

УДК 535.33 : 546.711.54-128

СПЕКТР MnVI В ОБЛАСТИ 140—220 Å

А. Н. Рябцев

С помощью вакуумного спектрографа скользящего падения излучения с решеткой радиуса 3 м (3600 штр/мм) изучен спектр Mn VI, возбуждаемого в трехэлектродной вакуумной искре. Классифицирована 151 линия переходов в основную конфигурацию $3d^2$ из конфигураций $3dnf$ ($n=4-8$), $3d5p$ и $3p^53d^3$. Из серии $3dnf$ ($n=6-8$) определен потенциал ионизации Mn VI — $772\,250 \pm 150$ см⁻¹.

Современное состояние наших знаний спектра пятикратно ионизованного марганца Mn VI отражено в [1]. Для этого иона известны основная $3d^2$ и возбужденные конфигурации $3d4s$, $3d4p$ и $3d4d$, установленные в результате исследований резонансного перехода в области 300—330 Å [2] и длинноволнового переходом (800—1550 Å) между возбужденными конфигурациями [3]. В данной работе сообщается об изучении спектра в более коротковолновой области $\lambda < 300$ Å, в результате которого идентифицированы переходы в основное состояние из возбужденных конфигураций $3dnf$ ($n=4-8$), $3d5p$ и $3p^53d^3$.

Анализ спектра MnVI выполнялся по пластинкам, полученным при исследовании Mn VII [4] с помощью вакуумного спектрографа скользящего падения излучения (угол падения 85°) с решеткой радиуса 3 м (3600 штр/мм). Источником излучения служила малоиндуктивная трехэлектродная искра с оптимальными параметрами для возбуждения MnVI ($C=10$ мкФ, $L \sim 600$ нГн, $U \sim 4$ кВ). Для разделения линий по стадиям ионизации, спектры фотографировались при уменьшении индуктивности до ~ 90 нГн и вариации напряжения в интервале 3—10 кВ. Кроме того, использовался более холодный режим ($C=7500$ мкФ, $U=220$ В). Остальные экспериментальные подробности содержатся в работе [4].

Идентификация спектра проводилась с помощью расчетов энергий уровней и вероятностей переходов методом Хартри—Фока, а также полуэмпирическим методом по программам, разработанным в [5, 6]. Длины волн классифицированных линий и их интенсивности приведены в табл. 1, а энергии, найденные из измерений длин волн уровней, в табл. 2. При измерении длин волн в качестве реперов использовались линии ионов Ti [7], Mg и Al [8, 9]. Среднеквадратичная ошибка в измерениях абсолютных значений длин волн оценивается в 0.003 Å, что соответствует ошибке энергии 15 см⁻¹ для $\lambda=140$ Å и 6 см⁻¹ для $\lambda=220$ Å. Интенсивности линий в табл. 1 получены обработкой микрофотометрических измерений почернений с помощью характеристической кривой фотопластинок без учета изменения с длиной волны пропускания спектрографа. Масштаб относительных интенсивностей выбран так, чтобы ярким линиям перехода $3d^2 - 3p^53d^3$ соответствовала интенсивность 500.

Трудность идентификации спектра MnVI в области ~ 200 Å заключается в переналожении трех взаимодействующих конфигураций $3p^53d^3$, $3d5p$ и $3d4f$. Это приводит к сильному отклонению взаимно возмущенных уровней от положений, предсказываемых расчетами в одноконфигурационном приближении. Поскольку использованный пакет программ [5, 6] не позволяет проводить

