

УДК 535.41, 535.42, 681.785.574

Некоторые свойства аппаратной функции фурье-спектрометра

© 2018 г. **Б. Е. Мошкин, канд. техн. наук; А. В. Шакун, канд. физ.-мат. наук;**
Н. И. Игнатьев, канд. физ.-мат. наук

Институт космических исследований РАН, Москва

E-mail: btmoha@yandex.ru; avshakun@iki.rssi.ru

Поступила в редакцию 16.11.2017

В статье рассматривается зависимость аппаратной функции фурье-спектрометра от волнового числа, максимальной оптической разности хода, размера поля зрения и угла между осями поля зрения и интерферометра.

Ключевые слова: фурье-спектрометр, аппаратная функция, интерферометрия.

Коды OCIS: 120.6200, 300.6190, 300.6300, 300.6340.

Аппаратная функция (АФ), или инструментальный контур, является наиболее наглядной и информативной характеристикой спектрального разрешения любого спектрального прибора. АФ прибора — это отклик прибора на монохроматическое излучение, равномерно и изотропно заполняющего всё поле зрения. Ниже подробно рассмотрена зависимость АФ фурье-спектрометра от волнового числа, максимальной оптической разности хода, поля зрения и угла между осями поля зрения и интерферометра.

Предварительно следует уточнить, что «поля зрения» имеет двоякий смысл. Это, во-первых, телесный угол, стягивающий приёмник из центра объектива, если изображение источника излучения заполняет весь приёмник. Во-вторых — это телесный угол, стягивающий изображение источника излучения из центра объектива, если его изображение меньше размера приёмника. В обоих случаях источник считается изоморфным и изотропным.

Как известно [2, 3, 6], интенсивность J (в относительных единицах) потока излучения, выходящего из интерферометра, на вход которого падает монохроматическое изотропное излучение с волновым числом v , определяется разностью хода лучей в плечах интерферометра x

$$J(l, \rho) = 1 + \cos(2\pi v x). \quad (1)$$

Величина x зависит от угла ρ между падающим лучом и осью интерферометра и от оптической разности хода l

$$x = l \cos \rho \approx l(1 - (\rho^2 / 2)), \quad (2)$$

поэтому уравнение поля интерферометра, т.е. угловое распределение интенсивности J (в относительных единицах) потока излучения, выходящего из интерферометра, на вход которого падает монохроматическое изотропное излучение с волновым числом v , имеет вид

$$J(l, \rho) = \left(1 + \cos \left(2\pi v l \left(1 - \left(\rho^2 / 2 \right) \right) \right) \right), \quad (3)$$

где l — оптическая разность хода интерферометра, ρ — угол от оси интерферометра.

Это уравнение описывает интерференционные кольца, которые образуются или на экране, расположенным после интерферометра, если перед входом расположен точечный источник, или на экране после объектива, если перед интерферометром расположен протяжённый источник.

Облучённость в центре колец, т.е. при $\rho = 0$, максимальна при целом значении величины $v l$. При этом угловой радиус каждого i -го тёмного кольца определяется формулой

$$\rho_i = \sqrt{(2i - 1) / v l}. \quad (4)$$

Радиус минимального первого кольца для данного волнового числа равен

$$\rho_{\min} = \sqrt{1 / v L}, \quad (5)$$

где L — максимальная оптическая разность хода.

Уравнение (3) иллюстрирует важную особенность интерференционного поля. При равномерном изменении оптической разности хода со скоп-

ростью V частота колебаний f интенсивности в направлении ρ равна $f = Vv(1 - (\rho^2/2))$, т.е. уменьшается с удалением от центра колец.

Интерферограмма, определяемая как зависимость переменной составляющей интенсивности от оптической разности хода, равна интегралу от уравнения поля (3) по всему полю зрения. Однако для расчёта спектра обычно используется только переменная часть измеренной интенсивности, т.е. среднее значение интерферограммы принимается равным нулю. Переменная составляющая уравнения поля имеет вид

$$J_{\text{var}}(l, \rho) = \cos(2\pi v l (1 - (\rho^2 / 2))). \quad (6)$$

Предполагаем, что поле зрения — осесимметричный конус с угловым радиусом φ . Так как в конечном итоге мы должны получить аппаратную функцию, независящую от абсолютной величины интенсивности падающего на приёмник потока, пронормируем по телесному углу поля зрения $\Omega = \pi\varphi^2$ и интерферограмма будет определяться формулой

$$I(l) = (1 / \pi\varphi^2) \int_0^\varphi 2\pi\rho \cos(2\pi v l (1 - (\rho^2 / 2))) d\rho. \quad (7)$$

Используя функцию sinc (sinus cardinalis) и задавая область определения двухсторонней интерферограммы с помощью прямоугольной (rectangular) функции $\text{rect}(l, L)$, решая уравнение (7) получим окончательный вид интерферограммы

$$I(l) = \text{sinc}(v\Omega l / 2) \cos(2\pi v l - (v\Omega l / 2)) \text{rect}(l, L). \quad (8)$$

Итак, для осесимметричной оптической схемы интерферометра и приёмника с равномерной чувствительностью по поверхности интерферограмма выражается произведением трёх функций: sinc , \cos и rect .

