

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОГО ИЗЛУЧАЮЩЕГО ОБЪЕМА В ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПРОТЯЖЕННОЙ СРЕДЫ

© 2009 г. А. А. Шепеленко, канд. физ.-мат. наук

Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева, Самара

E-mail: shepelenko@fian.smr.ru

Представлен вывод формул для расчета эффективного объема, который связывает концентрацию излучающих частиц с интенсивностью спектральной линии или полосы при измерениях методом эмиссионной спектроскопии. Даются формулы для расчета эффективного объема, описывающие вклады центральной и периферийной областей при излучающей среде значительной протяженности вдоль оси излучающего объема.

Коды OCIS: 120.0120, 120.4570, 120.6200.

Поступила в редакцию 31.07.2008.

Введение

В исследованиях плазмы и возбужденных газовых сред широко используется метод измерения концентраций возбужденных атомов или молекул по интенсивности эмиссионных спектральных линий или полос. Концентрации излучающих молекул N определяются из выражения, описывающего сигнал фотодетектора, регистрирующего мощность излучения в спектральной линии или полосе

$$I(\nu) = C(\nu)A(\nu)N(1/4\pi) \int \Omega(x, y, z) dV,$$

где $C(\nu)$ – спектральная чувствительность спектрометрической системы с фотодетектором, $A(\nu)$ – коэффициент Эйнштейна перехода, дающего данную спектральную линию, Ω – телесный угол, который задает попадающую в регистрирующую систему часть из всего излучения, испускаемого элементом объема в угол 4π . Интегрирование проводится по всему объему V вырезаемой диафрагмами области, излучение из которой попадает в поле зрения регистрирующей системы. Здесь предполагается, что исследуемая среда оптически тонкая, то есть поглощение излучения на длине излучающего объема пренебрежимо мало. Кроме того, предполагается, что объем заполнен излучающими молекулами однородно.

Угол Ω задается видимой из излучающей точки площадью входной апертуры конденсора, фокусирующего свет на входную щель спектрометра. Эта входная апертура ограничивается соответствующей диафрагмой D_1 . Размер области, излучение из которой попадает в систему регистрации, обычно ограничивают также и диафрагмой D_2 , установленной перед диагностируемой средой. В монографии [1], например, одним из условий для абсолютных измерений названо, что излучающий объем “может счи-

таться точечным источником, т. е. что все его элементы дают одинаковый вклад в регистрируемый сигнал”.

Величину, получаемую интегрированием телесного угла Ω по всему излучающему объему V , можно понимать как соответствующий эффективный объем

$$V_e = 1/4\pi \int \Omega(x, y, z) dV. \quad (1)$$

Формально – это произведение объема, вырезаемого из всей исследуемой среды диафрагмами, на усредненную по этому объему долю излучения, попадающую на фотодетектор. Эта доля есть отношение усредненного по объему телесного угла $\langle \Omega(r, z) \rangle$ к полному телесному углу 4π . По физическому смыслу V_e – это объем, испускающий в полный телесный угол 4π поток излучения, равный потоку, попадающему на фотодетектор из всего исследуемого объема.

Там, где это возможно, величину V_e определяют экспериментально, используя для эталона газ с известной концентрацией N^* . Особенно удобна калибровка, когда эталон содержит частицы того же типа, что и исследуемые: тогда одновременно определяются и коэффициенты $C(\nu)$, и $A(\nu)$. Но нередко значение V_e требуется определить расчетом, так как невозможно создать известную концентрацию N^* и провести по ней калибровку.

Определяемый апертурными диафрагмами D_1 и D_2 излучающий объем в осесимметричном случае вырезается поверхностью цилиндрической или конической формы. Его центральная часть ограничена радиальным размером $r_c(z)$

$$r_c(z) = a_2 - z(a_1 - a_2)/L, \quad (2)$$

где a_1 и a_2 – радиусы диафрагм D_1 и D_2 , z – координата вдоль оси системы, отсчитываемая от ближайшей к излучаемой области диафрагмы D_2 , L – рас-

стояние между диафрагмами D_1 и D_2 . Когда протяженность излучающего объема вдоль оси невелика, излучающий объем определяется этой центральной частью, и величина V_e находится простым интегралом

$$V_e = \frac{1}{4\pi} \int_{z_1}^{z_2} \Omega_c dV = \frac{\pi}{4} a_1^2 \int_{z_1}^{z_2} \left(\frac{r_c(z)}{z+L} \right)^2 dz, \quad (3)$$

где z_1 и z_2 – расстояния по оси от диафрагмы D_2 до начала и до конца излучающей среды. Так, при равных радиусах диафрагм $a_1 = a_2$ размер $r_c = a_1$, и из (2) получается

$$V_e = \frac{\pi}{4} \frac{a_1^4 (z_2 - z_1)}{(z_1 + L)(z_2 + L)}.$$

Выражение (3) справедливо только при малой протяженности вдоль оси излучающего объема $dz = z_2 - z_1 \leq a_2$. Более точный критерий будет нетрудно сформулировать из дальнейшего.

