

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АППАРАТНОЙ ФУНКЦИИ И РАЗРЕШАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ ОПТИЧЕСКОГО ЦИФРОВОГО СПЕКТРОГРАФА НА БАЗЕ ПОЛИХРОМАТОРА МФС

© 2014 г. А. И. Дробышев, доктор физ.-мат. наук; С. С. Савинов, аспирант

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

E-mail: s.sergei.s@mail.ru

Приведены результаты экспериментальных исследований аппаратной функции и практической разрешающей способности цифрового спектрографа, скомпонованного на базе спектрального прибора МФС-8 и фотодиодной линейки МАЭС. Установлено, что при увеличении ширины входной щели спектрографа от 3 до 100 мкм аппаратная функция сохраняет колоколообразную форму с максимумом посередине. При этом ширина регистрируемых спектральных линий становится меньше ширины входной щели при ее увеличении более 15–30 мкм. Экспериментально установленные значения практической разрешающей способности монотонно возрастают при уменьшении ширины щели от 90 до 10 мкм, а затем остаются неизменными при 6 и 3 мкм.

*Ключевые слова:* спектрограф, фотодиодная линейка, цифровая регистрация, аппаратная функция, практическая разрешающая способность.

Коды OCIS: 120.4640, 040.1520, 070.2025

*Поступила в редакцию 15.03.2013*

### Введение

Современный этап развития спектрального приборостроения для оптической спектроскопии примечателен разработками и применением в качестве регистрирующих устройств твердотельных полупроводниковых многоканальных детекторов излучения [1], в частности, фотодиодных линеек. Эти устройства, установленные в спектрограф вместо фотографической пластинки или в полихроматор вместо выходных щелей и фотоэлектронных умножителей (ФЭУ) [2], в комплекте с компьютером и соответствующим программным обеспечением (ПО) [3] позволяют совместить достоинства фотографического способа регистрации некоторой области спектра, т.е. фотоспектрографии, и фотоэлектрического способа измерения интенсивностей спектральных линий, молекулярных полос и фонового излучения. Поскольку в спектральных приборах, модернизированных фотодиодными линейками, передача изображения спектра в память компьютера, а также его визуализация проводятся на основе цифровых технологий, то такие приборы следует называть

цифровыми спектрографами, в отличие от традиционных фотоспектрографов.

Важным достоинством цифровых спектрографов является существенное сокращение времени, необходимого для обработки спектральной информации после окончания экспозиции спектра, включая его визуализацию, а также измерение, расчет и представление данных об интенсивностях фрагментов и деталей спектра. Обычно это время составляет несколько секунд. По этой причине цифровые спектрографы нашли широкое применение на промышленных предприятиях для повышения экспрессности и увеличения производительности атомно-эмиссионного спектрального анализа различных материалов [4–7]. При этом зачастую используются ранее разработанные спектроаналитические методики, оптимизированные для фотоэлектрической с ФЭУ или для фотографической регистраций, которые регламентируют не только режим работы источников возбуждения спектра и время его экспозиции, но и весьма важный эксплуатационный параметр спектрографа, а именно, ширину его входной щели. От последней, как известно,

зависит форма и ширина аппаратной функции (АФ), а также связанная с ней практическая разрешающая способность [8, 9], которая во многом определяет возможность использования того или иного прибора для решения конкретных задач не только аналитической, но и в целом оптической спектроскопии. К сожалению, в публикациях, посвященных приборным разработкам, а также практическому применению цифровой фотодиодной регистрации [10], не уделяется должного внимания исследованию АФ цифровых спектрографов. В связи с этим авторами статьи было проведено экспериментальное исследование формы и ширины АФ, а также практической разрешающей способности цифрового спектрографа в зависимости от ширины его входной щели.

### Экспериментальная установка

Цифровой спектрограф был скомпонован на основе полихроматора фотоэлектрической установки МФС-8 (вогнутая дифракционная решетка 1800 штр/мм размером 50×50 мм с радиусом кривизны рабочей поверхности 1 м) и фотодиодной линейки МАЭС, производимой ООО “ВМК-Оптоэлектроника” (Новосибирск). Используемая в исследованиях линейка имеет фотодиодные элементы (пиксели) шириной 12,5 мкм и высотой 1 мм и позволяет регистрировать спектр в интервале длин волн 197–343 нм. Управление работой линейки и обработка спектральной информации, полученной с ее помощью, осуществляется компьютером с ПО “Атом” [3], которым комплектуется МАЭС.

Для исследования АФ и разрешающей способности спектрографа использовался маломощный дуговой разряд переменного тока (7 А) между вольфрамовыми электродами. Излучение этого источника содержит большое число спектральных линий, среди которых есть как одиночные, пригодные для исследования формы АФ и ее ширины, так и “сдвоенные” (близко расположенные друг к другу) линии, которые можно использовать для экспериментального определения практической разрешающей способности спектрального прибора при разной ширине его входной щели.

