

Моделирование оптоэлектронного тракта фильтровых фотометров / А. А. Евстапов, В. Е. Курочкин, А. Л. Сизов // Научное приборостроение. — 1992. — Т. 2. — N 1. — С. 59-67.

Получена модель оптоэлектронного тракта фильтровых фотометров, позволяющая исследовать пригодность каждого оптического элемента, источника зондирующего излучения и фотоприемника в связке с аналоговым цифровым преобразователем при одновременном учете спектральных характеристик исследуемых субстанций, что, в свою очередь, позволяет оценивать полную погрешность фотометрирования и проводить оптимизацию фильтровых фотометров. С помощью модели найдены оптимальные соотношения величин полосы пропускания светофильтра и ширины полосы поглощения исследуемого вещества, обеспечивающего минимум погрешности фотометрирования при выбранной разрядности АЦП и конечных значениях чувствительности фотоприемника и мощности зондирующего излучения. Библ. — 5 назв. Ил. — 6.

А.А.Евстрапов, В.Е.Курочкин, А.Л.Сизов

(Институт аналитического приборостроения РАН, С.-Петербург)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТОЭЛЕКТРОННОГО ТРАКТА ФИЛЬТРОВЫХ ФОТОМЕТРОВ

Критерием оптимальности оптического тракта фильтровых фотометров является минимум погрешности при фотометрических измерениях объекта в максимально возможном динамическом диапазоне регистрируемых оптических плотностей при заданных спектральной чувствительности фотоприемника и спектральной плотности потока зондирующего излучения.

Известно [1], что для уменьшения погрешности фотометрирования ΔD необходимо увеличивать мощность светового потока, падающего на фотоприемник и уменьшать величину шага квантования аналого-цифрового преобразователя (АЦП):

$$\Delta D = \frac{1.24h}{\ln 10} \left(\frac{1}{I_{\text{пад}} - I_{\Phi_1}} + \frac{1}{I_{\text{пр}} - I_{\Phi_2}} \right), \quad (1)$$

где h – величина шага квантования АЦП; $I_{\text{пад}}$, $I_{\text{пр}}$, I_{Φ_1} , I_{Φ_2} – цифровые эквиваленты оценок интенсивностей падающего на вещество и прошедшего через него светового потока и соответствующих им фоновых световых потоков фотометра. В условиях реальных характеристик источника света увеличить мощность светового потока, прошедшего через исследуемое вещество, можно только при увеличении коэффициента пропускания светофильтров или при расширении их полосы пропускания. Анализ выражения, оценивающего коэффициент светопропускания исследуемого объекта, показывает, что увеличение полосы пропускания светофильтра ограничено некоторой величиной, связанной со спектральными характеристиками данного вещества (объекта):

$$\tau = \left(\int_{\Delta\lambda} \tau_{\text{в}}(\lambda) AF(\lambda) d\lambda \right) / \left(\int_{\Delta\lambda} AF(\lambda) d\lambda \right), \quad (2)$$

где $AF(\lambda)$ – спектральная характеристика аппаратной функции фотометра; $\tau_{\text{в}}(\lambda)$ – спектральная функция светопропускания исследуемого вещества,

$$AF(\lambda) = \Phi_{\lambda} S_{\lambda} \tau_{\text{ф}}(\lambda) \prod_{i=0}^i \rho_i(\lambda) \prod_{i=0}^i \tau_i(\lambda) (\Omega / 4\pi), \quad (3)$$

Φ_{λ} – спектральная плотность потока зондирующего излучения; S_{λ} – спектральная чувствительность фотоприемника; $\tau_{\text{ф}}(\lambda)$ – спектральная функция коэффициента пропускания интерференционного светофильтра; $\tau_i(\lambda)$ и $\rho_i(\lambda)$ – спектральные характеристики коэффициентов пропускания и отражения зондирующего излучения i -м оптическим элементом фотометра; Ω – приведенный телесный угол, который собирает излучение от источника, попадающее на фотоприемник.

Действительно, из выражения (2) следует, что чем уже спектральная характеристика аппаратной функции фотометра $AF(\lambda)$, тем лучше соответствие оценки τ истинному значению светопропускания вещества τ_b на заданном интервале длин волн и, следовательно, тем меньше погрешность при фотометрировании. Вместе с тем, по мере сужения спектральной полосы пропускания оптической системы фотометра мощность светового потока, прошедшего через исследуемое вещество на фотоприемник, уменьшается, что приводит, в свою очередь, к уменьшению цифровых эквивалентов оценок интенсивностей световых потоков и к росту погрешности фотометрирования ΔD согласно выражению (1).

