

## ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ ПЕРЕХОДА $3p^63d^8-3p^53d^9$ В ИОНАХ Y XIV—Mo XVII

*М. И. Богдановичене, Э. Я. Кононов, Г. В. Меркелис, А. А. Рамонас,  
А. Н. Рябцев и С. С. Чурилов*

В области 60—100 Å изучены спектры переходов  $3p^63d^8-3p^53d^9$  в ионах Y XIV—Mo XVII. Идентифицировано свыше 100 спектральных линий. Экспериментально и теоретически исследованы энергии уровней обеих конфигураций.

Важность исследования спектров многозарядных ионов Mo связана в основном с диагностикой высокотемпературной плазмы на установках типа Токамак. Молибден является одним из конструкционных материалов Токамаков, и ионы Mo входят в состав плазмы как основная тяжелая примесь. В плазме современных установок типа Токамак на различных стадиях развития плазменного шнура возбуждаются ионы от Mo XIII до Mo XXXIII [1-4]. Ионы наиболее высоких кратностей, например Mg- и Na-подобные ионы Mo XXXI и MoXXXII, существуют в горячей области плазмы, спектры этих ионов могут быть использованы для диагностики квазистационарной плазмы в установившемся разряде. На периферии плазменного шнура и в стадии его развития в Токамаке излучают ионы Mo меньшей кратности. Изучение спектров этих ионов не менее важно, поскольку это открывает возможность диагностики плазмы в те моменты, когда происходит поступление тяжелых примесей, существенно увеличивающих энергетические потери термоядерной плазмы.

На спектрограммах плазмы Токамаков в области 25—40 Å выделяются плотные группы линий, принадлежащих переходам  $3d^n-3d^{n-1}4p$ ,  $4f$  [3, 4]. Аналогичные группы можно наблюдать в спектрах вакуумной искры [3] и лазерной плазмы [4, 5]. В принципе, наблюдение этих групп позволяет удовлетворительно диагностировать присутствие соответствующих ионов в плазме. Однако детальное изучение отдельных линий в группах и структуры основной конфигурации оказывается невозможным из-за эффектов уширения и недостаточного спектрального разрешения. Исследование же спектров переходов типа  $3-3$  дает возможность определить энергии уровней конфигураций  $3s^23p^63d^n$ ,  $3s^23p^53d^{n+1}$  и  $3s3p^63d^{n+1}$ . Данная работа посвящена изучению переходов  $3p^63d^8-3p^53d^9$  в Mo XVII и изоэлектронных ионах Y XIV—Nb XVI.

Основным источником возбуждения ионов Y XIV—Mo XVII служила вакуумная искра со следующими параметрами:  $C=10$  мкФ,  $L=90$  нГн и  $U=10$  кВ. Определение принадлежности линий к спектру требуемой стадии ионизации проводилось путем изучения изменения их интенсивностей при увеличении индуктивности разрядного контура. В случае молибдена использовалось также сравнение с интенсивностями в спектре лазерной плазмы, полученном на той же установке, на которой нами проводилось изучение натриеподобных ионов Cu XIX—Br XXV [6]. Спектры регистрировались на трехметровом спектрографе скользящего падения ДФС-26, снабженном дифракционной решеткой 3600 штр/мм. Угол падения исследуемого излучения на решетку  $85^\circ$ , регистрация ве-



лась на фотопластинках типа ORWO UV-2. В случае молибдена для регистрации спектра применялся также спектрограф E-580 ( $R=2$  м,  $1152$  штр/мм,  $88^\circ$ ) и фотопластинки Ilford Q2.

