

УДК 533.9.08, 004.42

**Программный комплекс для автоматизированного распознавания и анализа  
молекулярных спектров плазмы дейтерия**

**Тройнов В.И.<sup>1</sup>, Рачков Р.С.<sup>2</sup>, Нургалиев М.Р.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Аспирант, <sup>2</sup>студенты, МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия

*Научный руководитель: Зимин А.М., д.т.н., профессор кафедры «Плазменные  
энергетические установки», МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия*

МГТУ им. Н.Э. Баумана  
[lud2002@bmstu.ru](mailto:lud2002@bmstu.ru)

Магнетронный разряд в скрещенных Е-Н полях (рис. 1) наряду с технологическими применениями для нанесения покрытий и тонких пленок используется также для исследования физики высокотемпературной среды и моделирования взаимодействия ионных потоков с обращенными к плазме компонентами термоядерного реактора и диагностическими зеркалами. При этом в качестве плазмообразующего газа используется тяжелый изотоп водорода - дейтерий.



Рис.1. Вид магнетронного разряда

Эмиссионный спектр дейтериевого разряда (рис. 2) наряду с отдельными атомными линиями серии Бальмера представлен множеством молекулярных полос с выраженной вращательной структурой, которые заполняют практически весь видимый диапазон длин волн. Эти полосы принадлежат различным электронным системам и могут накладываться друг на друга. Расшифровка такого спектра является очень трудоемкой задачей, решение которой может занимать несколько месяцев. Это осложняет анализ важнейшей информации о параметрах и свойствах плазмы.

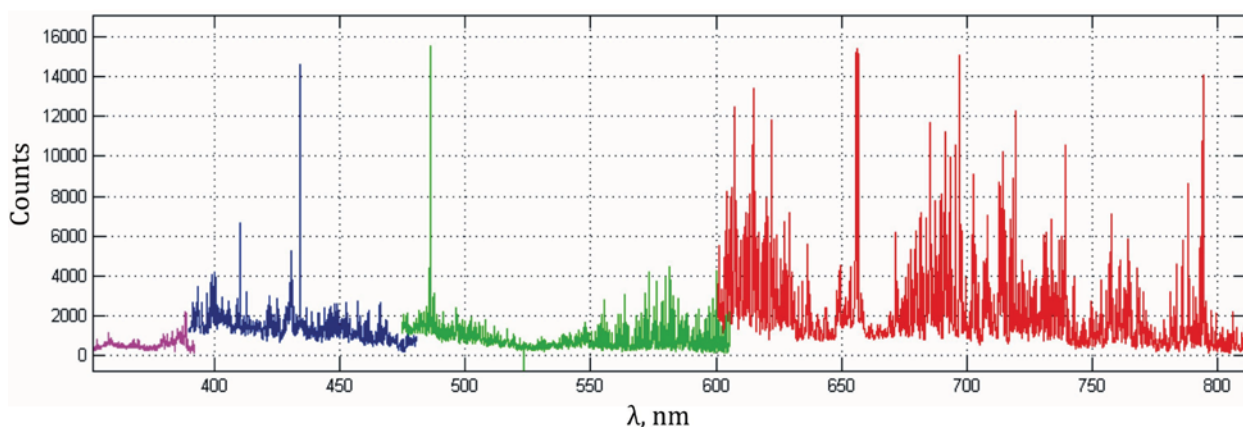


Рис. 2. Спектр магнетронного разряда

Для существенного повышения производительности обработки и интерпретации результатов исследований необходимо автоматизировать процесс распознавания спектра, что требует разработки специализированного программного комплекса. Этапами работы являлись: а) создание алгоритмов идентификации вращательных линий молекулярных полос, б) разработка базы данных электронно-колебательно-вращательных переходов молекулы дейтерия и в) создание на этой основе высокопроизводительного программного комплекса в современной вычислительной среде.

При проведении серий экспериментов по исследованию физики разряда и процессов взаимодействия плазмы с элементами конструкции перерывы на длительную обработку результатов недопустимы. Полная расшифровка спектра и определение по нему излучательных характеристик плазмы осложняются тем, что в отличие от атомных линий для дейтерия имеется очень мало информации о характеристиках излучательных переходов, имеющиеся данные разрознены, а электронные таблицы электронно-колебательно-вращательных переходов отсутствуют. Создание комплекса, позволяющего существенно повысить скорость распознавания и обработки спектра, даст возможность заметно повысить оперативность проведения исследований, их достоверность и качество полученной научной информации.

Для автоматизированного распознавания и компьютерной обработки молекулярного спектра впервые создан электронный атлас электронно-колебательно-вращательных переходов для дейтерия по данным работы [1] и разработан пакет программ идентификации и обработки результатов в среде MATLAB [2]. Таблицы электронного атласа формируются с помощью СУБД MySQL, при этом работа с атласом может производиться также через Web-интерфейс (рис 3,а). Электронный атлас включает в себя информацию более чем о 7000 линий, сгруппированных по электронным

переходам. Реализован поиск вращательных линий в заданном диапазоне длин волн как по всему атласу, так и по конкретным электронным и колебательным переходам. В результате для найденных линий выводятся длины волн, квантовые характеристики соответствующего перехода, табличная интенсивность, а также принадлежность к той или иной электронной системе, что позволяет перейти затем к качественному и количественному анализу (рис 3,б).

