УДК 533.9.082.5

ЭЛЕКТРОННЫЙ АТЛАС ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ В МОЛЕКУЛАХ ДЕЙТЕРИЯ И ПРОТИЯ

*В.И. Тройнов^{1,2}, А.М. Зимин¹, М.Р. Нургалиев²*¹Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия²НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Анализ излучения, связанного с электронно-колебательно-вращательными (ЭКВ) переходами в молекулах изотопов водорода, является весьма информативным при изучении процессов в пристеночной плазме токамака. Эмиссионные спектры наряду с атомными линиями представлены множеством накладывающихся друг на друга молекулярных полос, имеющих ярко выраженную вращательную структуру. Идентификация вращательных линий спектра является весьма трудоёмкой задачей, осложняющейся взаимным наложением множества колебательных полос, что требует анализа огромного количества ЭКВ-переходов. Компьютерное распознавание спектра, а также определение по нему характеристик плазмы затруднены, так как для молекул изотопов водорода отсутствуют электронные атласы излучательных переходов. Созданный авторами на базе имеющихся литературных источников и описанный в настоящей работе электронный атлас включает в себя информацию более чем о 57 электронных переходах и 7000 линиях для молекул дейтерия и 69 электронных переходах и 13 400 линиях для протия. Атлас содержит, кроме длин волн и соответствующих энергий, необходимые для расчёта константы (колебательные и вращательные квантовые числа, табличные интенсивности, тип ветви и т.д.). Атлас создан с целью его публикации в сети Интернет в качестве общедоступного электронного ресурса. Он реализован в виде Web-сайта, который будет размещён на одном из серверов организаций-разработчиков. Для того чтобы предоставить возможность использования атласа заинтересованным пользователям из других стран, все его интерфейсы выполнены англоязычными.

Ключевые слова: молекулы изотопов водорода, электронно-колебательно-вращательные переходы, электронный атлас, характеристики молекулярного излучения.

DIGITAL ATLAS OF ELECTRONIC-VIBRO-ROTATIONAL TRANSITIONS IN DEUTERIUM AND PROTIUM MOLECULES

*V.I. Troynov^{1,2}, A.M. Zimin¹, M.R. Nurgaliev²*¹Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia²NRC «Kurchatov Institute», Moscow, Russia

Analysis of radiation associated with electron-vibrational-rotational (EVR) transitions in molecules of hydrogen isotopes is very informative for studying of processes in the edge plasma of a tokamak. Emission spectra together with atomic lines are represented by a set of overlapping molecular bands having a pronounced rotational structure. The identification of the rotational lines of the spectrum is a very laborious task that is complicated by the overlapping of a multitude of vibrational bands, which requires analysis of a huge number of EVR-transitions. The computer recognition of the spectrum, as well as the using it for the determination of the characteristics of the plasma, are difficult, since for hydrogen isotope molecules there are no electronic atlases of radiative transitions. Created by the authors on the basis of available literature sources and described in this paper the digital atlas includes information on more than 57 electronic transitions and 7000 lines for deuterium molecules and 69 electronic transitions and 13 400 lines for protium. The atlas contains, in addition to wavelengths and corresponding energies, the necessary for calculating constants (vibrational and rotational quantum numbers, tabular intensities, branch type, etc.). The atlas was created to be published on the Internet as a public digital resource. It was implemented as a Web site which will be hosted on a server of one of the organizations involved in atlas development. In order to provide the possibility of using the atlas to interested users from other countries, all its interfaces are made in English.

Key words: molecules of hydrogen isotopes, electronic-vibrational-rotational transitions, electronic atlas, characteristics of molecular radiation.

DOI: 10.21517/0202-3822-2017-40-4-86-91

ВВЕДЕНИЕ

Среди процессов в пристеночной плазме токамака, определяющих её состояние, важное место занимает рециклинг изотопов водорода (протий, дейтерий). Это явление связано с поступлением в плазму атомов и молекул плазмообразующего газа, образующихся при рекомбинации ионов на поверхности стенки камеры и диафрагмы (лимитера). Отношение потока возвращающихся в плазму нейтральных частиц (атомов, молекул) к падающему характеризуется эффективным коэффициентом рециклинга. Поскольку поток частиц из плазмы может приводить также к десорбции частиц, ранее захваченных стенкой, то значение этого коэффициента иногда может превышать единицу. Неопределённость характеристик рециклинга может привести к сложностям интерпретации режимов работы токамака.