Таким образом, должен существовать оптимум, обеспечивающий минимальную погрешность при фотометрических измерениях светопоглощающих веществ, определяемый путем выбора вполне определенного отношения спектральных характеристик аппаратной функции и исследуемого вещества.

Кроме этого, вид аппаратной функции (3) существенно определяют спектральные характеристики источника излучения, фотоприемника и оптических элементов фотометра, что также влияет на погрешность фотометрирования. Влияние спектральных характеристик элементов фотометра на погрешность измерений светопропускающих объектов вызывает известные трудности при оптимизации оптоэлектронных трактов, поэтому представляется целесообразным выработать адекватный метод моделирования, позволяющий определить влияние каждого элемента на погрешность фотометрирования и оценить их пригодность в конкретном фильтровом фотометре.

Модель оптоэлектронного тракта

Для получения модели оптоэлектронного тракта фильтровых фотометров необходимо связать параметры, входящие в выражения (1) и (2), с целью учета влияния не только параметров аппаратной функции $AF(\lambda)$ и спектральной функции поглощения вещества $\tau_b(\lambda)$, но и параметров АЦП.

Известно правило получения оптимальной оценки интенсивности постоянного светового потока на основе критерия максимальной апостериорной плотности вероятностей [2]. Это позволяет получить оценки интенсивностей падающего на вещество излучения $I_{пад} \sim \int_{\lambda} AF(\lambda) d\lambda$ и прошедшего через ве-

щество $I_{пр} \sim \int_{\lambda} \tau_b AF(\lambda) d\lambda$ с дисперсией меньшей величины шага квантования

АЦП h . Кроме этого, будем считать, что АЦП является идеальным устройством, и его максимальная погрешность не превышает ± 0.5 единицы младшего разряда.

Введем нормирующий коэффициент k , оценивающий количество квантов АЦП, приходящихся на условную единицу интенсивности регистрируемого излучения, получаемого при известном значении спектральной характеристики аппаратной функции AF^m , которое обеспечивает максимально возможный электрический сигнал на выходе фотоприемника:

$$k = 2^n \left[\int_{\lambda} AF^m(\lambda) d\lambda \right]^{-1},$$

где n – разрядность АЦП. С учетом максимальной погрешности идеального АЦП и вводимого нормирующего коэффициента k можно показать, что оценку коэффициента пропускания вещества τ необходимо вычислять по следующей модели:

$$\tau = \left[k \int_{\lambda} \tau_s(\lambda) AF(\lambda) d\lambda \pm 0.5 \right] / \left[k \int_{\lambda} AF(\lambda) d\lambda \mp 0.5 \right]. \quad (4)$$

Погрешность оценки $\Delta \tau$ будем определять как абсолютную величину разности между величиной τ (4) и истинным коэффициентом пропускания вещества в максимуме поглощения излучения:

$$\Delta \tau = |\tau - \tau_s^m|. \quad (5)$$

Спектральное распределение коэффициента пропускания интерференционных фильтров при моделировании удобно представить следующей экспоненциальной зависимостью:

$$\tau_{\Phi}(\lambda) = \tau_{\Phi}^m \exp \left\{ -0.5 \left[2.35 (\lambda - \lambda_{\Phi}^m) / \Delta \lambda_{\Phi}^{0.5} \right]^2 \right\}, \quad (6)$$

где τ_{Φ}^m – величина максимального пропускания светофильтра на длине волны λ_{Φ}^m ; $\Delta \lambda_{\Phi}^{0.5}$ – ширина спектральной кривой пропускания светофильтра на уровне $0.5 \tau_{\Phi}^m$. Функцию спектрального распределения коэффициента пропускания исследуемого вещества аппроксимировали также экспоненциальной зависимостью:

$$\tau_s(\lambda) = 1 - (1 - \tau_s^m) \exp \left\{ -0.5 \left[2.35 (\lambda - \lambda_s^m) / \Delta \lambda_s^{0.5} \right]^2 \right\}, \quad (7)$$

где τ_s^m – величина минимального пропускания излучения веществом на длине волны λ_s^m ; $\Delta \lambda_s^{0.5}$ – ширина спектральной кривой пропускания излучения веществом на уровне $0.5 (\tau_s^m + \tau_{sm}^m)$, где τ_{sm}^m – величина максимального коэффициента пропускания вещества в заданном интервале длин волн.