Положения спектральных линий измерялись на автоматизированном компараторе-микрофотометре [7], полученная числовая информация обрабатывалась затем на ЭВМ «Напри-С» с анализом используемых стандартов длин волн и одновременной оценкой возможной ошибки измерений. В качестве стандартов использовались излучательные переходы в ионах Ti VIII—Ti XII [8], возбуждаемые в том же источнике. При обработке спектров молибдена в высоких порядках использовались также переходы Mo XI и Mo XIV, измеренные в работах [9–11]. Среднеквадратичная ошибка измерения длин волн для одиночных и не очень слабых линий оценивается в  $0.003 \text{ \AA}$  для Y XIV,  $0.005 \text{ \AA}$  для Zr XV и Mo XVII и  $0.01 \text{ \AA}$  для Nb XVI.

Отождествление спектров основывалось на теоретическом расчете энергетической структуры методом наложения конфигураций и вероятностей изучаемых переходов, определяемых в одноконфигурационном приближении Хартри—Фока—Паули в промежуточном типе связи. Учитывалось взаимодействие следующих конфигураций:  $3s^2 3p^6 3d^8$ — $3s 3p^6 3d^9$ — $3p^6 3d^{10}$ — $3s^2 3p^4 3d^{10}$ — $3s^2 3p^6 3d^7 4s$ — $3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$ ;  $3s^2 3p^5 3d^9$ — $3s 3p^5 3d^{10}$ — $3s^2 3p^6 3d^7 4p$ — $3s^2 3p^6 3d^7 4f$ — $3s^2 3p^5 3d^8 4s$ . Накладываемые конфигурации рассчитывались в обычном приближении Хартри—Фока. Межконфигурационные матричные элементы учитывались в матрице энергий одновременно с релятивистскими поправками. В процессе отождествления спектров по мере экспериментального нахождения уровней рассчитанные методом Хартри—Фока энергии уточнялись путем последовательных приближений с помощью полуэмпирических расчетов [12].

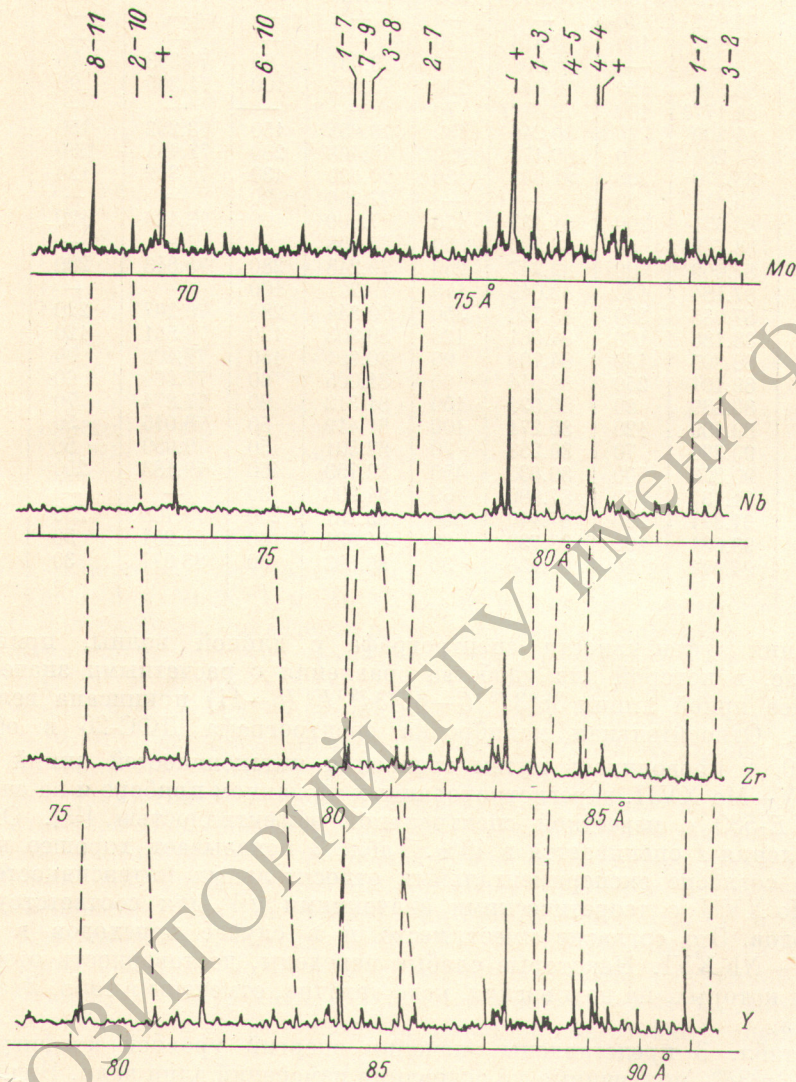
На рисунке представлены микрофотограммы спектров изученных элементов в области длин волн, соответствующей переходу  $3p^6 3d^8$ — $3p^5 3d^9$  в каждом из ионов Y XIV—Mo XVII. Крестиком отмечены линии, принадлежащие переходу  $3p^6 3d^9$ — $3p^5 3d^{10}$  в ионах Y XIII—Mo XVI, идентифицированные в работах [13, 14]. На рисунке также обозначены иденти-