Молекулы изотопов водорода играют важную роль в балансах энергии и частиц пристеночной плазмы токамака, участвуя в реакциях возбуждения, ионизации, диссоциации и рекомбинации. Исследования, проведённые на зарубежных токамаках [1, 2], показали, что доля дейтерия в виде молекул в случаях как с диверторной, так и лимитерной конфигурацией может достигать до 90% от общего потока. Поэтому общий поток заряженных частиц, поступающих в плазму, может быть существенно недооценён при учёте лишь одного атомного компонента. При этом соотношение потоков заряженных частиц, поступающих в плазму через атомы и молекулы, сильно зависит от температуры поверхности стенки (лимитера) [1]. Показано, что при различных параметрах разряда не только существенно меняется интенсивность линий молекулярного спектра, но и его вращательно-колебательная структура также претерпевает качественные изменения. Например, вращательная температура является функцией концентрации электронов и температуры поверхности лимитера. Таким образом, анализ молекулярных спектров даёт возможность проводить оценки параметров плазмы.

ОСОБЕННОСТИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СПЕКТРОВ ПЛАЗМЫ ТОКАМАКА И ИХ РАСПОЗНАВАНИЯ

Эмиссионные спектры изотопов водорода наряду с атомными линиями серии Бальмера представлены множеством молекулярных полос, которые заполняют практически весь видимый диапазон длин волн. Полосы не имеют ярко выраженных характерных кантов, а спектры представляют собой совокупность большого количества относительно далеко отстоящих друг от друга вращательных линий, которые обусловлены электронно-колебательно-вращательными переходами в молекулах протия и дейтерия. Эта особенность напрямую связана с малыми массами ядер изотопов водорода и, как следствие, с большим разделением по энергиям колебательных и вращательных уровней различных возбуждённых электронных состояний.

Интенсивность молекулярного излучения плазмы токамака хотя и значительно ниже линейчатого атомного излучения, тем не менее достаточна для регистрации спектров, пригодных для качественного и количественного анализа. Об этом свидетельствуют спектры излучения, как полученные на зарубежных токамаках TEXTOR, DIII-D, JET и др. [1—3], так и зарегистрированные на установке T-10 [4] (рис. 1). На периферии шнура разряда в токамаке наблюдаются электронные системы полос (например, $d^3\Pi_u - a^3\Sigma_g^+$ — $a^3\Sigma_g^+$, $I^1\Pi_g - B^1\Sigma_u^+$, $G^1\Sigma_g^+ - B^1\Sigma_u^+$), характерные для низкотемпературной газоразрядной плазмы [5].

Рис. 1. Участок молекулярного спектра дейтерия с α -системой Фулхера $d^3\Pi_u - a^3\Sigma_g^+$, зарегистрированный в лимитерном сечении токамака T-10. Отмечены Q-ветви полос секвенции $\Delta v = 0$

Анализ молекулярного спектра — весьма трудоёмкая задача. Сложность распознавания спектра дейтерия заключается в большом количестве вращательных линий и возможных взаимных наложениях различных полос, принадлежащих как к одному, так и к различным электронным переходам. Ситуация ещё более усложняется при работе на смеси газов в случае наложения электронных систем от различных изотопов. Кроме того, необходимость учёта присутствия протия в локальных областях дейтериевого разряда может быть обусловлена использованием активной спектральной CXRS-диагностики [6], основанной на инжекции диагностического пучка высокоэнергетичных атомов водорода.

Идентификация вращательных линий спектра (а их число исчисляется тысячами!) требует анализа огромного количества ЭКВ-переходов в молекулах изотопов водорода, относящихся к различным электронным системам. Автоматизированное распознавание молекулярного спектра в интересующем спектральном диапазоне длин волн может быть осуществлено лишь при использовании электронного атласа излучательных переходов [7].

Однако в отличие от ситуации с распознаванием атомных линий [8] для молекул изотопов водорода отсутствуют электронные атласы излучательных переходов. Поэтому одной из важнейших задач, позволяющих автоматизировать процесс распознавания молекулярных спектров, является разработка атласа ЭКВ-переходов для дейтерия и протия, содержащего, кроме длин волн и соответствующих энергий, необходимые для расчёта константы (колебательные и вращательные квантовые числа, табличные интенсивности, тип ветви и т.п.). Эти данные о характеристиках переходов, соответствующих идентифицированным спектральным линиям, будут необходимы для проведения дальнейшего анализа с целью определения параметров плазмы токамака.

