levels of Mg III was carried out by Martin and Zalubas [2] and Kaufman and Martin [3]. In the manner of Moore [4], these authors use the most appropriate notation in each case—*jl* coupling or *LS* coupling—to describe the energy levels. In this paper, we have maintained this form of notation, since although in the results of our calculations the levels are described in the intermediate coupling (IC), we have decided to label each energy level for its more usual notation in the literature to facilitate the use of our results. In our calculations, we used the experimental energy level presented in [2].

For the transition probabilities and oscillator strengths, we could only find theoretical values in the literature. The most recent are the works presented by Froese Fischer and

Table 1. Theoretical transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^53s$, $2p^53p$ and $2p^53d$ configurations of Mg III.

Transition		Transition probabilities, A_{ji} (s^{-1})		
Upper level	Lower level	Our values	Froese Fischer & Tachiev values [5]	Elabidi values [6]
$2p^53s\ ^3P^{\circ}_1$	$2p^6\ ^1S_0$	8.53E+08	4.7E+08	6.48E+08
$2p^53s\ ^1P^{\circ}_1$	$2p^6\ ^1S_0$	1.315E+10	9.160E+09	1.151E+10
$2p^53d\ ^3P^{\circ}_1$	$2p^6\ ^1S_0$	2.69E+08	1.946E+08	2.428E+08
$2p^53d\ ^3D^{\circ}_1$	$2p^6\ ^1S_0$	1.481E+10	1.257E+10	1.401E+10
$2p^53p\ ^3S_1$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_2$	1.89E+08	1.67E+08	1.87E+08
$2p^53p\ ^3D_3$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_2$	4.27E+08	4.21E+08	4.39E+08
$2p^53p\ ^3D_2$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_2$	1.54E+08	1.54E+08	1.61E+08
$2p^53p\ ^3D_1$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_2$	3.10E+07	3.33E+07	3.65E+07
$2p^53p\ ^1D_2$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_2$	1.54E+08	1.69E+08	1.84E+08
$2p^53p\ ^1P^{\circ}_1$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_2$	5.63E+07	4.20E+07	4.97E+07
$2p^53p\ ^3P^{\circ}_2$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_2$	2.09E+08	1.76E+08	1.66E+08
$2p^53p\ ^3P^{\circ}_1$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_2$	1.22E+08	1.28E+08	1.19E+08
$2p^53p\ ^3S_1$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_1$	7.85E+07	6.91E+07	7.66E+07
$2p^53p\ ^3D_2$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_1$	2.69E+08	2.58E+08	2.68E+08
$2p^53p\ ^3D_1$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_1$	2.33E+08	2.35E+08	2.49E+08
$2p^53p\ ^1D_2$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_1$	5.30E+07	4.94E+07	5.25E+07
$2p^53p\ ^1P^{\circ}_1$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_1$	5.38E+07	3.27E+07	3.42E+07
$2p^53p\ ^3P^{\circ}_2$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_1$	1.32E+08	1.37E+08	1.39E+08
$2p^53p\ ^3P^{\circ}_0$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_1$	5.32E+08	5.16E+08	5.21E+08
$2p^53p\ ^3P^{\circ}_1$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_1$	4.66E+07	5.47E+07	5.09E+07
$2p^53p\ ^3S_1$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_0$	2.17E+07	1.89E+07	2.08E+07
$2p^53p\ ^3D_1$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_0$	1.63E+08	1.50E+08	1.51E+08
$2p^53p\ ^1P^{\circ}_1$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_0$	1.31E+08	1.22E+08	1.47E+08
$2p^53p\ ^3P^{\circ}_1$	$2p^53s\ ^3P^{\circ}_0$	1.36E+08	1.46E+08	1.34E+08
$2p^53p\ ^1D_2$	$2p^53s\ ^1P^{\circ}_1$	2.40E+08	2.12E+08	2.07E+08
$2p^53p\ ^1P^{\circ}_1$	$2p^53s\ ^1P^{\circ}_1$	2.24E+08	2.36E+08	2.17E+08
$2p^53p\ ^3P^{\circ}_2$	$2p^53s\ ^1P^{\circ}_1$	1.67E+08	1.68E+08	1.83E+08
$2p^53p\ ^3P^{\circ}_0$	$2p^53s\ ^1P^{\circ}_1$	1.58E+07	1.21E+07	1.58E+07
$2p^53p\ ^3P^{\circ}_1$	$2p^53s\ ^1P^{\circ}_1$	2.02E+08	1.61E+08	1.88E+08

Tachiev in 2004 [5]. Also, in 2013, Elabidi [6] presented calculations for energy levels and transition probabilities of 32 Mg III lines using autostructure code [7].

In our previous work, we presented calculations for Stark broadening parameters for 237 Mg III spectral lines that correspond to the configurations $2p^5ns$ (3–5), $2p^5np$ (3, 4) and $2p^5nd$ (3, 4) Colón *et al* [8]. However, the Stark widths presented in this work do not cover all of the needs of a diagnosis of plasma. In order to extend the wavelength range as much as possible, under the assumption of local thermodynamic equilibrium (LTE) and using the Boltzmann plot method to estimate the plasma temperature and electron density with the Mg III lines, we believe it necessary to know the Stark broadening of the lines that arise from levels of $2p^5nf$ ($n=4, 5$). Thus, for example, in the wavelength range of 185 up to 195 nm, we can find the lines 186.5636, 188.2308, 189.0380, 190.0043 and 193.8249 nm (arising from levels of the $2p^54f$ configuration), the lines 185.8186, 187.9492 and 190.8500 nm (arising from levels of the $2p^53p$ configuration) and the lines 186.8225, 188.7308 and 191.8777 nm (arising from the $2p^53d$ levels of configuration) with an energy difference between its upper levels of ~ 6.5 eV. The temperature can be estimated, but the Stark broadening of the lines that does not originate from the $2p^54f$

configuration is around 0.01 nm, making it difficult to measure the widening and to estimate the electron density.

In this work, we have calculated the semi-empirical values of the Stark broadening parameters for 111 lines of Mg III, with a special reference to what is mentioned in the National Institute of Standards and Technology (NIST) [9] for these new configurations.

For these calculations, we work with the well-known Griem's semi-classical approximation [10] by using the matrix elements of all known experimental transitions calculated in the framework of the relativistic Hartree–Fock (HFR) by means of Cowan's [11] computer code. These matrix elements have been used to calculate the transition probabilities and lifetimes for the considered spectral lines and energy levels.

The Stark widths and shifts parameters for spectral lines arising from the $2p^54f$, $2p^55f$ and $2p^55g$ electronic configurations of Mg III are presented for an electron density of 10^{17} cm^{-3} and for the temperatures $T=0.5\text{--}5.0$ (10^4 K). In order to display the theoretical trends of Stark parameters, we present our calculations about the Stark width and shift versus the temperature for the 189.0380 nm spectral line of Mg III.

Table 2. Mg III $2p^5nd$ (3, 4)– $2p^5nf$ (4, 5) line-widths (FWHM), ω (pm) and shifts, d (pm), normalized to $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. The wavelengths are obtained from NIST [9].

No	Wavelength λ (nm)	Transition levels			T (10^4 K)	ω (pm)	d (pm)
		Configuration	Term	J-J			
1	127.1784	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f$	$^3P^{\circ}-^2[5/2]$	1–2	0.5	30.95	22.20
					1	20.99	15.56
					2	14.47	11.03
					5	8.96	6.99
2	128.0702	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f$	$^3P^{\circ}-^2[5/2]$	2–3	0.5	46.15	31.29
					1	31.11	21.89
					2	21.41	15.57
					5	13.28	9.95
3	130.6590	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3P^{\circ}-^2[3/2]$	0–1	0.5	18.05	14.16
					1	12.24	9.81
					2	8.48	6.92
					5	5.31	4.41
4	131.0271	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f$	$^3F^{\circ}-^2[7/2]$	2–3	0.5	61.99	45.07
					1	42.02	31.50
					2	29.05	22.36
					5	18.08	14.25
5	131.0633	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3P^{\circ}-^2[3/2]$	1–2	0.5	27.30	17.82
					1	18.24	12.35
					2	12.46	8.72
					5	7.68	5.55
6	131.0720	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3P^{\circ}-^2[3/2]$	1–1	0.5	21.70	12.74
					1	14.49	8.94
					2	9.90	6.38
					5	6.11	4.11
7	131.4500	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f$	$^1F^{\circ}-^2[7/2]$	3–4	0.5	54.33	32.30
					1	36.42	22.77
					2	24.93	16.29
					5	15.38	10.47
8	131.8013	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3P^{\circ}-^2[5/2]$	2–2	0.5	36.49	21.97
					1	24.50	15.51
					2	16.74	11.07
					5	10.27	7.06
9	131.8078	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3P^{\circ}-^2[5/2]$	2–3	0.5	49.38	33.66
					1	33.30	23.54
					2	22.92	16.74
					5	14.22	10.69
10	132.0022	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3P^{\circ}-^2[3/2]$	2–2	0.5	31.32	16.52
					1	20.73	11.57
					2	14.03	8.24
					5	8.57	5.29
11	132.7512	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3F^{\circ}-^2[7/2]$	4–4	0.5	70.30	42.65
					1	47.20	30.07
					2	32.32	21.50
					5	19.92	13.78
12	132.9583	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3F^{\circ}-^2[9/2]$	4–5	0.5	83.53	54.34
					1	56.22	38.11
					2	38.64	27.17
					5	23.95	17.41
13	133.2310	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3F^{\circ}-^2[7/2]$	3–3	0.5	55.12	33.28
					1	36.99	23.46
					2	25.32	16.78
					5	15.61	10.76
14	133.4359	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3F^{\circ}-^2[9/2]$	3–4	0.5	65.03	42.03
					1	43.74	29.48
					2	30.03	21.00
					5	18.58	13.43
15	133.5951	$2p^53d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	1–2	0.5	34.75	24.18

Table 2. (Continued.)

