

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КАФЕДРА ЕЛЕКТРОННОЇ ТЕХНІКИ**

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

**до виконання курсової та розрахунково-графічної робіт з дисциплін:
«Оптоелектронні пристрої та системи», «Оптоелектронні та акустичні
пристрої і системи», «Оптичні вимірювання» та «Оптоелектронні
вимірювальні пристрої»
(для студентів денної та заочної форм навчання усіх спеціальностей)**

Покровськ – 2021

УДК 681.7:681.84](072)

М54

Методичні вказівки до виконання курсової та розрахунково-графічної робіт з дисциплін: «Оптоелектронні пристрої та системи», «Оптоелектронні та акустичні пристрої і системи», «Оптичні вимірювання» та «Оптоелектронні вимірювальні пристрої» (для студентів денної та заочної форм навчання усіх спеціальностей) [Електронний ресурс] / уклад. О.В. Вовна, Г.А. Лактіонова. – Покровськ : ДонНТУ, 2021. – 43 с.

У цих методичних вказівках викладено матеріали для виконання курсової та графічно-розрахункової робіт на тему: «Моделювання процесів в оптичному каналі абсорбційного газоаналізатора». Методичні вказівки містять завдання до роботи, методичні вказівки до виконання роботи, порядок виконання розрахунків, зміст пояснювальної записки, шкалу оцінювання роботи, список рекомендованої літератури.

Укладачі: Вовна О.В., д.т.н., професор, зав. кафедри електронної техніки;
Лактіонова Г.А., ас. каф. електронної техніки.

Рецензент: Дікова Ю.Л., к.т.н., доц. каф. комп'ютерної інженерії

Відповідальний за випуск: Вовна О.В – професор, д.т.н., завідувач кафедри електронної техніки.

Затверджено навчально-методичним відділом ДонНТУ,
протокол № 2 від 28.09.2021 р.

Розглянуто на засіданні кафедри електронної техніки,
протокол № 3 від 23.09.2021 р.

ЗМІСТ

ВСТУП	4
1. Завдання до роботи.....	5
2. Методичні вказівки до виконання роботи.....	7
3. Порядок виконання розрахунків.....	20
4. Зміст основної частини пояснювальної записки.....	24
5. Оцінювання роботи.....	25
СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ.....	27
Додаток А – Варіанти завдань.....	29
Додаток Б – Елементи спектральної теорії поглинання ІЧ- випромінювання газами.....	33
Додаток В – Приклад виконання роботи (на електронному носії)	

ВСТУП

Метою виконання роботи є систематизація, закріплення та розширення теоретичних знань з дисципліни; контроль знань та вмінь, що було отримано студентами в ході вивчення дисципліни; отримання практичних навичок моделювання процесів в оптичному каналі з використанням прикладної програми MathCad; розвиток навичок самостійної роботи з довідковою літературою.

Підготовка до виконання роботи студентами полягає у розгляді та вивченні відповідного теоретичного матеріалу з лекційних занять, матеріалу даних методичних вказівок та додаткової літератури; ознайомленні зі завданням, прикладом виконання розрахунків та вимогами до оформлення пояснювальної записки.

Структура пояснювальної записки повинна бути наступною: титульний лист, лист завдання, реферат, зміст, вступ, основна частини, висновки, перелік посилань. Оформлення пояснювальної записки повинно відповідати ДСТУ 3008:2015. Обсяг пояснювальної записки повинен складати 25-30 сторінок машинописного тексту. Форма надання роботи до захисту – роздрукований варіант пояснювальної записки на аркушах формату А4, що поміщена у папку-швидкозшивач. Перелік посилань оформляється згідно з ДСТУ 8302:2015.

Для виконання розрахунків та побудови графіків потрібно використовувати пакет прикладних програм – MathCad. Усі рисунки повинні бути пронумеровані та підписані. На рисунках мають бути позначені величини,

що відкладаються по вісям, та їх розмірність. Результати обчислень повинні мати розмірність, що відповідає величинам. Формули у звіті мають бути оформлені за допомогою додатку MathType. Розрахунки та графіки повинні супроводжуватися поясненнями.

Максимальна оцінка за виконання роботи складає 100 балів. Розподілення балів за виконання окремих частин роботи представлено у табл. 5.1.

1 ЗАВДАННЯ ДО РОБОТИ

Темою роботи є «Моделювання процесів в оптичному каналі абсорбційного газоаналізатора».

До складу вимірювача концентрації газової компоненти входить джерело випромінювання, оптичний канал, фотоприймальний пристрій (рис. 1.1).

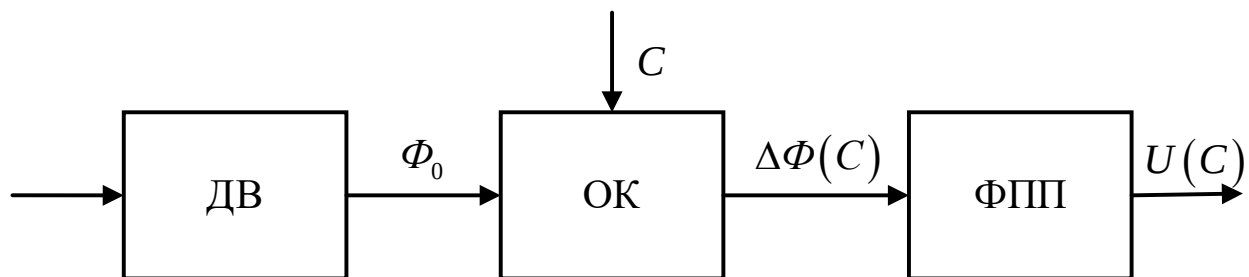


Рисунок 1.1 – Структурна схема вимірювача концентрації газової компоненти в суміші

У ході виконання роботи необхідно визначити параметри та характеристики вимірювача концентрації газової компоненти за наступними даними:

- 1) параметри та характеристики газової компоненти
 - максимальне значення вимірюваного параметра C , %;
 - довжина хвилі центру смуги поглинання λ_{n0} , мкм;

- ширина смуги поглинання $\Delta\lambda_n$, мкм;
- найбільше значення інтегрального коефіцієнта поглинання $K_{\max}$, см^{-1} ;
- аналітичний опис залежності інтегрального коефіцієнта поглинання від довжини хвилі $K(\lambda)$, см^{-1} ;

2) параметри та характеристики електролюмінесцентного джерела випромінювання

- номінальне значення потоку випромінювання Φ_0 , мВт;
- довжина хвилі центра спектра випромінювання λ_{e0} , мкм;
- ширина спектра випромінювання на рівні 0.5 $\Delta\lambda_e$, мкм;
- аналітичний опис огинаючої нормованого спектра випромінювання $s_e(\lambda)$;

3) неоднорідності оптичного каналу враховуються відносними коефіцієнтами заломлення середовищ, що утворюють оптичний канал

- фокусуючі системи n_{fc} ;
- газові середовища n_{gc} ;

4) параметри та характеристики приймального пристрою

- інтегральний коефіцієнт чутливості S_{int} , $\text{В} \cdot \text{мВт}^{-1}$;
- максимальна довжина хвилі $\lambda_{\max}$, мкм;
- аналітичний опис огинаючої нормованої функції спектральної чутливості $s_\phi(\lambda)$;
- розміри вікна фотоприймального пристрою $a \times b$, мм×мм;
- виявна здатність D^* , $\text{мВт}^{-1} \cdot \text{Гц}^{0.5} \cdot \text{см}$;
- постійна часу фотоприймального пристрою τ , мкс;

5) Просторові параметри потоку випромінювання в площині фотоприймального пристрою

- аналітичний опис функції просторової щільності потоку випромінювання $Q(x, y)$, $\text{мВт} \cdot \text{см}^{-2}$;

- зміщення вікна фотоприймача відносно осі променя $\Delta a, \Delta b$, мм;
- напрямок зсуву вікна фотоприймача N_s .

Чисельні значення початкових даних наведені в Додатку А.

2 МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ДО ВИКОНАННЯ РОБОТИ

2.1 Математичне моделювання оптичного каналу і сигналів

Спектр поглинання. При проходженні потоку випромінювання через газоподібні середовища в різних областях спектру випромінювання мають місце зміни величини потоку випромінювання обумовлені поглинанням випромінювання різними компонентами газоподібного середовища. Основи теорії молекулярного поглинання газами ІЧ-випромінювання наведено в Додатку Б (детально про молекулярне поглинання див. роботи [4-7]).

З коливальним і обертальним рухами молекул газу пов'язана форма електромагнітного поля молекули, що залежить одночасно від ступеня симетрії молекул газу і її молекулярної маси. При цьому молекули можуть бути строго симетричними і неповно симетричними різного ступеня симетрії. Повносиметричні молекули мають єдину смугу поглинання. Неповносиметричні молекули, в залежності від ступеня симетрії, мають кілька смуг поглинання. З ростом ступеня не симетрії число смуг поглинання зростає. З ростом молекулярної маси довжина хвилі центру смуг поглинання зростає.

Поглинання носить квантовий характер і пов'язане з розподілом енергії електронів, обертального і коливального рухів за енергетичними рівнями. Поглинання кванта енергії переводить молекулу в збуджений стан, в якому

вона знаходиться $t_{36} = 10^{-6}$ с. Зі збудженого стану молекули повертаються у вихідне, при цьому спонтанно випромінюється квант енергії. Кожна смуга поглинання може містити дві або три гілки утворювачів коливально-обертальної смуги спектра.

Смуга поглинання спектра носить лінійчатий характер, показаний на рис. 2.1. Розрахунки поглиненої енергії, що дають задовільні результати, виконуються при високій роздільній здатності за довжиною хвилі (на кожному лінії спектра має припадати не менше 10-12 опорних точок розрахунку), що підвищує ступінь їх трудомісткості, але залишаються єдиною можливим методом для майже монохроматичних джерел випромінювання, якими, наприклад, є напівпровідникові лазери. При однаковій точності розрахунків для джерел випромінювання з шириною спектра сумірною з шириною смуги поглинання більш економічними є методи, засновані на обліку інтегрального коефіцієнта поглинання. Інтегральний коефіцієнт поглинання ІЧ-випромінювання виходить шляхом усереднення лінійного спектра поглинання за інтервал $\Delta\lambda^*$. Довжина інтервалу усереднення $\Delta\lambda^*$ вибирається не менше відстані між лініями в спектрі поглинання. У роботі інтервал осереднення прийнятий рівним відстані між лініями в спектрі поглинання. Це веде до зменшення обсягу обчислень в 10-12 разів.