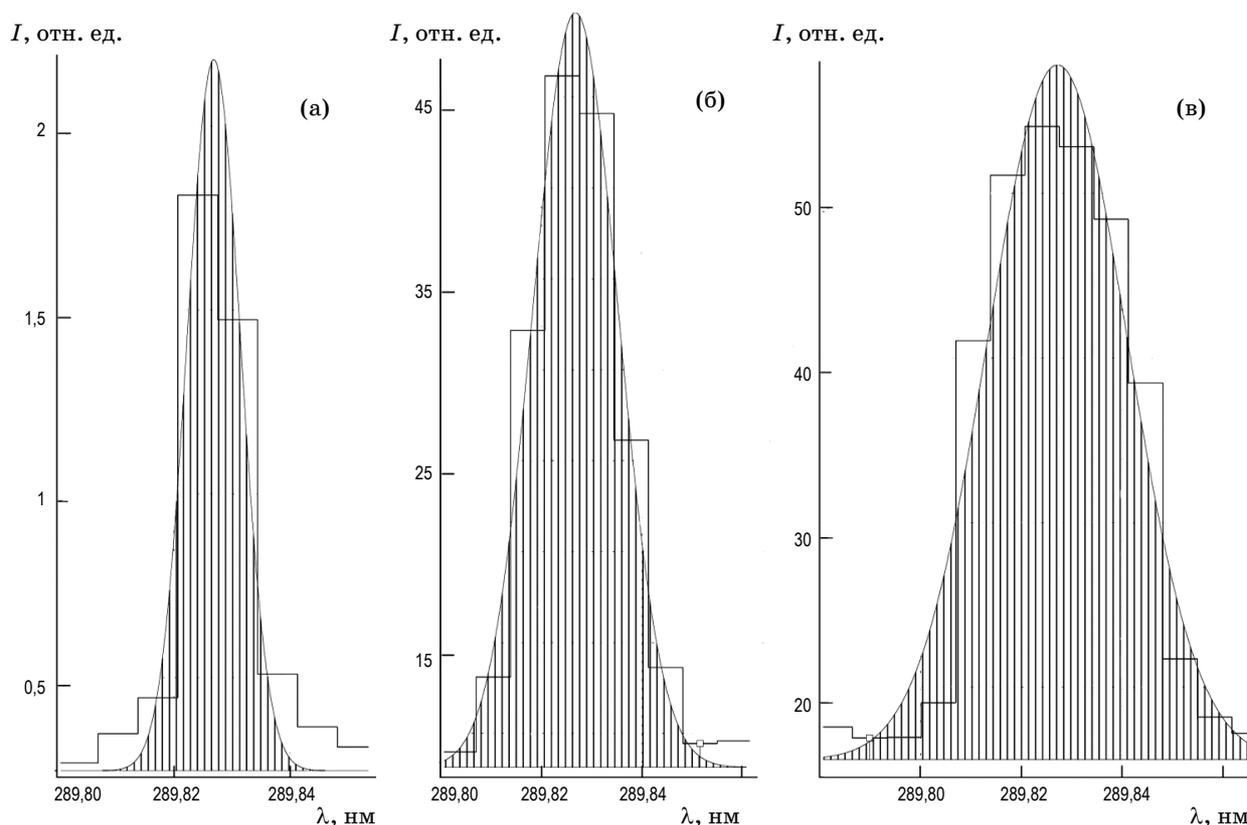
### Форма и ширина аппаратной функции

На рис. 1, для примера, приведены три контура, которые были зарегистрированы при разной ширине входной щели спектрографа, од-

ной и той же спектральной линии  $\lambda = 289,825$  нм. Контур линии аппроксимированы с помощью ПО “Атом” распределением Гаусса. Видно, что не только при небольшой ширине входной щели, равной 10 мкм, но и при более широких щелях 50 и 80 мкм (это более, чем в 8 и в 13 раз превышает нормальную ширину щели МФС) регистрируемая спектральная линия имеет колоколообразный контур с максимумом посередине. Очевидно, что такая форма АФ при большой ширине входной щели не соответствует общепринятой теоретической модели, согласно которой при увеличении ширины щели у контура спектральной линии вместо максимума должно появиться достаточно широкое плато, являющееся проявлением прямоугольного инструментального контура геометрического изображения входной щели [9, с. 78].

Кроме того, обращает на себя внимание заметное различие форм зарегистрированных и аппроксимирующих контуров при различной ширине входной щели. При малой (менее 20 мкм) ширине щели (рис. 1а) верхняя и средняя части цифрового изображения контура линии хорошо аппроксимируются функцией Гаусса, а нижняя часть имеет более широкий профиль по сравнению с ней. При большой (более 60 мкм) ширине входной щели (рис. 1в) верхняя часть реального контура шире аппроксимирующей функции, а нижняя часть – несколько уже. Что касается средней ширины (30–60 мкм) щели (рис. 1б), то аппроксимация функцией Гаусса всех частей цифрового изображения контура спектральной линии весьма хорошая, что дает основание в данном случае использовать ее для математического описания контуров линий и благодаря этому учитывать взаимные наложения соседних линий в зарегистрированном спектре при расчете их интенсивностей.