No	Wavelength λ (nm)	Transition levels			T (10^4 K)	ω (pm)	d (pm)
		Configuration	Term	J-J			
16	134.6460	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f$	$^1D^{\circ}-^2[7/2]$	2-3	1	23.53	16.97
					2	16.20	12.04
					5	10.02	7.64
					0.5	65.64	47.45
					1	44.48	33.17
17	134.8342	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3F^{\circ}-^2[7/2]$	2-3	2	30.74	23.56
					5	19.13	15.02
					0.5	52.63	35.71
					1	35.53	25.03
					2	24.46	17.81
18	134.9132	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f$	$^3D^{\circ}-^2[7/2]$	3-4	5	15.16	11.37
					0.5	57.29	33.96
					1	38.40	23.94
					2	26.28	17.14
					5	16.21	11.01
19	134.9365	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3F^{\circ}-^2[5/2]$	2-2	0.5	38.67	22.74
					1	25.94	16.08
					2	17.71	11.48
					5	10.86	7.33
					0.5	69.51	45.68
20	135.2800	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^1F^{\circ}-^2[7/2]$	3-4	1	46.86	32.09
					2	32.22	22.87
					5	19.94	14.61
					0.5	56.20	32.73
					1	37.62	23.08
21	135.3804	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	2-3	2	25.72	16.52
					5	15.85	10.62
					0.5	56.68	33.35
					1	37.96	23.50
					2	25.95	16.82
22	135.3915	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^1F^{\circ}-^2[5/2]$	3-3	5	16.00	10.80
					0.5	36.81	25.54
					1	24.92	17.92
					2	17.15	12.71
					5	10.60	8.07
23	137.1769	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f$	$^1P^{\circ}-^2[5/2]$	1-2	0.5	36.50	25.33
					1	24.70	17.77
					2	16.99	12.60
					5	10.50	8.00
					0.5	30.86	19.39
24	137.6713	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	1-2	1	20.59	13.46
					2	14.04	9.52
					5	8.65	6.07
					0.5	55.85	37.61
					1	37.70	26.38
25	137.8891	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^1D^{\circ}-^2[7/2]$	2-3	2	25.95	18.78
					5	16.08	11.99
					0.5	73.40	48.12
					1	49.48	33.80
					2	34.02	24.09
26	138.6691	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3D^{\circ}-^2[7/2]$	3-4	5	21.05	15.39
					0.5	56.09	37.20
					1	37.78	26.06
					2	25.98	18.55
					5	16.11	11.86
27	138.9504	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	2-3	0.5	52.75	-12.30
					1	33.76	-6.95
					2	22.11	-3.98
28	139.5642	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	2-3	0.5	52.75	-12.30
					1	33.76	-6.95
					2	22.11	-3.98
29	177.3959	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^3P^{\circ}-^2[5/2]$	1-2	0.5	52.75	-12.30
					1	33.76	-6.95
					2	22.11	-3.98
					0.5	52.75	-12.30
					1	33.76	-6.95

Table 2. (Continued.)

No	Wavelength λ (nm)	Transition levels			T (10^4 K)	ω (pm)	d (pm)
		Configuration	Term	J-J			
30	179.1402	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^3P^{\circ}-^2[5/2]$	2-3	5	13.12	-2.09
					0.5	78.15	-18.78
					1	49.85	-10.77
					2	32.58	-6.25
31	181.9954	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^3F^{\circ}-^2[7/2]$	3-4	5	19.32	-3.28
					0.5	107.93	-24.75
					1	68.89	-14.05
					2	45.06	-8.05
32	184.6121	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3P^{\circ}-^2[3/2]$	0-1	5	26.73	-4.16
					0.5	31.00	-6.99
					1	19.81	-4.00
					2	12.99	-2.31
33	184.6707	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3P^{\circ}-^2[5/2]$	1-2	5	7.75	-1.20
					0.5	51.02	-19.40
					1	32.20	-11.86
					2	20.82	-7.43
34	184.9591	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^3F^{\circ}-^2[5/2]$	2-2	5	12.21	-4.26
					0.5	65.25	-16.98
					1	41.57	-9.78
					2	27.09	-5.74
35	185.0060	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^3F^{\circ}-^2[7/2]$	2-3	5	15.98	-3.07
					0.5	84.45	-20.15
					1	53.87	-11.54
					2	35.22	-6.68
36	185.4139	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3P^{\circ}-^2[3/2]$	1-2	5	20.89	-3.50
					0.5	53.96	-16.49
					1	34.22	-9.85
					2	22.25	-6.01
37	185.4424	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3P^{\circ}-^2[3/2]$	1-1	5	13.13	-3.33
					0.5	38.36	-10.07
					1	24.35	-5.89
					2	15.83	-3.50
38	185.8451	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^1F^{\circ}-^2[7/2]$	3-4	5	9.34	-1.87
					0.5	113.10	-26.27
					1	72.18	-14.94
					2	47.20	-8.58
39	186.5388	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3P^{\circ}-^2[5/2]$	2-2	5	28.00	-4.44
					0.5	59.29	-22.92
					1	37.31	-14.03
					2	24.03	-8.79
40	186.5636	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3P^{\circ}-^2[5/2]$	2-3	5	14.02	-5.03
					0.50	84.91	-20.15
					1.00	54.15	-11.56
					2.00	35.39	-6.70
41	187.2956	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3P^{\circ}-^2[3/2]$	2-2	5.00	20.99	-3.51
					0.5	62.36	-19.98
					1	39.41	-12.00
					2	25.51	-7.35
42	188.2308	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3F^{\circ}-^2[7/2]$	4-4	5	14.97	-4.09
					0.5	122.76	-30.33
					1	78.18	-17.43
					2	51.00	-10.14
43	188.6764	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3F^{\circ}-^2[5/2]$	4-3	5	30.14	-5.34
					0.50	102.53	-27.50
					1.00	65.03	-16.08
					2.00	42.24	-9.54
44	189.0341	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3F^{\circ}-^2[9/2]$	4-4	5.00	24.86	-5.10
					0.5	121.61	-31.60

Table 2. (Continued.)

No	Wavelength λ (nm)	Transition levels			T (10^4 K)	ω (pm)	d (pm)
		Configuration	Term	J-J			
45	189.0380	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3F^{\circ}-^2[9/2]$	4-5	1	77.32	-18.35
					2	50.35	-10.81
					5	29.72	-5.76
					0.5	143.56	-32.94
					1	91.53	-18.78
46	189.1970	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3F^{\circ}-^2[7/2]$	3-3	2	59.81	-10.79
					5	35.47	-5.57
					0.5	96.59	-24.03
					1	61.50	-13.84
					2	40.10	-8.07
47	190.0043	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3F^{\circ}-^2[9/2]$	3-4	5	23.70	-4.25
					0.5	115.39	-28.72
					1	73.52	-16.56
					2	47.99	-9.68
					5	28.42	-5.11
48	190.1360	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	1-2	0.5	61.80	-14.76
					1	39.53	-8.37
					2	25.88	-4.83
					5	15.35	-2.55
					0.5	70.85	-18.63
49	192.254	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^1D^{\circ}-^2[5/2]$	2-2	1	45.13	-10.75
					2	29.41	-6.31
					5	17.35	-3.38
					0.5	91.24	-22.51
					1	58.18	-12.96
50	192.2788	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^1D^{\circ}-^2[5/2]$	2-3	2	38.02	-7.55
					5	22.54	-3.98
					0.5	91.60	-22.06
					1	58.43	-12.65
					2	38.19	-7.34
51	192.3042	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^1D^{\circ}-^2[7/2]$	2-3	5	22.66	-3.84
					0.5	92.15	-21.57
					1	58.84	-12.28
					2	38.49	-7.07
					5	22.85	-3.68
52	192.4479	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3F^{\circ}-^2[7/2]$	2-3	0.5	99.95	-26.29
					1	63.55	-15.29
					2	41.39	-9.02
					5	24.44	-4.81
					0.5	121.89	-28.42
53	192.8198	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[7/2]$	3-4	1	77.80	-16.17
					2	50.87	-9.29
					5	30.18	-4.82
					0.5	64.25	-25.09
					1	40.43	-15.37
54	192.8424	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	2-2	2	26.03	-9.64
					5	15.19	-5.51
					0.50	91.64	-22.13
					1.00	58.43	-12.72
					2.00	38.18	-7.40
55	192.8811	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3F^{\circ}-^2[5/2]$	2-3	5.00	22.64	-3.89
					0.5	122.39	-29.17
					1	78.11	-16.64
					2	51.07	-9.61
					5	30.28	-5.02
56	192.9080	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3F^{\circ}-^2[7/2]$	3-4	0.5	72.12	-19.08
					1	45.94	-11.01
					2	29.94	-6.47
57	193.3563	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^1F^{\circ}-^2[7/2]$	3-4	0.5	122.39	-29.17
					1	78.11	-16.64
					2	51.07	-9.61
58	193.7539	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	2-2	5	30.28	-5.02
					0.5	72.12	-19.08
					1	45.94	-11.01
59	193.7539	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	2-2	2	29.94	-6.47
					2	29.94	-6.47

Table 2. (Continued.)

