

ОПТИЧЕСКОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИЯ

УДК 681.785.554

СПЕКТРОМЕТР ВЫСОКОЙ РАЗРЕШАЮЩЕЙ СИЛЫ С ЦИФРОВОЙ ФОТОРЕГИСТРАЦИЕЙ НА БАЗЕ СПЕКТРОГРАФА ДФС-8

© 2011 г. Б. П. Лавров, доктор физ.-мат. наук; А. С. Михайлов; И. С. Умрихин

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

E-mail: lavrov@pobox.spbu.ru

Показана возможность превращения длиннофокусного спектрографа ДФС-8 в современный автоматический спектрометр высокой разрешающей силы с цифровой регистрацией небольших участков спектра с помощью зеркальной фотокамеры. Разработана методика преобразования двумерного распределения освещенности, регистрируемого матричным КМОП-детектором, в спектральное распределение интенсивности излучения. Проградуированный спектрометр позволяет в полностью автоматическом режиме регистрировать как наборы отдельных окон (участков спектра размером приблизительно по 1,6 нм) по выбору экспериментатора, так и обзорные спектры в диапазоне длин волн 400–700 нм путем последовательного измерения окон с заданным перекрытием. Исследования эмиссионных спектров тлеющего разряда в смеси Ag-Hg и капиллярно-дугового разряда в чистом водороде позволили определить основные характеристики спектрометра: максимальную разрешающую силу до 2×10^5 , линейную дисперсию 0,077–0,065 нм/мм, динамический диапазон измеряемых интенсивностей более 10^4 и др.

Ключевые слова: спектрограф, спектрометр, высокая разрешающая сила, цифровая регистрация.

Коды OCIS: 120.6200.

Поступила в редакцию 19.07.2010.

Введение

К настоящему времени большая часть информации об энергетических характеристиках молекул (волновых числах электронно-колебательно-вращательных спектральных линий, колебательно-вращательных постоянных и ровибронных уровнях) получена с помощью длиннофокусных спектрографов с фотографической регистрацией. Эти приборы сейчас практически не используются при измерении распределений интенсивности в молекулярной спектроскопии высокой разрешающей силы вследствие известных недостатков фотографической регистрации – нелинейной зависимости плотности почернения от освещенности и малого динамического диапазона измеряемых интенсивностей. В то же время последние десятилетия возрастает интерес к измерению распределений интенсивности в колебательно-

вращательной структуре молекулярных спектров, поскольку они несут информацию как о вероятностях радиационных [1] и столкновительных [2] переходов, так и о характеристиках среды, в которой находятся излучающие молекулы [3]¹. В спектроскопии молекулярной плазмы при необходимости высокого разрешения спектрограф обычно преобразуют в сканирующий монохроматор с фотоэлектронным множителем (ФЭУ) и аналоговой или цифровой системой регистрации сигнала [3]. Известны и недостатки таких систем: невозможность улучшения отношения сигнал/шум путем накопле-

¹ Недавно установлено, что надежное измерение интенсивности оказывается чрезвычайно важным и при измерении волновых чисел электронно-колебательно-вращательных переходов в неполностью разрешенном спектре молекулы D₂, поскольку это позволяет раскладывать перекрывающиеся контуры спектральных линий на элементарные составляющие [4].

ния сигнала и неравномерность сканирования, связанная с неполной идеальностью редукторов. Поэтому в последние годы вместо ФЭУ все большее применение находят оптические многоканальные анализаторы, использующие линейки или матрицы фотодиодов (см., например, [3, 5, 6]). Основными недостатками этих приборов являются их высокая стоимость и ограниченные (для физика-экспериментатора) возможности программного обеспечения.

Цель настоящей статьи состоит в том, чтобы на конкретном примере изготовленного в середине прошлого века спектрографа ДФС-8 и фотокамеры Canon EOS 350D показать, как с помощью относительно недорогих фотоаппаратов длиннофокусные спектрографы можно преобразовывать во вполне современные автоматизированные спектрометры высокой разрешающей силы с цифровой регистрацией узких участков спектра.

Описание спектрометра

Для создания спектрометра был применен собранный по схеме Эберта–Фасти спектрограф ДФС-8 с фокусным расстоянием 2,65 м и дифракционной решеткой 1800 штр/мм шириной 100 мм, используемой в первом порядке (см. рис. 1). Со спектрографа была удалена кассета для фотопластинок, а на юстировочном столике с 6 степенями свободы установлена фотокамера Canon EOS 350D. Изображение фокальной плоскости спектрографа с помощью дополнительного объектива Гелиос-44М ($f = 58$ см) проектировалось на КМОП-матрицу фотокамеры размером 22,2×14,8 мм, состоящую из 3456×2304 фотоприемников.

Выбор фотокамеры обусловлен следующими соображениями.

1. Эта камера легко подключается к персональному компьютеру (ПК), полностью управляется с клавиатуры ПК, а самое главное, позволяет сохранять изображения в формате RAW, в котором содержится информация о сигналах, зарегистрированных всеми восемью миллионами фотоприемников.

2. При правильной юстировке спектрографа с заданными характеристиками ширина инструментального контура прибора определяется шириной входной щели. Ее удается сделать даже несколько меньше нормальной ширины щели (которая для ДФС-8 составляет 10,6–18,6 мкм в диапазоне длин волн 400–700 нм), если яркость источника света достаточна для регистрации.

