

DOI: <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2021.11.6>

УДК: 534.63, 535.33

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДУЛЯЦИОННОЙ АКУСТООПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МЕСТОПОЛОЖЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ В ПЕРЕКРЫВАЮЩИХСЯ СПЕКТРАХ

С. В. Боритко, С. И. Иванов, А. В. Карандин

Научно-технологический центр Уникального приборостроения РАН, 117342, г. Москва,  
ул. Бутлерова, д.15

Статья поступила в редакцию 23 ноября 2021

**Аннотация.** Спектрометр не способен безошибочно определить спектральные положение меньшего максимума, если он расположен на фоне мощного широкого пика. Решение проблемы известно: достаточно продифференцировать имеющуюся зависимость, и положение меньшего пика определяется с достаточной точностью. На базе квазилинейной акустооптической ячейки был создан макет спектрометра, позволяющего регистрировать как спектр оптического сигнала, так и его производную, причем в реальном масштабе времени. В ходе проведения работ было проведено более детальное исследование работы созданного макета: программно менялась величина фазового сдвига от 0 до 360°, а пространственный период модуляции – от 0 до длины АО ячейки  $L$ . В качестве источника излучения использовалась неоновая лампа и все приведенные данные были получены для одной и той же линии излучения. Максимальный сигнал для производной соответствует значениям фазы 90° и 270°. В другой серии экспериментов была исследована работа макета при изменении периода модуляции (фазовый сдвиг фиксирован,  $\psi = \pi/2$ ). Максимальный сигнал для производной соответствует значениям длительности периода модуляции равной  $L/2$ , т.е. половине длины акустооптической ячейки. Графики результатов “физического” и “математического” дифференцирования не совпадают. Мы предполагаем, что различия связаны с формой аппаратной

функции акустооптического спектрометра. Однако, на вершинах спектральных пиков, т.е. в районах пересечения производных с нулевой линией результаты совпадают, что позволяет использовать акустооптическое дифференцирование для выявления "тонкой структуры" оптических спектров, причем в реальном масштабе времени. Таким образом, в результате проведенных работ: предложен метод точного определения положения спектральных максимумов в сложных перекрывающихся спектрах в реальном масштабе времени; создана приборная реализация предложенного метода и показано, что для видимого диапазона (532 нм) точность определения спектрального положения максимумов составляет 0,2 нм.

**Ключевые слова:** спектрометр, спектральное положение, акустооптическая ячейка, неоновая лампа, акустооптическое дифференцирование, тонкая структура, перекрывающиеся спектры.

**Abstract.** The spectrometer is not able to accurately determine the spectral position of the smaller maximum if it is located against the background of a powerful broad peak. The solution of the problem is known it is enough to differentiate the existing dependence, and the position of the smaller peak is determined with sufficient accuracy. Based on a quasi-collinear acousto-optic (AO) cell, a prototype spectrometer was created, which makes it possible to record both the spectrum of the optical signal and its derivative in real time. In the course of the work, more detailed research of the work of the created model was carried out: the value of the phase shift was changed programmatically from zero to  $360^\circ$ , and the spatial modulation period - from zero to the length of the AO cell  $L$ . A neon lamp and all the data presented were used as a radiation source, were obtained for the same emission line. The maximum signal for the derivative corresponds to the phase values of  $90^\circ$  and  $270^\circ$ . In another series of experiments, the work of the model was investigated with a change in the modulation period (the phase shift is fixed,  $\psi=\pi/2$ ). The maximum signal for the derivative corresponds to the values of the modulation period duration equal to  $L/2$ , half the length of the acousto-optic cell. The graphs of the results of "physical" and "mathematical" differentiation do not coincide. We assume that the differences are related to the shape

of the instrumental function of the acousto-optical spectrometer. However, at the tops of the spectral peaks, in the regions of intersection of derivatives with a zero line, the results coincide, which makes it possible to use acousto-optic differentiation to reveal the "fine structure" of optical spectra, and in real time. Thus, as a result of the work carried out: a method was proposed for the precise determination of the position of spectral maxima in complex overlapping spectra in real time; an instrumental implementation of the proposed method was created, and it was shown that for the visible range (532 nm) the accuracy of determining the spectral position of the maxima is 0.2 nm.

**Key words:** spectrometer, spectral position, acousto-optic cell, neon lamp, acousto-optic differentiation, fine structure, overlapping spectra.

### **Введение.**

Одним из способов выявления тонкой структуры оптических спектров является метод производной спектрометрии, основанный на непосредственном измерении частотной зависимости оптической плотности многокомпонентных образцов, обладающих сильным затуханием (так называемых "мутных жидкостей") с последующим математическим сглаживанием и дифференцированием. Однако, искажения в производных спектров, вносимые различными процедурами их вычисления, могут приводить к неверной интерпретации результатов, а учет этого обстоятельства весьма усложняет процедуру вычислений и снижает достоверность получаемых результатов. С другой стороны, развитие методов анализа оптических спектров, безусловно, представляет значительный интерес для широкого круга исследователей в области молекулярной спектрометрии, аналитической химии, биофизики и биохимии. В работе рассмотрен другой путь, основанный на методе модуляционной акустооптической спектрометрии, который основан на применении не вычислительных методов, а методов, связанных с непосредственным измерением производных спектра. В этом случае отпадает

вопрос о возможном искажении (или потере) спектральной информации при предварительном «сглаживании» перед процедурой дифференцирования.