No	Wavelength λ (nm)	Transition levels			T (10^4 K)	ω (pm)	d (pm)
		Configuration	Term	J-J			
59	193.7778	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	2-3	5	17.66	-3.47
					0.5	92.83	-23.02
					1	59.19	-13.26
					2	38.68	-7.73
60	193.8249	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^1F^{\circ}-^2[5/2]$	3-3	5	22.93	-4.08
					0.50	101.03	-26.18
					1.00	64.22	-15.22
					2.00	41.82	-8.96
61	194.2036	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^1F^{\circ}-^2[9/2]$	3-4	5.00	24.70	-4.77
					0.5	121.15	-30.50
					1	77.18	-17.61
					2	50.38	-10.30
62	197.4737	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f$	$^1P^{\circ}-^2[5/2]$	1-2	5	29.83	-5.45
					0.5	67.03	-15.84
					1	42.87	-8.98
					2	28.07	-5.17
63	198.5173	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	1-2	5	16.64	-2.73
					0.5	60.27	-23.11
					1	38.03	-14.14
					2	24.58	-8.86
64	199.3759	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[3/2]$	1-2	5	14.41	-5.08
					0.5	63.71	-19.77
					1	40.40	-11.83
					2	26.25	-7.22
65	199.4089	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[3/2]$	1-1	5	15.49	-4.02
					0.5	45.69	-12.34
					1	28.98	-7.25
					2	18.84	-4.32
66	200.2917	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^1D^{\circ}-^2[7/2]$	2-3	5	11.11	-2.32
					0.5	100.26	-23.69
					1	64.01	-13.51
					2	41.88	-7.79
67	200.7623	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^1D^{\circ}-^2[5/2]$	2-2	5	24.85	-4.06
					0.5	70.04	-27.52
					1	44.07	-16.86
					2	28.38	-10.57
68	200.7906	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^1D^{\circ}-^2[5/2]$	2-3	5	16.55	-6.05
					0.50	99.74	-24.31
					1.00	63.58	-13.99
					2.00	41.54	-8.15
69	200.8771	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[7/2]$	3-4	5.00	24.63	-4.29
					0.5	132.32	-31.66
					1	84.45	-18.07
					2	55.21	-10.44
70	201.3546	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	3-2	5	32.73	-5.46
					0.5	79.39	-31.66
					1	49.83	-19.42
					2	31.99	-12.18
71	201.3838	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	3-3	5	18.58	-6.96
					0.50	109.26	-28.43
					1.00	69.46	-16.53
					2.00	45.23	-9.75
72	201.7927	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[9/2]$	3-4	5.00	26.71	-5.19
					0.5	131.02	-33.11
					1	83.47	-19.13
					2	54.48	-11.20
73	202.2404	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[3/2]$	3-2	5	32.26	-5.93
					0.5	83.10	-28.29

Table 2. (Continued.)

No	Wavelength λ (nm)	Transition levels			T (10^4 K)	ω (pm)	d (pm)
		Configuration	Term	J-J			
74	202.3980	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	2-2	1	52.36	-17.08
					2	33.77	-10.52
					5	19.72	-5.88
					0.5	71.36	-28.14
					1	44.90	-17.24
75	202.4285	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[5/2]$	2-3	2	28.91	-10.81
					5	16.86	-6.19
					0.50	101.55	-24.87
					1.00	64.73	-14.32
					2.00	42.29	-8.35
76	203.2923	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^3D^{\circ}-^2[3/2]$	2-2	5.00	25.08	-4.39
					0.5	75.04	-24.70
					1	47.41	-14.86
					2	30.68	-9.12
					5	18.00	-5.09
77	207.3976	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^1P^{\circ}-^2[3/2]$	1-2	0.5	69.39	-21.31
					1	43.99	-12.75
					2	28.58	-7.78
					5	16.86	-4.33
					0.5	49.87	-13.27
78	207.4298	$2p^5 3d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f$	$^1P^{\circ}-^2[3/2]$	1-1	1	31.63	-7.79
					2	20.56	-4.64
					5	12.12	-2.49
					0.5	195.90	125.39
					1	132.68	86.16
79	397.5738	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^2[1/2]^{\circ}-^2[3/2]$	0-1	2	91.96	60.38
					5	57.72	38.13
					0.5	341.92	148.33
					1	228.85	100.70
					2	156.90	69.70
80	400.1345	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^2[1/2]^{\circ}-^2[3/2]$	1-2	5	97.59	43.43
					0.5	289.78	100.97
					1	193.96	68.88
					2	133.08	47.90
					5	82.91	29.98
81	400.2304	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^2[1/2]^{\circ}-^2[3/2]$	1-1	0.5	610.50	286.43
					1	411.55	196.86
					2	283.81	137.67
					5	177.21	86.49
					0.5	443.98	126.08
82	403.8255	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^2[3/2]^{\circ}-^2[5/2]$	2-3	1	295.61	84.83
					2	201.75	58.18
					5	125.06	35.89
					0.5	1041.38	453.71
					1	701.32	311.64
83	405.6480	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^2[3/2]^{\circ}-^2[3/2]$	2-2	2	483.34	217.94
					5	301.72	137.00
					0.5	815.53	351.43
					1	549.24	241.25
					2	378.34	168.51
84	405.7350	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^2[7/2]^{\circ}-^2[9/2]$	4-5	5	235.87	105.71
					0.5	751.22	412.08
					1	508.86	284.19
					2	352.15	199.32
					5	220.21	125.53
85	408.2939	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^2[7/2]^{\circ}-^2[9/2]$	3-4	0.5	643.00	301.46
					1	433.99	207.39
					2	299.53	145.21
86	409.4375	$2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f$	$^2[5/2]^{\circ}-^2[7/2]$	2-3	1	508.86	284.19
					2	352.15	199.32
					5	220.21	125.53
					0.5	643.00	301.46
					1	433.99	207.39
87	411.1992	$2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f$	$^2[5/2]^{\circ}-^2[7/2]$	3-4	2	299.53	145.21

Table 2. (Continued.)

No	Wavelength λ (nm)	Transition levels			T (10^4 K)	ω (pm)	d (pm)
		Configuration	Term	J-J			
88	411.2835	$2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f$	$^2[3/2]^{\circ}-^2[5/2]$	2-3	5	187.03	91.39
					0.5	719.04	266.52
					1	482.79	182.60
					2	331.72	127.36
89	414.0688	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^2[5/2]^{\circ}-^2[7/2]$	2-3	5	206.42	79.86
					0.5	649.74	302.89
					1	438.97	208.43
					2	303.03	145.84
90	415.6475	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^2[5/2]^{\circ}-^2[7/2]$	3-4	5	189.07	91.62
					0.5	864.77	389.66
					1	583.75	268.13
					2	402.60	187.58
91	423.8916	$2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f$	$^2[3/2]^{\circ}-^2[5/2]$	1-2	5	250.93	117.83
					0.5	441.51	222.29
					1	299.33	153.53
					2	206.68	107.49
92	427.5201	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^2[3/2]^{\circ}-^2[5/2]$	1-2	5	128.57	67.46
					0.5	399.22	269.40
					1	269.08	186.72
					2	184.80	131.12
93	429.6355	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4d-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f$	$^2[3/2]^{\circ}-^2[3/2]$	1-2	5	114.51	82.53
					0.5	347.22	213.58
					1	231.02	146.22
					2	157.44	102.14
					5	97.30	64.35

Note. A positive shift is red.

2. Method of calculation

Our calculation procedure is the same as presented by us in previous works [8, 12–15]. In our procedure, we present Stark broadening parameters for 80 spectral lines of Sn II [13] and for 122 lines of Pb III [14].

In this way, the Stark line width and Stark line shifts were calculated from the Griem semi-empirical formulas:

$$\omega_{se} \approx 8 \left(\frac{\pi}{3} \right)^{3/2} \frac{\hbar}{ma_0} N_e \left(\frac{E_H}{kT} \right)^{1/2} \left[\sum_{i'} |\langle i' | \vec{r} | i \rangle|^2 g_{se} \times \left(\frac{E}{\Delta E_{i'i}} \right) + \sum_{f'} |\langle f' | \vec{r} | f \rangle|^2 g_{se} \left(\frac{E}{\Delta E_{f'f}} \right) \right] \quad (1)$$

$$d \approx -8 \left(\frac{\pi}{3} \right)^{3/2} \frac{\hbar}{ma_0} N_e \frac{E_H}{kT} \left[\sum_{i'} \left(\frac{\Delta E_{i'i}}{|\Delta E_{i'i}|} \right) \times |\langle i' | \vec{r} | i \rangle|^2 g_{sh} \left(\frac{E}{\Delta E_{i'i}} \right) - \sum_{f'} \left(\frac{\Delta E_{f'f}}{|\Delta E_{f'f}|} \right) \times |\langle f' | \vec{r} | f \rangle|^2 g_{sh} \left(\frac{E}{\Delta E_{f'f}} \right) \right] \quad (2)$$

Here, ω_{se} and d represent the Stark line width and shifts, respectively, in angular frequency units; N_e is the perturber (free electron) density, T is the electron temperature, $E=3/2$

kT is the mean energy of the perturbing electron and E_H is the hydrogen ionization energy. The indices i and f denote the initial (upper) and final (lower) levels of the transitions, respectively. The half width at half maximum (HWHM) of the Lorentz profile in frequency units is ω_{se} . This parameter is proportional to the full width at half maximum (FWHM) in line ω in wavelength units through the expression $\omega = \omega_{se} \lambda^2/(\pi c)$.

These formulas are based on Baranger's original formulation [16] and on the use of an effective Gaunt factor, g_{se} and g_{sh} , proposed by Seaton [17] and Van Regemorter [18]. These factors are slowly varying functions of $x_{i'i} = E/\Delta E_{i'i}$, where $\Delta E_{i'i}$ is the energy difference between perturbing level i' and perturbed level i . We have used a fit to the values given by Regemorter (1962) in his table 1 for the effective Gaunt factor. As Griem (1968) suggests, the use of the effective Gaunt factor suggested by Regemorter may include errors by a factor large than 1.5.

The matrix elements required in these formulas are calculated in IC by means of Cowan's computer programs. In order to calculate these elements, we used the experimental energy level presented by Martin and Zalubas [2] and a basis set suggested by Froese Fischer and Tachiev [5]. Our basis set consists of 5 configurations of even parity, namely $2s^2 2p^6$, $2s^2 2p^5 3p$, $2s^2 2p^5 4p$, $2s^2 2p^5 4f$ and $2s^2 2p^5 5f$ and 18 configurations of odd parity, namely $2s^2 2p^5 ns$ ($n=3-6$), $2s^2 2p^5 nd$ ($n=3-9$), $2s^2 2p^5 5g$ and $2s 2p^6 np$ ($n=3-8$).

Table 3. Mg III $2p^5 4f-2p^5 5g$ line-widths (FWHM), ω (pm) and shifts, d (pm), normalized to $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. The wavelengths are obtained from NIST [9].