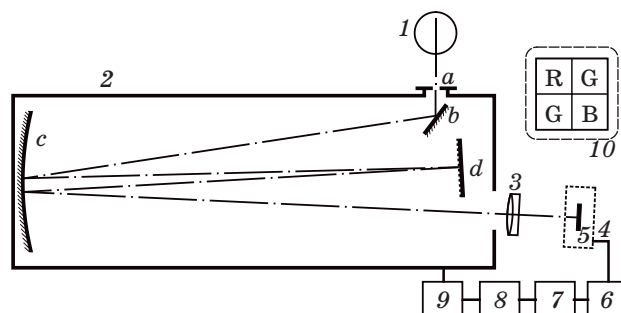


Рис. 1. Блок-схема экспериментальной установки. 1 – источник света; 2 – спектрограф ДФС-8: *a* – входная щель, *b* – поворотное зеркало, *c* – фокусирующее зеркало, *d* – дифракционная решетка; 3 – дополнительный камерный объектив, 4 – фотокамера, 5 – КМОП-матрица, 6 – персональный компьютер, 7 – схема управления, 8 – шаговый двигатель, 9 – редуктор, 10 – изображение ячейки КМОП-матрицы, иллюстрирующее расположение R, G и B фотодиодов.

Эта величина сравнима с линейным размером фотоприемников КМОП-матрицы (6,42 мкм) и расстоянием между фотодиодами R и B типов (см. рис. 1). Для того чтобы конечные размеры фотоприемников не ухудшали разрешающую способность, обеспеченную оптической системой спектрографа, необходимо использовать дополнительный камерный объектив, увеличивающий изображение регистрируемого участка фокальной плоскости. Камера Canon EOS 350D рассчитана на подсоединение сменных объективов, что и позволяет использовать какую-либо самодельную оптическую систему в качестве дополнительного камерного объектива. В нашем случае² оказалось достаточно увеличения стандартного объектива, подсоединенного к фотоаппарату с помощью переходных колец.

3. Это зеркальная камера, позволяющая наблюдать изображение в плоскости КМОП-матрицы, что удобно при визуальной юстировке фотокамеры.

КМОП-матрица представляет собой двумерную последовательность ячеек (см. рис. 1), каждая из которых состоит из четырех независимых фотоприемников разных типов: красный (R), два зеленых (G) и синий (B),² Прибор создавался под конкретную задачу – измерение эмиссионных спектров двухатомных изотопов молекулы водорода H₂ и D₂, с возможностью достаточно точного измерения не только интенсивностей спектральных линий, но и волновых чисел электронно-колебательно-вращательных спонтанных переходов.

обладающих наибольшей чувствительностью в спектральных областях: 570–640, 490–580 и 420–500 нм соответственно [7]. При регистрации узких спектральных интервалов можно использовать сигналы только наиболее чувствительных в данной области фотоприемников. В нашем случае на матрице фотоаппарата помещается участок спектра шириной примерно 1,6 нм. В дальнейшем изложении такой участок спектра будем называть окном, а кадром или снимком – окном, снятое при однократной экспозиции. Таким образом, всякое окно в спектре может быть зарегистрировано в виде либо одного кадра (снимка), либо путем суммирования многих кадров.

Используемая нами камера позволяет устанавливать длительность экспозиции двумя способами: программно, с помощью встроенного таймера фотоаппарата (в интервале выдержек 0,00025–30 с), и вручную (длительность экспозиции задается “от руки”) со стандартного внешнего пульта управления камерой. Первый способ используется в автоматическом режиме при последовательной съемке многих окон (причем для получения каждого окна может быть просуммировано несколько кадров), а второй – при съемке отдельных кадров для окон слабой яркости, требующих больших экспозиций.

Выбор участка спектра для фотографирования осуществляется поворотом дифракционной решетки с помощью специальной системы сканирования, управляемой с ПК. Она включала штатную червячную передачу ДФС-8, дополнительный редуктор, шаговый двигатель, подключенную к ПК электронную схему управления двигателем и соответствующее программное обеспечение. Один шаг мотора соответствует изменению длины волны примерно на 0,0006 нм.

Для изменения угла поворота дифракционной решетки и фотографирования спектров в ручном и автоматическом режимах была разработана специальная программа, управляющая работой спектрометра. Она состоит из двух логических блоков. Функции программы, входящие в первый блок, позволяют управлять фотокамерой и осуществлять обмен данными ПК с фотоаппаратом. Это дает возможность пользователю проводить съемку как отдельных кадров, так и серии из нескольких кадров с нужными длительностями экспозиций.

Второй блок программы отвечает за управление системой сканирования. Встроенный в программу счетчик запоминает число шагов, сде-

ланных мотором относительно устанавливаемого пользователем фиксированного положения. Поскольку угол поворота решетки пропорционален числу шагов, постольку после соответствующей градуировки спектрометра по линиям известного спектра можно устанавливать участок спектра для фотографирования (окно) с точностью в несколько тысячных нанометра.

Программа имеет удобный интерфейс, в котором реализована визуализация существенных для пользователя параметров фотокамеры и системы сканирования, возможность интерактивного изменения этих параметров, а также синхронизированное взаимодействие управляющих блоков. Это дает экспериментатору следующие возможности.