Исследуемый объем среды часто делают по возможности большим для того, чтобы увеличить поток регистрируемого излучения. Это не только желательно, но бывает и необходимым при низких интенсивностях эмиссии. Для увеличения мощности потоков и, соответственно, регистрируемых сигналов, увеличивают протяженность объема вдоль оси системы, то есть размер $z_2 - z_1$. При протяженном объеме выражение (3) становится несправедливым. Помимо центральной части объема, описываемой выражением (3), в таком случае значительный вклад дает периферийная область, которая экранируется диафрагмой D_2 в разной степени для различных ее частей.

Вывод соответствующих формул требует рассмотрения геометрической задачи и приводит к более сложным, чем (3), выражениям, требующим численного интегрирования. Несмотря на очевидную потребность, необходимых формул для расчета V_e протяженных излучающих объемов в литературе не представлено [2, 3].

В данной работе представляется вывод соответствующих выражений. Показан также пример расчета, иллюстрирующий большой относительный вклад периферийных областей в случае, когда излучающий объем среды имеет значительную протяженность.

Вывод формул для расчета

Будем определять эффективный объем V_e для осесимметричной системы. Схема расположения элементов, определяющих различные области излучающего объема, и соответствующие обозначения

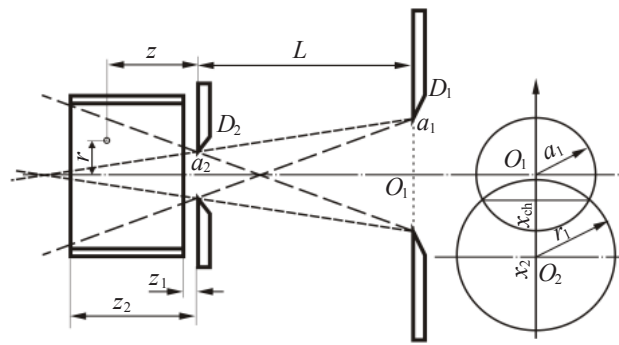


Рис. 1. К расчету эффективного излучающего объема V_e – схема расположения элементов, границ центральной и периферийной областей, пересечения отверстия диафрагмы D_1 и проекции на нее диафрагмы D_2 .

показаны на рис. 1. Протяженность излучающего объема считаем достаточно большим, таким, что его размер по координате вдоль оси системы больше или порядка характерного радиуса области среды, вырезаемой ограничивающими диафрагмами.

Весь объем, излучение из которого попадает в регистрирующую систему, складывается из двух составляющих частей – центральной и периферийной. Центральная область ограничивается конической поверхностью, образующая которой – прямая, проведенная через точки A и B на верхних краях диафрагм D_1 и D_2 . Периферийная область ограничена названной конической поверхностью, которая для нее внутренняя, и второй – внешней конической поверхностью, образующая которой, проходит через точку A на верхнем краю диафрагмы D_2 и точку C на нижнем краю диафрагмы D_1 .

Радиус границы $r_c(z)$ центральной области определяется выражением (2). Для периферийной области радиус ее внутренней границы – $r_c(z)$, а внешней

$$r_p = a_2 + z(a_1 + a_2)/L. \quad (4)$$

Телесный угол Ω_c , которым ограничена часть от всего излучаемого элементом объема потока излучения, попадающая в регистрирующую систему, для элементов центральной области составляет

$$\Omega_c(z) = \pi a_1^2 / (z + L)^2. \quad (5)$$

Здесь пренебрегается малыми изменениями расстояний и углов для элементов объема с различными радиальными координатами при фиксированной координате z . Предполагается также, что, как в большинстве практических случаев, наибольшая координата z_{\max} излучающей области не превышает величины $a_2 L / (a_1 - a_2)$, при которой образующая ко-

нической поверхности, ограничивающей центральную область, пересекает ось системы. (В случае, если $z_{\max} \geq a_2 L / (a_1 - a_2)$, телесный угол для центральной области задается площадью диафрагмы D_2 , а не D_1 , как в (4)). Вклад, который вносится в эффективный объем центральной областью описывается выражением (3).