Что касается моделирования спектральных характеристик источника излучения и фотоприемника, то в данной статье рассмотрены модели для оптоэлектронного тракта, где применены лампы накаливания с галогеновым циклом и кремниевым фотодиодом типа ФД263. Кроме этого принято, что на обсуждаемом интервале длин волн коэффициенты отражения $\rho_i(\lambda)$ и пропускания $\tau_i(\lambda)$ оптических элементов постоянны.

Следует отметить, что для несимметричных спектров пропускания света веществом, источников с газоразрядным циклом некоторые виды аппроксимаций зависимостей $\tau_s(\lambda)$ и Φ_{λ} приведены в работе [3].

Зная распределение относительной спектральной энергии E_{λ} [4] для кварцевой галогенной лампы накаливания, примем следующую модель спектральной плотности потока излучения в диапазоне 460–700 нм:

$$\Phi_{\lambda} = k_1 (\lambda - \lambda_0) + \alpha, \quad (8)$$

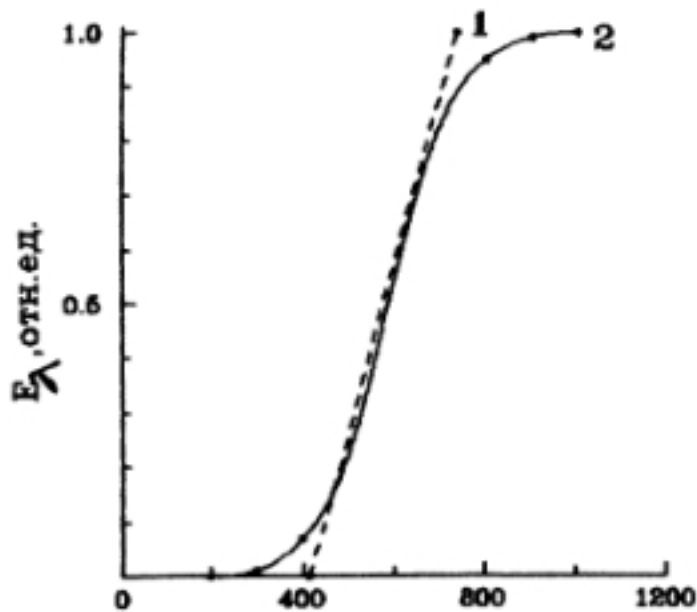


Рис. 1. Распределение относительной спектральной энергии галогенной лампы накаливания: (1) — зависимость заимствована из работы [4]; (2) — зависимость соответствует модели (8)

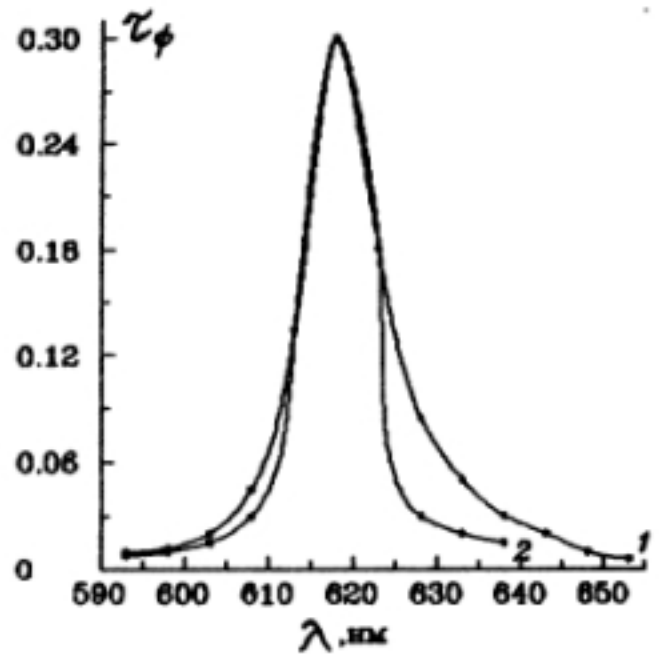


Рис. 2. Спектральная характеристика интерференционного светофильтра: (1) — пропускание реального светофильтра; (2) — расчетное пропускание в соответствии с моделью (6)

где $k_1 = 0.28 \cdot 10^{-2}$; α — значение Φ_λ на длине волны λ_0 . В указанном диапазоне излучения принимаем $\lambda_0 = 400$ нм и $\alpha = 0$ (рис. 1).