Аппаратная функция идеального фурье-спектрометра находится путём фурье-преобразования интерферограммы (8)

$$S(v) = \text{FT}\{I(l)\} = \int_0^\infty I(l) \cos(2\pi v l) dl, \quad (9)$$

где FT — оператор фурье-преобразования.

Окончательное решение уравнения (9) имеет вид, где v_0 — волновое число излучения источника

$$S(v) = (2\pi L / v_0 \Omega) \text{rect}(vL, v_0 \Omega L / 4\pi) * \text{sinc}(2\pi(L(v - v_0) + (v_0 \Omega L / 4\pi))). \quad (10)$$

Из этой формулы видно, что если в качестве аргумента брать безразмерную величину vL , то форма аппаратной функции зависит только от одного безразмерного параметра

$$Q = v_0 \Omega L / \pi = v_0 L \varphi^2. \quad (11)$$

Заметим, что этот параметр в π раз меньше безразмерного параметра, введённого в работе [5].

При использовании параметра Q и без нормирующего множителя формула (10) принимает вид

$$S(vL) = \text{rect}(vL, Q / 4) * \text{sinc}(2\pi(L(v - v_0) + (Q / 4))). \quad (12)$$

Чтобы придать параметру Q понятный физический смысл, следует произведение $v_0 L$ заменить, используя (5), на $1/\rho_{\min}^2$. Введём телесный угол первого минимального интерференционного кольца $\omega_{\min} = \pi\rho_{\min}^2$. При этом получим более наглядное соотношение

$$Q = \Omega / \omega_{\min}, \quad (13)$$

т.е. параметр Q равен отношению телесного угла поля зрения Ω к телесному углу первого минимального интерференционного кольца ω_{\min} .

Рассмотрим формулу (12). Она представляет собой свёртку двух функций с безразмерным аргументом vL .

При $Q \ll 1$, когда приёмник вписан в минимальное кольцо, АФ обращается в $\text{sinc}(2\pi L(v_0 - v))$ с максимумом в точке Lv_0 . В этом случае расстояние между её первыми нулями равно $1/L$, а ширина на половине высоты $\Delta v = 0,6/L$. В безразмерных единицах $L(v - v_0)$ величина ширины $L\Delta v = 0,6$.

При $Q \gg 1$ приёмник захватывает несколько колец, и аппаратная функция с ростом Q превращается в прямоугольник с центром в точке $Q/4$ шириной $Q/2$.

Это иллюстрируется графиками на рис. 1, где изображены аппаратные функции, полученные математическим моделированием в соответствии с соотношением (12) и нормировочным коэффициентом из соотношения (10).

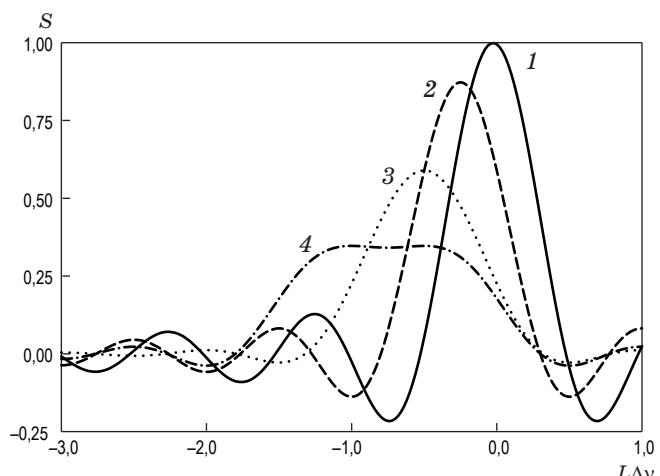


Рис. 1. Аппаратные функции в зависимости от безразмерного аргумента $L\Delta v$. Кривая 1 — $Q = 0,1$, кривая 2 — $Q = 1$, кривая 3 — $Q = 2$, кривая 4 — $Q = 3$.

