

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ, МОЛОДІ ТА СПОРТУ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КАФЕДРА ЕЛЕКТРОННОЇ ТЕХНІКИ

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до розрахункової роботи «Моделювання оптичного каналу» з дисципліни «Оптоелектронні вимірювальні системи» для студентів спеціальності: 8.090903 «Наукові, аналітичні та екологічні прилади та системи»

РОЗГЛЯНУТО

на засіданні кафедри
електронної техніки
протокол № _ від __.04.11 р.

ЗАТВЕРДЖЕНО

на засіданні навчально-
видавничої ради
ДВНЗ «ДонНТУ»
протокол № _ від ____ 2011 р.

УДК 551.510.42 : 621.383.8 : 681.7.068

Методичні вказівки до розрахункової роботи «Моделювання оптичного каналу» по курсу «Оптоелектронні вимірювальні системи» (для студентів спеціальності 7.090902 «Наукові, аналітичні і екологічні прилади і системи») / Хламов М.Г. – Донецьк: ДонНТУ, 2011. – 33 с.

У методичних вказівках надані завдання розрахункової роботи «Моделювання оптичного каналу» і методика їх виконання по курсу «Оптоелектронні вимірювальні системи» для студентів спеціальності 7.090902 «Наукові, аналітичні і екологічні прилади і системи». Розрахункова робота виконується на персональному комп'ютері з використанням пакету Machtcad.

Укладач:

к.т.н., проф.Хламов М.Г.

Рецензент

к.т.н., доц.

Секирин О.І.

ЗМІСТ

	Стор.
1. Завдання на розрахункову роботу «Моделювання оптичного каналу»	4
2. Методичні вказівки до виконання розрахункової роботи	9
2.1. Математичне моделювання оптичного каналу і сигналів	9
2.2. Облік оптичних неоднорідностей каналу	14
2.3. Визначення ефективності введення випромінювання у фотоприймач.	16
2.4. Визначення вихідного сигналу фотоприймача	17
2.5. Визначення параметрів шуму на виході фотоприймача	18
3. Порядок виконання розрахунків	20
4. Зміст звіту по розрахунковій роботі	22
5. Контрольні питання для самоперевірки	23
ЛІТЕРАТУРА	24
ДОДАТОК А. Елементи спектральної теорії поглинання ІЧ – випромінювання газами	25

1. Завдання на розрахункову роботу «Моделювання процесів в оптичному каналі газоаналізатора абсорбції»

Визначити параметри і характеристики вимірника концентрації газової компоненти за наступними даними:

параметри газової компоненти	
максимальне значення вимірюваного параметра	$C, \%$
довжина хвилі центру смуги поглинання	$\lambda_{n0}, \text{мкм}$
ширина смуги поглинання	$\Delta\lambda_n, \text{мкм}$
найбільше значення інтегрального коефіцієнта поглинання	$K_{max}, \text{см}^{-1}$
аналітичний опис залежності інтегрального коефіцієнта поглинання від довжини хвилі	$K(\lambda), \text{см}^{-1}$
параметри джерела електролюмінесценції випромінювання	
номінальне значення потоку випромінювання	$\Phi_0, \text{мВт}$
довжина хвилі центру спектру випромінювання	$\lambda_{u0}, \text{мкм}$
ширина спектру випромінювання на рівні 0.5	$\Delta\lambda_i, \text{мкм}$
аналітичний опис огинаючої нормованого спектру випромінювання	$su(\lambda)$
неоднорідності оптичного каналу враховуються відносними коефіцієнтами заломлення середовищ, створюючих оптичний канал	
фокусуєчі системи	n_{fc}
газові середовища	n_{gc}
фотоприймальний пристрій має параметри і характеристики інтегральний коефіцієнт чутливості	$S_{int}, \text{В} \cdot \text{мВт}^{-1}$
максимальна довжина хвилі	$\lambda_{max}, \text{мкм}$
аналітичний опис огинаючої нормованої функції спектральної чутливості	$s\phi(\lambda)$
розміри вікна фотоприймального пристрою	$a \times b, \text{мм} \times \text{мм}$
обнаружительна здатність	$D^*, \text{мВт}^{-1} \cdot \text{Гц}0.5 \cdot \text{см}$
постійна часу фотоприймального пристрою	$\tau, \text{мкс}$
просторові параметри потоку випромінювання в площині фотоприймального пристрою	
аналітичний опис функції просторової	$Q(x,y), \text{мВт} \cdot \text{см}^{-2}$
густина потоку випромінювання	
зсув вікна фотоприймача щодо осі променя	$\Delta a, \Delta b, \text{мм}$
напрямок зсуву вікна фотоприймача	N_s

Численные значения исходных данных приведены в табл.1.

Таблиця 1 – Варіанти даних розрахункової роботи

№п/п	$C, \%$	$\lambda_{n0}, \text{мкм}$	$\Delta\lambda_n, \text{мкм}$	$K_{max}, \text{см}^{-1}$	$\Phi_0, \text{мВт}$	$\lambda_{u0}, \text{мкм}$	$\Delta\lambda_u, \text{мкм}$	$s_u(\lambda)$	$n_{\phi c}$	n_{ze}
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

Продовження табл.1

№п/п	$S_{\text{инт}}$ $\text{В}\cdot\text{Вт}^{-1}$	λ_{max} мкм	a , мм	b , мм	D^* , $\text{мВт}^{-1}\cdot$ $\text{Гц}^{0.5}\cdot\text{см}$	Δa , мм	Δb , 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. Нормовану спектральну густину потоку випромінювання апроксимовано функціями $su(\lambda) = \{f_1, f_2\}$, де

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

2. Інтегральний коефіцієнт поглинання ГИК – випромінювання газової компоненти описаний функцією:

$$K_{\text{инт}}(\lambda) = K_{\text{max}} \cdot 2.718 \cdot \frac{g(\lambda - \lambda_{0n})^2}{\left(\frac{\Delta\lambda_n}{2}\right)^2} \cdot e^{-\frac{g(\lambda - \lambda_{0n})^2}{\left(\frac{\Delta\lambda_n}{2}\right)^2}}.$$

3. Нормована спектральна чутливість фотоприймального пристрою задана у вигляді:

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

де $b_{\phi n} = \lambda_{\text{max}}^{-1}$.

4. Нормована функція просторової густини 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 $Q(x,y)$ приведене на рис.2.

Діаметр променя встановлюється на рівні 0.5 функції $q(x,y)$ і за значення діаметру променя прийняти найбільше із значень $\{a,b\}$.