Для кремниевых фотодиодов удобна аналогичная линейная аппроксимация спектральной чувствительности:

$$S_\lambda = p (\lambda - \lambda'_0), \quad (9)$$

где λ'_0 — длина волны, на которой чувствительность фотодиода равна нулю; $p = (S_{\lambda_1} - S_{\lambda_2}) / (\lambda_1 - \lambda_2)$. Для диода ФД263: $\lambda'_0 = 400$ нм, $S_{\lambda_1} = 0.15$ А/Вт, $S_{\lambda_2} = 0.5$ А/Вт при $\lambda_1 = 550$ нм, $\lambda_2 = 900$ нм, откуда следует, что $p = 10$ А/Вт · нм.

С помощью аппроксимаций (6) — (9) и модели (4) можно получить расчетные значения τ и, используя формулу (5), оценить погрешность $\Delta \tau$ в зависимости от конкретных параметров источника излучения, фотоприемника, светофильтров, исследуемого вещества, оптических элементов и АЦП.

Используя предложенную модель, на примере оптического тракта, содержащего кварцевую галогенную лампу КГМ 6.3-15 и кремниевый фотодиод типа ФД263, можно показать наличие оптимума в соотношении полос пропускания светофильтра и поглощения излучения исследуемым веществом, обеспечивающего минимум погрешности фотометрирования при заданных значениях разрядности АЦП, а также зависимость спектральной характеристики аппаратной функции $AF(\lambda)$ от параметров $\tau_\phi(\lambda)$ и $\Delta \lambda_\phi^{0.5}$.

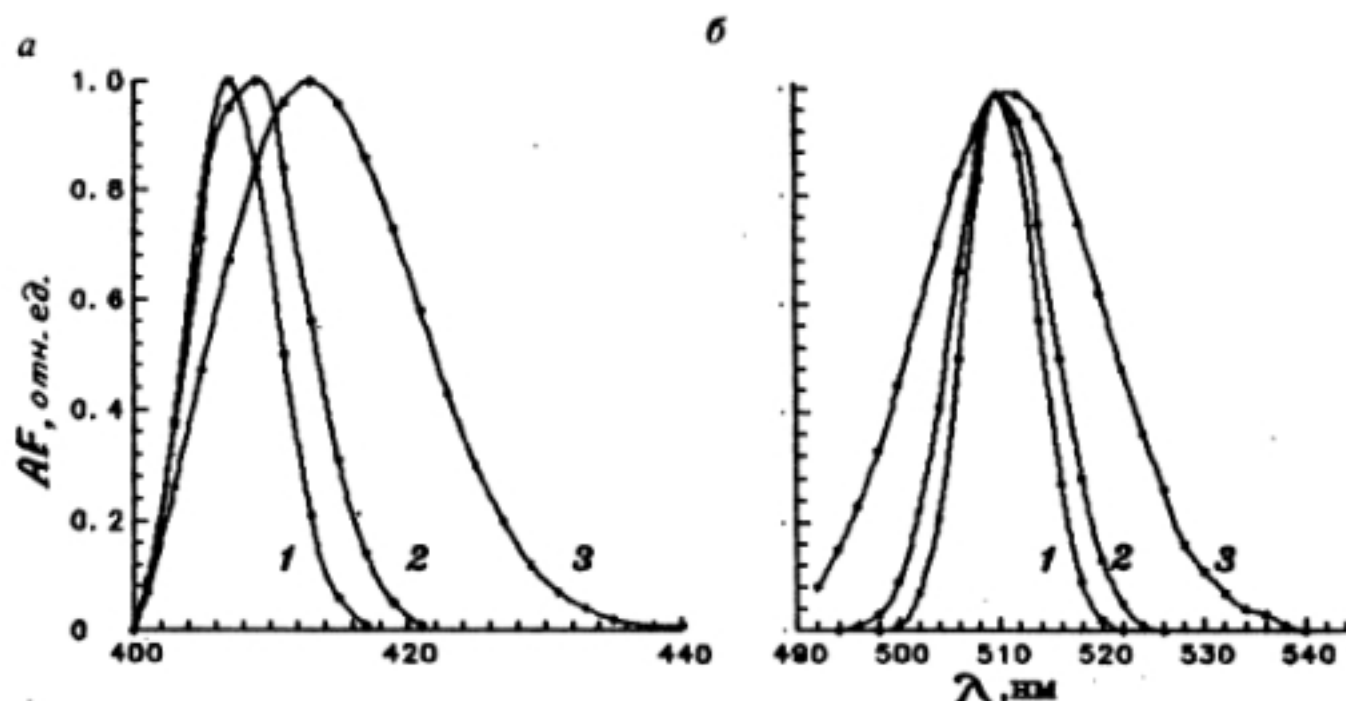


Рис. 3. Спектральные характеристики аппаратной функции при использовании фильтров с различной $\Delta\lambda_{\Phi}^{0.5}$: а — при максимальном пропускании 405 нм; б — при максимальном пропускании 510 нм. (1) — 6 нм, (2) — 8 нм, (3) — 15 нм