1. В ручном режиме (с клавиатуры ПК) можно проводить съемку отдельных кадров какого-либо одного окна при различных условиях эксперимента, например при настройке прибора (юстировке камеры, выборе ширины входной щели и пр.) или при варьировании параметров плазмы в источнике света.

2. При фиксированных условиях в источнике света можно с помощью системы сканирования в полностью автоматическом режиме регистрировать интересующие экспериментатора участки спектра с заданным шагом и устанавливаемыми для каждого шага числом кадров и длительностью экспозиции. Это, в частности, позволяет снимать обзорные спектры.

Полученные с фотокамеры изображения окон поступали в ПК в RAW-формате, содержащем выходные сигналы всех фотоприемников матрицы, преобразованные с помощью 12-битного АЦП. Это позволяет считывать с одного фотоприемника максимальный сигнал, равный 4095 фотоотсчетов³.

Для извлечения информации из полученных снимков была разработана специальная программа. Первый блок программы, отвечающий за преобразование поступающих с камеры RAW-файлов в удобные для работы цифровые файлы, основан на открытом коде [8]. Он позволяет получить двумерную матрицу чисел, два измерения которой соответствуют положению фотоприемника на матрице по горизонтали и вертикали. Числа в полученной таким образом матрице соответствуют значениям сигнала на выходе АЦП от каждого фотодетектора.

³ В научно-технической литературе наряду с терминами “отсчет”, “фотоотсчет” используются и другие, например, “count”, МЗР (младший значащий разряд) и DN (digital number).

Второй блок программы предназначен для преобразования полученной матрицы чисел в четыре матрицы, в каждой из которых объединены сигналы от четырех различных типов (R, G, G, B) фотоприемников. Это дает возможность обрабатывать по отдельности массивы данных, содержащие сигналы фотоприемников любого типа.

В третьем блоке была реализована возможность изменять угол наклона фотоснимка относительно изображения спектральных линий так, чтобы горизонталь изображения совпала с направлением дисперсии в фокальной плоскости спектрометра. Это позволяет устранять неполное совпадение изображения спектральной линии с направлением вертикали матрицы, обусловленное конечной точностью юстировки фотоаппарата.

Четвертый блок дает возможность пользователю проводить суммирование сигналов от фотоприемников, расположенных в одном вертикальном столбце, и устанавливать начальный и конечный пределы для суммирования. При равномерной освещенности входной щели сигналы фотоприемников одного типа, расположенных в одном вертикальном столбце, несут информацию о яркости излучения источника света на одной и той же длине волны. Такое суммирование дает возможность увеличить чувствительность спектрометра и отношение сигнал/шум для данных, получаемых с одного снимка. Если пользователя интересует двумерное распределение освещенности в фокальной плоскости, суммирование по вертикали можно не проводить.

Пятый блок программы предназначен для сохранения преобразованных данных в виде удобных для дальнейшего использования текстовых файлов, содержащих таблицы чисел. Пользователь имеет возможность сохранять как просуммированный по вертикали сигнал, так и суммарный сигнал, деленный на количество фотоприемников в вертикальном столбце (усредненный по вертикали сигнал). Имеется и возможность сохранения сигнала от фотоприемников, расположенных в одной строке, без суммирования по вертикали, а также сохранения всей исходной матрицы чисел в файле без какого-либо преобразования исходных данных. Каждый такой файл содержит задаваемую пользователем информацию о данном фотоснимке (дата снимка, параметры источника света, длительность экспозиции и др.).

Шестой блок программы позволяет осуществлять просмотр цветного изображения зарегистрированного окна, а также изображений, полученных от каждого типа фотоприемников. В режиме просмотра пользователь может изменять яркость и контрастность изображения без изменения исходного массива данных. Это позволяет обнаруживать в кадре линии малой интенсивности визуально, без цифровой обработки окна или отдельного кадра.

Взаимодействие всех блоков программы реализовано в рамках удобного графического интерфейса с интуитивно понятными элементами управления и возможностью отслеживать вносимые пользователем изменения в режиме реального времени.

Изучение характеристик прибора

Одной из наиболее важных характеристик используемой нами матрицы является связь между освещенностью фотоприемника и выдаваемым им отсчетом на выходе АЦП. Измерения показали, что сигнал АЦП растет пропорционально увеличению освещенности и длительности экспозиции, достигает своего максимального значения 4095 отсчетов, после чего выходит в режим насыщения. Линейность данной зависимости в рабочем диапазоне является весьма важным преимуществом фотоэлектрической регистрации перед фотографической. Она не только облегчает измерение относительных интенсивностей спектральных линий, но и позволяет исследовать форму контуров отдельных линий, а в случае переналаживания контуров соседних линий (так называемого "блендирования") проводить операцию деконволюции (операцию, обратную операции свертки) и таким образом измерять интенсивности и длины волн даже блендированных линий. Как известно, именно блендирование сильно затрудняет анализ вращательной структуры молекулярных спектров.