## 1. Постановка задачи

Основной задачей спектрометрии является точное определение положения спектральных составляющих спектра. Часто встречаемая ситуация состоит в том, что в спектре на фоне мощного широкого пика расположен более узкий и менее мощный пик. В этом случае, как показано на рис. 1, какой бы точный спектрометр ни использовался измерение спектрального положения меньшего максимума происходит с существенной ошибкой.

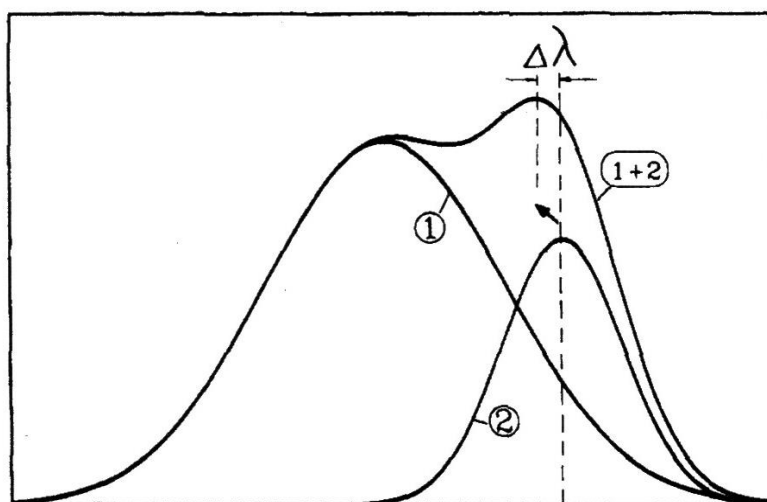


Рис. 1. Один пик на фоне другого.

Оценим величину возможной ошибки  $\Delta\lambda$  при измерении положения меньшего пика в разных ситуациях. Очевидно, что если положения максимумов пиков совпадают, то ошибки в измерении нет. Если максимум меньшего пика расположен на краю большого пика, то влияние последнего незначительно, и ошибка в измерении меньшего максимума также отсутствует. Однако, между этими ситуациями, как это показано на рис. 1, ошибка в измерении положения меньшего максимума существует.

На рис. 2 (а) для примера приведены три ситуации и показаны ошибки в измерении положения меньшего пика. На рис. 2 (б) представлен график зависимости ошибки измерения положения меньшего пика  $\Delta\lambda$  (в относительных

единицах) в зависимости от отстройки положения меньшего максимума относительно большего максимума (0 по оси абсцисс соответствует ситуации, когда максимумы совпадают, а 1 – меньший максимум «вышел» за ширину большего).

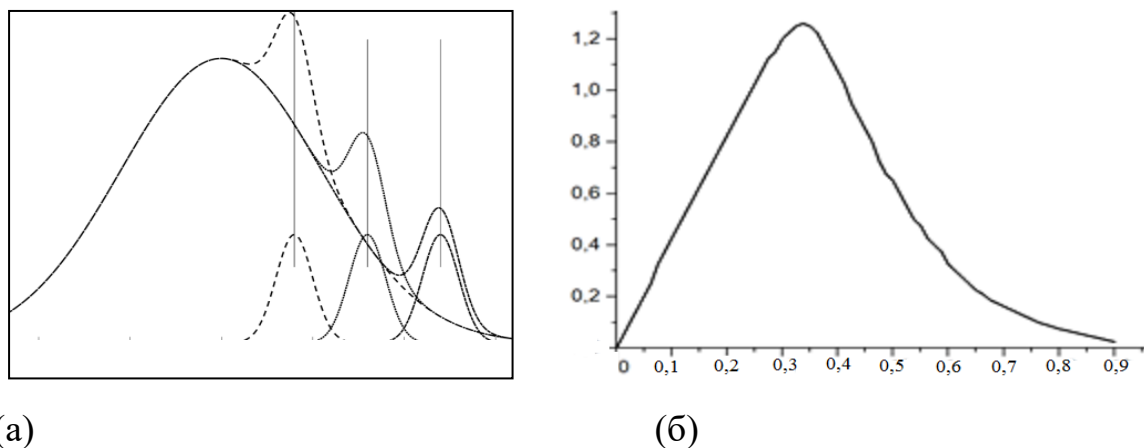


Рис. 2. Зависимости ошибки измерения положения меньшего пика  $\Delta\lambda$  (в относительных единицах) в зависимости от отстройки положения меньшего максимума относительно большего максимума.

Определенный интерес представляет зависимость ошибки  $\Delta\lambda$  от ширины меньшего пика. Ведь если меньший пик представляет собой дельта функцию, то ошибки в измерении его положения быть не может. С другой стороны, если ширина меньшего пика совпадает с шириной большего, то он просто не выделяется как второй максимум и говорить об ошибке его измерения бессмысленно. На рис. 3 представлены картинки трех ситуаций, когда меньший пик имеет разную ширину и график зависимости ошибки  $\Delta\lambda$  от отношения полуширины меньшего пика к полуширине большего в точке положения меньшего пика, соответствующей максимальной ошибке (см. рис. 2 (б)).

Оценим величину максимальной ошибки  $\Delta\lambda$  для видимого диапазона длин волн в районе зеленого света (532 нм) и полуширины большего пика порядка 20 нм. В этом случае ошибка достигает 2-х нм. Много это или мало?