СТРУКТУРА ЭЛЕКТРОННОГО АТЛАСА

Атлас создавался с целью его публикации в сети Интернет в качестве общедоступного электронного ресурса. Он реализован в виде Web-сайта, который будет размещён на одном из серверов организаций-разработчиков. Основой электронного атласа являются две базы данных с характеристиками ЭКВ-переходов для изотопов водорода: дейтерия [9] и протия. Организация пользовательского Web-интерфейса для сетевой работы с атласом осуществлялась с помощью набора Php-скриптов, которые позволяют подключаться к созданным базам данных, формировать запросы на поиск необходимых данных в таблицах атласа и организовывать вывод результатов в текстовом виде.

Таблицы электронного атласа формировались нами в свободно распространяемой СУБД MySQL, быстрое действие и функционал которой вполне достаточны при работе с имеющимися объёмами информации. Для каждой электронной системы полос в базах данных *deuterium* и *protium* создавались соответствующие таблицы с характеристиками ЭКВ-переходов. Источниками исходных данных для создания таблиц электронного атласа послужили работы [10, 11], в которых рассматривались синглет-синглетные и триплет-триплетные переходы в молекулах дейтерия и протия. После предварительного анализа в базу данных включались только те вращательные линии, для которых имелась полная информация о принадлежности к той или иной электронной системе и характеристики соответствующих ЭКВ-переходов. Структура баз данных атласа позволяет дополнять список спектральных линий, используя, например, недавно вышедшую работу [12], а также в случае необходимости корректировать характеристики соответствующего излучательного перехода.

Созданные базы данных *deuterium* и *protium* содержат в себе информацию о квантовых характеристиках 57 электронных систем полос для молекулы дейтерия и 69 — для молекулы протия соответственно. На рис. 2 показана схема, иллюстрирующая структуру баз данных, а также связи между входящими в них таблицами.

Рис. 2. Структура таблиц баз данных

Для каждого электронного перехода в базах данных для изотопов создавалась таблица с необходимыми излучательными характеристиками. На схеме (см. рис. 2) в качестве примера показаны таблицы 2a-2c(3) и wz-2b(1), соответствующие электронным переходам $a^3\Sigma_g^+ - c^3\Pi_u$ и $WZ^1\Sigma_g^+ - B^1\Sigma_u^+$ и содержащие следующие параметры: номера спектральных линий в таблице, длины волн в вакууме, значения волновых чисел, примерные уровни интенсивностей линий в относительных единицах для различных условий эксперимента, колебательные квантовые числа v' и v'' для верхнего и нижнего состояний соответственно, вращательные квантовые числа N' и N'' , типы ветвей (P, Q или R), типы симметрии вращательных уровней (орто- и парамодификации), а также оценки погрешности определения волновых чисел соответствующего ЭКВ-перехода.

Таблица band_systems устанавливает связь между системами обозначений электронных переходов (традиционной и системой Г. Дике [10]) и названиями соответствующих им таблиц в атласе.

Для быстрого поиска спектральных линий в заданном диапазоне длин волн по всем ЭКВ-переходам предназначена отдельная таблица all_systems, включающая полные списки вращательных линий всех электронных переходов в молекулах дейтерия или протия.

ПОЛЬЗОВАТЕЛЬСКИЙ WEB-ИНТЕРФЕЙС ЭЛЕКТРОННОГО АТЛАСА

Пользовательский Web-интерфейс атласа представлен на рис. 3, который иллюстрирует порядок работы с ним. Здесь отмечены доступные для задания пользователем параметры искомых ЭКВ-переходов.

The Electronic Spectrum of the Hydrogen Isotopes

Hydrogen Isotopes: H2 Protium database was chosen

Band System: ☐ Traditional notation ☒ G.H.Dicke's notation

Select all

Lower Wavelength:

Upper Wavelength:

Units: nm

☒ Vacuum (all wavelengths) ☐ Air (all wavelengths)

Vibration transition: ☒ All ☐ Sequence - ☐ $v'-v''$ -

Rotational transition: All

Output options

Wavelength: ☒ Air ☐ Vacuum ☒ Wavenumber

Transition information: ☒ $v'-v''$ ☒ Branch ☐ $N'-N''$
☒ Intensity ☒ N'' ☐ Sym

Band notation: ☒ Traditional ☐ G.H.Dicke

Рис. 3. Web-интерфейс для работы с атласом

Перед началом работы в меню Hydrogen Isotopes пользователь должен выбрать интересующий изотоп водорода: протий или дейтерий. Далее необходимо указать, с какой из двух упомянутых ранее систем обозначений электронных переходов ему удобнее работать. После этого происходит автоматическая перезагрузка страницы, в раскрывающихся списках формируется перечень возможных электронных переходов. Пользователь может выбрать одновременно до трёх переходов, в рамках которых будет осуществляться поиск вращательных линий. Далее в соответствующих разделах Web-формы необходимо указать, какие значения длин волн необходимы (в вакууме или воздухе), и их единицы измерения (нанометры или ангстремы).