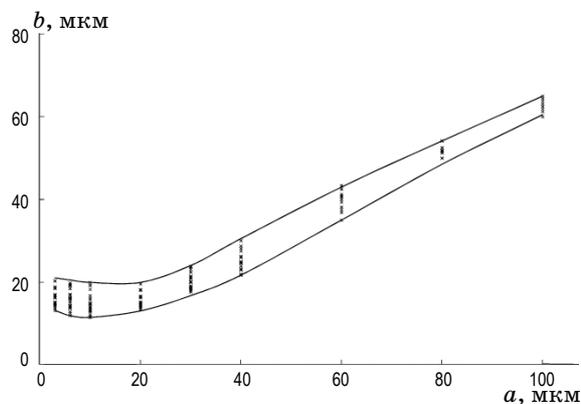
Как известно, АФ спектрографа формируется комбинацией, а математически описывается сверткой дифракционного и щелевого инструментальных контуров с учетом инструментального контура регистрирующего устройства [9, с. 80], который в рассматриваемом случае обусловлен дискретной структурой (пикселями) фотодиодной линейки. Поскольку диспергирующий элемент, параметры которого определяют ширину дифракционного контура, и размер пиксела фотодиодной линейки являются неизменными конструктивными деталями цифрового спектрографа и, следовательно, не подлежат каким-либо изменениям, то в настоящей



**Рис. 1.** Цифровые изображения спектральной линии W 289,825 нм при ширине входной щели спектрографа 10 (а), 50 (б), 80 мкм (в) и аппроксимирующие их контуры Гаусса.

работе была исследована зависимость ширины контура регистрируемой спектральной линии от ширины входной щели спектрографа.

ПО “Атом” при установке соответствующих опций позволяет не только аппроксимировать контур зарегистрированной спектральной линии распределением Гаусса, как отмечалось выше, но и проводить расчет его ширины на полувысоте. На рис. 2 приведены результаты измерения ширины контуров более 20 спектральных линий дугового спектра вольфрама по девяти значениям ширины входной щели спектрографа в интервале от 3 до 100 мкм. Отбор спектральных линий осуществлялся по признаку отсутствия наложений на них соседних линий. Погрешность измерения ширины контуров отдельных спектральных линий, как показала статистическая обработка экспериментальных данных, характеризуется относительным среднеквадратическим отклонением менее 0,05. Таким образом, наблюдаемый разброс результатов обусловлен не погрешностью измерения, а статистически достоверно различающимися значениями ширины регистри-



**Рис. 2.** Зависимость ширины  $b$  аппроксимирующих контуров Гаусса линий вольфрама в области 290–310 нм от ширины  $a$  входной щели спектрографа.

руемых спектральных линий. В связи с этим, зависимость представлена не линией, проведенной по средним значениям ширины АФ, а полосой между верхней и нижней границами интервалов вариаций значений этой ширины.

