

Ar Floriano  
com agradecimento  
especial 6/73  
Juvoni

Doação: Flavio P. Lima  
R\$ 5,00

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
Instituto de Física

SIMULAÇÃO E INTERPRETAÇÃO DE ESPECTROS  
MOSSBAUER EM PEQUENO COMPUTADOR<sup>‡</sup>

Ivone Maluf Medero

Dissertação realizada sob a orientação  
do Ph.D. John D. Rogers, apresentada ao  
Instituto de Física da UFRGS em preen-  
chimento parcial dos requisitos para a  
obtenção do título de Mestre em Ciências

FT 72.80  
M 4995

220239-1

<sup>‡</sup> Trabalho parcialmente financiado pelas seguintes Instituições:  
Conselho Nacional de Pesquisas, Banco Nacional de Desenvolvi-  
mento Econômico, Conselho de Pesquisas da Universidade Federal do  
Rio Grande do Sul e Comissão Nacional de Energia Nuclear.

Porto Alegre  
1973

Biblioteca  
Instituto de Física  
UFRGS

### AGRADECIMENTOS

A John D. Rogers pela sua orientação neste trabalho,  
meu reconhecimento.

E a todos os que de uma forma ou outra contribuíram  
para o término deste trabalho.

## RESUMO

A partir dos estudos de interações quadripolares, um modelo foi desenvolvido para calcular espectros Mössbauer. Fez-se uma simulação deste modelo para computador digital de pequeno porte com apresentação visual das curvas calculadas e facilidade de interação entre experimental e computador.

Fez-se uma análise detalhada da estrutura hiperfina quadripolar e mostrou-se que através do cálculo exato dos valores das energias e amplitudes de transição, a interpretação de espectros Mössbauer experimentais torna-se mais fácil.

Evidenciou-se a variação das amplitudes de transição em função do parâmetro de assimetria e a existência de transições "proibidas" quando o gradiente de campo elétrico não apresenta simetria axial.

## ABSTRACT

Starting from studies of Nuclear Quadrupole Interactions a model was developed to calculate Mössbauer spectra. A program for simulation of this model on small digital computers was written which includes visual display of the calculated spectra and facilitates interaction between the computer and the user.

A detailed analysis of nuclear hyperfine structure was made and it was shown that exact calculation of the energies and transition probabilities allows easier interpretation of Mössbauer spectra.

Significant variations were found in the calculated transition probabilities as a function of the asymmetry parameter, as well as the presence of "forbidden" transition when the field gradient is not axially symmetric.

## CONTÉUDO

### 1. INTRODUÇÃO GERAL

### 2. DESENVOLVIMENTO TEÓRICO

#### 2.1 Introdução

#### 2.2 O Hamiltoniano Quadripolar

#### 2.3 Elementos de Matriz

#### 2.4 Autovalores e Autovetores

#### 2.5 Transições entre os Níveis

#### 2.6 Distribuição Lorentziana

#### 2.7 Tabelas de Autovalores e Autovetores

### 3. PROGRAMAÇÃO

#### 3.1 Introdução

#### 3.2 Descrição da Programação

#### 3.3 Diagramas de Blocos

### 4. APLICAÇÕES

#### 4.1 Introdução

#### 4.2 Esquema Teórico Detalhado

#### 4.3 Comparações Qualitativas entre as Experiências e Fotografias de Curvas Apresentadas no "Display"

##### 4.3.1 Compostos de $I^{129}$ : $IaI_3$ , $GdI_3$ e $ErI_3$

##### 4.3.2 Compostos de $Te^{129}$ : $Ie$ , $Te(NO_3)_4$ e $TeO_2$

##### 4.3.3 Compostos de $Hf^{178}$ : $(NH_4)_3HfF_7$ , $(NH_4)_4HfF_6$ e $K_2HfF_6$

### 5. CONCLUSÕES

APÊNDICE: Listagem com comentários

REFERÊNCIAS

## 1. INTRODUÇÃO GERAL

O Efeito Mössbauer é uma das ferramentas mais poderosas para investigações de campos internos em sólidos<sup>1 a 9</sup>. Através dos espectros observados podem ser obtidos o gradiente de campo elétrico para o núcleo e a constante de acoplamento quadripolar.

Existem métodos aproximados de calcular os diagramas de níveis de energia e as amplitudes de transição. Valores dados pelos coeficientes de Clebsch-Gordan são usados para aproximação no cálculo das amplitudes. Alguns pesquisadores utilizam estes valores aproximados para interpretar espectros Mössbauer experimentais, mas em geral os espectros só podem ser interpretados corretamente usando-se soluções exatas para as energias e amplitudes de transição.

Neste trabalho nos propomos encontrar as soluções exatas das energias, quando temos interação quadripolar e calcular as amplitudes de transição corretas para qualquer combinação de spins. Isto é feito através de programação FORTRAN para um sistema pequeno de computação, em que o experimentador pode atuar e analisar seus resultados, apresentados visualmente em osciloscópio junto do computador.

O capítulo 2 apresenta um resumo da teoria das interações quadripolares em sólidos, partindo do Hamiltoniano quadripolar. Os autovalores e autovetores são apresentados em tabelas para alguns valores típicos de spin. Curvas ilustrativas da variação de energia em função do parâmetro de assimetria para vários valores de spin são apresentadas. O desenvolvimento teórico é feito para encontrar a equação que fornece as amplitudes de transição entre os níveis correspondentes a 2 estados de spin nuclear separados devido à interação de quadripolo.

No capítulo 3 damos uma descrição da programação necessária a fim de simular o comportamento do sistema físico para uso em computador digital de pequeno porte, cuja listagem detalhada consta do Apêndice.

Como ilustração do comportamento e exemplificação de uso, no capítulo 4 foram selecionados para comparação alguns espectros experimentais. Estas comparações foram feitas entre as curvas cal-

culadas através do nosso sistema e figuras das curvas experimentais fornecidas pelas publicações<sup>10, 11, 12</sup>.

Uma análise detalhada dos esquemas de níveis de energia para alguns casos foi feita. Os gráficos ilustrativos que mostram a evidência da variação das amplitudes de transição em função do parâmetro de assimetria, foram apresentados para alguns casos. Além disso, em algumas comparações mostramos a existência de transições "proibidas".

## 2. DESENVOLVIMENTO TEÓRICO

### 2.1 INTRODUÇÃO

A existência de uma interação de quadrípolo elétrico é um dos fatos mais usados em espectroscopia Mössbauer.

A teoria é desenvolvida partindo da idéia que todo o núcleo com um número quântico de spin maior do que  $I = 1/2$  tem uma distribuição de carga não esférica, a qual se expandida como uma série de multipolos contém um termo de quadrípolo<sup>13</sup>.

Nesta seção apresentamos o desenvolvimento a partir do Hamiltoniano Quadrípolar dado em 2.2 pela equação (1).

Em 2.3 achamos a equação que dá os elementos de matriz correspondentes ao Hamiltoniano Quadrípolar. Pelo método de diagonalização de matriz são calculados os autovalores e autovetores correspondentes à matriz quadrípolar apresentados em 2.4.

As transições entre os níveis são tratadas em 2.5, cujo desenvolvimento leva à equação (31), que dá as amplitudes das transições.

Em 2.6 foi estudada a formação de curvas Lorentzianas para simular um espectro Mössbauer observado experimentalmente.

### 2.2 O HAMILTONIANO QUADRÍPOLAR

O Hamiltoniano que descreve a interação do momento de quadrípolo de um núcleo com o gradiente de campo criado pela distribuição de cargas vizinhas ao núcleo, para os casos de interesse a este trabalho, pode ser escrito como<sup>13</sup>:

$$H_Q = \frac{eQV_{zz}}{4I(2I-1)} \left[ (3I_z^2 - I^2) + \frac{V_{xx}-V_{yy}}{V_{zz}} (I_x^2 - I_y^2) \right] \quad (1)$$

onde  $I$  é o momento angular de spin nuclear.  $I_x$ ,  $I_y$  e  $I_z$  são as componentes de  $I$  nos eixos  $x$ ,  $y$  e  $z$ .  $Q$  é o momento de quadrípolo.

O gradiente de campo elétrico<sup>14,15</sup>, descrito pelo tensor simétrico  $V_{ij}$  de traço nulo foi reduzido a uma forma diagonal, escolhendo-se um conjunto de eixos ortogonais principais x, y e z. Em relação a estes eixos somente três componentes,  $V_{xx}$ ,  $V_{yy}$  e  $V_{zz}$  não se anulam. Estas três componentes satisfazem a condição

$$\nabla^2 V = 0 \quad (2)$$

ou seja

$$V_{xx} + V_{yy} + V_{zz} = 0 \quad (3)$$

Sendo dependentes entre si, apenas dois parâmetros são necessários para caracterizá-los. É costume utilizar para este fim

$$V_{zz} \text{ e } \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}} \text{ e definir:}$$

$$\epsilon \eta = V_{zz}$$

$$\eta = \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}}$$

onde  $\epsilon \eta$  é o gradiente de campo e  $\eta$  o parâmetro de assimetria.

A escolha dos dois parâmetros pode ser feita, orientando-se os eixos principais de maneira que o eixo z fique na direção de máximo gradiente de campo e o eixo x ao longo da direção de mínimo gradiente de campo, de tal modo que:



$$|V_{zz}| \geq |V_{yy}| \geq |V_{xx}| \quad (4)$$

Temos da equação (3) que

$$|V_{zz}| = |V_{xx} + V_{yy}|$$

estas equações (3) e (4) implicam em que com esta escolha de eixos,  $\eta$  tenha a seguinte propriedade:

$$0 \leq \eta \leq 1$$

Se o gradiente de campo é axialmente simétrico,  $V_{xx} = V_{yy}$  e  $\eta$  é zero. Por isso  $\eta$  é chamado parâmetro de assimetria, é ele que mede o desvio do gradiente de campo da simetria cilíndrica.

Se o gradiente de campo é esfericamente simétrico ou se tem simetria cúbica,  $V_{xx} = V_{yy} = V_{zz}$  e, pela equação  $V_{xx} + V_{yy} + V_{zz} = 0$ , vemos que cada componente é igual a zero e a interação de quadrípolo se anula.

Podemos escrever o Hamiltoniano (1) como

$$H_Q = \frac{e^2 q Q}{4I(2I-1)} \left[ (3I_z^2 - I^2) + \eta (I_x^2 - I_y^2) \right] \quad (5)$$

onde  $e^2 q Q$  é chamado de constante de acoplamento quadrípolar.

### 2.3 ELEMENTOS DE MATRIZ

O Hamiltoniano descrito pela equação (5) é posto em termos de  $I_+$ ,  $I_-$  e  $I_z$  devido a uma conveniente e particular regra de seleção dos operadores escadinha de momento angular de spin.  $I_+$  e  $I_-$  são definidos como<sup>16</sup>:

$$I_+ = I_x + iI_y \quad (6)$$

$$I_- = I_x - iI_y \quad (7)$$

$$I_x = \frac{1}{2} [I_+ - I_-]$$

$$I_y = \frac{1}{2i} [I_+ + I_-]$$

com valores de  $I_x^2$  e  $I_y^2$  valendo:

$$I_x^2 = \frac{1}{4} [I_+^2 - I_+ I_- - I_- I_+ + I_-^2]$$

sendo o valor

$$I_x^2 + I_y^2 = \frac{1}{2} [I_+^2 + I_-^2]$$

substituído na equação (5), obtemos a seguinte expressão para o operador Hamiltoniano que descreve a interação do momento de quadrupolo nuclear  $Q$  com gradientes de campos não axiais:

$$H_Q = \frac{e^2 q Q}{4I(2I-1)} \left[ (3I_z^2 - I^2) + \eta \frac{1}{2}(I_+^2 + I_-^2) \right] \quad (8)$$

Como base para expansão dos autovetores do sistema, usamos o conjunto de estados  $|I m\rangle$ , onde  $m$  é a projeção do spin nuclear  $I$  ao longo do eixo  $z$  (eixo de maior magnitude de  $V_{zz}$ ).

Os elementos de matriz de  $H_Q$  são dados por:

$$\langle I m' | H_Q | I m \rangle = \frac{e^2 q Q}{4I(2I-1)} \langle I m' | \left[ 3I_z^2 - I^2 + \eta \frac{1}{2}(I_+^2 + I_-^2) \right] | I m \rangle \quad (9)$$

usando o fato que

$$I_z |I m\rangle = m |I m\rangle \quad (10)$$

$$I^2 |I m\rangle = I(I+1) |I m\rangle \quad (11)$$

$$I_+^2 |I m\rangle = \sqrt{I(I+1)-m(m+1)} |I m+1\rangle \quad (12)$$

$$I_-^2 |I m\rangle = \sqrt{I(I+1)-m(m-1)} |I m-1\rangle \quad (13)$$

ficamos com os elementos de matriz valendo:

$$\begin{aligned} \langle m' | H_Q | m \rangle = & \frac{e^2 q Q}{4I(2I-1)} \left[ (3m^2 - I(I+1)) \delta_{m'm} + \right. \\ & + \eta \frac{1}{2} \sqrt{I(I+1)-m(m+1)} \sqrt{I(I+1)-(m+1)(m+2)} \delta_{m', m+2} + \\ & \left. + \eta \frac{1}{2} \sqrt{I(I+1)-m(m-1)} \sqrt{I(I+1)-(m-1)(m-2)} \delta_{m', m-2} \right] \quad (14) \end{aligned}$$

### 2.4 AUTOVALORES E AUTOVETORES

As energias devidas à interação quadripolar são dadas pelos autovalores da matriz formada através de (14).

Vê-se que a matriz  $H_Q$  só terá elementos não nulos para  $m' = m$ ,  $m' = m+2$  e  $m' = m-2$ , correspondendo à regra de seleção  $\Delta m = 0, \pm 2$ . Isto mostra que ocorrem estados misturados.

Quando o parâmetro de assimetria  $\eta$  é zero, temos matrizes diagonais cujos elementos valem

$$\langle m | H_Q | m \rangle = \frac{e^2 q Q}{4I(2I-1)} \left[ 3m^2 - I(I+1) \right] \quad (15)$$

e são as próprias energias correspondentes à interação quadripolar.

As matrizes correspondentes a spin semi-inteiro de ordem  $(2I+1)$ , têm a característica de serem equivalentes a duas matrizes iguais de ordem  $(2I+1)/2$  cada uma.

Por exemplo, no caso de  $I = 3/2$  a matriz será dada por:

	$m$	$3/2$	$1/2$	$-1/2$	$-3/2$
$H_Q \frac{e^2 q Q}{4}$	$3/2$	1	0	$\frac{\eta \sqrt{3}}{3}$	0
	$1/2$	0	-1	0	$\frac{\eta \sqrt{3}}{3}$
	$-1/2$	$\frac{\eta \sqrt{3}}{3}$	0	-1	0
	$-3/2$	0	$\frac{\eta \sqrt{3}}{3}$	0	1

Vê-se que esta é uma matriz simétrica real que é equivalente à matriz

$$H_Q = \frac{e^2 q Q}{4} \left( \begin{array}{cc|cc} 1 & \frac{\eta \sqrt{3}}{3} & 0 & 0 \\ \frac{\eta \sqrt{3}}{3} & -1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & \frac{\eta \sqrt{3}}{3} \\ 0 & 0 & \frac{\eta \sqrt{3}}{3} & -1 \end{array} \right)$$

Estas duas matrizes têm autovalores iguais, de onde se verifica que os estados ocorrem duplamente degenerados. No caso de  $\eta = 0$  esta degenerescência corresponde ao fato que as energias em (15) são iguais para  $+m$  e  $-m$ .

Pode-se mostrar que esta dupla degenerescência, chamada degenerescência de Kramers<sup>17</sup>, corresponde à invariância do Hamiltoniano (8) frente à inversão de tempo. Esta é uma propriedade de qualquer sistema com spin semi-inteiro interagido com um gradiente de campo elétrico, seja o sistema eletrônico ou nuclear.

Nos casos de spin inteiro, a matriz devida ao Hamiltoniano quadrupolar também pode ser separada em duas matrizes de menor ordem mas diferentes.

Por exemplo, para  $I = 2$  temos a matriz

$$H_Q = \frac{e^2 q Q}{4} \begin{array}{c|ccccc} & m & 2 & 1 & 0 & -1 & -2 \\ \hline m & & & & & & \\ 2 & & 1 & 0 & \eta/2 & 0 & 0 \\ 1 & & 0 & -1/2 & 0 & \eta/2 & 0 \\ 0 & \eta/2 & 0 & -1 & 0 & 0 & \eta/2 \\ -1 & 0 & \eta/2 & 0 & -1/2 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & \eta/2 & 0 & 0 & 1 \end{array}$$

esta matriz é equivalente a:

$$H_Q = \frac{e^2 q Q}{4} \left( \begin{array}{ccc|cc} 1 & \eta/2 & 0 & 0 & 0 \\ \eta/2 & -1 & \eta/2 & 0 & 0 \\ 0 & \eta/2 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & -1/2 & \eta/2 \\ 0 & 0 & 0 & \eta/2 & -1/2 \end{array} \right)$$

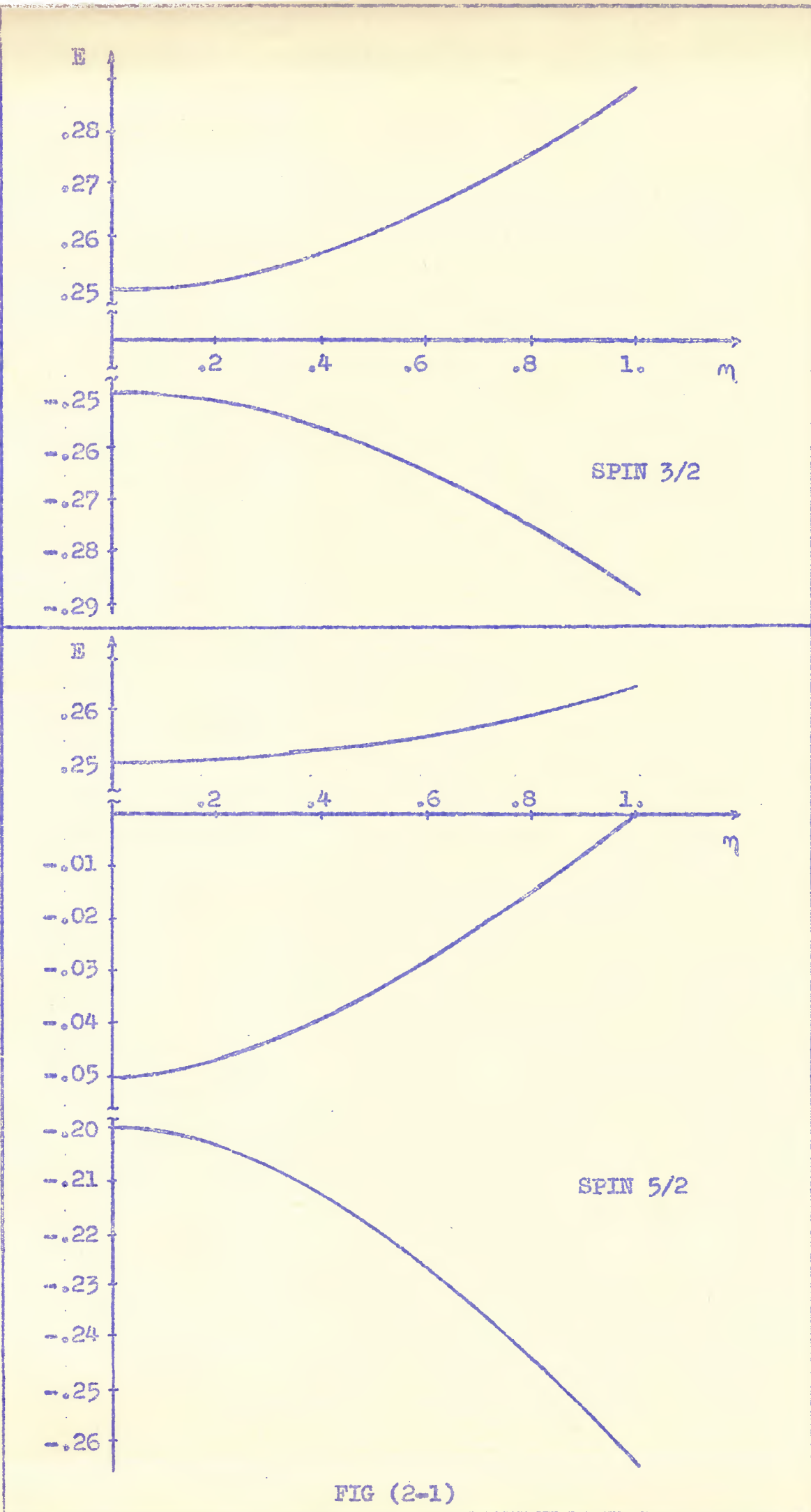


FIG (2-1)

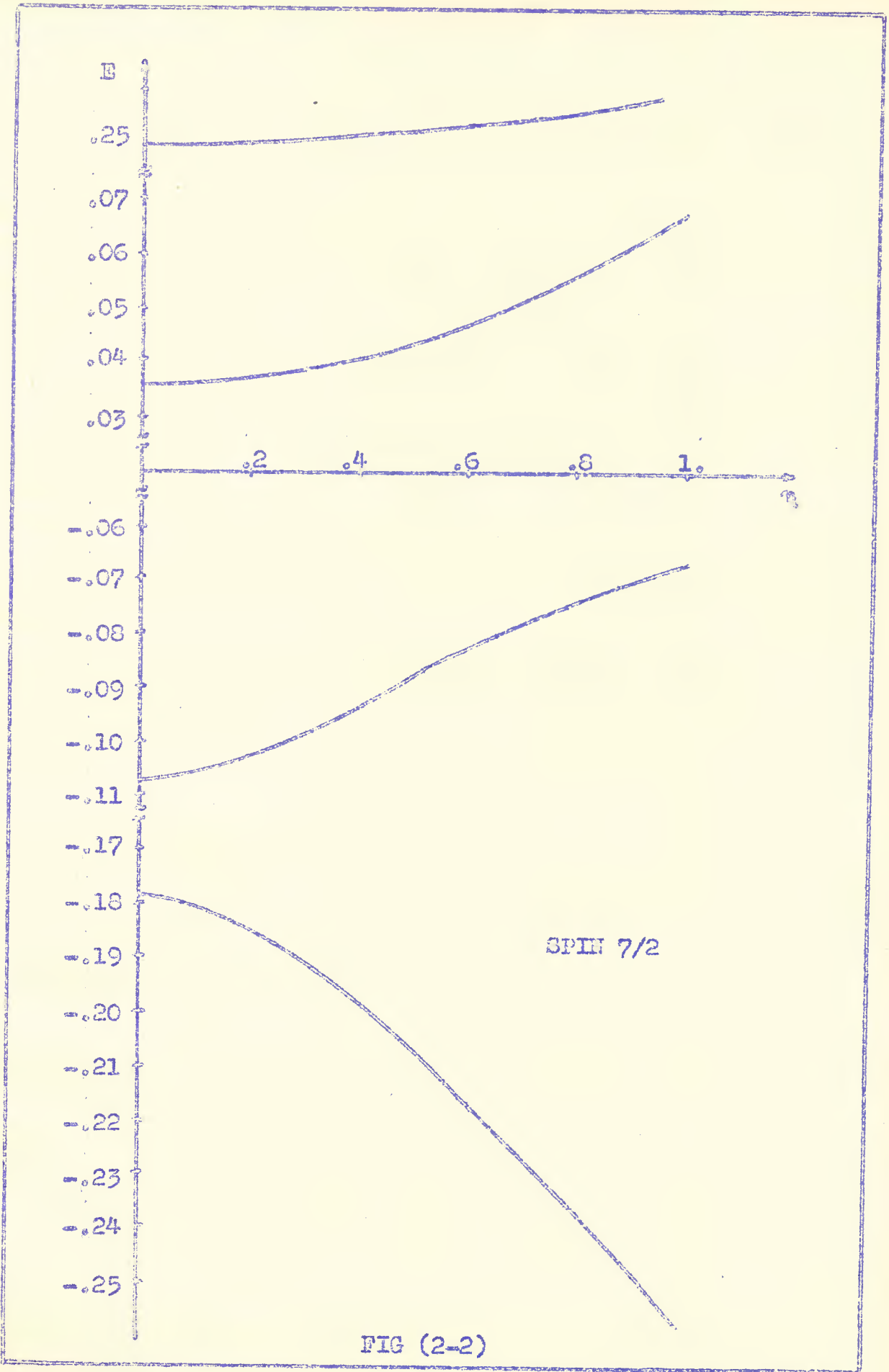


FIG (2-2)

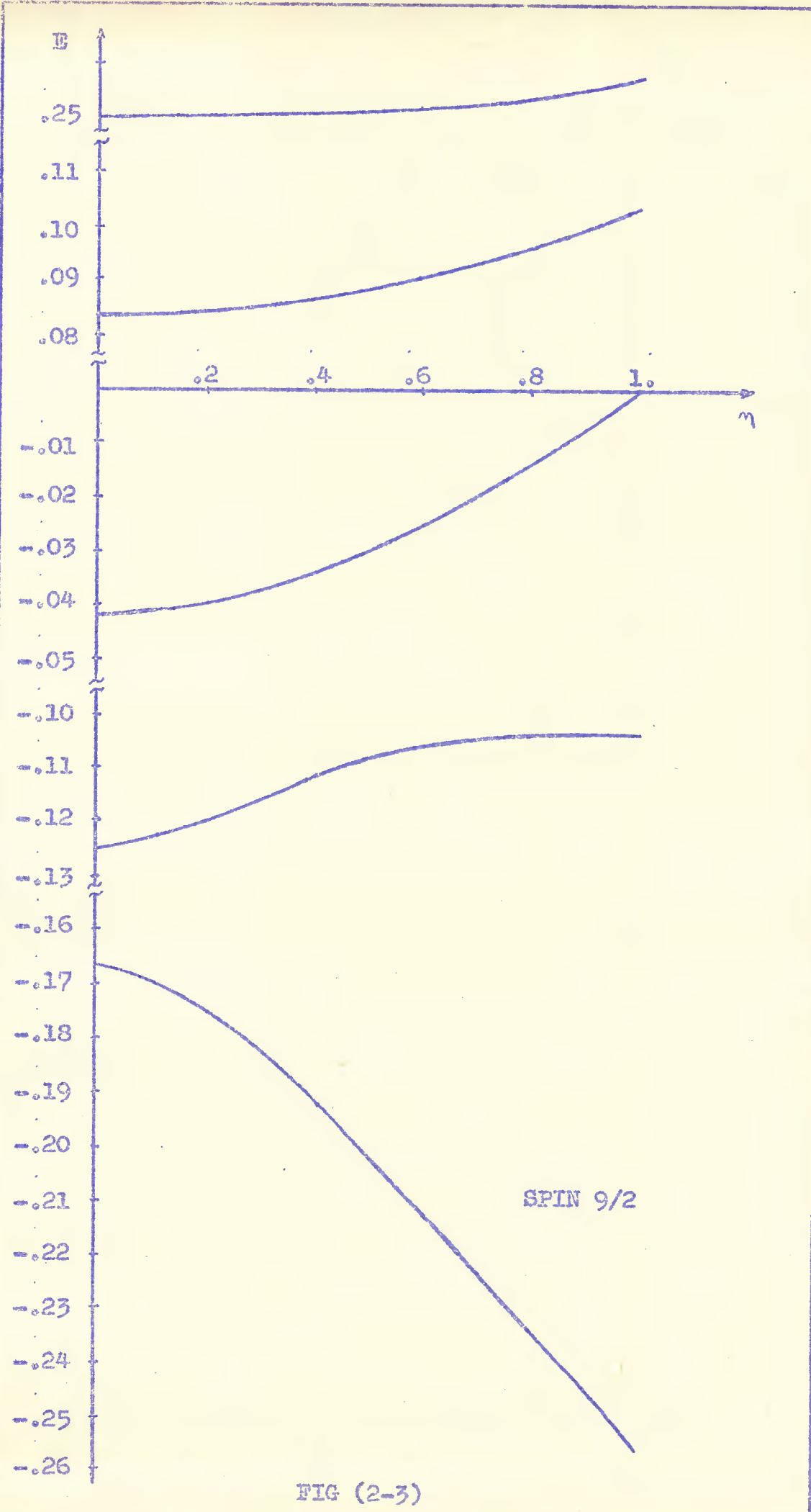


FIG (2-3)

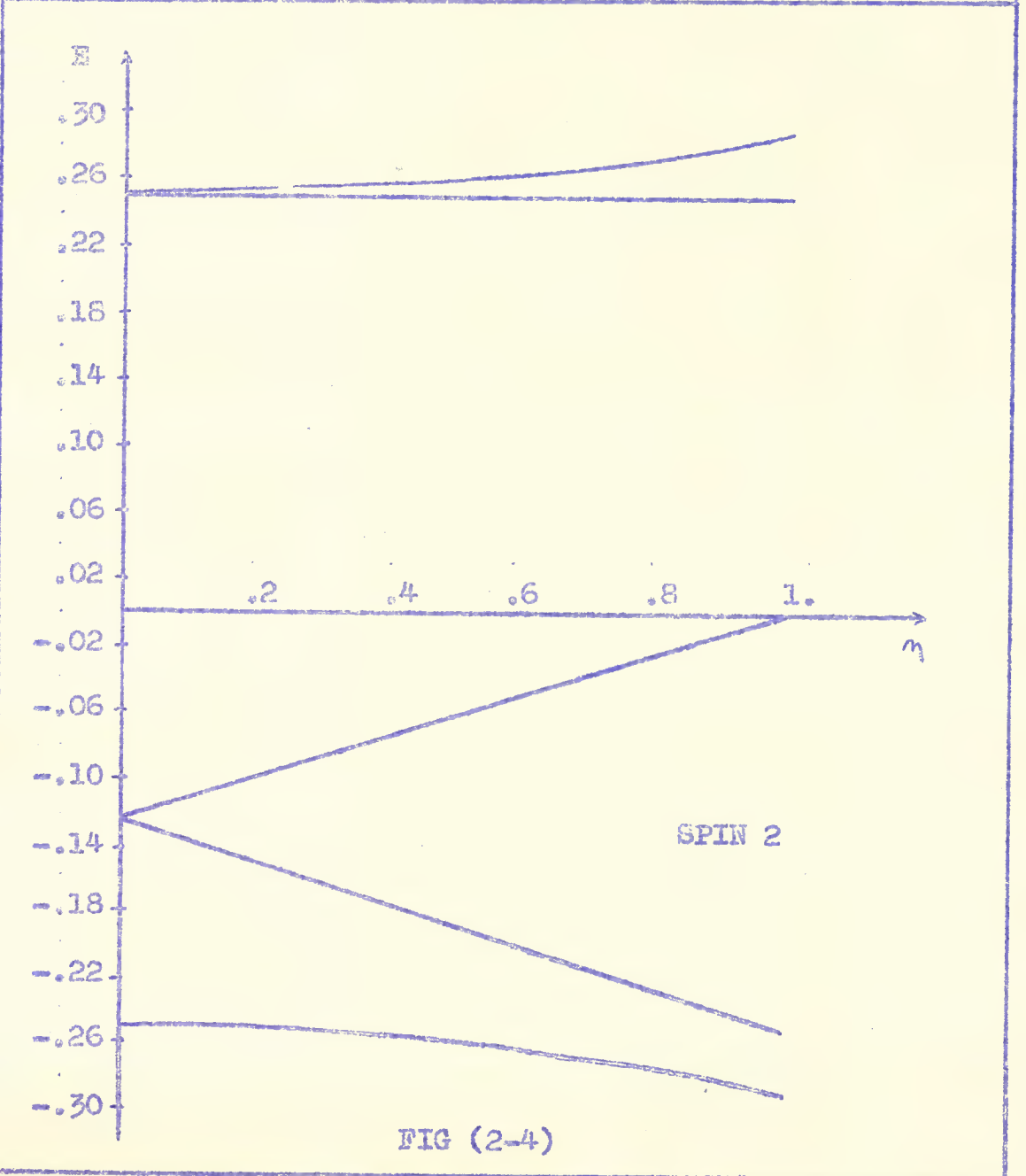
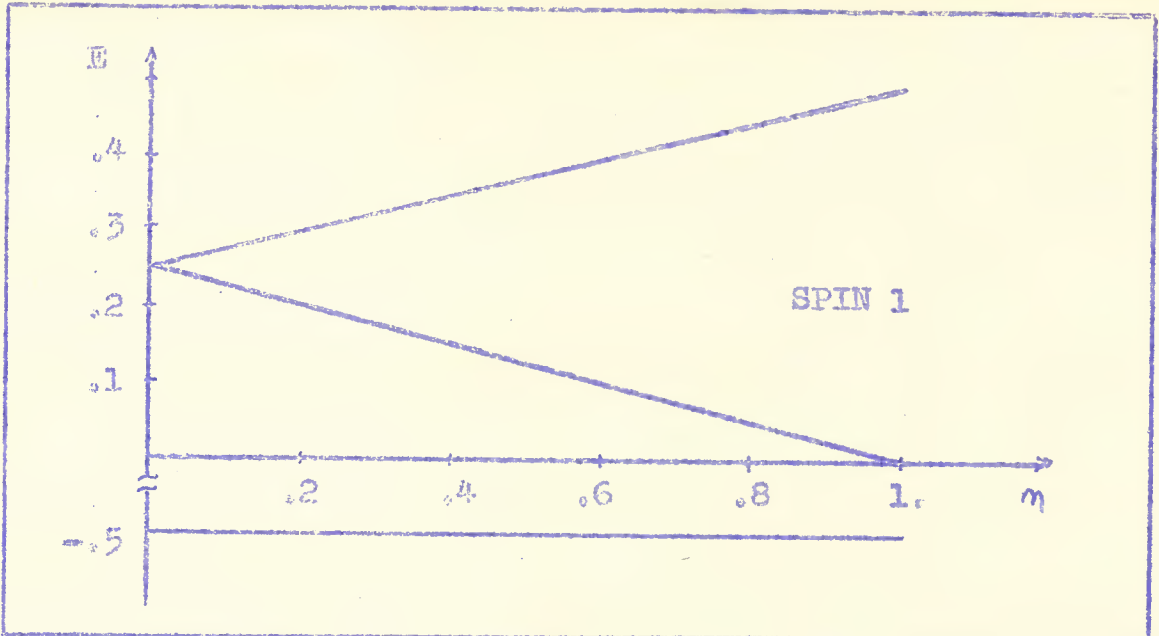


FIG (2-4)



Estas duas matrizes de ordem  $(I+1)$  e  $I$ , respectivamente, têm seus autovalores diferentes, não mostrando degenerescência, no caso geral.