No	Wavelength λ (nm)	Transition levels			T (10^4 K)	ω (pm)	d (pm)
		Configuration	Term	J-J			
1	444.3947	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[3/2]-^2[5/2]^{\circ}$	1-2	0.5	281.32	89.93
					1	178.98	58.71
					2	116.90	39.35
					5	69.64	24.00
2	444.5577	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[3/2]-^2[5/2]^{\circ}$	2-3	0.5	371.29	53.04
					1	235.95	35.97
					2	153.90	24.93
					5	91.48	15.58
3	444.5577	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[3/2]-^2[5/2]^{\circ}$	2-2	0.5	371.29	53.04
					1	235.95	35.97
					2	153.90	24.93
					5	91.48	15.58
4	445.2343	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[9/2]-^2[9/2]^{\circ}$	5-5	0.5	830.37	122.85
					1	531.64	87.01
					2	349.43	62.65
					5	209.27	40.47
5	445.2343	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[9/2]-^2[9/2]^{\circ}$	4-4	0.5	708.66	130.27
					1	452.83	89.35
					2	296.99	62.55
					5	177.43	39.43
6	446.3404	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[9/2]-^2[11/2]^{\circ}$	5-6	0.5	930.72	219.69
					1	594.73	147.88
					2	390.13	101.92
					5	233.22	63.58
7	446.3404	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[9/2]-^2[11/2]^{\circ}$	4-5	0.5	808.41	227.16
					1	515.54	150.25
					2	337.43	101.83
					5	201.23	62.55
8	447.6490	$2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5g$	$^2[7/2]-^2[9/2]^{\circ}$	4-5	0.5	224.30	224.30
					1	140.97	140.97
					2	90.93	90.93
					5	53.53	53.53
9	447.6490	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[5/2]-^2[7/2]^{\circ}$	3-4	0.5	224.95	224.95
					1	141.39	141.39
					2	91.21	91.21
					5	53.70	53.70
10	447.6490	$2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5g$	$^2[7/2]-^2[9/2]^{\circ}$	3-4	0.5	610.76	153.72
					1	389.93	102.68
					2	255.52	70.23
					5	152.56	43.48
11	447.7853	$2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5g$	$^2[5/2]-^2[7/2]^{\circ}$	3-4	0.5	609.35	151.34
					1	388.92	101.05
					2	254.78	69.08
					5	152.06	42.73
12	447.7853	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[5/2]-^2[7/2]^{\circ}$	2-3	0.5	463.33	137.32
					1	292.86	87.96
					2	189.94	57.76
					5	112.26	34.44
13	447.9030	$2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5g$	$^2[5/2]-^2[7/2]^{\circ}$	2-3	0.5	499.07	172.47
					1	318.35	113.08
					2	208.26	75.84
					5	123.97	46.01
14	449.7566	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[7/2]-^2[9/2]^{\circ}$	3-4	0.5	622.28	158.06
					1	397.59	105.79
					2	260.70	72.44

Table 3. (Continued.)

No	Wavelength λ (nm)	Transition levels			T (10^4 K)	ω (pm)	d (pm)
		Configuration	Term	J-J			
15	449.7566	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[7/2]-^2[9/2]^{\circ}$	4-5	5	155.70	44.85
					0.5	735.55	138.69
					1	470.76	95.58
					2	309.17	67.12
16	450.1793	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[7/2]-^2[7/2]^{\circ}$	3-3	5	184.87	42.34
					0.5	622.48	157.44
					1	397.72	105.40
					2	260.78	72.19
17	450.1793	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[7/2]-^2[7/2]^{\circ}$	3-4	5	155.75	44.69
					0.5	622.48	157.44
					1	397.72	105.40
					2	260.78	72.19
18	450.1793	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f-2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5g$	$^2[7/2]-^2[7/2]^{\circ}$	4-4	5	155.75	44.69
					0.5	735.95	138.03
					1	471.02	95.17
					2	309.34	66.86
					5	184.97	42.18

Note. A positive shift is red.

Figure 1. Calculated Stark widths FWHM (ω (pm), $\bullet$) and shifts (d (pm), $\circ$) versus the temperature for a 189.0380 nm Mg III line at an electron density of 10^{17} cm^{-3} .

In order to avoid using an excessive number of parameters in the fit, we have excluded, following the Cowan suggestions, some parameters. For all of the F^k , G^k and R^k integrals not adjusted in the fitting procedure, we take the HFR *ab initio* values scaled down by a factor of 0.85 (as suggested by

Cowan). For the spin-orbit integrals ζ_{nl} characterized by small numerical values and not adjusted in the fitting procedures, we used the HFR *ab initio* values without scaling. Our results are not essentially different from those published by Anderson and Johannesson [19]; therefore, we do not present the details here.

Despite the time that has elapsed between our previous work and the new work, there are still no experimental values of transition probabilities with which to compare our results. Therefore, the only possibility is to compare our work with other theoretical works. This type of comparison has a certain kind of problem. In the comparison, discrepancies that are, in many cases, due to the theoretical approach of each author can be present. The HFR method and the Cowan code (the *ab initio* calculations in his first calculations) are optimized for the calculation of the energy levels. What sometimes happens is that by forcing a fit to the energy levels that produces wavelengths very close to the experimental calculations, there are important changes in the transition probabilities with respect to the previously calculated *ab initio* calculations, especially in those lines that are very weak and therefore very sensitive to small changes in the composition of the level.

3. Results and discussion

There are no experimental or theoretical values with which we can compare our results of the Stark parameters. In order to make some kind of comparison, we present, in table 1, some values of transition probabilities obtained in this work compared with recent theoretical values. As can be seen, the values are similar despite the different theoretical approaches: *ab initio* values or a fit to the experimental energy levels.

The Stark broadening parameters are calculated using the Griem semi-empirical approaches, which correspond to the 111 spectral lines of Mg III that are displayed in tables 2 and 3. The

Table 4. Theoretical transition probabilities of seven spectral lines of Mg III. The wavelengths are obtained from NIST [9].

No	Wavelength λ (nm)	Transition levels		Transition probabilities (10^8 s^{-1})
		Upper	Lower	
16	134.64 600	$2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f\ ^2[7/2]_3$	$2p^53d\ ^1D^{\circ}_2$	3.37
20	135.2800	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f\ ^2[7/2]_4$	$2p^53d\ ^1F^{\circ}_3$	3.21
45	189.0380	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f\ ^2[9/2]_5$	$2p^53d\ ^3F^{\circ}_4$	11.94
47	190.0043	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4f\ ^2[9/2]_4$	$2p^53d\ ^3F^{\circ}_4$	10.63
54	192.8424	$2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4f\ ^2[7/2]_4$	$2p^53d\ ^3D^{\circ}_3$	10.31
85	408.2939	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})5f\ ^2[9/2]_4$	$2p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4d\ ^2[7/2]^{\circ}_3$	1.86
86	409.4375	$2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})5f\ ^2[7/2]_3$	$2p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4d\ ^2[5/2]^{\circ}_2$	1.88

data are presented at an electron density of 10^{17} cm^{-3} and for several temperatures ($T=5000, 10\,000, 20\,000$ and $50\,000 \text{ K}$). In the first column of these two tables, an arbitrary number of the transition is shown. In the second column in both tables, we present the corresponding wavelengths in nm (as are given in the NIST). The third column indicates that the configuration of the energy levels in the coupling scheme are more adequate for each case. In column 4, we displayed the temperatures. The Stark broadening line-widths (in pm) and Stark broadening line-shift (in pm) are shown in the last two columns. As is well known, both the positive and negative contributions of the perturber level can be present in the Stark line shift calculations (Griem [10]). Sometimes cancellation occurs, resulting in very small shifts for lines that have large widths. In these cases, the experimental shift values can be smaller than the uncertainty of any semi-classical calculation. Since displacements are therefore very sensitive to the set of transition probabilities used, it will be possible to find discrepancies between our results for the displacements and experimental values measured in the future. There are no experimental values in the literature. Neither of the found values have been calculated by other authors, so we cannot compare our values with other results. As can be seen, there are parameters for lines that correspond to the same multiplet, which have relatively different values. This is because Mg III levels are not well described by LS coupling. The notation corresponds only to the majority vector in IC and to a description, which is, in many cases, just a label.

One of the most relevant characteristics of the calculated data is that the Stark broadening in the wavelength units of the ultraviolet range is of the order of tenths of Å, with exceptions of around $\sim 1 \text{ Å}$ for the temperature of 5000 K . Lines in the visible range have broadening for the lower calculated temperatures that can reach $\sim 10 \text{ Å}$. In figure 1, we display the theoretical trends of our calculations for Stark widths and Stark shifts versus the temperature for the 189.0380 nm spectral line of Mg III. Since the semi-empirical calculations are based on the approximation of Griem, dependence tends to adjust to the inverse of the square root of the temperature. It can be seen that although both parameters have the same type of behavior, there is a crossing of the graphs. As in calculated shifts, there are terms with different signs; the contribution of these terms to the final value is a function of temperature. The behavior of shifts may be slightly different from the behavior of broadening.

As an example, in order to estimate the importance of the Stark broadening parameters calculated in this paper, we present, in table 4, our calculations of the transition probabilities (no experimental values are in the bibliography) for some of the lines that have the largest values of the Stark broadening. The selected spectral lines in table 4 appear in the NIST as intense and, in our calculations, show high transition probabilities. In particular, the lines with the serial numbers 16, 20, 45, 47, 54, 85 and 86 that correspond to the wavelengths $134.6460, 135.2800, 189.0380, 190.0043, 192.8424, 408.2939$ and 409.4375 nm have high probabilities and also have large values of line widths. Therefore, these lines can be used in some applications. The values shown in table 3 correspond to the lines that arise from levels of $2p^55g$. These lines have wavelengths so close together that they would present great experimental difficulties for resolution.

Thus, part of the interest of the Stark broadening presented in this paper is to provide values for the transitions that start from the $2p^5nf$ (4, 5) configurations. This allows us to estimate the electron density of Mg III plasma in many applications more accurately than using the values presented in our previous work.