Для экспериментального определения предела разрешающей способности прибора проводились исследования сверхтонкой структуры (СТС) атомных линий ртути, излучаемых тлеющим разрядом низкого давления в смеси Hg + Ar при газовой температуре плазмы менее 500 К. В этих условиях доплеровская ширина⁴ линий ртути 404,6 и 546,1 нм не превышает

⁴ Здесь и далее под шириной линии мы будем понимать полную ширину на половине высоты (FWHM – в англоязычной литературе).

$4,6 \times 10^{-4}$ и $6,2 \times 10^{-4}$ нм соответственно. Поэтому при ширине входной щели спектрометра меньше нормальной контуры отдельных компонентов СТС практически совпадают с аппаратным контуром спектрометра на данной длине волны. Ширина аппаратного контура очень слабо, но зависит от длины волны. Поэтому для различ-

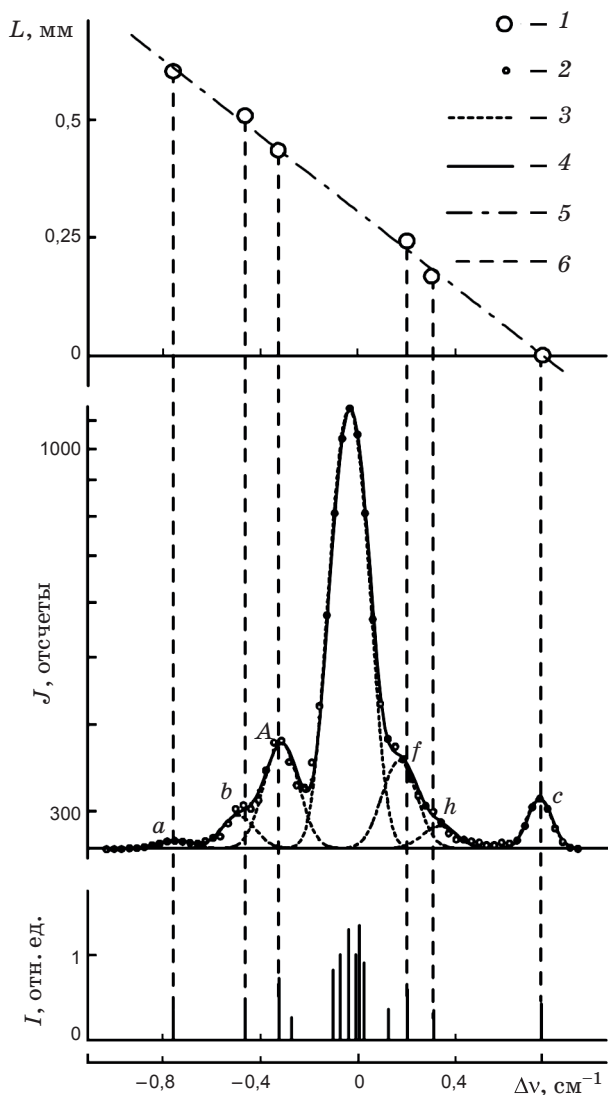


Рис. 2. Зависимость интенсивности J (в единицах фотоотсчетов) в окрестности линии ртути 546,1 нм, схематическое изображение СТС этой линии I по данным работы [9] и зависимость координаты L по горизонтали КМОП-матрицы от волнового числа $\Delta\nu$ относительно центра линии изотопа ртути Hg^{202} . 1 – положение центров разрешенных компонентов СТС, 2 – измеренная интенсивность сигнала в логарифмическом масштабе после вычета фона, 3 – контуры гауссовых составляющих, 4 – суммарная интенсивность всех составляющих, 5 – прямая, полученная в результате аппроксимации экспериментальных данных. Вертикальные вспомогательные линии (6) соответствуют значениям волновых чисел (в см^{-1}) максимумов интенсивности разрешенных компонентов СТС.

ных областей спектра требуется весьма небольшая подъюстировка, которая в случае ДФС-8 легко осуществляется продольным перемещением входной щели.

В качестве примера на рис. 2 представлены результаты измерений (при ширине входной щели 7 мкм) и анализа фрагмента спектра в окрестности менее разрешенной из исследованных зеленой линии ртути (546,1 нм). Видно, что расположенные вблизи $\Delta\nu = 0$ наиболее интенсивные компоненты, излучаемые четными изотопами, не разрешаются и формируют колоколообразный контур в центре СТС. Изотопы с нечетным массовым числом имеют ненулевой спин ядра, что обуславливает их расщепление на несколько компонентов, расстояние между которыми существенно больше изотопического сдвига. Как видно из рисунка, в наших условиях наблюдается частичное перекрытие контуров различных компонентов СТС. Поэтому при нахождении волновых чисел компонентов проводилось разложение наблюдаемого распределения интенсивности на отдельные составляющие. Для решения такой обратной задачи использовалась специальная программа, основанная на минимизации взвешенного среднеквадратичного отклонения наблюдаемого и синтезируемого распределений интенсивности. Наши исследования показали, что наблюдаемые контуры одиночных линий хорошо аппроксимируются функцией Гаусса (например компонент “с”), за исключением несущественных далеких крыльев. Поэтому, синтезируя наблюдаемое распределение интенсивности из гауссовых составляющих, можно определить параметры отдельных компонентов СТС. В приведенном на рис. 2 примере оказалось достаточным предположения о том, что измеряемое распределение интенсивности в основном определяется семью гауссовыми составляющими. Поскольку центральный купол образован многими компонентами СТС, его ширина варьировалась независимо от ширины, общей для шести остальных (компоненты a, b, A, f, h, c)⁵. Видно, что такая модель хорошо описывает наблюдаемое распределение интенсивности, а найденные положения компонентов согласуются с результатами специальных исследований СТС [9]. На рис. 2 приведена также зависимость положения центров шести разрешенных компонентов L от волнового числа.