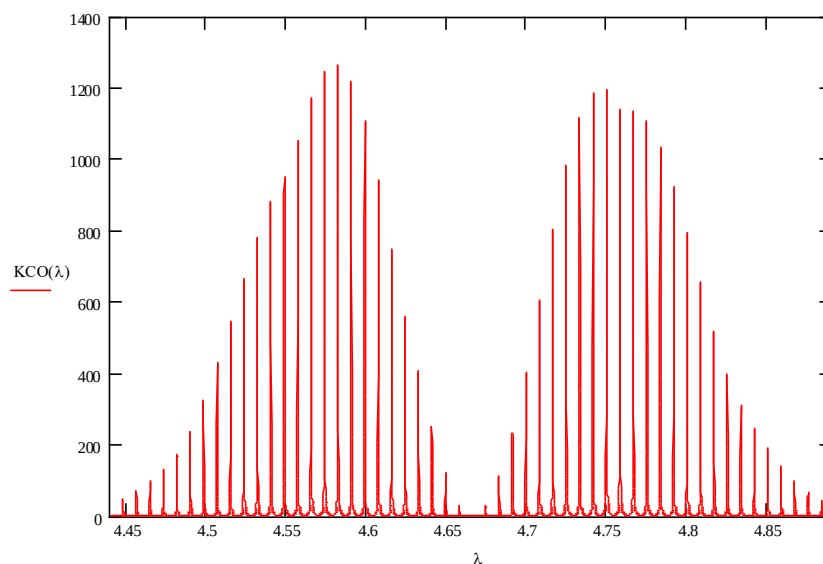


Рисунок 2.1 – Приклад спектра поглинання трьохатомного газу (молекули лінійного типу)

Модель оптичного каналу. На першій стадії математичного моделювання, оптичний канал (ОК) визначимо як шар речовини, що тестується, через який проходить, відчуючи поглинання, потік випромінювання. У міру врахування впливу різних чинників, визначення каналу буде уточнюватися. Модель ОК повинна являти собою залежність концентрації інгредієнта від параметрів вихідного сигналу каналу і ця залежність встановлюється на підставі наступного.

Зміна однорідного і монохромного потоку випромінювання, що проходить через речовину описується законом Ламберта-Бугера:

$$\Phi(l) = \Phi_0 \cdot e^{-a \cdot l},$$

де Φ_0 – потік випромінювання на кордоні речовини, що тестується; a – показник поглинання; l – довжина шляху (траси) випромінювання в речовині, що тестується.

Оптична щільність речовини встановлюється законом Беєра у вигляді:

$$D = a \cdot l = k \cdot C \cdot l,$$

де C – концентрація активної компоненти речовини, яка поглинає випромінювання; k – питомий показник поглинання.

Оптична щільність речовини залежить від зовнішніх умов: температури і тиску. Ці фактори в метеорології [10], враховуються у вигляді еквівалентної довжини траси:

$$l_{екв} = \frac{P_p}{101325} \cdot \frac{237,15}{T_p} \cdot l,$$

де тиск P_p вимірюється в [Па], температура T_p – [°K].

В ІЧ-спектрометрії вплив тиску і температури враховується більш складним чином: від тиску сильно залежить напівширина спектральної лінії поглинання і в меншій від зміни температури, огинаюча спектра смуги теж прямо пропорційна зміні тиску і зворотно пропорційна квадратному кореню зміни температури.

Покладемо, що на вході ОК діє випромінювання зі рівномірним спектром, як показано на рис. 2.2. На хвилі l_0 відповідно до закону Ламберта-Бугера між поглинутим, вхідним і вихідним потоками ОК встановлюється зв'язок:

$$\Phi_n(\lambda) = \Phi_0 - \Phi_{вих}(\lambda_0, l) = \Phi_0 - \Phi_0 \cdot e^{-a \cdot l}.$$

Або, що теж саме:

$$\Phi_n(\lambda) = \Phi_0 - \Phi_0 \cdot T = \Phi_0 \cdot (1 - T) = \Phi_0 \cdot (1 - e^D),$$

де T – коефіцієнт пропускання оптичного каналу.

Наведене співвідношення ілюструє рис. 2.3.

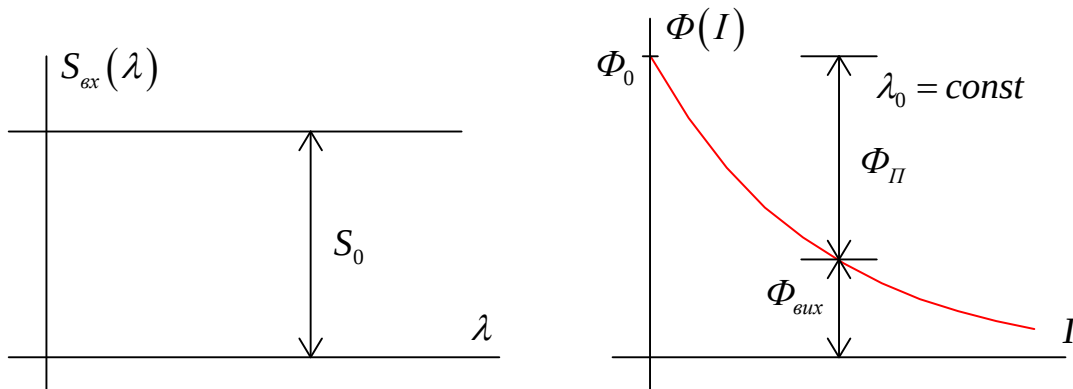


Рисунок 2.2 – Спектральна
щільність потоку випромінювання
на вході ОК

Рисунок 2.3 – Зміна потоку
випромінювання при
проходженні шару поглинаючої
речовини

Для околу λ_{n0} тобто $\lambda_0 \pm \Delta\lambda / 2$ процес поглинання частотно залежний і визначається функцією інтегрального коефіцієнта поглинання. Ця залежність враховується наступним чином:

$$K_{инт}(\lambda) = K_{max} \cdot 2,718 \cdot \frac{9 \cdot (\lambda - \lambda_{0n})^2}{\left(\frac{\Delta\lambda_n}{2}\right)^2} \cdot e^{-\frac{9(\lambda - \lambda_{0n})^2}{\left(\frac{\Delta\lambda_n}{2}\right)^2}}; \quad (2.1)$$

$$D(\lambda, C) = K_{инт}(\lambda) \cdot l_o \cdot C / 100; \quad (2.2)$$

$$T(\lambda, C) = e^{-D(\lambda, C)}. \quad (2.3)$$

Коефіцієнт передачі оптичного каналу визначається як:

$$K_{OK}(\lambda, C) = T(\lambda, C). \quad (2.4)$$

Приклад АЧХ ОК наведено на рис. 2.4.

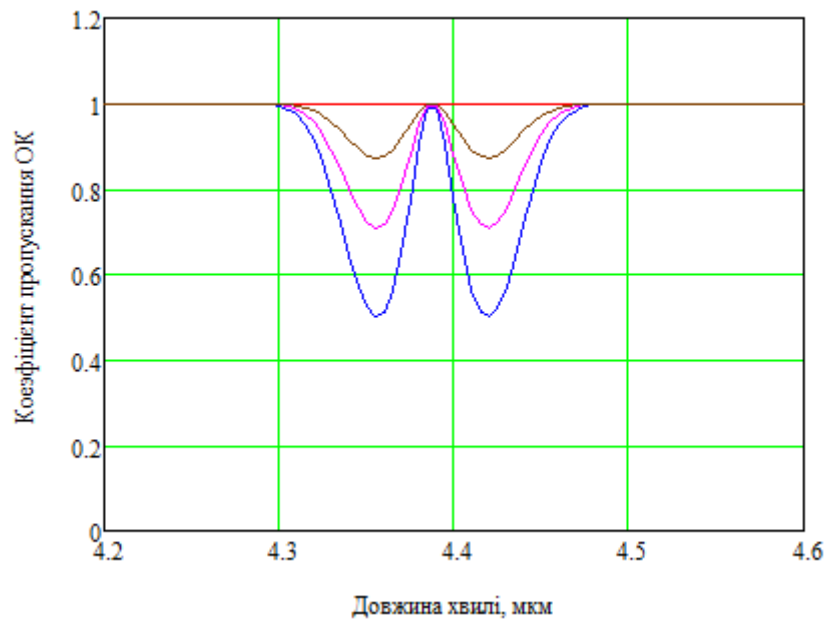


Рисунок 2.4 – Приклад АЧХ оптичного каналу

Чутливість вимірювача визначається довжиною траси вимірювального каналу. Цю довжину рекомендується встановлювати співвідношенням:

$$l_{mp} \approx \frac{\ln(2)}{C_{\max} \cdot K_{\max}}. \quad (2.5)$$

Отриманий вираз використовується для побудови амплітудно-частотної характеристики ОК, що включається до звіту роботи. Приклад розрахунку спектральної характеристики оптичного каналу $K_{OK}(\lambda, C)$ наведено в Додатку В.

Потік випромінювання, що створюється електролюмінісцентним джерелом і направляється на опромінення ОК, являє собою вхідний сигнал ОК. Цей сигнал заданий функцією $s_e(\lambda) = \{f_3, f_4\}$, що представляє собою нормовану спектральну щільність потоку випромінювання. Визначимо спектральну щільність потоку вхідного сигналу оптичного каналу наступним чином:

$$S_{exOK}(\lambda) = S_{e0} \cdot s_e(\lambda).$$

Потік випромінювання, що пройшов шар тестованої речовини, утворює вихідний сигнал ОК. Цей сигнал містить інформацію про концентрацію інгредієнта в тестованій речовині. Описується він в наступному вигляді:

$$S_{вихОК}(\lambda, C) = S_{вихОК}(\lambda) \cdot K_{ОК}(\lambda, C). \quad (2.6)$$

Обидві функції представляються графічно, причому графік функції $S_{вихОК}(\lambda)$ має вигляд $S_{вихОК}(\lambda, C=0)$, а графік функції $S_{вихОК}(\lambda, C)$ для різних значень концентрації інгредієнта наведено на рис. 2.5. Отримані вирази спектральних густин потоків випромінювання використовуються для побудови спектрів вхідного і вихідного сигналів ОК, що включаються до звіту за роботою. Спектр вихідного сигналу будується при максимальному значенні концентрації інгредієнта. Приклад побудови цих характеристик сигналів наведено в Додатку В.

Інформація про концентрацію інгредієнта в вихідному сигналі представлена у вигляді зміни форми спектра. Вхідною величиною всіх фотоприймачів є потік випромінювання, а не окремі спектральні складові.