Т а б л и ц а 1

Номер уровня	Обозначение	J	Состав волновой функции, %	
			Y XIV	Mo XVII
	$3p^6 3d^8$			
1	$^3F$	4	$99^3F, 11^1G$	$99^3F, 15^1G$
2	$^3F$	3	$100^3F$	$100^3F$
3	$^3F$	2	$88^3F, 45^1D, 17^3P$	$73^3F, 61^1D, 31^3P$
4	$^3P$	2	$72^3P, 55^1D, 42^3F$	$73^3P, 60^3F, 34^1D$
5	$^3P$	0	$98^3P, 20^1S$	$96^3P, 28^1S$
6	$^3P$	1	$100^3P$	$100^3P$
7	$^1D$	2	$70^1D, 67^3P, 23^3F$	$71^1D, 62^3P, 34^3F$
8	$^1G$	4	$99^1G, 11^3F$	$99^1G, 15^3F$
9	$^1S$	0	$98^1S, 20^3P$	$96^1S, 28^3P$
	$3p^5 3d^9$			
1	$^3F^0$	4	$100^3F^0$	$100^3F^0$
2	$^1D^0$	2	$87^1D^0, 40^3F^0, 30^3P^0, 5^3D^0$	$86^1D^0, 38^3F^0, 35^3P^0, 3^3D^0$
3	$^3F^0$	3	$87^3F^0, 48^3D^0, 7^1F^0$	$81^3F^0, 58^3D^0, 5^1F^0$
4	$^3D^0$	2	$68^3D^0, 57^3P^0, 46^3F^0, 5^1D^0$	$71^3D^0, 56^3P^0, 42^3F^0, 2^1D^0$
5	$^3P^0$	1	$92^3P^0, 38^3D^0, 9^1P^0$	$93^3P^0, 34^3D^0, 13^1P^0$
6	$^3P^0$	0	$100^3P^0$	$100^3P^0$
7	$^3D^0$	3	$84^3D^0, 44^3F^0, 32^1F^0$	$76^3D^0, 51^3F^0, 40^1F^0$
8	$^3D^0$	1	$83^3D^0, 50^1P^0, 29^3P^0$	$80^3D^0, 57^1P^0, 21^3P^0$
9	$^3F^0$	2	$78^3F^0, 44^1D^0, 32^3D^0, 30^3P^0$	$81^3F^0, 46^1D^0, 27^3D^0, 26^3P^0$
10	$^3P^0$	2	$71^3P^0, 66^3D^0, 22^1D^0, 13^3F^0$	$71^3P^0, 65^3D^0, 24^1D^0, 15^3F^0$
11	$^1F^0$	3	$95^1F^0, 25^3D^0, 21^3F^0$	$91^1F^0, 30^3D^0, 27^3F^0$
12	$^1P^0$	1	$86^1P^0, 43^3D^0, 26^3P^0$	$81^1P^0, 50^3D^0, 30^3P^0$