4. Conclusions

We report the calculated values of the Stark widths and Stark shifts for 111 lines (no experimental information is available) that arise from the levels that correspond to the $2p^5nf$ (4, 5) and $2p^55g$ configurations of Mg III using the semi-empirical approach. These values are reported in the literature for the first time.

The contribution of this paper is to provide values to estimate the electron density of Mg III plasma in many applications.

The data are presented at an electron density of 10^{17} cm^{-3} and for several temperatures ($T=5000, 10\,000, 20\,000$ and $50\,000 \text{ K}$). An example of the regularities of broadening parameters versus the temperature is presented in figure 1.

Acknowledgements

This work has been supported by the Spanish DGI project MAT2012-37782.

References

- [1] Sealy M P and Guo Y B 2010 *J. Mech. Behav. Biomed.* **3** 488–96
- [2] Martin W C and Zalubas R 1980 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **9** 20–3
- [3] Kaufman V and Martin W C 1991 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **20** 105–12
- [4] Moore C E 1958 *Atomic Energy Levels (NBS Circular 467 vol 3)* (Washington, DC: US Govt Printing Office) p 213
- [5] Froese Fischer C and Tachiev G 2004 *At. Data Nucl. Data Tables* **87** 174–6
- [6] Elabidi H 2014 *Advances in Space Research* **54** 1203–22
- [7] Badnell N R *Comput. Phys. Commun.* **182** 1528–35
- [8] Colón C, Moreno-Díaz C and Alonso-Medina A 2013 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **435** 1749–57
- [9] Kramida A, Yu R and Reader JNIST ASD Team 2013 *NIST Atomic Spectra Database* (v. 5.1) Available: (<http://physics.nist.gov/asd>) [2014, March 3] (Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology)
- [10] Griem H R 1968 *Phys. Rev.* **165** 258–94
- [11] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (Berkeley, CA: University of California Press)
- [12] Colón C and Alonso-Medina A 2002 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** 1143–53
- [13] Colón C, Alonso-Medina A, Rivero C and Fernández F 2006 *Phys. Scr.* **73** 410–9
- [14] Alonso-Medina A, Colón C and Zanón A 2008 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **385** 261–8
- [15] Alonso-Medina A and Colón C 2011 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **414** 713–26
- [16] Baranger M 1958 *Phys. Rev.* **112** 855–65
- [17] Seaton M J 1962 The theory of excitation and ionization by electron impact *Atomic and Molecular Processes* ed D R Bates (New York: Academic) pp 375–419
- [18] Van Regemorter H 1962 *Astrophys. J.* **136** 906–15
- [19] Andersson E and Johannesson G-A 1971 *Phys. Scr.* **3** 203–10

Theoretical Stark broadening parameters for spectral lines arising from the $2p^5ns$, $2p^5np$ and $2p^5nd$ electronic configurations of Mg III

C. Colón,^{*} C. Moreno-Díaz and A. Alonso-Medina

Departamento de Física Aplicada, EUIT Industrial, Universidad Politécnica de Madrid, E-28012 Madrid, Spain

Accepted 2013 July 29. Received 2013 July 25; in original form 2013 July 5

ABSTRACT

In the present work we report theoretical Stark widths and shifts calculated using the Griem semi-empirical approach, corresponding to 237 spectral lines of Mg III. Data are presented for an electron density of 10^{17} cm^{-3} and temperatures $T = 0.5\text{--}10.0$ (10^4 K). The matrix elements used in these calculations have been determined from 23 configurations of Mg III: $2s^22p^6$, $2s^22p^53p$, $2s^22p^54p$, $2s^22p^54f$ and $2s^22p^55f$ for even parity and $2s^22p^5ns$ ($n = 3\text{--}6$), $2s^22p^5nd$ ($n = 3\text{--}9$), $2s^22p^55g$ and $2s2p^6np$ ($n = 3\text{--}8$) for odd parity. For the intermediate coupling (IC) calculations, we use the standard method of least-squares fitting from experimental energy levels by means of the Cowan computer code. Also, in order to test the matrix elements used in our calculations, we present calculated values of 70 transition probabilities of Mg III spectral lines and 14 calculated values of radiative lifetimes of Mg III levels. There is good agreement between our calculations and experimental radiative lifetimes. Spectral lines of Mg III are relevant in astrophysics and also play an important role in the spectral analysis of laboratory plasma. Theoretical trends of the Stark broadening parameter versus the temperature for relevant lines are presented. No values of Stark parameters can be found in the bibliography.

Key words: atomic data – atomic processes.

1 INTRODUCTION

Stark broadening parameters for ionized elements are very relevant in astrophysics. Stark width data and transition probabilities can be used in the analysis of stellar abundances. It is well-known that magnesium is an important element for studying the history of nucleosynthesis in the Universe (Mashonkina 2013). Lines of Mg III have been detected in solar spectra and have been used for application to high spectral resolution measurements of astrophysical plasmas (Doschek & Cowan 1984; Larsen et al. 2011). In addition, magnesium is one of the most abundant elements on Earth, with multiple applications (Singh & Harimkar 2012). Magnesium is also present as an impurity in many industrial interest alloys, making it a good candidate for diagnosis of the properties of laser-produced plasmas (LSP) from these alloys. The LSP technique has recently begun to be used in the study of biodegradable implants made with Mg–Ca alloys, generating an interest in knowledge of the behaviour of the atomic parameters of the species magnesium (Sealy & Guo 2010).

There are in the literature several experimental and theoretical works devoted to the Stark broadening parameters of Mg I and Mg II. Recently, Cvejić et al. (2013) presented an experimental study of Stark broadening of three Mg I lines and one Mg II line. There are

also several works on highly ionized magnesium (Mg X and Mg XI). However, no experimental works on Stark broadening of Mg III exist and the few existing calculations (Popović & Dimitrijević 1996) do not cover the relevant vacuum ultraviolet region. As already indicated, Mg III appears to be a good candidate for diagnosis in future LSP experiments. The aim of the present work is to solve the lack of values for the Stark broadening parameters of Mg III.

Mg III is a member of the neon-like sequence. An exhaustive compilation of experimental wavelengths and energy levels of Mg III was carried out by (Martin & Zalubas 1980) and (Kaufman & Martin 1991). In the manner of Moore (1958), these authors use the most appropriate notation to describe the energy levels in each case: jl coupling or LS coupling. In this article, we have maintained this form of notation.

For the transition probabilities and oscillator strengths we could only find theoretical values in the literature. The most recent are those of Hibbert, Le Dourneuf & Mohan (1993), Das (1996), Verner, Verner & Ferland (1996), Savukov (2003) and Froese Fischer & Tachiev (2004). The latter were compiled by Kelleher & Podobedova (2008).

With regard to the lifetimes, Andersen et al. (1970) presented experimental radiative lifetimes of eight levels of the $2p^53p$ configuration of Mg III. These lifetimes were obtained using the beam-foil excitation technique. Andersen, Petrakiev Petkov & Sørensen (1975) revised six of these values and provided new measures eliminating the cascade contribution. Five levels of the $2p^54p$ and $2p^53s$

^{*}E-mail: cristobal.colon@upm.es

2 C. Colón, C. Moreno-Díaz and A. Alonso-Medina

configurations were obtained from the investigation of beam-foil spectra of Mg III using a heavy ion accelerator by Lundin et al. (1973). Later, Buchet, Buchet-Poulizac & Ceyzeriat (1980) and Träbert (1996) made new measures of the level lifetimes of the $2p^53s$ configuration. Also, in the bibliography the theoretical values of Bureeva & Safronova (1979) are given.

Popović and Dimitrijević (1996) present calculated values of Stark parameters for $3s-3p$ transitions of Mg III. In this article, the authors present only widths and shifts for three lines and three multiplets.

In this work we have calculated semi-empirical values of the Stark broadening parameters for 237 lines of Mg III, in order to help remedy the lack of data on Stark broadening parameters. For these calculations we work with the well-known Griem's (1968) semiclassical approximation, by using the matrix elements of all known experimental transitions calculated in the relativistic Hartree-Fock (HFR) framework by means of Cowan (1981) computer code. Additionally, these matrix elements have been used to calculate the transition probabilities and lifetimes for the spectral lines and energy levels considered.

In this article, we present only some transition probabilities and lifetimes, those for which there are experimental values in the literature with which we could test the goodness of our calculations. Stark widths and shift parameters for spectral lines arising from the $2p^5ns$, $2p^5np$ and $2p^5nd$ electronic configurations of Mg III are presented for an electron density of 10^{17} cm^{-3} and temperatures $T = 0.5-5.0 (10^4 \text{ K})$. In order to display the theoretical trends of Stark parameters, we present our calculated Stark widths and Stark shifts versus temperature for some spectral lines of Mg III.

2 METHOD OF CALCULATION

As mentioned above, we use in this work the semi-empirical approach suggested by Griem (1968). In this way our calculation procedure is similar to those presented in recent publications by Alonso-Medina & Colón (2011, 2012, 2013).

The Stark line width and Stark line shifts can be calculated from the following semi-empirical formulae:

$$\omega_{se} \approx 8 \left(\frac{\pi}{3} \right)^{3/2} \frac{\hbar}{ma_0} N_e \left(\frac{E_H}{kT} \right)^{1/2} \left[\sum_{i'} |\langle i' | \vec{r} | i \rangle|^2 g_{se} \times \left(\frac{E}{\Delta E_{i'i}} \right) + \sum_{f'} |\langle f' | \vec{r} | f \rangle|^2 g_{se} \left(\frac{E}{\Delta E_{f'f}} \right) \right] \quad (1)$$

$$d \approx -8 \left(\frac{\pi}{3} \right)^{3/2} \frac{\hbar}{ma_0} N_e \left(\frac{E_H}{kT} \right)^{1/2} \left[\sum_{i'} \left(\frac{\Delta E_{i'i}}{|\Delta E_{i'i}|} \right) |\langle i' | \vec{r} | i \rangle|^2 \times g_{sh} \left(\frac{E}{\Delta E_{i'i}} \right) - \sum_{f'} \left(\frac{\Delta E_{f'f}}{|\Delta E_{f'f}|} \right) |\langle f' | \vec{r} | f \rangle|^2 g_{sh} \left(\frac{E}{\Delta E_{f'f}} \right) \right] \quad (2)$$

where ω_{se} and d represented the Stark line width and shifts respectively in angular frequency units, N_e is the perturber (free electron) density, T the electron temperature, $E = \frac{3}{2}kT$ the mean energy of the perturbing electron and E_H the hydrogen ionization energy. The indexes ' i ' and ' f ' denote the initial (upper) and final (lower) levels of the transitions, respectively. ω_{se} is the half-width at half maximum (HWHM) of the Lorentz profile in frequency units. ω_{se}

is proportional to the full-width at half maximum (FWHM) line ω in wavelength units, through the expression $\omega = \omega_{se} \lambda^2 / (\pi c)$.