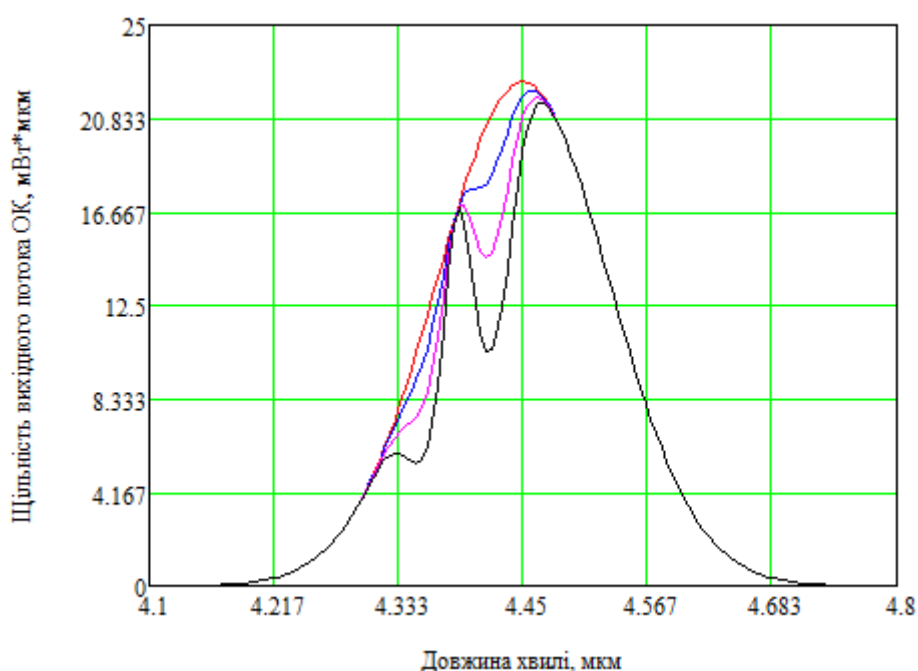
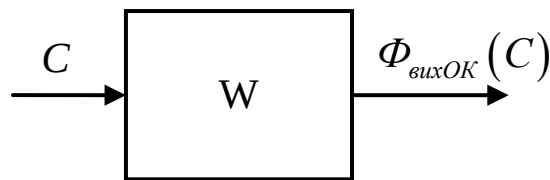


Рисунок 2.5 – Спектр вихідного сигналу ОК при різних концентраціях інгредієнта

Вихідний сигнал фотоприймача пропорційний інтегральній характеристиці сигналу:

$$U_{\phi n} = S_{\text{int.c}} \cdot \Phi_{\text{вихОК}}(C);$$

$$\Phi_{\text{вихОК}}(C) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} S_{\text{вихОК}}(\lambda, C) d\lambda.$$



$$\Phi_{\text{вихОК}}(C) = C \cdot W.$$

Рисунок 2.6 – Представлення ОК ланкою вимірювального ланцюга

Результатом вимірювань повинна бути концентрація, а не величина вихідного потоку. Для цього слід встановити зворотну залежність:

$$C = W^{-1} \cdot \Phi_{\text{вихОК}}(C).$$

Одним із завдань роботи є встановлення цієї залежності. При виконанні інтегральних перетворень рекомендується використовувати довідкову літературу [10]. Залежність концентрації від потоку випромінювання виявляється більш наочною і сприймається, якщо вона встановлюється не для потоку випромінювання, а його відносної зміни:

$$C = W^{-1} \cdot \frac{\Phi_{\text{вихОК}}(C) - \Phi_{\text{вихОК}}(C)}{\Phi_{\text{вихОК}}(C)}. \quad (2.7)$$

Приклад розрахунку та графічного представлення залежностей наведено

в Додатку В. Зворотня функція W^{-1} є рішенням рівняння (2.7) щодо C . В (2.7) вихідний потік оптичного каналу входить у вигляді інтегрального співвідношення зі складною залежністю від довжини хвилі. Це значно ускладнює пошук рішення в аналітичному вигляді, але за це рішення може бути прийнято табличне представлення залежності, де аргумент і функцію легко поміняти місцями.

2.2 Врахування оптичних неоднорідностей каналу

Оптична неоднорідність каналу викликана застосуванням в каналі матеріалів з різними оптичними властивостями. Оптична неоднорідність враховується коефіцієнтами заломлення. Неоднорідність оптичних властивостей каналу ілюструється рис 2.7.

Втрати випромінювання на кордонах розділу і в середовищах з різними коефіцієнтами заломлення враховуються коефіцієнтами відображення і пропускання межами розділу, розсіювання і поглинання випромінювання в цих середовищах. У даній роботі в якості таких середовищ виступають оптичні лінзи, що виготовляються зі спеціальних матеріалів: спеціальних сортів оптичного скла, природних і синтетичних кристалів. Розглянуті лінзи вважаються тонкими (їх товщина і діаметр багато менше фокусних відстаней) в зв'язку з чим втратами на розсіювання і поглинання можна знехтувати.

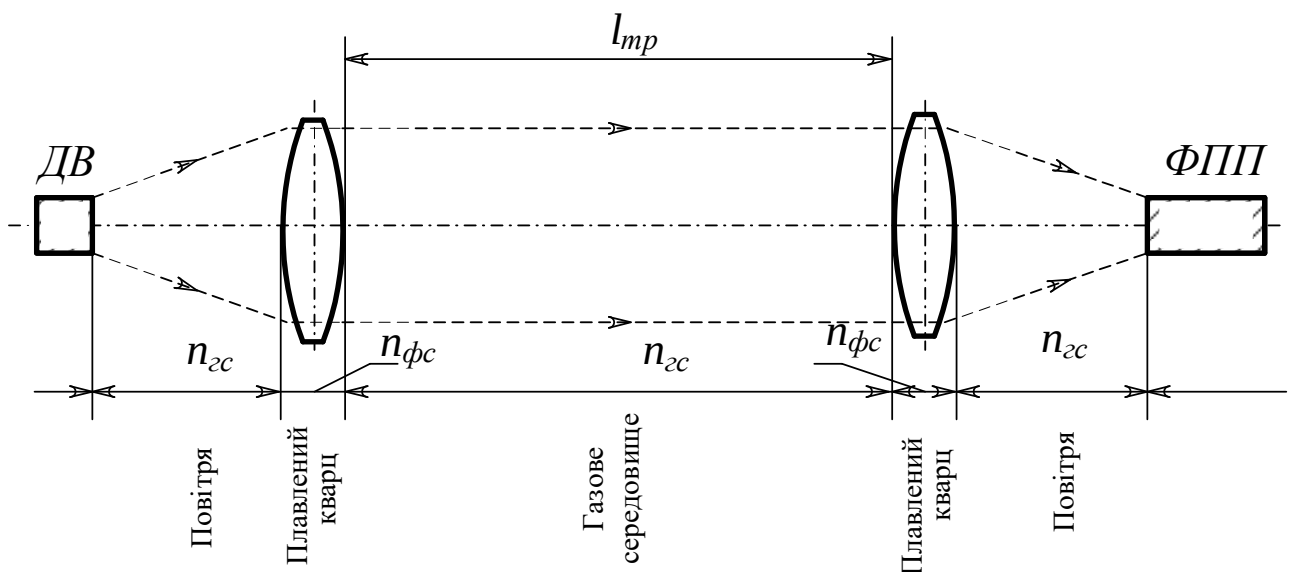


Рисунок 2.7 – Оптичні неоднорідності каналу

З цієї ж причини вважатимемо, що потоки випромінювання падають на межі розділу середовищ за нормалю до поверхні розділу, як показано на рис. 2.8.

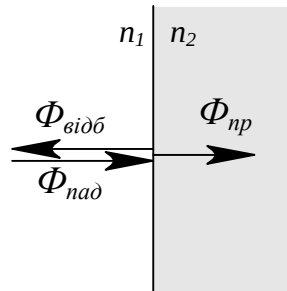


Рисунок 2.8 – Втрати випромінювання на межі розділу середовищ з різною оптичною щільністю

Коефіцієнти відбиття R і пропускання T кордоном розділу середовищ встановлюються через коефіцієнти заломлення цих середовищ. При нормальному падінні променя ці залежності набувають вигляду:

$$R_{1,2} = \frac{\Phi_{\text{відб}}}{\Phi_{\text{пад}}} = \frac{(n_2 - n_1)^2}{(n_2 + n_1)^2};$$

$$T_{1,2} = \frac{\Phi_{\text{пр}}}{\Phi_{\text{пад}}} = 1 - R_{1,2} = \frac{(n_2 + n_1)^2 - (n_2 - n_1)^2}{(n_2 + n_1)^2} = \frac{4 \cdot n_1 \cdot n_2}{(n_2 + n_1)^2}. \quad (2.8)$$

Якщо межі розділу чергуються, наприклад, при проходженні випромінювання через лінзу таких меж виявиться дві, то в загальному випадку при проходженні N кордонів розділу коефіцієнт пропускання всієї системи виявиться рівним:

$$T_{1,N} = \prod_{i=1}^{N-1} T_{i,i+1}.$$

Приклад обчислення коефіцієнтів пропускання, що враховують оптичні неоднорідності, наведено в Додатку В.

2.3 Визначення ефективності введення випромінювання в фотоприймач

Ефективність введення випромінювання в вікно фотоприймального пристрою оцінюється коефіцієнтом введення:

$$K_{BB} = \frac{\Phi_{\text{вікна}}}{\Phi_{\text{пад}}} = \frac{\int_{a_1}^{a_2} \int_{b_1}^{b_2} Q(x, y) dx dy}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(x, y) dx dy}, \quad (2.9)$$

де $Q(x, y)$ – просторова щільність потоку випромінювання, падаючого нормально на площину фотоприймача; a_1, b_1, a_2, b_2 – координати вікна фотоприймача в системі координат X, Y (центр системи координат збігається з точкою перетину осі променя з площиною фотоприймача); $\Phi_{\text{пад}}$ – величина потоку (потужності) випромінювання падаючого променя на площину фотоприймача; $\Phi_{\text{вікна}}$ – частина потоку падаючого променя, що потрапив у вікно фотоприймача.

Топографічний план введення випромінювання в вікно фотоприймача наведено на рис. 2.9.