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

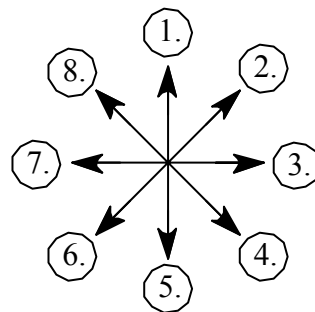


Рисунок 1 – Напрями зсуву вікна фотоприймача відносно осі променя і їх кодування

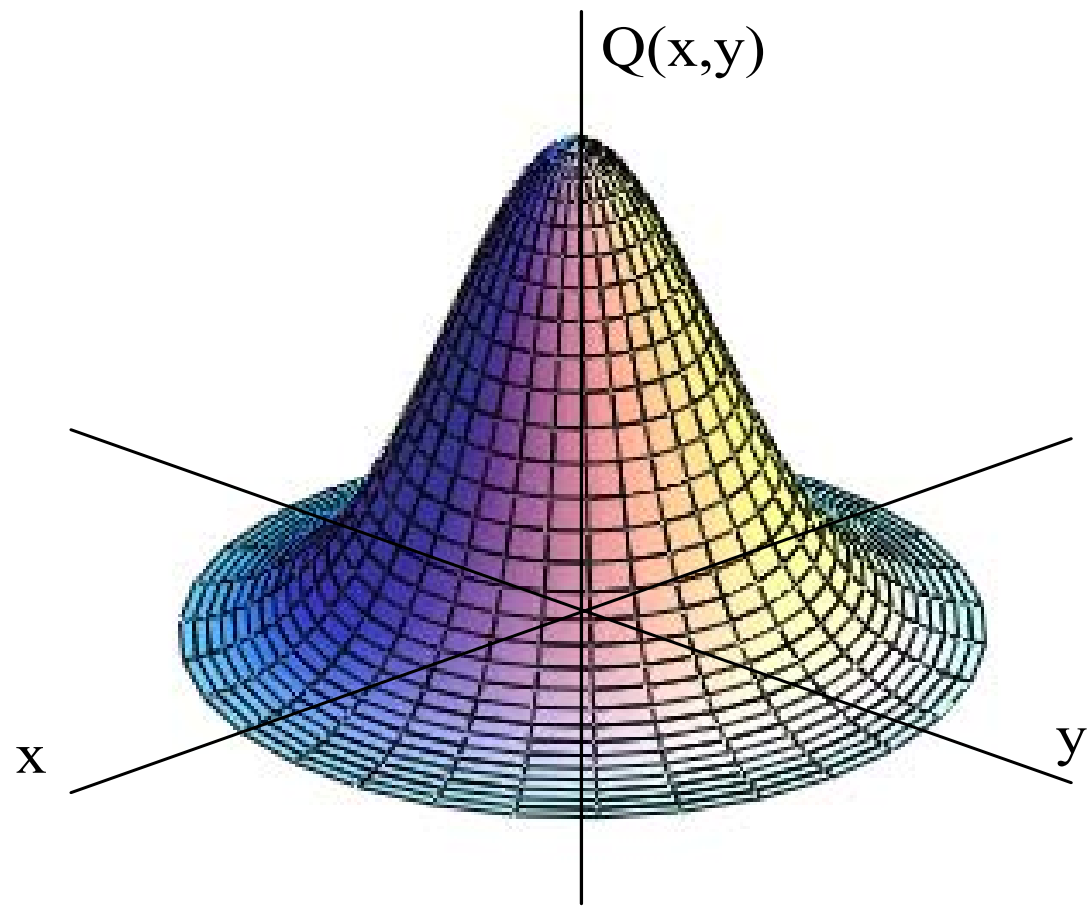


Рисунок 2 - Графік функції просторової **густини** розподілу потоку випромінювання

2. Методичні вказівки до виконання розрахункової роботи

2.1. Математичне моделювання оптичного каналу і сигналів

2.1.1. 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 ГИК – випромінювання приведені в додатку А (докладно про молекулярне поглинання див. роботи [1-4]).

З коливальним і обертальним рухами молекул газу пов'язана форма електромагнітного поля молекули, залежна одночасно від ступеня симетрії молекул газу і її молекулярної маси. При цьому молекули можуть бути строго симетричними і неповно симетричними різному ступеню симетрії. Повно симетричні молекули мають єдину смугу поглинання. Неповно симетричні молекули, залежно від ступеня симетрії, мають декілька смуг поглинання. Із зростанням ступеня не симетрії число смуг поглинання зростає. Із зростанням молекулярної маси довжина хвилі центру смуг поглинання зростає. Поглинання носить квантовий характер і пов'язане з розподілом енергії електронів, обертального і коливального рухів по енергетичних рівнях. Поглинання кванта енергії переводить молекулу в збуджений стан, в якому вона знаходиться $t_b \approx 10^{-6}$ с. Із збудженого стану молекули повертаються в початкове, при цьому спонтанно випромінюється квант енергії. Кожна смуга поглинання може містити дві або три гілки створюючих коливально – обертальну смугу спектру. Смуга поглинання спектру носить лінійчатий характер, показаний на мал. 3. Розрахунки поглиненої енергії, що дають задовільні результати, виконуються при високому дозволі по довжині хвилі (на кожен лінійку спектру повинен доводитися 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 спектру сумірної з шириною смуги поглинання економічнішими є методи, засновані на обліку інтегрального коефіцієнта поглинання. Інтегральний коефіцієнт поглинання ПЧ-випромінювання виходить шляхом усереднювання лінійчатого спектру поглинання за інтервал $\Delta\lambda^*$. Довжина інтервалу усереднювання $\Delta\lambda^*$ вибирається не менше відстані між лініями в спектрі поглинання. У розрахунковій роботі інтервал усереднювання прийнятий рівним відстані між лініями в спектрі поглинання. Це веде до зменшення об'єму обчислень в 10 ... 12 разів.

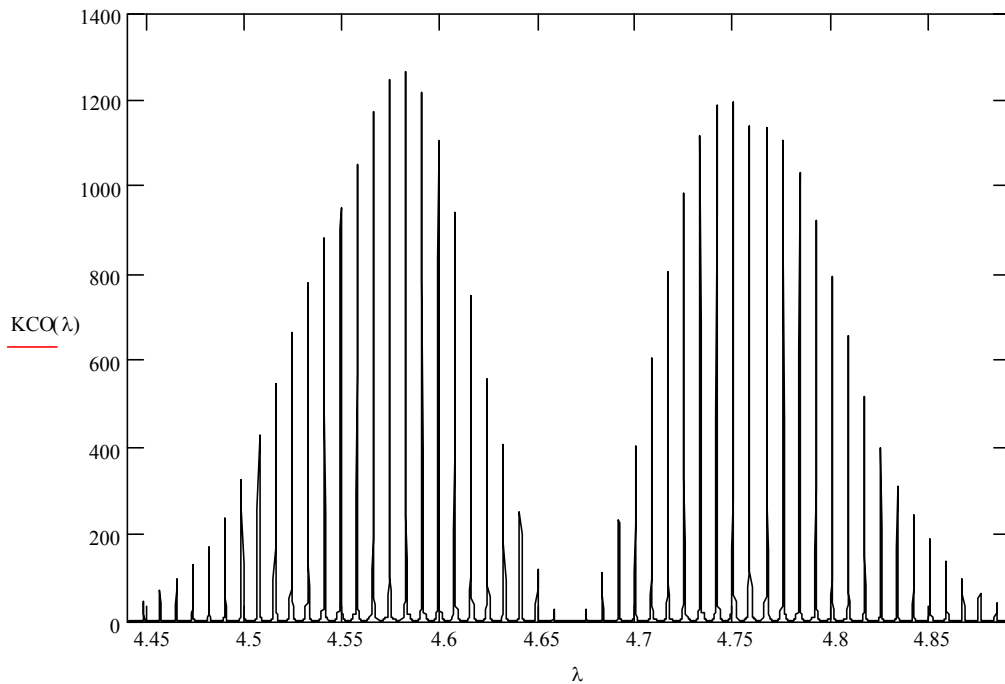


Рисунок 3 - Приклад спектру поглинання трьохатомного газу (молекули лінійного типу)

2.1.2. Модель оптичного каналу. На першій стадії математичного моделювання, оптичний канал (ОК) визначимо як шар тестованої речовини, через який проходить, випробовуючи поглинання, потік випромінювання. У міру обліку впливу різних чинників, визначення каналу буде уточняться.

Модель ОК повинна бути залежністю 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:

$$\Phi(l) = \Phi_0 \cdot e^{-a \cdot l}, \quad (1)$$

де Φ_0 - потік випромінювання на межі тестованої речовини;

a - показник поглинання;

l - довжина шляху (траси) випромінювання в тестованій речовині.

Оптична густина речовини встановлюється законом Бєєра у вигляді:

$$D = a \cdot l = k C \cdot l, \quad (2)$$

де C - концентрація активної компоненти речовини, поглинаючої випромінювання;

k - питомий показник поглинання.

Оптична густина речовини залежить від зовнішніх умов: температури і

тиск. Ці чинники в метеорології [6], враховуються у вигляді еквівалентної довжини траси:

$$l_{\text{э}} = \frac{P_{\text{в}}}{101325} \cdot \frac{237.15}{T_{\text{в}}} \cdot l, \quad (3)$$

де тиск $P_{\text{в}}$ вимірюється в $[\text{Па}]$, а температура $T_{\text{в}} - [^{\circ} \text{ДО}]$. У ІЧ-спектрометрії вплив тиск і температури враховується складнішим чином: від тиску сильно залежить напівширина спектральної лінії поглинання і в меншій від зміни температури, огинаюча спектру смуги теж прямо пропорційна зміні тиску і обернено пропорційна квадратному корінню зміни температури.

Покладемо, на вході ОК діє випромінювання з рівномірним спектром, як показано на мал. 4. На хвилі λ_0 згідно закону Ламберта - Бугера між поглиненим, вхідним і вихідним потоками ОК встановлюється зв'язок:

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

Або, що теж саме:

$$\Phi_n(\lambda) = \Phi_0 - \Phi_0 \cdot T = \Phi_0 \cdot (1 - T) = \Phi_0 (1 - e^D), \quad (4)$$

де T – коефіцієнт пропускання оптичного каналу.

Приведене співвідношення ілюструє рис.5.