Para um gradiente simétrico os valores das diagonais são os autovalores de  $H_0$ . Neste caso, devido à simetria cilíndrica, existe uma degenerescência em  $\pm m$  para  $m \neq 0$ .

Através da diagonalização de matrizes calculadas para vários  $I$ , obteve-se valores de energia com correspondentes autovetores.

Denominando os autovetores com dois  $|I_j a \rangle$ , onde  $a$  designa os vários possíveis estados, podemos escrever

$$|I_j a \rangle = \sum_i \alpha_i^j |I_j m_i \rangle \quad (16)$$

As tabelas a seguir de autovalores e autovetores apresentamos  $\alpha_i^j$  para  $m_i = I, I-1, I-2, \dots, -I$ , nesta ordem, para vários valores de  $I$  e  $\eta$ . Vide item 2.7:

As figuras (2-1), (2-2), (2-3) e (2-4) mostram a variação da energia com a variação de  $\eta$ .

## 2.5 TRANSIÇÕES ENTRE OS NÍVEIS

As amplitudes de transições entre dois estados  $I_i$  e  $I_f$  são proporcionais ao elemento de matriz<sup>18</sup> do operador  $H$  entre os níveis.

$$\langle I_f b | H | I_i a \rangle \quad (17)$$

onde  $H$  representa a radiação eletromagnética e é dado por<sup>19</sup>:

$$H = \int \vec{j} \cdot \vec{A}$$

com  $\vec{j}$  sendo a densidade de corrente e  $\vec{A}$  o potencial vetor.

Se  $\vec{A}$  representa uma onda plana indo em uma direção determinada pelo conjunto dos ângulos de Euler<sup>20</sup>  $(\alpha, \beta, \gamma)$ , relativos ao sistema de eixos principais do gradiente de campo, podemos escrever  $H$  na seguinte forma:

$$H = \sum_{\lambda, \mu} [M_{\lambda\mu}^{(m)} + H_{\lambda\mu}^{(e)}] \quad (18)$$

onde  $M_{\lambda\mu}^{(m)}$  é o termo da expansão em multipolo magnético e  $M_{\lambda\mu}^{(e)}$  é o termo da expansão em multipolo elétrico.

Chamando  $M_{\lambda}^{\mu}$  o tensor esférico dado por

$$M_{\lambda}^{\mu} = M_{\lambda\mu}^{(m)} + M_{\lambda\mu}^{(e)} \quad (19)$$

com a escolha do eixo z paralelo à direção de propagação, temos  $\mu = +1$  e  $-1$  correspondente à polarização circular para emissão e absorção, respectivamente.

No sistema dos eixos principais do gradiente de campo, este tensor pode ser escrito como<sup>18</sup>:

$$M_{\lambda}^{\mu} = \sum_{\mu'} D_{\mu\mu'}^{\lambda} \approx M_{\lambda}^{\mu'} \quad (20)$$

onde  $D_{\mu\mu'}^{\lambda}$  são os elementos de matriz do operador induzindo uma rotação pelos ângulos  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\varphi$ .

Usando as equações (20) e (19) em (18), ficamos com

$$H = \sum_{\lambda, \mu, \mu'} D_{\mu\mu'}^{\lambda} \approx M_{\lambda}^{\mu'} \quad (21)$$

A amplitude de transição entre dois níveis  $I_1 a$  e  $I_2 b$ , obtida pela emissão de uma radiação para um ângulo  $\theta$  ao redor do eixo z considerando uma definida polarização circular para emissão, ou seja, fazendo  $\mu = 1$ , é proporcional ao elemento de matriz dado por

$$E = \sum_{\lambda, \mu'} \langle I_2 b | D_{\mu\mu'}^{\lambda} \approx M_{\lambda}^{\mu'} | I_1 a \rangle \quad (22)$$

Os estados representados por  $|I_2 b\rangle$  e  $|I_1 a\rangle$  podem ser escritos na forma expandida dada pela equação (16):

$$|I_1 a\rangle = \sum_K \alpha_K^i |I_1 m_K\rangle$$

$$|I_2 b\rangle = \sum_j \beta_j^f |I_2 m_j\rangle$$

Substituindo estas em (22) temos que:

$$E = \sum_j \sum_K \alpha_K^i \beta_j^f \sum_{\mu\lambda} D_{\mu\lambda}^{\lambda} \approx \langle I_2 m_j | M_{\lambda}^{\mu} | I_1 m_K \rangle \quad (23)$$

Seendo  $M_{\lambda}^{\mu}$  um operador tensor esférico, podemos usar o teorema de Wigner-Eckart<sup>21</sup>, onde o elemento de matriz pode ser posto na forma reduzida, da seguinte maneira:

$$\langle I_f m_j | M_{\lambda}^{\mu} | I_i m_K \rangle = (I_i m_K \lambda \mu | I_f m_j) \frac{\langle I_f || M_{\lambda} || I_i \rangle}{\sqrt{2I_f + 1}} \quad (24)$$

onde  $(I_i m_K \lambda \mu | I_f m_j)$  é o coeficiente de Clebsch-Gordan<sup>21</sup>,  $\langle I_f || M_{\lambda} || I_i \rangle$  o elemento de matriz reduzido.

Definindo por conveniência<sup>18</sup>

$$c = \frac{\langle I_f || M_{\lambda} || I_i \rangle}{\sqrt{2I_f + 1}}$$

temos

$$E = \sum_{\mu\lambda} \sum_j \sum_K \alpha_K^i \beta_j^f D_{j\mu}^{\lambda} \times (I_i m_K \lambda \mu | I_f m_j) c \quad (25)$$

que pode ser reescrito como:

$$E = \sum_j \sum_K \alpha_K^i \beta_j^f \sum_{\lambda\mu} D_{j\mu}^{\lambda} \times (I_i m_K \lambda (m_j - m_K) | I_f m_j) c$$

A amplitude de transição entre os níveis é proporcional ao módulo do elemento ao quadrado

$$A(f \leftarrow i) \propto | E |^2$$

então

$$A(f \leftarrow i) \propto \sum_j \sum_K \sum_{\lambda} (\alpha_K^i)^2 (\beta_j^f)^2 (I_i m_K \lambda m - m | I_f m_j)^2 \times \sum_{\mu} D_{j\mu}^{\lambda} \times D_{j\mu}^{\lambda} \quad (26)$$

Usa-se o sinal proporcional porque deixou-se fora a constante  $c$ , que independe dos ângulos  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ .

Tratamos neste trabalho de absorção (ou emissão) de raios gamma numa amostra de forma de pó cristalino. Sendo que (27) representa a probabilidade de absorção (ou emissão) para um raio  $\gamma$  na direção especificada por  $(\alpha, \beta, \gamma)$  com respeito aos eixos do gradiente de campo, podemos obter a expressão para um pó, em que os ângulos são aleatórios para os vários micro-cristais, fazendo a média sobre as direções relativas entre o raio  $\gamma$  e os eixos.

Fazemos isto, integrando a expressão (27) em relação aos ângulos  $\alpha, \beta$  e  $\gamma$ .

$$A(f \leftarrow i) \propto \sum_{\lambda} \sum_{K} \sum_{j} (\alpha_{\frac{i}{K}})^2 (\beta_{\frac{f}{j}})^2 (I_{i, m_K} \lambda (m_K - m_j) | I_{f, m_j})^2$$

$$\approx \sum_{\mu} \int D_{1\mu}^{\lambda} \approx D_{1\mu}^{\lambda} d\Omega \quad (28)$$

onde, está sob a integral apenas a parte dependente de ângulos. Definindo

$$I = \sum_{\mu} \int D_{1\mu}^{\lambda} \approx D_{1\mu}^{\lambda} d\Omega \quad (29)$$

e escrevendo :

$D_{1\mu}^{\lambda} \approx (-1)^{1-\mu} D_{-1-\mu}^{\lambda}$ , substituindo na (29) ficamos com:

$$I = \sum_{\mu} (-1)^{1-\mu} \int D_{-1-\mu}^{\lambda} D_{1\mu}^{\lambda} d\Omega$$

Usando propriedades das matrizes  $D^{20}$ , ficamos com

$$I = \sum_{\mu} (-1)^{1-\mu} \int \sum_{\lambda'} (\lambda \mu \lambda - \mu | \lambda' (\mu - \mu) | \times$$

$$\times (\lambda 1 \lambda - 1 | \lambda' (1-1) \times D_{00}^{\lambda'} d\Omega$$

ou seja:

$\approx$  usou-se  $\int D_{1\mu}^{\lambda} \approx D_{1\mu}^{\lambda} d\nu$  no lugar de

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} D_{1\mu}^{\lambda} \approx (\alpha, \beta, \gamma) D_{1\mu}^{\lambda} (\alpha, \beta, \gamma) d\alpha \sin\beta d\beta d\gamma$$

$$I = \sum_{\lambda'} (-1)^{1-\mu} \int \sum_{\lambda} (\lambda \mu \lambda - \mu | \lambda' 0) (\lambda 1 \lambda - 1 | \lambda' 0) D_{00}^{\lambda'} d\nu \quad (30)$$

Usando

$$\sum_{JM} (j_1 m_1 j_2 m_2 | JM) (j_1 m_1' j_2 m_2' | JM) = \delta_{m_1' m_1} \delta_{m_2' m_2}$$

$$\sum_{\lambda'} (\lambda \mu \lambda - \mu | \lambda' 0) (\lambda 1 \lambda - 1 | \lambda' 0) = \delta_{1\mu} \delta_{-1-\mu}$$

e

$$\sum_{\lambda'} (\lambda \mu \lambda - \mu | \lambda' 0) (\lambda 1 \lambda - 1 | \lambda' 0) = 1$$

Substituindo este na (30) temos <sup>13</sup>,

$$I = (-1)^{1-1} \int D_{00}^{\lambda'} d\nu = 8\pi^2 \delta(\lambda' 0)$$

substituindo agora I na equação (28) da amplitude de transição, ficam os termos para um determinado  $\lambda$  com:

$$A(\pi \leftarrow i) \propto \sum_K \sum_J (\alpha_K^i)^2 (\beta_J^f)^2 (I_{i n_K} \lambda (m_{j-n_K}) | I_f m_j)^2 \quad (31)$$

onde novamente as constantes não são consideradas.

Esta é a forma da equação que dá a amplitude de uma transição entre dois níveis num pó cristalino. A posição desta transição no espectro Mössbauer é dada pela diferença de energia entre os níveis.

Como foi visto anteriormente,  $m_z$ , a projeção do momento angular no eixo  $z$ , é um bom número quântico somente quando  $\eta = 0$ . Para este caso existe uma regra de seleção para a radiação gama que proíbe transições para as quais  $|\Delta m| = \lambda$ .

Esta regra de seleção está implícita na equação (24), por exemplo, devido ao coeficiente de Clebsch-Gordan.

Por exemplo, para  $\lambda = 1$  numa transição  $7/2 \rightarrow 5/2$  para  $\eta = 0$  as transições permitidas são aquelas mostradas na figura (2-5).

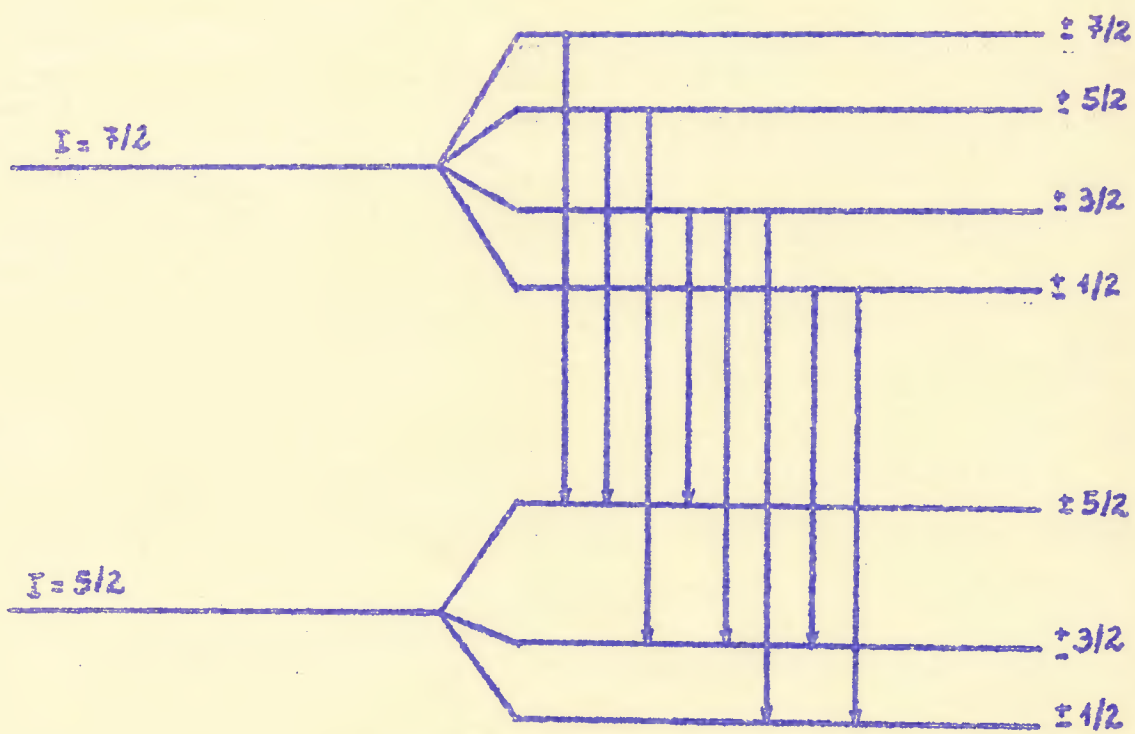


FIGURA (2-5)

No caso de  $\eta \neq 0$ , onde existem estados misturados, vê-se da equação (31) que ocorrem transições que eram "proibidas" para  $\eta = 0$ .

Na figura (2-6) as transições mostradas com linhas tracejadas representam as transições "proibidas".

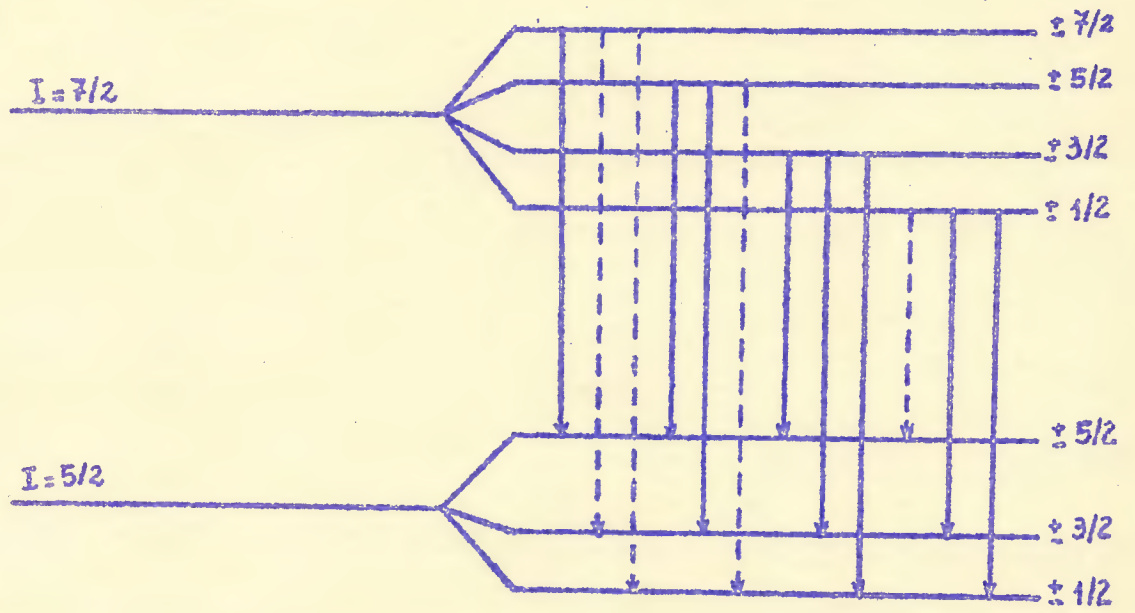


FIGURA (2-6)

Resultados típicos são vistos nas tabelas apresentadas no Capítulo 4.

## 2.6 DISTRIBUIÇÃO LORENTZIANA

Um espectro Mössbauer<sup>22</sup> consiste de um número de linhas originadas das transições entre os sub-níveis dos estados fundamental e excitado dos núcleos absorventes.

A distribuição espectral devida a estas linhas numa posição de energia  $E_0 = E_e - E_g$ , onde  $E_e$  e  $E_g$  são as energias dos estados excitados e fundamental respectivamente, obedece a uma Lorentziana<sup>23</sup>

$$I(E) = \frac{1}{(E-E_0)^2 + \Gamma_0^2/4} \quad (32)$$

Para espectro Mössbauer ideal,  $\Gamma_0 = 2 \Gamma_N$ , onde  $\Gamma_N$  é a largura natural da linha de emissão centrada em torno da energia  $E_0$  da transição.

Em relação a  $\tau$ , vida média do estado excitado,

$$\Gamma_N = \frac{\hbar}{\tau}$$

No caso prático, as larguras da linha de emissão ou absorção observadas são maiores que  $\Gamma_0$ .

Podemos escrever a distribuição Lorentziana que forma o espectro Mössbauer devida a uma transição de amplitude  $A$  numa posição  $E_0$  como:

$$I(E) \propto \frac{A}{(E-E_0)^2 + \Gamma^2/4 + 1} \quad (33)$$

O espectro Mössbauer é dado pela soma de curvas Lorentzianas calculadas pela equação (33) para os vários valores de  $A$  e  $E_0$ .

## 2.7 TABELAS DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

\*\* SPIN: .0 \*\* ETA: .0 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.00000 1.0000

\*\* SPIN: .5 \*\* ETA: .0 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.00000 1.0000 .0000  
.00000 .0000 1.0000

\*\* SPIN: .5 \*\* ETA: .5 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.00000 1.0000 .0000  
.00000 .0000 1.0000

\*\* SPIN: .5 \*\* ETA: 1.0 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.00000 1.0000 .0000  
.00000 .0000 1.0000

\*\* SPIN: 1.5 \*\* ETA: .0 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25000 1.0000 .0000 .0000 .0000  
.25000 .0000 .0000 .0000 1.0000  
-.25000 .0000 .0000 1.0000 .0000  
-.25000 .0000 1.0000 .0000 .0000

\*\* SPIN: 1.5 \*\* ETA: .2 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25166 .9983 .0000 .0574 .0000  
.25166 .0000 .0574 .0000 .9983  
-.25166 -.0574 .0000 .9983 .0000  
-.25166 .0000 .9983 .0000 -.0574

\*\* SPIN: 1.5 \*\* ETA: .4 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25658 .9936 .0000 .1132 .0000  
.25658 .0000 .1132 .0000 .9936  
-.25658 -.1132 .0000 .9936 .0000  
-.25658 .0000 .9936 .0000 -.1132



\*\* SPIN: 1.5 \*\* ETA: .6 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.26458	.9861	.0000	.1660	.0000
.26458	.0000	.1660	.0000	.9861
-.26458	-.1660	.0000	.9861	.0000
-.26458	.0000	.9861	.0000	-.1660

\*\* SPIN: 1.5 \*\* ETA: .8 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.27538	.9767	.0000	.2147	.0000
.27538	.0000	.2147	.0000	.9767
-.27538	-.2147	.0000	.9767	.0000
-.27538	.0000	.9767	.0000	-.2147

\*\* SPIN: 1.5 \*\* ETA: 1.0 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.28868	.9659	.0000	.2588	.0000
.28868	.0000	.2588	.0000	.9659
-.28868	-.2588	.0000	.9659	.0000
-.28868	.0000	.9659	.0000	-.2588

\*\* SPIN: 2.5 \*\* ETA: .0 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
.25000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000
-.05000	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000
-.05000	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
-.20000	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000
-.20000	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000

\*\* SPIN: 2.5 \*\* ETA: .2 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25056	.9994	.0000	.0352	.0000	.0025	.0000
.25056	.0000	.0025	.0000	.0352	.0000	.9994
-.04707	.0000	.9906	.0000	.1367	.0000	-.0073
-.04707	-.0073	.0000	.1367	.0000	.9906	.0000
-.20348	.0000	-.1368	.0000	-.9900	.0000	-.0345
-.20348	-.0345	.0000	.9900	.0000	-.1368	.0000

\*\* SPIN: 2.5 \*\* ETA: .4 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25224	.9975	.0000	.0707	.0000	.0099	.0000
.25224	.0000	.0099	.0000	.0707	.0000	.9974
-.03905	.0000	.9679	.0000	.2498	.0000	-.0273
-.03905	-.0273	.0000	.2498	.0000	.9679	.0000
-.21319	.0000	-.2511	.0000	.9657	.0000	-.0659
-.21319	-.0659	.0000	.9657	.0000	-.2511	.0000

\*\* SPIN: 2.5 \*\* ETA: .6 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25509	.0000	.0223	.0000	.1067	.0000	.9940
.25509	.9940	.0000	.1067	.0000	.0223	.0000
-.02757	.0000	.9416	.0000	.3319	.0000	-.0567
-.02757	-.0567	.0000	.3319	.0000	.9416	.0000
-.22753	.0000	-.3360	.0000	.9373	.0000	-.0931
-.22753	-.0931	.0000	.9373	.0000	-.3360	.0000

\*\* SPIN: 2.5 \*\* ETA: .8 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25918	.0000	.0394	.0000	.1435	.0000	.9889
.25918	.9889	.0000	.1435	.0000	.0394	.0000
-.01417	.0000	.9173	.0000	.3873	.0000	-.0927
-.01417	-.0927	.0000	.3873	.0000	.9173	.0000
-.24500	-.1164	.0000	.9107	.0000	-.3963	.0000
-.24500	.0000	-.3963	.0000	.9107	.0000	-.1164

\*\* SPIN: 2.5 \*\* ETA: 1.0 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.26458	.0000	.0610	.0000	.1810	.0000	.9816
.26458	.9816	.0000	.1810	.0000	.0610	.0000
.00000	.0000	.8964	.0000	.4226	.0000	-.1336
.00000	-.1336	.0000	.4226	.0000	.8964	.0000
-.26458	-.1364	.0000	.8881	.0000	-.4390	.0000
-.26458	.0000	-.4390	.0000	.8881	.0000	-.1364

\*\* SPIN: 3.5 \*\* ETA: .0 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
.25000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000
.03571	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000
.03571	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
-.10714	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
-.10714	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000
-.17857	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000
-.17857	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000

\*\* SPIN: 3.5 \*\* ETA: .2 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25033	.9995	.0000	.0306	.0000	.0013	.0000	.0001	.0000
.25033	.0000	.0001	.0000	.0013	.0000	.0306	.0000	.9995
.03691	-.0005	.0000	.0095	.0000	.0747	.0000	.9972	.0000
.03691	.0000	.9972	.0000	.0747	.0000	.0095	.0000	-.0005
-.10308	.0000	-.0267	.0000	.2318	.0000	.9719	.0000	-.0300
-.10308	-.0300	.0000	.9719	.0000	.2318	.0000	-.0267	.0000
-.18416	.0000	-.0705	.0000	.9699	.0000	-.2331	.0000	.0059
-.18416	.0059	.0000	-.2331	.0000	.9699	.0000	-.0705	.0000

\*\* SPIN: 3.5 \*\* ETA: .4 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25134	.9981	.0000	.0613	.0000	.0053	.0000	.0008	.0000
.25134	.0000	.0008	.0000	.0053	.0000	.0613	.0000	.9981
.04057	-.0038	.0000	.0369	.0000	.1502	.0000	.9880	.0000
.04057	.0000	.9880	.0000	.1502	.0000	.0369	.0000	-.0038
-.09384	-.0586	.0000	.9236	.0000	.3679	.0000	-.0907	.0000
-.09384	.0000	-.0907	.0000	.3679	.0000	.9236	.0000	-.0586
-.19808	.0183	.0000	-.3766	.0000	.9177	.0000	-.1254	.0000
-.19808	.0000	-.1254	.0000	.9177	.0000	-.3766	.0000	.0183

\*\* SPIN: 3.5 \*\* ETA: .6 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25304	.9956	.0000	.0923	.0000	.0121	.0000	.0027	.0000
.25304	.0000	.0027	.0000	.0121	.0000	.0923	.0000	.9956
.04685	-.0126	.0000	.0784	.0000	.2256	.0000	.9710	.0000
.04685	.0000	.9710	.0000	.2256	.0000	.0784	.0000	-.0126
-.08356	.0000	-.1718	.0000	.4277	.0000	.8832	.0000	-.0867
-.08356	-.0867	.0000	.8832	.0000	.4277	.0000	-.1718	.0000
-.21632	.0000	-.1664	.0000	.8752	.0000	-.4531	.0000	.0318
-.21632	.0318	.0000	-.4531	.0000	.8752	.0000	-.1664	.0000

\*\* SPIN: 3.5 \*\* ETA: .8 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25545	.9920	.0000	.1239	.0000	.0220	.0000	.0064	.0000
.25545	.0000	.0064	.0000	.0220	.0000	.1239	.0000	.9920
.05583	-.0286	.0000	.1271	.0000	.2978	.0000	.9457	.0000
.05583	.0000	.9457	.0000	.2978	.0000	.1271	.0000	-.0286
-.07446	-.1144	.0000	.8503	.0000	.4444	.0000	-.2577	.0000
-.07446	.0000	-.2577	.0000	.4444	.0000	.8503	.0000	-.1144
-.23682	.0000	-.1980	.0000	.8446	.0000	-.4954	.0000	.0444
-.23682	.0444	.0000	-.4954	.0000	.8446	.0000	-.1980	.0000

\*\* SPIN: 3.5 \*\* ETA: 1.0 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25863	.9870	.0000	.1561	.0000	.0352	.0000	.0126	.0000
.25863	.0000	.0126	.0000	.0352	.0000	.1561	.0000	.9870
.06738	-.0523	.0000	.1751	.0000	.3624	.0000	.9139	.0000
.06738	.0000	.9139	.0000	.3624	.0000	.1751	.0000	-.0523
-.06738	-.1411	.0000	.8209	.0000	.4374	.0000	-.3389	.0000
-.06738	.0000	-.3389	.0000	.4374	.0000	.8209	.0000	-.1411
-.25863	.0558	.0000	-.5206	.0000	.8222	.0000	-.2231	.0000
-.25863	.0000	-.2231	.0000	.8222	.0000	-.5206	.0000	.0558

\*\* SPIN: 1.0 \*\* ETA: .0 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25000	1.0000	.0000	.0000
.25000	.0000	.0000	1.0000
-.50000	.0000	1.0000	.0000

\*\* SPIN: 1.0 \*\* ETA: .2 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.30000	.7071	.0000	.7071
.20000	-.7071	.0000	.7071
-.50000	.0000	1.0000	.0000

\*\* SPIN: 1.0 \*\* ETA: .4 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.35000	.7071	.0000	.7071
.15000	-.7071	.0000	.7071
-.50000	.0000	1.0000	.0000

\*\* SPIN: 1.0 \*\* ETA: .6 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.40000	.7071	.0000	.7071
.10000	-.7071	.0000	.7071
-.50000	.0000	1.0000	.0000

\*\* SPIN: 1.0 \*\* ETA: .8 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.45000	.7071	.0000	.7071
.05000	-.7071	.0000	.7071
-.50000	.0000	1.0000	.0000

\*\* SPIN: 1.0 \*\* ETA: 1.0 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.50000	.7071	.0000	.7071
-.00000	-.7071	.0000	.7071
-.50000	.0000	1.0000	.0000

\*\* SPIN: 2.0 \*\* ETA: .0 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
.25000	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000
-.12500	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000
-.12500	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000
-.25000	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000

\*\* SPIN: 2.0 \*\* ETA: .2 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25166	.7060	.0000	.0574	.0000	.7059
.25000	-.7071	.0000	.0000	.0000	.7071
-.10000	.0000	.7071	.0000	.7071	.0000
-.15000	.0000	-.7071	.0000	.7071	.0000
-.25166	-.0406	.0000	.9983	.0000	-.0406

\*\* SPIN: 2.0 \*\* ETA: .4 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.25658	.7026	.0000	.1132	.0000	.7026
.25000	-.7071	.0000	-.0000	.0000	.7071
-.07500	.0000	.7071	.0000	.7071	.0000
-.17500	.0000	-.7071	.0000	.7071	.0000
-.25658	-.0801	.0000	.9936	.0000	-.0801

\*\* SPIN: 2.0 \*\* ETA: .6 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.26458	.6973	.0000	.1660	.0000	.6973
.25000	-.7071	.0000	-.0000	.0000	.7071
-.05000	.0000	.7071	.0000	.7071	.0000
-.20000	.0000	-.7071	.0000	.7071	.0000
-.26458	-.1174	.0000	.9861	.0000	-.1174

\*\* SPIN: 2.0 \*\* ETA: .8 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.27538	.6906	.0000	.2147	.0000	.6906
.25000	-.7071	.0000	-.0000	.0000	.7071
-.02500	.0000	.7071	.0000	.7071	.0000
-.22500	.0000	-.7071	.0000	.7071	.0000
-.27538	-.1518	.0000	.9767	.0000	-.1518

\*\* SPIN: 2.0 \*\* ETA: 1.0 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.28868	.6830	.0000	.2588	.0000	.6830
.25000	-.7071	.0000	.0000	.0000	.7071
.00000	.0000	.7071	.0000	-.7071	.0000
-.25000	.0000	-.7071	.0000	.7071	.0000
-.28868	-.1830	.0000	.9659	.0000	-.1830

### 3. PROGRAMAÇÃO

#### 3.1 INTRODUÇÃO

A partir das equações resultantes no desenvolvimento dos itens 2.3, 2.5 e 2.6, procurou-se formar um modelo numérico que simulasse o comportamento físico.