Результаты моделирования

На рис. 1 показана адекватность модели спектральной плотности зондирующего излучения (прямая 1) физической спектральной плотности энергии излучения кварцевой галогенной лампы (зависимость 2) в интервале длин волн от 460 до 700 нм. Для сохранения адекватности модели (8) в интервале от 400 до 460 нм необходимо изменить коэффициент k_1 и значения λ'_0 и α . На рис. 2 представлены зависимости коэффициентов пропускания интерференционного светофильтра от длины волны излучения: реального с $\lambda_{\Phi}^m = 618$ нм и $\tau_{\Phi}^m = 0.3$ и модельного.

Вид спектральных характеристик нормируемых аппаратных функций, рассчитанных по формуле (3) для различных полос пропускания $\Delta\lambda_{\Phi}^{0.5}$ с максимумами пропускания λ_{Φ}^m на 405 и 510 нм, показан на рис. 3. Зависимости смещения Δ максимума спектральной характеристики аппаратной функции λ_{AF}^m относительно максимумов пропускания интерференционных светофильтров показаны на рис. 4, из которого видно, что чем ближе λ_{Φ}^m к "критической" точке спектра λ_0 , тем больше величина смещения Δ максимума пропускания аппаратной функции λ_{AF}^m , т.е. тем больше аппаратная погрешность, обусловленная смещением фактической спектральной характеристики прибора относительно номинальной. Для устранения смещения Δ необходимо корректировать спектральную характеристику, например, применив интерференционные светофильтры с максимумами пропускания λ_{Φ}^m , смещенными в

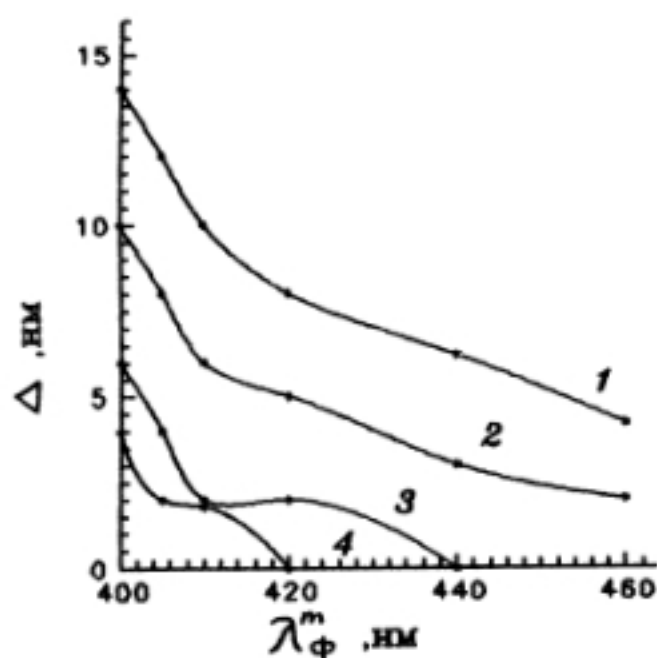


Рис. 4. Зависимость смещения максимума спектральной характеристики аппаратной функции относительно максимумов спектра пропускания интерференционных светофильтров при различной $\Delta\lambda_{\phi}^{0.5}$: (1) — 20 нм, (2) — 15 нм, (3) — 8 нм, (4) — 6 нм