Из рассмотрения этих графиков и формулы (12) можно отметить несколько очевидных особенностей поведения АФ:

1. Центр АФ смещается в сторону уменьшения волнового числа пропорционально Q .

2. С увеличением Q от 0 до 1 ширина АФ растёт незначительно, но при $Q \approx 1,5$ величина поля зрения начинает заметно сказываться, и уже при $Q > 2$ ширина аппаратной функции определяется только величиной поля зрения.

3. С увеличением Q уменьшается величина побочных максимумов. Если при $Q = 0$ их амплитуда составляет 0,22 от максимума АФ, то при $Q = 2$ снижается до 0,05. т.е. в этом случае необходимость в дополнительной аподизации снижается.

Для детального анализа этих свойств были построены аппаратные функции, более или менее равномерно расположенные в интервале $0 < Q < 2,5$, измерены их сдвиг по волновым числам и их ширина.

Из (12) следует, что величина $L\Delta\nu$, где $\Delta\nu$ — сдвиг центра АФ, равен $0,25Q$. Действительно, измеренные сдвиги оказались линейной функцией от Q с очень близким коэффициентом, что подтверждает правомочность математической модели.

На рис. 2 показана интерполированная зависимость измеренной относительной ширины m от Q . Величина m — это отношение измеренной ширины АФ $\delta\nu$ к ширине АФ при $Q = 0$

$$m = \delta\nu / (0,6 / L). \quad (14)$$

Из рис. 2 следует, что условно можно принять значение $Q = 1,5$ за некоторый граничный критерий. При $Q < 1,5$ уширение незначительно, но при $Q > 1,5$ уширение резко увеличивается.

Рассмотрим равенство, часто упоминаемое в [6] как «фундаментальное соотношение фурье-спектроскопии»

$$R\Omega = 2\pi, \quad (15)$$

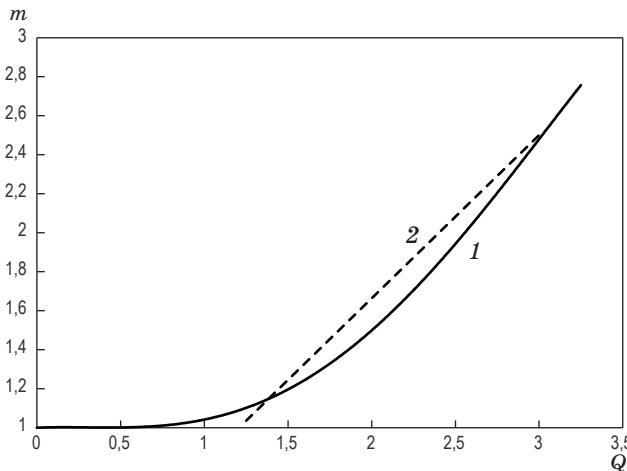


Рис. 2. Зависимость $m(Q)$. Прямая линия — значение m , рассчитанное из соотношения $R\Omega = 2\pi$.

здесь $R = v_0/\delta\nu$ — разрешающая сила, а $\delta\nu$ — спектральное разрешение.

Надо заметить, что в литературе встречаются различные определения понятия «разрешение», причём крайние из них различаются в два раза. Следует всегда и везде использовать наиболее употребительную характеристику спектрального разрешения спектрометра, а именно ширину аппаратной функции на половине высоты (стандартное обозначение Full Width at Half Maximum [1, 4]). В настоящей работе мы используем именно это определение.

Соотношение (15) следует применять с осторожностью. Для расчёта спектрального разрешения в некоторых случаях она непригодна: при $\Omega \approx 0$ (например, спектрометрия Солнца) спектральное разрешение равно $0,6/L$, а не 0, что следует из (15). Абсолютно точное равенство $R\Omega = 2\pi$ имеет место только в гипотетическом случае бесконечной интерферограммы ($L = \infty$), когда аппаратная функция (см. (12)) превращается в прямоугольник шириной $\delta\nu = v_0\Omega/2\pi$. Подставляя это значение $\delta\nu$ в (15), действительно получаем тождество.

Функцию (15) можно изобразить графически. Выразим спектральное разрешение $\delta\nu$, а затем разрешающую силу R через величину m (14)

$$\delta\nu = 0,6m / L, \quad (16)$$

$$R = v_0L / 0,6. \quad (17)$$

Учитывая (11), что $Q = v_0L\Omega/\pi$, из (15) получим

$$m = Q / 1,2. \quad (18)$$

График этой линейной функции (см. рис. 2) близок к полученной из математической модели функции $m(Q)$, но только при $Q > 1,3$.