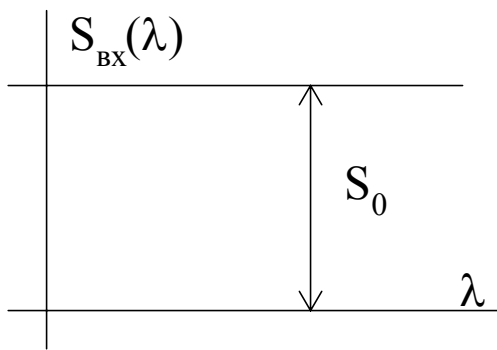


Рисунок 4 - Спектральна щільність потоку випромінювання на вході ОК

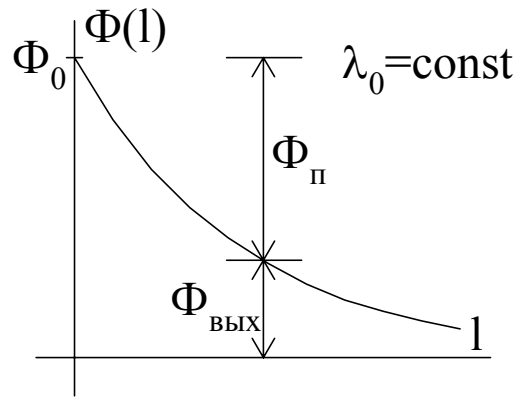


Рисунок 5 - Зміна потоку випромінювання при проходженні шару поглинаючої речовини

Для околиці λ_{n0} тобто $\lambda_0 \pm \Delta\lambda/2$ процес поглинання частотно залежить і визначається функцією інтегрального коефіцієнта поглинання. Ця залежність враховується таким чином

$$K_{\text{инт}}(\lambda) = K_{\text{max}} \cdot 2.718 \cdot \frac{9(\lambda - \lambda_{0n})^2}{\left(\frac{\Delta\lambda_n}{2}\right)^2} \cdot e^{-\frac{9(\lambda - \lambda_{0n})^2}{\left(\frac{\Delta\lambda_n}{2}\right)^2}}. \quad (6)$$

$$D(\lambda, C) = K_{\text{инт}}(\lambda) \cdot l_0 \cdot C / 100; \quad (7)$$

$$T(\lambda, C) = e^{-D(\lambda, C)}; \quad (8)$$

Коефіцієнт передачі оптичного каналу визначається як:

$$K_{OK}(\lambda, C) = T(\lambda, C). \quad (9)$$

Приклад АЧХ ОК приведений на рис.6.

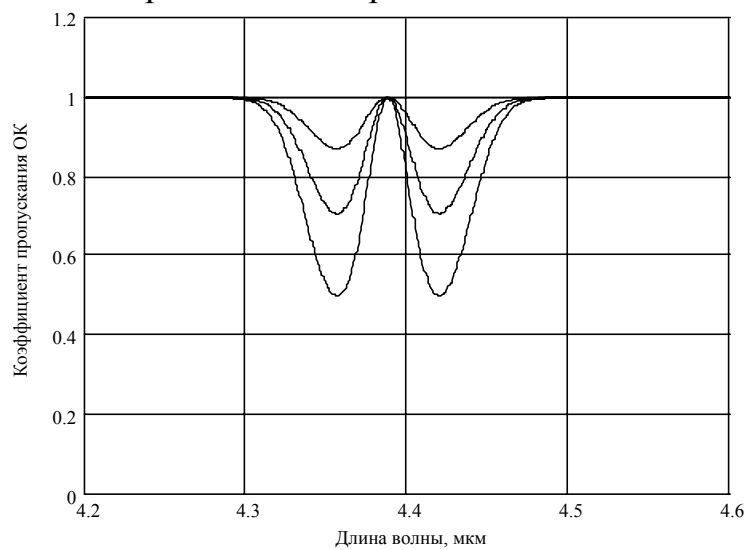


Рисунок 6 – Приклад АЧХ оптичного каналу

Чутливість вимірника визначається завдовжки траси вимірювального каналу. Цю довжину рекомендується встановлювати співвідношенням:

$$l_0 \approx \frac{\ln(2)}{C_{\text{max}} \cdot K_{\text{max}}}. \quad (10)$$

Одержаний вираз використовується для побудови амплітудно-частотної характеристики ОК, що включається в звіт по розрахунковій роботі. Приклад розрахунку спектральної характеристики оптичного каналу $K_{OK}(\lambda, 3)$ приведений в додатку б.

Потік випромінювання, створюваний джерелом електролюмінесценції і направляється на опромінювання ОК, є вхідним сигналом ОК. Цей сигнал заданий функцією $su(\lambda) = \{f3, f4\}$, що є нормованою спектральною густиною потоку випромінювання. Визначимо спектральну густиною потоку вхідного сигналу оптичного каналу таким чином:

$$S_{\text{вхОК}}(\lambda) = S_{u0} \cdot su(\lambda) \quad (11)$$

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

$$S_{выхОК}(\lambda, C) = S_{вхОК}(\lambda) \cdot K_{ОК}(\lambda, C). \quad (12)$$

Обидві функції представляються графічно, причому графік функції $S_{вхОК}(\lambda)$ має вигляд $S_{выхОК}(\lambda, C=0)$, а графік функції $S_{выхОК}(\lambda, C)$ для різних значень концентрації інгредієнта приведений на рис.7. Полученные вирази спектральної густини потоків випромінювання використовуються для побудови спектрів вхідного і вихідного сигналів ОК, що включаються в звіт по розрахунковій роботі. Спектр вихідного сигналу будується при максимальному значенні концентрації інгредієнта.

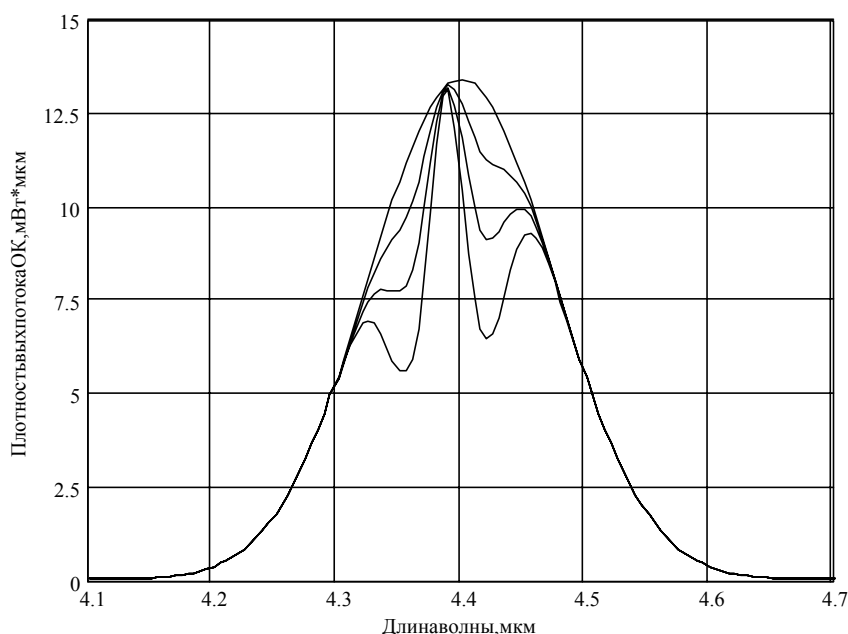


Рисунок 7 – Спектр вихідного сигналу ОК при різних концентраціях інгредієнта

Інформація про концентрацію інгредієнта у вихідному сигналі представлена у вигляді зміни форми спектру. Вхідною величиною всіх фотоприймачів є потік випромінювання, а не окремі спектральні складові. Вихідний сигнал фотоприймача пропорційний інтегральній характеристиці сигналу:

$$U_{фн} = S_{интс} \cdot \Phi_{выхОК}(C); \quad (13)$$

$$\Phi_{выхОК}(C) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} S_{выхОК}(\lambda, C) d\lambda. \quad (14)$$



$$\Phi_{вихОК}(C) = C \cdot W;$$

Рисунок 8 – Уявлення ОК ланкою вимірювального ланцюга

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

$$C = W^{-1} \cdot \Phi_{вихОК}(C). \quad (15)$$

Однією із задач розрахункової роботи є встановлення залежності (15). При виконанні інтегральних перетворень рекомендується використання довідкової літератури [7]. Зависимість концентрації від потоку випромінювання виявляється наочнішою і сприйнятною, якщо вона встановлюється не для потоку випромінювання, а його відносної зміни:

$$C = W^{-1} \cdot \frac{\Phi_{вхОК} - \Phi_{вихОК}(C)}{\Phi_{вхОК}}. \quad (16)$$

Залежності (15) і (16) представляються в графічній формі. Приклад розрахунку і графічного представлення залежностей приведений в додатку Б. Обратная функція W^{-1} є рішенням рівняння (16) відносно C . У (16) вихідний потік оптичного каналу входить у вигляді інтегрального співвідношення (14) з складною залежністю від довжини хвилі. Це значно ускладнює пошук рішення в аналітичному вигляді, але за це рішення може бути прийняте табличне представлення залежності, де аргумент і функцію легко поміняти місцями.