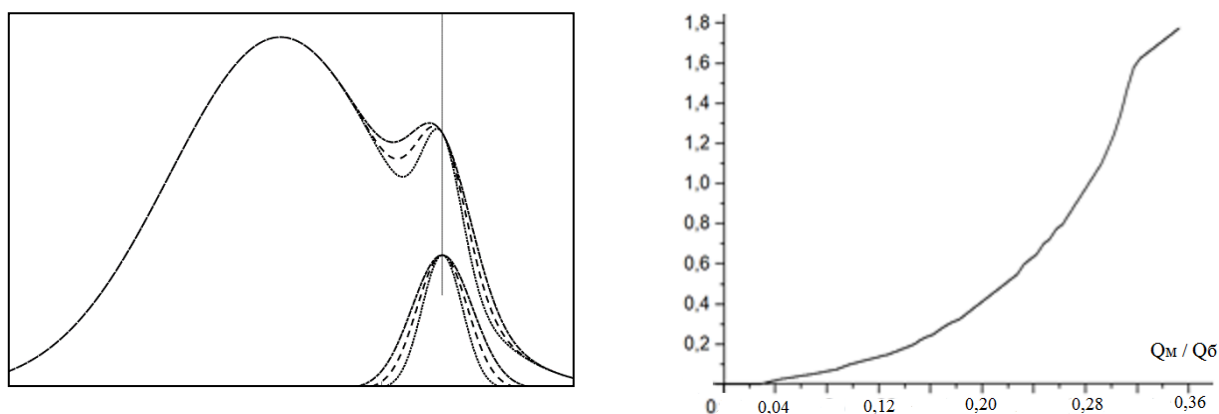


Рис. 3. Зависимость ошибки измерений положения меньшего пика в зависимости от его ширины.

На рис. 4 приведена аппаратная функция двойного акустооптического монохроматора, разработанного и выпускаемого в НТЦ Уникального приборостроения РАН. Видно, что при подавлении вне полосы пропускания в 50 дБ полуширина главного максимума составляет 2 ангстрема, т.е. 0,2 нм.

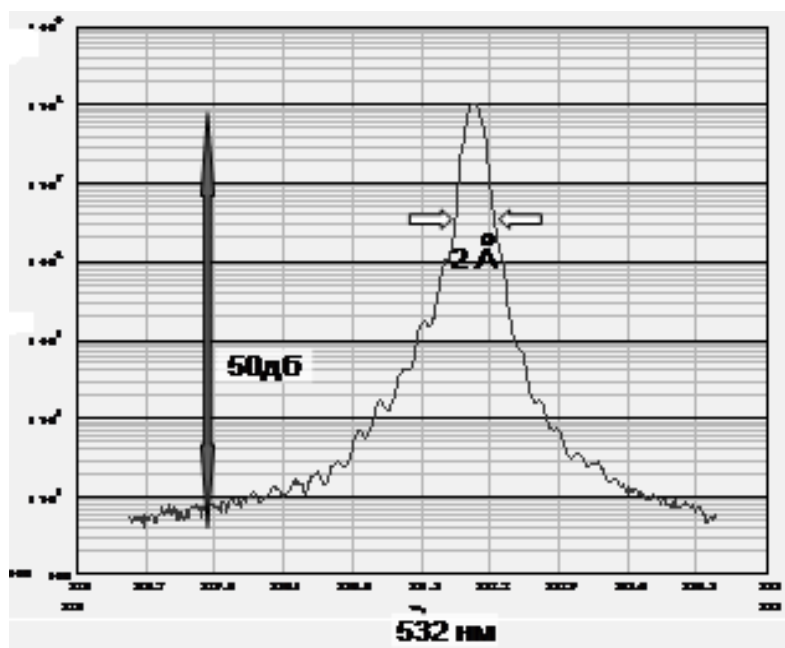


Рис. 4. Аппаратная функция двойного акустооптического монохроматора, разработанного в НТЦ Уникального приборостроения РАН.

Можно положить, что для достоверного различия двух близко расположенных пиков необходимо, чтобы они последовательно попадали в соседние главные максимумы функции пропускания спектрометра при сканировании по спектру, когда они перекрываются на уровне  $\sqrt{2}$  высоты. Это как раз и будет соответствовать разрешению 0,2 нм, что в 10 раз меньше возможной ошибки  $\Delta\lambda$ . Таким образом, исследование возможности повышения

точности определения действительного положения спектральных линий в перекрывающихся спектрах является достаточно актуальной.

Решение данной проблемы известно, достаточно продифференцировать имеющуюся зависимость и, как это показано на рис. 5, положение меньшего пика определяется с достаточной точностью. Этот способ широко используется в молекулярной спектроскопии и аналитической химии при исследовании мутных жидкостей и сложных растворов [1, 2, 3]. Как уже отмечалось ранее, процедура заключается в измерении частотной зависимости спектральной плотности образца, затем сглаживании (удаление шумовой составляющей) и последующее дифференцирование результата.