These formulae are based on Baranger's original formulation (Baranger 1958) and the use of effective Gaunt factors g_{se} and g_{sh} , proposed by Seaton (1962) and Van Regemorter (1962). These factors are slowly varying functions of $x_{i'i} = E/\Delta E_{i'i}$, where $\Delta E_{i'i}$ is the energy difference between a perturbing level i' and the perturbed level i . In this work, we used the Gaunt factors suggested by Niemann et al. (2003), because these factors give us theoretical values closer to the experimental values.

The matrix elements required in these formulae are calculated using intermediate coupling (IC) by means of the computer programs of Cowan (1981). In order to calculate these elements, we used the experimental energy level presented by Martin & Zalubas (1980) and a basis set as suggested by Froese Fischer & Tachiev (2004). Our basis set consists of five configurations of even parity, namely $2s^22p^6$, $2s^22p^53p$, $2s^22p^54p$, $2s^22p^54f$ and $2s^22p^55f$, and 18 configurations of odd parity, namely $2s^22p^5ns$ ($n = 3-6$), $2s^22p^5nd$ ($n = 3-9$), $2s^22p^55g$ and $2s2p^6np$ ($n = 3-8$) for odd parity.

As the total number of parameters to adjust is excessive (i.e. exceeds of the number of experimental levels), we have chosen to exclude a certain number of parameters from the adjustment process. For all the F^k , G^k and R^k integrals not adjusted in the fitting procedure, we take the HFR *ab initio* values scaled down by a factor of 0.85 (as suggested by Cowan). For the spin-orbit integrals ζ_{nl} , characterized by small numerical values and not adjusted in the fitting procedures, we used the HFR *ab initio* values without scaling. Our results are not essentially different from those published by Anderson & Johannesson (1971) and therefore we do not present details here, but these can be obtained upon request from the authors.

3 RESULTS AND DISCUSSION

In Table 1 we present some of the results obtained in this work for transition probabilities and lifetimes. In this table we present only the values obtained for lines arising from energy levels for which there are experimental lifetimes. In this way we perform a comparison between the theoretical transition probabilities of Froese Fischer & Tachiev (2004), experimental lifetime values and our calculations. This comparison was performed to test the goodness of the matrix elements that we have used to calculate the broadening parameters. As can be seen, our values are in good agreement with the theoretical values with the exception of the two resonant lines, which deviate by the order of a factor of 1.6 but approach the experimental lifetimes more in these two cases. Also our results are agreement with the experimental lifetime values and fit recent experimental values that have been corrected for cascades Andersen et al. (1975).

Stark broadening parameters for 237 spectral lines of Mg III are presented in Tables 2, 3 and 4. Except for the six values presented by Popović and Dimitrijević, these values are reported in the literature for the first time. Data are presented at an electron density of 10^{17} cm^{-3} and for several temperatures ($T = 5\,000$, $10\,000$, $20\,000$ and $50\,000 \text{ K}$). For the astrophysically relevant lines at 330.00 , 330.73 , 23.42 and 23.17 nm , we have also added the temperatures in the tables ($T = 35\,000$, $60\,000$, $75\,000$ and $100\,000 \text{ K}$).

In the first column in the broadening tables (Tables 2, 3 and 4), we present the corresponding wavelengths in nm (see Martin & Zalubas 1980). The second column indicates that the configuration of energy levels in the coupling scheme is more adequate in each case. In column 3 we displayed the temperatures. Stark

Table 1. Transition probabilities of several spectral lines arising from $2p^5\ 3s$ and $2p^5np$ ($n = 3, 4$) configurations of Mg III and radiative lifetimes of levels of these configurations.

Transition levels		λ (nm) ^a	Transition probabilities ($10^7\ s^{-1}$)		Lifetimes (ns)	
Upper	Lower		This work	Other authors	This work	Other authors
$2p^5 3s\ ^3P_1$	$2p^6\ ^1S_0$	23.43	85.3	47.0 ^g	1.17	3.8 ± 0.3^c $1.9 \pm 20\ \text{per cent}^e$
$2p^5 3s\ ^1P_1$	$2p^6\ ^1S_0$	23.17	1315.4	916.0 ^g	0.076	1.9 ± 0.19^f 2.8 ± 0.3^c $0.1 \pm 10\ \text{per cent}^e$ $0.11 \pm 15\ \text{per cent}^f$
$2p^5 3p\ ^3S_1$	$2p^5 3s\ ^3P_2$	239.59	18.9	16.7 ^g	3.44	3.4 ± 0.4^d 5.1 ± 0.15^b 4.95 ± 0.10^b
	$2p^5 3s\ ^3P_1$	246.85	7.85	6.91 ^g		
	$2p^5 3s\ ^3P_0$	252.99	2.17	1.89 ^g		
$2p^5 3p\ ^3D_3$	$2p^5 3s\ ^1P_1$	278.95	0.16	0.097 ^g		
	$2p^5 3s\ ^3P_2$	206.56	42.7	42.1 ^g	2.34	2.4 ± 0.4^d 3.6 ± 0.15^b
$2p^5 3p\ ^3D_2$	$2p^5 3s\ ^3P_2$	204.02	15.4	15.4 ^g	2.35	2.3 ± 0.3^d 3.35 ± 0.15^b
	$2p^5 3s\ ^3P_1$	209.26	26.9	25.7 ^g		
	$2p^5 3s\ ^1P_1$	231.88	0.18	0.044 ^g		
$2p^5 3p\ ^3D_1$	$2p^5 3s\ ^3P_2$	200.55	3.10	3.33 ^g	2.34	3.30 ± 0.15^b 3.10 ± 0.15^b
	$2p^5 3s\ ^3P_1$	205.61	23.3	23.5 ^g		
	$2p^5 3s\ ^3P_0$	209.86	16.3	15.0 ^g		
	$2p^5 3s\ ^1P_1$	227.41	0.0064	0.012 ^g		
$2p^5 3p\ ^1D_2$	$2p^5 3s\ ^3P_2$	193.07	15.4	17.0 ^g	2.24	2.2 ± 0.3^d 3.35 ± 0.10^b
	$2p^5 3s\ ^3P_1$	197.75	5.30	4.94 ^g		
	$2p^5 3s\ ^1P_1$	217.84	24.0	21.2 ^g		
$2p^5 3p\ ^1P_1$	$2p^5 3s\ ^3P_2$	189.63	5.63	4.20 ^g	2.15	2.0 ± 0.2^d 3.0 ± 0.1^b
	$2p^5 3s\ ^3P_1$	194.15	5.38	3.27 ^g		
	$2p^5 3s\ ^3P_0$	197.93	13.1	12.2 ^g		
	$2p^5 3s\ ^1P_1$	213.47	22.4	23.6 ^g		
$2p^5 3p\ ^3P_2$	$2p^5 3s\ ^3P_2$	187.95	20.9	17.6 ^g	2.00	2.1 ± 0.2^d 3.0 ± 0.1^b
	$2p^5 3s\ ^3P_1$	192.39	13.2	13.7 ^g		
	$2p^5 3s\ ^1P_1$	211.34	16.7	16.9 ^g		
$2p^5 3p\ ^3P_0$	$2p^5 3s\ ^3P_1$	190.85	53.2	51.5 ^g	1.82	
	$2p^5 3s\ ^1P_1$	209.15	1.58	1.21 ^g		
$2p^5 3p\ ^3P_1$	$2p^5 3s\ ^3P_2$	185.82	12.2	12.8 ^g	1.97	3.0 ± 0.1^b
	$2p^5 3s\ ^3P_1$	190.16	4.66	5.47 ^g		
	$2p^5 3s\ ^3P_0$	193.78	13.6	14.6 ^g		
	$2p^5 3s\ ^1P_1$	208.65	20.2	16.1 ^g		
$2p^5(^2P_{3/2})4p\ ^2[5/2]_3$	$2p^5 3s\ ^3P_2$	73.44	7.25		3.49	7.6 ± 0.7^c
	$2p^5 3d\ ^3P_2$	324.30	0.034			
	$2p^5 3d\ ^3F_4$	330.73	11.5			
	$2p^5 3d\ ^3F_3$	333.72	0.96			
	$2p^5 3d\ ^3F_2$	343.96	0.096			
	$2p^5 3d\ ^1F_3$	346.89	1.48			
	$2p^5 3d\ ^3D_3$	372.09	0.39			
	$2p^5 3d\ ^3D_2$	375.67	0.12			
	$2p^5 3d\ ^1D_2$	370.07	0.024			
$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_2$	$2p^5 3s\ ^3P_2$	625.85	6.88			
	$2p^5 3s\ ^3P_1$	73.26	2.50		3.43	6.6 ± 0.5^c
	$2p^5 3s\ ^3P_0$	73.93	4.25			
	$2p^5 3s\ ^1P_1$	76.57	0.74			
	$2p^5 3d\ ^3P_1$	315.30	0.17			
	$2p^5 3d\ ^3P_2$	320.79	0.36			
	$2p^5 3d\ ^3F_3$	330.00	10.9			
	$2p^5 3d\ ^3F_2$	340.02	2.56			
	$2p^5 3d\ ^1F_3$	342.88	0.0034			
	$2p^5 3d\ ^3D_1$	357.93	0.218			