Em experiências de Efeito Mössbauer, têm sido usados em muitos casos, para o cálculo das amplitudes de transição, os coeficientes de Clebsch-Gordan. Mostramos em 2.5 que para  $\eta \neq 0$  os valores exatos das amplitudes de transição são dados pela equação (31). Para valores de spin superior a 3/2 torna-se necessário o uso de computador nestes cálculos.

Inicialmente, utilizamos o computador HP 2114A no trabalho de programação<sup>24, 25, 26</sup> porém a maior parte deste foi desenvolvida e testada no IBM-1130 por estar o HP 2114A, na época, numa configuração de 4K de memória, dificultando a execução e compilação de programas em FORTRAN (linguagem utilizada). Na fase final do trabalho usamos o computador HP 2100 com leitora de cartões, disco e principalmente com "display" (apresentação visual em osciloscópio), dando ao usuário a possibilidade de fazer uma análise detalhada dos espectros calculados e ali apresentados.

O trabalho foi feito por partes (subprogramas), por serem estas de utilidade independente e uso geral.

Os subprogramas são utilizados num programa principal, de forma que dados: spins inicial e final, correspondentes ao estado excitado e ao fundamental respectivamente, parâmetro de assimetria, fator  $Q_{ex}/Q_0$ , valor de  $e^2qQ$  (constante de acoplamento quadrupolar) em mm/s e valor de  $\Gamma$  (largura de linha) em mm/s; temos como resposta a apresentação visual em osciloscópio da curva calculada a fim de que possa ser comparada com pontos experimentais e, opcionalmente, a tabela de resultados com autovalores, autovetores correspondentes aos spins do estado excitado e fundamental, amplitudes de transição com as correspondentes diferenças de energia (posições) e os pontos que formam a curva que é apresentada no "display". Vide exemplo de formato de saída nas tabelas apresentadas no Capítulo 4.

O procedimento deste programa depois de lidos os parâme -

tos requeridos (ver comentários junto à listagem do programa principal) segue a seguinte sequência: cálculo da matriz quadripolar referente a um dos spins, cálculo dos autovalores e autovetores; mesmo procedimento para o outro spin, cálculo da matriz, autovalores e autovetores; cálculo das amplitudes de transição entre os níveis e diferenças de energia entre eles; cálculo dos pontos que formam a curva, dados pela soma de Lorentzianas (descrição em 2.6).

E, finalmente, a apresentação visual desta curva. O usuário pode examinar com cuidado o caso que corresponde à sua experiência e imprimir a tabela de valores teóricos calculados pelo programa.

A seguir, apresentamos uma breve descrição dos subprogramas principais do sistema com diagramas de blocos e dos vários programas da biblioteca de subprogramas científicos da IBM usados.

### 3.2 DESCRIÇÃO DA PROGRAMAÇÃO

Os subprogramas aqui descritos, referem-se aos cálculos realizados e especificados no item 3.1.

A subrotina MAT calcula os elementos da matriz de interação quadripolar a partir da equação (14). A diagonalização desta matriz é feita pela subrotina EIGEN<sup>27</sup>.

A entrada da matriz a ser diagonalizada deve estar ordenada por colunas e contendo os elementos da diagonal e, acima dela, numa forma de arranjo unidimensional, como mostra a figura (3-1b). Vide comentários na listagem da EIGEN.

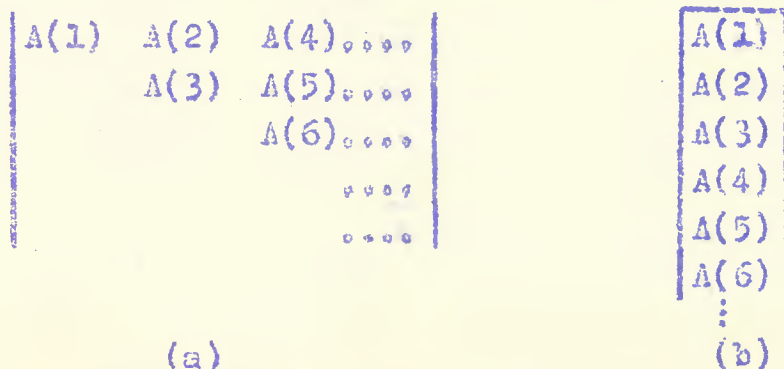


FIGURA (3-1)



A esta ordenação denomina-se armazenamento simétrico de uma matriz.

No entanto, IAT entrega a matriz a ser armazenada segundo o modo normal, conforme mostra a figura (3-2b), em que a ordenação é feita por colunas.

A(1,1)	A(1,2)	.....	A(1,12)
A(2,1)	A(2,2)	.....	A(2,12)
.....	.....	.....	.....
.....	.....	.....	.....
.....	.....	.....	.....
A(12,1)	.....	.....	A(12,12)

(a)

A(1,1)
A(2,1)
°
°
°
A(12,1)
A(2,2)
A(2,2)
°
°
°
A(2,12)
A(3,1)
°
°
°
A(1,12)
°
°
°
A(12,12)

(b)

FIGURA (3-2)

Quando a dimensão da matriz a ser calculada for inferior ao dimensionamento máximo (12 x 12 neste caso), o computador guarda estes elementos nos lugares reservados, conforme mostra a figura (3-2b). São preenchidas as colunas reservadas até à dimensão da matriz em cálculo, ficando as posições que completam a dimensão máxima da coluna em branco.

Por este motivo, deve-se mudar o modo de armazenamento para outro no qual os elementos da matriz se apresentem consecutivamente na área reservada, sem posições em branco, independente do dimensionamento e do tamanho real da matriz. Esta maneira compacta de armazenamento denomina-se modo geral.

A subrotina encarregada de mudar o modo de armazenamento da matriz é ARRAY. A matriz devolvida por ARRAY é uma armazenada como mostra a figura (3-3), num exemplo para uma matriz 2 x 2.

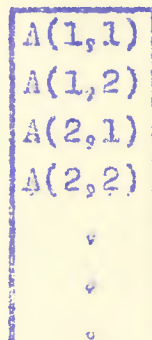


FIGURA (3-3)

Nesta forma a matriz entra na subrotina MSTR, encarregada de selecionar os elementos da diagonal e acima dela.

MSTR utiliza a subrotina LOC que transforma os elementos bidimensionais selecionados para unidimensionais. MSTR devolve a matriz armazenada no modo simétrico.

A subrotina EIGEN recebe assim a matriz, com a finalidade de encontrar seus autovalores e autovetores.

A subrotina AMTR utiliza estes valores devolvidos por EIGEN e calcula as amplitudes de transição a partir da equação (31).

AMTR utiliza a função COG encarregada de calcular o coeficiente de Clebsch-Gordan que, por sua vez, usa a função FACT destinada a dar o fatorial de um número.

São devolvidas pela AMTR as amplitudes de transição com as respectivas posições.

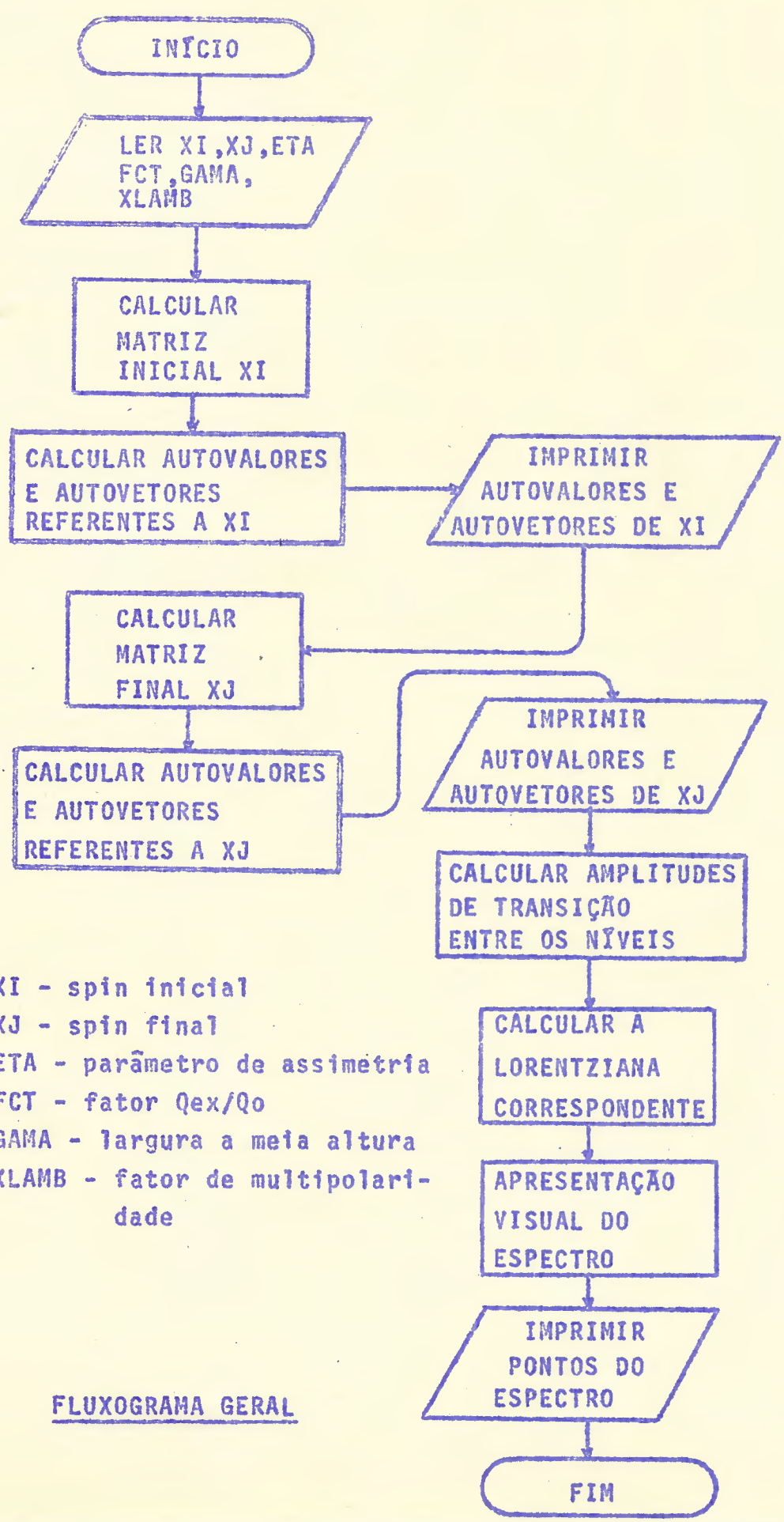
Estes valores entram na subrotina IORNZ, que faz o cálculo dos pontos do espectro Mössbauer, formado pela soma das curvas Lorentzianas achadas para cada valor de amplitude de transição numa determinada posição.

O arranjo de pontos calculados na LORNZ é utilizado na subrotina DISPL que mostra no "display" o espectro assim formado para ser comparado com o experimental correspondente.

Estes subprogramas são utilizados no programa principal detalhado em 3.1 (ver comentários junto à listagem do programa principal).

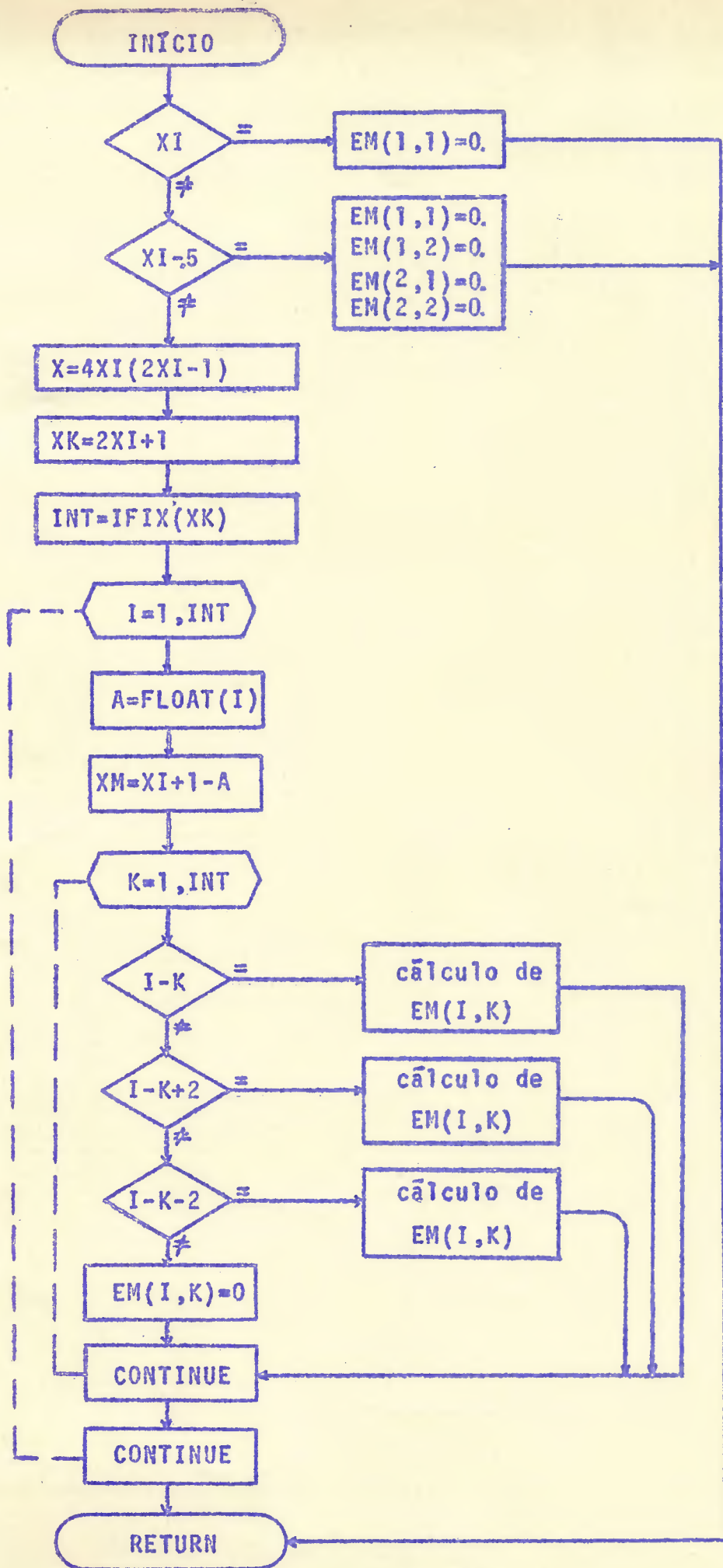
Nos comentários junto às listagens de cada subprograma está descrito o modo de uso dos mesmos.

### 3.3 DIAGRAMAS DE BLOCOS

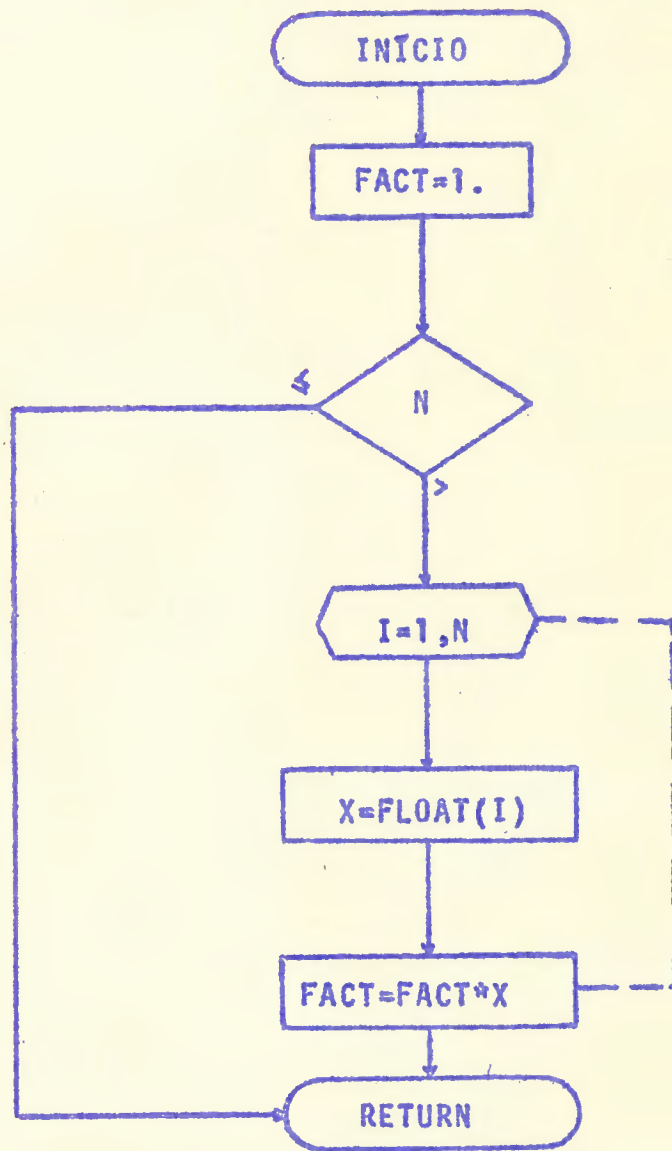


XI - spin inicial  
XJ - spin final  
ETA - parâmetro de assimetria  
FCT - fator  $Q_{ex}/Q_0$   
GAMA - largura a meia altura  
XLAMB - fator de multipolaridade