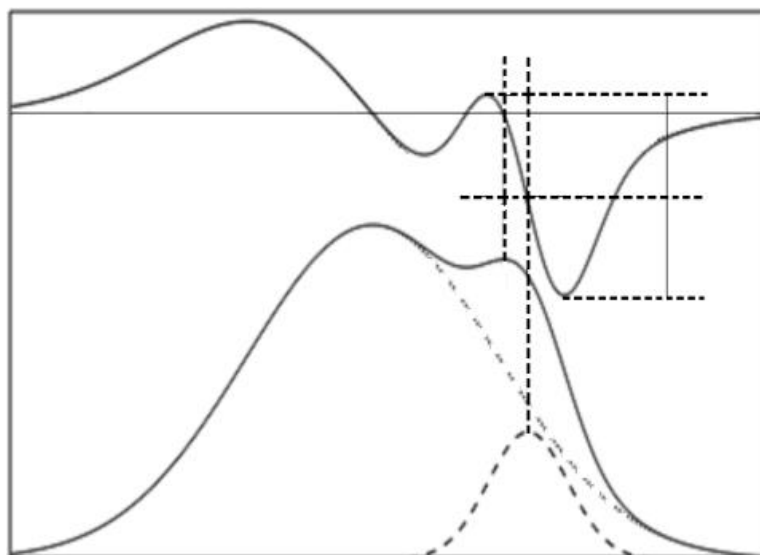


Рис. 5. Результат дифференцирования пересекающихся спектральных линий.

Следует отметить, что на современном этапе возникает все больше задач, которые требуют получения результата в процессе исследования, чтобы иметь возможность влиять на его ход. Математика этого не позволяет, так как для сглаживания надо иметь всю характеристику.

## **2. Возможность дифференцирования оптического сигнала при акустооптическом взаимодействии**

В работах [4, 5] теоретически была показана возможность непосредственной регистрации спектра оптического излучения и его производных в процессе проведения измерений. В основе этой возможности лежит акустооптическая дифракция на фазовой решетке, созданной

акустической волной с резкой периодической модуляцией фазы, как это показано на рис. 6. Рассмотрим характеристики акустооптического фильтра при такой модуляции.

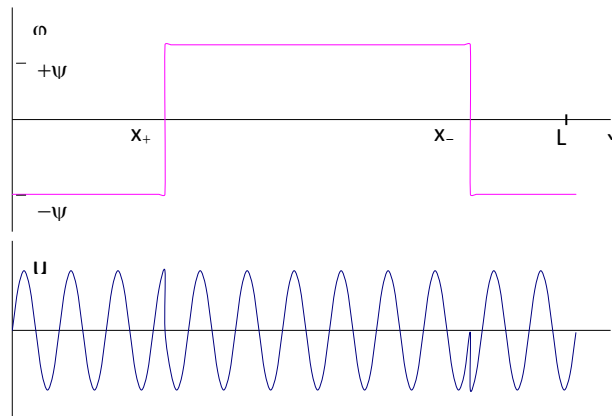


Рис. 6. Мгновенное распределение по длине АО кристалла фазы и упругих напряжений бегущей звуковой волны.

Положив для определенности, что период модуляции равен времени пробега звука ( $t_m = t_{пр}$ ), запишем амплитуду сигнала как:

$$A(\tau) = a_0 \exp(i\varphi(\tau)), \quad (1)$$

где фазовая функция имеет вид 
$$\varphi(\tau) = \begin{cases} +\varphi, n - \frac{1}{2} \leq \tau \leq n \\ -\varphi, n \leq \tau \leq n + \frac{1}{2} \end{cases}$$

Дифракцию на модулированной подобным образом акустической волне можно рассматривать как последовательную дифракцию на отдельных однородных участках фазовой решетки: от 0 до  $x_+$ ; от  $x_+$  до  $x_-$ ; от  $x_-$  до  $L$ , где  $L$  – длина акустооптической ячейки. На каждом из участков коэффициент передачи световой волны по амплитуде представляется в виде комплекснозначной матрицы  $T(x, x+y)$  с компонентами:

$$T_{11} = e^{i\delta y} [\cos(\rho y) - i(\delta/\rho) \sin(\rho y)] \quad T_{12} = i(\Gamma/\rho) e^{i\delta(2x+y)} \sin(\rho y) \quad (2)$$

$$T_{21} = i(\Gamma^*/\rho) e^{-\delta(2x+y)} \sin(\rho y) \quad T_{22} = e^{-i\delta y} [\cos(\rho y) + i(\delta/\rho) \sin(\rho y)] \quad (3)$$

которые являются решениями системы уравнений связанных волн. Здесь  $\Gamma$  – комплексный коэффициент связи, включающий фазу акустической волны,  $\delta = \chi/(2L)$ ,  $\rho = (\Gamma^2 + \delta^2)$ .

Мгновенная функция пропускания акустооптического фильтра (по интенсивности) в данном случае дается недиагональным членом



«результатирующей» матрицы, являющейся произведением трех отдельных матриц с соответствующей фазой  $+\psi$ ,  $-\psi$ :

$$T_{12}(0,L)^2 = \sum_{i,j=1,2} \left| T_{1j}^{-\varphi}(0, x_+(t)) T_{ji}^{\varphi}(x_+(t), x_-(t)) T_{i2}^{-\varphi}(x_-(t), L) \right|^2 \quad (4)$$

Выражения аппаратных функций для основного сигнала и первой гармоники имеют вид:

$$S_0 = \left( \frac{\Gamma}{\rho} \right)^2 \left\{ \sin^2(L\rho) + 2 \sin^2 \psi \left[ 1 + \left( \frac{\delta}{\rho} \right)^2 - 4 \frac{\sin(L\rho)}{L\rho} + \left( \frac{\Gamma}{\rho} \right)^2 \left( \cos \psi + \frac{\sin(L\rho)}{L\rho} \right) + \frac{1}{4} \left( \frac{\Gamma}{\rho} \right)^4 \left( 2 + \cos^2(L\rho) - \frac{\sin(L\rho)}{L\rho} \right) \right] \right\} \quad (5)$$

$$S_1 = 8 \left( \frac{\Gamma}{\rho} \right)^2 \frac{\delta \sin(L\rho/2)}{\rho L\rho/2} \sin \psi \left\{ \frac{\sin(L\rho)}{L\rho} \left[ 2 \cos \psi - \left( \frac{\Gamma}{\rho} \right)^2 \sin^2 \psi \right] \int_0^{1,2} \sin(L\rho\tau) \sin(\pi\tau) d\tau + 2 \left( \frac{\Gamma}{\rho} \right)^2 \frac{\sin(L\rho/2)}{L\rho/2} \sin^2 \psi \int_0^{1,2} \sin(L\rho\tau) \sin(\pi\tau) d\tau \right\} \quad (6)$$