2.2. Облік 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 на рис 9.

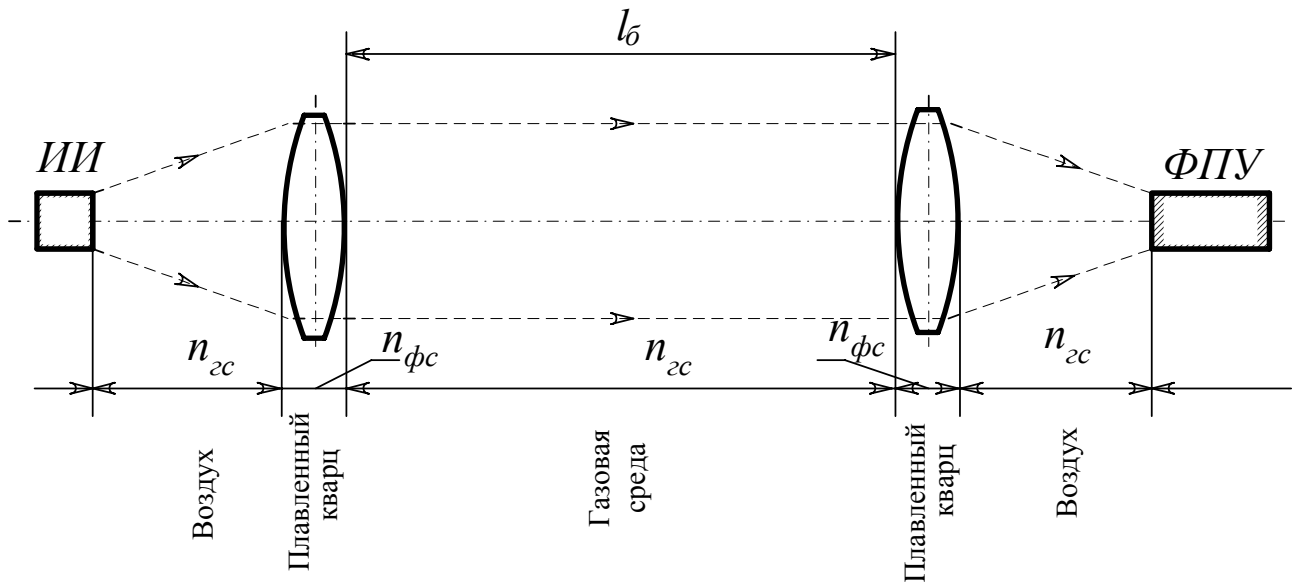


Рисунок 9 – Оптичні неоднорідності каналу

Втрати випромінювання на межах розділу і в середовищах з різними коефіцієнтами заломлення враховуються коефіцієнтами віддзеркалення і пропускання межами розділу, розсіяння і поглинання випромінювання в цих середовищах. У справжній роботі як такі середовища виступають оптичні лінзи, що виготовляються із спеціальних матеріалів: спеціальних сортів оптичного скла, природних і синтетичних кристалів. Дані лінзи вважаються тонкими (їх товщина і діаметр багато менше фокусних відстаней) у зв'язку з чим втратами на розсіяння і поглинання можна нехтувати. З цієї ж причини вважатимемо, що потоки випромінювання падають на межі розділу середовищ по нормалі до поверхні розділу, як показано на рис.10.

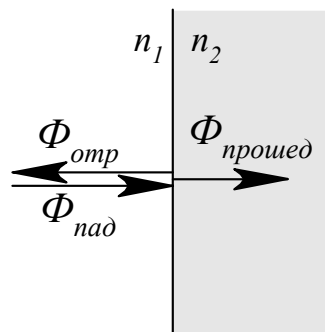


Рисунок 10 – Втрати випромінювання на межі розділу середовищ з різною оптичною густиною

Коефіцієнти віддзеркалення R і пропускання T межею розділу середовищ встановлюються через коефіцієнти заломлення цих середовищ. При нормальній падінні променя ці залежності приймають вигляд:

$$R_{1,2} = \frac{\Phi_{отр}}{\Phi_{пад}} = \frac{(n_2 - n_1)^2}{(n_2 + n_1)^2}; \quad (17)$$

$$T_{1,2} = \frac{\Phi_{\text{прошед}}}{\Phi_{\text{над}}} = 1 - R_{1,2} = \frac{(n_2 + n_1)^2 - (n_2 - n_1)^2}{(n_2 + n_1)^2} = \frac{4 \cdot n_1 \cdot n_2}{(n_2 + n_1)^2}. \quad (18)$$

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

$$T_{1,N} = \prod_{i=1}^{N-1} T_{i,i+1}. \quad (19)$$

2.3 Визначення ефективності введення випромінювання у фотоприймач.

Ефективність введення випромінювання у вікно фотоприймального пристрою оцінюється коефіцієнтом введення:

$$K_{BB} = \frac{\Phi_{\text{окна}}}{\Phi_{\text{над}}} = \frac{a_2 b_2 \int \int Q(x,y) dx dy}{a_1 b_1 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(x,y) dx dy}; \quad (20)$$

де $Q(x,y)$ - просторова густина потоку випромінювання, падаючого нормально на площину фотоприймача;

a_1, a_2, b_1, b_2 - координати вікна фотоприймача в системі координат X, Y (центр системи координат співпадає з точкою перетину осі променя з площиною фотоприймача);

$\Phi_{\text{над}}$ - величина потоку (потужності) випромінювання падаючого променя на площину фотоприймача;

$\Phi_{\text{окна}}$ - частина потоку, падаючого променя фотоприймача, що потрапив у вікно.

Топографічний план введення випромінювання у вікно фотоприймача приведений на рис.11.

Для визначення потоку випромінювання, що потрапило у вікно фотоприймача, рекомендується встановити величину потоку випромінювання в зоні фотоприймача, врахувавши втрати потоку при проходженні випромінювання через другий об'єктив (другу лінзу). Величина $\Phi_{\text{над}}$ визначається при мінімальному значенні концентрації інгредієнта тобто коли величина потоку максимальна.

