

ФОРМИРОВАНИЕ, ПРЕОБРАЗОВАНИЕ И ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКОГО СИГНАЛА В ДИФРАКЦИОННОМ СПЕКТРОМЕТРЕ: РАДИООПТИЧЕСКИЙ ПОДХОД

DOI: 10.36724/2072-8735-2025-19-12-34-43

Казаков Василий Иванович,
Санкт-Петербургский государственный университет
аэрокосмического приборостроения,
г. Санкт-Петербург, Россия, kvi@guap.ru

Бестугин Александр Роальдович,
Санкт-Петербургский государственный университет
аэрокосмического приборостроения,
г. Санкт-Петербург, Россия, fresguap@mail.ru

Manuscript received 12 September 2025;
Accepted 20 November 2025

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, соглашение № FSRF-2023-0003, "Фундаментальные основы построения помехозащищенных систем космической и спутниковой связи, относительной навигации, технического зрения и аэрокосмического мониторинга".

Ключевые слова: спектр, обработка информации, дифракционная решетка, спектрометр, считывание, ПЗС

В работе представлено исследование процессов формирования и обработки сигнала в форме оптического излучения в дифракционном спектрометре. Актуальность работы обусловлена необходимостью совершенствования теоретических основ функционирования дифракционных спектрометров для повышения точности и достоверности спектрометрических измерений. Существующие модели, базирующиеся на принципах геометрической оптики, не позволяют адекватно описать ряд важных эффектов, наблюдаемых при работе спектральных приборов. Разработана математическая модель спектрального преобразования, основанная на принципах радиооптики, теории линейных систем и системного подхода. Модель позволяет описать формирование комплексного спектра в дифракционном спектрометре от входной апертуры до фотодетектора. Проведено исследование особенностей преобразования оптического сигнала, включая анализ формирования пространственных спектров и их детектирования ПЗС-линейкой. Установлены закономерности формирования многопорядкового спектра и его характеристик. Предложен метод описания комплексной аппаратной функции спектрального прибора с дифракционной решёткой, учитывающий особенности формирования спектра в различных дифракционных порядках. Показано влияние геометрических параметров прибора на его спектральные характеристики. Разработан алгоритм коррекции спектрометрических измерений, учитывающий нелинейность спектральной шкалы, неравномерность чувствительности ПЗС-линейки, особенности формирования аппаратной функции спектрометра. Проведено моделирование процесса фотодетектирования с учётом конструктивных особенностей ПЗС-линейки и параметров оптической системы. Результаты работы позволяют повысить точность и достоверность спектрометрических измерений, могут быть использованы при создании компактных спектрометрических систем для решения задач спектрального анализа, контроля технологических процессов и экологического мониторинга. Практическая значимость работы заключается в возможности применения полученных результатов при создании компактных и недорогих спектрометрических систем для решения задач спектрального анализа, контроля технологических процессов и экологического мониторинга. Предложенные методы могут быть использованы в многоканальных спектрометрах и системах с элементами искусственного интеллекта. Перспективы дальнейших исследований связаны с учётом шумовых процессов при регистрации и влияния температурных факторов на стабильность параметров ПЗС-линейки, а также с возможностью реализации подобных систем в микросборках и интегральных оптоэлектронных платформах.

Информация об авторах:

Казаков Василий Иванович, к.т.н., доцент, доцент кафедры конструирования и технологий электронных и лазерных средств, Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения (ГУАП), Санкт-Петербург, Россия, ORCID: 0000-0002-1617-2275

Бестугин Александр Роальдович, д.т.н., проф., директор института радиотехники и инфокоммуникационных технологий, Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения (ГУАП), Санкт-Петербург, Россия, ORCID: 0000-0003-3847-2516

Для цитирования:

Казаков В.А., Бестугин А.Р. Формирование, преобразование и детектирование оптического сигнала в дифракционном спектрометре: радиооптический подход // Т-Comm: Телекоммуникации и транспорт. 2025. Том 19. №12. С. 34-43.

For citation:

V.I. Kazakov, A.R. Bestugin, "Formation, transformation, and detection of spectroscopic information in a diffraction spectrometer: a radio-optical approach," *T-Comm*, 2025, vol. 19, no.12, pp. 34-43. (in Russian)

Введение

В настоящее время оптические спектральные методы анализа находят широкое применение в самых разнообразных областях науки и техники – от фундаментальных физических исследований [1, 2] до практических задач в промышленной автоматике [3], экологии [4] и др. Одним из наиболее универсальных и широко используемых инструментов спектрального анализа является дифракционный оптический спектрометр, обеспечивающий высокую спектральную разрешающую способность и чувствительность при сравнительно компактных габаритах и доступной стоимости. Благодаря сочетанию этих характеристик, спектрометры данного типа применяются для мониторинга химического состава, контроля параметров плазменных и горючих сред, а также в задачах дистанционной диагностики.

Тем не менее, задача улучшения метрологических характеристик спектральной аппаратуры является непреходящей. Стоит отметить, что применительно к оптическому спектральному приборостроению эта задача требует также детального теоретического переосмысления принципов работы аппаратуры. Ряд особенностей формирования спектра [5], особенно в условиях использования нескольких дифракционных порядков, не находил ранее достаточного отражения в математических моделях и алгоритмах обработки данных.

Теоретические общепринятые основы и математическое описание принципов работы дифракционных спектральных приборов, представленный в классической литературе по спектроскопии [6, 7], базируется на постулатах геометрической оптики. В рамках данной теоретической модели процесс спектрального разложения описывается следующим образом: формирующая оптическая система образует коллимированный пучок излучения от исследуемого источника, который взаимодействует с дифракционной решёткой. Далее дифракционная решётка реализует пространственное разделение спектральных компонент согласно соотношению, связывающему угол дифракции φ с длиной волны λ . Последующее фокусирование дифрагированных пучков осуществляется линзой, которая проецирует их на соответствующие сегменты ПЗС-линейки, которая выполняет функцию фотоприёмного устройства, осуществляя пространственно-разрешённое детектирование оптического сигнала.

При этом следует отметить, что такая модель описания оптического дифракционного спектрометра имеет несколько фундаментальных ограничивающих факторов, что приводит к необходимости разработки нового подхода к описанию процесса формирования и обработки спектроскопической информации в нем. Эти факторы сводятся к следующему:

1) Отсутствует математически строгий и корректный формализм (математическая модель), который бы описывал процедуру получения многопорядкового спектра, а также свойства спектров в различных порядках. Хорошо известный факт в экспериментальной спектроскопии, который, например, описан в работе [8], заключающийся в том, что спектральное разрешение кратно улучшается пропорционально номеру дифракционного порядка, не поддается описанию и объяснению с позиций сугубо геометрической оптики. Изменение спектрального разрешения в пределах диапазона анализируемых длин волн тоже невозможно объяснить с этих позиций.