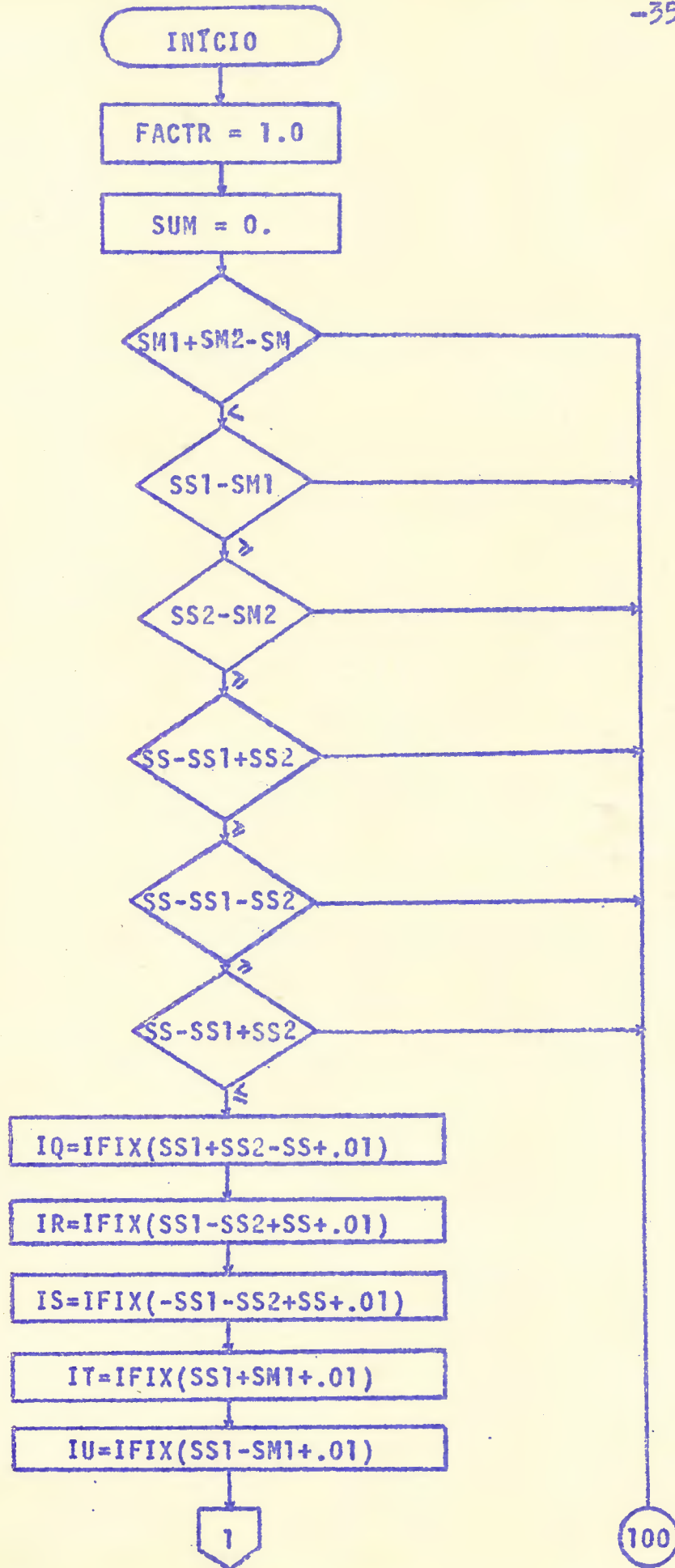
FLUXOGRAMA GERAL

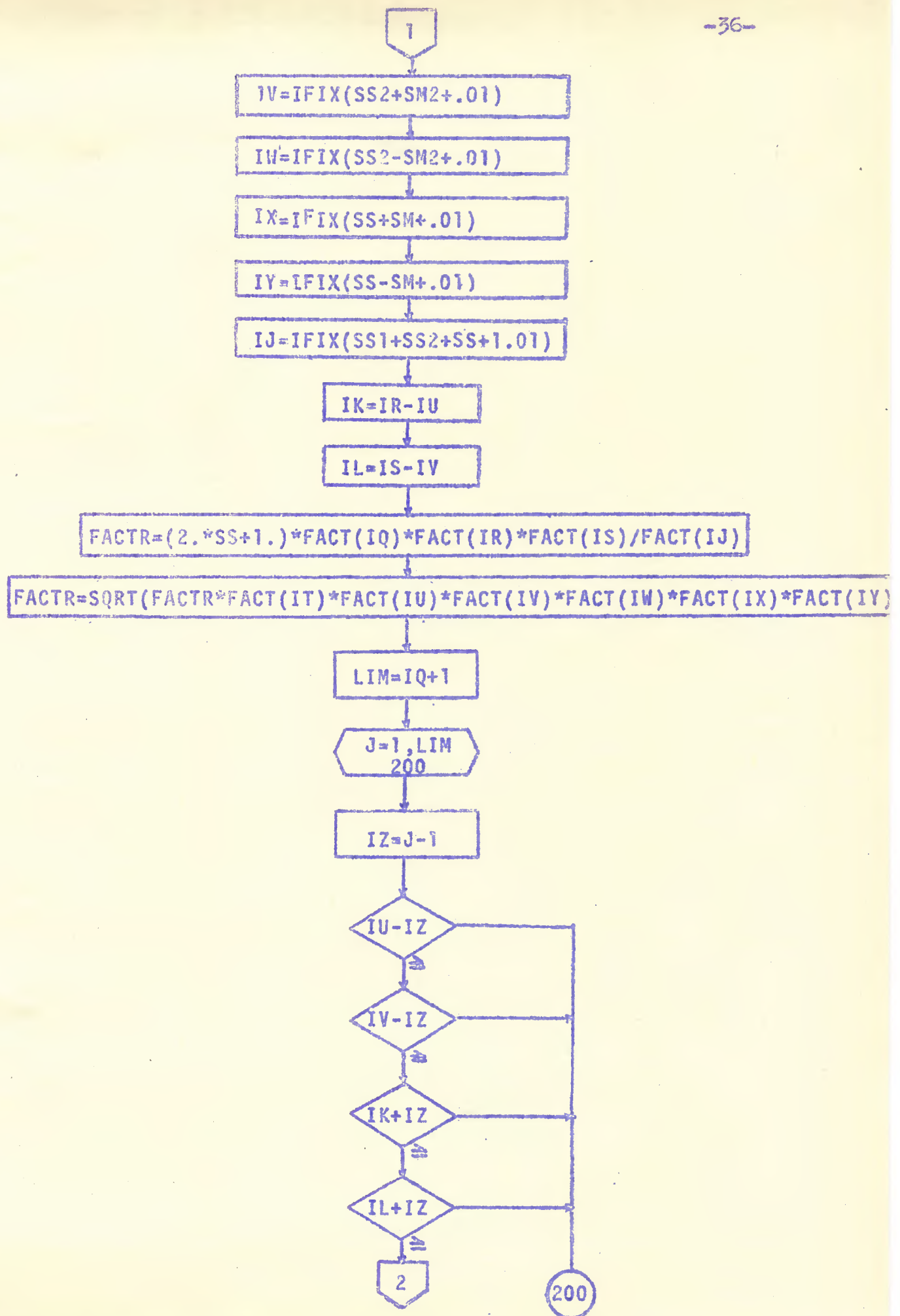


Subrotina MAT

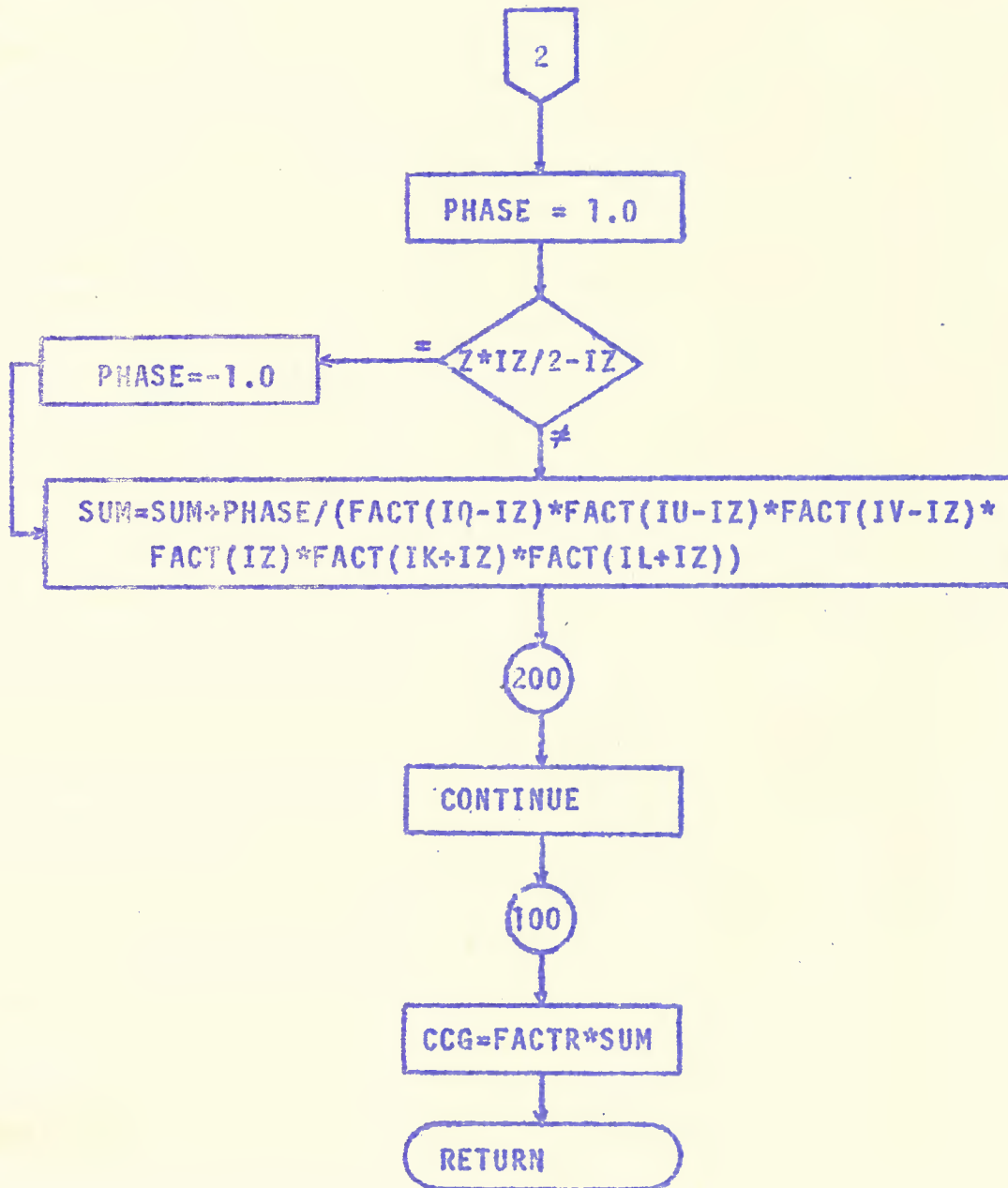


Função FACT

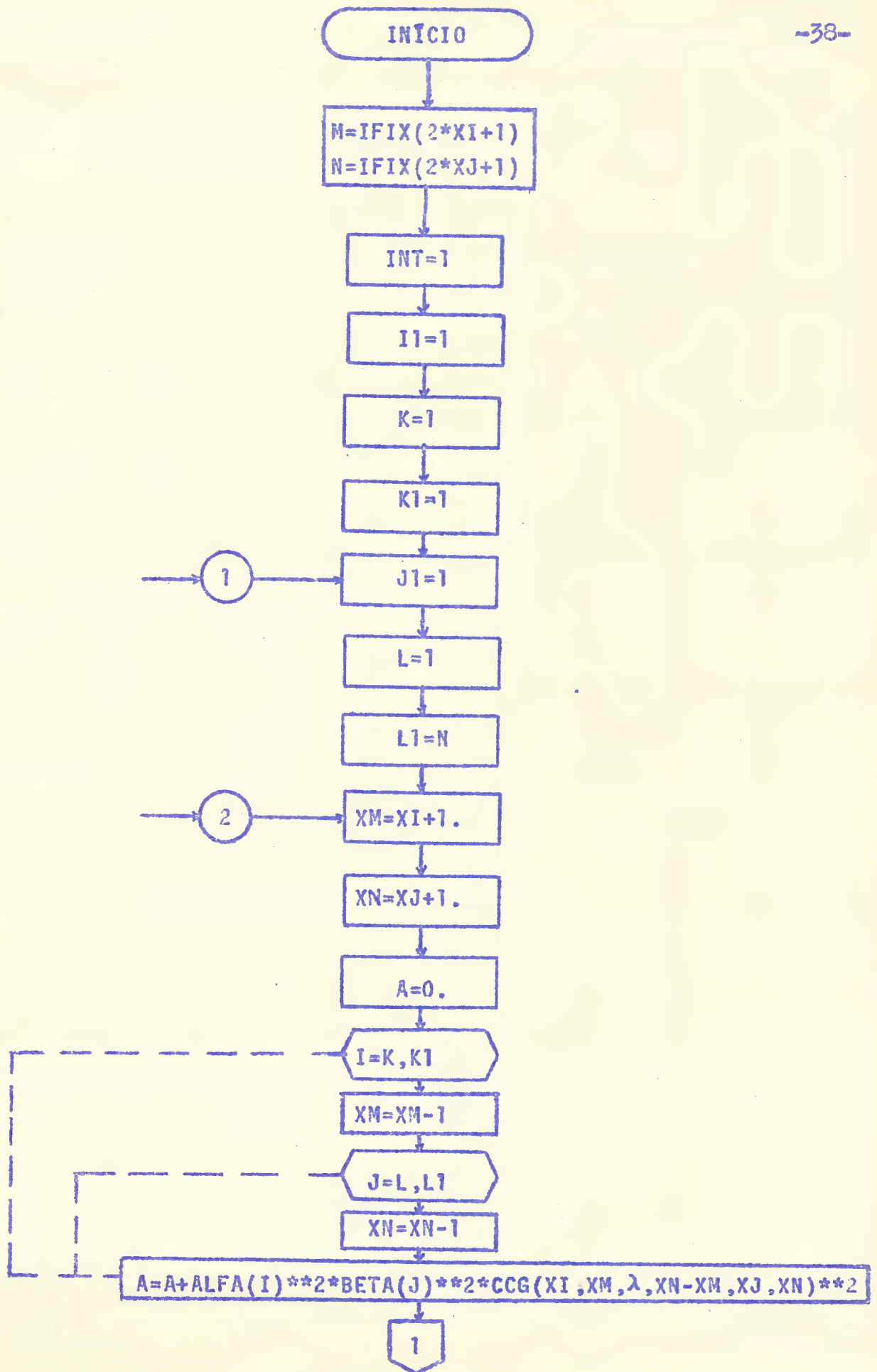


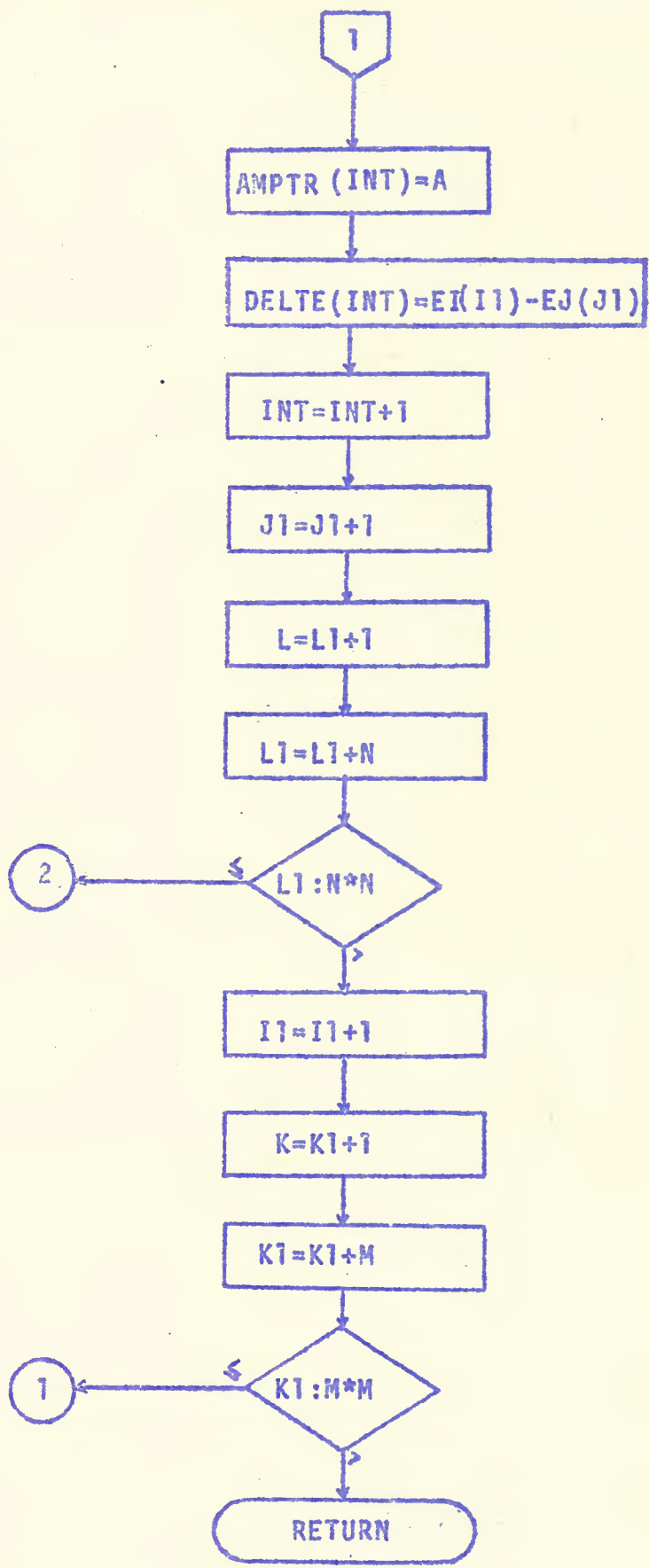




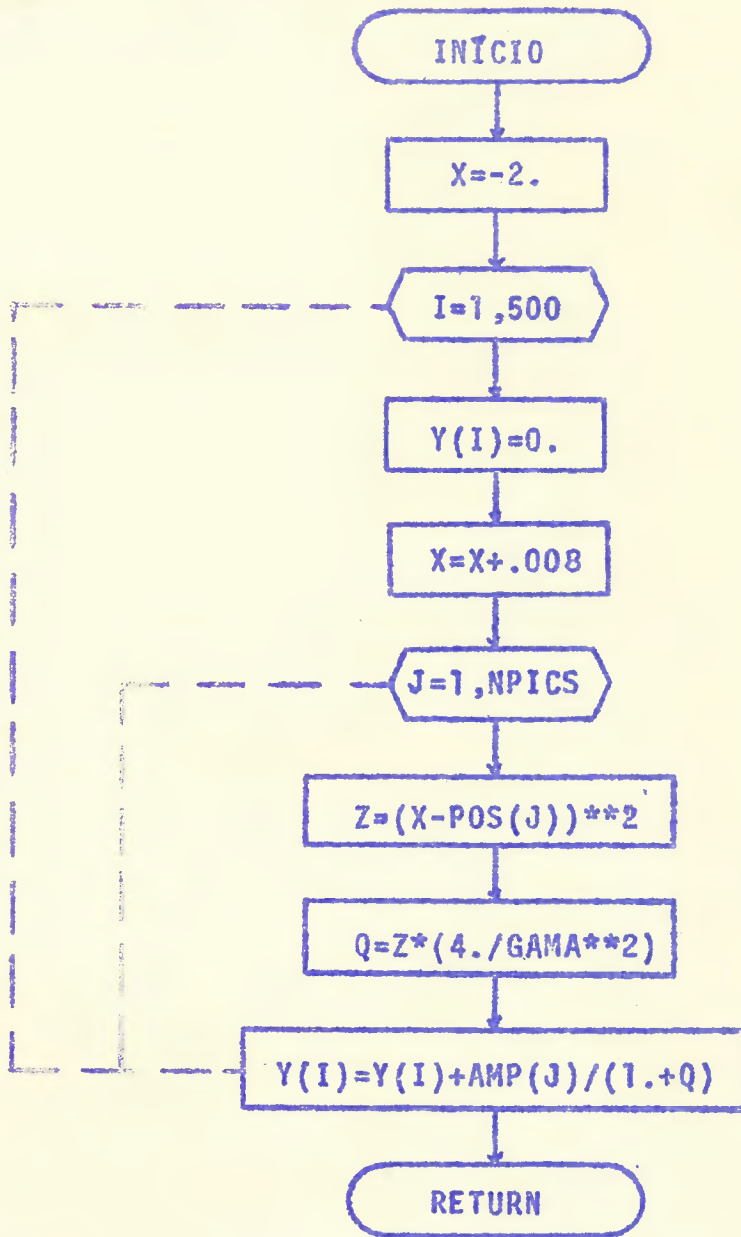


Função CCG





Subrotina AMTR.



Subrotina LORNZ

## 4. APLICAÇÕES

### 4.1 INTRODUÇÃO

Os estudos desenvolvidos nos capítulos 2 e 3 foram realizados com o objetivo de achar os parâmetros  $\sigma$  e  $\eta$  no Hamiltoniano Quadripolar (1) que melhor reproduza um espectro experimental de Efeito Mössbauer.

Em vários casos, espectros Mössbauer experimentais têm sido analisados usando a aproximação de que em amostras policristalinas as amplitudes de transição são aquelas preditas pelos coeficientes de Clebsch-Gordan e que estas não são afetadas pelo parâmetro  $\eta$ .

Veremos aqui que estas amplitudes são, em geral, afetadas por  $\eta$  por causa dos estados misturados e que, além disso, ocorrem transições "proibidas".

O sistema foi usado para simular espectros correspondentes a um grupo de experiências selecionadas da literatura. Embora as comparações são necessariamente qualitativas, visto que não dispomos dos dados originais, a aplicação do programa para análise deste tipo é bastante evidente.

As experiências selecionadas são: as dos espectros de absorção de compostos de  $\text{I}^{129}$  analisadas por M.L. da Costa Jr., P. da R. Andrade e P.J. Viccareo<sup>10</sup>; as de compostos de  $\text{Te}^{129}$  realizadas por M. Pasternack e S. Bukshpan<sup>11</sup>; e as com compostos de  $\text{Hf}^{178}$  feitas por E. Gerda, B. Scharnberg e H. Winkler<sup>12</sup>.

Como introdução à análise detalhada, apresentamos no item 4.2 uma breve análise teórica dos esquemas de energia e espectros observados para uma transição entre estados de spin  $3/2 \rightarrow 1/2$  em que não aparecem transições proibidas; para uma transição  $7/2 \rightarrow 5/2$  na qual aparecem transições "proibidas" e modificações nas amplitudes de transição; e o mesmo estudo para uma transição  $2 \rightarrow 0$  em que não ocorrem transições "proibidas".

Em 4.3 mostramos as comparações feitas das figuras dos artigos<sup>10,11,12</sup> com as fotografias do "display" para cada caso. Uma tabela de resultados impressa pelo computador é apresentada para cada espectro mostrado no "display".

### 4.2 ESQUEMA TEÓRICO DETALHADO

O caso do  $Fe^{57}$ , cujas transições ocorrem entre estados  $3/2 \rightarrow 1/2$ , não apresenta transições "proibidas".

Na figura (4-1) apresentamos o esquema de níveis de energias com as possíveis transições e o espectro observado com uma interação quadripolar para  $\eta = 0$ .

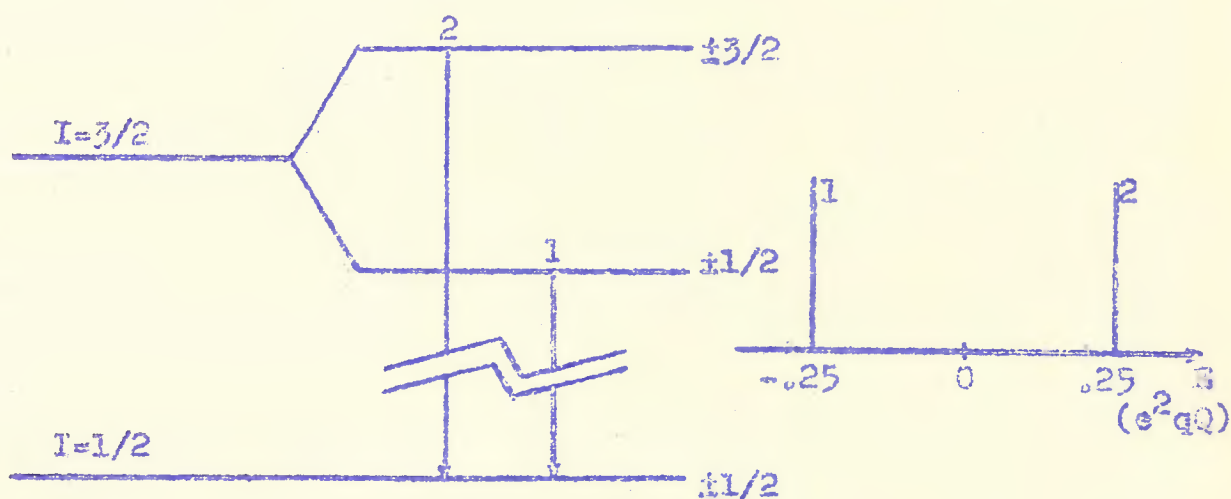


FIG (4-1)

Para valores de  $\eta$  diferentes de zero, o espectro apresenta as duas linhas em posições diferentes com a mesma amplitude de transição.

A figura (4-2) mostra a variação de posição das linhas com  $\eta$ . Na figura (4-3) vê-se que a amplitude das duas transições independe de  $\eta$ .

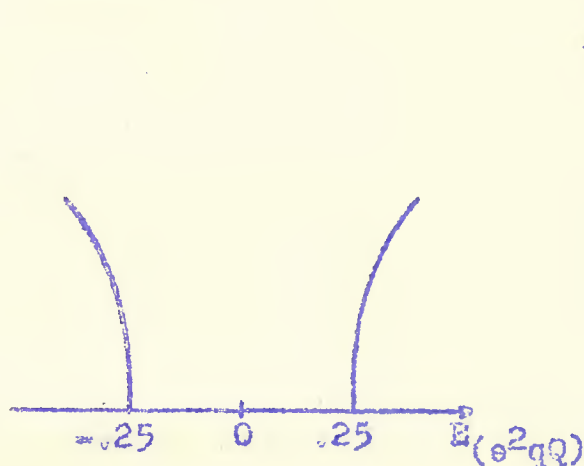


FIG (4-2)

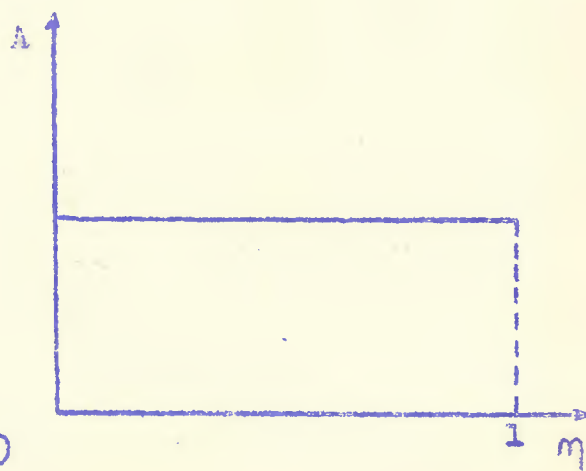


FIG (4-3)

Nota-se que a existência de assimetria não é detectável neste caso e, conseqüentemente, poderíamos ter erro na determinação de  $e^2qQ$  e  $\eta$ .

Para o caso de transição entre estados  $7/2 \rightarrow 5/2$ , o esquema de níveis de energia está mostrado na figura (4-4), onde as linhas tracejadas indicam as transições "proibidas".

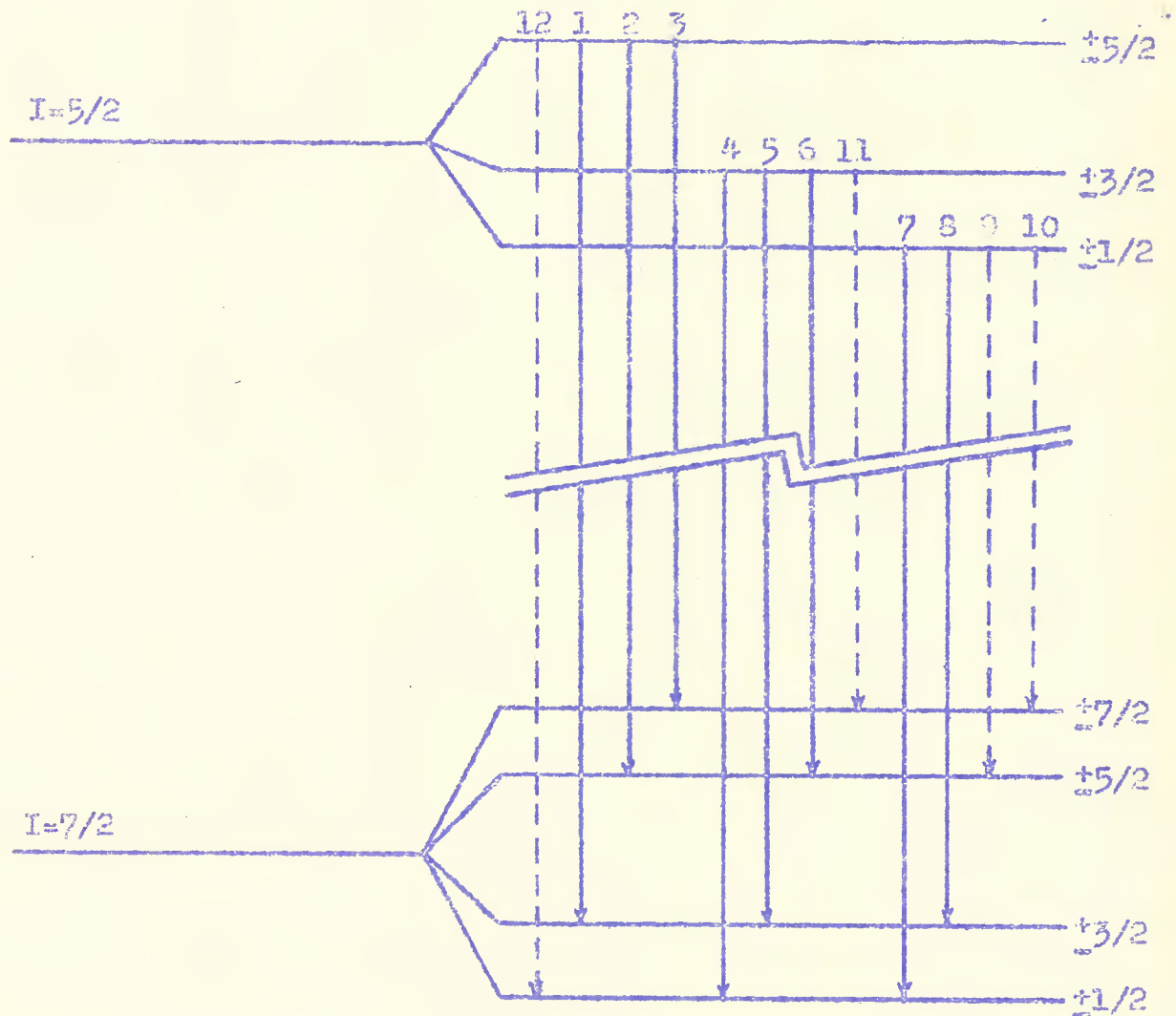


FIG (4-4)

O espectro observado para  $\eta = 0$  está mostrado na figura (4-5) e a mudança de posição das linhas com a variação de  $\eta$  está especificada na figura (4-6).

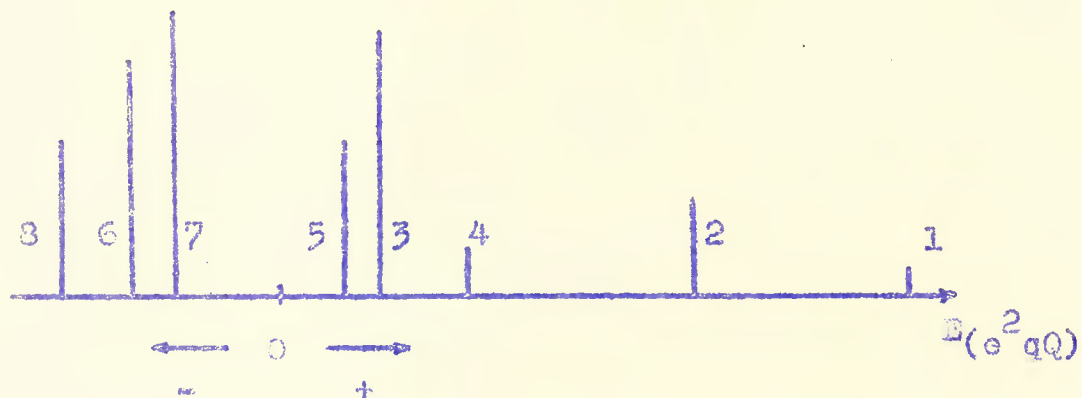


FIG (4-5)

A figura (4-7) mostra como varia a amplitude das linhas de transições com a variação de  $\eta$ . Nota-se a variação significativa da linha 9 (uma proibida) que é da ordem da 4, maior que a transição 1 e igual à 2.

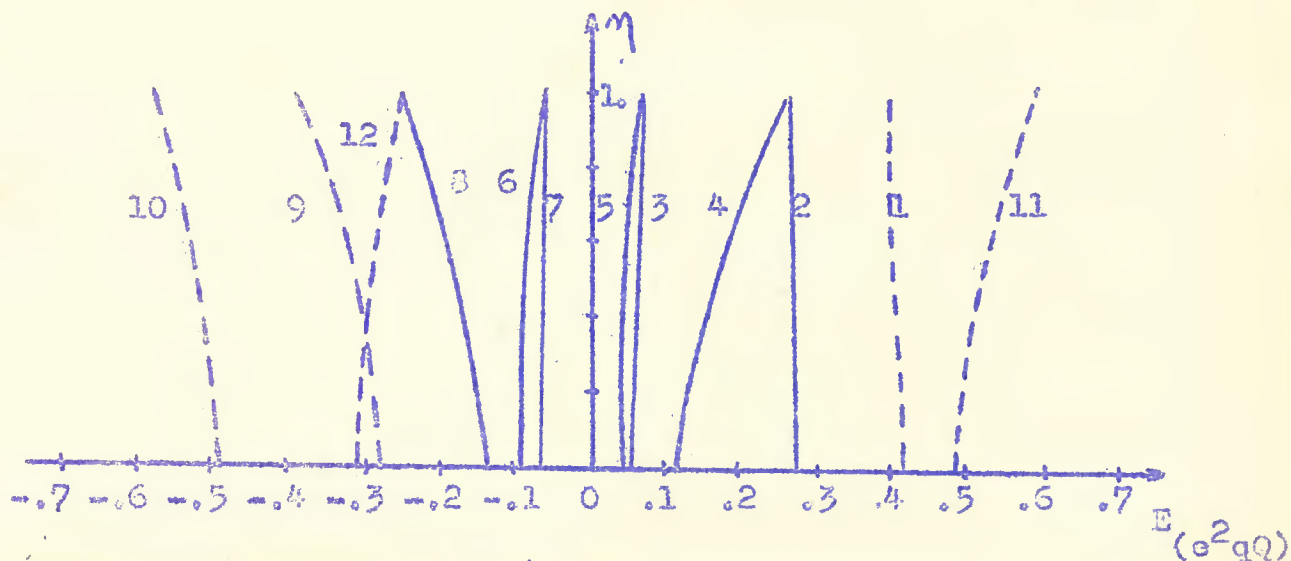


FIG (4-6)



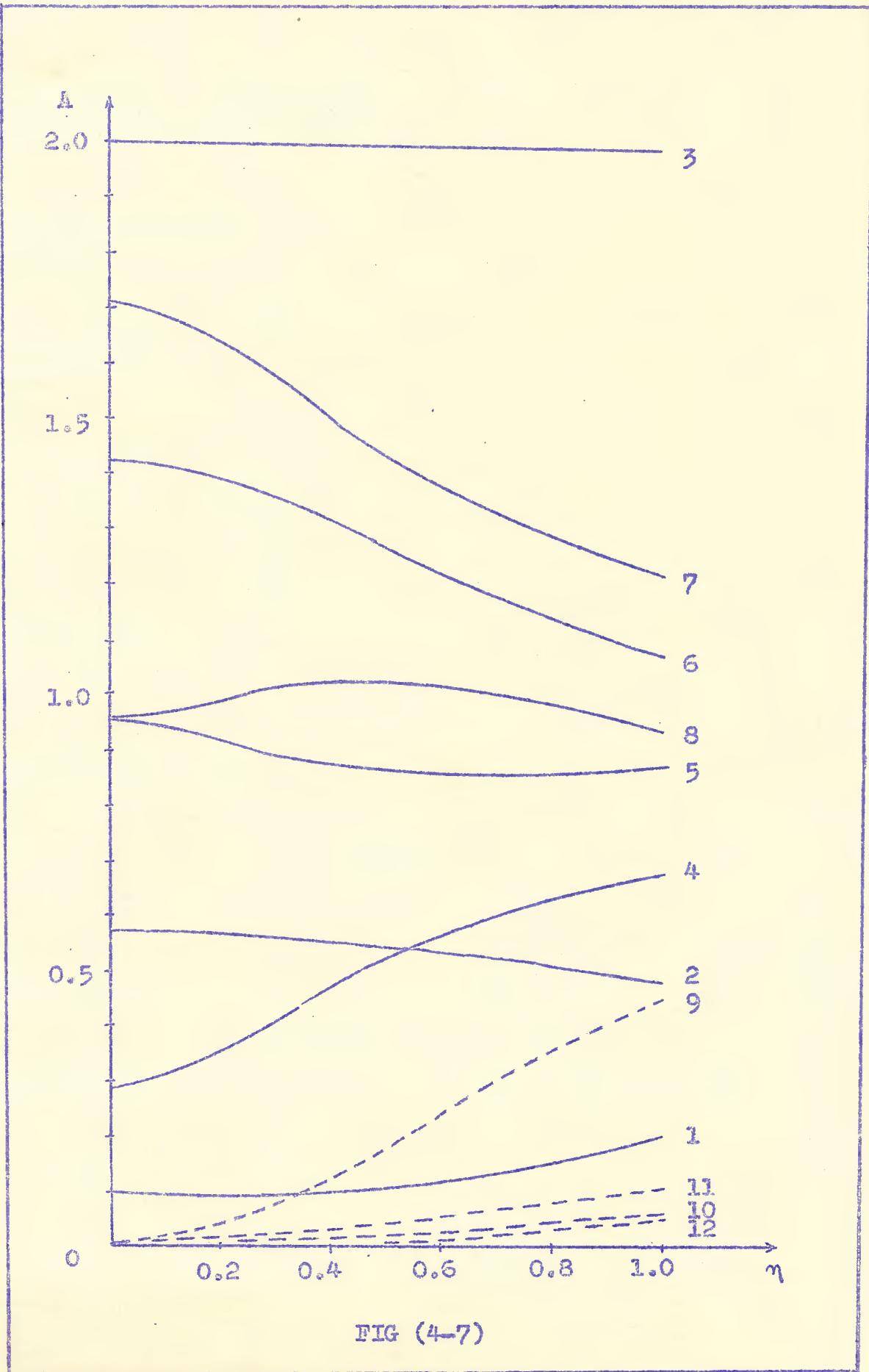


FIG (4-7)

No caso de transições entre estados  $2 \rightarrow 0$ , temos o esquema de níveis de energia para  $\eta = 0$  representado na figura (4-8) e o espectro observado está mostrado na figura (4-9).