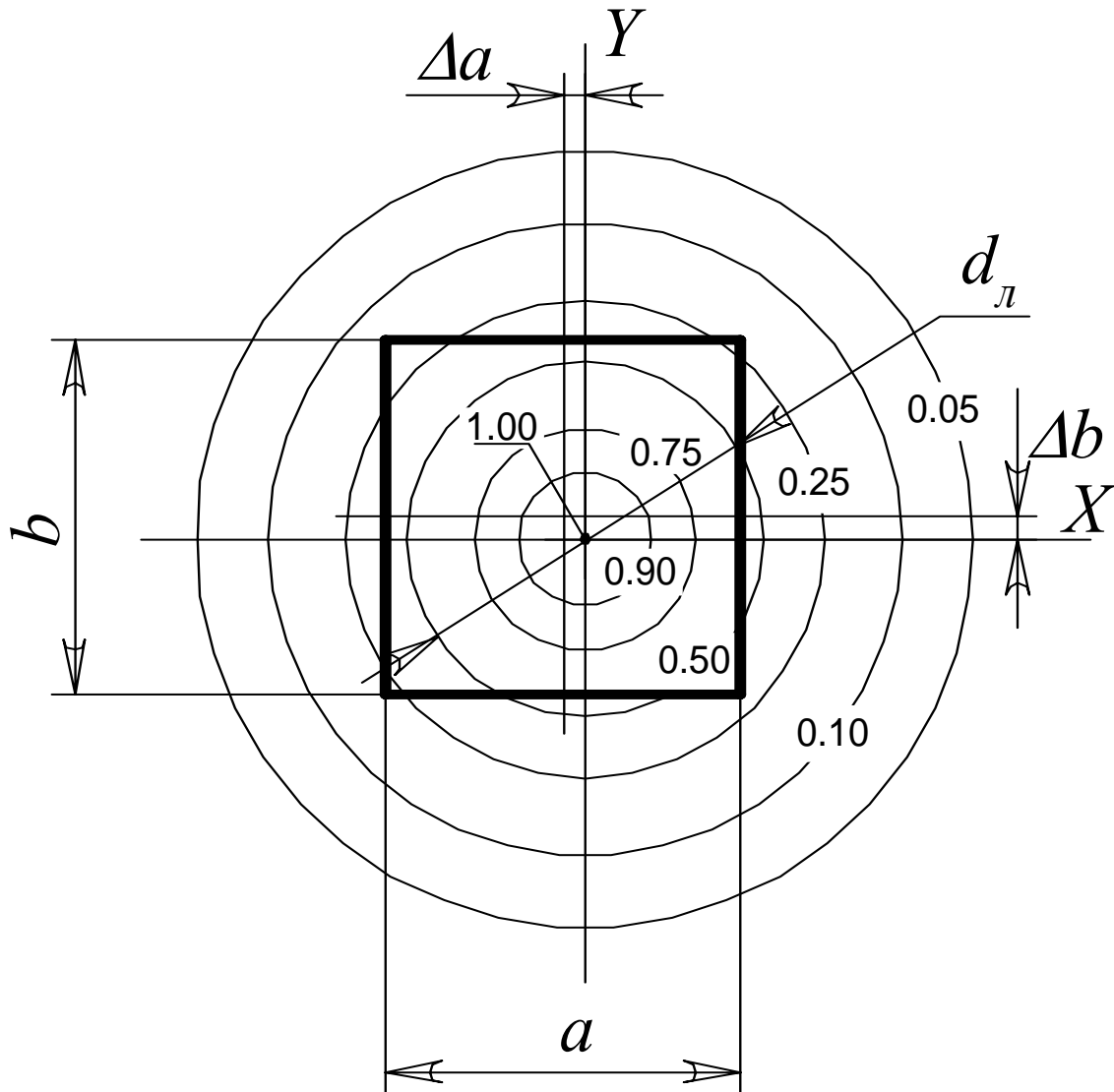


Рисунок 11 – Топографічний план введення випромінювання у вікно фотоприймача

2.4 Визначення вихідного сигналу фотоприймача.

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

$$U_{с\text{ вих}ФП} = \Phi_{\text{окна}} \cdot S_{\text{с\text{ инт}}}, \quad (21)$$

де $S_{\text{с\text{ инт}}}$ – інтегральна чутливість фотоприймача до сигналу випромінювача; ця характеристика пов'язана із спектральними характеристиками як фотоприймача, так і випромінювача і відрізняється від інтегральної чутливості фотоприймача. Обидві характеристики визначаються таким чином:

$$S_{инт} = \int_0^{\infty} S_{\Phi\Pi}(\lambda) d\lambda; \quad (22)$$

$$S_{с инт} = S_{инт} \frac{\int_0^{\infty} S_{\Phi\Pi}(\lambda) \cdot s_u(\lambda) d\lambda}{\int_0^{\infty} S_{\Phi\Pi}(\lambda) d\lambda}. \quad (23)$$

Підінтегральна функція першої формули містить спектральну густину чутливості фотоприймача в той час, як друга формула як підінтегральні функції містить нормовані функції спектральної густини чутливості фотоприймача і густини потоку випромінювання джерела. У геометричній інтерпретації інтегралам відповідають площі, обмежені кривий підінтегральній функції і віссю абсцис. Пояснення формул (22) і (23) приведено на рис.12.

2.5 Визначення параметрів шуму на виході фотоприймача.

Рівень шуму у вихідному сигналі визначається виходячи з питомої обнаржувальної здатності фотоприймача - D^* , через яку, як основна складова шуму, визначається фоновий потік ПЧ-випромінювання тіл, що оточують фотоприймач. Фоновий потік випромінювання і рівень шуму визначаються як:

$$\begin{cases} \Phi_{ш} = \frac{\sqrt{A_{окна} \cdot \Delta f_{\Phi\Pi}}}{D^*}; \\ U_{ш} = S_{ш инт} \cdot \Phi_{ш}; \end{cases} \quad (24)$$

де $A_{окна}$ - площа вікна фотоприймача, $[см^2]$;

$\Delta f_{\Phi\Pi}$ - смуга пропускання фотоприймача $[Гц]$; $S_{ш инт}$ - інтегральна чутливість фотоприймача до оптичного фонового шуму.

Характеристика фотоприймача $S_{ш инт}$ визначається по формулі (23) при рівномірній в смузі пропускання фотоприймача спектральній густині фонового шуму [11].

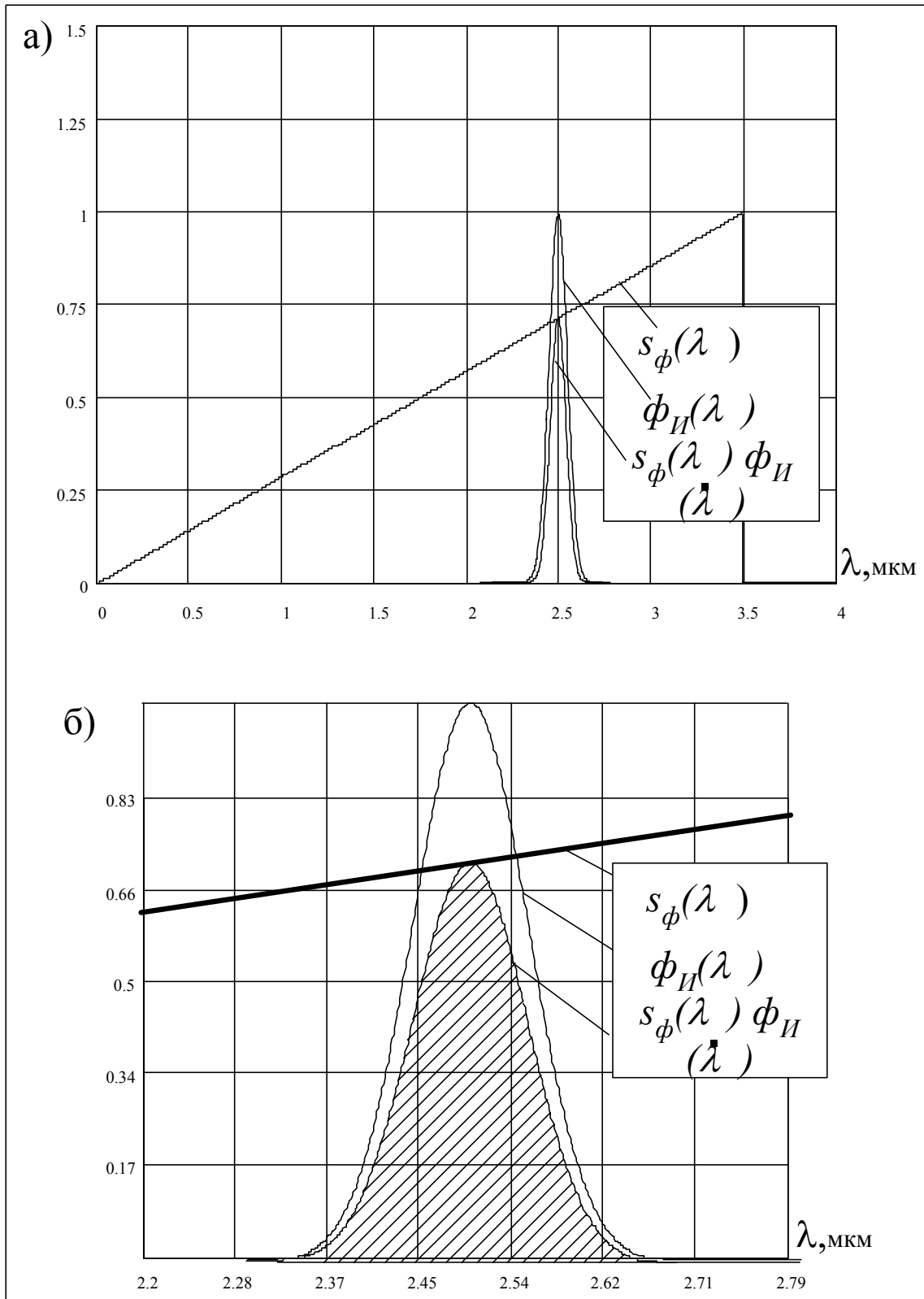


Рисунок 12 – Визначення інтегральної чутливості до немонохроматичного сигналу: а) нормована спектральна густина спектральної чутливості фотоприймача і густина потоку випромінювання джерела і їх твору; б) збільшений фрагмент спектрів

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. Як основні об'єкти справжньої роботи виступають (див. рис. 13) оптичний канал і перетворення сигналів в ньому, фотоприймальний пристрій (фотоприймач) і перетворення ним оптичних сигналів в електричні.