2) Применение спектрометров в различных системах контроля и диагностики приводит к необходимости рассматривать излучение как информационный сигнал. Это приводит к противоречию, заключающемуся в отсутствии модели, которая описывала бы динамику воздействия спектрометра на этот информационный сигнал. Переход к работе с импульсными сигналами еще более усугубляет эту ситуацию.

3) Существующая модель работы оптического спектрометра не дает возможности связать спектр «идеальный», который представлен в форме интеграла Фурье, и физический, т.е. регистрируемый на выходе спектрометра. Роль и вклад аппаратурных преобразований (аппаратной функции) спектрометра никак не учитывается при описании его работы.

Все это приводит к необходимости разработки новой математической модели, которая могла бы устранить указанные выше противоречия и в строго математической форме описать процесс формирования и регистрации оптических спектров в дифракционном спектрометре.

Разработка такой модели позволит создать теоретический фундамент для повышения точности и достоверности спектрометрических измерений, а также обеспечит согласованность между физической реализацией прибора и его математическим описанием.

1. Формирование комплексных спектров в дифракционном спектрометре

Новый подход к описанию работы оптического спектрометра предлагается строить на базе принципов радиооптики [9], а также системного подхода. Кроме того, потребуются привлечение математических моделей, оперирующих с комплексными спектрами оптического излучения.

Таким образом, можно сформулировать критерии, которым должна отвечать новая модель:

- обеспечение математически корректного описания преобразования оптического сигнала всеми элементами спектрометра;
- возможность корректного перехода к энергетическим спектрам, который формируется в результате операции фотодетектирования, позволяющей преобразовать комплексный спектр в итоговые энергетические соотношения [10];
- целостное моделирование процесса спектрального анализа – от физического воздействия электромагнитного поля на вход прибора до формирования регистрируемого спектра.

С учетом сформулированных критерием предлагается структурная схема дифракционного спектрометра, представленная на рисунке 1.

В общем случае процесс распространения и преобразования оптического пространственно-временного сигнала $s(t, \xi)$ можно описать следующим образом. Дифракционная решетка, имеющая пропускание, описываемое законом $T(\xi)$ выполняет операцию пространственной модуляции сигнала $s(t, \xi)$.

Далее, расположенная линза (фазовый транспарант) и два окружающих ее слоя свободного пространства, образуют оптический когерентный Фурье-процессор.

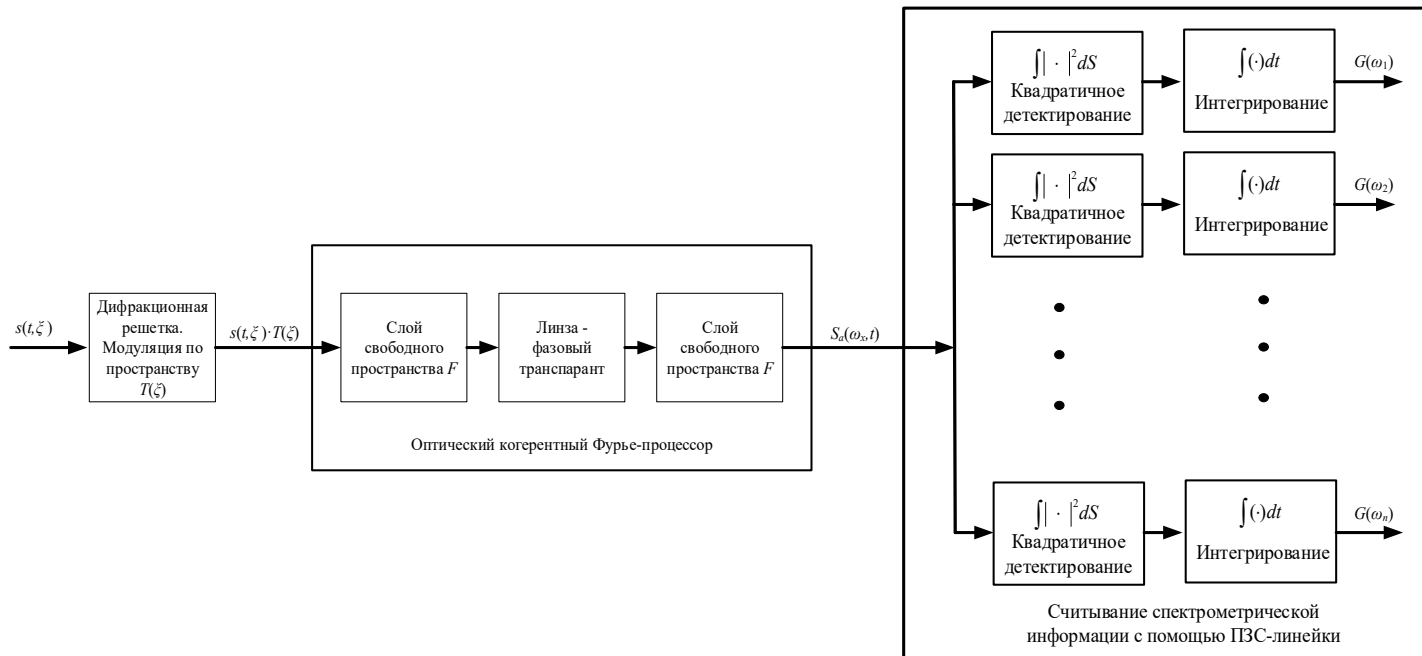


Рис. 1. Структурная схема спектрального прибора с дифракционной решеткой

При воздействии на такой Фурье-процессор однородной плоской монохроматической волны, его действие может быть представлено в форме выражения:

$$S_a(\omega_x, t) = \hat{F}[T(\xi)] = \sqrt{\frac{\omega'}{2\pi c_0 F}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} T(\xi) e^{-i\omega_x \xi} d\xi, \quad (1)$$

где $S_a(\omega_x)$ – спектр пространственных частот, ξ, x – координатные оси входной и выходной плоскостей, $T(\xi)$ – функция пропускания транспаранта, $\omega_x = \frac{\omega' x}{c_0 F}$ – пространствен-

ная частота, ω' – круговая частота падающей на транспарант однородной плоской монохроматической волны, F – фокусное расстояние линзы, L – размер апертуры транспаранта.