Следующим этапом работы с атласом является выбор колебательных и вращательных переходов. В указанном диапазоне длин волн предусмотрена селекция по колебательным переходам, включающая в себя три режима поиска: по всем колебательным переходам, по отдельным секвенциям (указываются Δv) и по конкретному переходу (указываются значения v' и v''). Также пользователь может ограничиться только интересующей его ветвью (P, Q или R) либо выбрать режим поиска по всем вращательным переходам.

В разделе Output options, отображённом в нижней части Web-формы, находится перечень характеристик переходов, который определяет формат генерируемой таблицы результатов поиска. В соответствующих подразделах пользователь может выбрать следующую информацию об ЭКВ-переходе: длину волны (в вакууме и/или в воздухе), волновое число, относительную интенсивность, колебательные и вращательные квантовые числа для верхнего и нижнего состояний, тип симметрии вращательных уровней, тип вращательной ветви, а также принадлежность к той или иной электронной системе (в различных обозначениях).

С помощью кнопки Get Data пользователь запускает процедуру поиска линий на сервере. Если эти параметры были заданы неверно либо в атласе отсутствуют ЭКВ-переходы, удовлетворяющие условиям поиска, об этом выводится соответствующее сообщение в верхней части страницы. При наличии в атласе искомым спектральных линий выводится итоговая Web-страница результатов в табличном виде. Текстовый формат данных в таблице позволяет использовать их при идентификации вращательных линий с помощью комплекса распознавания и анализа молекулярного спектра [7]. На рис. 4 в качестве примера представлена такая таблица для случая выбора всего списка характеристик переходов, задаваемых в разделе Output options.

BandSystems	G.H.Dieke's notation	Wavenumber cm-1	Wavelength Air (nm)	Rel. Int.	Band v'-v''	Branch	N''	N'-N''	SYM
g3Sigmg(+)-c3Puu	3d-2c	16662.539	599.985	55	1 - 1	R	4	5 - 4	P
d3Puu-a3Sigmg(+)	3c-2a	16662.131	600	66	0 - 0	Q	1	1 - 1	P
g3Sigmg(+)-c3Puu	3d-2c	16661.480	600.023		0 - 0	R	9	10 - 9	O
g3Sigmg(+)-c3Puu	3d-2c	16661.301	600.03	58	1 - 1	Q	2	2 - 2	O
i3Pig(+)-c3Puu	3e(+)-2c	16656.051	600.219	26	3 - 3	Q	5	5 - 5	P
GK1Sigmg(+)-B1Sigmu(+)	GK-2B	16655.359	600.244		4 - 8	P	2	1 - 2	P
d3Puu-a3Sigmg(+)	3c-2a	16654.551	600.273	74	0 - 0	Q	2	2 - 2	O
i3Pig(-)-c3Puu	3e(-)-2c	16653.070	600.326	34	1 - 1	P	7	6 - 7	P
i3Pig(+)-c3Puu	3e(+)-2c	16650.500	600.419	43	2 - 2	P	8	7 - 8	P
I1Pig-B1Sigmu(+)	3E-2B	16649.770	600.445		3 - 11	Q	3	3 - 3	O
GK1Sigmg(+)-B1Sigmu(+)	GK-2B	16649.449	600.457		5 - 9	R	3	4 - 3	O
i3Pig(-)-c3Puu	3e(-)-2c	16648.670	600.485	52	2 - 2	P	4	3 - 4	O
i3Pig(+)-c3Puu	3e(+)-2c	16647.850	600.514	25	3 - 3	Q	4	4 - 4	O
d3Puu-a3Sigmg(+)	3c-2a	16643.189	600.683	67	0 - 0	Q	3	3 - 3	P
GK1Sigmg(+)-B1Sigmu(+)	GK-2B	16640.730	600.771	24	6 - 10	R	3	4 - 3	O
g3Sigmg(+)-c3Puu	3d-2c	16634.779	600.986	39	1 - 1	P	2	1 - 2	P
g3Sigmg(+)-c3Puu	3d-2c	16634.020	601.014	60	1 - 1	R	5	6 - 5	O

Рис. 4. Таблица результатов

Для того чтобы предоставить возможность использования атласа заинтересованным пользователям из других стран, все его интерфейсы выполнены англоязычными. Опытная эксплуатация электронного Web-ресурса совместно с упомянутой системой распознавания показала его надёжную работу как для анализа спектров дейтерия и протия, зарегистрированных по отдельности, так и для разрядов, развивающихся в смеси изотопов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Статья посвящена разработанному авторами электронному атласу электронно-колебательно-вращательных переходов в молекулах дейтерия и протия. Атлас имеет англоязычный Web-интерфейс и будет опубликован в сети Интернет в свободном доступе.