На рис. 7 приведены графики аппаратных функций для основного сигнала и первой гармоники акустооптического фильтра при резком переключении фазы управляющего сигнала. Из графиков видно, что для первой гармоники функция является знакопеременной, что может позволить регистрацию производной спектра.

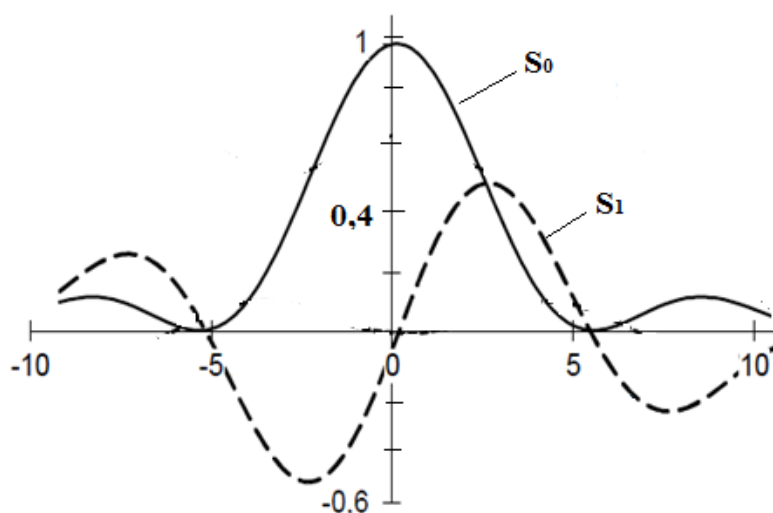


Рис. 7. Аппаратные функции акустооптического фильтра при модулированной акустической волне ( $S_0$  - основной сигнал,  $S_1$  - гармоника).

### 3. Аппаратурно-программное обрамление исследования

В НТЦ Уникального приборостроения РАН на базе квазиколлинеарной акустооптической ячейки был создан макет спектрометра, позволяющего регистрировать производные оптических спектров. Его принципиальная схема приведена на рис. 8.

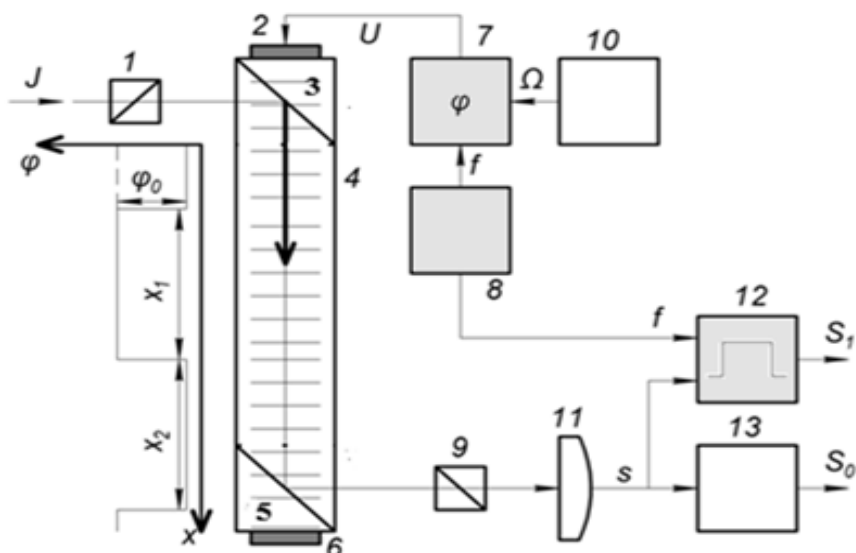


Рис. 8. Принципиальная схема макета акустооптического спектрометра с резкой модуляцией фазы управляющего сигнала (1 – поляризатор; 2 – пьезопреобразователь; 3, 5 – светоделительные призмы, имеющие отражательную плоскость; 4 – акустооптический кристалл; 6 – звукопоглотитель; 7 – высокочастотный фазовращатель; 8 – генератор частотной модуляции; 9 – анализатор; 10 – высокочастотный генератор; 11 – фотоприемник; 12 – синхронный детектор; 13 – интегратор).

Макет состоит из акустооптического спектрометра с резкой модуляцией фазы управляющего сигнала и компьютера, который с помощью специализированной программы, обеспечивает управление параметрами и режимом работы спектрометра, контроль его состояния, а также графическое отображение, обработку и сохранение данных. Собственно, спектрометр включает в себя оптический модуль, модуль обработки сигнала, модуль выработки управляющего сигнала и модуль управления спектрометром.

Оптический модуль состоит из акустооптического монохроматора, входного адаптера под световолоконный кабель, фотоприемника (ФЭУ) и вспомогательной оптики. В качестве монохроматора был использован уже готовый узел от акустооптического спектрометра комбинационного рассеяния,

который «хорошо» зарекомендовал себя в работах по диагностике драгоценных камней в ювелирных изделиях.