Таким образом, на выходе Фурье-процессора формируется сигнал, являющийся комплексным спектром входного сигнала. Этот комплексный спектр $S_a(\omega_x, t)$ далее подвергается операции фотодетектирования на каждом пикселе ПЗС-линейки.

Следует более подробно рассмотреть вопрос получения функции пропускания дифракционной решетки $T(\xi)$. Поскольку в самом простом случае дифракционная решетка представляет собой набор чередующихся прозрачных и непрозрачных элементов, это дает возможность представить функцию пропускания в форме «импульсов» длительностью τ_g и следующих с периодом T_g . Такое представление позволяет записать выражения для разложения функции пропускания в комплексный ряд Фурье [10], необходимость чего будет пояснена ниже:

$$T(\xi) = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} C_n \exp(in\Omega_g \xi), \quad (2)$$

где $\Omega_g = 2\pi / L$ пространственная «круговая» частота первой гармоники разложения.

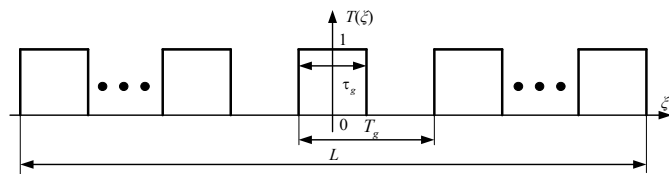


Рис. 2. Представление функции пропускания решетки в форме последовательности «импульсов»

Чтобы установить величину коэффициентов разложения C_n ряда Фурье (2), было предложено использовать одно из фундаментальных соотношений теории сигналов [11], которое позволяет выразить эти коэффициенты через комплексный спектр – в данном контексте представляющего собой спектр пространственных частот. Указанная взаимосвязь формализуется следующим образом:

$$C_n = 2S(n\Omega_g) / L. \quad (3)$$

Таким образом, задача получения коэффициентов разложения сводится к расчету спектральной плотности $S(n\Omega_g)$, что можно реализовать методом определения спектра пачки видеоимпульсов [11]:

$$S(\omega_\xi) = S_0(\omega_\xi) \cdot \left(e^{iN\omega_\xi T_g} + e^{i(N-1)\omega_\xi T_g} + \dots + 1 + e^{-i\omega_\xi T_g} + \dots + e^{-iN\omega_\xi T_g} \right) = S_0(\omega_\xi) \sum_{n=-N}^N e^{-in\omega_\xi T_g}, \quad (4)$$

где $S_0(\omega_\xi)$ – спектральная плотность одного элемента прозрачности дифракционной решетки, $2N$ – число таких элементов.

С другой стороны,

$$S_0(\omega_\xi) = \int_{-\frac{\tau_g}{2}}^{\frac{\tau_g}{2}} \exp(-i\omega_\xi \xi) d\xi = 2 \frac{\sin(\omega_\xi \frac{\tau_g}{2})}{\omega_\xi} \quad (5)$$

В выражении (5) сумма может быть представлена в форме ядра Дирихле:

$$\sum_{n=-N}^N e^{-in\omega_\xi T_g} = \frac{\sin[(N + \frac{1}{2})\omega_\xi T_g]}{\sin(\omega_\xi T_g / 2)} \quad (6)$$

Это дает возможность записать выражение для спектральной плотности для всей решетки:

$$S(\omega_\xi) = S_0(\omega_\xi) \cdot \frac{\sin[(N + \frac{1}{2})\omega_\xi T_g]}{\sin(\omega_\xi T_g / 2)} \quad (7)$$

Из соотношений (7) и (3) следует, что коэффициенты ряда (2) можно представить в следующем виде:

$$C_n = 4 \frac{\sin(n\Omega_g \frac{\tau_g}{2}) \sin[(N + \frac{1}{2})n\Omega_g T_g]}{n\Omega_g L \cdot \sin(n\Omega_g \frac{T_g}{2})} \quad (8)$$

Более строгий подход приводит к тому, что разложение в ряд Фурье (2) следует записать в виде:

$$T(\xi) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_k \exp(ik\omega_g \xi) + \sum_{\substack{m=-\infty \\ m \neq kL/T_g}}^{\infty} C_m \exp(im\Omega_g \xi), \quad (9)$$

где $\omega_g = 2\pi / T_g = 2N\Omega_g$.

Тщательный анализ выражения (9) позволяет установить, что при весьма большой величине L коэффициенты C_k определяются в точках, соответствующих главным значениям ядра Дирихле, что является идеальным случаем представления функции пропускания дифракционной решетки. При этом C_m , входящие во вторую сумму выражения (9), вследствие специфического свойства ядра Дирихле оказываются пренебрежимо малыми по сравнению с указанными выше коэффициентами. Это подтверждается результатами компьютерного моделирования, представленного на рисунке 3.

Для наглядного подтверждения этого факта были выполнены расчеты коэффициентов разложения для следующих параметров: : период $T_g=5$ мкм и апертура $L = 0,01$ мм (рис. 3а) – 2 штриха, укладываемых в пределах апертуры, $L = 0,1$ мм (рис. 3б) – 20 штрихов и $L = 1$ мм (рис. 3в) – 200 штрихов. Дополнительно в виде огибающих показаны: ядро Дирихле $D(n\Omega_g)$ (синяя сплошная линия) и спектр разложения одного элемента прозрачности дифракционной решетки $S(n\Omega_g)$ (зеленая штриховая линия).