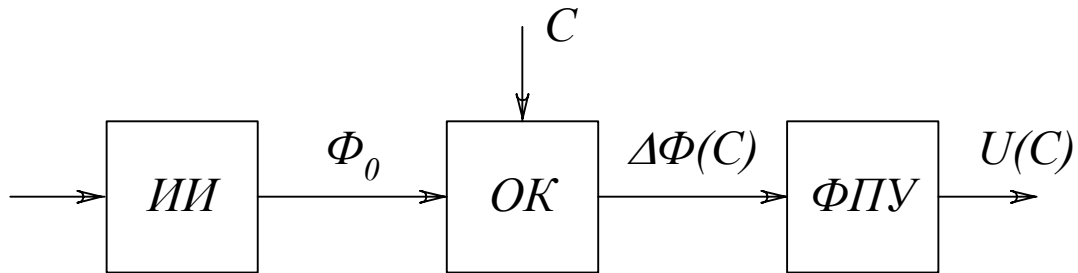


Рисунок 13 – Структурна схема вимірника концентрації газової компоненти в суміші

Як обмеження вводяться наступні:

- 1) Джерело випромінювання точкове (нехтують лінійні розміри П).
- 2) Введення випромінювання у фокусуючу систему ФС1 здійснюється без втрат.
- 3) У оптичному каналі промінь не розходитьсья.
- 4) У газових середовищах промінь не розсівається і не випробовує розподіленого віддзеркалення.
- 5) У всіх перпендикулярних перетинах промінь має круговий просторовий розподіл потоку.

Розрахунок параметрів оптичних і електричних сигналів і шумів рекомендується виконати в характерних перетинах і точках вимірника, приведені на рис. 14.

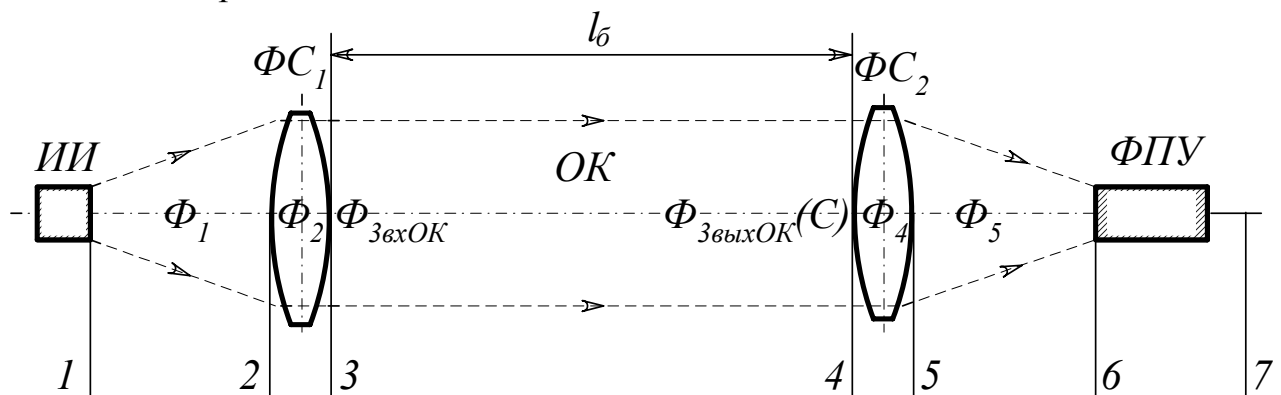


Рисунок 14 – Характерні перетини і точки вимірника, в яких визначаються параметри сигналів і шумів

1. В перетині 1 визначається спектральна густина потоку випромінювання джерела – $S_u(\lambda) = S_0 \cdot s_u(\lambda)$. Параметр b_u , що входить у вираз нормованої

спектральну густину потоку випромінювання, визначається з умови:

$$s_u(\lambda = \lambda_{0u} + \Delta\lambda/2) = 0.5.$$

Вирішуючи останнє рівняння щодо b_u , встановлюється значення цього параметра. Найбільше значення спектральну густину потоку випромінювання джерела S_0 визначається з умови:

$$\Phi_0 = \int_0^{\infty} S_u(\lambda) d\lambda$$

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

2. В перетинах 2, 3, 4 і 5 потік випромінювання падає (нормально) на межу розділу середовищ з різною оптичною густиною, де має місце віддзеркалення частини потоку випромінювання. Обліку підлягає тільки проходячий потік, визначуваний співвідношенням (18).

3. Процес виборчого поглинання розраховується в наступному порядку:

3.1 З урахуванням процесів, описаних в п. 2, визначається величина вхідного потоку оптичного каналу – $\Phi_{3вхОК}$. Як описано в п. 1, визначається спектральна густина цього потоку: параметр b_u залишається тієї ж величини, що і в 1, а S_0 визначається з умови:

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

3.2 Призначивши концентрацію поглинаючої компоненти C незалежною змінною змінюється в діапазоні від 0 до C_{max} , по формулах (6) – (10) встановлюється коефіцієнт передачі оптичного каналу.

3.3 По формулі (12) визначається спектральна густина вихідного потоку оптичного каналу, яка є функцією двох змінних: довжини хвилі і концентрації.

3.4 Величину вихідного потоку оптичного каналу слід визначити як:

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

Всі подальші потоки (Φ_4, Φ_5) повинні бути функціями від концентрації C .

4. В перетині 5 і 6 величина потоку залишається однієї і тієї ж величини. Але в перетині 6, на ряду з повним потоком, визначається його частина: що потрапила у вікно фотоприймача. Для оцінки цієї складової визначається функція просторової густини потоку випромінювання (розподіл потужності випромінювання по перетину 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 густини потоку випромінювання, визначається з умови:

$$q(y = 0, x = d\lambda/2) = 0.5.$$

Вирішуючи останнє рівняння щодо r , встановлюється значення цього параметра. Найбільше значення просторової густини потоку випромінювання q_0 ви-

значається 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 (20) при $\Phi_{над} = \Phi_6(C=0)$.

Виходячи з відомого значення коефіцієнта введення, визначається величина потоку, що потрапив у вікно фотоприймача: $\Phi_{окна}(C) = K_{BB} \cdot \Phi_6(C)$.

5. Величина вихідного сигналу фотоприймача визначається формулами (21), (22) і (23). Причому спочатку визначається функція спектральної густини 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 (24). Характеристика фотоприймача $S_{ш шум}$ визначається по формулі (23) при рівномірній в смузі пропускання фотоприймача спектральній густині теплового фонового шуму. Встановити відношення

$$\text{сигнал} / \text{шум} = U_{сфн}(C_{max}) / U_{шфн}$$

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 інтеграції замінюються кінцевими рівними межами встановленого діапазону.

4 Зміст звіту по розрахунковій роботі

У звіті по роботі повинні бути приведені розрахунки і графіки:

- спектральної густини джерела випромінювання $S_u(\lambda)$;
- спектральної густини потоку випромінювання на вході оптичного каналу $S_{вхОК}(\lambda)$;
- інтегрального коефіцієнта поглинання $K_{инт}(\lambda)$;
- коефіцієнта передачі оптичного каналу $K_{ОК}(\lambda, C)$ при значення C рівних $0, 20\% C_{max}, 50\% C_{max}, 100\% C_{max}$;
- спектральної густини потоку випромінювання на виході оптичного каналу $S_{вихОК}(\lambda, C)$ при значення C рівних $0, 20\%, 50\%, 100\% C_{max}$;
- просторову густину потоку випромінювання $Q(x, y)$ в перетинах $y = 0, y = d_l/2, y = d_l, y = 2d_l$;
- у одній системі координат привести графіки нормованої спектральної чутливості фотоприймача, нормованої спектральної густини потоку випромінювання джерела і їх твору: $s_u(\lambda), s_\phi(\lambda)$ і $s_u(\lambda) \cdot s_\phi(\lambda)$;
- у табличній і графічній формі представити залежність $C = \varphi(U_{фн})$ при $C =$

0, 10, 20, ..., 100 % C_{max} .

– значення відношення *сигнал/шум*.