Таблица 1

Длины волн и интенсивности переходов $3d^2-3dnl$, $3p^53d^3$ в спектре Mn VI

Переход ^a	λ , Å	I	Переход ^a	λ , Å	I
1	2	3	1	2	3
3F3—8f 3G4	141.119	2	3P2—5f 3D3	168.691	160
3F2—8f 3G3	141.193	1	3P1—5f 3D1	168.740	5
3F4—8f 3G5	141.277	10 ^b	3P2—5f 1F3	168.888	20
3F3—7f 3G4	145.117	8	3P2—5f 3F3	169.551	1
3F2—7f 3G3	145.169	4	1G4—5f 1H5	170.303	220
3F2—7f 3F3	145.257	2	1G4—5f 3G5	170.910	1
3F4—7f 3G5	145.280	16	1G4—5f 3G4	170.990	1
3F2—7f 3F2	145.304	2	1G4—5f 3F4	171.348	70
3F3—7f 3F3	145.304	2	1G4—5f 1G4	171.633	120
3F4—7f 3F4	145.414	2	1D2—(2D1) 1P1	178.515	110
1G4—8f 1H5	145.452	2	3P2—(2D1) 1P1	179.572	10
1D2—7f 3D3	146.118	1	1S0—5f 1P1	180.474	40
1D2—7f 1D2	148.273	1	1D2—(2F3) 1F3	180.626	60
3P1—7f 3D2	148.476	1	1D2—(4P3) 3S1	180.817	15
3P0—7f 3D1	148.846	2	3F2—(4F3) 3D1	181.357	160
3P2—7f 3D3	148.909	2	3F2—(4F3) 3D2	181.602	80
1G4—7f 1H5	148.998	4	3P0—(4P3) 3S1	181.617	50
3F4—6f 1G4	150.324	8	3P1—(4P3) 3S1	181.708	80
3F3—6f 3G4	151.617	1	3F3—(4F3) 3D2	181.849	130
3F2—6f 3G3	151.736	35	3P2—(4P3) 3S1	181.897	120
3F4—6f 3G5	151.769	20	3F3—(4F3) 3D3	181.980	70
3F2—6f 3F3	151.899	45	3F2—(2P3) 1P1	182.048	90
3F4—6f 3G4	151.920	10	3F4—(4F3) 3D3	182.286	250
3F2—6f 3F2	151.949	20	1G4—(2F3) 1F3	184.001	350
3F3—6f 3F3	152.046	8	1D2—(4F3) 3D1	186.545	40
3F4—6f 3F4	152.093	5	1D2—(4F3) 3D2	186.805	5
1D2—6f 1F3	152.182	10	1D2—(4F3) 3D3	186.942	10
1D2—6f 3D3	154.994	2	1D2—(2P3) 1P1	187.278	90
1D2—6f 1D2	155.119	12	3P0—(4F3) 3D1	187.398	40
3P0—6f 3D1	155.317	2	3P1—(4F3) 3D1	187.495	30
3P1—6f 3D2	155.747	10	3P2—(4F3) 3D1	187.695	10
3P1—6f 3D1	155.789	20	3P1—(4F3) 3D2	187.756	130
3P2—6f 3D3	155.813	5	3P2—(4F3) 3D2	187.955	80
1G4—6f 1H5	155.914	25	3P2—(4F3) 3D3	188.097	250
1G4—6f 3F4	157.301	60	3P0—(2P3) 1P1	188.137	50
1G4—6f 1G4	157.908	2	1G4—(2H3) 1G4	188.160	450
3F2—5f 3D3	158.139	6	3P1—(2P3) 1P1	188.233	15
3F4—5f 1H5	158.139	1	3P2—(2P3) 1P1	188.438	10
3F2—5f 1F3	163.557	1	3F3—(4F3) 3F4	188.748	90
3F4—5f 1F3	163.663	5	3F2—(4F3) 3F3	188.862	60
3F3—5f 1F3	163.740	5	3F4—(4F3) 3F4	189.078	500
3F3—5f 3G4	163.939	5	3F3—(4F3) 3F3	189.129	400
3F2—5f 3G3	164.051	180	3F4—(4F3) 3F3	189.460	70
3F4—5f 1F3	164.188	2	3F2—(4F3) 3F2	189.569	100
3F4—5f 3G5	164.224	180	3F3—(4F3) 3F2	189.837	30
3F3—5f 3G3	164.249	20	3F3—5p 3F4	190.365	20
3F4—5f 3G4	164.300	30	3F2—5p 3F3	190.480	10
3F2—5f 3F3	164.365	25	1G4—(4F3) 3D3	190.565	15
3F3—5f 3F4	164.378	10	3F2—5p 3F2	190.625	150
3F2—5f 3F2	164.421	55	3F4—5p 3F4	190.700	350
3F3—5f 3F3	164.421	60	3F3—5p 3F3	190.753	250
3F4—5f 3F4	164.566	85	3F3—5p 3D3	190.890	30
3F3—5f 1G4	164.629	60	3F3—5p 3D2	191.059	120
3F4—5f 3F3	164.639	60	3F4—5p 3F3	191.091	200
3F4—5f 1G4	164.815	1	3F2—5p 3D1	191.130	70
3F4—5f 3F3	164.892	20	3F4—5p 3D3	191.227	200
1S0—6f 1P1	166.115	10	3F2—4f 3G3	192.050	350
1D2—5f 3D3	167.765	20	3F3—4f 3G4	192.101	500
1D2—5f 1F3	167.957	70	3F4—4f 3G5	192.225	450
1D2—5f 1D2	168.147	70	3F3—4f 3G3	192.327	50
1D2—5f 3G3	168.147	15	3F4—4f 3G4	192.441	80
3P1—5f 3P1	168.282	15	3F4—4f 3G3	192.675	10
3P1—5f 3P2	168.321	10	1S0—(2D1) 1P1	193.706	60
3P2—5f 3P2	168.353	15	1D2—5p 1F3	194.857	200
3P1—5f 3D2	168.515	15	1D2—(2G3) 1F3	195.802	300
3P0—5f 3D1	168.549	70			
	168.664	40			