Разработанный модуль выработки управляющего сигнала включает в себя программируемое высокочастотное устройство для синтеза управляющего сигнала с требуемыми характеристиками. Модуль обработки сигнала представляет собой фазочувствительное устройство для выделения различных частотных составляющих фототока ФЭУ и его предварительной обработки и оцифровки. Этот модуль синхронизован с модулем выработки управляющего сигнала.

Модуль управления спектрометром представляет собой одноплатный компьютер и плату контроллера, а также другие вспомогательные элементы (в частности, блоки питания). Этот модуль обеспечивает выработку управляющих сигналов для всех блоков в соответствии с заданием, поступающим с внешнего компьютера, и передачу данных на внешний компьютер.

Внешний вид макета, собранного в корпусе персонального компьютера приведен на рис. 9.



Рис. 9. Внешний вид созданного макета акустооптического спектрометра (без кожуха и в собранном состоянии).

#### **4. Экспериментальное исследование возможности регистрации производных оптического излучения**

В качестве тестового эксперимента была произведена регистрация излучения неоновой лампы, имеющей, как известно, линейчатый спектр. На рис. 10 показан участок зарегистрированного спектра, а также его первой производной. Из графика видно, что созданный макет модуляционного

акустооптического спектрометра довольно эффективно регистрирует как спектр оптического сигнала, так и его производную, причем в реальном масштабе времени (см. рис. 11) - слева присутствуют как сигнал спектра, так и его производной; справа сигналов нет.

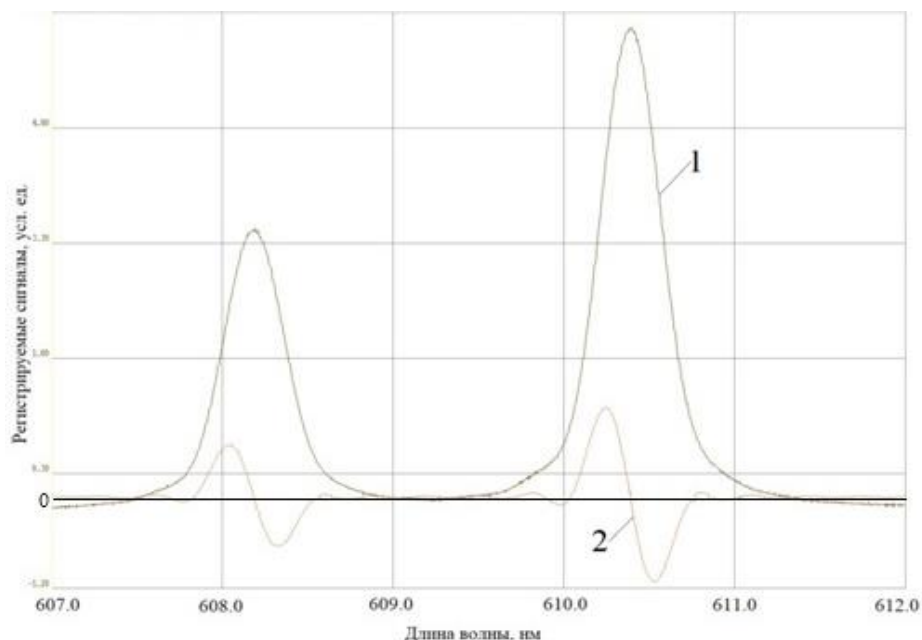


Рис. 10. Часть спектра неоновой лампы, зарегистрированная макетом модуляционного акустооптического спектрометра (1 – основной сигнал, 2 – его производная).

