

Применение формулы Гартмана для градуировки призмённых спектральных приборов в широком диапазоне

Т.В. Широких

Смоленский филиал «Национального исследовательского университета «МЭИ»

Аннотация: Призмённые спектральные приборы имеют переменную по спектру дисперсию и поэтому нелинейную связь длины волны и положения спектральных линий на фокальной поверхности спектрального прибора - монохроматора, что затрудняет градуировку таких приборов по длинам волн и дисперсии.

Чаще всего для градуировки используется известная формула Гартмана. Однако точность расчета по ней удовлетворительна лишь в ограниченном спектральном интервале, в связи с чем расчет осуществляется на перекрывающихся участках не шире 200 нм с усреднением в зонах перекрытия. Усреднение дает градуировочную кривую с разрывами в местах стыков.

В настоящей работе рассматривается возможность использования единой градуировки для всей области спектра, обеспечивающей гладкие, неразрывные градуировочные кривые.

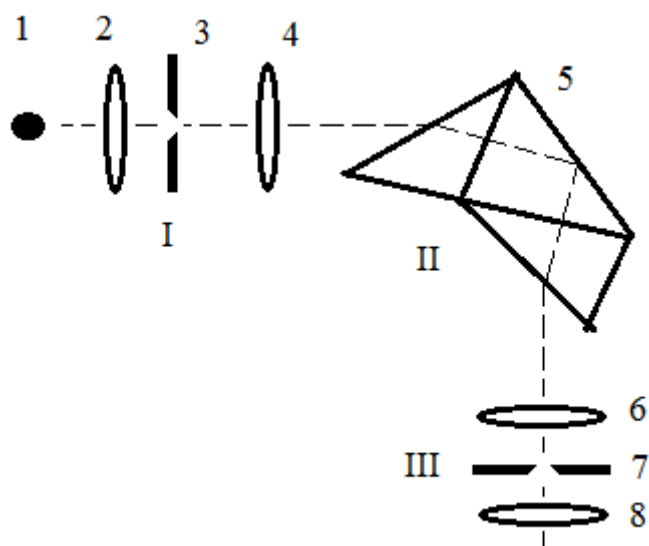
Наилучший результат получается при использовании формулы Гартмана для всего спектрального интервала, после чего определяется множество отклонений градуировочных точек. Это множество интерполируется полиномом произвольно выбираемого порядка n методом наименьших квадратов.

Ключевые слова: монохроматор, спектр, градуировка, дисперсия, формула Гартмана, интерполяция, полином.

Спектральные приборы – монохроматоры - служат для разделения лучей различных длин волн, т. е. получения оптических спектров [1,2]. Монохроматоры широко используются в спектроскопии, в частности, для идентификации химических элементов, каждый из которых имеет «свой» спектр, для анализа спектров сигналов, источников света, и т.п. [3,4].

Разложить излучение в спектр можно, используя явление взаимодействия света с веществом (селективное поглощение) либо явление интерференции или дифракции. В данной работе получение монохроматического света основано на дисперсии света – зависимости показателя преломления среды от длины волны. Этот принцип лежит в основе работы спектрального прибора – призмённого монохроматора.

Принципиальная оптическая схема монохроматора представлена на рис.1.



I – осветительная часть; II – диспергирующая часть; III – приемно–
регистрирующая часть.

Рис. 1 - Оптическая схема монохроматора

Принцип работы монохроматора заключается в следующем: свет от источника излучения 1 проходит через конденсор 2, освещает входную щель 3, расположенную в фокальной плоскости объектива коллиматора 4, полученный параллельный пучок света падает на диспергирующую призму 5. Далее лучи с различными длинами волн $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \dots$ собираются в фокальной плоскости 7 объектива 6 зрительной трубы в виде изображения щели 3. Наблюдать спектр можно через окуляр 8.

Основной характеристикой монохроматора является дисперсия [5,6].