Отсюда следует, что «фундаментальное соотношение фурье-спектроскопии» $R\Omega = 2\pi$ выполняется при $Q > 1,3$, и при этом $\delta\nu \approx v_0\Omega/2\pi$. А при $Q < 1,5$ можно принять, что $\delta\nu \approx 0,6/L$.

Расхождение осей интерферометра и поля зрения на некоторый угол γ , которое может происходить в результате разъёстрировки прибора или при ошибке наведения прибора на источник малого углового размера, всегда приводит к сдвигу АФ по шкале волновых чисел $\Delta\nu$, как правило в сторону уменьшения. Кроме того, происходит искажение формы АФ, увеличение её ширины, появление вторичных максимумов. Это хорошо видно на рис. 3, где приведены АФ при различных смещениях осей γ . Для построения графиков проводилось фурье-преобразование интерферограмм, полученных при заданных параметрах.

Получена зависимость таких характеристик АФ, как величина максимума, его сдвига по волновому числу $\Delta\nu$ и ширины $\delta\nu$ от следующих параметров прибора: величины смещения γ , волнового числа v , максимальной оптической разности хода L и углового радиуса поля зрения φ .

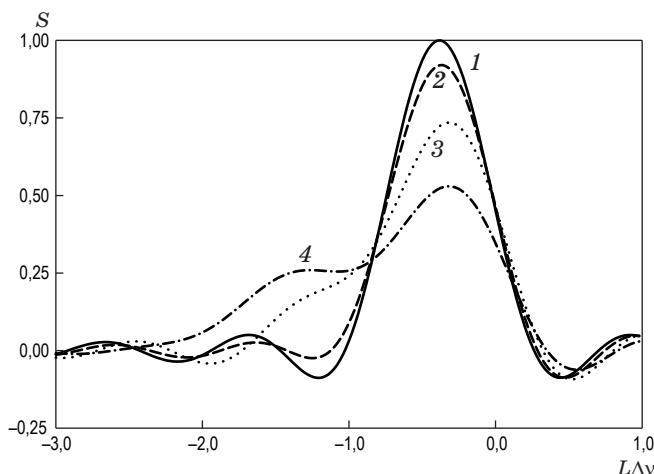


Рис. 3. Аппаратные функции, отн. ед., при безразмерном аргументе $L\Delta v$ и при $Q = 1,5$. Кривая 1 — $\gamma = 0$ мрад, кривая 2 — $\gamma = 3$ мрад, кривая 3 — $\gamma = 7$ мрад, кривая 4 — $\gamma = 12$ мрад.

Были проанализированы свыше 200 АФ при различных волновых числах (400 – 4000) см^{-1} , максимальных оптических разностях хода (1 – 20) см, радиусах поля зрения ($0,001$ – $0,05$) рад и смещении осей (0 – $0,01$) рад. Из расчётов исключались наборы этих параметров, при которых АФ заведомо сильно искажена, т.е. при $Q > 3$ и увеличении относительной ширины $m > 2,5$.

Предварительный анализ позволил выявить зависимость характеристик АФ отдельно от каждого параметра прибора при различных величинах Q и в результате выбрать в качестве аргумента искомых зависимостей комбинацию смещения γ с остальными параметрами. Выбранные комбинации должны обеспечивать наименьшее рассеяние измеренных характеристик относительно аппроксимирующих кривых.

Сдвиг АФ по волновому числу при расхождении оптической оси интерферометра и оси поля зрения на угол γ по-разному зависит от параметров прибора при больших и малых Q . При $Q < 1$ происходит монотонный сдвиг максимума Δv по шкале волновых чисел в сторону уменьшения, причём выполняется равенство

$$\Delta v = v\gamma^2/2, \quad (19)$$

что, впрочем, соответствует формуле (3).

Как было показано выше с ростом Q даже при отсутствии смещения возникает сдвиг АФ, пропорциональный Q . Однако при $Q > 1,3$ радикально изменяется и характер зависимости от смещения γ : с ростом аргумента $v\gamma^2/2$ от 0 до $(0,2$ – $0,3)$ см^{-1} безразмерное произведение $L\Delta v$ принимает значение близкое к $0,3$, даже если при $\gamma = 0$ оно было больше, и сохраняется во всём выбранном диапазоне. Здесь влияние смещение проявляется в росте вто-

ричных низкочастотных максимумов. При дальнейшем росте смещения γ искажения АФ слишком велики, основной максимум уже сливаются с высоким вторичным максимумом, при этом ширина АФ увеличена более, чем в 2,5 раза.