5 Контрольні питання для самоперевірки

1. Що встановлюється законом Ламберта-Бугера?
2. Яким чином інформація про концентрацію контрольованої газової компоненти опиняється в оптичному сигналі?
3. Як досягається вибірковість вимірювання концентрації контрольованої газової компоненти на фоні великого числа інших компонент?
4. Як на основі спектральної теорії сигналів оцінюється величина поглиненого потоку в оптичному каналі?
5. Яким чином коефіцієнт поглинання приймає участь в спектральному описі оптичного каналу?
6. Яка причина втрат випромінювання при проходженні оптичного сигналу через оптичну схему?
7. Які задачі виникають при введенні випромінювання у вікно фотоприймача?
8. У зв'язку з чим у вихідному сигналі фотоприймача виявляється окрім сигналу і шум?
9. Якими методами можна зменшити рівень шуму у вихідному сигналі фотоприймача?
10. Як, маючи відношення сигнал/шум, оцінити погрішність фотоприймача як перетворювач сигналів?

ЛІТЕРАТУРА

1. Герцберг Е.Н. колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. –М . Мир, 1980.-197с.
- 2 Бреслер П.И. Оптические абсорбционные газоанализаторы и их применение. –Л.: Энергия, 1980. –164с.
3. Смит А. Прикладная ИК- спектрометрия. –М.: Мир , 1982. – 328с.Кузнецов Ю.Я., и др. Методы спектрального анализа : уч. пособие. – М.: Издательство МГУ, 1991. – 536с.
4. Беллами А. Инфракрасные спектры сложных молекул. –М.: Мир, 1963. – 120с.
5. Аксененко М.Д., Бараночников М.Л. приемники оптического излучения : справочник. – М.: Радио и связь, 1987. – 296с.
6. Источники и приемники излучения: Учебное пособие для студентов оптических специальностей вузов/ Г.Г. Ишанин, Э.Д. Панков, А.А. Андреев, Г.В. Польщиков. - СПб.: Политехника, 1991, - 240с.
7. Двайт Г.Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы. -М.: Наука, 1983. - 176с.
8. Справочник по радиоэлектронике. В трех томах/ Под ред. А. А. Куликовско-го. Том 3. М : Энергия, 1976. 816 с.
9. Горелик Д.О., Конопелько Л.А. Мониторинг загрязнения атмосферы и источников выбросов : Аэроаналит. измерения / Д.О. Горелик, Л.А. Конопелько - М.: Изд-во стандартов, 1992. - 432с.
10. Системный анализ контроля и управления качеством воздуха и воды / Примак А. В., Кафаров В. В., Качиашвили К. И. - Киев: Наукова думка, 1991. - 360 с.
11. Носов Ю.Р. Оптоэлектроника. - М.: Радио и связь, 1989. - 360с.

ДОДАТОК А

ЕЛЕМЕНТИ СПЕКТРАЛЬНОЇ ТЕОРІЇ ПОГЛИНАННЯ ГИК – ВИПРОМІНЮВАННЯ ГАЗАМИ

Методи якісного і кількісного аналізу складу речовин, засновані на здатності речовин вибірково поглинати оптичне випромінювання, одержали широке застосування при рішенні всіляких аналітичних задач в промисловості, наукових дослідженнях і при контролі за станом навколишнього середовища. Вказані методи є розділом спектроскопії абсорбції. Спектри поглинання характеризують будову поглинаючої речовини, тоді як рішення аналітичних задач вимагає знання не всього спектру, а лише окремих, найхарактерніших для визначуваних компонентів середовища інтервалів частот.

Енергію ізольованої молекули можна представити у вигляді:

$$E = E_{\text{пост}} + E_{\text{эл}} + E_{\text{кол}} + E_{\text{вр}};$$

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

Розглядаючи і враховуючи взаємодію різних видів руху молекул, баланс енергії приймає вигляд:

$$E = E_{\text{пост}} + E_{\text{эл}} + E_{\text{кол}} + E_{\text{вр}} + E_{\text{элкол}} + E_{\text{элвр}} + E_{\text{колвр}};$$

тут останні три члени учитають взаємодія різних видів руху молекули.

Величини електронної, коливальної і обертальної енергій молекули мають різний порядок. Енергія електронних переходів має порядок декількох електронвольт, коливальна енергія вимірюється десятими і сотими частками електронвольт, обертальна енергія – тисячними і десятитисячними частками електронвольт. Відповідно величині енергії електронні спектри займають ультрафіолетову і видиму частини спектру, коливальні – ближню інфрачервону, 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, залежно 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 наступний вираз для контура спектральної лінії:

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

γ_N – природна ширина лінії; визначається на рівні 0.5;

Розширення спектральної лінії за рахунок ефекту Доплера. Має місце максвеллово розподіл молекул по швидкостях. Для контура спектральної лінії виходить вираз:

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

S – інтенсивність лінії;

α_D – доплеровська напівширина спектральної лінії;

$$\alpha_D = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{2kT \ln 2}{m}};$$

T – абсолютна температура;

m – маса молекули;

c – швидкість світла;

k – постійна Больцмана.

Для лінії оберальної смуги H₂O близько 200 см⁻¹:

$$\alpha_D = 3.5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$$

Розширення спектральної лінії за рахунок зіткнень молекул. Цей параметр **напряму** обумовлений **тиском**: із зростанням тиску росте інтенсивність **зіткнень**. Теорія Лоренца дає **наступний** опис спектральній лінії (у літературі часто званім **дисперсійним контуром**):

$$k(\nu) = \frac{S}{\pi} \cdot \frac{\gamma_L}{(\nu - \nu_0)^2 + \gamma_L^2};$$

Напівширина лінії:

$$\gamma_L = \frac{1}{4\pi\tau(\nu)}.$$

тут $\tau(\nu)$ – час життя у збудженому стані **поглинаючої** або **випромінюючої** молекули, залежне від її швидкості. Звичайно це встановлюється через середню швидкість молекул і часу життя. З кінетичної теорії газів виходить **вираз**, який в основному відповідає квантовомеханічній неадіабатичній теорії розширення спектральних ліній **тиском** Андерсона (1949 р.):

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

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

Для двокомпонентної суміші напівширина лінії **записується** в простішій формі:

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

де γ_L^0 – напівширина лінії за стандартних умов ($P = 1 \text{ атм}$, $T_0 = 273^0 \text{ К}$).

Найвірогідніше для атмосферних газів значення $\gamma_L^0 \times 0 = 0.08 \text{ см}^{-1}$.

Сумісна дія ефектів Доплера і зіткнень молекул. У атмосфері обидва ефекти 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).

Сумісний розгляд двох ефектів розширення спектральних ліній веде до наступного виразу для коефіцієнта поглинання:

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

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

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

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

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

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

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; $T, h, \text{до}, c$ – абсолютна температура, постійні Планка, Больцмана і швидкість світла.

Знаходження матричних коефіцієнтів – складна задача. Ці коефіцієнти пов'язані з відомими коефіцієнтами Ейнштейна $A_{i,j}$, характеризуючими вірогідність вимушеного випромінювання і поглинання між рівнями молекули з індексами i і 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 сик^{-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. 1 виходить, чому електронні і коливальні переходи в молекулі не можуть спостерігатися в чистому вигляді. У ансамблі молекул маємо справу з їх статистичним розподілом по величині електронної, коливальної і обертальної енергії. При кожному електронному переході одночасно міняються коливальна і обертальна енергії. Вся сукупність електронних переходів утворює електронно-коливально-обертальний спектр, інтенсивність ліній якого визначається розподілом молекул по енергетичних рівнях і вірогідності відповідних переходів.

Електронно-коливально-обертальний спектр є набором 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 спектру.