фицированные в данной работе наиболее интенсивные линии в ионах Y XIV—Mo XVII. Рисунок показывает подобие спектров и однозначность прослеживания интенсивных переходов вдоль изоэлектронной последовательности. Обозначения переходов на рисунке даны в соответствии с нумерацией уровней энергии, приведенной в табл. 1. Табл. 1 содержит также состав волновых функций уровней конфигураций  $3p^63d^8$  и  $3p^53d^9$  для Y XIV и Mo XVII, полученный из полуэмпирических



расчетов и обозначение уровней в терминах  $LS$ -связи. Обозначение уровней дано по компоненту волновой функции с наибольшим процентным содержанием. Хотя при переходе от Y XIV к Mo XVII в обеих конфигурациях заметна тенденция к ухудшению  $LS$ -связи, состоящая в уменьшении коэффициента при основной волновой функции, однако вклад лидирующего компонента нигде не становится меньше 70%, что формально оправдывает принятое обозначение уровней.

Результаты измерения длин волн, идентификация, а также интенсивности линий приведены в табл. 2. Кроме того, здесь же даны значения произведения статистического веса верхнего уровня  $g$  на вероятности переходов  $W$ , определенные методом Хартри—Фока—Паули для Mo XVII. Относительные интенсивности линий  $I$ , полученные с учетом



Таблица 2

Переход	Y X IV		Zr XV		Nb XVI		Mo XVII		
	$\lambda, \text{Å}$	$I$	$\lambda, \text{Å}$	$I$	$\lambda, \text{Å}$	$I$	$\lambda, \text{Å}$	$I$	$\frac{gW}{10^{10} \text{ c}^{-1}}$
7—12	78.396	90	74.402	90	70.475	80	67.304	100	70
8—11	79.338	400	75.391	400	71.851	400	68.393	400	412
2—10	80.713	160	76.510	200	72.735	140	69.093	140	86
3—10	81.031	70	—	—	—	—	—	—	12
3—9	82.962	160	78.476	70	—	—	—	—	21
4—10	—	—	78.001	70	73.457	60	70.393	70	33
6—10	83.398	150	79.044	130	75.102	100	71.365	90	66
9—12	84.177?	100	79.670?	70	—	—	—	—	40
3—8	84.209	220	80.246	180	76.655	150	73.292	150	107
1—7	84.264	350	80.176	329	76.468	280	72.995	200	190
2—7	85.370	200	81.348	180	77.699	130	74.309	120	65
4—8	85.618	50	—	—	77.966	30	—	—	6
7—9	85.671	200	81.133	170	77.000	100	73.127	120	82
5—8	86.768	50	82.693	50	78.958	70	—	—	22
2—4	87.009	300	82.247	250	79.248	280	75.843	200	111
4—7	87.184	120	83.049	170	79.291	100	—	—	34
1—3	87.985	350	83.726	350	79.844	280	76.267	220	97
4—5	88.186	100	84.061	120	80.303	120	76.861	120	49
4—4	88.895	120	84.709	90	80.901	150	77.408	90	45
8—7	89.191	250	84.914	60	81.005	60	77.664	60	26
6—6	89.289	80	85.031	150	81.312	90	77.874	70	33
6—5	89.409	120	85.271	100	81.419	50	78.015	50	31
7—4	90.390	70	86.258	70	82.501	50	79.059	50	21
1—1	90.873	500	86.630	450	82.753	450	79.183	250	119
2—1	91.137	70	87.996	50	84.206	30	—	—	8
3—2	91.371	250	87.149	250	83.281	200	79.706	200	73
4—2	93.031	100	88.738	60	84.831	60	81.251	50	24
7—2	94.674	50	90.426	30	86.593	30	83.077	30	14