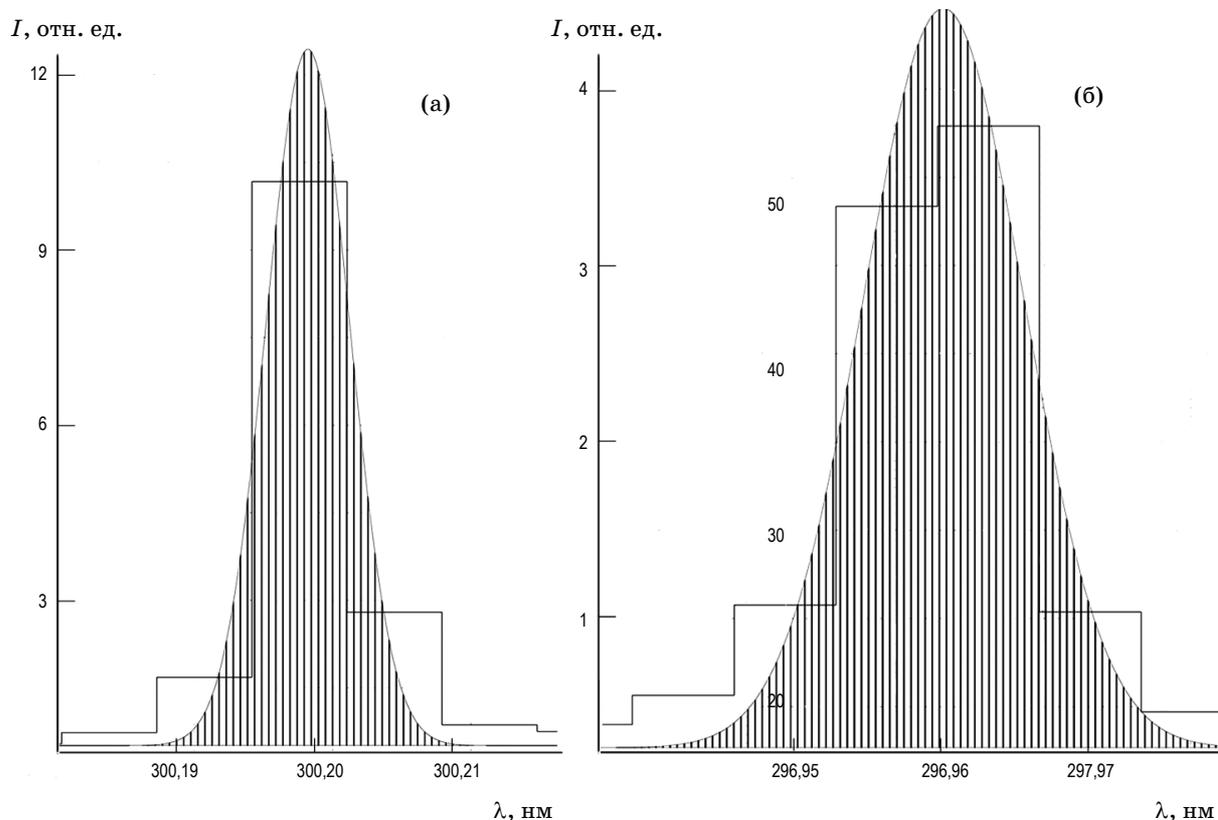
Как следует из представленной на рис. 2 зависимости, при увеличении ширины щели

более 10–20 мкм ширина контуров спектральных линий, аппроксимированных распределением Гаусса, оказывается меньше ширины щели. В соответствии с общепринятой теорией спектральных приборов такой ход рассматриваемой зависимости свидетельствует либо о когерентности регистрируемого излучения, либо о когерентном освещении входной щели спектрографа [9]. В эксперименте использовался некогерентный источник света – дуговой разряд. Поэтому единственно возможным объяснением наблюдаемой зависимости является то, что в рассматриваемом случае реализуется вариант частично когерентного освещения, поскольку коэффициент некогерентности освещения входной щели, введенный Д.С. Рождественским [11], в данном эксперименте равен 1, в то время как при когерентном – он равен нулю, а при некогерентном – бесконечности. Заметим, что возможность практической реализации частично когерентного освещения теоретически обсуждалась в целом ряде публикаций

[12–16], но не находила достаточно убедительного экспериментального подтверждения и поэтому была отвергнута в случае некогерентных источников света [8, с. 16].

Из рис. 2 следует также, что при увеличении ширины входной щели более 20 мкм зависимость приобретает вид прямолинейной полосы, которая имеет угол наклона, приблизительно равный значению  $\text{arctg } 0,6$ , т.е. чуть больше  $30^\circ$ . Таким образом, ширина контура спектральной линии, аппроксимированного функцией Гаусса, составляет около 60 % от ширины входной щели, если последняя превышает 20 мкм.

При уменьшении ширины входной щели от 20 до 3 мкм ширина контуров спектральных линий остается практически "неизменной" в одном и том же интервале ее вариаций, проявляя тенденцию к увеличению при ширине щелей 6 и 3 мкм. Причиной интервального разброса (12–20 мкм) значений ширины контуров спектральных линий является фактор дискретно-

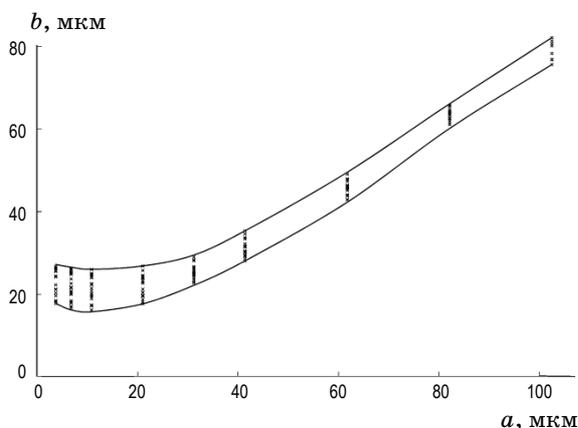


**Рис. 3.** Цифровые изображения двух спектральных линий W 300,20 (а) и W 296,96 нм (б), отличающиеся различной симметрией расположения относительно границы между пикселями фотодиодной линейки, при ширине входной щели 10 мкм.