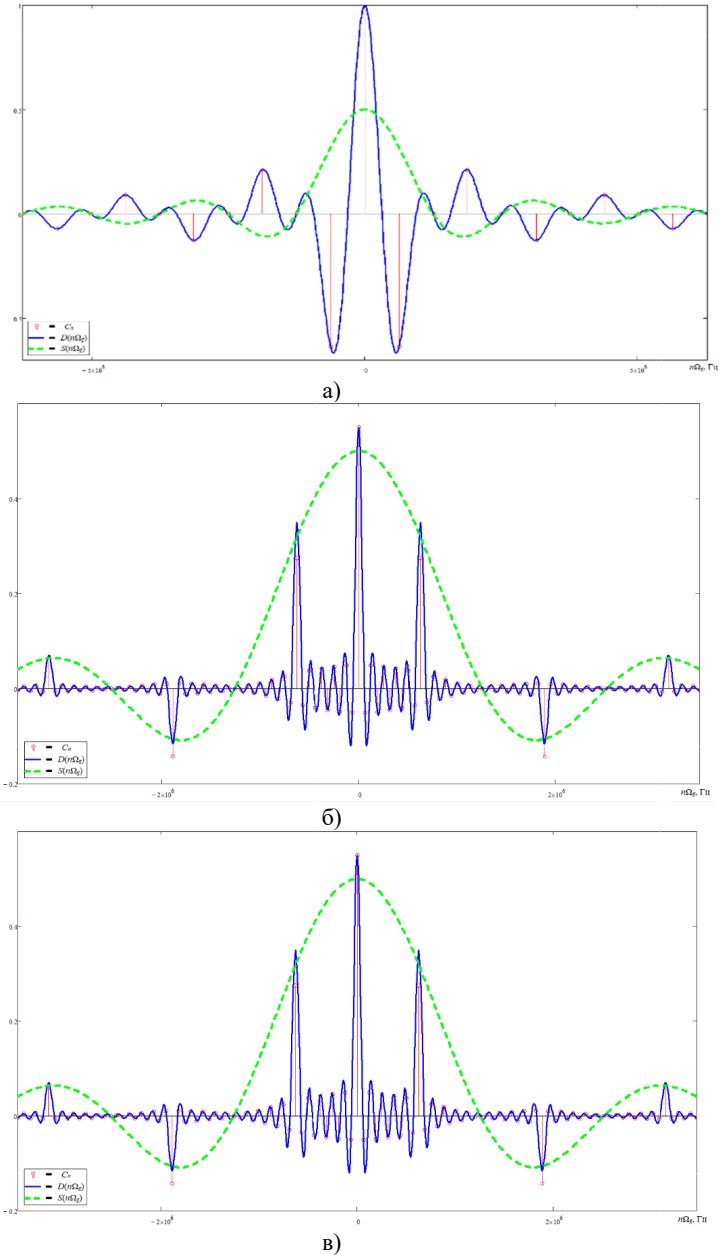


Рис. 3. Результат компьютерных расчетов коэффициентов разложения C_n при $L = 0,01$ (а), $0,1$ (б) и 1 (в) мм

С учётом выявленной закономерности дальнейшее построение математической модели базируется исключительно на первом слагаемом в правой части выражения (9). Это упрощение обосновано физическим смыслом рассматриваемых коэффициентов и подтверждается результатами численного моделирования.

Далее рассмотрение процесса преобразования оптического сигнала требует перехода к комплексному спектру оптического сигнала на основании полученных выражений для функции пропускания решетки и коэффициентов разложения. В качестве входного воздействия при определении аппаратной функции прибора следует использовать однородную плоскую монохроматическую волну $\exp(i\omega t)$ с единичной амплитудой [12]. Подстановка первой суммы выражения (9) в соотношение (1), дает:

$$S_a(\omega_x, t) = \exp(i\omega't) \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left(\sum_{k=-\infty}^{\infty} C_k \exp(ik\Omega_g \xi) \cdot \exp(-i\omega_x \xi) \right) d\xi =$$

$$= \exp(i\omega't) \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_k \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \exp(ik\Omega_g \xi) \cdot \exp(-i\omega_x \xi) d\xi \quad (10)$$

Результат интегрирования в выражении (10) можно представить в форме:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \exp(ik\Omega_g \xi) \cdot \exp(-i\omega_x \xi) d\xi = 2 \frac{\sin \left[\left(k\Omega_g - \frac{\omega_x}{c_0 F} \right) \frac{L}{2} \right]}{k\Omega_g - \frac{\omega_x}{c_0 F}}. \quad (11)$$

Для удобства выражение под синусом можно преобразовать к виду [77]:

$$\left(k\Omega_g - \frac{\omega_x}{c_0 F} \right) \frac{L}{2} = \left(\frac{k\Omega_g c_0 F}{x} - \omega' \right) \frac{Lx}{2c_0 F} = (\omega(x) - \omega') \frac{T_a(x)}{2}. \quad (12)$$

В итоговом результате (12) можно выделить ряд важных параметров оптической схемы дифракционного прибора.

1) Зависимость пространственной координаты и спектральной частоты:

$$\omega(x) = (k\Omega_g c_0 F / x). \quad (13)$$

2) Так называемое «время» анализа (имеет размерность времени, с), которое соответствует введенному в формуле (9):

$$T_a(x) = Lx / 2c_0 F. \quad (14)$$

Совокупность полученных математических выражений позволяет записать комплексную аппаратную функцию прибора с дифракционной решеткой в виде:

$$K(\omega, \omega', t) = \exp(i\omega't) \sum_{k=-N}^N 2C_k \frac{\sin[(\omega(x) - \omega')T_a(x) / 2]}{(\omega(x) - \omega')x / c_0 F},$$

где N – число учитываемых дифракционных порядков.

В свою очередь, комплексный аппаратный спектр можно записать в форме:

$$S_a(\omega_x, t) = \int_{\Delta\Omega} S(\omega') \exp(i\omega't) \sum_{k=-N}^N 2C_k \frac{\sin[(\omega(x) - \omega')T_a(x) / 2]}{(\omega(x) - \omega')x / c_0 F} d\omega' =$$

$$= \sum_{k=-N}^N 2C_k \int_{\Delta\Omega} S(\omega') \cdot \exp(i\omega't) \cdot \frac{\sin[(\omega(x) - \omega')T_a(x) / 2]}{(\omega(x) - \omega')x / c_0 F} d\omega'. \quad (15)$$

Выражение (15) является очень важным результатом, отражающим формирование многопорядкового комплексного спектра и отвечающего обозначенным в начале этого раздела критериям, предъявляемым к новой модели.

Следует прокомментировать важные аспекты, которые стало возможным описать благодаря предложенному новому подходу. Присутствие множителя k в выражении на временной спектральной частоте объясняет улучшение спектрального разрешения при переходе в более высокие порядки.

При этом, убывание коэффициентов разложения C_k другой стороны приводит к ухудшению отношения сигнал/шум, что ограничивает использование высоких порядков при спектральном анализе.

Наконец, следует отметить, что предложенная модель позволила объяснить изменение спектрального разрешения в пределах даже одного дифракционного порядка. Эта особенность подтверждается результатами компьютерного моделирования аппаратной функции для дифракционных порядков +1, +2 и +3 при двух значениях длины волны: $\lambda = 400$ нм и $\lambda = 550$ нм. Соответствующие данные визуализированы на рисунке 4.