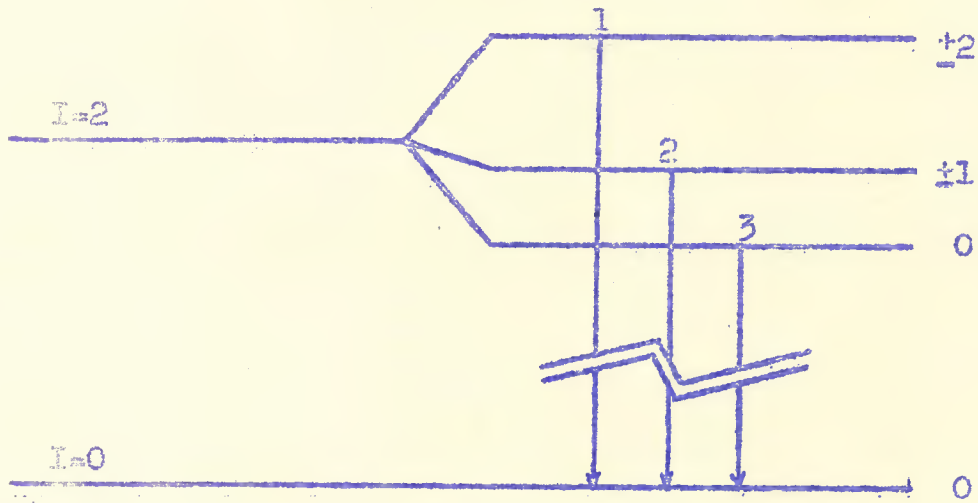


FIG (4-8)

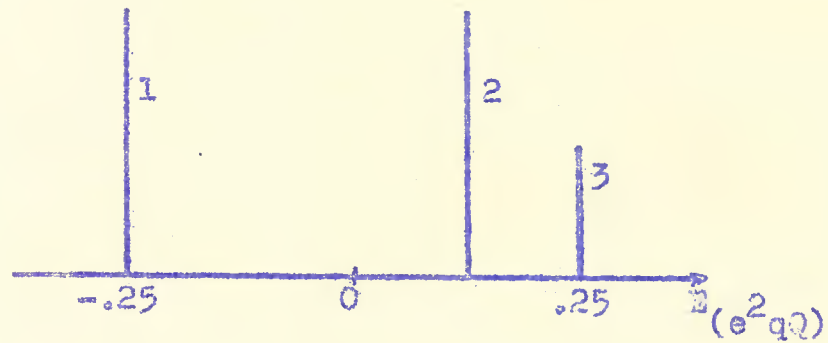


FIG (4-9)

Para  $\eta$  diferente de zero, não há degenerescências e o esquema de níveis de energia fica sendo aquele mostrado na figura (4-10).

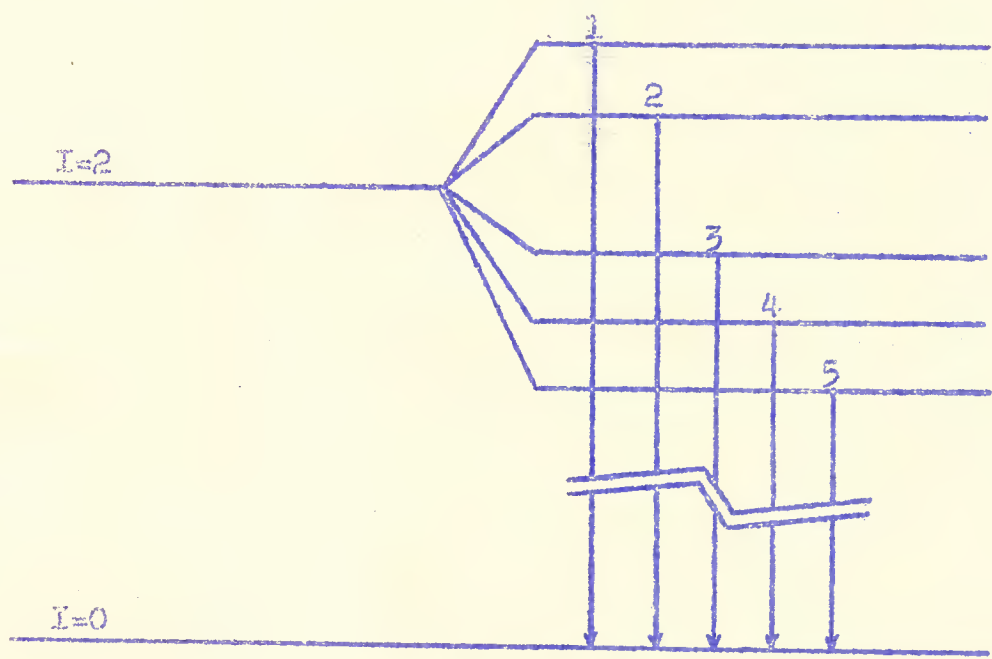


FIG (4-10)

A figura (4-11) mostra as variações das posições para as transições com a variação de  $\eta$ .

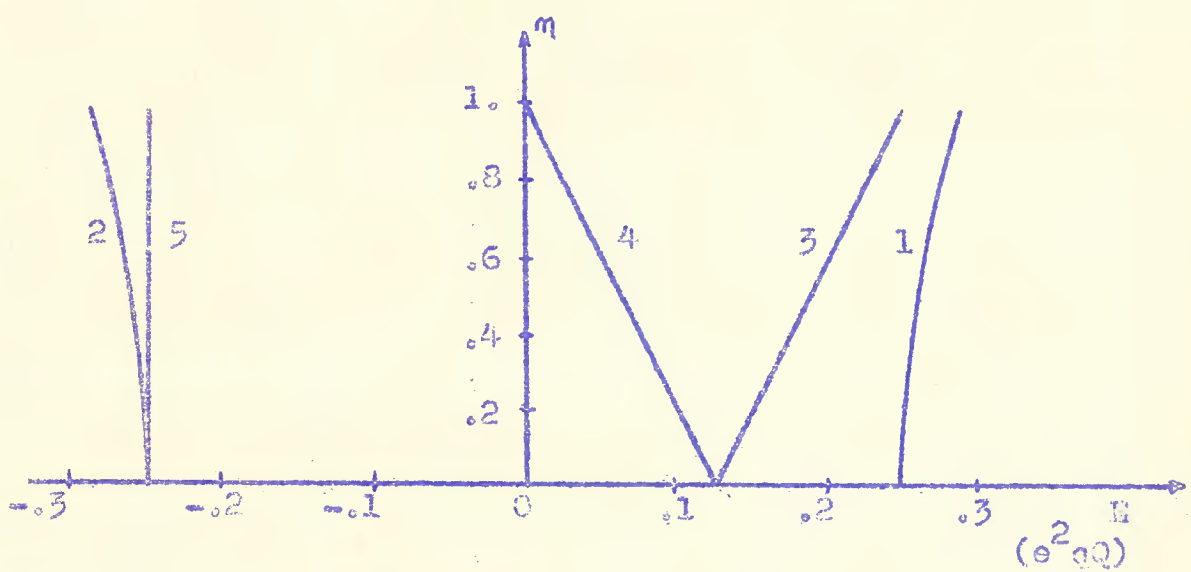
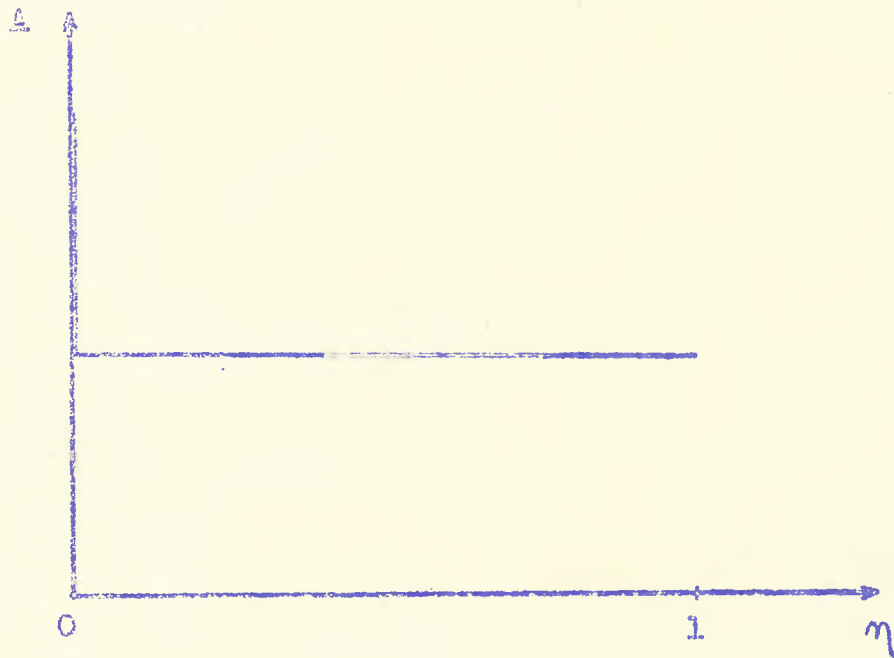


FIG (4-11)

Vemos que no espectro para  $\eta = 0$  representado na figura (4-9), as duas linhas maiores são na realidade duas transições degeneradas. A figura (4-12) mostra que para  $\eta$  diferente de zero as amplitudes de todas as transições são iguais e também independentes de  $\eta$ .

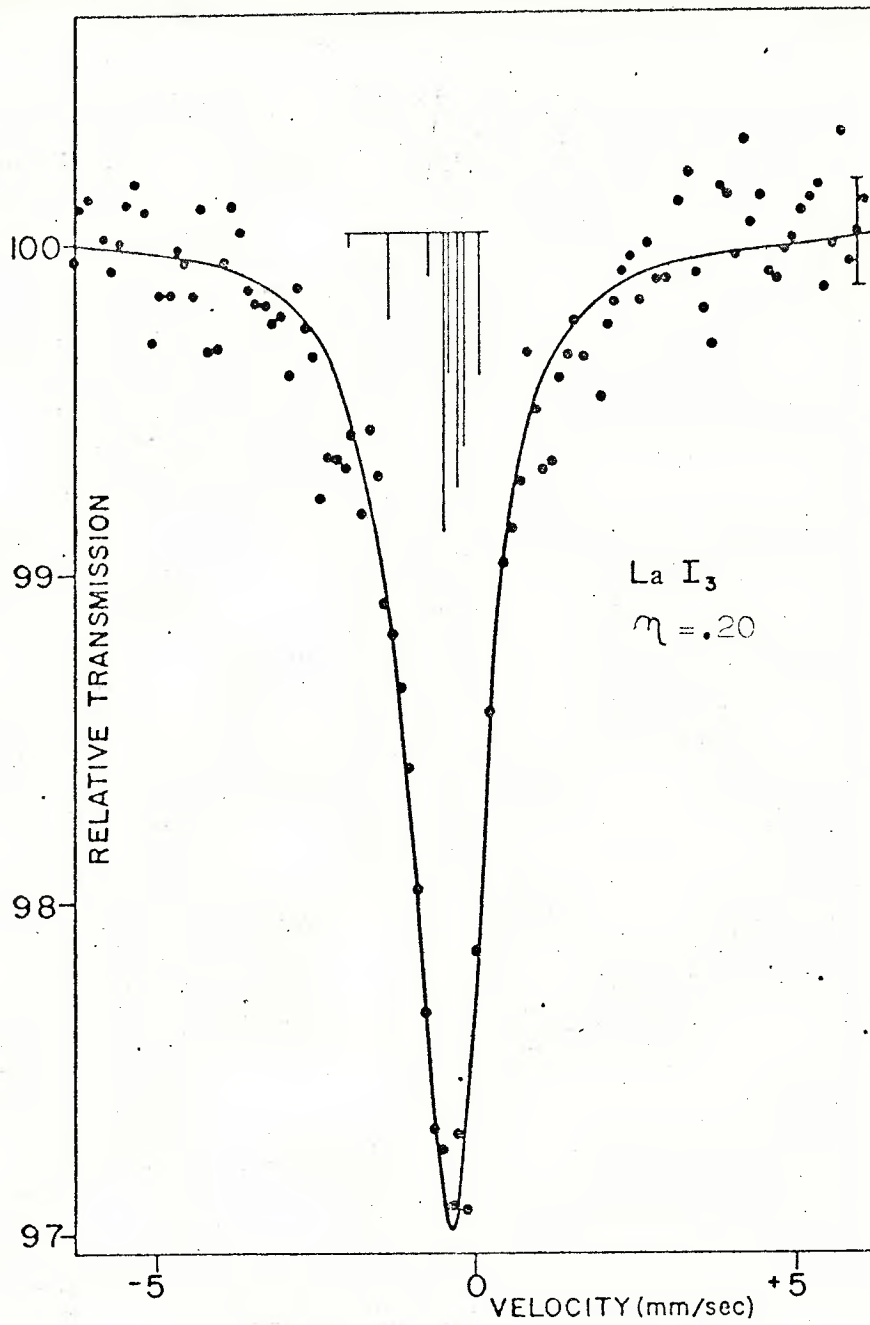


### 4.3 COMPARAÇÕES QUALITATIVAS ENTRE AS EXPERIÊNCIAS E FOTOGRAFIAS DE CURVAS APRESENTADAS NO "DISPLAY"

#### 4.3.1 Compostos de $I^{129}$ : $LaI_3$ , $GdI_3$ e $ErI_3$

As experiências de compostos do  $I^{129}$  tratam de transições entre estados  $7/2 \longrightarrow 5/2$ ; as figuras (4-13), (4-14) e (4-15) mostram os pontos experimentais com as curvas de ajuste feitas via mínimos quadrados, usando as amplitudes de transição dadas pelos coeficientes de Clebsch-Gordan; a curva (a) de cada figura mostra este fato. A curva (b) em cada caso é a fotografia do espectro mostrado no "display" calculado através do modelo desenvolvido neste trabalho, utilizando os mesmos parâmetros  $\eta$  e  $e^2qQ$  tirados da experiência.

Nestes três casos a largura de linha é grande comparada com a separação das linhas de transição, o que dificulta uma análise mais detalhada. A tabela apresentada após cada figura dá os resultados do cálculo feito para o espectro mostrado no "display" (curvas (b)).



(a)

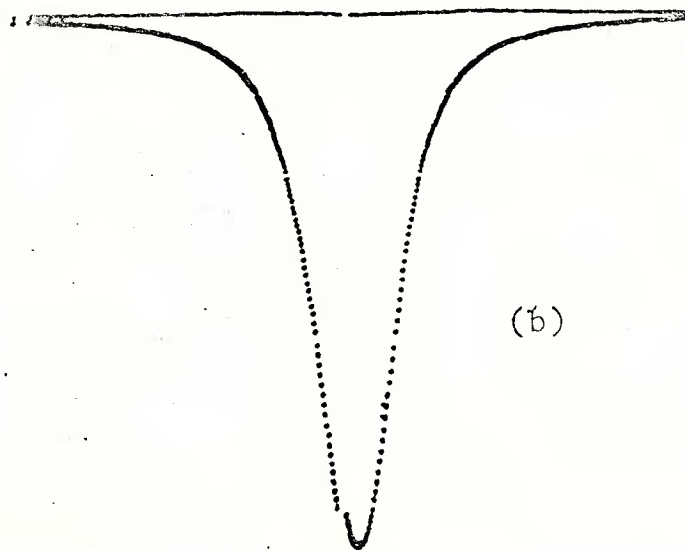


FIG (4-13)

\*\* SPIN: 3.5-2.5 \*\* ETA: .20 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.30818	.9994	.0000	.0352	.0000	.0025	.0000
.30818	.0000	.0025	.0000	.0352	.0000	.9994
-.05790	.0000	.9906	.0000	.1367	.0000	-.0073
-.05790	-.0073	.0000	.1367	.0000	.9906	.0000
-.25028	.0000	-.1368	.0000	.9900	.0000	-.0345
-.25028	-.0345	.0000	.9900	.0000	-.1368	.0000

.25033	.9995	.0000	.0306	.0000	.0013	.0000	.0001	.0000
.25033	.0000	.0001	.0000	.0013	.0000	.0306	.0000	.9995
.03691	-.0005	.0000	.0095	.0000	.0747	.0000	.9972	.0000
.03691	.0000	.9972	.0000	.0747	.0000	.0095	.0000	-.0005
-.10308	.0000	-.0267	.0000	.2318	.0000	.9719	.0000	-.0300
-.10308	-.0300	.0000	.9719	.0000	.2318	.0000	-.0267	.0000
-.18416	.0000	-.0705	.0000	.9699	.0000	-.2331	.0000	.0059
-.18416	.0059	.0000	-.2331	.0000	.9699	.0000	-.0705	.0000

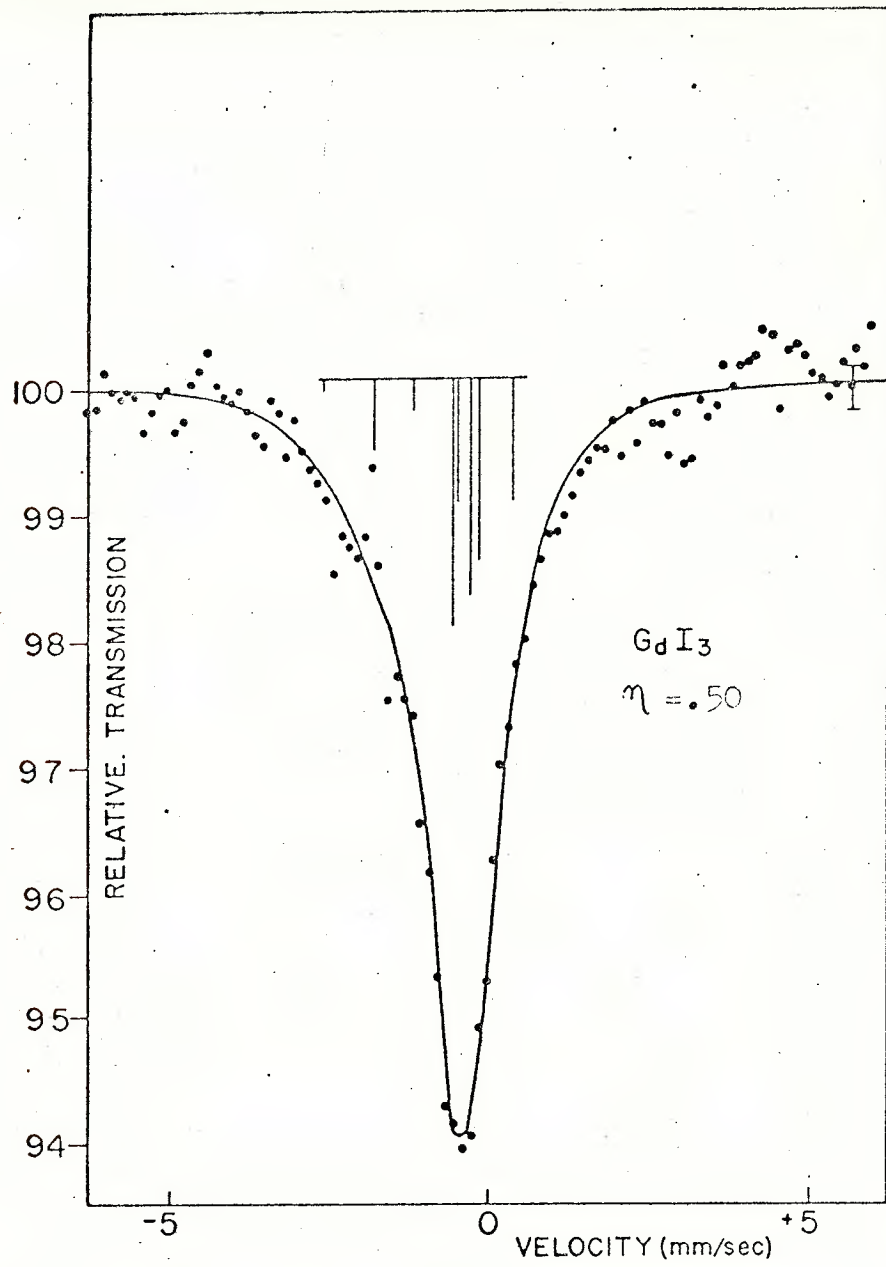
DIFERENCA DE ENERGIA

AMPLITUDE DE TRANSICAO

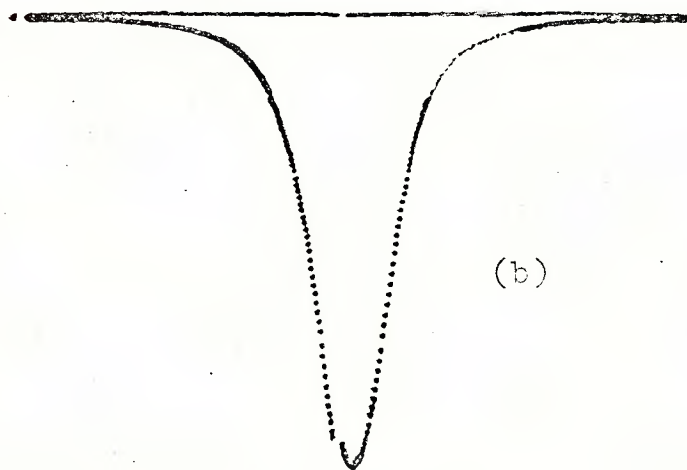
(E200)	(MM/S)	
.057851	-.206413	1.995731
.271274	-.967904	.567508
.411266	-1.467398	.093297
.492348	-1.756699	.010131
-.308234	1.099780	.000997
-.094812	.338288	1.395722
.045181	-.161206	.917409
.126263	-.450507	.352539
-.500618	1.786206	.003273
-.287196	1.024714	.036769
-.147203	.525220	.989295
-.066121	.235919	1.637330

PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL

.0777	.0809	.0843	.0879	.0918	.0960	.1004	.1051	.1102	.1157
.1216	.1279	.1348	.1422	.1503	.1590	.1686	.1790	.1904	.2030
.2168	.2321	.2490	.2679	.2890	.3127	.3394	.3697	.4042	.4436
.4891	.5419	.6035	.6761	.7622	.8652	.9895	1.1409	1.3270	1.5579
1.8462	2.2073	2.6572	3.2084	3.8597	4.5790	5.2908	5.8896	6.2855	6.4470
6.3891	6.1250	5.6691	5.0809	4.4551	3.8685	3.3500	2.8935	2.4875	2.1294
1.8199	1.5563	1.3340	1.1480	.9936	.8657	.7598	.6717	.5979	.5355
.4825	.4369	.3976	.3634	.3335	.3071	.2837	.2630	.2444	.2278
.2128	.1992	.1870	.1758	.1656	.1562	.1477	.1398	.1325	.1258
.1196	.1138	.1085	.1035	.0988	.0945	.0904	.0866	.0831	.0797



(a)



(b)

FIG (4-14)



\*\* SPIN: 3.5-2.5 \*\* ETA: .50 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.31183	.9959	.0000	.0886	.0000	.0155	.0000
.31183	.0000	.0155	.0000	.0886	.0000	.9959
-.04137	-.0411	.0000	.2946	.0000	.9547	.0000
-.04137	.0000	.9547	.0000	.2946	.0000	-.0411
-.27045	-.0800	.0000	.9515	.0000	-.2970	.0000
-.27045	.0000	-.2970	.0000	.9515	.0000	-.0800

.25210	.0000	.0015	.0000	.0084	.0000	.0768	.0000	.9970
.25210	.9970	.0000	.0768	.0000	.0084	.0000	.0015	.0000
.04337	.0000	.9805	.0000	.1881	.0000	.0563	.0000	-.0074
.04337	-.0074	.0000	.0563	.0000	.1881	.0000	.9805	.0000
-.08865	-.0727	.0000	.9022	.0000	.4049	.0000	-.1300	.0000
-.08865	.0000	-.1300	.0000	.4049	.0000	.9022	.0000	-.0727
-.20683	.0251	.0000	-.4207	.0000	.8948	.0000	-.1473	.0000
-.20683	.0000	-.1473	.0000	.8948	.0000	-.4207	.0000	.0251

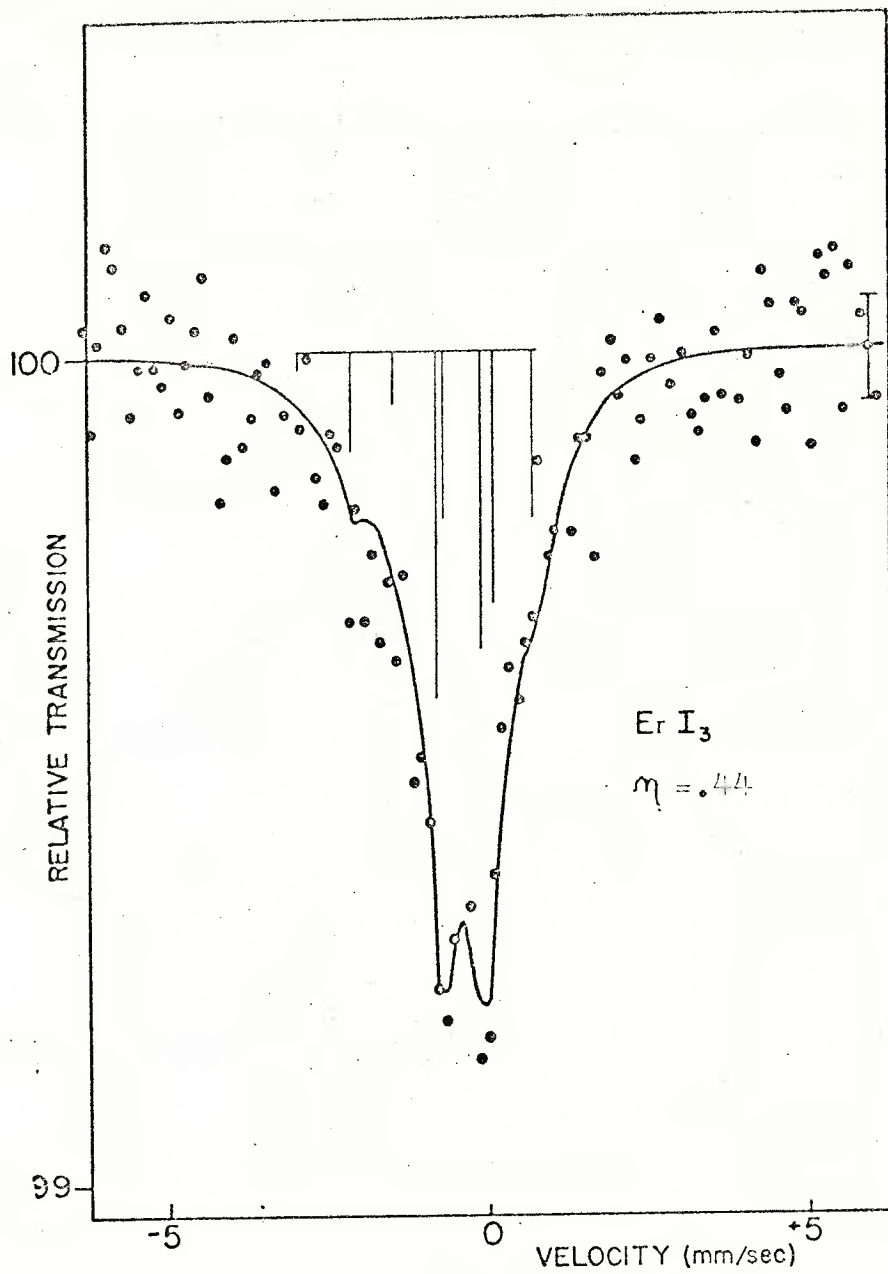
DIFERENCA DE ENERGIA

AMPLITUDE DE TRANSICAO

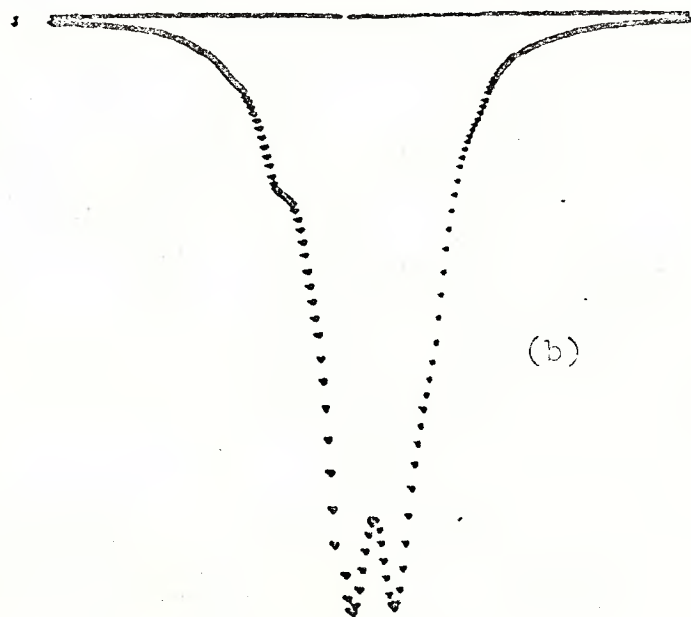
(E200)	(MM/S)	
.059726	-.306332	1.972583
.268452	-1.376891	.546167
.400475	-2.054037	.105438
.518652	-2.660164	.042480
-.293473	1.505223	.008988
-.084746	.434665	1.270335
.047277	-.242481	.863090
.165453	-.848609	.524255
-.522554	2.680180	.018430
-.313828	1.609622	.183500
-.181805	.932476	1.031473
-.063628	.326348	1.433265

PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL

.0327	.0341	.0356	.0371	.0388	.0406	.0425	.0445	.0467	.0490
.0516	.0543	.0573	.0605	.0640	.0678	.0720	.0766	.0816	.0871
.0933	.1001	.1077	.1162	.1258	.1366	.1489	.1631	.1793	.1983
.2205	.2468	.2783	.3166	.3637	.4222	.4945	.5839	.6975	.8483
1.0517	1.3203	1.6608	2.0910	2.6371	3.2663	3.9016	4.4957	4.9143	5.0567
5.0600	4.9270	4.4805	3.8251	3.1996	2.6844	2.2689	1.9004	1.5571	1.2685
1.0409	.8592	.7147	.5990	.5036	.4256	.3636	.3144	.2750	.2431
.2166	.1945	.1758	.1597	.1458	.1337	.1231	.1137	.1054	.0980
.0913	.0854	.0800	.0751	.0706	.0665	.0628	.0594	.0562	.0534
.0507	.0482	.0459	.0438	.0418	.0399	.0382	.0366	.0350	.0336



(a)



(b)

FIG (4-15)

\*\* SPIN: 3.5-2.5 \*\* ETA: .44 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.31084	.9969	.0000	.0778	.0000	.0120	.0000
.31084	.0000	.0120	.0000	.0778	.0000	.9969
-.04548	-.0326	.0000	.2686	.0000	.9627	.0000
-.04548	.0000	.9627	.0000	.2686	.0000	-.0326
-.26536	-.0717	.0000	.9601	.0000	-.2703	.0000
-.26536	.0000	-.2703	.0000	.9601	.0000	-.0717

.25162	.9977	.0000	.0675	.0000	.0065	.0000	.0010	.0000
.25162	.0000	.0010	.0000	.0065	.0000	.0675	.0000	.9977
.04161	.0000	.9852	.0000	.1654	.0000	.0443	.0000	-.0051
.04161	-.0051	.0000	.0443	.0000	.1654	.0000	.9852	.0000
-.09177	.0000	-.1060	.0000	.3846	.0000	.9147	.0000	-.0642
-.09177	-.0642	.0000	.9147	.0000	.3846	.0000	-.1060	.0000
-.20147	.0000	-.1345	.0000	.9081	.0000	-.3960	.0000	.0211
-.20147	.0211	.0000	-.3960	.0000	.9081	.0000	-.1345	.0000

DIFERENCA DE ENERGIA

AMPLITUDE DE TRANSICAO

(E200)	(MM/S)	
.059217	-.380345	1.978919
.269228	-1.729223	.551956
.402608	-2.585910	.100264
.512310	-3.290515	.035528
-.297105	1.908276	.006461
-.087094	.559398	1.298194
.046286	-.297289	.868460
.155988	-1.001694	.493552
-.516983	3.320529	.014620
-.306972	1.971651	.149850
-.173592	1.114964	1.031276
-.063890	.410359	1.470921

PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL

.0085	.0089	.0093	.0097	.0101	.0106	.0111	.0116	.0122	.0128
.0134	.0142	.0149	.0158	.0167	.0177	.0188	.0200	.0213	.0228
.0244	.0262	.0282	.0304	.0329	.0358	.0391	.0428	.0471	.0522
.0581	.0652	.0738	.0844	.0979	.1159	.1405	.1696	.2004	.2473
.3247	.4541	.6358	.8305	1.2007	1.8581	2.3997	3.0477	3.6313	3.2129
3.1617	3.6618	3.0104	2.0853	1.5751	1.2047	1.0994	.9426	.6497	.4817
.3935	.3008	.2390	.1948	.1511	.1202	.0996	.0847	.0735	.0646
.0573	.0513	.0463	.0420	.0383	.0351	.0323	.0298	.0276	.0256
.0239	.0223	.0209	.0196	.0184	.0174	.0164	.0155	.0147	.0139
.0132	.0126	.0120	.0114	.0109	.0104	.0099	.0095	.0091	.0088

#### 4.3.2 Compostos de $\text{Te}^{129}$ : $\text{Te}$ , $\text{Te}(\text{NO}_3)_4$ e $\text{TeO}_2$

As figuras (4-16), (4-17) e (4-18) mostram as comparações entre as experiências de compostos de  $\text{Te}^{129}$  com as fotografias das curvas apresentadas no "display" calculadas teoricamente. Estas experiências têm transições entre estados  $7/2 \rightarrow 5/2$  cujo esquema teórico foi visto em 4.2.