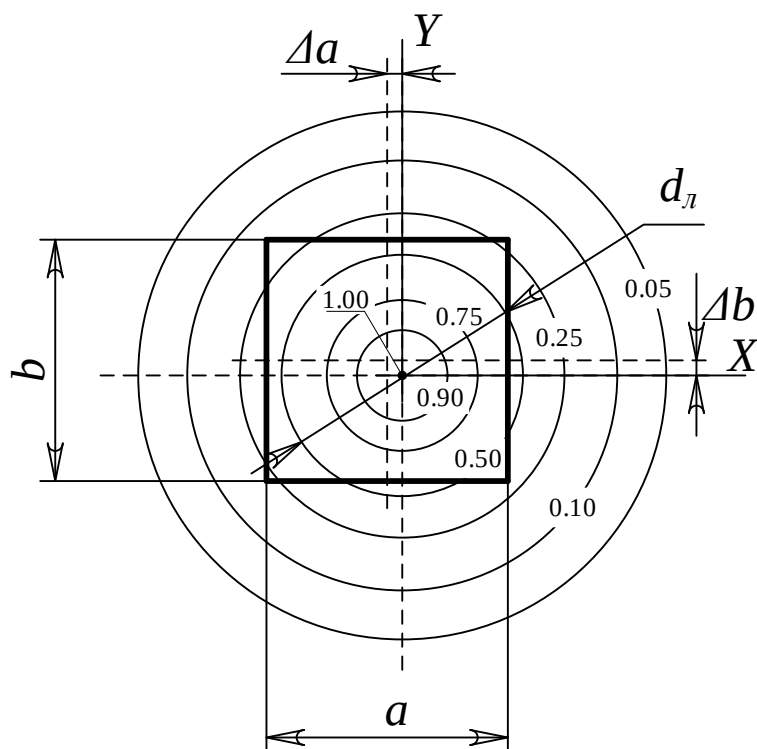


Рисунок 2.9 – Топографічний план введення випромінювання в вікно фотоприймача

Для визначення потоку випромінювання, що потрапило в вікно фотоприймача, рекомендується встановити величину потоку випромінювання в зоні фотоприймача, врахувавши втрати потоку при проходженні випромінювання через другий об'єктив (другу лінзу). Величина Φ_{nad} визначається при мінімальному значенні концентрації інгредієнта тобто, коли величина потоку максимальна. Приклад розрахунків потоку випромінювання, що потрапило в вікно фотоприймача, і коефіцієнта введення наведено в Додатку В.

2.4 Визначення вихідного сигналу фотоприймача

Вихідний сигнал фотоприймача є сигнал напруги, оскільки фотоприймальний пристрій – фоторезистор з інтегральним підсилювачем напруги, і визначається співвідношенням:

$$U_{c.вих.ФП} = \Phi_{вікна} \cdot S_{c.інт}, \quad (2.10)$$

де $S_{c.інт}$ – інтегральна чутливість фотоприймача до сигналу випромінювача.

Ця характеристика пов'язана зі спектральними характеристиками як фотоприймача, так і випромінювача і відрізняється від інтегральної чутливості фотоприймача. Обидві характеристики визначаються наступним чином:

$$S_{інт} = \int_0^{\infty} S_{ФП}(\lambda) d\lambda; \quad (2.11)$$

$$S_{c.інт} = S_{інт} \frac{\int_0^{\infty} s_{ФП}(\lambda) \cdot s_{\varepsilon}(\lambda) d\lambda}{\int_0^{\infty} s_{ФП}(\lambda) d\lambda}. \quad (2.12)$$

Підінтегральна функція першої формули містить спектральну щільність чутливості фотоприймача в той час, як друга формула у якості підінтегральної функції містить нормовані функції спектральної щільності чутливості фотоприймача і щільності потоку випромінювання джерела. У геометричній інтерпретації інтегралам відповідають площі, обмежені кривою підінтегральної функції і віссю абсцис. Пояснення формул наведено на рис. 2.10. Приклад розрахунку параметрів вихідного сигналу фотоприймача наведено в Додатку В.

2.5 Визначення параметрів шуму на виході фотоприймача

Рівень шуму у вихідному сигналі визначається виходячи з питомої виявної здатності фотоприймача D^* , через яку, в якості основної складової шуму, визначається еквівалентний фоновий потік інфрачервоного випромінювання тіл, що оточують фотоприймач і створює такого ж рівня вихідний сигнал фотоприймача як і всі складові (оптичні і електронні) шуму.

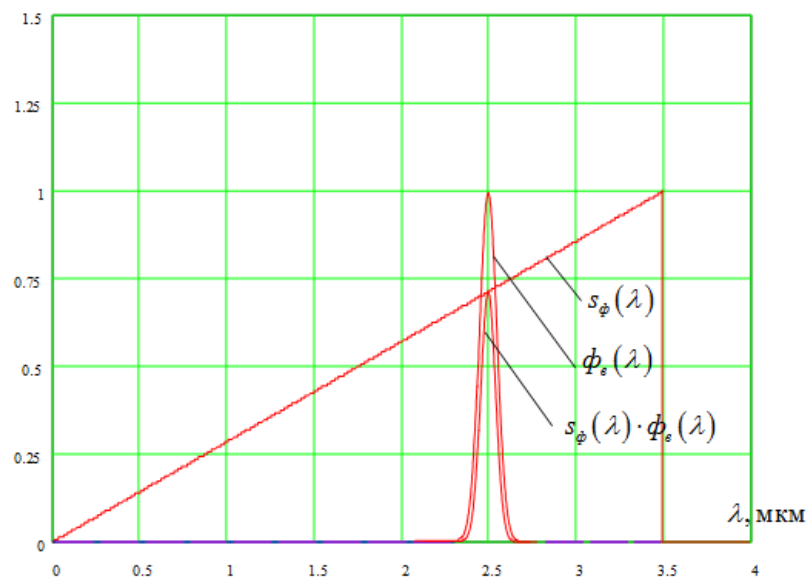
Еквівалентний фоновий потік випромінювання і рівень шуму визначаються як:

$$\Phi_{ш} = \frac{\sqrt{A_{\text{вікна}} \cdot \Delta f_{\text{ФП}}}}{D^*}; \quad (2.13)$$

$$U_{ш} = S_{ш.інт} \cdot \Phi_{ш}, \quad (2.14)$$

де $A_{\text{вікна}}$ – площа вікна фотоприймача, $[\text{см}^2]$; $\Delta f_{\text{ФП}}$ – смуга пропускання фотоприймача $[\text{Гц}]$; $S_{ш.інт}$ – інтегральна чутливість фотоприймача до оптичного фонового шуму.

При цьому вважається, що спектральна щільність еквівалентного фонового потоку носить характер «білого шуму» в оптичній смузі пропускання фотоприймача. Характеристика фотоприймача $S_{ш.інт}$ визначається за формулою (2.3) при рівномірній в смузі пропускання фотоприймача спектральній щільності фонового шуму. Приклад розрахунку рівня шуму наведено в Додатку В.



a)

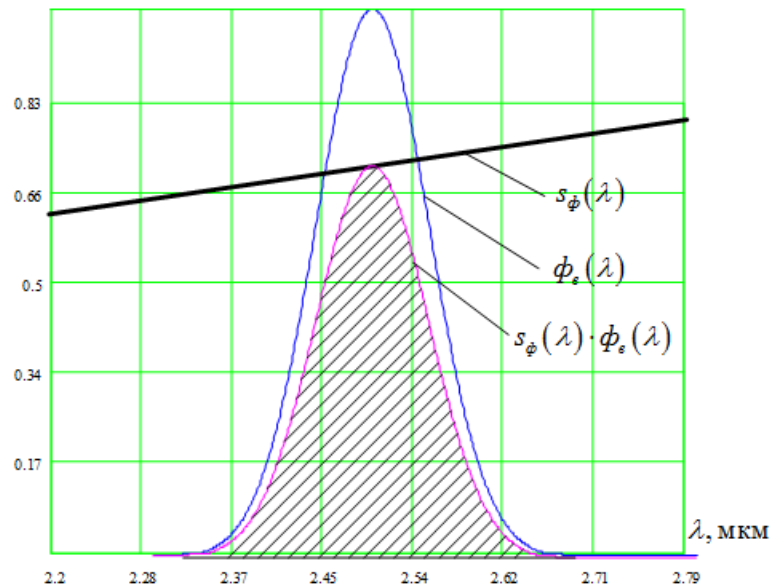


Рисунок 2.10 – Визначення інтегральної чутливості до немонохроматичного сигналу: а) нормовані спектральні щільності спектральної чутливості фотоприймача і щільності потоку випромінювання джерела і їх добутки; б) збільшений фрагмент спектрів

3 ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ РОЗРАХУНКІВ

Порядок розрахунків і їх зміст пов'язані з виділенням об'єктів математичного моделювання, формуванням комплексу обмежень і, з урахуванням останніх, використання інженерних методик розрахунків параметрів пристроїв і сигналів.

В якості основних об'єктів цієї роботи виступають оптичний канал і перетворення сигналів в ньому, фотоприймальний пристрій (фотоприймач) і перетворення їм оптичних сигналів в електричні.

В якості обмежень вводяться наступні:

- 1) Джерело випромінювання точковий (нехтуються лінійні розміри ДВ);
- 2) Введення випромінювання в фокусуючу систему ФС₁ здійснюється без втрат;
- 3) В оптичному каналі промінь не розходитьсся;

4) У газових середовищах промінь не розсіюється і не відчуває розподіленого відбиття;

5) У всіх перпендикулярних перетинах промінь має круговий просторовий розподіл потоку.

Розрахунок параметрів оптичних і електричних сигналів та шумів рекомендується виконати в характерних перетинах і точках вимірювача, наведених на рис. 3.1.

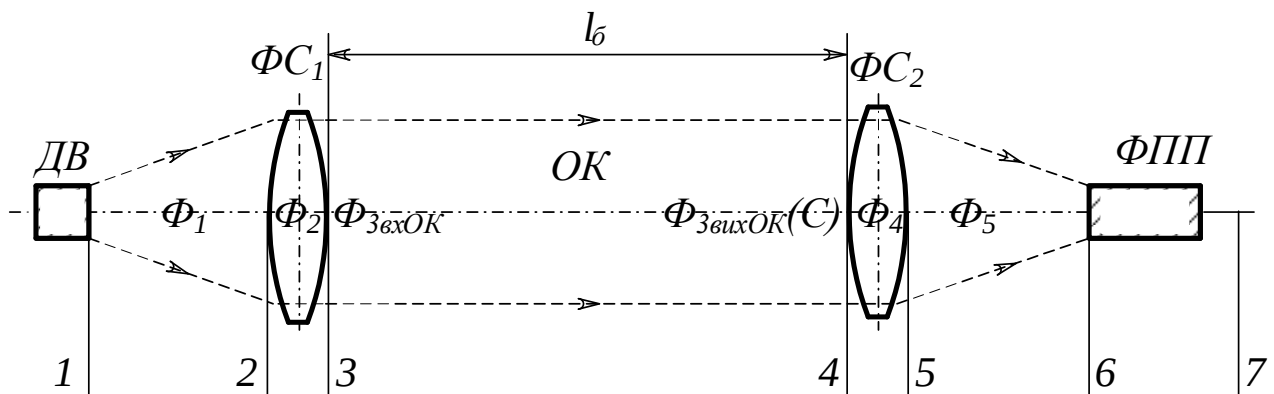


Рисунок 3.1 – Характерні перетини і точки вимірювача, в яких визначаються параметри сигналів і шумів

1. У перетині 1 визначається спектральна щільність потоку випромінювання джерела $S_{\epsilon}(\lambda) = S_0 \cdot s_{\epsilon}(\lambda)$. Параметр b_{ϵ} , що входить у вираз нормованої спектральної щільності потоку випромінювання, визначається з умови:

$$s_{\epsilon}(\lambda = \lambda_{0_{\epsilon}} + \Delta\lambda / 2) = 0,5.$$

Вирішуючи останнє рівняння щодо b_{ϵ} , встановлюється значення цього параметра. Найбільше значення спектральної щільності потоку випромінювання джерела S_0 визначається з умови:

$$\Phi_0 = \int_0^{\infty} S_{\epsilon}(\lambda) d\lambda.$$

В останньому співвідношенні S_0 є єдиною невідомою величиною. Вирішуючи рівняння щодо цієї невідомої, встановлюється її значення.