сти по длинам волн при цифровой регистрации спектра с помощью фотодиодной линейки. Для иллюстрации сказанного, на рис. 3 приведены цифровые изображения двух спектральных линий и аппроксимирующие их контуры Гаусса при ширине входной щели 10 мкм. Одна из линий  $\lambda$  300,20 нм попала на пиксел симметрично его середине и поэтому имеет ширину контура 12 мкм, т.е. практически равную ширине пиксела. Другая линия  $\lambda$  296,96 нм попала симметрично на границу между пикселами и поэтому ширина ее аппроксимирующего контура составляет 18 мкм, т.е. в полтора раза больше. Таким образом, фактор дискретности цифровой регистрации спектра и ширина пиксела (12,5 мкм) определяют не только ход представленной на рис. 2 зависимости ширины аппроксимирующего контура, но и интервал вариации (неопределенности) его ширины.

Наряду с рассмотренной выше процедурой определения ширины спектральных линий путем аппроксимации их контура функцией Гаусса, ПО “Атом” позволяет определять ширину линии без какой-либо аппроксимирующей функции путем интерполяции экспериментальных данных о зарегистрированных световых потоках теми пикселами, которые формируют контур спектральной линии.

Измерения ширины интерполяционных контуров проводились на тех же спектральных линиях, которые использовались при аппроксимации их функцией Гаусса, а полученные результаты приведены на рис. 4. Видно, что общий ход зависимости имеет тот же характер,



**Рис. 4.** Зависимость ширины  $b$  интерполирующих контуров линий вольфрама в области 290–310 нм от ширины  $a$  входной щели спектрографа.

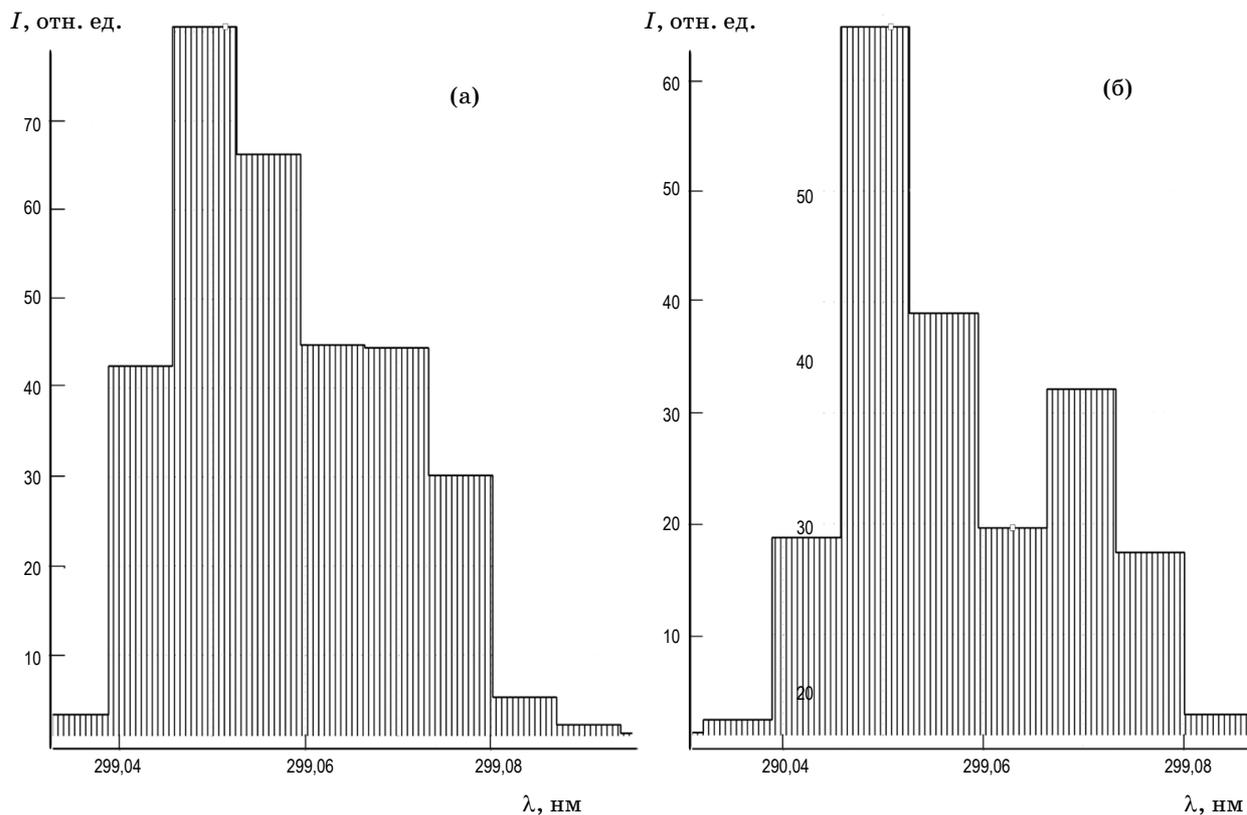
что и на рис. 2. Однако есть и отличия. Так, например, ширина АФ спектрографа становится меньше ширины входной щели при ширине входной щели более 15–30 мкм. Угол наклона прямолинейного участка зависимости при ширине входной щели более 30 мкм составляет приблизительно  $\arctg 0,8$ , т.е. около  $40^\circ$ , а верхняя и нижняя границы интервала неопределенности ширины АФ превышают те, которые получены при аппроксимации контуров спектральных линий функцией Гаусса (см. рис. 2).