⁵ Здесь и на рис. 2 используются общепринятые обозначения разрешенных компонентов (см., например, [9]).

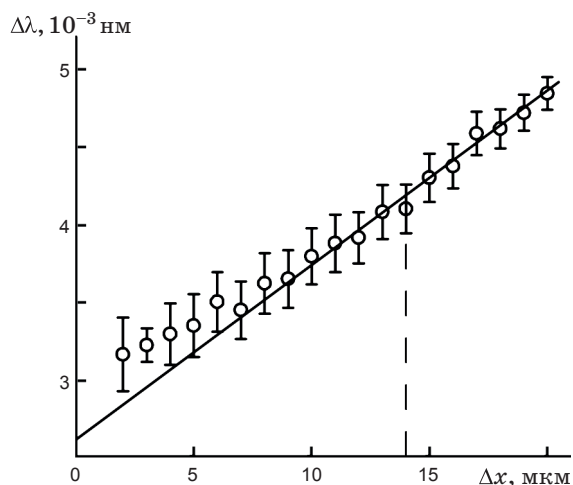


Рис. 3. Зависимость ширины аппаратного контура спектрометра $\Delta\lambda$ от ширины входной щели Δx . Вертикальной пунктирной линией обозначена нормальная ширина щели для нашего прибора для данной длины волны. Сплошная прямая – линейная аппроксимация экспериментальных точек при ширине входной щели, превышающей нормальную.

Видно, что на малом спектральном участке в центре окна эта зависимость хорошо описывается прямой. Таким образом, удастся использовать СТС линий ртути для экспериментального определения ширины аппаратного контура спектрометра.

Зависимость ширины аппаратного контура $\Delta\lambda$ от ширины входной щели Δx вблизи зеленой линии ртути, найденная по уширению компонента “с”, приведена на рис. 3⁶. Видно, что при уменьшении ширины входной щели (пока она заметно больше нормальной) ширина аппаратного контура спектрометра убывает по линейному закону вплоть до значения примерно 0,004 нм. Затем спад этой зависимости существенно замедляется, а яркость линии быстро убывает. Достигнутое в данном эксперименте наименьшее значение ширины аппаратного контура составляет $0,0032 \pm 0,0002$ нм, что соответствует разрешающей силе спектрометра $\lambda/\Delta\lambda \approx (1,71 \pm 0,12) \times 10^5$ (95% разрешающей силы идеальной дифракционной решетки с полным числом штрихов $1,8 \times 10^5$ в первом по-

⁶ Компонент “с” использовался здесь только для простоты вычислений. Напомним, что при описании распределения интенсивности, показанного на рис. 2, предполагалась одинаковая ширина всех шести компонентов, и это предположение выполнялось с точностью $(0,0002/0,0032) \times 100\% = 6\%$, причем расхождение экспериментальных данных с суммой контуров не превышало 2%.

рядке), а на длине волны синей линии ртути – $(1,77 \pm 0,12) \times 10^5$ (98%) соответственно.

Приведенный пример иллюстрирует не только разрешающую способность спектрометра, но и важность линейности отклика измерительной системы, позволившей получить вполне надежную информацию о составляющих частично разрешенной структуры спектра. В принципе аналогичной способностью обладают и сканирующие монохроматоры с одноканальной фотоэлектрической регистрацией. Однако реализация этой возможности в случае спектров малой интенсивности затруднена тем, что в сканирующих системах отсутствует возможность длительного накопления сигнала. В этом отношении такие системы проигрывают даже традиционной фотографической регистрации в обнаружении особо слабых спектральных линий, поскольку при многочасовых экспозициях фотоэмульсии можно значительно увеличить отношение сигнал/шум и зарегистрировать линии, теряющиеся в шумах сканирующего фотоэлектрического спектрометра.

Фотографирование спектров с помощью многоканальных матричных детекторов сочетает достоинства как фотоэлектрической регистрации (линейность отклика), так и обычного фотографирования (возможность накопления сигнала за время экспозиции). Это обстоятельство и обеспечивает широкий динамический диапазон измеряемых интенсивностей, определяющий, в частности, возможность наблюдения слабых зашумленных линий на фоне ярких. В этом отношении возможности нашего прибора практически не ограничены⁷, поскольку линейность зависимости сигнала от экспозиции⁸ позволяет увеличивать последнюю путем суммирования любого количества отдельных кадров, выбирая длительность экспозиции каждого кадра таким образом, чтобы выход АЦП для наиболее яркой части спектра (линии или континуума) в регистрируемом окне не выходил за пределы рабочего диапазона матрицы. Ясно, что точная верхняя граница диапазона должна определяться пользователем в зависимости от требуемой точности измерения интенсивности. В нашем случае оказалось достаточным не превышать 4000 отсчетов.

⁷ Эти возможности, конечно, ограничены стабильностью используемого источника света.