Угловая дисперсия D_φ монохроматора - это отношение углового расстояния $\delta\varphi$ между двумя близкими монохроматическими линиями, отличающимися по длине волны на $\delta\lambda$, к величине $\delta\lambda$:

$$D_\varphi = \frac{d\varphi}{d\lambda} \quad (1)$$

Линейная дисперсия D_l - это отношение линейного расстояния δl между двумя близкими монохроматическими линиями, отличающимися по длине

волны на $\delta\lambda$, к величине δl :

$$D_l = \frac{dl}{d\lambda} \quad (2)$$

Призмные спектральные приборы имеют переменную по спектру дисперсию [7,8] и поэтому нелинейную связь длины волны и положения спектральных линий на фокальной поверхности спектрального прибора - монохроматора, что затрудняет градуировку таких приборов по длинам волн и дисперсии.

Чаще всего для градуировки используется известная формула Гартмана:

$$N(\lambda) = C + \frac{B}{\lambda - A} \quad (3)$$

Коэффициенты A , B , C определяются экспериментально по измерениям трех спектральных линий с известными длинами волн λ_1 , λ_2 , λ_3 .

Формула Гартмана дает лучшее из известных соотношений приближение к реальной зависимости. Формулу (3) можно применять и для градуировки по дисперсии. Однако точность этого приближения удовлетворительна лишь в ограниченном спектральном интервале, в связи с чем применяют формулу (3) на перекрывающихся участках не шире 200 нм с усреднением в зонах перекрытия. Усреднение дает градуировочную кривую $N(\lambda)$ (соответственно и кривую дисперсии) с разрывами в местах стыков.

В настоящей работе рассматривается возможность использования единой градуировки для всей области спектра, обеспечивающего гладкие, неразрывные градуировочные кривые.

Попытки непосредственно использовать для этого степенной полином:

$$N(\lambda) = A_0 + A_1\lambda^1 + A_2\lambda^2 + \dots + A_n\lambda^n, \quad (4),$$

а также сплайн-интерполяцию удовлетворительных результатов не дали.

Наилучший результат получается применением формулы (3) для всего спектрального интервала, после чего определяется множество отклонений градуировочных точек от (3). Это множество интерполируется полиномом (4) произвольно выбираемого порядка n методом наименьших квадратов [9,10], для чего используется программа расчета коэффициента A_i полинома (4).

Рассматриваемый подход был использован при градуировке монохроматора ДМР-4 с кварцевой оптикой и рабочей областью спектра 0,22 – 2,5 мкм.

Градуировочные точки (таблица 1) получены в видимом диапазоне спектра по линиям излучения ртути, в инфракрасной области – по полосам поглощения и пропускания светофильтров ЗС-7 и ПС-7 из комплекта монохроматора. При градуировки использовались фотоумножители ФЭУ-62 и ФЭУ-71, в связи с чем спектральная область ограничена 1300 нм.

Таблица 1

Результаты градуировки монохроматора ДМР-4

№ точки	λ , нм	$N(\lambda)$, дел.	№ точки	λ , нм	$N(\lambda)$, дел.
1	230,2	199,0	7	772,9	641,0
2	265,2	338,0	8	880,0*	653,0
3	334,1	474,5	9	1014,0	661,0
4	404,7	540,0	10	1129,0	673,0
5	491,6	584,5	11	1300,0*	681,0
6	623,4	620,0	-	-	-

* - точки определены по светофильтрам.

Для расчета коэффициентов в формуле (3) взяты точки с номерами 1, 6 и 9, при этом получили $A = 138,0$; $B = -47890,0$; $C = 718,7$.

Без применения полинома (4) сумма квадратов отклонений остальных точек от нелинейного графика составила 44,7 дел², абсолютное отклонение достигает 4 делений.