изменения эффективности спектрографа с длиной волны, приведены в шкале, в которой для удобства сравнения с расчетными значениями наиболее яркой линии  $Zr^6Zd^8^1G-Zr^5Zd^9^1F^0$  (8—11) приписана величина  $I=400$ . Относительная калибровка спектрографа ДФС-26 в области 70—100 Å проводилась путем сравнения интенсивностей линий ионов Mo XIV—Mo XVII, зарегистрированных на данном приборе и на спектрографе E-580 с известной спектральной эффективностью [15]. Ошибка определения  $I$  оценивается в 40%. Табл. 2 показывает хорошее качественное согласие экспериментальных относительных интенсивностей линий Mo XVII с теоретическими значениями  $gW$  для соответствующих переходов. Это согласие имеет место и в случае переходов в ионах Y XIV—Nb XVI. Некоторые слабые переходы, достоверность отождествления которых, на наш взгляд, недостаточна, отмечены в табл. 2 знаком вопроса.

В табл. 3 представлены значения энергий уровней конфигураций  $Zd^8$  и  $Zr^5Zd^9$ , полученные на основании измерений длин волн. Видно, что экспериментально найдены практически все уровни обеих конфигураций. В этой же таблице содержится сравнение с упомянутыми выше расчетами в многоконфигурационном приближении Хартри—Фока ( $E_{X-Ф}$ ), а также с расчетами, выполненными полуэмпирическим методом ( $E_{п-э}$ ). Чтобы не загромождать таблицу,  $E_{X-Ф}$  приведены только для Mo XVII, поскольку соотношение экспериментальных и теоретических данных у всех ионов одинаковы. В конфигурации  $Zd^8$  с возрастанием энергии наблюдается прогрессирующее превышение экспериментальных значений; разность  $E_{X-Ф}-E$  для верхних уровней достигает  $\sim 10\,000 \text{ см}^{-1}$ . Примерно на эту же величину завышен во всех ионах общий сдвиг в  $E_{X-Ф}$  для конфигурации  $Zr^5Zd^9$ . Аналогичные результаты дает сравнение с расчетами методом модельного потенциала [16]. Конфигурация  $Zd^8$  полуэмпирически была описана с помощью пяти, а  $Zr^5Zd^9$  семи параметров. Макси-



Таблица 3

Уровень	Y XIV		Zr XV		Nb XVI		Mo XVII			
	E	E - E <sub>п-3</sub>	E	E - E <sub>п-3</sub>	E	E - E <sub>п-3</sub>	E <sub>x-ф</sub>	E	E - E <sub>п-3</sub>	
3p <sup>6</sup> 3d <sup>8</sup>										
3F {	4	0	-116	0	-119	0	2	0	0	-241
	3	15370	332	17980	261	20720	161	23872	24230	-150
	2	20200	139	22430	98	24590	315	27632	27020	511
3P {	2	39750	-389	43020	-248	46560	-134	51097	50970	-263
	0	55220	109	59260	31	62640	-567	70317	(67645)	-
	1	55250	237	59870	153	64050	-479	72178	70310	129
1D	2	58360	-352	64130	-246	70470	130	79269	77950	202
1G	4	65550	-57	69500	106	73250	-293	86079	78660	35
1S	0	145950?	86	152990?	54	(160107)	-	178593	(168803)	-
3p <sup>5</sup> 3d <sup>9</sup>										
3F <sup>0</sup>	4	1100440	-193	1154310	-163	1208420	-8	1272497	1262900	45
1D <sup>0</sup>	2	1114640	612	1169930	390	1225340	-61	1295585	1281650	104
3F <sup>0</sup>	3	1136560	-74	1194390	87	1252440	76	1324973	1311180	292
3D <sup>0</sup>	2	1164670	85	1223550	167	1282580	161	1362870	1342800	557
3P <sup>0</sup> {	1	1173720	405	1232650	254	1292050	799	1372504	1352060	785
	0	1175200	-261	1234880	-224	1293880	-739	1376024	1354430	-675
3D <sup>0</sup> {	3	1186740	-487	1247220	-308	1307740	-64	1390784	1369960	-312
	1	1207730	-379	1268600	-380	1329140	-193	1412698	1391430	-540
3F	2	1225610	-75	1296670	-142	1369170	-29	1450641	1445430	-221
3P <sup>0</sup>	2	1254320	115	1325000	99	1395540	-44	1483718	1471560	43
1F <sup>0</sup>	3	1325980	344	1395740	213	1465020	-24	1567677	1540800	-630
1P <sup>0</sup>	1	1333930	-102	1408180	6	1482340	96	1574151	1563740	437