2. У перетинах 2, 3, 4 і 5 потік випромінювання падає (нормально) на кордон розділу середовищ з різною оптичною щільністю, де має місце відображення частини потоку випромінювання. Обліку підлягає тільки потік, що проходить, який визначається співвідношенням (2.8).

3. Процес виборчого поглинання розраховується в наступному порядку:

3.1 З урахуванням процесів, описаних в п. 2, визначається величина вхідного потоку оптичного каналу Φ_{3exOK} . Як описано в п. 1, визначається спектральна щільність цього потоку: параметр b_{ϵ} залишається тією ж величиною, що і в 1, а S_0 визначається з умови:

$$\Phi_{3exOK} = \int_0^{\infty} S_{exOK}(\lambda) d\lambda.$$

3.2 Призначивши концентрацію поглинаючої компоненти C незалежної змінної, що змінюється в діапазоні від 0 до $C_{\max}$, за формулами (2.1)-(2.5) встановлюється коефіцієнт передачі оптичного каналу.

3.3 За формулою (2.6) визначається спектральна щільність вихідного потоку оптичного каналу, яка представляє собою функцію двох змінних: довжини хвилі і концентрації.

3.4 Величину вихідного потоку оптичного каналу слід визначити як:

$$\Phi_{3вихOK}(C) = \int_0^{\infty} S_{вихOK}(\lambda, C) d\lambda.$$

Усі наступні потоки (Φ_4, Φ_5) повинні бути функціями від концентрації C .

4. У перетині 5 і 6 величина потоку залишається однією і тією ж величиною. Але в перерізі 6, на ряду з повним потоком, визначається його частина, що потрапила у вікно фотоприймача. Для оцінки цієї складової визначається функція просторової щільності потоку випромінювання (розподіл потужності випромінювання за перетином променя) $Q(x, y) = q^2 \cdot q(x, y)$. Ця функція має два параметри q і r . Параметр r , що входить у вираз нормованої просторової щільності потоку випромінювання, визначається з умови:

$$q(y = 0, x = d_n / 2) = 0,5.$$

Вирішуючи останнє рівняння щодо r , встановлюється значення цього параметра. Найбільше значення просторової щільності потоку випромінювання q_0 визначається з умови:

$$\Phi_6(C = 0) = \int_0^\infty \int_0^\infty q_0^2 \cdot q(x, y) dx dy.$$

Вирішуючи рівняння щодо q_0 , встановлюється її значення.

Коефіцієнт введення встановлюється співвідношенням (2.9) при $\Phi_{над} = \Phi_6(C = 0)$. Виходячи з відомого значення коефіцієнта введення, визначається величина потоку, яка потрапила у вікно фотоприймача:

$$\Phi_{вікна} = K_{BB} \cdot \Phi_6(C).$$

5. Величина вихідного сигналу фотоприймача визначається формулами (2.10-2.12). Причому спочатку визначається функція спектральної щільності чутливості, потім – інтегральна чутливість фотоприймача до сигналу і, на завершення, ефективне значення вихідної напруги сигналу.

6. Величина ефективної напруги шуму фотоприймача визначає його роздільну здатність і визначається формулами (2.13-2.14). Характеристика фотоприймача $S_{ш.інт}$ визначається за формулою (2.12) при рівномірній в смузі пропускання фотоприймача спектральній щільності теплового фонового шуму. Встановити відношення:

$$сигнал / шум = U_{с.фн}(C_{\max}) / U_{ш.фн}.$$

При визначенні чисельних значень певних інтегралів з нескінченними межами рекомендується побудувати графік підінтегральної функції. Визначити діапазон змінної, в якому підінтегральна функція приймає значення відмінні від нуля. При цьому нескінченні межі інтегрування замінюються кінцевими рівними кордонів встановленого діапазону.

Приклад розрахунків наведено в Додатку В.

4 ЗМІСТ ОСНОВНОЇ ЧАСТИНИ ПОЯСНЮВАЛЬНОЇ ЗАПИСКИ

1. Початкові дані.
2. Розрахунок та графік спектральної щільності потоку джерела випромінювання $S_e(\lambda)$.
3. Розрахунок коефіцієнта пропускання фокуруючої системи Φ_{C1} та величини потоку $\Phi_{звхОК}$.
4. Графік коефіцієнта поглинання середовища $K_{інт}(\lambda)$ та графік коефіцієнта пропускання оптичного каналу $K_{ОК}(\lambda, C)$ при значеннях C , що дорівнює 0 , $20\%C_{\max}$, $50\%C_{\max}$, $100\%C_{\max}$.
5. Розрахунок та графік спектральної щільності потоку випромінювання на вході оптичного каналу $S_{вхОК}(\lambda)$.
6. Графік спектральної щільності вихідного потоку оптичного каналу

$S_{вихОК}(\lambda, C)$ при значеннях C , що дорівнюють $0, 20\%C_{\max}, 50\%C_{\max}, 100\%C_{\max}$ та розрахунок величини вихідного потоку оптичного каналу $\Phi_{3вихОК}$.

7. Розрахунок коефіцієнта пропускання фокусуючої системи Φ_{C2} $T_{\Phi C2}$ та потоку $\Phi_5(C)$.

8. Розрахунок параметрів r та q просторової щільності потоку випромінювання $Q(x, y)$, падаючого на площину фотоприймача, в перетинах: $y = 0, y = d_n / 2, y = d_n, y = 2d_n$.

9. Розрахунок коефіцієнту введення випромінювання в вікно фотоприймача $K_{\text{вв}}$ та потоку, що потрапив у вікно фотоприймача $\Phi_{\text{вікна}}(C)$.

10. Розрахунок та графік спектральної щільності фотоприймача $S_{\phi n}(\lambda)$.

11. Розрахунок інтегральної чутливості фотоприймача до сигналу випромінювача $S_{c.int}(\lambda)$.

12. Графіки нормованої спектральної чутливості фотоприймача $s_{\phi}(\lambda)$, нормованої спектральної щільності потоку випромінювання джерела $s_e(\lambda)$ і їх добутку $s_{\phi}(\lambda) \cdot s_e(\lambda)$ в одній системі координат.

13. Розрахунок величини вихідного сигналу фотоприймача $U_{c.вих.ФП}(C)$.

14. Результати представлення в табличній і графічній формі залежності $C = \varphi(U_{c.ФП})$ при $C = 0, 10, 20, \dots, 100\%C_{\max}$.

15. Розрахунок величини напруги шуму на виході фотоприймача $U_{ш.ФП}$.

16. Розрахунок відношення сигнал/шум.

17. Висновки.

5 ОЦІНЮВАННЯ РОБОТИ

Оцінювання роботи розраховується за двома складовими, які мають свій максимальний бал: виконання і оформлення пояснювальної записки та захист роботи. Розподілення максимально можливих балів між видами роботи

представлено у табл. 5.1.

Таблиця 5.1 – Розподіл балів за виконання роботи

Пояснювальна записка		Захист
Розрахунки та графіки	Оформлення	60
30	10	

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Саржевский, А.М. Оптика. Полный курс / А.М. Саржевский. – М. : Изд-во Едиториал УРСС, 2016. – 608 с.
2. Астапенко, В.А. Оптические информационные технологии / В.А. Астапенко. – М. : МФТИ, 2015. – 184 с.
3. Ишанин, Г.Г. Приемники оптического излучения : учеб. / Г.Г. Ишанин, В.П. Челибанов. – СПб. : Лань, 2014. – 304 с.
4. Герцберг, Е.Н. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул / Е.Н. Герцберг. – М. : Мир, 1980. – 197 с.
5. Бреслер, П.И. Оптические абсорбционные газоанализаторы и их применение / П.И. Бреслер. – Л. : Энергия, 1980. – 164 с.
6. Смит, А. Прикладная ИК-спектроскопия / А. Смит. – М. : Мир, 1982. – 328 с.
7. Кузнецов, Ю.Я. Методы спектрального анализа : учеб. пособие / Ю.Я. Кузнецов. – М. : Изд-во МГУ, 1991. – 536 с.
8. Беллами, А. Инфракрасные спектры сложных молекул / А. Беллами. – М. : Мир, 1963. – 120 с.
9. Аксененко, М.Д. Приемники оптического излучения : справ. / М.Д. Аксененко, М.Л. Баранчиков. – М. : Радио и связь, 1987. – 296 с.
10. Источники и приемники излучения : учеб. пособие для студ. оптич. спец. вуз. / Г.Г. Ишанин, Э.Д. Панков, А.А. Андреев, Г.В. Польщиков. – СПб. : Политехника, 1991. – 240 с.
11. Двайт, Г.Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы / Г.Б. Двайт. – М. : Наука, 1983. – 176 с.

12. Горелик, Д.О. Мониторинг загрязнения атмосферы и источников выбросов : аэроаналит. измерения / Д.О. Горелик, Л.А. Конопелько – М. : Изд-во стандартов, 1992. – 432 с.

13. Носов, Ю.Р. Оптоэлектроника / Ю.Р. Носов. – М. : Радио и связь, 1989. – 360 с.