Na análise destes espectros para tirar os valores de  $\mathcal{M}$ , energias corretas foram usadas mas com a aproximação de que os níveis permanecem com o número quântico  $m$  apropriado para  $\mathcal{M} = 0$ . Assim, as intensidades foram calculadas usando os coeficientes de Clebsch-Gordan e as transições "proibidas" não aparecem.

A linha que aparece sobre os pontos experimentais da curva (b) de cada caso das figuras (4-16), (4-17) e (4-18) foi traçada sobre os pontos sem método de ajuste.

A curva (c) é uma calculada separadamente. Ela usa como energias os valores certos dados pelo autor das experiências, mas usa como amplitudes os coeficientes de Clebsch-Gordan e assim forma a curva dada pela soma das Lorentzianas. A curva (d) é uma calculada através do nosso sistema com valor de  $\mathcal{M}$  tirado da experiência pelo autor. Notamos que a diferença entre (c) e (d) é exatamente devida às transições "proibidas" que aparecem em (d) e às mudanças das amplitudes de transição que são, neste caso, dependentes de  $\mathcal{M}$ ; sendo que em (c) isto não se verifica.

Na figura (4-17) notamos que (c) é igual a (d) pois neste caso  $\mathcal{M}$  é zero, não apresentando transições "proibidas" e as amplitudes são dadas pelos coeficientes de Clebsch-Gordan.

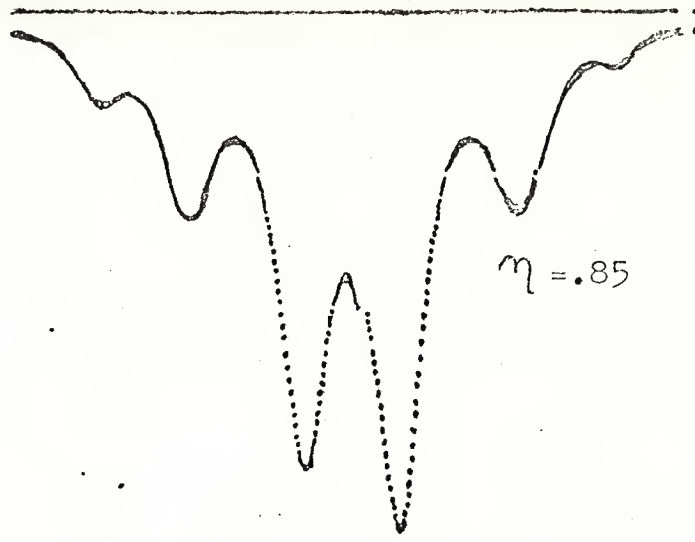
Nas curvas (b) das figuras (4-16) e (4-18) nos espectros experimentais, marcamos com 9 o pico notado correspondente a uma transição proibida.

A curva (a) em cada caso é uma calculada através do nosso modelo com um valor de  $\mathcal{M}$  modificado, indicado nas figuras o qual parece melhorar ligeiramente o ajuste dos pontos experimentais.

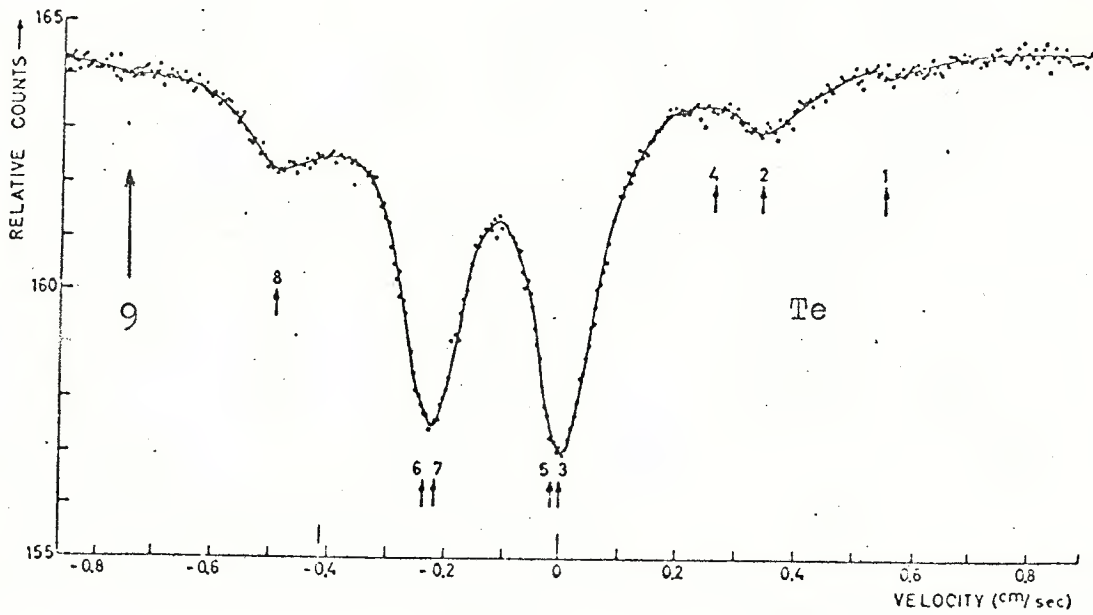
Notamos que na figura (4-16), na curva (b) do espectro experimental, as posições de 4 e 2 marcadas no espectro deveriam a parecer juntas na posição indicada por 2, pois se verifica clare

mente a existência de 2 picos ali e não onde está indicado por 4 na figura.

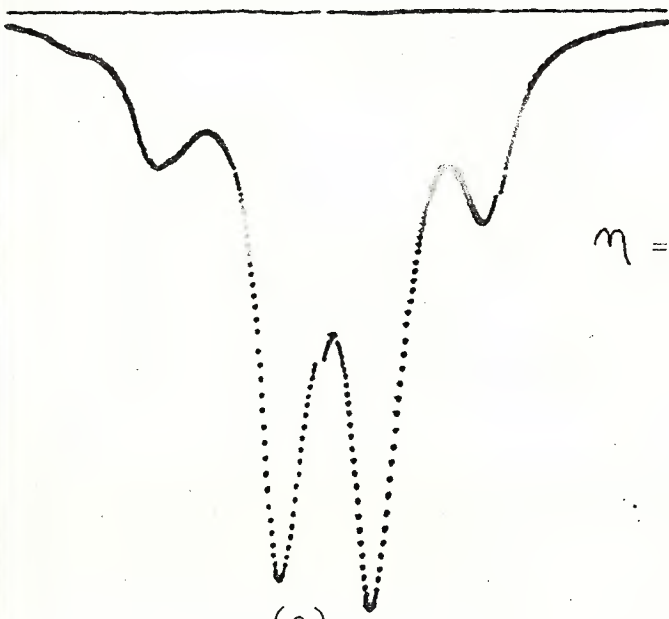
Depois de cada figura apresentamos a tabela de resultados dada pelo computador das curvas mostradas no "display" para os dois casos de  $\eta$ .



(a)

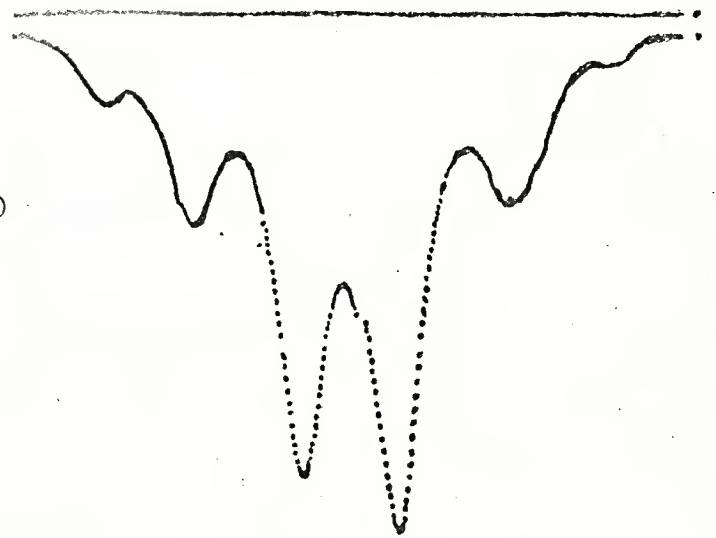


(b)



(c)

η = .80



(d)

FIG (4-16)

\*\* SPIN: 3.5-2.5 \*\* ETA: .80 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.31879	.0000	.0394	.0000	.1435	.0000	.9889
.31879	.9889	.0000	.1435	.0000	.0394	.0000
-.01743	.0000	.9173	.0000	.3873	.0000	-.0927
-.01743	-.0927	.0000	.3873	.0000	.9173	.0000
-.30135	-.1164	.0000	.9107	.0000	-.3963	.0000
-.30135	.0000	-.3963	.0000	.9107	.0000	-.1164

.25545	.9920	.0000	.1239	.0000	.0220	.0000	.0064	.0000
.25545	.0000	.0064	.0000	.0220	.0000	.1239	.0000	.9920
.05583	-.0286	.0000	.1271	.0000	.2978	.0000	.9457	.0000
.05583	.0000	.9457	.0000	.2978	.0000	.1271	.0000	-.0286
-.07446	-.1144	.0000	.8503	.0000	.4444	.0000	-.2577	.0000
-.07446	.0000	-.2577	.0000	.4444	.0000	.8503	.0000	-.1144
-.23682	.0000	-.1930	.0000	.8446	.0000	-.4954	.0000	.0444
-.23682	.0444	.0000	-.4954	.0000	.8446	.0000	-.1930	.0000

DIFERENCA DE ENERGIA

AMPLITUDE DE TRANSICAO

(E200)	(MM/S)	
.063337	-1.053741	1.926478
.262957	-4.374818	.508338
.393247	-6.542455	.152474
.555608	-9.243652	.079376
-.272883	4.539963	.031715
-.073264	1.218887	1.138818
.057027	-.948751	.861900
.219387	-3.649946	.634235
-.556804	9.263554	.041807
-.357184	5.942476	.352844
-.226894	3.774839	.985626
-.064533	1.073643	1.286390

PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL

.0037	.0038	.0040	.0042	.0043	.0045	.0048	.0050	.0052	.0055
.0058	.0061	.0065	.0068	.0072	.0077	.0082	.0087	.0093	.0100
.0107	.0115	.0124	.0135	.0147	.0160	.0176	.0194	.0216	.0242
.0273	.0313	.0365	.0438	.0557	.0794	.1039	.1064	.1274	.1382
.3454	.5438	.4885	.7122	1.2414	.9531	.8680	1.4840	2.7367	1.9375
1.7119	2.8889	2.2681	1.0809	.8085	1.0660	1.0251	.7063	.3822	.3134
.2761	.1665	.1247	.1316	.1333	.0806	.0554	.0431	.0356	.0304
.0265	.0234	.0209	.0188	.0171	.0155	.0142	.0131	.0121	.0112
.0104	.0097	.0091	.0085	.0080	.0075	.0071	.0067	.0063	.0060
.0057	.0054	.0051	.0049	.0047	.0045	.0043	.0041	.0039	.0037

\*\* SPIN: 3.5-2.5 \*\* ETA: .85 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.32029	.9873	.0000	.1528	.0000	.0444	.0000
.32029	.0000	.0444	.0000	.1528	.0000	.9873
-.01312	-.1025	.0000	.3978	.0000	.9117	.0000
-.01312	.0000	.9117	.0000	.3978	.0000	-.1025
-.30717	-.1217	.0000	.9047	.0000	-.4084	.0000
-.30717	.0000	-.4084	.0000	.9047	.0000	-.1217

.25617	.0000	.0077	.0000	.0250	.0000	.1319	.0000	.9909
.25617	.9909	.0000	.1319	.0000	.0250	.0000	.0077	.0000
.05849	.0000	.9382	.0000	.3148	.0000	.1395	.0000	-.0338
.05849	-.0338	.0000	.1395	.0000	.3148	.0000	.9382	.0000
-.07249	.0000	-.2787	.0000	.4443	.0000	.8427	.0000	-.1212
-.07249	-.1212	.0000	.8427	.0000	.4443	.0000	-.2787	.0000
-.24217	.0474	.0000	-.5029	.0000	.8384	.0000	-.2048	.0000
-.24217	.0000	-.2048	.0000	.8384	.0000	-.5029	.0000	.0474

DIFERENCA DE ENERGIA

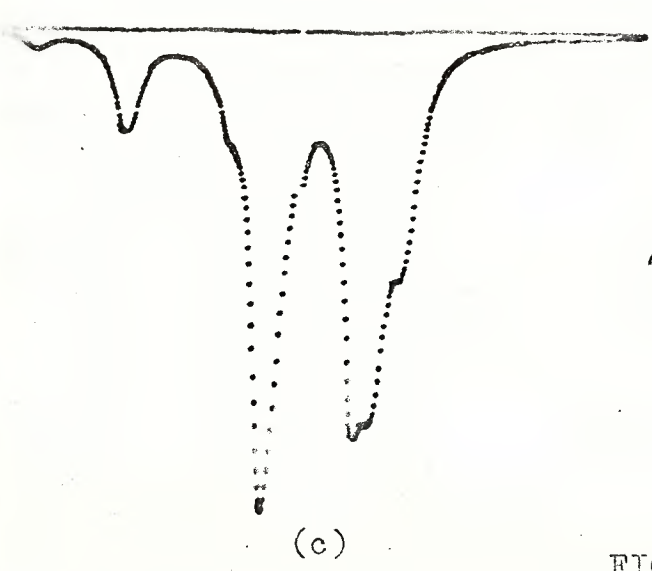
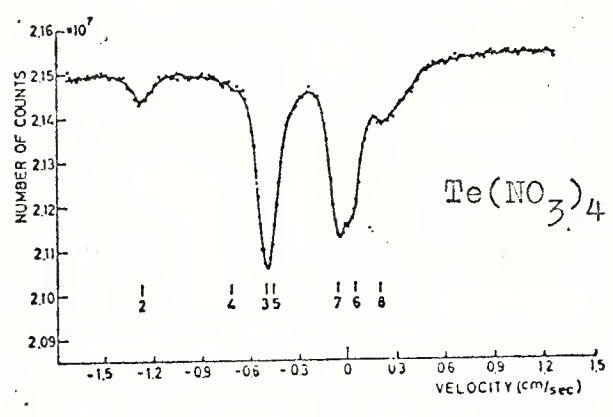
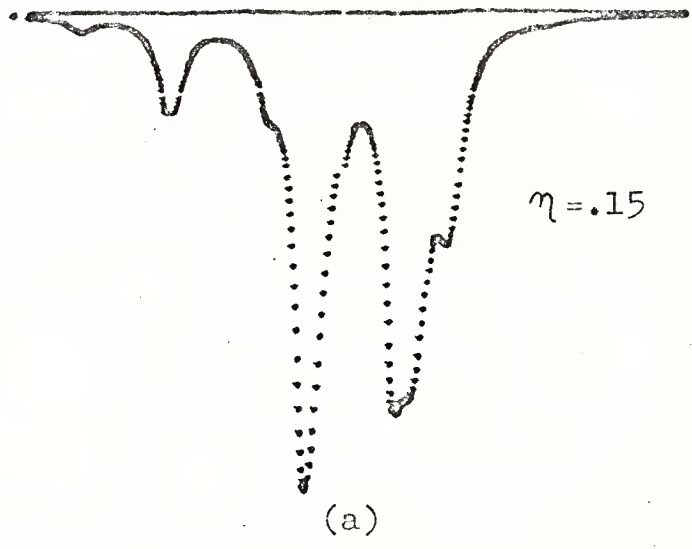
AMPLITUDE DE TRANSICAO

(E200)	(MM/S)	
.064121	-1.066778	1.916238
.261803	-4.355616	.501296
.392778	-6.534650	.163178
.562465	-9.357727	.085955
-.269293	4.480221	.037440
-.071611	1.191385	1.119475
.059365	-.987649	.863460
.229051	-3.810726	.646292
-.563341	9.372297	.046322
-.365658	6.083460	.379230
-.234683	3.904426	.973363
-.064997	1.081348	1.267753

PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL

.0037	.0038	.0040	.0042	.0043	.0046	.0048	.0050	.0053	.0055
.0058	.0061	.0065	.0069	.0073	.0077	.0082	.0087	.0093	.0100
.0108	.0116	.0125	.0136	.0148	.0162	.0178	.0197	.0219	.0246
.0279	.0321	.0377	.0458	.0596	.0883	.1137	.1107	.1379	.2142
.4128	.5496	.4975	.7959	1.2386	.8428	.8171	1.4317	2.6928	1.9140
1.6693	2.8336	2.3064	1.0826	.7681	.9966	1.1915	.7389	.3963	.3273
.2871	.1710	.1258	.1289	.1456	.0897	.0589	.0448	.0366	.0311
.0270	.0237	.0212	.0190	.0172	.0157	.0143	.0132	.0122	.0113
.0105	.0098	.0091	.0085	.0080	.0075	.0071	.0067	.0063	.0060
.0057	.0054	.0052	.0049	.0047	.0045	.0043	.0041	.0039	.0038





$\eta = .0$

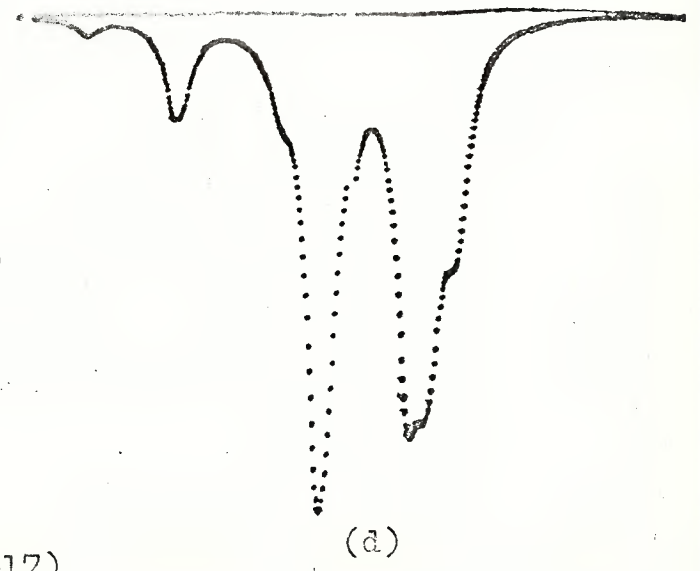


FIG (4-17)

\*\* SPIN: 3.5-2.5 \*\* ETA: .00 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.30750	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
.30750	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000
-.06150	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000
-.06150	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
-.24600	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
-.24600	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000

.25000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
.25000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000
.03571	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000
.03571	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
-.10714	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
-.10714	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000
-.17857	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000
-.17857	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000

DIFERENCA DE ENERGIA

AMPLITUDE DE TRANSICAO

(E200)	(MM/S)	
.057500	2.046598	2.000000
.271786	9.673670	.571428
.414643	14.758385	.095238
.486071	17.300743	.000000
-.311500	-11.08722	.000000
-.097214	-3.460148	1.428571
.045643	1.624566	.952381
.117071	4.166924	.285714
-.496000	-17.65413	.000000
-.281714	-10.02706	.000000
-.138857	-4.942343	.952381
-.067429	-2.399985	1.714286

PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL

.0010	.0011	.0011	.0012	.0012	.0013	.0013	.0014	.0015	.0015
.0016	.0017	.0018	.0019	.0020	.0021	.0023	.0024	.0026	.0027
.0029	.0031	.0034	.0036	.0039	.0043	.0046	.0051	.0056	.0061
.0068	.0076	.0085	.0097	.0110	.0127	.0148	.0175	.0211	.0259
.0327	.0426	.0584	.0861	.1430	.3020	1.0668	1.7949	2.4741	.8862
.8320	2.7814	1.0944	.5392	.2143	.1652	.3363	.4251	.1194	.0746
.1245	.0569	.0294	.0208	.0163	.0135	.0114	.0098	.0086	.0076
.0068	.0061	.0055	.0050	.0046	.0042	.0039	.0036	.0033	.0031
.0029	.0027	.0025	.0024	.0022	.0021	.0020	.0019	.0018	.0017
.0016	.0015	.0014	.0014	.0013	.0013	.0012	.0011	.0011	.0011

\*\* SPIN: 3.5-2.5 \*\* ETA: .15 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.30788	.0000	.0014	.0000	.0264	.0000	.9997
.30788	.9997	.0000	.0264	.0000	.0014	.0000
-.05945	.0000	.9946	.0000	.1040	.0000	-.0041
-.05945	-.0041	.0000	.1040	.0000	.9946	.0000
-.24843	.0000	-.1041	.0000	.9942	.0000	-.0261
-.24843	-.0261	.0000	.9942	.0000	-.1041	.0000

.25019	.9997	.0000	.0229	.0000	.0007	.0000	.0000	.0000
.25019	.0000	.0000	.0000	.0007	.0000	.0229	.0000	.9997
.03639	.0000	.9984	.0000	.0560	.0000	.0054	.0000	-.0002
.03639	-.0002	.0000	.0054	.0000	.0560	.0000	.9984	.0000
-.10477	.0000	-.0155	.0000	.1817	.0000	.9830	.0000	-.0227
-.10477	-.0227	.0000	.9830	.0000	.1817	.0000	-.0155	.0000
-.18180	.0035	.0000	-.1823	.0000	.9818	.0000	-.0541	.0000
-.18180	.0000	-.0541	.0000	.9818	.0000	-.1823	.0000	.0035

DIFERENCA DE ENERGIA

AMPLITUDE DE TRANSICAO

(E200)	(MM/S)	
.057697	2.053618	1.997604
.271499	9.663460	.569233
.412659	14.687782	.093803
.489684	17.429329	.006027
-.309641	-11.02106	.000535
-.095840	-3.411217	1.409605
.045321	1.613106	.930482
.122346	4.354651	.326046
-.498619	-17.74734	.001861
-.284817	-10.13750	.021163
-.143657	-5.113180	.975716
-.066632	-2.371634	1.667928

PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL

.0010	.0011	.0011	.0012	.0012	.0013	.0013	.0014	.0015	.0015
.0016	.0017	.0018	.0019	.0020	.0021	.0023	.0024	.0026	.0027
.0029	.0031	.0034	.0036	.0039	.0043	.0047	.0051	.0056	.0062
.0068	.0076	.0086	.0097	.0111	.0129	.0152	.0191	.0222	.0266
.0337	.0451	.0680	.1035	.1508	.3270	1.1990	1.6430	2.4270	.8888
.8261	2.7431	1.0825	.6130	.2304	.1694	.3402	.4199	.1191	.0757
.1273	.0555	.0349	.0222	.0167	.0136	.0115	.0099	.0086	.0076
.0068	.0061	.0055	.0050	.0046	.0042	.0039	.0036	.0033	.0031
.0029	.0027	.0025	.0024	.0022	.0021	.0020	.0019	.0018	.0017
.0016	.0015	.0014	.0014	.0013	.0013	.0012	.0011	.0011	.0011

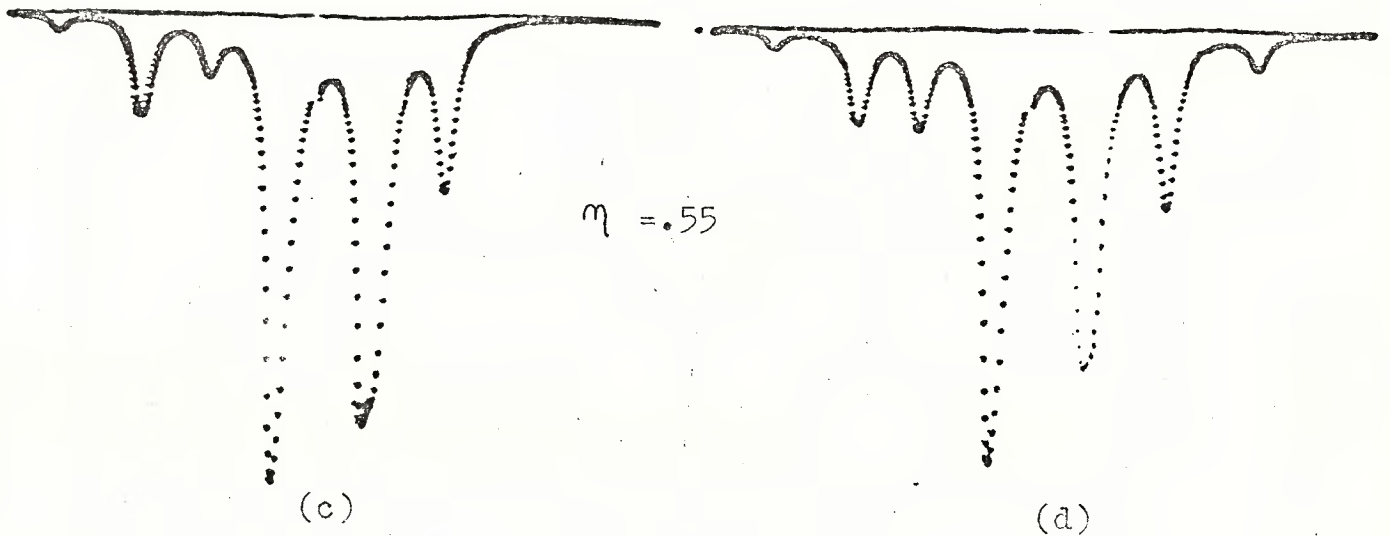
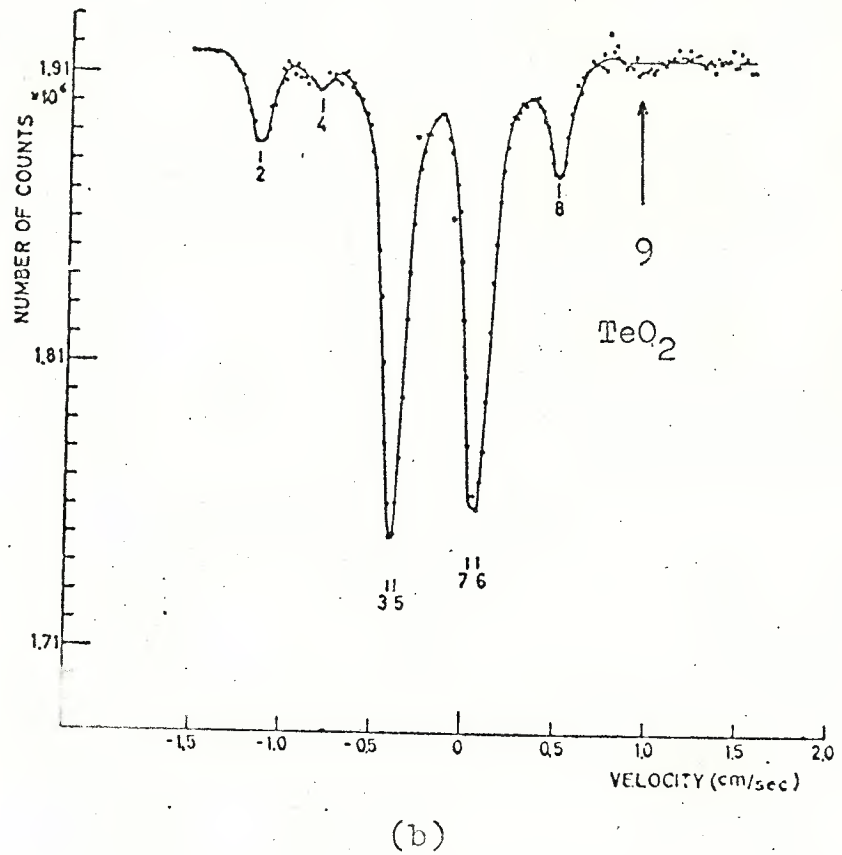
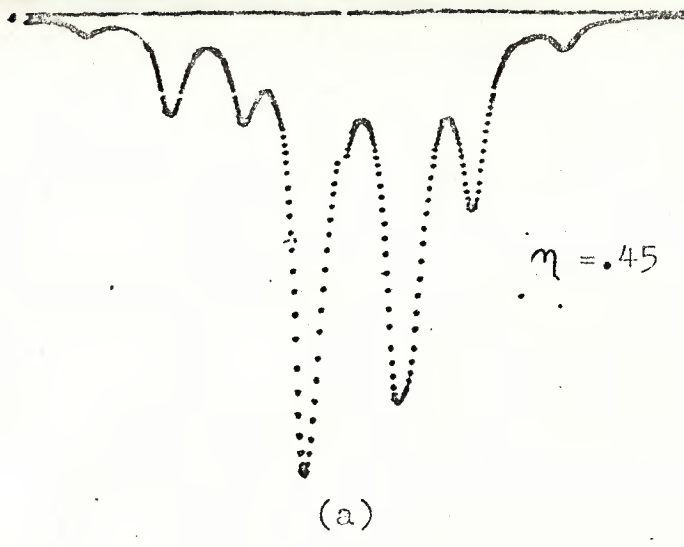