Таблица 1 (продолжение)

Переход ^a	λ , Å	<i>I</i>	Переход ^a	λ , Å	<i>I</i>
1	2	3	1	2	3
3P2—5p 1F3	196.111	40	3F4—4f 3F4	199.297	270
1D2—(2D1) 1D2	196.531	300	3F3—4f 3F2	199.509	10
1D2—5p 1D2	196.809	150	3F4—4f 3F3	199.612	5
3P2—(2G3) 1F3	197.070	60	1G4—4f 1H5	199.768	300
3P1—5p 3F2	197.423	10	1G4—4f 3G5	201.457	5
3P2—5p 3D3	197.635	150	1G4—4f 3G3	201.949	20
3P0—5p 3D1	197.856	10	1G4—4f 1G4	202.678	60
1G4—5p 1F3	198.792	70	1S0—(4F3) 3D1	203.198	5
3F3—4f 3F4	198.933	20	1S0—(2P3) 1P1	204.067	30
3F2—4f 3F3	198.947	20	1D2—4f 3F2	205.492	2
3F2—4f 3F2	199.213	130	1S0—5p 1P1	211.870	150
3F3—4f 3F3	199.246	200			

Примечание. ^a Приняты следующие обозначения: $M_{LJ} \equiv MLJ$ для конфигурации $3d^2$; $nI M_{LJ} \equiv nI MLJ$ для конфигураций $3dnl$ и $(M'_L) M_{LJ} \equiv (M'_L v) MLJ$ для конфигурации $3p^3 3d^3$. ^b Маскирована линией Mn VIII.

Таблица 2
Уровни энергии Mn VI

Конфигурация	Терм	<i>J</i>	<i>E</i> , см ⁻¹	Конфигурация	Терм	<i>J</i>	<i>E</i> , см ⁻¹		
1	2	3	4	1	2	3	4		
3d ²	1S	0	59265	3d5f	3F	2	608193		
		2	501976			3	608407		
		3	502639			4	609095		
3d ^{4f}	1G	4	503432		3G	3	609568		
		3G	4			518905	1D	2	610051
			3			520698	3G	4	610314
4	521305		5		610595				
5	521892	3D	1		610678				
3d5p	3D		1		523203	1F	3	610723	
			2		523443		3D	2	611340
		2	524146		3			611405	
3p ⁵ 3d ³	(1D) 1D	2	524162		3P	2		612044	
		3F	2			524590	1	612161	
			3			524608	1H	5	612678
3d5p	3F		3		524985	1P		1	613361
		4	526054	3F	2			657696	
		3p ⁵ 3d ³	(3G) 1F		3		526055	1G	4
3d4f	1H				5	526092	3F		3
				3p ⁵ 3d ³	(3F) 3F	2			527514
		3d5p	1F			3		528532	3G
3p ⁵ 3d ³	(3F) 3F					3	529488	1D	
				3d5p	(3P) 1P	4	530550		
		3d5p	1P			1	531252		3D
(3P) 1P	1					549303	3D	2	
	3d5p			(4F) 3D	3	550258		3G	
		3p ⁵ 3d ³	(3F) 3D		2	550654			3D
3d5p					(3F) 3D	1	551400		
	3p ⁵ 3d ³			(3H) 1G		4	556973	1H	
		3d5p	(3P) 3S			1	568390		1P
3p ⁵ 3d ³					(3F) 1F	3	568974		
	3d5p			(1D) 1P		1	575512	3F	
		3d5f	1G			4	608125		1D
3d5f					1G	4	608125		