4 *C. Colón, C. Moreno-Díaz and A. Alonso-Medina*

Table 1 – continued

Transition levels		λ (nm) ^a	Transition probabilities (10^7 s ⁻¹)		Lifetimes (ns)	
Upper	Lower		This work	Other authors	This work	Other authors
$2p^5(^2P_{3/2})4p\ ^2[3/2]_2$	$2p^53d\ ^3D_3$	367.48	0.0518			
	$2p^53d\ ^3D_2$	370.97	0.189			
	$2p^53d\ ^1D_2$	365.51	0.324			
	$2p^53d\ ^1P_1$	384.85	0.0493			
	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_2$	612.91	2.90			
	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_1$	640.84	3.99			
	$2p^53s\ ^3P_2$	72.83	2.39		3.33	7.9 ± 0.8^c
	$2p^53s\ ^3P_1$	73.49	1.00			
	$2p^53s\ ^1P_1$	76.10	2.35			
	$2p^53d\ ^3P_1$	307.51	1.01			
	$2p^53d\ ^3P_2$	312.73	4.02			
	$2p^53d\ ^3F_3$	321.48	0.402			
	$2p^53d\ ^3F_2$	330.97	0.0157			
	$2p^53d\ ^1F_3$	333.68	9.70			
	$2p^53d\ ^3D_1$	347.92	0.0260			
	$2p^53d\ ^3D_3$	356.94	0.493			
	$2p^53d\ ^3D_2$	360.23	0.837			
	$2p^53d\ ^1P_1$	373.31	0.0083			
	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_2$	584.14	4.53			
	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[3/2]_1$	609.46	2.85			
	$2p^5(^2P_{3/2})4s\ ^2[1/2]_1$	703.29	0.422			

^a Martin & Zalubas (1980).

^b Andersen et al.(1970).

^c Lundin et al. (1973).

^d Andersen et al. (1975).

^e Buchet et al. (1980).

^f Träbert (1996).

^g Froese Fischer & Tachiev (2004).

 Table 2. Mg III $2p^6$ – $2p^5ns$ (3–5) and $2p^5np$ (3, 4)– $2p^5ns$ (3–5) linewidths (FWHM) ω (pm) and shifts d (pm), normalized to $N_e = 10^{17}$ cm⁻³. We present values only for 15 lines. The remaining lines (up to 64) are presented online.

N ^o	Wavelength	Transition levels			T	ω (pm)	d (pm)
	λ (nm) ^a	Configuration	Term	J – J	(10^4 K)		
1	23.17	$2p^6$ – $2p^53s$	1S – 1P	0–1	0.5	0.105	–0.101
					1	0.065	–0.062
					2	0.040	–0.039
					3.5	0.028	–0.027
					5	0.022	–0.022
					6	0.020	–0.019
					7.5	0.018	–0.017
					10	0.015	–0.014
					0.5	0.103	–0.103
					1	0.063	–0.063
2	23.43	$2p^6$ – $2p^53s$	1S – 3P	0–1	0.5	0.103	–0.103
					1	0.063	–0.063
					2	0.040	–0.039
					3.5	0.028	–0.027
					5	0.022	–0.022
					6	0.020	–0.020
					7.5	0.017	–0.017
					10	0.015	–0.015
					0.5	21.2	–16.6
					1	13.4	–10.5
3	127.48	$2p^53p$ – $2p^5(^2P_{3/2})4s$	3S – $^2[3/2]$	1–2	2	8.66	–6.89
					5	5.11	–4.12
					0.5	31.5	–23.2
					1	19.8	–14.6
4	139.34	$2p^53p$ – $2p^5(^2P_{3/2})4s$	3D – $^2[3/2]$	3–2	2	12.7	–9.49
					5	7.41	–5.63

Table 2 – continued

N ^o	Wavelength	Transition levels			<i>T</i>	ω (pm)	<i>d</i> (pm)
	λ (nm) ^a	Configuration	Term	<i>J</i> – <i>J</i>	(10 ⁴ K)		
5	140.52	2p ⁵ 3p–2p ⁵ (² P _{3/2})4s	³ D– ² [3/2]	2–2	0.5	29.0	–21.9
					1	18.2	–13.9
					2	11.7	–9.04
6	142.21	2p ⁵ 3p–2p ⁵ (² P _{3/2})4s	³ D– ² [3/2]	1–2	5	6.89	–5.39
					0.5	26.5	–20.8
					1	16.7	–13.2
7	146.23	2p ⁵ 3p–2p ⁵ (² P _{3/2})4s	¹ D– ² [3/2]	2–2	2	10.8	–8.63
					5	6.39	–5.17
					0.5	31.5	–23.8
8	148.27	2p ⁵ 3p–2p ⁵ (² P _{3/2})4s	¹ P– ² [3/2]	1–2	1	19.8	–15.1
					2	12.8	–9.81
					5	7.49	–5.85
9	149.31	2p ⁵ 3p–2p ⁵ (² P _{3/2})4s	³ P– ² [3/2]	2–2	0.5	28.9	–22.6
					1	18.2	–14.4
					2	11.8	–9.4
10	150.68	2p ⁵ 3p–2p ⁵ (² P _{3/2})4s	³ P– ² [3/2]	1–2	5	6.96	–5.64
					0.5	32.8	–24.8
					1	20.6	–15.7
11	18.30	2p ⁶ –2p ⁵ (² P _{3/2})4s	¹ S– ² [3/2]	0–1	2	13.3	–10.3
					5	7.81	–6.11
					0.5	29.9	–23.4
12	126.34	2p ⁵ 3p–2p ⁵ (² P _{3/2})4s	³ S– ² [3/2]	1–1	1	18.8	–14.9
					2	12.2	–9.71
					5	7.19	–5.83
13	139.13	2p ⁵ 3p–2p ⁵ (² P _{3/2})4s	³ D– ² [3/2]	2–1	0.5	0.23	–0.19
					1	0.14	–0.12
					2	0.09	–0.08
14	140.79	2p ⁵ 3p–2p ⁵ (² P _{3/2})4s	³ S– ² [3/2]	1–1	5	0.06	–0.05
					0.5	14.1	–10.4
					1	8.83	–6.58
15	144.73	2p ⁵ 3p–2p ⁵ (² P _{3/2})4s	¹ D– ² [3/2]	2–1	2	5.69	–4.28
					5	3.34	–2.55
					0.5	20.2	–14.4
					1	12.6	–9.07
					2	8.10	–5.87
					5	4.71	–3.47
					0.5	17.6	–13.1
					1	11.0	–8.28
					2	7.11	–5.39
					5	4.17	–3.21
					0.5	21.9	–15.6
					1	13.7	–9.83
					2	8.81	–6.37
					5	5.13	–3.77

Note. A positive shift is red.

^a Martin & Zalubas (1980).

broadening linewidths (in pm) and Stark broadening line shift (in pm) are shown in the two last columns. As is well known, both positive and negative contributions of perturber level can be present in Stark line-shift calculations (Griem 1968). Sometimes near-cancellation occurs, resulting in very small shifts for lines that have large widths. In these cases the experimental shift values can be smaller than the uncertainty in any semi-classical calculation. Since displacements are very sensitive to the set of transition probabilities used, we should be able to find discrepancies between our results for the displacements and experimental values measured in future.

One of the most relevant characteristics of the data is that in general the broadenings are particularly low, of the order of

picometres, except for a few lines from the configurations 2p⁵5s, 2p⁵4p and 2p⁵4d. In at least two cases these lines, such as 330.73 and 330.00 nm of special interest (as mentioned above), have broadenings of the order of angstroms. As the description of the levels of these configurations should not be performed in the exact model of *LS* coupling, it is possible that any other method based exclusively on the Coulomb approximation will provide less accurate data. Many of the transitions involved in these calculations would be *LS*-unallowed. Using a pure *LS* model has led to underestimation of the values of the parameters.

In Fig. 1, we display the theoretical trends of our calculated Stark widths and Stark shifts versus temperature for the 330.00, 330.73, 23.42 and 23.17 nm spectral lines of astrophysical interest for Mg III.

6 *C. Colón, C. Moreno-Díaz and A. Alonso-Medina*

Table 3. Mg III $2p^5ns$ (3, 4)– $2p^5np$ (3, 4) and $2p^53d$ – $2p^54p$ linewidths (FWHM) ω (pm) and shifts d (pm), normalized to $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. We present values only for 15 lines. The remaining lines (up to 92) are presented online.

Nº	Wavelength	Transition levels			T (10^4 K)	ω (pm)	d (pm)
	λ (nm) ^a	Configuration	Term	J-J			
1	239.59	$2p^53s$ – $2p^53p$	3P – 3S	2–1	0.5	28.99	–22.53
					1	17.82	–13.83
					2	11.14	–8.63
					5	6.22	–4.79
2	246.85	$2p^53s$ – $2p^53p$	3P – 3S	1–1	0.5	24.05	–17.16
					1	14.78	–10.52
					2	9.23	–6.55
					5	5.14	–3.62
3	253.00	$2p^53s$ – $2p^53p$	3P – 3S	0–1	0.5	18.13	–10.92
					1	11.13	–6.68
					2	6.94	–4.14
					5	3.86	–2.27
4	278.95	$2p^53s$ – $2p^53p$	1P – 3S	1–1	0.5	31.34	–22.00
					1	19.26	–13.49
					2	12.02	–8.40
					5	6.69	–4.65
5	206.56	$2p^53s$ – $2p^53p$	3P – 3D	2–3	0.5	35.04	–24.15
					1	21.53	–14.82
					2	13.45	–9.24
					5	7.49	–5.13
6	204.02	$2p^53s$ – $2p^53p$	3P – 3D	2–2	0.5	27.74	–20.14
					1	17.05	–12.37
					2	10.65	–7.72
					5	5.94	–4.29
7	209.26	$2p^53s$ – $2p^53p$	3P – 3D	1–2	0.5	24.35	–16.33
					1	14.96	–10.02
					2	9.34	–6.24
					5	5.20	–3.46
8	231.88	$2p^53s$ – $2p^53p$	1P – 3D	1–2	0.5	30.33	–20.11
					1	18.63	–12.34
					2	11.63	–7.69
					5	6.48	–4.27
9	200.55	$2p^53s$ – $2p^53p$	3P – 3D	2–1	0.5	20.54	–16.14
					1	12.63	–9.92
					2	7.90	–6.20
					5	4.41	–3.46
10	205.61	$2p^53s$ – $2p^53p$	3P – 3D	1–1	0.5	16.93	–12.28
					1	10.40	–7.54
					2	6.50	–4.71
					5	3.63	–2.62
11	209.86	$2p^53s$ – $2p^53p$	3P – 3D	0–1	0.5	12.72	–7.90
					1	7.81	–4.84
					2	4.88	–3.01
					5	2.71	–1.67
12	227.41	$2p^53s$ – $2p^53p$	1P – 3D	1–1	0.5	21.12	–15.08
					1	12.98	–9.26
					2	8.11	–5.78
					5	4.52	–3.22
13	193.07	$2p^53s$ – $2p^53p$	3P – 1D	2–2	0.5	25.04	–18.09
					1	15.39	–11.12
					2	9.62	–6.94
					5	5.37	–3.87
14	197.76	$2p^53s$ – $2p^53p$	3P – 1D	1–2	0.5	21.95	–14.65
					1	13.49	–8.99
					2	8.43	–5.61
					5	4.70	–3.12
15	217.84	$2p^53s$ – $2p^53p$	1P – 1D	1–2	0.5	27.02	–17.82
					1	16.61	–10.94
					2	10.37	–6.83
					5	5.78	–3.80