Телесный угол Ω_p для элементов объема периферийной области задается площадью пересечения отверстия диафрагмы D_1 и проекции на нее отверстия диафрагмы D_2 . Схема, поясняющая форму этой площади пересечения, показана в правой части рис. 1. По координате x с началом $x = 0$ в центре окружности D_1 центр проекции окружности D_2 смещен в точку

$$x_2 = -rL/z, \quad (6)$$

где r, z – координаты рассматриваемого элемента излучающей области. Проекция отверстия D_2 на плоскость диафрагмы D_1 имеет форму круга. В этом нетрудно убедиться, заметив, что эта проекция образуется сначала преобразованием круга в эллипс, а затем обратно – эллипса в круг. На плоскость, перпендикулярную оси, проходящую из текущей излучающей точки с координатами (r, z) в центр проекции x_2 , окружность D_2 проектируется в эллипс умножением на косинус угла наклона оси. Затем на плоскость диафрагмы D_1 этот эллипс дает проекцию делением на косинус того же угла наклона, и тем самым преобразуется снова в окружность. Радиус окружности проекции

$$r_2 = a_2(1 + L/z). \quad (7)$$

Область пересечения двух кругов радиусом a_1 и r_2 представляет собой сумму двух сегментов. Площадь этой области, определяющая телесный угол, можно рассчитать, определив координату хорды x_{ch} , соединяющей две точки пересечения окружностей: окружности D_1 и проекции окружности D_2 . Координата x_{ch} определяется системой уравнений, описывающих эти окружности

$$\begin{cases} x^2 + y^2 = a_1^2 \\ [x + r(L/z)]^2 + y^2 = a_2^2(1 + L/z)^2, \end{cases}$$

из решения которой находим

$$x_{ch} = \frac{z}{2rL} [a_2^2(1 + L/z)^2 - a_1^2] - rL/2z. \quad (8)$$

Для малой окружности площадь сегмента, влево от хорды, равна [4]

$$S_1(r, z) = \frac{\pi a_1^2}{2} + \left[x_{ch} \sqrt{a_1^2 - x_{ch}^2} + a_1^2 \arcsin(x_{ch}/a_1) \right]. \quad (9)$$

Для большей окружности координата хорды равна $x_{ch} - x_2$, где величины из (7) и (8). Площадь сегмента (вправо от хорды) описывается, аналогично (10), выражением

$$S_2(r, z) = \frac{\pi r_2^2}{2} - \left((x_{ch} - x_2) \sqrt{r_2^2 - (x_{ch} - x_2)^2} + r_2^2 \arcsin \frac{x_{ch} - x_2}{r_2} \right). \quad (10)$$

Область пересечения наклонена к оси, проведенной из текущей точки в центр окружности D_1 , под углом α , для которого: $\operatorname{tg} \alpha = r/(z + L)$. Расстояние R_b от текущей точки (z, r) до этого центра и соответствующий телесный угол Ω_p составляют

$$R_p(r, z) = \sqrt{r^2 + (z + L)^2}, \quad \Omega_p(r, z) = \frac{(S_1 + S_2) \cos \alpha}{R_p^2} = \frac{(S_1 + S_2)}{R_p^2 \sqrt{1 + r^2/(z + L)^2}}. \quad (11)$$

Выражение для телесного угла (11) является более точным, чем (5), и для центральной области, для которой $S_1 + S_2 = \pi a_1^2$. Из (11) видно, что выражение (5) получается из (12) пренебрежением в R_p и $\cos \alpha$ величинами $r^2/(z + L)^2$ по сравнению с 1.

Эффективный объем, который дает периферийная область

$$V_e^p = \frac{1}{4\pi} \int_{z_1}^{z_2} dz \int_{r_c}^{r_p} \Omega_p 2\pi r dr, \quad (12)$$

нетрудно рассчитать численным интегрированием, где граничные радиусы даются выражениями (2) и (4). Таким образом, формулу для расчета эффективного объема можно записать в виде

$$V_e = V_e^c + V_e^p = \frac{\pi a_1^2 a_2^2}{4 L^2} \int_{z_1}^{z_2} \left(1 - \frac{a_1}{a_2} \frac{z}{z + L} \right)^2 dz + \frac{1}{2} \int_{z_1}^{z_2} dz \int_{r_c}^{r_p} \frac{S_1(r, z) + S_2(r, z)}{(r^2 + (z + L)^2) \sqrt{1 + r^2/(z + L)^2}} r dr, \quad (13)$$

где величины $S_1(r, z)$, $S_2(r, z)$, $r_c(z)$ и $r_p(z)$ даются выражениями (10), (11), (2) и (4).