Выражение 15 позволяет также установить математическую форму для важнейшего параметра спектрального прибора – его разрешающей способности $R(\omega)$:

$$R(\omega(x)) = \frac{2\pi \cdot c \cdot F}{\omega(x) \cdot L}. \quad (16)$$

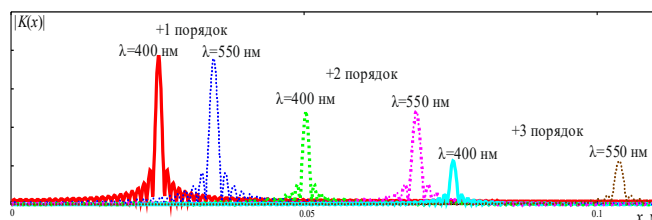


Рис. 4. Изменение аппаратной функции в различных порядках

Следует акцентировать внимание на следующем принципиальном обстоятельстве: перечисленные свойства, хорошо известные в экспериментальной спектрометрии [8], не поддаются обоснованию в рамках традиционного применения принципов геометрической оптики к анализу работы спектрального прибора с дифракционной решеткой.

Благодаря комплексному использованию принципов радиооптики, аппарата теории линейных систем и системного подхода к анализу преобразования оптического сигнала удалось в рамках строгих математических выкладок не только воспроизвести известные экспериментальные закономерности, но и установить взаимосвязь между конструктивными параметрами прибора и его спектральными характеристиками, выявить закономерности изменения разрешающей способности в зависимости от номера дифракционного порядка.

2. Процедура считывания спектрометрической информации

Считывание спектрометрической информации в дифракционных приборах реализуется через работу фотоприемных устройств – ПЗС-линеек. Корректное понимание механизмов формирования измерительного сигнала и его последующей цифровой обработки требует строгого математического описания.

Процесс считывания спектрометрической информации на примере одного пикселя ПЗС-линейки можно представить в виде двух последовательных операций: квадратичного детектирования и временного интегрирования, что представлено на рисунке 5.

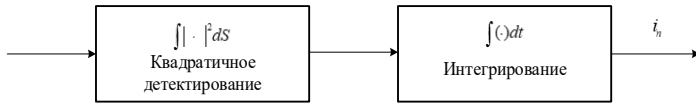


Рис. 5. Эквивалентная структурная схема фотодетектора

Каждый пиксель формирует фототок, пропорциональный интенсивности оптического сигнала на соответствующей пространственной координате спектральной частоте, что может быть записано в форме [13]:

$$i_f = \gamma q_e \frac{p}{\hbar \omega'} \quad (17)$$

где γ – квантовая эффективность детектора; q_e – заряд электрона; \hbar – постоянная Планка; p – мощность падающего оптического излучения; ω' – спектральная частота.

Для определения мощности p в выражении (17) следует использовать известное выражение для вектора Пойнтинга:

$$p = \iint_{S_f} \mathbf{P} ds, \quad (18)$$

где S_f – площадь чувствительной поверхности фотоприемника, $ds = nds$, здесь \mathbf{n} – единичная нормаль к чувствительной поверхности фотоприемника; \mathbf{P} – вектор Пойнтинга, определяемый как:

$$\mathbf{P} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} = |\mathbf{E} \times \mathbf{H}| \mathbf{s} = \sqrt{\varepsilon / \mu} \cdot |\mathbf{E}|^2 \mathbf{s} = \sqrt{\mu / \varepsilon} |\mathbf{H}|^2 \mathbf{s}, \quad (19)$$

где \mathbf{E} , \mathbf{H} – электрический и магнитный векторы, соответственно, \mathbf{s} – единичный вектор; ε , μ – диэлектрическая и магнитная проницаемости, соответственно.

Следует подчеркнуть, что в условиях спектрального анализа излучение, как правило, не является строго монохроматическим. Оно обладает конечной шириной спектра $\Delta\omega$, что требует учитывать специфику работы спектрального устройства. Это означает, что существует пространственная дисперсия частот, и координата x на ПЗС-линейке соответствует определённой спектральной компоненте [14].

Принимая во внимание нелинейную зависимость между координатой на приёмнике и спектральной частотой $S_0(\omega)$ и учитывая конечную ширину каждого элемента ПЗС-структуры, можно утверждать, что он регистрирует не одну частоту, а фильтрует сигнал в пределах определённой полосы спектра.

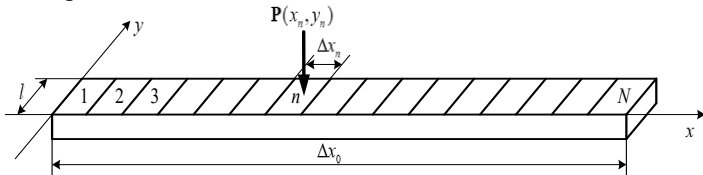


Рис. 6. Процесс фотодетектирования ПЗС-линейкой

Следовательно, на спектральное разрешение прибора влияет не только конфигурация оптической системы, но и конструктивные особенности ПЗС-линейки. Поскольку каждый элемент фотоприёмной структуры (см. рис. 6) обладает

конечными размерами $2\Delta x_n \ll x_n$, он осуществляет частотную фильтрацию в ограниченной полосе спектра, соответствующей своей пространственной протяженности. Таким образом, разрешающая способность спектрометра определяется не только параметрами оптической схемы, но и геометрическими характеристиками ПЗС-линейки. Исходя из этого можно записать разложение в ряд для окрестности точки, соответствующей пикселю x_n :

$$\omega(x_n \pm \Delta x'_n) = \frac{(2\pi c_0 F)}{\tau_g (x_n \pm \Delta x'_n)} \approx \frac{(2\pi c_0 F)}{\tau_g x_n} \mp \frac{(2\pi c_0 F) \Delta x'_n}{\tau_g x_n^2} + \dots, \quad (20)$$

В терминах спектральных частот, каждый элемент осуществляет частотную фильтрацию в полосе частот $\Delta\omega_n$, равную:

$$\Delta\omega_n = k \frac{4\pi c_0 F \Delta x_n}{\tau_g x_n^2} \quad (21)$$

или

$$\Delta x_n = \frac{\tau_g x_n^2 (\Delta\omega_n(x_n))}{4\pi c_0 F}. \quad (22)$$

Таким образом, можно заключить, что каждый элемент ПЗС-линейки является, по сути, частотным фильтром, параметры которого зависят от положения на линейке. Это накладывает определённые требования на алгоритм пересчёта координат в частотную шкалу при цифровой обработке данных.

На рисунке 7 приведены результаты моделирования, которые наглядно показывают изменение разрешающей способности прибора $\Delta\omega_n$, Гц для 1 и 2 порядков. Диапазон анализируемых длин волн при этом составил $\lambda=350\dots 650$ нм.