FIG (4-18)

\*\* SPIN: 3.5-2.5 \*\* ETA: .55 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.31275	.9950	.0000	.0976	.0000	.0187	.0000
.31275	.0000	.0187	.0000	.0976	.0000	.9950
-.03773	.0000	.9481	.0000	.3141	.0000	-.0487
-.03773	-.0487	.0000	.3141	.0000	.9481	.0000
-.27502	-.0867	.0000	.9443	.0000	-.3173	.0000
-.27502	.0000	-.3173	.0000	.9443	.0000	-.0867

.25255	.0000	.0021	.0000	.0102	.0000	.0845	.0000	.9964
.25255	.9964	.0000	.0845	.0000	.0102	.0000	.0021	.0000
.04503	.0000	.9760	.0000	.2069	.0000	.0670	.0000	-.0098
.04503	-.0098	.0000	.0670	.0000	.2069	.0000	.9760	.0000
-.08608	-.0797	.0000	.8924	.0000	.4178	.0000	-.1507	.0000
-.08608	.0000	-.1507	.0000	.4178	.0000	.8924	.0000	-.0797
-.21149	.0285	.0000	-.4381	.0000	.8846	.0000	-.1572	.0000
-.21150	.0000	-.1572	.0000	.8846	.0000	-.4381	.0000	.0285

DIFERENCA DE ENERGIA

AMPLITUDE DE TRANSICAO

(E20Q)	(MM/S)	
.060202	2.110564	1.966607
.267722	9.385790	.540795
.398826	13.982046	.110893
.524243	18.378922	.048373
-.290272	-10.17635	.011545
-.082752	-2.901126	1.247125
.048352	1.695130	.860437
.173769	6.092007	.547562
-.527569	-18.49552	.021848
-.320049	-11.22029	.212082
-.188945	-6.624039	1.028672
-.063528	-2.227161	1.404067

PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL

.0006	.0007	.0007	.0007	.0008	.0008	.0008	.0009	.0009	.0010
.0010	.0011	.0011	.0012	.0013	.0013	.0014	.0015	.0016	.0017
.0018	.0020	.0021	.0023	.0025	.0027	.0030	.0033	.0036	.0040
.0045	.0051	.0058	.0067	.0080	.0102	.0178	.0250	.0181	.0225
.0340	.0798	.2236	.1061	.2027	1.0774	.3476	.5862	2.1339	.6007
.4854	2.2691	.7745	.2701	.5991	.2111	.3060	.2741	.0754	.0634
.1119	.0323	.0269	.0592	.0170	.0105	.0081	.0067	.0057	.0050
.0044	.0039	.0035	.0032	.0029	.0027	.0024	.0023	.0021	.0019
.0018	.0017	.0016	.0015	.0014	.0013	.0012	.0012	.0011	.0010
.0010	.0009	.0009	.0009	.0008	.0008	.0007	.0007	.0007	.0007

\*\* SPIN: 3.5+2.5 \*\* ETA: .45 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.31100	.9967	.0000	.0796	.0000	.0125	.0000
.31100	.0000	.0125	.0000	.0796	.0000	.9967
-.04482	.0000	.9614	.0000	.2732	.0000	-.0339
-.04482	-.0339	.0000	.2732	.0000	.9614	.0000
-.26618	-.0731	.0000	.9587	.0000	-.2750	.0000
-.26618	.0000	-.2750	.0000	.9587	.0000	-.0731

.25170	.9976	.0000	.0690	.0000	.0068	.0000	.0011	.0000
.25170	.0000	.0011	.0000	.0068	.0000	.0690	.0000	.9976
.04189	.0000	.9845	.0000	.1692	.0000	.0462	.0000	-.0055
.04189	-.0055	.0000	.0462	.0000	.1692	.0000	.9845	.0000
-.09125	-.0656	.0000	.9126	.0000	.3884	.0000	-.1099	.0000
-.09125	.0000	-.1099	.0000	.3884	.0000	.9126	.0000	-.0656
-.20234	.0217	.0000	-.4004	.0000	.9058	.0000	-.1367	.0000
-.20234	.0000	-.1367	.0000	.9058	.0000	-.4004	.0000	.0217

DIFERENCA DE ENERGIA

AMPLITUDE DE TRANSICAO

(E200)	(MM/S)	
.059297	2.078841	1.977925
.269106	9.434328	.551043
.402243	14.101849	.101022
.513337	17.996574	.036678
-.296518	-10.39532	.006844
-.086709	-3.039834	1.293572
.046428	1.627689	.867382
.157522	5.522414	.498871
-.517876	-18.15569	.015232
-.308067	-10.80020	.155386
-.174929	-6.132678	1.031597
-.063836	-2.237952	1.464453

PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL

.0010	.0011	.0011	.0012	.0012	.0013	.0013	.0014	.0015	.0015
.0016	.0017	.0018	.0019	.0020	.0021	.0023	.0024	.0026	.0027
.0029	.0032	.0034	.0037	.0040	.0043	.0047	.0052	.0057	.0063
.0070	.0079	.0090	.0103	.0121	.0147	.0205	.0334	.0268	.0320
.0444	.0778	.2194	.1497	.2264	.7840	.7692	1.0021	2.3375	.8842
.7658	2.5674	1.0597	.4868	.5734	.2301	.3773	.3797	.1169	.0871
.1333	.0506	.0438	.0460	.0215	.0153	.0123	.0104	.0090	.0078
.0070	.0062	.0056	.0051	.0046	.0042	.0039	.0036	.0033	.0031
.0029	.0027	.0025	.0024	.0022	.0021	.0020	.0019	.0018	.0017
.0016	.0015	.0014	.0014	.0013	.0013	.0012	.0011	.0011	.0011

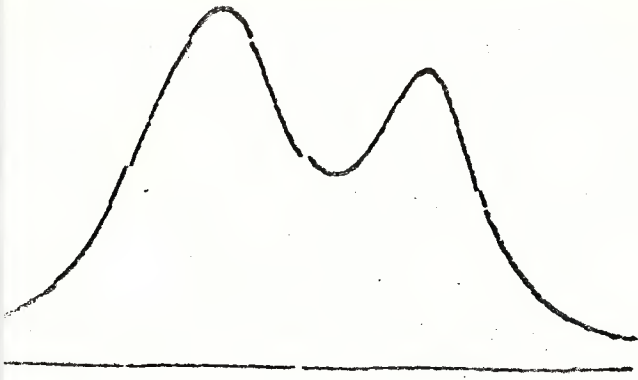
4.3.3 Compostos de  $\text{Hf}^{178}$ :  $(\text{NH}_4)_3\text{HfF}_7$ ,  $(\text{NH}_4)_4\text{HfF}_6$ ,  $\text{K}_2\text{HfF}_6$

Os compostos de  $\text{Hf}^{178}$  mostram transições entre o estado 2  $\longrightarrow$  0 como as estudadas no ítem 4.2.

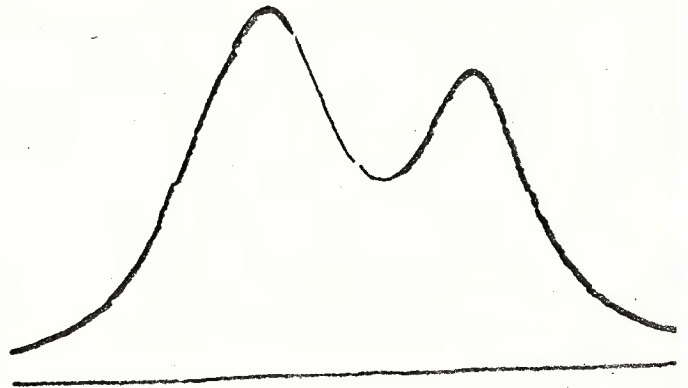
Para ilustrar este caso, apresentamos na figura (4-19) os espectros esperados para uma transição desse tipo, com  $\eta$  valendo .0, .2, .4, .6, .8 e 1.

As figura (4-20) e (4-21) são as comparações das experiências ajustadas através dos mínimos quadrados com as fotografias das curvas apresentadas no "display". Apresentamos também as tabelas de resultados para cada caso.

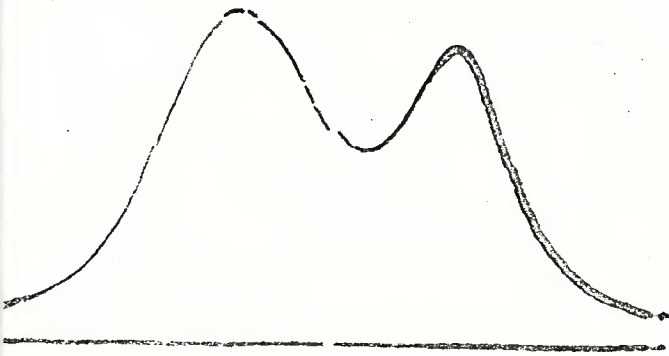
Hf<sup>178</sup>



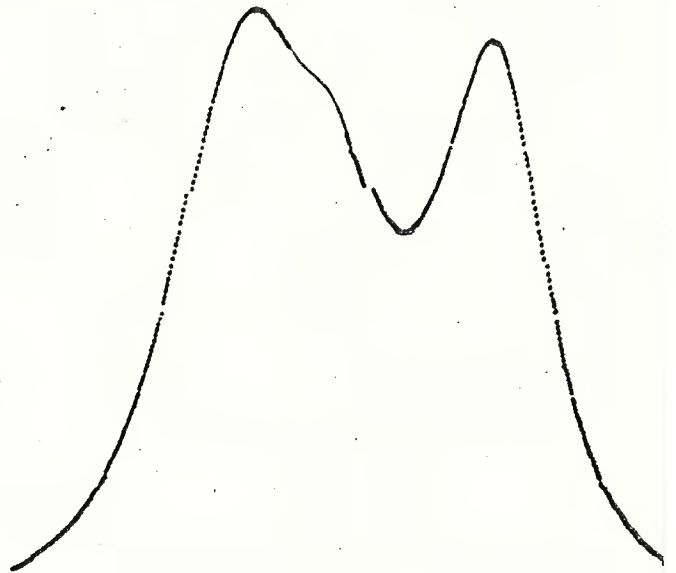
$\eta = 0.0$



$\eta = 0.2$



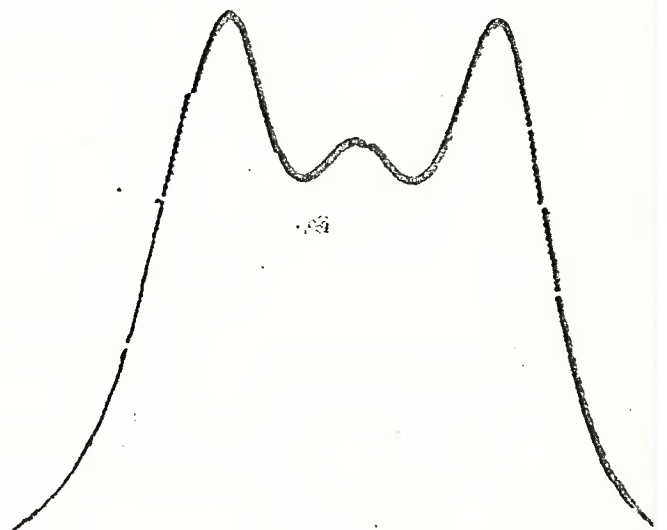
$\eta = 0.4$



$\eta = 0.6$



$\eta = 0.8$



$\eta = 1.0$

FIG (4-19)



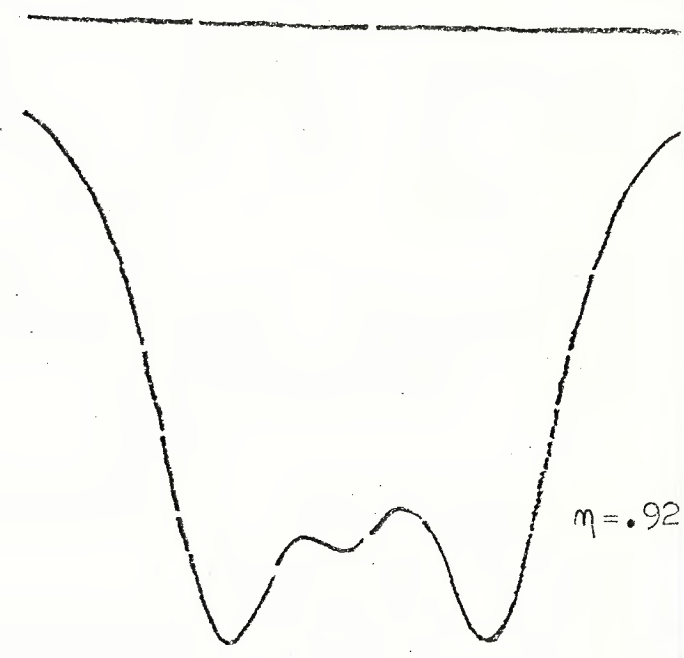
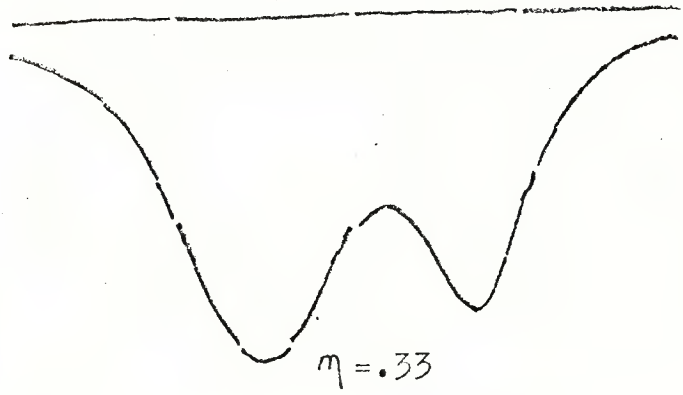
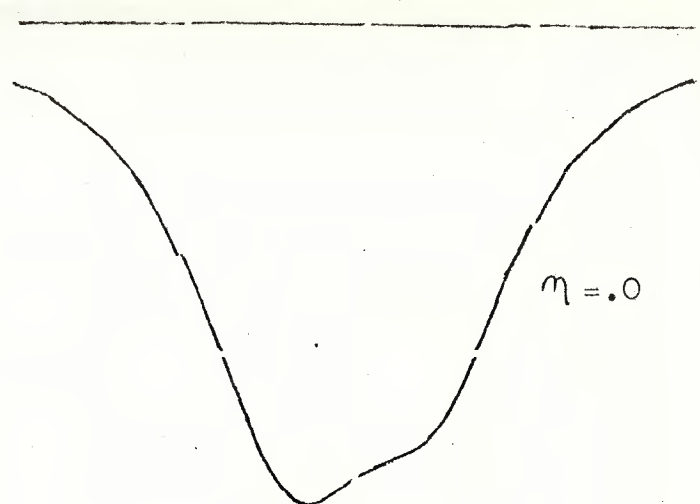
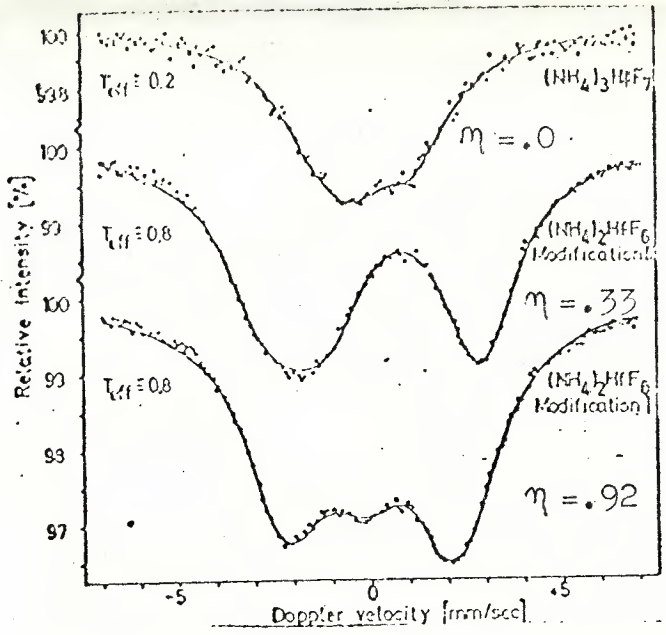


FIG (4-20)

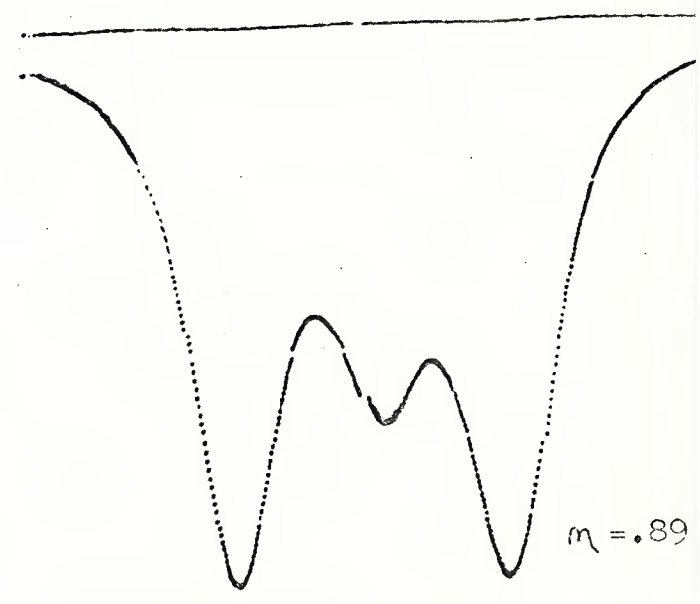
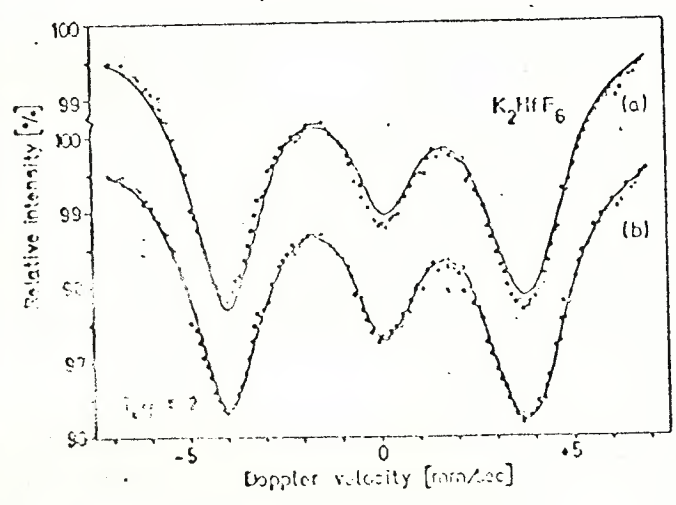


FIG (4-21)

\*\* SPIN: 2.0\* .0 \*\* ETA: .00 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.00000	1.0000				
.25000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
.25000	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000
-.12500	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000
-.12500	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000
-.25000	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000

DIFERENCA DE ENERGIA

AMPLITUDE DE TRANSICAO

(E200)	(MM/S)	
-.250000	-1.122590	2.000000
.125000	.561295	2.000000
.250000	1.122590	1.000000

PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL

.1151	.1199	.1250	.1304	.1363	.1425	.1491	.1563	.1639	.1721
.1810	.1906	.2010	.2122	.2244	.2376	.2521	.2680	.2854	.3045
.3256	.3490	.3749	.4038	.4362	.4725	.5134	.5598	.6124	.6726
.7415	.8209	.9125	1.0186	1.1415	1.2839	1.4481	1.6357	1.8466	2.0775
2.3204	2.5617	2.7834	2.9673	3.1028	3.1916	3.2483	3.2936	3.3458	3.4142
3.4955	3.5747	3.6285	3.6334	3.5726	3.4415	3.2475	3.0059	2.7366	2.4590
2.1895	1.9389	1.7132	1.5141	1.3407	1.1908	1.0617	.9504	.8543	.7712
.6991	.6361	.5810	.5325	.4897	.4518	.4180	.3878	.3607	.3363
.3143	.2944	.2763	.2598	.2447	.2309	.2183	.2066	.1958	.1859
.1767	.1682	.1602	.1529	.1460	.1395	.1335	.1279	.1226	.1176

\*\* SPIN: 2.0- .0 \*\* ETA: .33 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.00000	1.00000				
.25450	.7040	.0000	.0940	.0000	.7040
.25000	-.7071	.0000	-.0000	.0000	.7071
-.08375	.0000	.7071	.0000	.7071	.0000
-.16625	.0000	-.7071	.0000	.7071	.0000
-.25450	-.0665	.0000	.9956	.0000	-.0665

DIFERENCA DE ENERGIA

AMPLITUDE DE TRANSICAO

(E200)	(MM/S)	
-.254497	-2.935772	1.000000
-.250000	-2.883896	1.000000
.083750	.966105	1.000000
.166250	1.917791	1.000000
.254497	2.935773	1.000000

PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL

.0220	.0229	.0239	.0250	.0261	.0274	.0287	.0301	.0316	.0332
.0350	.0369	.0390	.0413	.0438	.0465	.0495	.0528	.0564	.0605
.0650	.0700	.0756	.0820	.0893	.0976	.1071	.1182	.1311	.1464
.1646	.1865	.2134	.2467	.2888	.3429	.4140	.5097	.6415	.8266
1.0880	1.4440	1.8674	2.2106	2.2602	2.0230	1.7238	1.5219	1.4618	1.5465
1.7669	2.0768	2.3668	2.5397	2.5722	2.4638	2.2262	1.8687	1.4670	1.1184
.8555	.6664	.5308	.4318	.3579	.3016	.2577	.2228	.1947	.1717
.1526	.1366	.1230	.1114	.1014	.0927	.0851	.0784	.0725	.0672
.0625	.0583	.0545	.0511	.0480	.0451	.0426	.0402	.0380	.0360
.0342	.0325	.0309	.0294	.0281	.0268	.0256	.0245	.0235	.0225

\*\* SPIN: 2.0 ← .0 \*\* ETA: .92 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.00000	1.00000				
.28308	.6861	.0000	.2417	.0000	.6861
.25000	-.7071	.0000	-.0000	.0000	.7071
-.01000	.0000	.7071	.0000	.7071	.0000
-.24000	.0000	-.7071	.0000	.7071	.0000
-.28308	-.1709	.0000	.9703	.0000	-.1709

DIFERENCA DE ENERGIA

AMPLITUDE DE TRANSICAO

(E2QQ)	(MM/S)	
-.283078	-2.388836	1.000000
-.250000	-2.109695	1.000000
.010000	.084388	1.000000
.240000	2.025308	1.000000
.283078	2.388836	1.000001

PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL

.0287	.0299	.0312	.0326	.0341	.0358	.0375	.0393	.0413	.0435
.0459	.0484	.0512	.0542	.0574	.0610	.0650	.0694	.0742	.0795
.0855	.0922	.0998	.1083	.1180	.1291	.1419	.1568	.1742	.1948
.2194	.2491	.2855	.3306	.3875	.4605	.5559	.6827	.8535	1.0842
1.3876	1.7542	2.1143	2.3328	2.3178	2.1363	1.9406	1.8333	1.8367	1.9094
1.9678	1.9605	1.9343	1.9731	2.1091	2.2879	2.3767	2.2586	1.9504	1.5749
1.2357	.9682	.7681	.6199	.5092	.4252	.3603	.3092	.2684	.2353
.2081	.1854	.1663	.1501	.1362	.1242	.1137	.1045	.0965	.0893
.0829	.0772	.0721	.0675	.0633	.0595	.0560	.0529	.0500	.0473
.0449	.0426	.0405	.0386	.0368	.0351	.0335	.0321	.0307	.0294

\*\* SPIN: 2.0+ .0 \*\* ETA: .89 \*\*

AUTOVALORES

AUTOVETORES

.00000	1.0000				
.28107	.6873	.0000	.2351	.0000	.6873
.25000	-.7071	.0000	.0000	.0000	.7071
-.01375	.0000	.7071	.0000	.7071	.0000
-.23625	.0000	-.7071	.0000	.7071	.0000
-.28107	-.1662	.0000	.9720	.0000	-.1662

DIFERENCA DE ENERGIA

AMPLITUDE DE TRANSICAO

(E2QQ)	(MM/S)	
-.281073	4.178050	1.000000
-.250000	3.716161	1.000000
.013750	-.204388	1.000000
.236250	-3.511773	1.000000
.281073	-4.178052	.000000

PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL

.0133	.0139	.0145	.0152	.0159	.0167	.0175	.0183	.0193	.0203
.0214	.0226	.0239	.0253	.0268	.0285	.0304	.0324	.0347	.0372
.0401	.0432	.0468	.0509	.0555	.0608	.0670	.0742	.0826	.0927
.1048	.1196	.1379	.1610	.1908	.2302	.2837	.3588	.4685	.6347
.8937	1.2879	1.7884	2.1276	2.0039	1.6039	1.2792	1.1421	1.1851	1.3650
1.5217	1.4666	1.3314	1.3300	1.5322	1.8829	2.1207	1.9709	1.5196	1.0685
.7494	.5433	.4092	.3189	.2558	.2100	.1758	.1495	.1289	.1124
.0990	.0879	.0787	.0708	.0641	.0584	.0534	.0490	.0452	.0418
.0388	.0361	.0337	.0315	.0296	.0278	.0262	.0247	.0233	.0221
.0209	.0198	.0189	.0180	.0171	.0163	.0156	.0149	.0143	.0137

## 5. CONCLUSÕES

As comparações qualitativas feitas no capítulo 4 entre espectros experimentais e curvas calculadas através do modelo desenvolvido neste trabalho, mostram a existência de transições "proibidas" e evidenciam a variação das amplitudes de transição em função do parâmetro de assimetria.

A programação geral baseada nas equações finais deduzidas do modelo usado para o sistema físico, foi feita em nível de linguagem compatível a pequenos sistemas de computação.

A apresentação visual em osciloscópio das curvas resultantes permite o ajuste iterativo das curvas experimentais por variações adequadas do parâmetro de assimetria e da constante de acoplamento quadripolar. Isto facilitado pela possibilidade de interação homem-máquina.

Mediante adaptações convenientes na programação, poder-se-ia usá-la como base para um programa de ajuste pelo método dos mínimos quadrados.

Se além da interação quadripolar levarmos em conta a ação de um campo magnético com ângulo fixo em relação ao gradiente de campo elétrico, uma situação representativa para materiais ferro ou anti-ferromagnéticos, o procedimento geral seria mantido, porém o surgimento de elementos de matriz complexos obrigaria à reestruturação da programação, trabalho este considerado uma extensão do existente. Para ângulo variável entre o campo magnético e o gradiente de campo elétrico, uma situação que surge em experiências onde há campo externo aplicado a um pó cristalino, a solução seria intrincada e difícil de implementar para pequenos sistemas de computação.

ANEXOS: LISTAGEM COM COMENTÁRIOS

FTN,L

PROGRAM IMTI  
PROGRAMA PRINCIPAL IMTI

## PROPOSICAO

CALCULO DE MATRIZES CORRESPONDENTES AO HAMILTONIANO QUADRIPO-  
LAR PARA SPIN INICIAL E FINAL, COM DETERMINACAO DOS AUTOVALO-  
RES E AUTOVETORES. CALCULO DAS ANPLITUDES DE TRANSICAO E RES-  
PECTIVAS DIFERENCAS DE ENERGIAT E PARA ESTES DADOS AJUSTE DE  
CURVAS LORENTZIANAS EM CADA PICO, COM APRESENTACAO VISUAL EM  
OSCILOSCOPIO.

## DESCRICAO DOS PARAMETROS REQUERIDOS

XI -SPIN EXCITADO  
XJ -SPIN FUNDAMENTAL  
ETA -PARAMETRO DE ASSIMETRIA  
FCT -VALOR DE QEX/Q0  
XLAMB -REFERENTE A REGRA DE TRANSICAO  
GAMA -LARGURA A MEIA ALTURA DAS LORENTZIANAS DADO EM MM/S  
AESP -FATOR QUE MULTIPLICA A ENERGIA PARA MELHOR APRESENTA-  
CAO VISUAL DA CURVA  
E2QQ -CONSTANTE DE ACOPLAMENTO QUADRIPOLAR DADA EM MM/S

## SUBPROGRAMAS UTILIZADOS

SUBROTINA MAT, SUBROTINA ARRAY, SUBROTINA MSTR, SUBROTINA LOC,  
FUNCAO FACT, FUNCAO CCG, SUBROTINA AMTR, SUBROTINA LORNZ,  
SUBROTINA DISPL

DIMENSION EM1(12,12),EM2(12,12),A1(100),A2(100),R1(150),R2(150),D1  
CLTE(80),AMPTR(80),B1(50),B2(50),JF(80),AMP(20),POS(20),Y(500)  
WRITE(6,1)

1 FORMAT(" ESCREVA:SPFIN,SPINI,ETA,QEX/Q0,LAMBDA,GAMA,AESP,E2QQ")

LEITURA DOS SPIN INICIAL, SPIN FINAL, PARAMETRO DE ASSIMETRIA,  
FATOR Q0/QEX, LAMBDA,LARGURA A MEIA ALTURA

2 READ(1,\*)XI,XJ,ETA,FCT,XLAMB,GAMA,AESP,E2QQ

TESTE DE FINALIZACAO

IF(ETA-2.0)5,60,60

5 XN=2.\*XJ+1.

XM=2.\*XI+1.