Относительный вклад периферийной области

Проиллюстрируем количественным примером относительные вклады различных участков периферийной и центральной областей для случая, когда исследуемая излучающая среда берется достаточно протяженной. На рис. 2 показаны результаты расчета для системы со следующими параметрами:

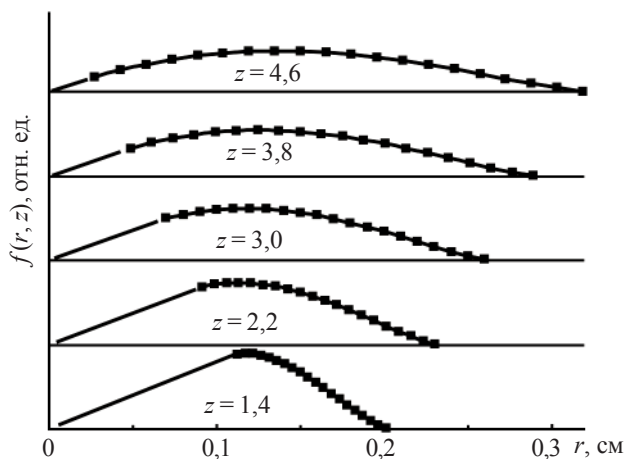


Рис. 2. Доля элементарного объема $f(r, z)$ от общего эффективного излучающего объема V_e . (Элементарный объем здесь – кольцо единичной ширины по радиусу и длины вдоль оси). Координата слоя z (расстояние от диафрагмы D_2 до слоя) указана под кривыми. Сплошные линии – центральная область, точки – периферийная область.

$z_1 = 1$ см, $z_2 - z_1 = 4$ см, $a_1 = 0,15$ см, $a_2 = 1$ см, $L = 30$ см. На рисунке представлены значения подынтегральной функции $f(r, z) = \Omega(r, z)2\pi r$, описываю-

щей выражение (13) в форме $V_e = \int_{z_1}^{z_2} dz \int_0^{r_p} f(r, z) dr$.

Функция $f(r, z)$ непосредственно показывает тот вклад, который вносится в суммарный эффективный объем V_e отдельным элементом объема в виде кольца единичной ширины по радиусу и длины вдоль оси. Рисунок показывает распределения $f(r, z)$ по радиальной координате r для нескольких слоев с различными координатами z .

Как видно из рис. 2, по мере увеличения координаты z (удаления от входной плоскости D_1 элементарного слоя шириной dz) относительный вклад пе-

риферийной области быстро увеличивается. Для данного примера с размером исследуемой среды вдоль оси 4 см общий эффективный излучающий объем в 2,3 раза больше объема, определяемого центральной областью.

Заключение

Выведены формулы для расчета эффективного излучающего объема, требующегося для определения концентрации возбужденных частиц по измеренной интенсивности спектральной линии эмиссионного излучения. Формулы позволяют рассчитывать эффективный объем и в том случае, когда исследуемая область излучающей среды имеет не малую протяженность вдоль оси. Весь объем, излучение из которого попадает в регистрирующую систему, складывается из двух частей – центральной и периферийной. Когда в эксперименте размер диагностируемой области вдоль оси не мал, вклад периферийной части в общее значение эффективного объема становится значительным и его необходимо учитывать. Расчетами для исследуемого объема с размерами, типичными для эксперимента, показано, что этот вклад может быть сравнимым или превосходить вклад соответствующей центральной области.

ЛИТЕРАТУРА

1. Очкин В.Н. Спектроскопия низкотемпературной плазмы. М.: Физматлит, 2006. 472 с.
2. Зайдель А.Н., Островская Г.Н., Островский Ю.И. Техника и практика спектроскопии. М.: Наука, 1976. 392 с.
3. Лебедева В.В. Техника оптической спектроскопии. М.: изд-во МГУ, 1986. 352 с.
4. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1977. 831 с. (Korn G.A., Korn T.M. Mathematical Handbook for Scientists and Engineers. New York: McGraw-Hill Book Company, 1968).