ДОДАТОК А

Таблиця А.1 – Варіанти початкових даних

№п/п	$C, \%$	$\lambda_{n0}, \text{мкм}$	$\Delta\lambda_n, \text{мкм}$	$K_{\max}, \text{см}^{-1}$	$\Phi_0, \text{мВт}$	$\lambda_{u0}, \text{мкм}$	$\Delta\lambda_u, \text{мкм}$	$s_u(\lambda)$	n_{fc}	n_{gc}
1	0.5	4.255	0.179	$1500 \cdot 10^{-4}$	2	4.20	0.18	f_1	1.52	1
2	5	4.664	0.452	$66 \cdot 10^{-4}$	5	4.45	0.19	f_2	1.55	1
3	2.5	3.313	0.433	$30 \cdot 10^{-4}$	10	3.45	0.14	f_1	1.61	1
4	20	3.042	0.158	$107 \cdot 10^{-4}$	2	3.15	0.12	f_2	1.57	1
5	0.1	4.496	0.206	$2036 \cdot 10^{-4}$	5	4.45	0.19	f_1	1.52	1
6	25	3.465	0.538	$10 \cdot 10^{-4}$	10	3.50	0.15	f_2	1.55	1
7	2	7.348	0.892	$560 \cdot 10^{-4}$	2	7.52	0.3	f_1	1.61	1
8	0.75	3.25	0.25	$1366 \cdot 10^{-4}$	5	3.30	0.13	f_2	1.57	1
9	1	3.04	0.1	$1240 \cdot 10^{-4}$	10	3.05	0.12	f_1	1.52	1
10	0.5	3.35	0.2	$890 \cdot 10^{-4}$	2	3.38	0.14	f_2	1.52	1
11	10	3.042	0.158	$107 \cdot 10^{-4}$	10	3.00	0.12	f_1	1.55	1
12	0.2	3.04	0.1	$1240 \cdot 10^{-4}$	2	3.02	0.13	f_2	1.61	1
13	0.75	4.255	0.179	$1500 \cdot 10^{-4}$	5	4.30	0.17	f_2	1.57	1
14	0.5	7.348	0.892	$560 \cdot 10^{-4}$	10	7.15	0.29	f_2	1.52	1
15	1.5	3.313	0.433	$30 \cdot 10^{-4}$	5	3.15	0.12	f_2	1.55	1
16	0.25	4.496	0.206	$2036 \cdot 10^{-4}$	10	4.55	0.2	f_2	1.61	1
17	10	4.664	0.452	$66 \cdot 10^{-4}$	2	4.82	0.20	f_1	1.57	1
18	15	3.465	0.538	$10 \cdot 10^{-4}$	5	3.45	0.14	f_2	1.52	1
19	0.25	3.25	0.25	$1366 \cdot 10^{-4}$	10	3.19	0.13	f_1	1.55	1
20	1.25	3.35	0.2	$890 \cdot 10^{-4}$	2	3.32	0.13	f_2	1.61	1
21	0.5	3.04	0.1	$1240 \cdot 10^{-4}$	5	3.05	0.12	f_1	1.57	1
22	2.5	4.664	0.452	$66 \cdot 10^{-4}$	10	4.60	0.19	f_2	1.52	1
23	0.2	4.496	0.206	$2036 \cdot 10^{-4}$	2	4.50	0.18	f_1	1.55	1
24	0.25	3.35	0.2	$890 \cdot 10^{-4}$	5	3.35	0.13	f_2	1.61	1
25	1.5	4.255	0.179	$1500 \cdot 10^{-4}$	10	4.25	0.17	f_1	1.57	1

Таблица А.2 – Варіанти початкових даних

№п/п	$S_{\text{инт}},$ $\text{В}\cdot\text{мВт}^{-1}$	$\lambda_{\text{max}},$ мкм	$a,$ мм	$b,$ мм	$D^*, \text{мВт}^{-1} \cdot$ $\text{Гц}^{0.5} \cdot \text{см}$	$\Delta a,$ Мм	$\Delta b,$ мм	τ мкс	N_s	$q(x,y)$
1	$5 \cdot 10^4$	7.5	0.5	1	$4 \cdot 10^9$	0.1	0.1	10	1	f_3
2	$2 \cdot 10^4$	7.5	0.2	1	$4 \cdot 10^9$	0.05	0.05	10	2	f_4
3	$1 \cdot 10^4$	6.0	1	1	$2 \cdot 10^9$	0.25	0.25	10	3	f_3
4	$5 \cdot 10^4$	6.0	2	0.5	$2 \cdot 10^9$	0.1	0.1	10	4	f_4
5	$4 \cdot 10^4$	7.5	2	0.2	$4 \cdot 10^9$	0.05	0.05	10	5	f_3
6	$4 \cdot 10^4$	6.0	2	1	$2 \cdot 10^9$	0.25	0.25	5	6	f_4
7	$5 \cdot 10^4$	10.5	0.5	2	$5 \cdot 10^9$	0.1	0.1	5	7	f_3
8	$3 \cdot 10^4$	6.0	0.2	2	$2 \cdot 10^9$	0.05	0.05	5	8	f_4
9	$5 \cdot 10^4$	6.0	1	0.5	$2 \cdot 10^9$	0.1	0.1	5	1	f_3
10	$2 \cdot 10^4$	6.0	2	0.2	$2 \cdot 10^9$	0.05	0.05	5	2	f_4
11	$4 \cdot 10^4$	6.0	2	1	$2 \cdot 10^9$	0.25	0.25	20	3	f_3
12	$1 \cdot 10^4$	6.0	0.5	1	$2 \cdot 10^9$	0.1	0.1	20	4	f_4
13	$3 \cdot 10^4$	7.5	0.2	1	$4 \cdot 10^9$	0.05	0.05	20	5	f_3
14	$4 \cdot 10^4$	10.5	1	1	$5 \cdot 10^9$	0.25	0.25	20	6	f_4
15	$3 \cdot 10^4$	6.0	2	0.5	$2 \cdot 10^9$	0.1	0.1	20	7	f_3
16	$2 \cdot 10^4$	7.5	2	0.2	$4 \cdot 10^9$	0.05	0.05	50	8	f_4
17	$5 \cdot 10^4$	7.5	2	1	$4 \cdot 10^9$	0.25	0.25	50	1	f_3
18	$3 \cdot 10^4$	6.0	0.5	1	$2 \cdot 10^9$	0.1	0.1	50	2	f_4
19	$1 \cdot 10^4$	6.0	0.2	1	$2 \cdot 10^9$	0.05	0.05	50	3	f_3
20	$5 \cdot 10^4$	6.0	1	1	$2 \cdot 10^9$	0.25	0.25	50	4	f_4
21	$2 \cdot 10^4$	6.0	2	1	$2 \cdot 10^9$	0.25	0.25	100	5	f_3
22	$4 \cdot 10^4$	7.5	2	0.5	$4 \cdot 10^9$	0.1	0.1	100	6	f_4
23	$2 \cdot 10^4$	7.5	1	0.2	$4 \cdot 10^9$	0.05	0.05	100	7	f_3
24	$4 \cdot 10^4$	6.0	0.5	2	$2 \cdot 10^9$	0.1	0.1	100	8	f_4
25	$3 \cdot 10^4$	7.5	0.2	2	$4 \cdot 10^9$	0.05	0.05	100	5	f_3

Примітки:

1. Нормована спектральна щільність потоку випромінювання апроксимована функціями $s_{\epsilon}(\lambda) = \{f_1, f_2\}$ де:

$$f_1 = e^{-b_{\epsilon}^2 \cdot (\lambda - \lambda_{0\epsilon})^2}; \quad f_2 = \frac{b_{\epsilon}^2}{b_{\epsilon}^2 + (\lambda - \lambda_{0\epsilon})^2}.$$

2. Інтегральний коефіцієнт поглинання ІЧ-випромінювання газової компоненти описаний функцією:

$$K_{int}(\lambda) = K_{\max} \cdot 2,718 \cdot \frac{9 \cdot (\lambda - \lambda_{0n})^2}{\left(\frac{\Delta\lambda_n}{2}\right)^2} \cdot e^{-\frac{9 \cdot (\lambda - \lambda_{0n})^2}{\left(\frac{\Delta\lambda_n}{2}\right)^2}}.$$

3. Нормована спектральна чутливість фотоприймального пристрої задана у вигляді:

$$s_{\Phi\P}(\lambda) = \begin{cases} b_{\Phi\P} \cdot \lambda, & 0 \leq \lambda \leq \lambda_{\max}; \\ 0, & \lambda > \lambda_{\max}, \end{cases}$$

де $b_{\Phi\P} = \lambda_{\max}^{-1}$.

4. Нормована функція просторової щільності потоку випромінювання апроксимована функціями $q(x, y) = \{f_3, f_4\}$ де:

$$f_3 = e^{-r^2 \cdot (x^2 + y^2)}; \quad f_4 = \frac{r^2}{r^2 + (x^2 + y^2)}.$$

Графічне зображення функції $Q(x, y)$ наведено на рис. А.1.

Діаметр променя встановлюється на рівні 0,5 функції $q(x, y)$ і за

значення діаметра променя прийняти найбільше зі значень $\{a, b\}$.

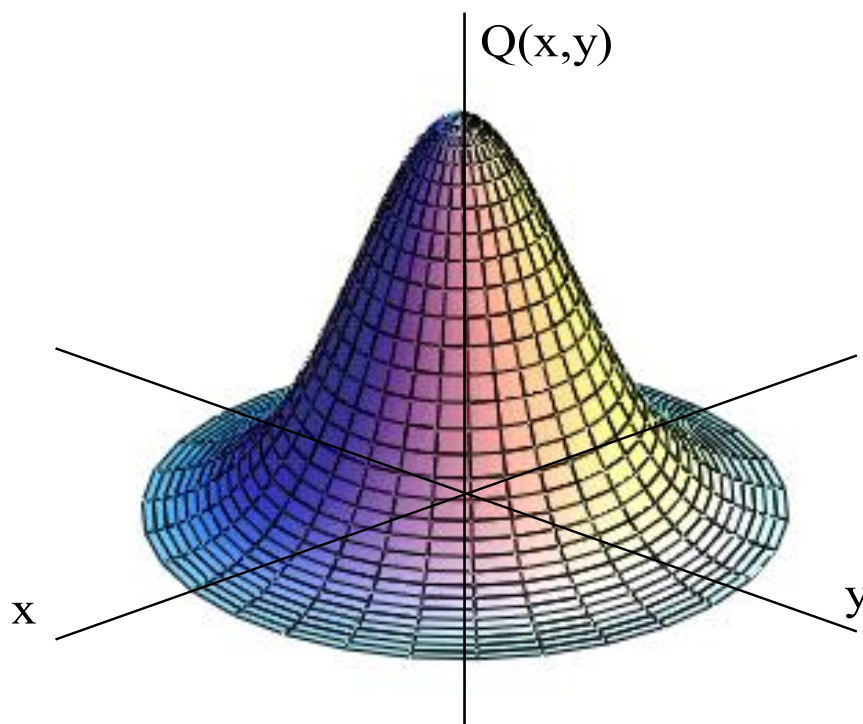


Рисунок А.1 – Графік функції просторової щільності розподілу потоку випромінювання

5. Напрямок зміщення вікна фотоприймача $N_s = \{1, 2, \dots, 8\}$ і визначається згідно з рис. А.2.