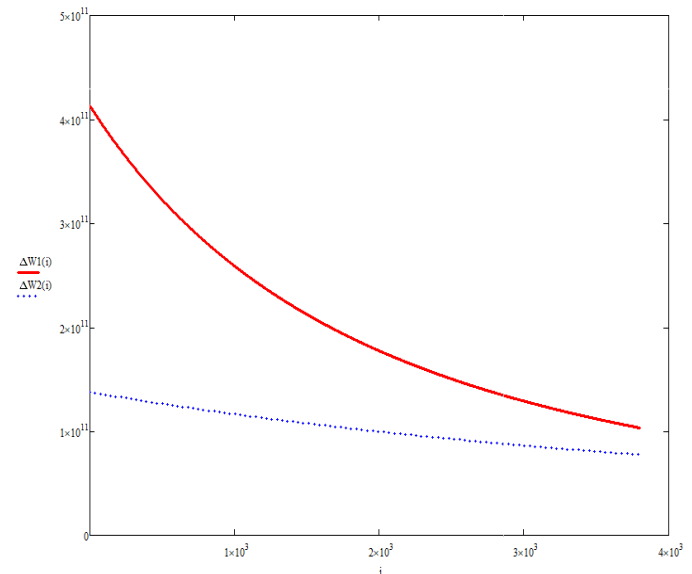


Рис. 7. Изменение разрешающей способности прибора

Следующий этап – разложение частотно-зависимых величин (например, спектральной плотности мощности и вектора Пойнтинга) в ряд Тейлора. Это позволяет получить выражения, пригодные для численного моделирования и анализа. В диапазоне частот $\omega' = \omega_0 \pm \Delta\omega$ величина $1/\omega'$ в формуле (1) представима рядом Тейлора в форме:

$$\frac{1}{\omega'} = \frac{1}{\omega_0 \pm \Delta\omega} = \frac{1}{\omega_0} \left[1 \mp \frac{\Delta\omega}{\omega_0} + \left(\frac{\Delta\omega}{\omega_0} \right)^2 \mp \dots \right]. \quad (23)$$

В свою очередь, вектор Пойнтинга может быть представлен в форме ряда:

$$\mathbf{P}(x, y) = \mathbf{P}(x_n, y_n) + \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} \right) \cdot \mathbf{P}(x_n, y_n) + \frac{1}{2!} \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \cdot \mathbf{P}(x_n, y_n) + \dots, \quad (24)$$

где x_n, y_n – координаты в плоскости чувствительной поверхности n -го элемента ПЗС-линейки.

Поскольку ширина отдельного элемента ПЗС-линейки мала $\Delta x_n \ll \Delta x_0$, можно ограничиться нулевым порядком в разложении. Тогда формула (1) принимает вид:

$$i_n = \gamma q_e \frac{\sqrt{\varepsilon / \mu} \cdot |\mathbf{E}|^2}{\hbar \omega_0} \Delta S_n, \quad (25)$$

где $\Delta S_n = \Delta x_n l$, здесь $\Delta x_n, l$ – протяженности n -го элемента ПЗС-линейки вдоль оси пространственных частот ω_x и в перпендикулярном направлении, соответственно.

Подставив выражения для электрического поля, соответствующего спектральной компоненте, в уравнение фототока, можно получить интегральное выражение результата фотодетектирования. С учетом пространственного и временного усреднения, характерного для работы ПЗС-структур, результат регистрации интенсивности на выходе спектрометра может быть представлен следующим образом:

$$\bar{i}_n = B \int_{\omega_n - \Delta\omega_n}^{\omega_n + \Delta\omega_n} \frac{\sin^2 \left[(\omega(x) - \omega') \frac{T_a}{2} \right]}{\left[(\omega(x) - \omega') \frac{T_a}{2} \right]^2} G(\omega') d\omega' = B \int_{\omega_n - \Delta\omega_n}^{\omega_n + \Delta\omega_n} \text{sinc}^2(\cdot) \cdot G(\omega') d\omega'. \quad (26)$$

Формально можно описать отклик каждого элемента ПЗС как результат свёртки спектрального сигнала с аппаратной функцией спектрометра, учитывающей разрешающую способность как по времени, так и по пространственной координате. В результате, выходной сигнал спектрометра можно представить в виде матричного уравнения:

$$\|G(\omega_n)\| = B \int_{\omega_n - \Delta\omega_n}^{\omega_n + \Delta\omega_n} \text{diag} \{ A_n(\omega, \omega') \} \cdot \|G(\omega')\| d\omega', \quad (27)$$

где $G(\omega')$ – энергетический спектр анализируемого сигнала; $\text{diag} \{ A_n(\omega, \omega') \}$ – энергетическая аппаратная функция спектрального прибора оптического диапазона в матричной форме; $A_n(\omega, \omega') = \text{sinc}^2(\cdot)$.

Таким образом, каждый выходной отсчёт спектра представляет собой результат интегральной свёртки входного

сигнала с аппаратной функцией соответствующего канала, усреднённой по площади фотоприемного элемента и времени регистрации.

Итогом предложенной модели является то, что спектральная чувствительность каждого элемента системы может быть точно описана с учетом геометрии, времени интегрирования и дифракционных параметров оптической схемы. Это создаёт основу для последующего этапа – корректной цифровой коррекции зарегистрированного сигнала, направленной на восстановление истинной спектральной плотности мощности анализируемого оптического излучения.

Как следует из приведённой выше математической модели, формируемый спектральный сигнал на выходе фотоприемного устройства подвержен ряду искажений, обусловленных как конструктивными особенностями спектрометра, так и физическими ограничениями элементов регистрации. В условиях реального эксперимента эти искажения становятся особенно значимыми и требуют обязательной компенсации с целью повышения достоверности получаемых спектров. В первую очередь это относится к нелинейности спектральной шкалы, нерегулярности чувствительности ПЗС-линейки и особенностям формирования аппаратной функции прибора.

Предложенная ранее математическая модель в явном виде показывает, что спектр, регистрируемый с помощью ПЗС-линейки, не является точным отражением спектрального состава входного сигнала. На это влияет, в том числе, неравномерная чувствительность самого фотоприемного устройства, которая не является постоянной во всем спектральном диапазоне.

На примере ПЗС-линейки TCD1304, с учетом имеющихся открытых данных о её спектральной чувствительности, была проведена её аппроксимация методом наименьших квадратов, в результате чего получено аналитическое выражение зависимости чувствительности от длины волны.