мальное отличие  $E_{п-3}$  от эксперимента составляет  $\sim 800 \text{ см}^{-1}$ . Для некоторых уровней в Nb XVI и Mo XVII, не найденных экспериментально, в табл. 3 в скобках приведены полуэмпирические значения.

В заключение следует отметить, что идентификация переходов  $3p^6 3d^8 - 3p^5 3d^9$  в ионах Y XIV—Mo XVII была выполнена нами, опираясь исключительно на теоретические расчеты. Невозможность использовать в работе традиционный метод изоэлектронного сравнения обусловлена изученностью конфигурации  $3d^8$  только для ионов Fe I—Cu IV и полным отсутствием данных о конфигурации  $3p^5 3d^9$  для всех ионов изоэлектронной последовательности Fe I. Для изучения закономерностей в данной изоэлектронной последовательности и окончательного подтверждения нашей идентификации переходов требуется экспериментальное исследование спектров ионов в интервале между Cu IV и Y XIII.

Авторы выражают благодарность Ю. В. Сидельникову за помощь в получении спектров молибдена в малоиндуктивной вакуумной искре, Л. И. Иванову за результаты [16] до опубликования и И. С. Абрамону, И. И. Засавицкому и Л. В. Липису за помощь в подготовке эксперимента.

#### Литература

- [1] TFR-Group. Phys. Rev. Lett., 36, 1306, 1976.
- [2] E. Hinno. Phys. Rev., 14A, 1533, 1976.
- [3] J. L. Schwob, M. Klapisch, M. Finkenthal, N. Schweitzer and TFR-Group. Phys. Lett., 62A, 85, 1977.
- [4] M. W. D. Mansfield, N. J. Peacock, C. C. Smith, M. G. Hobby, R. D. Cowan. J. Phys. B, 11, 1521, 1978.
- [5] E. Ya. Кононов. Phys. Scr., 17, 425, 1978.
- [6] E. Ya. Кононов, A. N. Ryabtsev, S. S. Churilov. Phys. Scr., 19, 328, 1979.
- [7] В. И. Ковалев, Э. Я. Кононов. ПТЭ, 3, 244, 1977.
- [8] L. A. Svensson, J. O. Ekberg. Ark. Fys., 40, 145, 1969.
- [9] K. Rahimullah, M. S. Z. Chaghtai, S. Khatoon. Phys. Scr., 14, 221, 1976.



- [10] K. Rahimullah, M. S. Z. Chaghtai, S. Khatoon. *Phys. Scr.*, 18, 96, 1978.
- [11] J. Reader, G. Luther, N. Acquista. *J. Opt. Soc. Amer.*, 69, 144, 1979.
- [12] А. А. Рамонас, О. Ю. Януконене. Программа для расчета энергетического спектра многоэлектронного атома полумпирическим способом. ГФАП, № П000981, 1974.
- [13] B. Edlén. *Physica*, 13, 545, 1947.
- [14] E. Alexander, M. Even-Zohar, B. S. Frankel, S. Goldsmith. *J. Opt. Soc. Amer.*, 61, 508, 1971.
- [15] Е. Я. Кононов, А. Н. Рыabtsev, У. И. Сафрoнoвa, С. С. Чурilov. *J. Phys.*, B., 9, L477, 1976.
- [16] M. N. Driker, L. N. Ivanov. *J. Phys.* B., 11, 1695, 1978.

Поступило в Редакцию 19 сентября 1979 г.

---

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. Скоринны