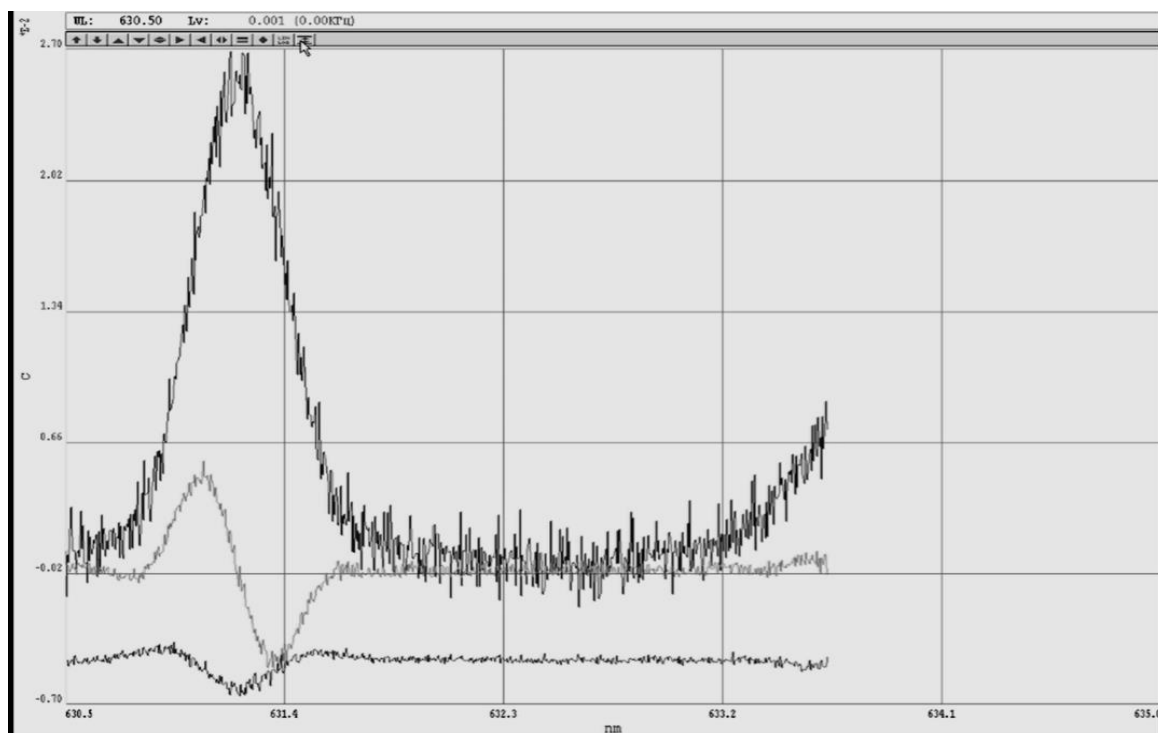


Рис. 11. Скан с экрана регистрирующей системы макета модуляционного акустооптического спектрометра.

В ходе проведения работ было проведено более детальное исследование работы созданного макета: программно менялась величина фазового сдвига от 0 до  $360^\circ$ , а пространственный период модуляции – от 0 до длины АО ячейки  $L$ . В качестве источника излучения использовалась неоновая лампа и все приведенные ниже данные были получены для одной и той же линии излучения.

На рис. 12 приведены результаты исследований зависимости регистрируемой первой производной спектра при разных значениях фазы в зависимости от управляющей частоты (т.е. частоты, подаваемой на акустооптическую ячейку для возбуждения акустической волны). Видно, что максимальный сигнал для производной соответствует значениям фазы 900 и 2700, как это и предсказывает теория. В другой серии экспериментов была исследована работа макета при изменении периода модуляции (фазовый сдвиг фиксирован,  $\psi = \pi/2$ ). Из приведенных на рис. 13 зависимостей видно, что максимальный сигнал для производной соответствует значениям длительности периода модуляции равной  $L/2$ , т.е. половине длины акустооптической ячейки, что соответствует, приведенной в разделе 2, теории.

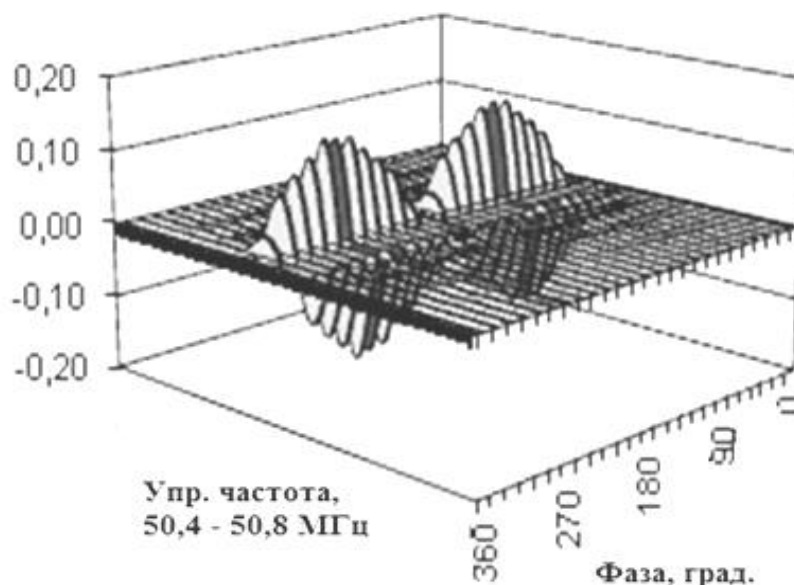


Рис. 12. Спектральная зависимость (как функция управляющей частоты) сигнала макета спектрометра в каналах регистрации первой гармоники при измерении спектра одной линии неоновой лампы при разных значениях скачка фазы  $\psi$ .