⁸ Под экспозицией, как обычно, понимается произведение освещенности на время (длительность экспозиции), от которого и зависит выдаваемый АЦП фотоэлектрический сигнал.

В качестве примера на рис. 4 приведен фрагмент спектра чисто водородной плазмы в окрестности наиболее яркой линии серии Бальмера атома водорода H_α . Источником света служила капиллярно-дуговая спектральная лампа ДВС-25 [10]. Измерение проведено путем суммирования 150 кадров, сделанных с экспозицией по 30 с. Таким образом, совокупное время экспозиции данного окна составляло 75 мин. Кроме атомной линии, в спектре хорошо видны и значительно более слабые линии молекулы H_2 , длины волн которых (в воздухе) указаны по данным [11]. Видно, что спектрометр позволяет измерять интенсивности линий, различающиеся до нескольких тысяч раз (в случае наиболее слабой линии 656,6154 нм). При этом отношение сигнал/шум достигает значений $200\,000/20 = 10^4$, что не является пределом прибора, поскольку определяется шумами источника света.

В молекулярной спектроскопии высокой разрешающей силы необходимо точное измерение не только интенсивности излучения, но и волновых чисел электронно-колебательно-вращательных переходов. Если при измерении относительных интенсивностей точность в 1% является вполне достаточной, то при измерении волновых чисел необходимо получать 6–7 надежных значащих цифр. Заметим также, что с точки зрения квантовой теории характеристикой молекулы является спектр излучаемых волновых чисел, в то время как измеряемой величиной в спектроскопии является длина волны света λ в той среде, в которой происходит взаимодействие света с диспергирующей систе-

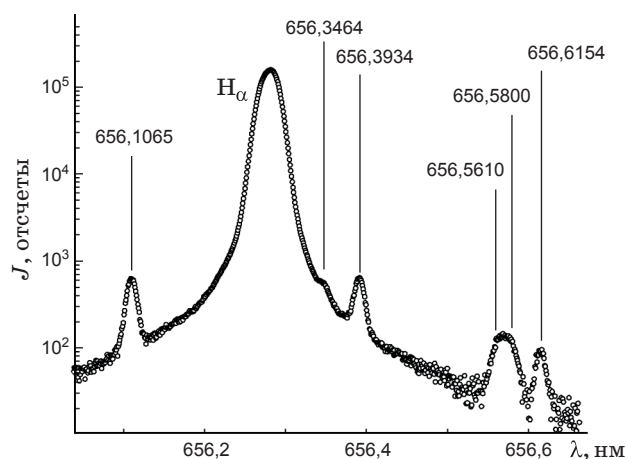


Рис. 4. Фрагмент спектра водородной плазмы лампы ДВС-25 при токе 0,3 А в окрестности линии H_α атома водорода. Длины волн в воздухе наиболее ярких линий молекулы H_2 указаны цифрами в нанометрах по данным [11].

мой (в нашем случае в воздухе). Связь между этими величинами определяется известным выражением

$$\nu = 1/\lambda_{\text{vac}} = 1/(\lambda n(\lambda)), \quad (1)$$

где ν — волновое число перехода, λ_{vac} — длина волны в вакууме, $n(\lambda)$ — показатель преломления. Видно, что для измерения волновых чисел с помощью матричного детектора в видимой области спектра необходимо знать зависимость длины волны в воздухе от координаты по направлению дисперсии в фокальной плоскости спектрометра, где расположена матрица. Аналитическое выражение для этой зависимости в известной нам литературе отсутствует, однако его нетрудно получить в результате элементарного рассмотрения схемы Эберта–Фасти в следующем виде (для простоты ограничиваемся первым порядком дифракции):

$$\lambda(x) = \frac{\lambda_0}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{(x/F)^2 + 1}} \right) + \sqrt{t^2 - \left(\frac{\lambda_0}{2} \right)^2} \frac{(x/F)}{\sqrt{(x/F)^2 + 1}}. \quad (2)$$

Здесь λ_0 — длина волны в центре фокальной плоскости прибора, соответствующая равенству углов падения и дифракции; t — постоянная дифракционной решетки, F — эффективное фокусное расстояние камерного объектива, x — координата в фокальной плоскости, отсчитываемая от ее центра. Видно, что, строго говоря, зависимость $\lambda(x)$ не является линейной.

В принципе выражение (2) можно использовать для аппроксимации зависимости длины волны от координаты при градуировке спектрометра с помощью эталонного спектра сравнения. В этом случае независимыми параметрами будут фокусное расстояние, период решетки, центральная длина волны λ_0 и положение линии с такой длиной волны на горизонтали КМОП-матрицы x_0 , которое может и не совпадать с центром матрицы вследствие неидеальности юстировки. Однако в этом случае для вычисления волнового числа необходимо достаточно точное знание показателя преломления воздуха $n(\lambda)$ в конкретных условиях проведения измерений.