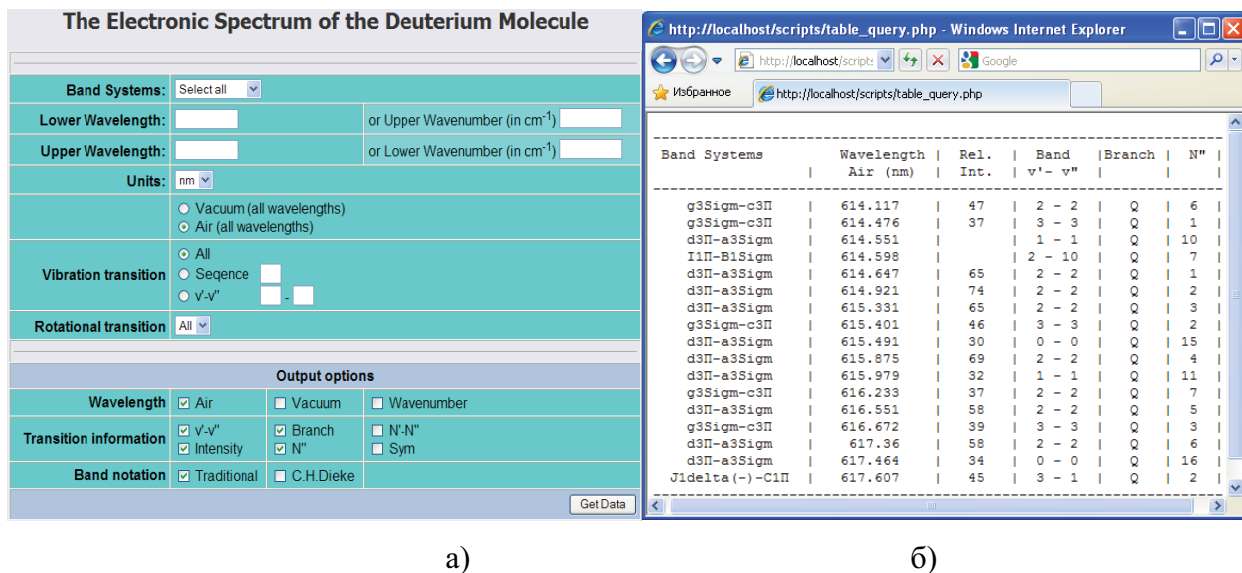


Рис.3.

Электронный атлас электронно-колебательно-вращательных переходов для дейтерия:  
а) Web-интерфейс для работы с атласом; б) таблица результатов

На первом этапе обработки из массивов значений сигналов с CCD-линейки спектрометра, используемого для регистрации излучения плазмы, формируется блок данных, содержащий информацию о длинах волн, интенсивностях излучения, насыщенности, уровне шумов и т.д.

На втором этапе осуществляется поиск пиков интенсивности, соответствующих различным атомным или молекулярным электронным переходам, и их идентификация. Для каждого найденного пика производится сравнение длины волны с имеющимися в электронном атласе значениями. Если разность значений длин волн табличной (из атласа) и найденной линии оказывается меньше величины оптического разрешения спектрометрической системы, линия считается идентифицированной, и ей ставятся в соответствие квантовые характеристики данного излучательного перехода. Если одной найденной линии соответствует несколько табличных вращательных линий (из-за наложения ветвей соседних молекулярных полос), то она исключается из дальнейшего анализа. На рис. 4 представлен интерфейс программы для распознавания спектра, где вертикальными линиями показаны табличные вращательные линии предварительно заданных электронных переходов.

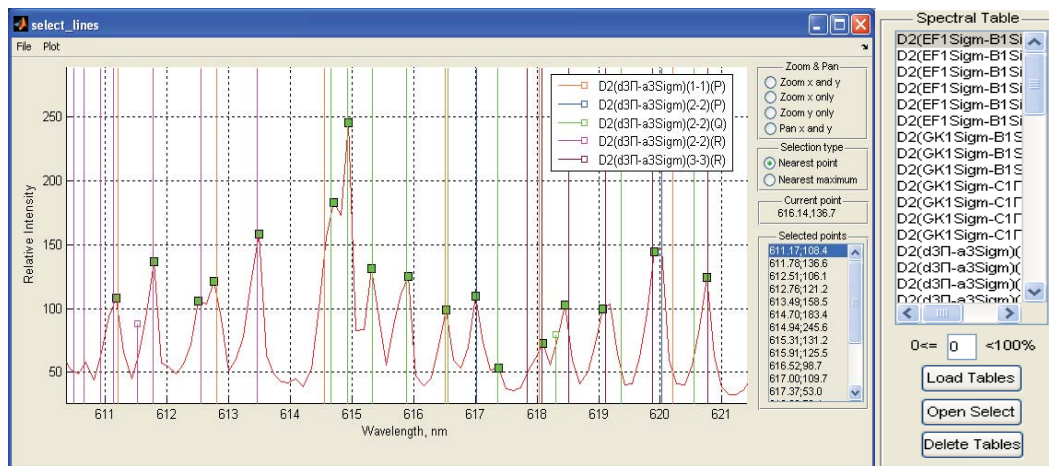


Рис.4.  
Интерфейс программы распознавания спектра

С помощью разработанного программного комплекса удалось идентифицировать в спектре магнетронного разряда полосы систем:  $d^3\Pi_u - a^3\Sigma_g^+$ ,  $EF^1\Sigma_g^+ - B^1\Sigma_u^+$ ,  $GK^1\Sigma_g^+ - B^1\Sigma_u^+$ . В ближайшее время комплекс предполагается использовать для автоматизированного распознавания молекулярного спектра плазмы токамака T-10 и определения характеристик высокотемпературной плазмы.

### Список литературы

1. 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, No. 1. P. 235-383.
2. Автоматизированная диагностика плазмы магнетронного разряда по эмиссионным атомно-молекулярным спектрам / В.М. Градов, А.М. Зимин, С.Е. Кривицкий, С.В. Серушкин, В.И. Тройнов // Прикладная физика. 2012. №3. С.44-49.