Обертальна енергія. Молекула, що обертається, розглядається як тверде тіло – жорстка дзига. Особливості обертання молекули

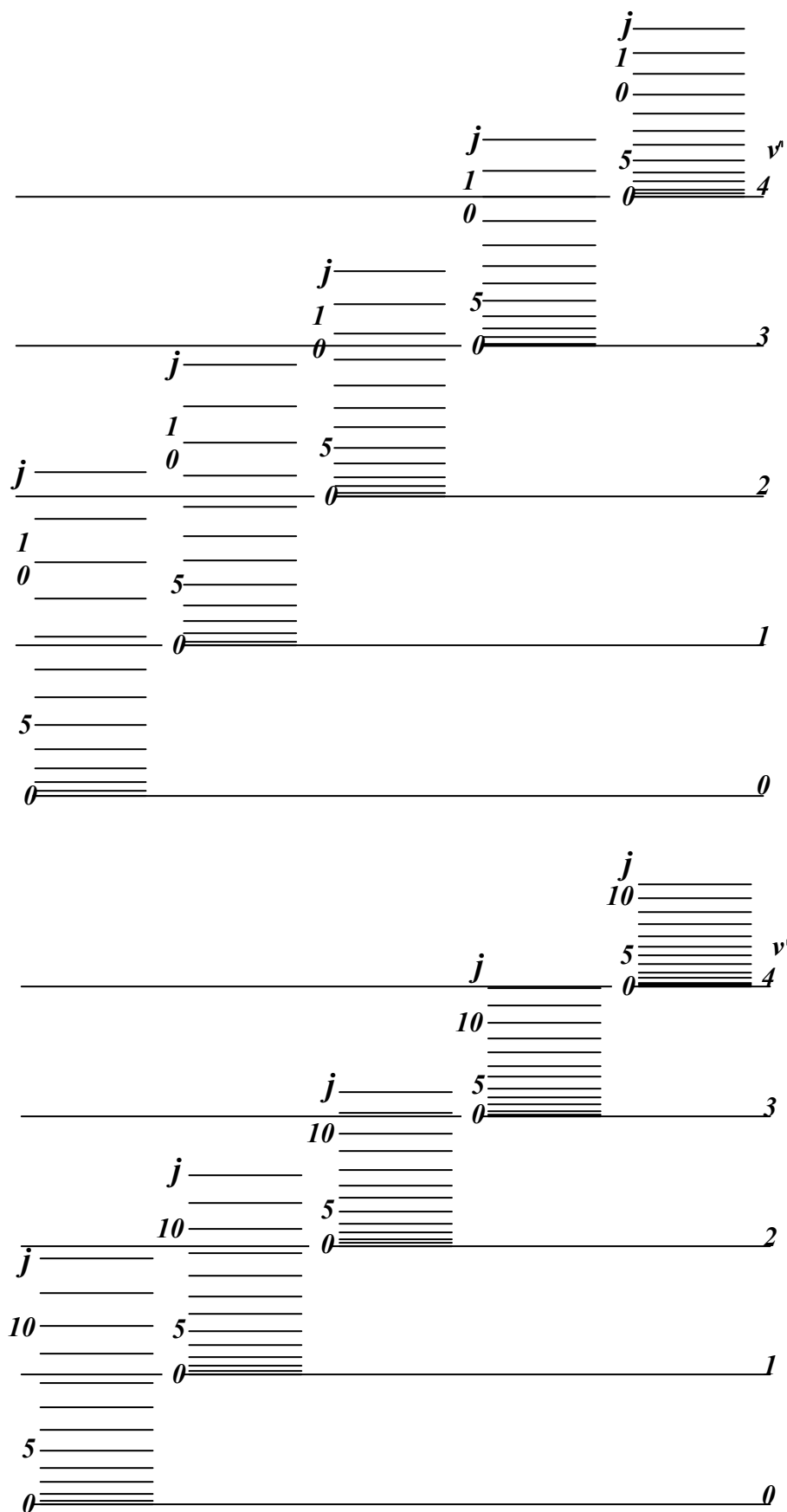


Рисунок А1 – Схема коливальних і обертальних рівнів двох електронних станів молекули (один і два штрихи, що відповідає верхньому і нижньому електронним станам молекули).

визначаються головними моментами інерції щодо трьох осей.

Лінійні молекули. Енергія обертання:

$$E = \frac{\vec{M}_p^2}{2I},$$

№ п/п	Момент інерції	Тип молекули	Групи газів
1.	$I_a = 0 \quad I_b = I_c \neq 0$	Лінійні молекули	CO ₂ , N ₂ O, NO, CO, O ₂ , N ₂ , (SO ₂)
2.	$I_a \neq 0 \quad I_b = I_c \neq 0$	Симетрична дзига	Серед атмосферних газів немає
3.	$I_a = I_b = I_c \neq 0$	Сферична дзига	CH ₄
4.	$I_a \neq I_b \neq I_c$	Асиметрична дзига	H ₂ O, O ₃ , HDO

де \vec{M}_p^2 – квадрат моменту кількості руху, I – момент інерції щодо осі обертання, перпендикулярної осі молекули і проходячої через її центр тяжкості,

$$\vec{M}_p^2 = \frac{h}{2\pi} j(j+1),$$

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

Квантова енергія молекули:

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

$$B = \frac{h}{2\pi \cdot 2I} = \frac{0.83 \cdot 10^{-34}}{I} [\text{МГц}] \text{ – обертальна постійна молекули.}$$

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

Відстань між послідовними рівнями енергії

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

пропорційно величині j .

Число молекул з даним j при тепловій рівновазі визначається як:

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

n_0 – число молекул в стані $j = 0$.

Молекули типу сферичної дзиги. Простий тип нелінійних молекул. Рівні обертальної енергії визначаються тією ж формулою, що і лінійні молекули. Але у них більше число ступенів свободи. Розподіл молекул по обертальних станах:

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

Молекули типу асиметричної дзиги. Для молекул типу асиметричної дзиги:

$$I_a < I_b < I_c ; A > B > 3.$$

$A, B, 3$ – обертальні постійні молекули відповідно по осях. Асиметрія дзиги

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

для витягнутої дзиги $\chi = -1$; при $B = \frac{A+C}{2}$, (найбільш асиметричний волчек) $\chi = 0$; 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 містить N атомів має $3N$ ступенів свободи. З них 3 доводиться на поступальну ходу центру тяжкості молекули, 3 або 2 – на обертальний рух. Лінійні молекули мають 2 ступені свободи обертального руху, нелінійні молекули – 3 ступені 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 співпадають унаслідок звироднілості.

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

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

де $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{M}}$ $\times 0$ – частота коливань, ν – коливальне квантове число, $\nu = 0, 1, 2, 3, \dots, \infty$

– константа квазіпружної сили, M – маса осцилятора.

Різниця енергій сусідніх рівнів рівна:

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

Рівні енергії знаходяться на однаковій відстані.

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

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

x – постійна ангармонічності. Так для молекули складається з різних атомів для коливальних частот $\nu_{\text{до}}$ маємо:

$$\nu_{\text{до}} = \nu(1-x)(v_{11}-v_1) - vx(v_{11}2-v_12),$$

де v_{11} і v_1 – коливальні квантові числа верхнього і нижнього станів молекули.

Наприклад, для серії, що починається з нульового рівня ($v_1 = 0$), одержимо:

$\nu_{\text{до}}(0, v_{11}) = \nu(1-x)v_{11} - vxv_{11}2$, звідки слідує сукупність частот коливальних переходів і, отже коливально-обертальних смуг:

$$\nu_1 = \nu(1-2x); \nu_2 = 2\nu(1-3x); \nu_3 = 3\nu(1-4x).$$

Відстань між сусідніми лініями із зростанням v_{11} і частоти убуває. Лінії сходяться до межі відповідної дисоціації молекули.

Взаємодія коливань і обертання молекули враховується за допомогою оберальної постійної,:

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

B_e – оберальна постійна молекули, що не коливається; α – постійна, відношення якої до B_e не перевищує декількох сотих. B_e лінійно убуває із зростанням 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 $E^{11} - E^1 = \nu_{00}x_0$ визначає частоту чисто коливального переходу (частоту нульової лінії) $j_{11} = j_1 = 0$. Перехід, відповідний нульовій лінії заборонений. Положення цієї лінії визначається розрахунковим шляхом. Переходи, визначувані різницею енергій рівнів, породжують наступні гілки смуг коливально-обертального спектру:

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 одержуємо частоти переходів

$$\nu_j = \nu_{00} + \left(B_{v_{11}} - B_{v_1}\right)j(j+1).$$

Оскільки різниця $B_{\nu 11} - B_{\nu 1} \times 0$ дуже мала, лінії Q гілки розташовані дуже близько. ІК-смуги ділять на паралельні і перпендикулярні по збігу або перпендикулярністю напрямку дипольного моменту з напрямом 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.

Сферична 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 обуславлює розщеплювання тричі вироджених коливань.

Асиметрична дзига. Молекули мають складні коливальні і коливально-обертальні спектри. Складний вибір дозволених квантових чисел з урахуванням трьох постійних, асиметричності, ангармонічності коливань, відцентрового розтягування, резонансного обурення рівнів енергій, впливу сил Коріоліса.