Из формулы (2) видно, что в случае длиннофокусных спектрометров зависимость длины волны от координаты $\lambda(x)$ не слишком далеко от центра фокальной плоскости близка к линейной. Ее можно разложить в ряд по степеням малого параметра x/F , который в нашем слу-

чае не превышает 2×10^{-3} . С другой стороны, на небольшом участке спектра зависимость показателя преломления воздуха $n(\lambda)$ также близка к линейной. Таким образом, при регистрации узких спектральных интервалов входящее в формулу (1) произведение $\lambda_{\text{vac}}(x) = \lambda(x) n(\lambda(x))$ имеет вид степенного ряда невысокой степени. Это обстоятельство позволяет проводить градуировку спектрометра в длинах волн в вакууме, обходя тем самым технически неприятную проблему точного измерения показателя преломления воздуха при различных условиях проведения измерений. В качестве реперов использовались длины волн λ_{vac} спектральных линий атома неона [12] и наиболее ярких, свободных от блендирования линий молекул H_2 [11] и D_2 [13]. Источником света служила спектральная лампа ДНУ-65 [14], наполненная смесью $\text{D}_2 + \text{H}_2 + \text{Ne}$. Измерения показали, что при полиномиальной аппроксимации данных о $\lambda_{\text{vac}}(x)$ линейная гипотеза оказывается недостаточной, полином третьей степени избыточен, а аппроксимация полиномом второй степени обеспечивает точность градуировки лучше, чем 10^{-3} нм.

Дифференцирование формулы (2) по x при $x/F \ll 1$ дает выражение для обратной линейной дисперсии автоколлимационного спектрометра в центре фокальной плоскости (при точном равенстве углов падения и дифракции, т. е. при $x = x_0$, а $\lambda = \lambda_0$), совпадающее с известной формулой из [15]:

$$\frac{d\lambda}{dx} = \frac{t}{F} \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_0}{2t}\right)^2}. \quad (3)$$

На рис. 5 приведены результаты измерения обратной линейной дисперсии в центре КМОП-матрицы при различных значениях длины волны λ_0 . При этом использовались данные о длине волны в воздухе линий молекулы D_2 из [13].

Измерения проводились по линиям электронно-вращательного спектра молекулы D_2 , излучаемого плазмой спектральной лампы ЛД2-Д [16] (при токе 0,3 А), наполненной спектрально чистым дейтерием. Видно, что дисперсия монотонно убывает с ростом длины волны и меняется от 0,076 до 0,065 нм/мм в диапазоне длин волн 400–700 нм. Эта зависимость аппроксимировалась формулой (3), в которой $1/t$ и F использовались в качестве подгоночных параметров. Найденные методом наименьших квадратов оптимальные значения этих параметров составляют $1/t = 1784 \pm 3$ штр/мм и $F = 6786 \pm 8$ мм, а стандартное отклонение аппроксимации для

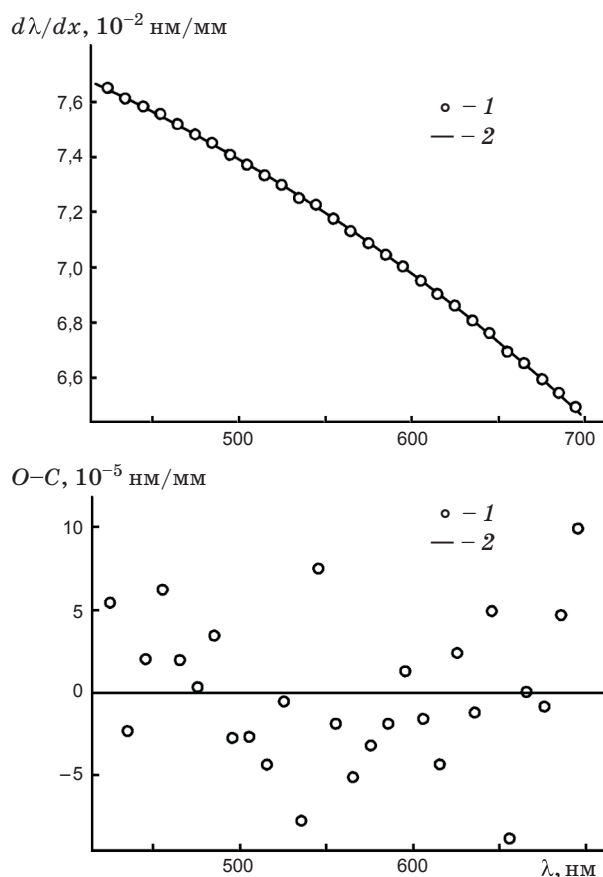


Рис. 5. Зависимость обратной линейной дисперсии прибора $d\lambda/dx$ от длины волны в воздухе λ и разности $(O-C)$ между экспериментальными данными (1) для центра КМОП-матрицы и теоретической кривой (2), представляющей результат аппроксимации этих данных выражением (3) при $\lambda = \lambda_0$.

всего исследованного диапазона длин волн равно 0,0005 нм/мм. В нижней части рис. 5 показаны разности $(O-C)$ между результатами измерений дисперсии в центре КМОП-матрицы и расчета по формуле (3) с оптимальными значениями параметров аппроксимации. Видно, что эти разности не превышают 10^{-4} нм/мм, а точность аппроксимации лучше 0,1%⁹.

Заключение

Таким образом, “морально устаревший” спектрограф ДФС-8 преобразован во вполне современный автоматизированный спектрометр⁹ Заметим, что 0,9%-ное отличие найденной нами плотности нарезки дифракционной решетки от величины 1800 штр/мм, указанной в паспорте, может объясняться не только округлением этой величины производителем, но и тем, что при проведении аппроксимации мы неявно предполагали идентичность показателя преломления воздуха в наших условиях и в экспериментах, представленных в работе [13].