Использование атласа позволяет существенно упростить идентификацию и анализ спектров пристеночной плазмы токамака и даёт возможность заметно повысить оперативность проведения спектральных исследований.

В настоящее время электронный атлас включает в себя информацию более чем о 13 400 линиях протия в интервале длин волн от 317 до 2836 нм (69 электронных переходов), для дейтерия — более чем о 7000 линий в интервалах длин волн от 308 до 1192 нм и от 1647 до 2780 нм (57 электронных переходов).

REFERENCES

1. **Brezinsek S., Sergienko G., Pospieszczyk A. et al.** Characterization of the deuterium recycling flux in front of a graphite surface in the TEXTOR tokamak. — *Plasma Phys. Control. Fusion*, 2001, vol. 47, pp. 615—634.
2. **Hollmann E.M., Brezinsek S., Brooks N.H. et al.** Spectroscopic measurement of atomic and molecular deuterium fluxes in the DIII-D plasma edge. — *Plasma Phys. Control. Fusion*, 2006, vol. 48, pp. 1165—1180.
3. **Pospieszczyk A., Brezinsek S., Sergienko G. et al.** Molecular deuterium sources in the outer divertor of JET. — *J. of Nuclear Materials*, 2005, vol. 337—339, pp. 500—504.
4. **Zimin A.M., Krupin V.A., Troynov V.I., Klyuchnikov L.A.** Molecular radiation of T-10 tokamak near-wall plasma. — *Yadernaya fizika i inzhiniring (Nuclear Physics and Engineering)*, 2014, vol. 5, № 7—8, pp. 557—563 (in Russian).
5. **Ochkin V.N.** Spectroscopy of low-temperature plasma. — M.: Fizmatlit (PhysMathLit), 2010. 592 p. (in Russian).
6. **Klyuchnikov L.A., Krupin V.A., Korobov K.V. et al.** Capabilities of spectroscopic diagnostics CXRS in T-10 tokamak. — *VANT. Ser. Termoyadernyi sintez (Problems of Atomic Science and Technology. Ser. Thermonuclear Fusion)*, 2016, vol. 39, № 1, pp. 95—104 (in Russian).
7. **Zimin A.M., Krupin V.A., Troynov V.I., Klyuchnikov L.A.** Molecular emission in the edge plasma of T-10 tokamak. — *Physics of Atomic Nuclei*, 2015, vol. 78, № 12, pp. 1319—1325.
8. **NIST Atomic Spectra Database.** http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html.
9. **Zimin A.M., Nurgaliev M.R., Rachkov R.S. et al.** Tables of deuterium molecule electron-vibrational-rotational transitions. Certificate on state registration of data base № 2014620730. — *Rospatent*, 2014 (in Russian).
10. **Freund R.S., Schiavone J.A., Crosswhite H.M.** The electronic spectrum and energy levels of the deuterium molecule. — *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1985, vol. 14, № 1, pp. 235—383.
11. **Crosswhite H.M.** The Hydrogen Molecule Wavelength Tables of Gerhard Heinrich Dieke. — New York: Wiley-Interscience, 1972. 616 p.
12. **Lavrov B.P., Umrikhin I.S.** Atlas and wavenumber tables for the visible part of the electronic-vibro-rotational D₂ spectrum emitted by low-temperature plasma. — *J. of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2016, vol. 182, pp. 180—192.

AUTHORS

Troynov V.I. N.E.Bauman MSTU, 2-ya Baumanskaya str. 5, 105005 Moscow, Russia; NRC “Kurchatov Institute”, pl. Akademika Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russia; 3off_vlad@mail.ru

Zimin A.M. N.E.Bauman MSTU, 2-ya Baumanskaya str. 5, 105005 Moscow, Russia; zimin@power.bmstu.ru

Nurgaliev M.R. NRC “Kurchatov Institute”, pl. Akademika Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russia; maxim.nurgaliev@gmail.com

Received 5 July 2017
Problems of Atomic Science and Technology
Ser. Thermonuclear Fusion, 2017, vol.40, issue 4, pp. 86—91.