Note. A positive shift is red.

^a Martin & Zalubas (1980).

Table 4. Mg III $2p^6-2p^5nd$ (3, 4) and $2p^5np$ (3, 4)– $2p^5nd$ (3, 4) linewidths (FWHM) ω (pm) and shifts d (pm), normalized to $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. We present values only for 15 lines. The remaining lines (up to 81) are presented online.

N ^o	Wavelength λ (nm) ^a	Transition levels			T (10 ⁴ K)	ω (pm)	d (pm)
		Configuration	Term	$J-J$			
1	159.24	$2p^53p-2p^53d$	$^3S-^3P$	1–0	0.5	8.37	–4.03
					1	5.14	–2.46
					2	3.21	–1.52
					5	1.78	–0.84
2	182.90	$2p^53p-2p^53d$	$^3D-^3P$	1–0	0.5	11.24	–5.61
					1	6.90	–3.44
					2	4.31	–2.14
					5	2.40	–1.18
3	193.04	$2p^53p-2p^53d$	$^1P-^3P$	1–0	0.5	12.65	–6.33
					1	7.77	–3.89
					2	4.85	–2.42
					5	2.70	–1.35
4	197.15	$2p^53p-2p^53d$	$^3P-^3P$	1–0	0.5	13.20	–6.62
					1	8.11	–4.06
					2	5.07	–2.53
					5	2.82	–1.41
5	18.85	$2p^6-2p^53d$	$^1S-^3P$	0–1	0.5	0.12	–0.05
					1	0.07	–0.03
					2	0.04	–0.02
					5	0.03	–0.01
6	158.62	$2p^53p-2p^53d$	$^3S-^3P$	1–1	0.5	13.49	–6.20
					1	8.29	–3.80
					2	5.18	–2.37
					5	2.88	–1.31
7	179.32	$2p^53p-2p^53d$	$^3D-^3P$	2–1	0.5	22.43	–10.86
					1	13.78	–6.67
					2	8.61	–4.16
					5	4.79	–2.31
8	188.73	$2p^53p-2p^53d$	$^1D-^3P$	2–1	0.5	25.03	–12.09
					1	15.38	–7.42
					2	9.61	–4.63
					5	5.36	–2.58
9	192.14	$2p^53p-2p^53d$	$^1P-^3P$	1–1	0.5	20.13	–9.51
					1	12.37	–5.85
					2	7.73	–3.66
					5	4.31	–2.04
10	193.89	$2p^53p-2p^53d$	$^3P-^3P$	2–1	0.5	26.43	–12.84
					1	16.24	–7.89
					2	10.15	–4.93
					5	5.66	–2.74
11	195.48	$2p^53p-2p^53d$	$^3P-^3P$	0–1	0.5	14.81	–6.64
					1	9.11	–4.09
					2	5.70	–2.56
					5	3.18	–1.44
12	196.21	$2p^53p-2p^53d$	$^3P-^3P$	1–1	0.5	21.00	–9.93
					1	12.91	–6.11
					2	8.07	–3.82
					5	4.50	–2.13
13	157.27	$2p^53p-2p^53d$	$^3S-^3P$	1–2	0.5	18.41	–8.32
					1	11.32	–5.11
					2	7.07	–3.19
					5	3.94	–1.77
14	186.82	$2p^53p-2p^53d$	$^1D-^3P$	2–2	0.5	31.79	–14.98
					1	19.54	–9.21
					2	12.22	–5.75
					5	6.82	–3.21
15	190.16	$2p^53p-2p^53d$	$^1P-^3P$	1–2	0.5	27.24	–12.56
					1	16.75	–7.73
					2	10.47	–4.84
					5	5.85	–2.71

Note. A positive shift is red.

^a Martin & Zalubas (1980).

8 *C. Colón, C. Moreno-Díaz and A. Alonso-Medina*

Figure 1. Calculated Stark width FWHM (ω (pm)) and shift (d (pm)) versus temperature for 330.73, 330.00, 23.42 and 23.71 nm Mg III lines at an electron density of 10^{17} cm^{-3} .

In conclusion, we have obtained the Stark broadening parameters of 237 Mg III spectral lines. Except for six values found in the literature, these values are reported in the literature for the first time. These data are of high interest for the modelling of astrophysical atmospheres. Clear trends in Stark width are seen in our results.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work has been supported by the Spanish DGI project MAT2012–37782.

REFERENCES

- Alonso-Medina A., Colón C., 2011, MNRAS, 414, 713
 Alonso-Medina A., Colón C., 2012, MNRAS, 427, 1312
 Alonso-Medina A., Colón C., 2013, MNRAS, 431, 2703
 Andersson E., Johansson G.-A., 1971, Phys. Scr., 3, 203
 Andersen T., Dessesquelles J., Jessen K. A., Sørensen G., 1970, Phys. Rev. A, 1, 1294
 Andersen T., Petrakiev Petkov A., Sørensen G., 1975, Phys. Scr., 12, 283
 Baranger M., 1958, Phys. Rev., 112, 855
 Buchet J. P., Buchet-Poulizac M. C., Ceyzeriat P., 1980, Phys. Lett., 77, 424
 Bureeva L. A., Safronova U. I., 1979, Phys. Scripta, 20, 81
 Cowan R. D., 1981, The Theory of Atomic Structure and Spectra. University of California Press, Berkeley
 Cvejić M., Gavrilović M. R., Jovičević S., Konjević N., 2013, Spectrochimica Acta B, 85, 20
 Das A. K., 1996, ApJ, 468, 445
 Doschek G. A., Cowan R. D., 1984, ApJS, 56, 67
 Froese Fischer C., Tachiev G., 2004, Atomic Data Nucl. Data Tables, 87, 174
 Griem H. R., 1968, Phys. Rev., 165, 258
 Hibbert A., Le Dourneuf M., Mohan M., 1993, At. Data Nucl. Data Tables, 53, 23
 Kaufman V., Martin W. C., 1991, J. Phys. Chem. Ref. Data, 20, 105
 Kelleher D. E., Podobedova L. I., 2008, J. Phys. Chem. Ref. Data, 37, 559
 Larsen K. K. et al., 2011, ApJ, 735, L37
 Lundin L., Engman B., Hilke J., Martinson I., 1973, Phys. Scripta, 8, 274
 Martin W. C., Zalubas R., 1980, J. Phys. Chem. Ref. Data, 9, 20
 Mashonkina L., 2013, A&A, 550, id.A28
 Moore C. E., 1958, Atomic Energy Levels, NBS Circular 467 Vol. III. U.S. Government Printing Office, Washington, p. 213
 Niemann C. et al., 2003, J. Phys. D: Appl. Phys., 36, 2102
 Popović L. Č., Dimitrijević M. S., 1996, Publ. Astron. Obs. Belgrade, 54, 39
 Savukov I. M., 2003, J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys., 36, 4789
 Sealy M. P., Guo Y. B., 2010, J. Mech. Behav. Biomed., 3, 488
 Seaton M. J., 1962, in Bates D. R., ed., Atomic and Molecular Processes. Academic Press, New York
 Singh S., Harimkar S. P., 2012, J. Miner. Met. Mater. Soc., 64, 716
 Träbert E., 1996, Phys. Scripta, 53, 167
 Van Regemorter H., 1962, ApJ, 136, 906
 Verner D. A., Verner E. M., Ferland G. J., 1996, Atomic Data Nucl. Data Tables, 64, 1

SUPPORTING INFORMATION

Additional Supporting Information may be found in the online version of this article:

Table 2. Mg III $2p^6-2p^5ns$ (3–5) and $2p^5np$ (3, 4)– $2p^5ns$ (3–5) linewidths (FWHM) ω (pm) and shifts d (pm), normalized to $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

Table 3. Mg III $2p^5ns$ (3, 4)– $2p^5np$ (3, 4) and $2p^53d-2p^54p$ linewidths (FWHM) ω (pm) and shifts d (pm), normalized to $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

Table 4. Mg III $2p^6-2p^5nd$ (3, 4) and $2p^5np$ (3, 4)– $2p^5nd$ (3, 4) linewidths (FWHM) ω (pm) and shifts d (pm),

normalized to $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (<http://mnras.oxfordjournals.org/lookup/suppl/doi:10.1093/mnras/stt1413/-/DC1>).

Please note: Oxford University Press are not responsible for the content or functionality of any supporting materials supplied by the authors. Any queries (other than missing material) should be directed to the corresponding author for the article.

This paper has been typeset from a Microsoft Word file prepared by the author.