высокой разрешающей силы с цифровой фото-регистрацией. Обратная линейная дисперсия прибора составляет 0,076–0,065 нм/мм в диапазоне длин волн 400–700 нм, а разрешающая сила может достигать 2×10^5 , что составляет 95–98% от разрешающей силы идеальной дифракционной решетки. Линейность зависимости фотоэлектрического сигнала от освещенности фотоприемников позволяет проводить разложение на элементарные составляющие спектров с частично разрешенной структурой близкорасположенных спектральных линий. Возможность суммирования кадров делает практически не ограниченным динамический диапазон измеряемых интенсивностей за счет увеличения отношения сигнал/шум, который в наших условиях достигал 10^4 . Консолидация процессов управления вращением решетки и фотографирования узких участков спектра (окон) позволяет экспериментатору организовать в автоматическом режиме либо регистрацию каких-то заранее выбранных окон, либо снимать обзорные спектры с возможностью выбора шага сканирования, длительности экспозиции каждого кадра и количества кадров для каждого шага. Доступный в наших условиях диапазон длин волн (400–700 нм) определялся не только яркостью использованных источников света (и небольшими длительностями экспозиции), но и тем, что в фотоаппарате Canon EOS 350D перед матрицей установлен специальный светофильтр для улучшения фотографических характеристик камеры. В работе [7] показано, что удаление этого светофильтра позволяет увеличить чувствительность фотоприемников матрицы в диапазоне длин волн 700–900 нм в красной области спектра. Таким образом можно получить доступный для измерения диапазон длин волн КМОП-матрицы 400–900 нм. В заключение заметим, что использование стандартной зеркальной цифровой фотокамеры существенно упрощает и удешевляет модернизацию спектрографа.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-03-00571а).

ЛИТЕРАТУРА

1. Лавров Б.П., Асташкевич С.А. Исследование вероятностей электронно-колебательно-вращательных радиационных переходов молекулы водорода // *Опт. и спектр.* 1999. Т. 86. В. 6. С. 946–953.
2. Lavrov B.P., Ostrovsky V.N., Ustimov V.I. Non-Franck-Condon transitions in the electron impact excitation of molecules. II. Semiempirical approach: transitions in H_2 // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1981. V. 14. № 23. P. 4701–4718.
3. Röpcke J., Davies P.B., Hempel F., Lavrov B.P. Diagnostic Emission and Absorption Spectroscopy of Nonequilibrium Molecular Plasmas // *Low Temperature Plasmas. Fundamentals, Technologies, and Techniques (2nd Edn.)* / Ed. by R. Hippler, H. Kersten, M. Schmidt, K.H. Schoenbach. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2008. P. 215–242.
4. Lavrov B.P., Umrikhin I.S. Optimal values of rovibronic energy levels for triplet electronic states of molecular deuterium // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2008. V. 41 105103 (25 pp).
5. Djermanov I., Jordanova S., Koleva I. Spectrograph coupled with CCD module for high resolution spectroscopy // *Journal of Physics: Conference Series.* 2007. V. 63. P. 012029 (6 pp).
6. Горячев С.В., Исакаев Э.Х., Мясников М.И., Чиннов В.Ф. Спектральные измерения локальных параметров плазмы с использованием ПЗС-матриц // *Опт. и спектр.* 2008. Т. 105. № 6. С. 918–924.
7. Lelong C., Burger P., Jubelin G., Roux B., Labbé S., Baret F. Assessment of Unmanned Aerial Vehicles Imagery for Quantitative Monitoring of Wheat Crop in Small Plots // *Sensors.* 2008. V. 8. P. 3557–3585.
8. Coffin D. Raw digital photo decoding // www.cybercom.net/~dcoffin/dcrawl.
9. Rank D.H., Skorinko G., Eastman D.P., Sakseena G.D., McCubbin T.K. jr., Wiggins T.A. Hyperfine Structures of Some Hg I Lines // *JOSA.* 1960. V. 50. № 11. P. 1045–1052.
10. Купрейчик К.П., Безлепкин А.И., Хомяк А.С., Александров В.В. Газоразрядные источники света для спектральных измерений. Минск: Университетское, 1987. 200 с.
11. The Hydrogen Molecule Wavelength Tables of Gerhard Heinrich Dieke / Ed. by H.M. Crosswhite. N.Y.: Wiley-Interscience, 1972. 616 p.
12. Saloman E.B., Carig J., Sansonetti. Wavelength, Energy Levels Classification, and Energy Levels for the Spectrum of Neutral Neon // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 2004. V. 33. № 4. P. 1113–1158.
13. 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. V. 14. P. 235–383.
14. Лавров Б.П., Шишацкая Л.П. Капиллярно-дуговой источник света на смеси дейтерия с неоном // *ОМП.* 1979. № 11. С. 58–59.
15. Зайдель А.Н., Островская Г.В., Островский Ю.И. Техника и практика спектроскопии. М.: Наука, 1972. 375 с.
16. Гребеньков В.С., Лавров Б.П., Тютчев М.В. Капиллярно-дуговая спектральная лампа ЛД2-Д // *ОМП.* 1982. № 2. С. 47–50.