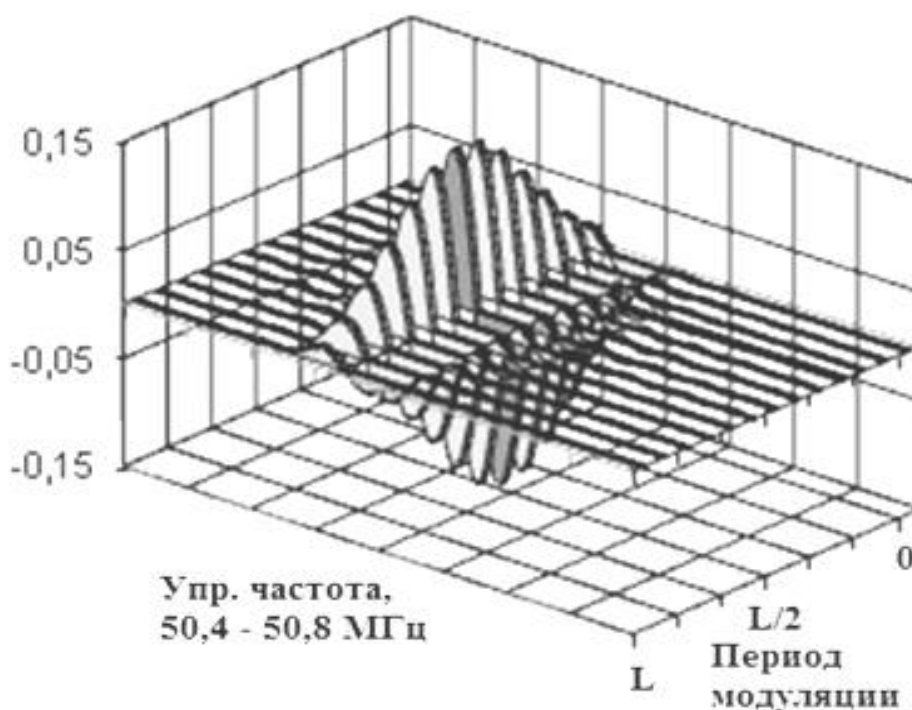


Рис. 13. Зависимость сигнала первой (а) и «нулевой» гармоники (б) макета спектрометра от управляющей частоты при измерении спектра одиночной линии неоновой лампы при разных значениях периода модуляции.

### Заключение.

Осталось выяснить насколько "физическая" производная, т.е. производная, зафиксированная макетом модуляционного акустооптического спектрометра, совпадает с "математической", рассчитанной из частотной зависимости спектральной плотности. Были выбраны два пика излучения неоновой лампы и созданным макетом, были зарегистрированы как спектры, так и их производные. Спектры были сглажены математически, а затем продифференцированы и нормированы на единицу. Величины зарегистрированных производных также были нормированы на единицу. Результаты "физического" (пунктир) и "математического" дифференцирования приведены на рис. 14 (большие пики - сами спектральные линии). Видно, что графики не совпадают. Мы предполагаем, что различия, а именно, заужение "физической" производной и появление дополнительных экстремумов, связаны с формой аппаратной функции акустооптического спектрометра. Однако, на вершинах спектральных пиков, т.е.

в районах пересечения производных с нулевой линией результаты совпадают, что позволяет использовать акустооптическое дифференцирование для выявления "тонкой структуры" оптических спектров, причем в реальном масштабе времени.

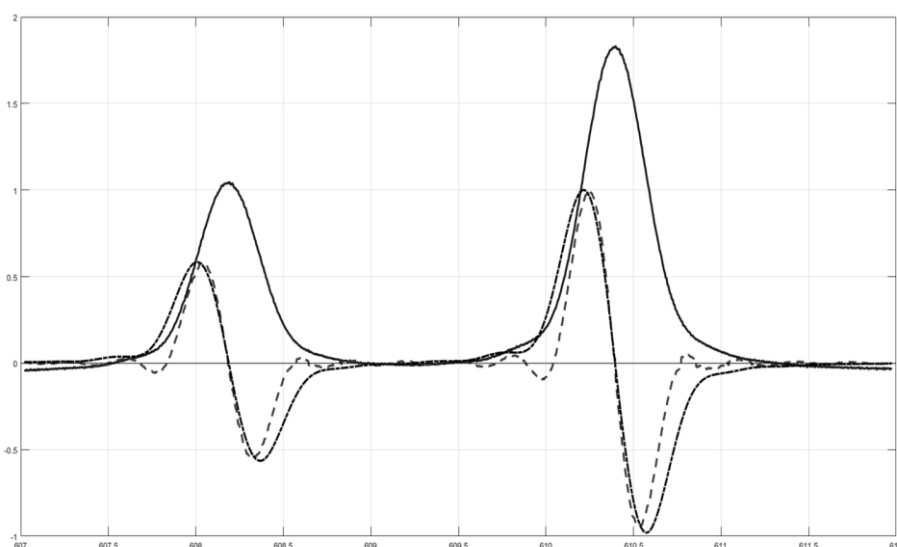


Рисунок 14. Результаты "физического" и "математического" дифференцирования части зарегистрированного спектра неоновой лампы.

Таким образом, в результате проведенных работ: предложен метод точного определения положения спектральных максимумов в сложных перекрывающихся спектрах в реальном масштабе времени; создана приборная реализация предложенного метода и показано, что для видимого диапазона (532 нм) точность определения спектрального положения максимумов составляет 0,2 нм.

## Литература

1. Сааков В.С., Драпкин В.З., Кривченко А.И., Сердюк А.С., Розенгарт Е.В., Богачев Ю.В., Князев М.Н. *Производная спектрофотометрия и спектроскопия ЭПР при решении эколого-биологических проблем*. Санкт-Петербург, Технолит. 2010. 408 с.
2. Берштейн И.Я., Каминский Ю.Л. *Спектрофотометрический анализ в органической химии*. Ленинград, Химия. 1986. 200 с.
3. Цокова Т.Н., Котлова Т.И., Осипова А.В. Метод производной УФ-спектрофотометрии определения концентрации лекарственного препарата в смесях. *Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований*. 2015. №11-5. С.694-698.
4. Пустовойт В.И., Пожар В.Э. Управление характеристиками коллинеарного акустооптического фильтра путем модуляции ультразвука. *Радиотехника и электроника*. 1998. Т.43. №1. С.121-127.
5. Пожар В.Э., Пустовойт В.И. Дифракция света на акустической кусочно-однородной волне со скачкообразным изменением фазы. *Успехи современной радиоэлектроники*. 2006. №9. С.61-69.

### Для цитирования:

Боритко С.В., Иванов С.И., Карандин А.В. Использование модуляционной акустооптической спектрометрии для определения местоположения спектральных особенностей в перекрывающихся спектрах. *Журнал радиоэлектроники* [электронный журнал]. 2021. №11. <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2021.11.6>