Заметим, что экспериментальные данные, представленные на рис. 4, при ширине входной щели от 3 до 20 мкм хорошо согласуются с результатами работ [2, 10], в которых для цифрового спектрографа МФС–МАЭС среднее значение ширины спектральных линий, названное авторами “пределом разрешения”, в области 300 нм составило 0,012 нм, что в пересчете на ширину интерполирующего контура составляет 22 мкм.

Таким образом, проведенные исследования АФ показали, что экспериментальное определение ее ширины разными способами приводит к количественно различающимся результатам. Очевидно, что оценка и, тем более, расчет практической разрешающей способности по этим результатам будут некорректны. В связи с этим, авторами настоящей статьи была разработана методика прямого экспериментального определения практической разрешающей способности цифрового спектрографа, основанная на рекомендации в монографии [9, с. 81].

### Практическая разрешающая способность

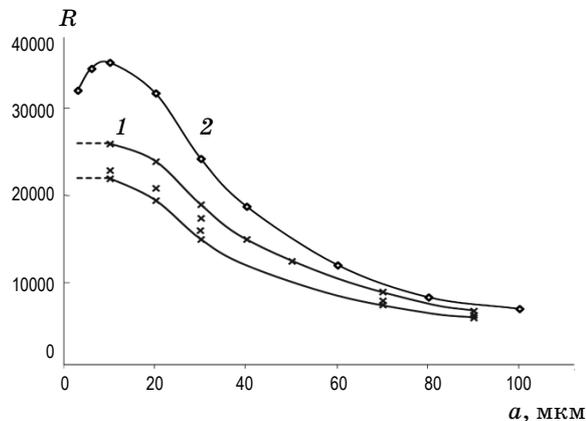
Для экспериментального определения практической разрешающей способности (ПРС) цифрового спектрографа также использовалось излучение дуги переменного тока с вольфрамовыми электродами, поскольку спектр этого источника света, как указывалось выше, отличается значительным числом “сдвоенных” спектральных линий, расположенных на близких и при этом различных расстояниях друг от друга. Для иллюстрации процедуры определения ПРС на рис. 5 приведены цифровые изображения двух накладываются друг на друга спектральных линий вольфрама  $\lambda$  299,05 и  $\lambda$  299,07 нм ( $\Delta\lambda = 0,02$  нм), которые зарегистрированы



**Рис. 5.** Иллюстрация к методике определения практической разрешающей способности цифрового спектрографа.

спектрографом при ширине входной щели 40 (рис. 5а) и 30 мкм (рис. 5б). На первой цифровой спектрограмме – спектральные линии не разрешаются, а на второй наблюдается их хорошее разрешение, которое при дальнейшем уменьшении ширины входной щели улучшается. Из этого факта следует, что реальная разрешающая способность спектрографа, определяемая формулой  $R = \lambda/\Delta\lambda$ , на длине волны 299 нм при ширине входной щели 30 мкм составляет не менее 14950.

Подобные пары спектральных линий, для которых известна разность длин волн  $\Delta\lambda$ , и которые наблюдаются раздельно с провалом интенсивности между их максимумами около 20%, использовались для определения ПРС при соответствующей ширине входной щели спектрографа. На основании полученных таким образом экспериментальных данных для 18 пар линий была построена зависимость ПРС от ширины входной щели цифрового спектрографа на базе полихроматора МФС, которая приведена на рис. 6. Здесь, как и в случае изменения ширины АФ, зависимость представлена



**Рис. 6.** Зависимость практической разрешающей способности  $R$  цифрового спектрографа МФС–МАЭС (1) и отношения длины волны спектральных линий к интерполяционной ширине их контура (2) от ширины  $a$  входной щели.

в виде полосы неопределенности между нижней и верхней границами вариаций ПРС, что связано с различным расположением изображений используемых пар линий относительно пикселей фотодиодной линейки. Отсутствие

на рис. 6 экспериментальных точек для ширины щелей 6 и 3 мкм объясняется тем, что разрешение спектральных линий при таких значениях ширины точно такое же, как при ширине щели 10 мкм, что подтверждается представленными на рис. 7 изображениями перекрывающихся контуров двух линий W 302,6672 и W 302,6788 нм. На основании практически полного совпадения цифровых изображений на рис. 7, полученных при ширине входных щелей 10, 6 и 3 мкм, границы ПРС этих значений на рис. 6 проведены пунктиром параллельно оси абсцисс.