Конфигурация	Терм	J	E, см ⁻¹	Конфигурация	Терм	J	E, см ⁻¹
1	2	3	4	1	2	3	4
3d7f	³ F	4	689181	3d7f	¹ H	5	690741
	³ D	1	689333	3d8f	³ G	3	708250
		3	689778			4	709370
	³ G	4	689844		5	709500	
	³ D	2	689892		¹ H	5	709890
³ G	5	689995					

Примечание. Ионизационный предел 772250 ± 150 см⁻¹.

расчеты энергий уровней переналагающихся конфигураций, в переходах $3d^2-3p^53d^3$, $3d5p$, $3d4f$ отождествлены только наиболее сильные линии. Критериям правильности идентификации служили соответствие мультиплетных расщеплений термов хартри—фоковским расчетам, наличие связей данного уровня с известными уровнями основной конфигурации и качественное согласие относительных интенсивностей с расчетными значениями.

Расшифровка спектров переходов $3d^2-nf$ ($n=5-8$) оказалась легкой задачей, поскольку соответствующие группы линий практически изолированы друг от друга. Для конфигурации $3d5f$ хорошим начальным приближением явились энергии, рассчитанные диагонализацией матрицы энергии с уменьшенными на 15% электростатическими параметрами, полученными из хартри—фоковских расчетов. Более высокие конфигурации, как оказалось вполне удовлетворительно для целей идентификации описываются чисто хартри—фоковскими расчетами. В результате, в спектрах переходов $3d^2-nf$ ($n=5-8$) были отождествлены все наблюдавшиеся линии. Идентификация длинной nf -серии дала возможность определить потенциал ионизации путем экстраполяции квантового дефекта. Такая экстраполяция была проведена для уровня 1H_1 и центра тяжести терма 3G , используя конфигурации $3dnf$ с $n=6-8$. Получена следующая величина потенциала ионизации: 772250 ± 150 см⁻¹. Данное значение ионизационного предела является уточнением на ~ 4000 см⁻¹ экстраполированной величины, указанной в современных таблицах уровней энергии ионов Mn [1].

Автор выражает глубокую признательность З. Б. Рудзикасу, К. К. Ушпелису, П. О. Богдановичу, А. А. Рамонасу и З. В. Меркелису, предоставившим в его распоряжение программы расчета атомных структур, а также Д. С. Виторову за помощь при проведении этих расчетов.

Литература

- [1] C. Corliss, J. Sugar. J. Phys. Chem. Ref. Data, 6, 1253, 1977.
- [2] W. M. Cady. Phys. Rev., 43, 322, 1933.
- [3] W. H. King. J. Phys. B., 10, 3381, 1977.
- [4] А. А. Рамонас, А. Н. Рябцев. Опт. и спектр., 48, 631, 1980.
- [5] П. О. Богданович, И. И. Грудзинская. Программа численного решения уравнений Хартри—Фока. ГФАП, № П001001, 1974.
- [6] А. А. Рамонас, О. Ю. Януконене. Программа для расчета энергетического спектра многоэлектронного атома полуэмпирическим методом. ГФАП, № П000981, 1977.
- [7] L. A. Svensson, J. O. Ekberg. Arkiv Fys., 40, 145, 1969.
- [8] R. L. Kelly, L. J. Palumbo. Atomic and Ionic Emission Lines Below 2000 Å. NRL Report 7599, Washington, 1973.
- [9] V. Kaufman, B. Edlén. J. Phys. Chem. Ref. Data, 3, 825, 1974.

Поступило в Редакцию 31 октября 1980