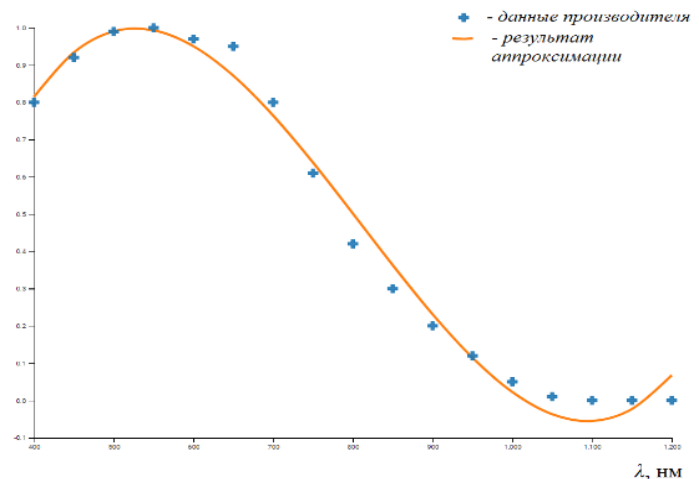


Рис. 8. Спектральная чувствительность ПЗС-линейки

Аналитическая запись аппроксимирующей функции имеет вид:

$$W(\lambda) = -0.000028\lambda^2 + 0.020002\lambda - 3.429690. \quad (28)$$

Это позволяет использовать обратную функцию чувствительности в качестве поправочного множителя к измеренному сигналу.

На основе проведенного анализа был сформирован пошаговый алгоритм коррекции спектроскопических измерений:

1. Нелинейное преобразование шкалы координат – пересчет пространственной координаты элементов ПЗС-линейки в шкалу спектральных частот на основании выражения (13), что учитывает реальные геометрические и дифракционные параметры системы.

2. Коррекция по чувствительности – каждый зарегистрированный отсчет спектра умножается на величину, обратно пропорциональную чувствительности фотодетектора при данной длине волны, с использованием выражения (28).

3. Формирование итогового спектра – результирующий спектр визуализируется или передается в последующий блок обработки, при этом может быть дополнительно интерполирован или сглажен для повышения читаемости.

Результаты применения предложенного алгоритма коррекции представлены на рисунке 9, где показано сравнение исходного и скорректированного спектра, полученного при регистрации сигнала от стандартного источника излучения – лампы LS-1 фирмы Ocean Optics.



Рис. 9. Результат коррекции спектроскопических измерений

Из анализа рисунка видно, что проведение коррекции существенно меняет форму спектра: ряд локальных максимумов и минимумов, искажённых из-за неравномерной чувствительности, становится адекватно отражённым. Это особенно важно при работе с широкополосными источниками или при количественном анализе распределения энергии по спектру.

Таким образом, реализованная система считывания в сочетании с математически обоснованным алгоритмом коррекции позволяет существенно повысить точность и воспроизводимость спектральных измерений. Это открывает возможности для использования прибора не только в исследовательских, но и в прикладных задачах – от технологического контроля до применений в аэрокосмической отрасли, например, по аналогии с результатами работ, приведенными в [15], а также в составе систем контроля с применением оптического волокна [16, 17].

Заключение

В данной работе рассмотрен комплексный подход к построению модели считывания и последующей коррекции спектроскопической информации в дифракционном решеточном спектрометре. В отличие от классических моделей, не учитывающих особенности пространственно-спектральных

преобразований, предложенное описание опирается на строгий радиооптический анализ, объясняющий многопорядковую природу формирования спектра, нелинейность шкалы пространственных спектральных частот и неравномерность спектральной характеристики ПЗС-линейки.

Предложенная математическая модель, описывающая процесс формирования сигнала на каждом пикселе ПЗС-линейки в условиях временной и пространственной интеграции, сопровождающейся частотной фильтрацией, в совокупности с параметрами оптической схемы спектрометра, позволяет количественно оценить вклад каждого из этих факторов в итоговую разрешающую способность прибора и их влияние на результат считывания спектра.

Результаты данной работы могут быть полезны при создании компактных и недорогих спектрометрических систем с расширенным функционалом, ориентированных на решение задач спектрального анализа, контроля технологических процессов, экологического мониторинга и других приложений, где важны как точность, так и адаптивность к изменяющимся условиям. В частности, предложенные методы могут быть использованы в многоканальных спектрометрах, а также в сочетании с элементами искусственного интеллекта для построения интеллектуальных систем обработки спектров.

В дальнейшем планируется расширить предложенную модель для учёта шумов, возникающих при регистрации, и влияния температурных факторов на стабильность параметров ПЗС-линейки. Также представляется перспективным использование многопорядковой дифракции и анализ возможностей реализации подобных систем в микросборках и интегральных оптоэлектронных платформах.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, соглашение № FSRF-2023-0003, «Фундаментальные основы построения помехозащищенных систем космической и спутниковой связи, относительной навигации, технического зрения и аэрокосмического мониторинга».

Литература

1. Лебедев В.Ф., Мишустин Г.В., Плаксин М.К. Анализ химического состава вина методом лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии // Физические основы приборостроения. 2023. № 4. С. 59-65.
2. Сердюк К.В. Моделирование работы анализирующей системы призмного спектрального прибора для контроля физических и физико-химических процессов // Датчики и системы. 2023. № 4-2 (270). С. 13-19.
3. Vaganov M.A., Moskaletz O.D., Kazakov V.I. Automatic control system of combustion processes based on the methods of contactless optical spectroscopy // Proceedings of SPIE. 2019. Vol. 11056. P. 110563A.
4. Kumaev B.B., Kazakov B.I. Применение методов оптической спектроскопии в задачах идентификации и контроля микропластика // Инновационное приборостроение. 2024. Т. 3, № 5. С. 51-58.
5. Hebling J., Marton Z. Theory of spectroscopic devices // Journal of the Optical Society of America A. 2006. Vol. 23, pp. 966-972.
6. Тарасов К.И. Спектральные приборы; 2-е изд. Л.: Машиностроение. Ленинградское отд., 1977. 367 с.
7. Скоков И.В. Оптические спектральные приборы: учебное пособие для оптических специальностей вузов. М.: Машиностроение, 1984. 240 с.

8. Раутиан С.Г. Реальные спектральные приборы // Успехи физических наук. 1958. Т. 66. №. 11. С. 475-517.

9. Казаков В.И., Москалец О.Д. Измерение оптических спектров решеточным спектральным прибором в высших дифракционных порядках // Датчики и системы. 2018. №12. С. 22-27.