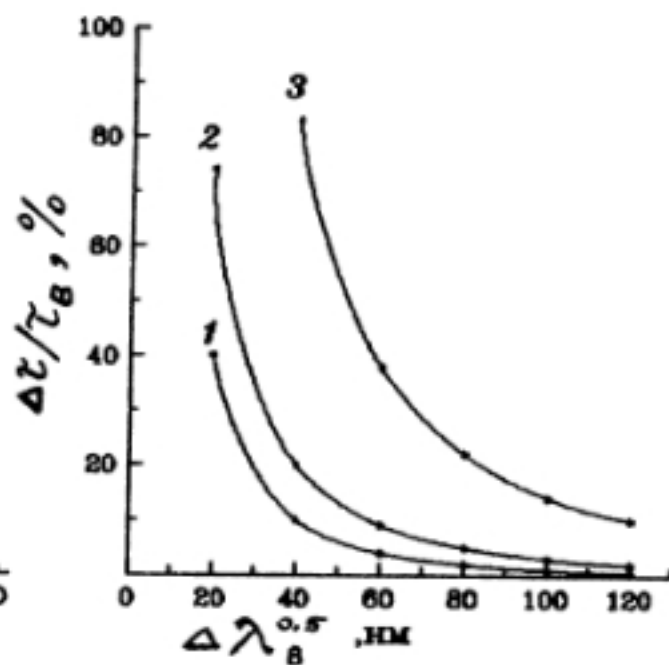


Рис. 5. Зависимость относительной погрешности фотометрирования $\Delta\tau/\tau_v^m$, без учета влияния АЦП, от ширины полосы поглощения излучения веществом при фильтрах с различной $\Delta\lambda_{\phi}^{0.5}$. ($\tau_v^m = 0.1$ в максимуме поглощения на 405 нм): (1) — 6 нм, (2) — 8 нм, (3) — 15 нм

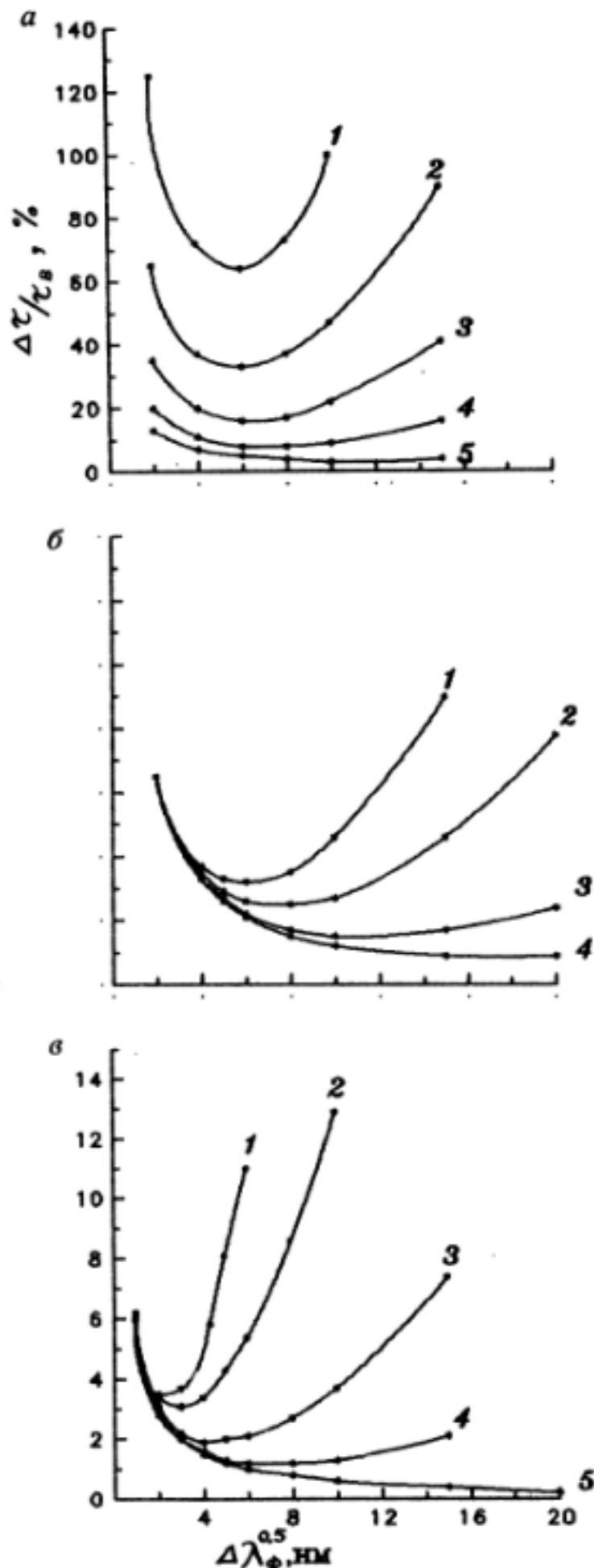
более коротковолновый участок спектра относительно номинального. Другой путь устранения смещения максимума спектральной характеристики аппаратной функции — повышение чувствительности фотоприемников S_{λ} в области 300—400 нм, однако до настоящего времени такие фотодиоды отечественной промышленностью широко не освоены.