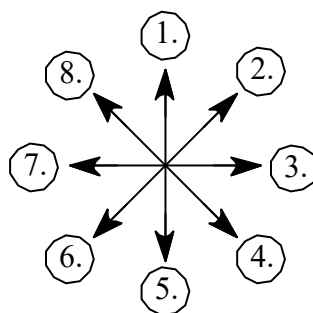


Рисунок А.2 – Напрями зміщення вікна фотоприймача щодо осі променя і їх кодування

ДОДАТОК Б

ЕЛЕМЕНТИ СПЕКТРАЛЬНОЇ ТЕОРІЇ ПОГЛИНАННЯ ІЧ-ВИПРОМІНЮВАННЯ ГАЗАМИ

Методи якісного та кількісного аналізу складу речовин, що засновані на здатності речовин вибірково поглинати оптичне випромінювання, отримали широке застосування при вирішенні різноманітних аналітичних задач в промисловості, наукових дослідженнях і при контролі за станом навколишнього середовища. Зазначені методи є розділом абсорбційної спектроскопії. Спектри поглинання характеризують будову поглинаючої речовини, тоді як рішення аналітичних задач вимагає знання не всього спектру, а лише окремих, найбільш характерних для визначених компонентів середовища інтервалів частот.

Енергію ізольованої молекули можна представити у вигляді:

$$E = E_{\text{пост}} + E_{\text{ел}} + E_{\text{кол}} + E_{\text{об}},$$

де враховані енергія поступального руху, яка залежить від швидкості руху і може приймати будь-які значення, а також енергія електронів валентного рівня, енергія коливального і обертального руху молекули (всі останні приймають тільки значення квантових рівнів).

Розглядаючи і з огляду на взаємодію різних видів руху молекул, баланс енергії набуває вигляду:

$$E = E_{\text{пост}} + E_{\text{ел}} + E_{\text{кол}} + E_{\text{обер}} + E_{\text{ел.кол}} + E_{\text{ел.обер}} + E_{\text{кол.обер}}.$$

Тут останні три члена враховують взаємодію різних видів руху молекули.

Величини електронної, коливальної та обертальної енергій молекули мають різний порядок. Енергія електронних переходів має порядок декількох електронівольт, коливальна енергія вимірюється десятими і сотими частками електронівольт, обертальна енергія – тисячними і десятитисячними частками електронівольт. Відповідно величині енергії електронні спектри займають ультрафіолетову і видиму частини спектра, коливальні – ближній інфрачервоний, обертальні – далеку інфрачервону і мікрохвильову. Оскільки в процесі руху молекули і її взаємодії з іншими молекулами відбувається зміна одночасно всіх трьох складових енергії одночасно, то в чистому вигляді коливальні спектри не виявляються. Таким чином, в залежності від діапазону довжин хвиль ми маємо справу або з електронно-коливально-обертальними, або з коливально-обертальними, або з чисто обертальними спектрами. Коливально-обертальна смуга містить деяку безліч спектральних ліній поглинання.

Спектр одиночної лінії. Квантова механіка дає такий вираз для контуру спектральної лінії:

$$k(\nu) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\gamma_N}{(\nu - \nu_0)^2 + \gamma_N^2},$$

де γ_N – природна ширина лінії, вона визначається на рівні 0,5.

Розширення спектральної лінії за рахунок ефекту Доплера. Має місце максвелловий розподіл молекул за швидкостями. Для контуру спектральної лінії виходить вираз:

$$k(\nu) = \frac{S}{\sqrt{\pi} \cdot \alpha_D} \cdot e^{-\left(\frac{\nu - \nu_0}{\alpha_D}\right)^2},$$

де S – інтенсивність лінії; α_D – доплерівська напівширина спектральної лінії,

що визначається виразом: $\alpha_D = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{2kT \ln 2}{m}}$, де T – абсолютна температура; m – маса молекули; c – швидкість світла; k – постійна Больцмана.

Для лінії обертальної смуги H_2O навколо 200 см^{-1} – $\alpha_D = 3.5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

Розширення спектральної лінії за рахунок зіткнень молекул. Цей параметр безпосередньо обумовлений тиском: з ростом тиску зростає інтенсивність зіткнень. Теорія Лоренца дає наступний опис спектральної лінії (в літературі часто званім дисперсійним контуром):

$$k(\nu) = \frac{s}{\pi_D} \cdot \frac{\gamma_L}{(\nu - \nu_0)^2 + \gamma_L^2},$$

де $\gamma_L = \frac{1}{4\pi\tau(\nu)}$ – напівширина спектру, $\tau(\nu)$ – час життя в збудженому стані поглинаючої або випромінюючої молекули, залежне від її швидкості.

Зазвичай це встановлюється через середню швидкість молекул і часу життя. З кінетичної теорії газів виходить вираз, який в основному відповідає квантово-механічній неадіабатичній теорії розширення спектральних ліній тиском Андерсона (1949 г.):

$$\gamma_L = \frac{1}{2\pi\tau} = \sum_i n_i \sigma_i^2 \left[\frac{2kT}{\pi} \cdot \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{m_i} \right) \right]^{1/2},$$

де n_i – концентрація молекул i -го типу; σ_i – ефективна відстань між збудженою молекулою і молекулою i -го типу; m та m_i – маси зазначених молекул.

Для двокомпонентної суміші напівширина лінії записується в більш простій формі:

$$\gamma_L = \gamma_L^0 \cdot \frac{P}{P_0} \cdot \sqrt{\frac{T_0}{T}},$$

де γ_L^0 – напівширина лінії при стандартних умовах ($P=1$ атм, $T_0 = 273$ °K).

Найбільш ймовірне для атмосферних газів значення – $\gamma_L^0 = 0,08$ см⁻¹.

Спільна дія ефектів Доплера і зіткнень молекул. В атмосфері обидва ефекту працюють одночасно, але в нижніх шарах (до 7 км) переважає ефект зіткнень, далі дія обох ефектів виявляється однаковою (7...37 км), ще вище переважає ефект Доплера (> 40 км).

Спільний розгляд двох ефектів розширення спектральних ліній приводить до наступного виразу для коефіцієнта поглинання:

$$k(\nu) = \frac{k_0 y}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{y^2 + (x-t)^2} dt,$$

$$\text{де } k_0 = \frac{S}{\gamma_D} \left(\frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2}; \quad y = \frac{\gamma_L}{\lambda_D} (\ln 2)^{1/2}; \quad x = \frac{\nu - \nu_0}{\gamma_D} (\ln 2)^{1/2}.$$

Інтенсивність спектральної лінії. Записується через коефіцієнт поглинання $k(\nu)$:

$$S = \int k(\nu) d\nu.$$

Квантова механіка для інтенсивності окремого переходу молекули зі стану з індексом j в стан, що характеризується індексом i , дає такий вираз:

$$S_{i,j} = \frac{n_j}{g_i^n} \cdot \frac{8\pi^3 \nu_{i,j} |R_{i,j}|^2}{3hc} \cdot \left(1 - e^{-\frac{h\nu_{i,j}}{kT}} \right),$$

де n_j – концентрація молекул в нижньому стані; n – концентрація всіх молекул; g_i – статистична вага; $\nu_{i,j}$ – частота переходу; $|R_{i,j}|^2$ – квадрат матричного елемента дипольного моменту; T, h, k, c – абсолютна температура, постійні Планка, Больцмана і швидкість світла.

Знаходження матричних коефіцієнтів – складне завдання. Ці коефіцієнти пов'язані з відомими коефіцієнтами Ейнштейна $A_{i,j}$, що характеризують ймовірності вимушеного випромінювання і поглинання між рівнями молекули з індексами i та j :

$$A_{i,j} = \frac{64\pi^4 \nu_{i,j}^3}{3hg_i c^3} |R_{i,j}|^2.$$

Для електричного дипольного випромінювання величини $A_{i,j}$, мають порядок $10^8, 10$ і 1 с^{-1} для електронних, коливальних і обертальних переходів відповідно.

Спектральна смуга поглинання. Кожному електронному стану відповідає сітка коливальних енергетичних рівнів, що характеризуються певним значенням коливального квантового числа ν . У свою чергу кожному коливальному рівню відповідає серія обертальних рівнів, що характеризуються певним значенням обертального квантового числа j .

З рис. Б.1 випливає, чому електронні і коливальні переходи в молекулі не можуть спостерігатися в чистому вигляді. В ансамблі молекул маємо справу з їх статистичним розподілом за величиною електронної, коливальної та обертальної енергії. При кожному електронному переході одночасно змінюються коливальна і обертальна енергії. Вся сукупність електронних переходів утворює електронно-коливально-обертальний спектр, інтенсивність ліній якого визначається розподілом молекул за енергетичними рівнями і

можливостями відповідних переходів.

Електронно-коливально-обертальний спектр являє собою набір смуг. Кожній сукупності переходів молекули між двома електронними станами відповідає електронна смуга, що складається з набору коливально-обертальних смуг. Високі коливальні рівні можуть перекриватися нижніми рівнями сусіднього вищого електронного стану. Це ускладнює характер спектра.

Обертальна енергія. Молекула, що обертається, розглядається як тверде тіло – жорсткий дзига. Особливості обертання молекули визначаються головними моментами інерції щодо трьох осей.