DIMENSAO DA MATRIZ FINAL

M=IFIX(XM)

DIMENSAO DA MATRIZ INICIAL

N=IFIX(XN)

CALCULO DA MATRIZ QUADRIPOLAR PARA O SPIN FINAL

CALL MAT(XI,ETA,EM1)

CALL ARRAY(2,M,M,12,12,EM1,EM1)

CALL MSTR(EM1,A1,M,0,1)

```

C   CALCULO DOS AUTOVALORES E AUTOVETORES CORRESPONDENTE AO SPIN FINAL
CALL EIGEN(A1,R1,M,0)
DO 100 I1=1,M
J1=I1*(I1+1)/2
C   A ENERGIA DO ESTADO EXCITADO E MULTIPLICADA PELO FATOR QEX/Q0
100 BI(I1)=A1(J1)*FCT
C   CALCULO DA MATRIZ QUADRIPOLAR PARA O SPIN INICIAL
CALL MAT(XJ,ETA,EM2)
CALL ARRAY(2,N,N,12,12,EM2,EM2)
CALL MSTR(EM2,A2,N,0,1)
C   CALCULO DOS AUTOVALORES E AUTOVETORES CORRESPONDENTES AO SPIN INIC
CALL EIGEN(A2,R2,N,0)
DO 200 I2=1,N
J2=I2*(I2+1)/2
200 B2(I2)=A2(J2)
C   CALCULO DAS AMPLITUDES DE TRANSICOES COM AS ENERGIAS CORRESPONDENT
CALL AMTR(R1,R2,B1,B2,XI,XJ,DELTE,AMPTR,XLAMB)
MAX=N*M
DO 300 INT=1,MAX
300 JF(INT)=0
MAX1=MAX-1
DO 400 J=1,MAX1
I=J+1
DO 400 INT=1,MAX
IF(JF(INT))35,35,400
C   AMPLITUDES CORRESPONDENTES A MESMA ENERGIA SAO SOMADAS
35 IF(ABS(DELTE(J)-DELTE(INT))-0.0001)45,45,400
45 JF(INT)=1
AMPTR(J)=AMPTR(INT)+AMPTR(J)
AMPTR(INT)=0.
400 CONTINUE
I=1
DO 500 INT=1,MAX
IF(JF(INT))500,55,500
55 POS(I)=DELTE(INT)*AESP
AMP(I)=AMPTR(INT)
I=I+1
NPICS=I-1
500 CONTINUE
GAMA=GAMA/E2QQ
CALL LORNZ(AMP,POS,Y,GAMA,NPICS)
CALL DISPL(Y,500,1,Y,500,1,M1,M2)
C   VARIABEL QUE INDICA IMPRESSAO OU NAO DE DADOS 1,0 RESPECTIVAMENTE
WRITE(6,7)
7 FORMAT(" TABELAS? (1/0)")
READ(1,*)IMM
IF(IMM)8,18,8
8 WRITE(6,10)XJ,XI,ETA
10 FORMAT(///,15X,"** SPIN:",F4.1,"~",F3.1," ** ETA:",F4.2," **",///,"
1 AUTOVALORES",20X,"AUTOVETORES",/)
DO 70 I=1,M
K=I*M-M+1

```



```
L=K+M-1
WRITE(6,20)(B1(I),(R1(J),J=K,L))
70 CONTINUE
20 FORMAT(F10.5,4X,8F7.4)
WRITE(6,30)
30 FORMAT(/)
DO 65 I=1,N
K=I*N-N+1
L=K+N-1
WRITE(6,80)(B2(I),(R2(J),J=K,L))
65 CONTINUE
80 FORMAT(F10.5,4X,8F7.4)
WRITE(6,90)
90 FORMAT(/,10X,"DIFERENCA DE ENERGIA",10X,"AMPLITUDE DE TRANSICAO",
1/,10X,"(E2QQ)",6X,"(MM/S)")
DO 92 I=1,NPICS
POST=POS(I)*E2QQ
92 WRITE(6,95)POS(I),POST,AMP(I)
95 FORMAT(7X,F9.6,3X,F9.6,15X,F9.6)
WRITE(6,96)
96 FORMAT(/,20X,"PONTOS QUE FORMAM A CURVA FINAL",/)
WRITE(6,97)(Y(I),I=1,500,5)
97 FORMAT(10F7.4)
18 GO TO 2
60 STOP
END
```

FTN.L

```

SUBROUTINE MAT(XI,W,EM)
SUBROTINA MAT
                                                    IVONE MM

PROPOSICAO
  CALCULAR A MATRIZ PERTURBADA DEVIDO A INTERACAO QUADRIPOlar

MODO DE USAR
  CALL MAT(XI,W,EM)

DESCRICAO DOS PARAMETROS
  XI   -SPIN NUCLEAR
  EM   -ARRANJO BIDIMENSIONAL, MATRIZ RESULTANTE
  W    -PARAMETRO DE ASSIMETRIA (ETA)

COMENTARIO
  DIMENSIONAMENTO VALIDO PARA 'EM' ATE 12 POR 12, CORRESPONDEN-
  TE A SPIN 11/2

DIMENSION EM(12,12)
IF(XI)3,3,2
2 IF(XI-.6)4,4,5
3 EM(1,1)=0.
GO TO 60
4 EM(1,1)=0.
EM(1,2)=0.
EM(2,1)=0.
EM(2,2)=0.
GO TO 60
5 X=4.*XI*(2.*XI-1.)
XK=2.*XI+1.
C DIMENSIONAMENTO DA MATRIZ A SER CALCULADA.
INT=IFIX(XK)
DO 30 I=1,INT
A=FLOAT(I)
XM=XI+1.-A
C DO 45 K=1,INT
TESTE DE SELECAO PARA OS ELEMENTOS DIAGONAIS
IF(I-K)35,10,35
10 EM(I,K)=(3.*XM*XM-XI*(XI+1.))/X
GO TO 45
C TESTE DE SELECAO PARA OS ELEMENTOS XM=XI+2
35 IF(I-(K+2))40,20,40
20 Y=SQRT(XI*(XI+1.)-(XM*(XM+1.)))
Z=SQRT(XI*(XI+1.)-(XM+1.)*(XM+2.))
EM(I,K)=Y*Z*W/(2.*X)
GO TO 45
C TESTE DE SELECAO PARA OS ELEMENTOS XM=XI-2
40 IF(I-(K-2))55,50,55

```

```
50 Y=SQRT(XI*(XI+1.)-(XM*(XM-1.)))  
Z=SQRT(XI*(XI+1.)-(XM-1.)*(XM-2.))  
EM(I,K)=Y*Z*W/(2.*X)  
GO TO 45  
C   TODOS ELEMENTOS FORA DOS TESTES SAO NULOS.  
55 EM(I,K)=0.  
45 CONTINUE  
30 CONTINUE  
60 RETURN  
END
```

SUBROUTINE ARRAY(MODE,I,J,N,M,S,D)  
SUBROTINA ARRAY

IVONE MM

## PROPOSICAO

MUDAR O MODO DE ARMAZENAMENTO DA MATRIZ. NESTE CASO UTILIZAMOS A CONVERSAO DO MODO NORMAL PARA O MODO GERAL QUE SE FAZ NECESSARIA DEVIDO AO DIMENSIONAMENTO MAXIMO DE MAT

## MODO DE USAR

CALL ARRAY(MODE,I,J,N,M,S,D)

## DESCRICAO DOS PARAMETROS

MODE -CODIGO INDICANDO O TIPO DE CONVERSAO. NESTE CASO MODE =2 MUDA DE MODO NORMAL PARA MODO GERAL  
I -NUMERO DE FILAS QUE A MATRIZ ARGUMENTO REALMENTE POSSUI  
J -NUMERO DE COLUNAS QUE A MATRIZ ARGUMENTO REALMENTE POSSUI  
N -NUMERO DE LINHAS ESPECIFICADAS PARA O CONJUNTO D NO 'DIMENSION'  
M -NUMERO DE COLUNAS ESPECIFICADAS PARA O CONJUNTO D NO 'DIMENSION'  
S -PARA MODE=2, ESTA AREA CONTEM NA SAIDA DA SUBROTINA A MATRIZ ARGUMENTO DE TAMANHO I\*J ARMAZENADA NO MODO GERAL.  
D -PARA MODE=2, ESTA AREA N\*M DEVE CONTER NA ENTRADA DA SUBROTINA A MATRIZ ARGUMENTO DE TAMANHO I\*J ARMAZENADA NO MODO NORMAL

## COMENTARIO

ESTA SUBROTINA PERTENCE A BIBLIOTECA DE PROGRAMAS CIENTIFICOS DA IBM

DIMENSION S(1),D(1)

NI=N-I

TEST TYPE OF CONVERSION

IF(MODE-1)100,100,120

CONVERT FROM SINGLE TO DOUBLE DIMENSION

100 IJ=I\*J+1

NM=N\*J+1

DO 110 K=1,J

NM=NM-NI

DO 110 L=1,I

IJ=IJ-1

NM=NM-1

110 D(NM)=S(IJ)

GO TO 140

CONVERT FROM DOUBLE TO SINGLE DIMENSION

120 IJ=0

NM=0

DO 130 K=1,J

PAGE 0004

```
DO 125 L=1,I
  IJ=IJ+1
  NM=NM+1
125 S(IJ)=D(NM)
130 NM=NM+NI
140 RETURN
  END
```

```
SUBROUTINE MSTR(A,R,N,MSA,MSR)  
SUBROTINA MSTR
```

IVONE MM

## PROPOSICAO

```
CONVERTER A MATRIZ DE MODO GERAL PARA SIMETRICO A FIM DE QUE  
POSSA SER DIAGONALIZADA
```

## MODO DE USAR

```
CALL MSTR(A,R,N,MSA,MSR)
```

## DESCRICAO DOS PARAMETROS

```
A -NOME DA MATRIZ A SER CONVERTIDA  
R -NOME DA MATRIZ APOS A CONVERSAO  
N -NUMERO DE FILAS E COLUNAS DE A E R  
MSA -PARAMETRO QUE INDICA O MODO DE ARMAZENAMENTO DA MATRIZ  
A. NESTE CASO MSA=0 (MODO GERAL)  
MSR -PARAMETRO QUE INDICA O MODO DE ARMAZENAMENTO DA MATRIZ  
R. NESTE CASO MSR=1 (MODO SIMETRICO)
```

## SUBROTINA REQUERIDA

```
LOC(I,J,IR,N,M,MS)
```

## COMENTARIO

```
ESTA SUBROTINA PERTENCE A BIBLIOTECA DE PROGRAMAS CIENTIFICOS  
DA IBM
```

```
DIMENSION A(1),R(1)
```

```
DO 20 I=1,N
```

```
DO 20 J=1,N
```

```
IF R IS GENERAL FORM ELEMENT
```

```
IF(MSR)5,10,5
```

```
IF IN LOWER TRIANGLE OF SYMMETRIC OR DIAGONAL R, BYPASS
```

```
5 IF(I-J)10,10,20
```

```
10 CALL LOC(I,J,IR,N,N,MSR)
```

```
IF IN UPPER AND OFF DIAGONAL OF DIAGONAL R, BYPASS
```

```
IF(IR)20,20,15
```

```
OTHERWISE, FORM R(I,J)
```

```
15 R(IR)=0.0
```

```
CALL LOC(I,J,IA,N,N,MSA)
```

```
IF THERE IS NO A(I,J), LEAVE R(I,J) AT 0.0
```

```
IF(IA)20,20,18
```

```
18 R(IR)=A(IA)
```

```
20 CONTINUE
```

```
RETURN
```

```
END
```

SUBROUTINE LOC(I,J,IR,N,M,MS)  
SUBROTINA LOC

IVONE MM

## PROPOSICAO

CALCULAR O SUBSCRITO UNIDIMENSIONAL DE UMA MATRIZ ARMAZENADA  
NO MODO GERAL, SIMETRICO OU DIAGONAL

## MODO DE USAR

CALL LOC(I,J,IR,N,M,MS)

## DESCRICAO DOS PARAMETROS

I -NUMERO DA LINHA DO ELEMENTO  
J -NUMERO DA COLUNA DO ELEMENTO  
IR -SUBSCRITO UNIDIMENSIONAL RESULTANTE  
N -NUMERO DE LINHAS DA MATRIZ  
M -NUMERO DE COLUNAS DA MATRIZ  
MS -PARAMETRO INDICANDO O MODO DE ARMAZENAMENTO DA MATRIZ  
NESTE CASO MS=1 (MODO SIMETRICO)

## COMENTARIO

ESTA SUBROTINA PERTENCE A BIBLIOTECA DE PROGRAMAS CIENTIFICOS  
DA IBM

```

IX=I
JX=J
IF(MS-1)10,20,30
10 IRX=N*(JX-1)+IX
GO TO 36
20 IF(IX-JX)22,24,24
22 IRX=IX+(JX*JX-JX)/2
GO TO 36
24 IRX=JX+(IX*IX-IX)/2
GO TO 36
30 IRX=0
IF(IX-JX)36,32,36
32 IRX=IX
36 IR=IRX
RETURN
END

```

SUBROUTINE EIGEN(A,R,N,MV)  
SUBROTINA EIGEN

IVONE MM

## PROPOSICAO

CALCULAR OS AUTOVALORES E AUTOVETORES DE UMA MATRIZ SIMETRICA REAL

## MODO DE USAR

CALL EIGEN(A,R,N,MV)

## DESCRICAO DOS PARAMETROS

A -MATRIZ ORIGINAL (SIMETRICA) DESTRUIDA DURANTE A EXECUCAO DA SUBROTINA. OS AUTOVALORES RESULTANTES SAO DEVOLVIDOS NA DIAGONAL DA MATRIZ A EM ORDEM DECRESCENTE  
R -MATRIZ RESULTANTE DE AUTOVETORES EM ORDEM IGUAL A DOS AUTOVALORES  
N -ORDEM DAS MATRIZES A E R  
MV -CODIGO SE MV=1 CALCULA SOMENTE AUTOVALORES SE MV=0 CALCULA AUTOVALORES E AUTOVETORES

## COMENTARIO

A MATRIZ ORIGINAL A DEVE SER SIMETRICA E REAL. O METODO DE DIAGONALIZACAO UTILIZADO FOI O DE JACOBI E ADAPTADO POR VON NEUMANN PARA GRANDES COMPUTADORES COMO MOSTRADO EM 'MATHEMATICAL METHODS FOR DIGITAL COMPUTERS', EDITADO POR A. RALSTON E H. S. WILF, JOHN WILEY AND SONS, NEW YORK, 1962, CAPITULO 7

DIMENSION A(1),R(1)

GENERATE IDENTITY MATRIX

IF(MV-1)10,25,10

10 IQ=-N

DO 20 J=1,N

IQ=IQ+N

DO 20 I=1,N

IJ=IQ+I

R(IJ)=0.0

IF(I-J)20,15,20

15 R(IJ)=1.0

20 CONTINUE

COMPUTE INITIAL AND FINAL NORMS (ANORM AND ANORMX)

25 ANORM=0.0

DO 35 I=1,N

DO 35 J=1,N

IF(I-J)30,35,30

30 IA=I+(J\*J-J)/2

ANORM=ANORM+A(IA)\*A(IA)

35 CONTINUE

IF(ANORM)165,165,40



```

40 ANORM=1.414*SQRT(ANORM)
   ANRMX=ANORM*1.0E-6/FLOAT(N)
C   INITIALIZE INDICATORS AND COMPUTE THRESHOLD, THR
   IND=0
   THR=ANORM
45 THR=THR/FLOAT(N)
50 L=1
55 M=L+1
C   COMPUTE SIN AND COS
60 MQ=(M*M-M)/2
   LQ=(L*L-L)/2
   LM=L+MQ
62 IF(ABS(A(LM))-THR)130,65,65
65 IND=1
   LL=L+LQ
   MM=M+MQ
   X=0.5*(A(LL)-A(MM))
68 Y=-A(LM)/SQRT(A(LM)*A(LM)+X*X)
   IF(X)70,75,75
70 Y=-Y
75 SINX=Y/SQRT(2.0*(1.0+(SQRT(1.0-Y*Y))))
   SINX2=SINX*SINX
78 COSX=SQRT(1.0-SINX2)
   COSX2=COSX*COSX
   SINCS=SINX*COSX
C   ROTATE L AND M COLUMNS
   ILQ=N*(L-1)
   IMQ=N*(M-1)
   DO 125 I=1,N
   IQ=(I*I-1)/2
   IF(I-L)80,115,80
80 IF(I-M)85,115,90
85 IM=I+MQ
   GO TO 95
90 IM=M+IQ
95 IF(I-L)100,105,105
100 IL=I+LQ
   GO TO 110
105 IL=L+IQ
110 X=A(IL)*COSX-A(IM)*SINX
   A(IM)=A(IL)*SINX+A(IM)*COSX
   A(IL)=X
115 IF(MV-1)120,125,120
120 ILR=ILQ+I
   IMR=IMQ+I
   X=R(ILR)*COSX-R(IMR)*SINX
   R(IMR)=R(ILR)*SINX+R(IMR)*COSX
   R(ILR)=X
125 CONTINUE
   X=2.0*A(LM)*SINCS
   Y=A(LL)*COSX2+A(MM)*SINX2-X
   X=A(LL)*SINX2+A(MM)*COSX2+X

```

```
A(LM)=(A(LL)-A(MM))*SINCS+A(LM)*(COSX2-SINX2)
A(LL)=Y
A(MM)=X
C TESTS FOR COMPLETION
C TEST FOR M= LAST COLUMN
130 IF(M-N)135,140,135
135 M=M+1
GO TO 60
C TEST FOR L= SECOND FROM LAST COLUMN
140 IF(L-(N-1))145,150,145
145 L=L+1
GO TO 55
150 IF(IND-1)160,155,160
155 IND=0
GO TO 50
C COMPARE THRESHOLD WITH FINAL NORM
160 IF(THR-ANRMX)165,165,45
C SORT EIGENVALUES AND EIGENVECTORS
165 IQ=-N
DO 185 I=1,N
IQ=IQ+N
LL=I+(I*I-1)/2
JQ=N*(I-2)
DO 185 J=1,N
JQ=JQ+N
MM=J+(J*J-1)/2
IF(A(LL)-A(MM))170,185,185
170 X=A(LL)
A(LL)=A(MM)
A(MM)=X
IF(MV-1)175,185,175
175 DO 180 K=1,N
ILR=IQ+K
IMR=JQ+K
X=R(ILR)
R(ILR)=R(IMR)
180 R(IMR)=X
185 CONTINUE
RETURN
END
```

FTN,L

FUNCTION FACT(N)  
FUNCAO FACT

IVONE MM

C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C  
C

PROPOSICAO  
DAR O FATORIAL DO NUMERO N

MODO DE USAR  
FACT(N)

DESCRICAO DO PARAMETRO  
N -NUMERO DO QUAL SE QUER O FATORIAL

COMENTARIO  
TEMOS O FATORIAL DADO EM REAL DEVIDO A MAIOR CAPACIDADE DO  
MESMO.

FACT=1.  
IF(N)30,30,20  
20 DO 10 I=1,N  
X=FLOAT(I)  
10 FACT=FACT\*X  
30 RETURN  
END

FUNCTION CCG(SS1, SM1, SS2, SM2, SS, SM)  
FUNCAO CCG

IVONE MM

## PROPOSICAO

FAZER O CALCULO DO COEFICIENTE DE CLEBSH-GORDON

## MODO DE USAR

CCG(XI, XM, XLAMB, X, XJ, XN)

## DESCRICAO DOS PARAMETROS

XI -SPIN NUCLEAR REFERENTE AO SPIN INICIAL

XM -VALORES ASSUMIDOS POR XI COM VARIACAO XI, XI-1, . . . ., -XI

XLAMB -PARAMETRO REFERENTE A INTERACAO

X -TEM VALOR XN-XM

XJ -SPIN NUCLEAR REFERENTE AO SPIN FINAL

XN -VALORES ASSUMIDOS POR XJ COM VARIACAO XJ, XJ-1, . . . ., -XJ

## FUNCAO REQUERIDA

FACT(N)

## COMENTARIOS

PARA O METODO DE CALCULO VER 'ANGULAR MOMENTUM IN QUANTUM  
MECHANICS', EDITADO POR EDMONDS, PRINCETON, NEW JERSEY,  
1957 CAPITULO 3.

FACTR=1.0

SUM=0.

IF((ABS(SM1+SM2-SM)-.001))10,100,100

10 IF(SS1-ABS(SM1)+.001)100,20,20

20 IF(SS2-ABS(SM2)+.001)100,30,30

30 IF(SS-ABS(SM)+.001)100,40,40

40 IF(SS-ABS(SS1-SS2)+.001)100,50,50

50 IF(SS-ABS(SS1+SS2)-.001)60,60,100

60 IQ=IFIX(SS1+SS2-SS+.01)

IR=IFIX(SS1-SS2+SS+.01)

IS=IFIX(-SS1+SS2+SS+.01)

IT=IFIX(SS1+SM1+.01)

IU=IFIX(SS1-SM1+.01)

IV=IFIX(SS2+SM2+.01)

IW=IFIX(SS2-SM2+.01)

IX=IFIX(SS+SM+.01)

IY=IFIX(SS-SM+.01)

IJ=IFIX(SS1+SS2+SS+1.01)

IK=IR-IU

IL=IS-IV

FACTR=(2.\*SS+1.)\*FACT(IQ)\*FACT(IR)\*FACT(IS)/FACT(IJ)

FACTR=SQRT(FACTR\*FACT(IT)\*FACT(IU)\*FACT(IV)\*

FACT(IW)\*FACT(IX)\*FACT(IY))

LIM=IQ+1

DO 200 J=1,LIM

```
IZ=J-1
IF(IU-IZ)200,65,65
65 IF(IV-IZ)200,70,70
70 IF(IK+IZ)200,75,75
75 IF(IL+IZ)200,80,80
80 PHASE=1.0
IF((2*(IZ/2))-IZ)85,90,85
85 PHASE=-1.0
90 SUM=SUM+PHASE/(FACT(IQ-IZ)*FACT(IU-IZ)*FACT(IV-IZ)*
2FACT(IZ)*FACT(IK+IZ)*FACT(IL+IZ))
200 CONTINUE
100 CCG=FACTR*SUM
RETURN
END
```

SUBROUTINE AMTR(ALFA, BETA, EI, EJ, XI, XJ, DELTE, AMPTR, XLAMB)  
 SUBROTINA AMTR

IVONE MM

## PROPOSICAO

DAR AS AMPLITUDES DE TRANSICAO PERMITIDAS E AS ENERGIAS COR-  
 RESPONDENTES, NUMA TRANSICAO NUCLEAR

## MODO DE USAR

CALL AMTR(ALFA, BETA, EI, EJ, XI, XJ, DELTE, AMPTR, XLAMB)

## DESCRICAO DOS PARAMETROS

XI -SPIN NUCLEAR INICIAL  
 XJ -SPIN NUCLEAR FINAL  
 ALFA -ARRANJO DOS AUTOVETORES REFERENTES AO SPIN INICIAL  
 BETA -ARRANJO DOS AUTOVETORES REFERENTES AO SPIN FINAL  
 EI -ARRANJO DOS AUTOVALORES REFERENTES AO SPIN INICIAL  
 EJ -ARRANJO DO AUTOVALORES REFERENTES AO SPIN FINAL  
 DELTE -ARRANJO DE ENERGIAS DADO PELA DIFERENCA DE EI E EJ  
 AMPTR -ARRANJO RESULTANTE COM AS AMPLITUDES DE TRANSICAO PER-  
 MITIDAS  
 ETA -PARAMETRO DE ASSIMETRIA  
 XLAMB -PARAMETRO DEFINIDO EM CCG

## COMENTARIO

ARRANJOS DIMENSIONADOS CONFORME TAMANHO MAXIMO DA MATRIZ CAL-  
 CULADA EM MAT

DIMENSION ALFA(150), BETA(150), EI(12), EJ(12), DELTE(80), AMPTR(80)

DIMENSAO DA MATRIZ INICIAL

M=IFIX(2.\*XI+1.)

DIMENSAO DA MATRIZ FINAL.

N=IFIX(2.\*XJ+1.)

INT=1

I1=1

K=1

K1=M

15 J1=1

L=1

L1=N

20 XM=XI+1.

A=0.

DO 25 I=K, KI

INICIO DA VARIACAO DE XM.

XM=XM-1.

XN=XJ+1.

DO 25 J=L, L1

INICIO DA VARIACAO DE XN.

XN=XN-1.

A=A+ALFA(I)\*\*2\*BETA(J)\*\*2\*CCG(XI, XI, XLAMB, XN-XI, XJ, XN)\*\*2

25 CONTINUE

C O RESULTADO A EM CADA CASO E GUARDADO NUM ARRANJO AMPTR.  
AMPTR(INT)=A

C A ENERGIA E DADA PELA DIFERENCA DOS AUTOVALORES INICIAL E FINAL.  
DELTE(INT)=EI(I1)-EJ(J1)

INT=INT+1

J1=J1+1

L=L1+1

L1=L1+N

IF(L1-N\*N)20,20,100

100 I1=I1+1

K=K1+1

K1=K1+M

IF(K1-M\*M)15,15,200

200 RETURN

END

SUBROUTINE LORNZ(AMP,POS,Y,GAMA,NPICS)  
SUBROTINA LORNZ

IVONE MM

## PROPOSICAO

TRACAR A LORENZIANA CORRESPONDENTE A TRANSICAO PROPOSTA

## MODO DE USAR

CALL LORNZ(AMP,POS,Y,GAMA,NPICS)

## DESCRICAO DOS PARAMETROS

AMP -ARRANJO CORRESPONDENTE AS AMPLITUDES DE TRANSICAO  
CALCULADAS NO AMTRPOS -ARRANJO CORRESPONDENTE AS POSICOES DAS AMP, TAMBEM  
CALCULADAS NO AMTR SOB FORMA DE DIFERENCA DE ENERGIAY -ARRANJO DE 500 PONTOS QUE FORMA A LORENZIANA PARA  
IGUAIS INTERVALOS DE X

GAMA -LARGURA DE MEIA ALTURA DA LORENZIANA A SER TRACADA

NPICS -O NUMERO DE AMPLITUDES DE TRANSICAO NAO NULAS OU SEJA  
O NUMERO DE PICOS EXISTENTES PARA FORMAR A LORENZIANA

DIMENSION AMP(20),POS(20),Y(500)

X=-2.

DO 100 I=1,500

Y(I)=0.

X=X+.008

DO 100 J=1,NPICS

Z=(X-POS(J))\*\*2

Q=Z\*(4./GAMA\*\*2)

100 Y(I)=Y(I)+AMP(J)/(1.+Q)

RETURN

END



## R E F E R Ê N C I A S

1. G.K. Wertheim, Mössbauer Effect, Principles and Applications (Academic Press Inc., New York, 1964).
2. H. Frauenfelder, The Mössbauer Effect (W.A. Benjamin, Inc., New York, 1962).
3. M.H. Cohen, Phys.Rev. 96, 1278 (1954).
4. M. Pasternak, A. Simopoulos and Y. Hazony, Phys.Rev. 140, A1892 (1965).
5. R.V. Pound, Phys.Rev. 79, 685 (1950).
6. Gilbert R. Hoy and Subhas Chandra, J.Chem.Phys 47, 961 (1967).
7. M. Pasternak and T. Sonnino, J.Chem.Phys. 48, 1997 (1968).
8. Walter Kündig, Nucl.Instr.Methods 48, 219 (1967).
9. J.R. Gabriel and S.L. Ruby, Nucl.Instr.Methods 36, 23 (1965).
10. M.I. de Costa Jr., P.de R.Andrade and P.J.Viccaro, Rev.Bras. Fis. 1, 337 (1971).
11. M. Pasternak and S. Bukshpan, Phys.Rev. 163, 297 (1967).
12. E. Gerdau, B. Scharuberg and H. Winkler, Hiperfine Interaction in Excited Nuclei, ed. Cvirol Goldring & Rafael Kalish, 3 861 (1971).
13. C.P. Slichter, Principles of Magnetic Resonance (Harper & Row, New York, 1963), cap. 6.
14. T.P. Das and E.L. Hahn, Solid State Physics, ed. P. Seitz and D. Turnbull, suppl. 1, 4 (1958).
15. M.H. Cohen and F. Reif, Solid State Physics, ed. P. Seitz and D. Turnbull, 5, 321 (1957).
16. C.P. Slichter, Principles of Magnetic Resonance (Harper & Row, New York, 1963), cap. 2.
17. A. Abragam, The Principles of Nuclear Magnetism (Oxford University Press, London, 1961), cap. 7.
18. J.D. Rogers, Collective Models (1965), cap. 7 (não publicado).
19. J.D. Jackson, Classical Electrodynamics (John Wiley, New York, 1962), cap. 6.

20. A.S. Davyдов, Quantum Mechanics (Neo Press, Michigan, 1966) s. 43.
21. A.R. Edmonds, Angular Momentum in Quantum Mechanics (Princeton New Jersey, 1957), cap. 5.
22. P.G.L. Williams and G.M. Bancroft, Mössbauer Effect Methodology ed. I.J. Gruverman, 7, 39 (1971).
23. N.N. Greenwood and T.C. Gibb, Mössbauer Spectroscopy (Chapman and Hall Ltd., London, 1971), cap. 1.
24. P.R. Bevington, Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences (McGraw-Hill Book Company, New York, 1969).
25. D.D. McCracken and W.S. Dorn, Numerical Methods and FORTRAN Programming (John Wiley and Sons, Inc., New York, 1964).
26. Hewlett-Packard Company, A Pocket Guide to HP Computers (California, 1968).
27. IBM Application Program, 1130 Scientific Subroutine Package (1968).