На рис. 5 представлены зависимости относительной погрешности фотометрирования $\Delta\tau/\tau_v^m$ (без учета влияния АЦП) от ширины полосы поглощения веществ $\Delta\lambda_v^{0.5}$ при использовании интерференционных светофильтров с разными полосами пропускания $\Delta\lambda_{\phi}^{0.5}$. Коэффициент пропускания вещества при этом $\tau_v^m = 0.1$ на длине волны 405 нм. Вид этих зависимостей легко объясняется. Действительно, чем больше ширина полосы поглощения вещества $\Delta\lambda_v^{0.5}$, тем меньше влияет на погрешность измерений величина смещения максимума спектральной характеристики аппаратной функции, а также ширина полосы пропускания интерференционных фильтров. Из приведенных зависимостей видно, что для обеспечения относительной погрешности не более 10 % необходимо, чтобы $\Delta\lambda_v^{0.5}/\Delta\lambda_{\phi}^{0.5} \geq 8$, а для получения погрешности менее 5 % — $\Delta\lambda_v^{0.5}/\Delta\lambda_{\phi}^{0.5} \geq 10$.

На рис. 6 представлены зависимости относительной погрешности от ширины спектральной полосы пропускания фильтра $\Delta\lambda_{\phi}^{0.5}$ при различных τ_v^m , $\Delta\lambda_v^{0.5}$ для трех значений λ_{ϕ}^m с учетом влияния погрешности АЦП при $n = 14$. Из приведенных зависимостей видно, что при выбранных конкретных параметрах $\Delta\lambda_v^{0.5}$, τ_v и λ_{ϕ}^m существует оптимальная ширина полосы пропускания интер-

ференционных светофильтров $\Delta\lambda_{\Phi}^{\text{опт}}$, при которой может быть достигнута минимально возможная погрешность фотометрирования при заданных и конечных параметрах S_{λ} , Φ_{λ} , ρ_i и τ_i . Так, при коэффициенте пропускания вещества $\tau_s = 0.1$ в максимуме поглощения на 450 нм и ширине полосы пропускания $\Delta\lambda_s^{0.5} = 40$ нм, оптимальная ширина полосы пропускания светофильтра $\Delta\lambda_{\Phi}^{\text{опт}} = 7.5$ нм (рис. 6, а), а в максимуме поглощения на 405 нм при тех же характеристиках — $\Delta\lambda_{\Phi}^{\text{опт}} = 6$ нм (рис. 6, б). При увеличении коэффициента пропускания излучением веществом (рис. 6, а) и при увеличении ширины полосы поглощения (рис. 6, б) оптимальная ширина полосы пропускания фильтра $\Delta\lambda_{\Phi}^{\text{опт}}$ также увеличивается. В основе этих зависимостей лежит одно и то же явление: как при увеличении $\Delta\lambda_s^{0.5}$, так и при увеличении τ_s происходит сглаживание полосы поглощения вещества и уменьшается влияние степени монохроматизации зондирующего излучения на погрешность измерений. В пределе, т. е. при $\Delta\lambda_s^{0.5} \rightarrow \infty$, фильтр не требуется ($\Delta\lambda_{\Phi}^{\text{опт}} \rightarrow \infty$), что означает возможность фотометрирования в белом свете.

Рис. 6. Зависимость относительной погрешности фотометрирования от ширины спектральной полосы пропускания фильтра с $\lambda_{\Phi}^{\text{опт}} = 405$ нм. а — при $\Delta\lambda_s^{0.5} = 40$ нм: (1) — $\tau_s = 0.05$; (2) — $\tau_s = 0.1$; (3) — $\tau_s = 0.2$; (4) — $\tau_s = 0.4$; (5) — $\tau_s = 0.8$. б — при $\tau_s^{\text{опт}} = 0.1$: (1) — $\Delta\lambda_s^{0.5} = 40$ нм; (2) — $\Delta\lambda_s^{0.5} = 60$ нм; (3) — $\Delta\lambda_s^{0.5} = 120$ нм; (4) — $\Delta\lambda_s^{0.5} = 240$ нм. в — при $\lambda_{\Phi}^{\text{опт}} = 450$ нм: (5) — $\Delta\lambda_s^{0.5} = \infty$