Лінійні молекули. Енергія обертання:

$$E = \frac{\overline{M_p^2}}{2I},$$

де $\overline{M_p^2}$ – квадрат моменту кількості руху; I – момент інерції щодо осі обертання, перпендикулярній осі молекули і, що проходить через її центр ваги,

$$\overline{M_p^2} = \frac{h}{2\pi} j \cdot (j+1),$$

де h – постійна Планка; j – обертальне квантове число, $j = 0, 1, 2, 3, \dots$

Таблиця Б.1 – Значення моментів енергії в залежності від типу молекул та групів газів

№ п/п	Момент інерції	Тип молекули	Групи газів
1	$I_a = 0; I_b = I_c \neq 0$	Лінійні молекули	$CO_2, NO_2, NO, CO, O_2, N_2, SO_2$
2	$I_a \neq 0; I_b = I_c \neq 0$	Симетричний дзига	Серед атмосферних газів немає
3	$I_a = I_b = I_c \neq 0$	Сферичний дзига	CH_4
4	$I_a \neq I_b \neq I_c$	Асиметричний дзига	H_2O, O_3, HDO

Квантова енергія молекули:

$$E = \frac{h}{2\pi \cdot 2I} \cdot j \cdot (j+1) = B \cdot j \cdot (j+1),$$

$$B = \frac{h}{2\pi \cdot 2I} = \frac{0,83 \cdot 10^{-34}}{I} [\text{МГц}] - \text{обертальна постійна молекули.}$$

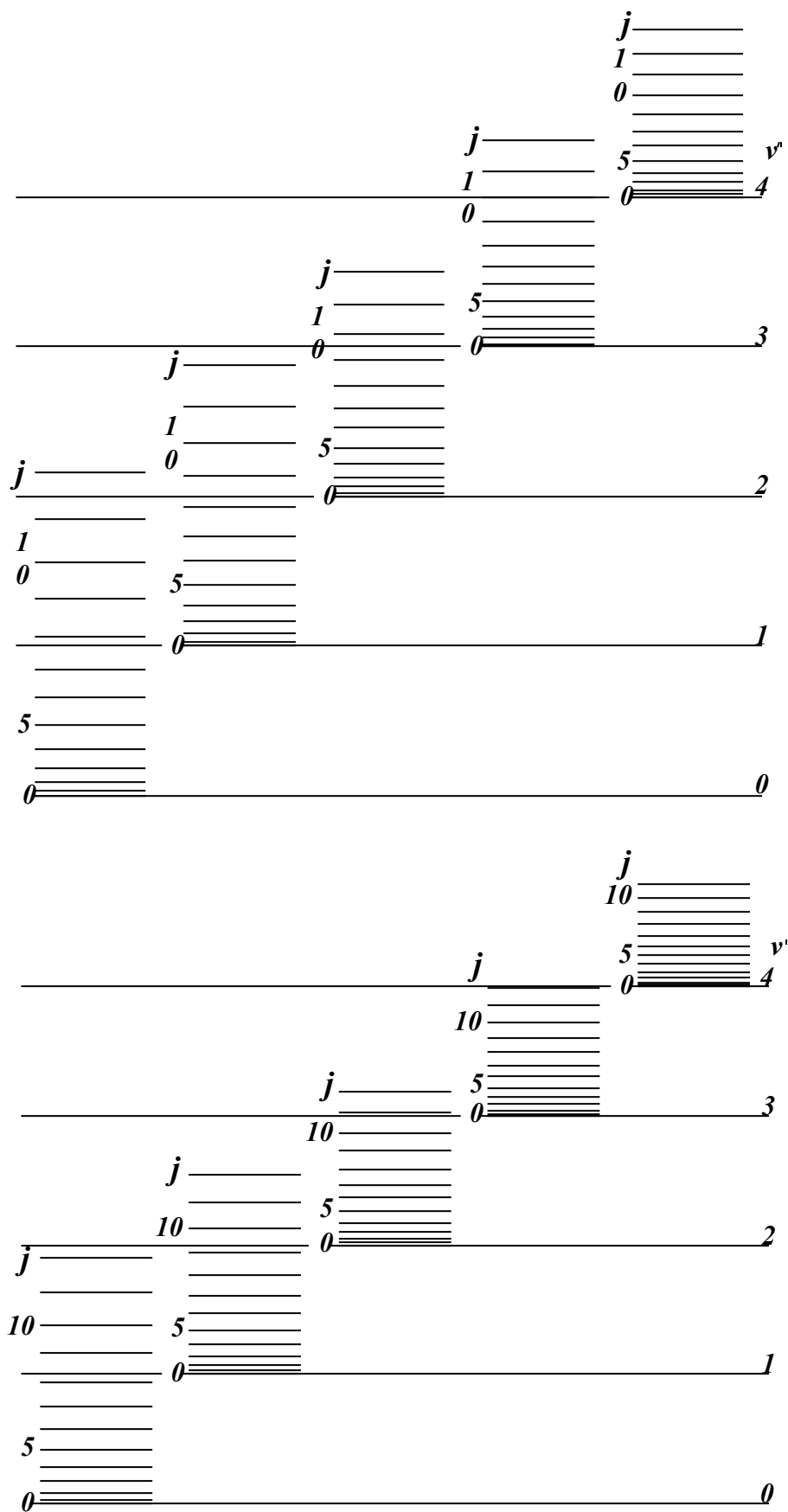


Рисунок Б.1 – Схема коливальних і обертальних рівнів двох електронних станів молекули (один і два штриха, що відповідає верхньому і нижньому електронним станам молекули)

Таблиця Б.2 – Значення квантованої енергії молекули при різних значеннях обертового квантованого числа

j	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
E_j	0	2 В	6 В	12 В	20 В	30 В	42 В	56 В	72 В	90 В	110 В

Відстань між послідовними рівнями енергії:

$$E_{j+1} - E_j = 2 B \cdot (j + 1),$$

пропорційне значенню j .

Число молекул з даними j при тепловій рівновазі визначається як:

$$n_j = (2j + 1) \cdot n_0 \cdot e^{-\frac{B \cdot j(j+1)}{kT}},$$

де n_0 – число молекул в стані $j = 0$.

Молекули типу сферичної дзиги. Найпростіший тип нелінійних молекул. Рівні обертової енергії визначаються тією ж формулою, що і лінійні молекули. Але у них більше число ступенів свободи. Розподіл молекул за обертовими станами:

$$n_j = (2j + 1)^2 \cdot n_0 \cdot e^{-\frac{B \cdot j(j+1)}{kT}}.$$

Молекули типу асиметричної дзиги. Для молекул типу асиметричної дзиги:

$$I_a < I_b < I_c; A > B > C,$$

де A, B, C – обертові постійні молекули відповідно за осями.

Асиметрія дзиги:

$$\chi = \frac{2B - A - C}{A - C},$$

для витягнутої дзиги $\chi = -1$; при $B = \frac{A+C}{2}$, $\chi = 0$; для води $\chi = -0,430$.

Спектри молекул дуже складні. Дозволені переходи $\Delta j = 0, \pm 1$. При цьому переходам з $\Delta j = 0, +1, -1$ відповідають Q, R, P гілки.

Коливальна енергія молекул. Молекула, що містить N атомів має $3N$ ступенів свободи. З них 3 відводиться на поступальну ходу центра ваги молекули, 3 або 2 – на обертальний рух. Лінійні молекули мають 2 ступеня свободи обертального руху, нелінійні молекули – 3 ступеня свободи. Нелінійна молекула має $3N - 6$ ступенів свободи коливального руху і в загальному випадку стільки ж різних частот коливань. У лінійної молекули $3N - 5$ ступенів свободи і частот коливань. У симетричних молекул деякі частоти збігаються внаслідок виродження.

Найпростішою моделлю коливального руху молекули є гармонійний осцилятор. Для цієї моделі квантова механіка дає вираз коливальної енергії:

$$E_v = h\nu \cdot \left(v + \frac{1}{2} \right),$$

де $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{M}}$ – частота коливань; v – коливальне квантове число,

$v = 0, 1, 2, 3, \dots, k$ – константа квазіпружної сили; M – маса осцилятора.

Різниця енергій сусідніх рівнів дорівнює:

$$E_{v+1} - E_v = h\nu.$$

Рівні енергії знаходяться на однаковій відстані.

Дозволені переходи $\Delta \nu = \pm 1$ між сусідніми рівнями з однією і тією ж частотою. Для двоатомних молекул коливальна енергія молекули:

$$E_\nu = h\nu \cdot \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - xh\nu \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2,$$

де x – постійна ангармонійності. Так для молекули, що складається з різних атомів для коливальних частот ν_k маємо:

$$\nu_k = \nu \cdot (1 - x) \cdot (\nu^{11} - \nu^1) - \nu x \cdot (\nu^{112} - \nu^{12}),$$

де ν^{11} та ν^1 – коливальні квантові числа верхнього і нижнього станів молекули.

Наприклад, для серії, що починається з нульового рівня ($\nu^1 = 0$), отримаємо $\nu_k(0, \nu^{11}) = \nu(1 - x)\nu^{11} - \nu x\nu^{112}$, звідки виходить, що сукупність частот коливальних переходів і, отже коливально-обертальних смуг:

$$\nu_1 = \nu(1 - 2x); \nu_2 = 2\nu(1 - 3x); 3\nu(1 - 4x).$$

Відстань між сусідніми лініями з ростом ν^{11} і частоти зменшується. Лінії сходяться до кордону відповідної дисоціації молекули. Взаємодія коливань і обертання молекули враховується за допомогою оберальної постійної, що є функцією коливального квантового числа ν :

$$B_\nu = B_e - \alpha \left(\nu + \frac{1}{2} \right),$$

де B_e – оберальна постійна неколивальної молекули; α – постійна,

відношення якої до B_e не перевищує декількох сотих. B_e лінійно убиває з ростом квантового числа.

Енергія переходу між двома рівнями:

$$E^{11} - E^1 = E_{v^{11}} + B_{v^{11}} j^{11}(j^{11} + 1) - E_{v^1} - B_{v^1} j^1(j^1 + 1).$$

Різниця $E^{11} - E^1 = \nu_{00}$ визначає частоту чисто коливального переходу (частоту нульової лінії) $j^{11} = j^1 = 0$. Перехід, відповідної нульової лінії заборонений. Положення цієї лінії визначається розрахунковим шляхом. Переходи, що визначаються різницею енергій рівнів, породжують наступні гілки смуг коливально-обертального спектра:

при $\Delta j = j^{11} - j^1 = +1$ переходи утворюють R гілку,

при $\Delta j = j^{11} - j^1 = +0$ переходи утворюють Q гілку,

при $\Delta j = j^{11} - j^1 = -1$ переходи утворюють P гілку.

Для Q гілки отримуємо частоти переходів:

$$\nu_j = \nu_{00} + (B_{v^{11}} - B_{v^1}) j(j + 1).$$

Так як різниця $B_{v^{11}} - B_{v^1}$ дуже мала, лінії Q гілки розташовані дуже близько. ІК-смуги ділять на паралельні і перпендикулярні за випадковим збігом або перпендикулярністю напрямку дипольного моменту з напрямком осі симетрії молекули. Перпендикулярна структура створює в центрі смуги максимум поглинання. Паралельна – мінімум (відсутність Q гілки).

Лінійні молекули. Є як паралельні, так і послідовні молекули. Спектри мають раніше описану структуру.

Сферичний дзига. Положення обертальних ліній в коливально-обертальній смузі має той же характер, що і для лінійних молекул. Смуги

поглинання складаються з трьох гілок. Взаємодія коливального і обертального рухів обумовлює розщеплення тричі вироджених коливань.

Асиметричний дзига. Молекули мають складні коливальні і коливально-обертальні спектри. Складний вибір дозволених квантових чисел з урахуванням трьох постійних, асиметричності, ангармонічності коливань, відцентрового розтягування, резонансного збурення рівнів енергій, впливу сил Коріоліса. Можуть виникати паралельні і послідовні смуги.