На рис. 6, для сравнения, изображена зависимость отношения длины волны спектральных линий к ширине (в нм) их интерполяционного контура (по данным рис. 4) для верхней границы вариаций ширины АФ. Как видно, такой расчет ПРС, рекомендованный в работе [8, с. 28], дает завышенные по сравнению с экспериментальными данными значения ПРС, хотя ход зависимости имеет схожий характер за исключением интервала от 3 до 10 мкм, где проявилась тенденция увеличения ширины АФ

при уменьшении ширины входной щели спектрографа (см. рис. 2 и 4).

Необходимо отметить, что наибольшее экспериментально установленное значение ПРС цифрового спектрографа на базе МФС с фотодиодной линейкой МАЭС для длин волн вблизи 300 нм реализуется при ширине входной щели от 3 до 10 мкм и составляет 26000. Это более чем в 3 раза меньше теоретической разрешающей способности для рассматриваемого прибора, которая по критерию Рэля равна 90000.

## Заключение

Экспериментально установлено, что АФ цифрового спектрографа с фотодиодной линейкой при ширине входной щели от 3 до 100 мкм имеет колоколообразную форму с максимумом посередине. Ширина АФ при заданной ширине входной щели имеет разброс у разных спектральных линий в интервале от 6 до 11 мкм для широких и узких щелей соответственно. Этот разброс, или неопределенность, связан

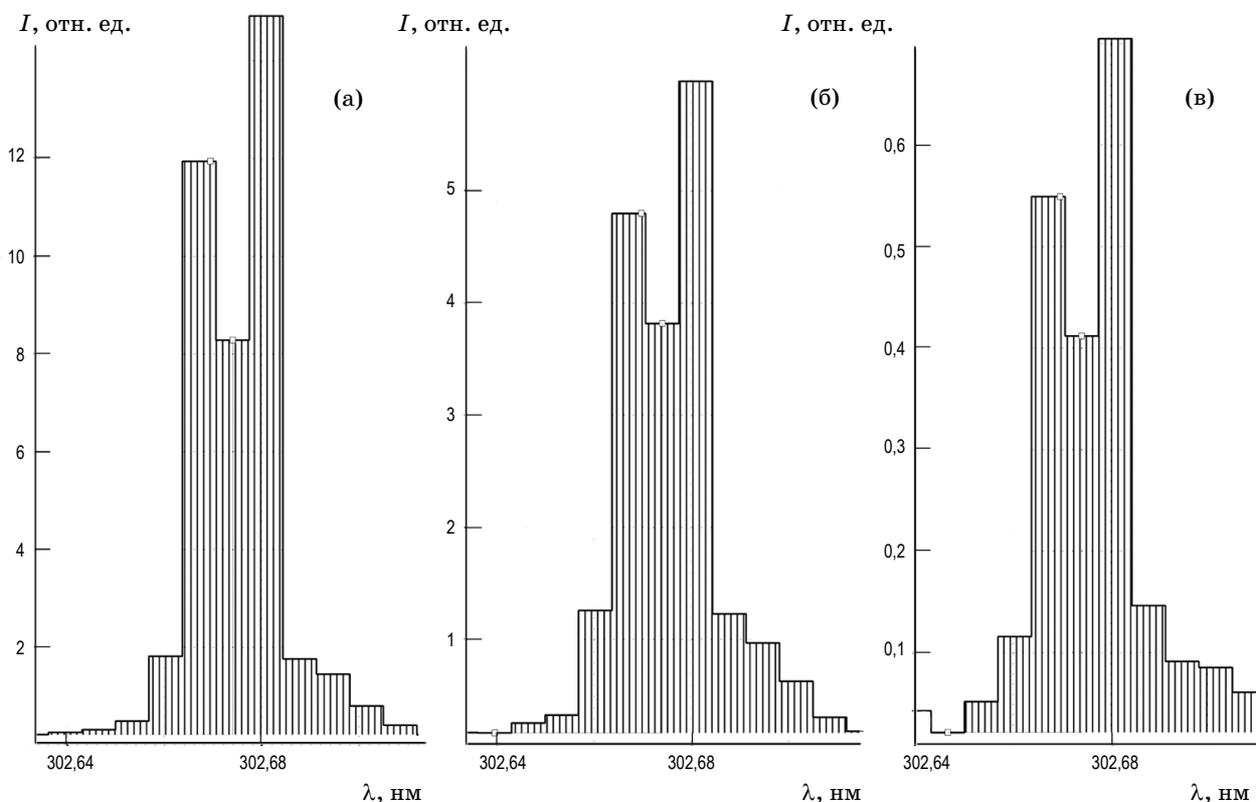


Рис. 7. Цифровые изображения перекрывающихся спектральных линий W 302,6672 и W 302,6788 нм при ширине входной щели 10 (а), 6 (б) и 3 мкм (в).