Выводы

Полученная модель оптоэлектронного тракта фильтровых фотометров (5) позволяет проводить анализ влияния каждого оптического элемента, источника зондирующего излучения и фотоприемника в связке с АЦП, при одновременном учете спектральных характеристик исследуемых субстанций $\tau_n(\lambda)$, $\Delta\lambda_{\Phi}^{0.5}$, λ_n^m на суммарную погрешность фотометрирования и проводить оптимизацию фильтровых фотометров. Установленные с помощью модели (4) оптимальные соотношения величин ширины полос поглощения излучением веществом и коэффициента пропускания светофильтра свидетельствует о том, что в области $\Delta\lambda_{\Phi}^{0.5} < \Delta\lambda_{\Phi}^{opt}$ преобладает составляющая погрешности, обусловленная квантованием сигнала, а в области $\Delta\lambda_{\Phi}^{0.5} > \Delta\lambda_{\Phi}^{opt}$ мажорирует систематическая составляющая, определяемая степенью монохроматичности зондирующего излучения. Полученный результат имеет первостепенное значение при проектировании фильтровых фотометров различных классов.

Очевидно, что в одно- и двухканальных универсальных фотометрах с галогенными лампами целесообразно выбирать светофильтры с $\Delta\lambda_{\Phi}^{0.5} < \Delta\lambda_{\Phi}^{opt}$, а погрешность квантования сигналов при этом компенсировать увеличением усиления сигнала в соответствии со степенью поглощения света веществом. В фотометрах данного класса указанный прием практически не повлияет на производительность измерений.

В многоканальных универсальных приборах с числом каналов 10 и более данный метод достижения заданной погрешности измерений неприемлем в связи с резким уменьшением быстродействия прибора. Полученные результаты рекомендуется использовать в рассматриваемом классе приборов в желто-красном участке спектра (интерференционные светофильтры с $\Delta\lambda_{\Phi}^{0.5} < \Delta\lambda_{\Phi}^{opt}$) и, если необходимо, уравнивать коэффициенты пропускания аппаратной функции добавлением в оптический тракт цветных или нейтральных стекол. В первом случае неизбежно изменение аппаратной функции. Что касается синезеленого участка спектра, то интерференционные фильтры здесь необходимо выбирать с полосой пропускания $\Delta\lambda_{\Phi}^{0.5}$ несколько большей $\Delta\lambda_{\Phi}^{opt}$. В этом случае мажорировать будет систематическая составляющая погрешности, которая легко устраняется градуировкой. Количество же разрядов АЦП в данном случае должно выбираться в соответствии с требуемыми динамическими диапазонами и погрешностью измерений светопропускания.

При проектировании специализированных одноканальных фотометров для одной или группы методик исследования вполне определенных веществ необходимо помнить, что существует общая зависимость относительной погрешности определения концентрации веществ от измеренного значения коэффициента светопропускания исследуемого вещества, имеющая минимальное значение при $\tau_n^m \approx 0.368$ [5]. Двухкратное увеличение погрешности по шкале пропускания сверху и снизу относительно минимума соответствует $\tau_n^m \approx 0.76$ и $\tau_n^m \approx 0.04$. Таким образом, разрабатывая методики исследования так, чтобы светопропускание веществ попадало в диапазон от 0.76 до 0.04 и выбирая фильтры с шириной полосы пропускания $\Delta\lambda_{\Phi}^{0.5} \approx \Delta\lambda_{\Phi}^{opt}$, можно достичь абсолютного потенциального минимума погрешности фотометрирования при выбранных разрядности АЦП n , спектральной чувствительности S_{λ} и спектральной плотности потока зондирующего излучения Φ_{λ} .

ЛИТЕРАТУРА

1. Курочкин В. Е., Полек А. М., Рахманкулов Р. В. и др. Анализ погрешности микропроцессорного фотометра. В кн.: Техническое оснащение медицинских лабораторных исследований.—М.: ВНИИМП, 1988.—С. 51.
2. Курочкин В. Е., Фельдман Б. Х. Оценка параметра положения сигнала. В сб.: Научное приборостроение. Автоматизация научных исследований.—Л.: Наука, 1988.—С. 68.
3. Курочкин В. Е., Литвинкова В. И. Моделирование внешнего фотоэффекта при выборе типа фотоэлектрического умножителя. В кн.: Техническое оснащение медицинских лабораторий.—М.: ВНИИМП, 1985.—С. 51.
4. Рабек О. Экспериментальные методы в фотохимии и фотофизике. Т.1.—М.: Мир, 1985.—С. 608.
5. Булатов М. И., Калинин И. П. Практическое руководство по фотометрическим методам анализа.—Л.: Химия, 1986.

Рукопись поступила 06.01.92