Таким образом, если Q не превышает единицы, то можно определять смещение γ по сдвигу максимума АФ, используя формулу (19). При $Q > 1$ зависимость АФ от γ становится слабо выраженной и неоднозначной.

Относительное увеличение ширины АФ, обозначенное, как и ранее (14), через m , аппроксимируется наглядными кривыми, если в качестве аргумента использовать произведение $g = \gamma v L\varphi$, причём характер зависимости в свою очередь зависит от параметра Q (рис. 4).

При $Q \leq 1$ искажение формы АФ незначительно, и кривая $m(g)$ не зависит от Q . При $Q > 1$ искомая зависимость в интервале $(0 < g < 1)$ описывается более пологими кривыми, т.к. уширение АФ происходит за счёт роста левого крыла и вторичных максимумов, однако при $g \approx 1,1$ высота вторичного максимума достигает половины высоты и происходит резкий скачок величины m .

По виду аргумента g можно заключить, что уширение АФ при одинаковом смещении растёт с увеличением произведения $vL\varphi = Q/\varphi$, т.е. чем больше Q , тем шире АФ и тем жёстче допуск на смещение γ .

Интегральная величина АФ по результатам измерений оказалась не зависящей от величины смещения γ при всех значениях Q , что оказалось неожиданным фактом. Более того, величина максимума АФ оказалась обратно пропорциональна ширине АФ довольно точно. Среднеквадратическое отклонение не превышает 5%.

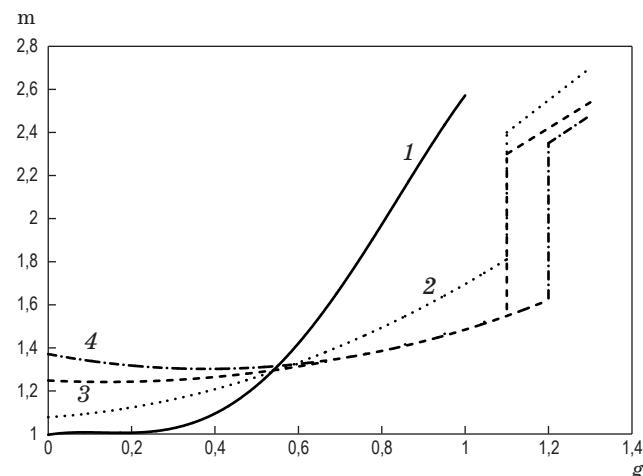


Рис. 4. Зависимость относительного уширения АФ от произведения $g = \gamma v L\varphi$ при разных значениях Q . Кривая 1 — $Q < 1$, кривая 2 — $Q = 1,3$, кривая 3 — $Q = 1,6$, кривая 4 — $Q = 1,9$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показано, что основные характеристики аппаратных функций фурье-спектрометров определяются некоторым критерием Q , равным произведению волнового числа, максимальной оптической разности хода и квадратом радиуса поля зрения. Существует предельное значение этого критерия, $Q \approx (1-1,5)$, превышение которого приводит к искажению положения, ширины и формы АФ и нарушению однозначной зависимости этих характеристик от параметров прибора. Следует заметить,

что эти выводы распространяются и на свойства изолированных спектральных линий, излучения или поглощения. В частности, однозначность зависимости смещения АФ от угловой разъюстировки прибора позволяет по положению линий в спектре определять отклонение источника излучения от оси прибора.

Мошкин Б.Е. и Шакун А.В. выражают благодарность Российскому научному фонду за финансовую поддержку данной работы (грант РНФ16-12-10453).

ЛИТЕРАТУРА

1. Морозов Ф.Н., Светличный С.И. Основы фурье-спектрорадиометрии. М.: Наука, 2014. 456 с.
2. Вагин В.А., Гершун М.А., Жижин Г.Н., Тарасов К.И. Светосильные спектральные приборы. М.: Наука, 1988. 262 с.
3. Жижин Г.Н. Инфракрасная спектроскопия высокого разрешения. М.: Мир, 1972. 352 с.
4. Chamberlain J. The principles of interferometric spectroscopy. Chichester; New York; Brisbane; Toronto: A Wiley-Interscience Publication, 1979. 346 p.
5. Мошкин Б.Е., Максименко С.В., Шакун А.В., Засова Л.В. Влияние качества юстировки фурье-спектрометра на аппаратную функцию // Оптический журнал. 2011. Т. 78. № 3. С. 43–50.
6. Белл Р.Дж. Введение в фурье-спектроскопию. М.: Мир, 1975. 380 с.