с дискретной структурой фотодиодной линейки, с конечной шириной пикселей и с различным взаиморасположением их относительно фокусируемых на них изображений разных спектральных линий.

АФ цифрового спектрографа МФС–МАЭС хорошо аппроксимируется контуром Гаусса при ширине входной щели от 30 до 60 мкм.

При ширине входных щелей менее 30 мкм АФ в верхней и в средней частях хорошо аппроксимируется функцией Гаусса, а в нижней части имеет существенно бóльшую ширину.

При ширине входной щели более 60 мкм форма АФ изменяется в направлении формирования геометрического изображения входной щели, а именно, ее верхняя часть становится шире, чем у функции Гаусса, а нижняя – уже.

Интерполяция АФ по значениям зарегистрированного потока излучения каждым из пикселей, формирующих цифровое изображе-

ние спектральной линии, дает бóльшую ширину по сравнению с аппроксимацией функцией Гаусса.

Как в случае аппроксимации функцией Гаусса, так и при интерполяционном построении контура спектральных линий ширина изображений спектральных линий при ширине входной щели более 20–30 мкм становится меньше ширины щели, что свидетельствует о частично когерентном ее освещении.

Экспериментально установленная зависимость ПРС цифрового спектрографа МФС–МАЭС от ширины входной щели в интервале от 20 до 90 мкм имеет ниспадающий характер и изменяется от наибольшего значения 26000 при ширине щели в интервале 3–10 мкм до 6000 при ширине щели 90 мкм. При фиксированных значениях ширины входной щели ПРС имеет неопределенность, которая связана, как и ширина АФ, с дискретной структурой фотодиодной линейки.

\* \* \* \* \*

## ЛИТЕРАТУРА

1. Шелпакова И.Р., Гаранин В.Г., Лабусов В.А. Многоэлементные твердотельные детекторы и их использование в атомно-эмиссионном анализе (обзор) // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 1999. Т. 65. № 10. С. 3–16.
2. Лабусов В.А., Путьмаков А.Н., Зарубин И.А., Гаранин В.Г. Новые многоканальные оптические спектрометры на основе анализаторов МАЭС // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2012. Т. 78. № 1. Часть II. С. 7–13.
3. Гаранин В.Г., Неклюдов О.А., Петроченко Д.В., Семенов З.В., Шталов И.Г., Панкратов С.В. Программное обеспечение атомно-эмиссионного спектрального анализа // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2012. Т. 78. № 1. Часть II. С. 69–74.
4. Заякина С.Б., Путьмаков А.Н., Аношин Г.Н. Модернизация дифракционного спектрографа ДФС-458: расширение возможностей атомно-эмиссионного спектрального анализа // Аналитика и контроль. 2005. Т. 9. № 2. С. 212–219.
5. Вернидуб О.Д., Ломакина Г.Е. Анализ материалов черной металлургии атомно-эмиссионным с ИСП методом с применением МАЭС // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2007. Т. 73. Спец. вып. С. 54–57.
6. Чумакова Н.Л., Смирнова Е.В. Определение лантана, церия, неодима, иттербия и иттрия в геологических пробах с использованием многоканального анализатора атомно-эмиссионных спектров // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2010. Т. 76. № 3. С. 3–8.
7. Кохановский А.Э. Применение анализатора МАЭС для идентификации марок резиновых смесей // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2012. Т. 78. № 1. Часть II. С. 98–100.
8. Пейсахсон И.В. Оптика спектральных приборов. Л.: Машиностроение, 1975. 312 с.
9. Зайдель А.Н., Островская Г.В., Островский Ю.И. Техника и практика спектроскопии. М.: Наука, 1976. 392 с.
10. Лабусов В.А., Гаранин В.Г., Шелпакова И.Р. Многоканальные анализаторы атомно-эмиссионных спектров. Современное состояние и аналитические возможности // ЖАХ. 2012. Т. 67. № 7. С. 697–707.

11. *Рождественский Д.С.* Когерентные и некогерентные лучи при образовании изображения в микроскопе // ЖЭТФ. 1940. Т. 10. С. 305–330.
12. *Нагибина И.М., Прокофьев В.К.* Спектральные приборы и техника спектроскопии / Под ред. Прокофьева В.К. М.-Л.: ГНТИМЛ, 1963. 272 с.
13. *Mielenz K.D.* Spectroscope slit images in partially coherent light // JOSA. 1967. V. 57. P. 66–75.
14. *Roseler A.* Die Apparatefunktion von Einfachmonochromatoren bei teilkoherenter Beleuchtung des Eintrittspaltes // Optik. 1968. B. 27. S. 179–191.
15. *Толмачев Ю.А.* Новые спектральные приборы. Принципы работы / Под ред. Фриша С.Э. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1976. 128 с.
16. *Пейсахсон И.В.* Расчет аппаратных функций реальных спектральных приборов при частично когерентном освещении щели // Оптический журнал. 1997. Т. 64. С. 87–89.