При использовании полинома четвертой степени ($A_0 = -22,06$; $A_1 = 0,1465$; $A_2 = -3,240 \cdot 10^{-4}$; $A_3 = 2,842 \cdot 10^{-7}$; $A_4 = -8,455 \cdot 10^{-11}$) сумма квадратов отклонений снизилась до 16,1 дел², при этом абсолютное отклонение уменьшилось до 2,3 и (-2,9) делений для первой и второй точек, что соответствует 0,4 нм и (-0,79) нм.

Для остальных точек отклонение не превышает 1 дел, в том числе 0,7 для десятой точки, что соответствует 0,74 нм.

Данная работа будет полезна при проведении спектральных измерений, в частности, в экспериментальной спектроскопии.

Литература

1. Беккер Ю. Спектроскопия. М., Техносфера, 2009. – 528 с.
 2. Гуревич М.М. Фотометрия (теория, методы и приборы). Л.: Энергоатомиздат, 1983. 272 с.
 3. Муравьев И.В., Перцев Л.В., Исаенков Н.С. Обзор методов адаптивного использования спектра// Инженерный вестник Дона, 2011, № 3
URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2011/468
 4. Бурцев А. Г., Мельников А. В. Численное моделирование и анализ спектра прерывающихся сигналов // Инженерный вестник Дона, 2014, № 2.
URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2014/2314
 5. Справочная книга по светотехнике / Под ред. Айзенберга А.Ю. 3-е изд. перераб. и доп. – М.: Знак, 2006. – 972 с
 6. Шашлов, А.Б. Основы светотехники – 2-е изд., доп. и перераб. – М.: Логос, 2011. – 256 с.
 7. McClure, W.F. Near-infrared Spectrometry: Learning the Fundamentals, book & disk ed., John Wiley & Sons, New York, 2006. – 221 p.
-

8. Raghavachari, R. Near-infrared Applications in Biotechnology (Practical Spectroscopy), Marcel Dekker, New York, 2000. – 392 p.

9. Эпштейн М. И. Измерения оптического излучения в электронике. - 2-е изд., перераб. и доп.- М.: Энергоатомиздат, 1990.- 254 с.

10. Зайдель А.Н. Ошибки измерений физических величин. Санкт-Петербург: Лань, 2022. — 112 с.

References

1. Bekker Ju. Spektroskopija [Spectroscopy] М., Tehnosfera, 2009. 528 p.

2. Gurevich M.M. Fotometrija (teorija, metody i pribory). [Photometry (theory, methods and devices)] L.: Jenergoatomizdat, 1983. 272 p.

3. Murav'ev I.V., Percev L.V., Isaenkov N.S. Inzhenernyj vestnik Dona, 2011, № 3. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2011/468

4. Burcev A. G., Mel'nikov A. V. Inzhenernyj vestnik Dona, 2014, № 2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2014/2314

5. Spravochnaja kniga po svetotehnike [A reference book on lighting engineering]. Pod red. Ajzenberga A.Ju. 3-e izd. pererab. i dop. M.: Znak, 2006. 972 p.

6. Shashlov, A.B. Osnovy svetotehniki [Fundamentals of lighting engineering]. 2-e izd., dop. i pererab. M.: Logos, 2011. 256 p.

7. McClure, W.F. Near-infrared Spectrometry: Learning the Fundamentals, book & disk edn., John Wiley & Sons, New York, 2006. 221 p.

8. Raghavachari, R. Near-infrared Applications in Biotechnology (Practical Spectroscopy), Marcel Decker, New York, 2000. 392 p.

9. Jepshtejn M. I. Izmerenija opticheskogo izluchenija v jelektronike [Optical radiation measurements in electronics]. 2-e izd., nererab. i dop. M.: Jenergoatomizdat, 1990. 254 p.

10. Zajdel' A.N. Oshibki izmerenij fizicheskikh velichin. [Measurement errors of physical quantities]. Sankt-Peterburg : Lan', 2022. 112 p.

Дата поступления: 2.03.2024

Дата публикации: 9.04.2024