10. Kazakov V.I., Moskaletz D.O., Moskaletz O.D. Alternative theory of diffraction grating spectral device and its application for calculation of convolution and correlation of optical pulse signals // Proc. SPIE. Vol. 9889, Optical Modelling and Design IV, 2016. P. 988924.

11. Гоноровский И.С. Радиотехнические цепи и сигналы: учебник для вузов, 4-е изд., перераб. и доп. М.: Радио и связь, 1986. 512 с.

12. Казаков В.И., Москалец О.Д. Комплексные спектры в дифракционном решеточном спектральном приборе // Радиопромышленность. 2016. №4. С. 32-37.

13. Салех Б., Теïх М. Оптика и фотоника. Принципы и применения. Долгопрудный: Издательский дом Интеллект, 2012. 760 с.

14. Kazakov V.I., Moskaletz D.O., Moskaletz O.D., Vaganov M.A. Transformation of a harmonized random process by spectral devices that perform instantaneous spectrum analysis // Proc. SPIE. 2018. Vol. 10680, Optical Sensing and Detection V. P. 1068024.

15. Параскун А.С. Измерительные сигналы и их обработка в спектроскопической системе контроля работы ракетного двигателя // Датчики и системы. 2022. № 5 (264). С. 33-37.

16. Бестугин А.Р., Ваганов М.А., Казаков В.И. Применение оптического волокна в качестве линии передачи анализируемого излучения в системах дистанционной оптической спектроскопии // T-Comm: Телекоммуникации и транспорт. 2023. Т. 17. № 12. С. 4-14.

17. Сердюк К.В., Москалец О.Д., Казаков В.И. Применение призменного спектрального прибора в системе контроля и управления технологическими процессами // Датчики и системы. 2020. № 7 (249). С. 23-29.

FORMATION, TRANSFORMATION, AND DETECTION OF SPECTROSCOPIC INFORMATION IN A DIFFRACTION SPECTROMETER: A RADIO-OPTICAL APPROACH

Vasily I. Kazakov, Saint Petersburg State University of Aerospace Instrumentation, Saint Petersburg, Russia, kvi@guap.ru
Aleksandr R. Bestugin, Saint Petersburg State University of Aerospace Instrumentation, Saint Petersburg, Russia, fresguap@mail.ru

Abstract

This paper presents a study of the formation and processing of spectroscopic information in a diffraction spectrometer. The relevance of this work lies in the need to improve the theoretical foundations of diffraction spectrometers to increase the accuracy and reliability of spectrometric measurements. Existing models based on the principles of geometric optics fail to adequately describe a number of important effects observed during the operation of spectral instruments. A mathematical model of spectral transformation has been developed, based on the principles of radio optics, linear systems theory, and a systems approach. The model describes the formation of a complex spectrum in a diffraction spectrometer from the input aperture to the photodetector. A study of the characteristics of optical signal transformation has been conducted, including an analysis of the formation of spatial spectra and their detection by a CCD array. Patterns of formation of a multi-order spectrum and its characteristics have been established. A method for describing the complex instrumental function of a spectral instrument with a diffraction grating is proposed, taking into account the characteristics of spectrum formation in different diffraction orders. The influence of the instrument's geometric parameters on its spectral characteristics is demonstrated. An algorithm for correcting spectroscopic measurements has been developed, taking into account the nonlinearity of the spectral scale, the nonuniformity of the CCD array sensitivity, and the characteristics of the spectrometer's instrumental function formation. A photodetection process was simulated, taking into account the design features of a CCD array and the parameters of the optical system. The results improve the accuracy and reliability of spectrometric measurements and can be used to create compact spectrometric systems for spectral analysis, process control, and environmental monitoring. The practical significance of this study lies in the potential application of the obtained results in creating compact and inexpensive spectrometric systems for spectral analysis, process control, and environmental monitoring. The proposed methods can be used in multichannel spectrometers and systems with artificial intelligence elements. Prospects for further research include taking into account noise processes during recording and the influence of temperature factors on the stability of CCD array parameters, as well as the possibility of implementing such systems in microassemblies and integrated optoelectronic platforms.

Keywords: spectrum, information processing, diffraction grating, spectrometer, readout, CCD

References

- [1] V.F. Lebedev, G.V. Mishustin, and M.K. Plaksin, "Analysis of wine chemical composition by laser-induced breakdown spectroscopy," *Fizicheskie Osnovy Priborostroeniya*, no. 4, pp. 69-65, 2023.
- [2] K.V. Serdyuk, "Modeling of prism spectral instrument analyzing system for monitoring physical and physico-chemical processes," *Sensors and Systems*, no. 4?2 (270), pp. 13-19, 2023.
- [3] M.A. Vaganov, O.D. Moskaletz, and V.I. Kazakov, "Automatic control system of combustion processes based on the methods of contactless optical spectroscopy," *Proc. SPIE*, vol. 11056, p. 110563A, 2019.
- [4] V.V. Kitaev and V.I. Kazakov, "Application of optical spectroscopy methods in microplastic identification and control," *Innovative Instrumentation*, vol. 3, no. 5, pp. 51-58, 2024.
- [5] J. Hebling and Z. Marton, "Theory of spectroscopic devices," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 23, pp. 966-972, 2006.
- [6] K.I. Tarasov, *Spectral Instruments*, 2nd ed. Leningrad, USSR: Mashinostroenie (Leningrad Branch), 1977, p. 367.
- [7] I.V. Skokov, *Optical Spectral Instruments: Textbook for Optical Specialties*. Moscow, USSR: Mashinostroenie, 1984, p. 240.
- [8] S.G. Rautian, "Real spectral instruments," *Usp. Fiz. Nauk*, vol. 66, no. 11, pp. 475-517, 1958.
- [9] V.I. Kazakov and O.D. Moskaletz, "Measurement of optical spectra by grating spectral instrument in higher diffraction orders," *Sensors and Systems*, no. 12, pp. 22-27, 2018.
- [10] V.I. Kazakov, D.O. Moskaletz, and O.D. Moskaletz, "Alternative theory of diffraction grating spectral device and its application for calculation of convolution and correlation of optical pulse signals," *Proc. SPIE*, vol. 9889, Optical Modelling and Design IV, p. 988924, 2016.
- [11] I.S. Gonorovsky, *Radio Engineering Circuits and Signals: Textbook*, 4th ed., rev. and augm. Moscow, USSR: Radio i Svyaz', 1986, p. 512.
- [12] V.I. Kazakov and O.D. Moskaletz, "Complex spectra in diffraction grating spectral instrument," *Radio Industry*, no. 4, pp. 32-37, 2016.
- [13] B. Saleh and M. Teich, *Optics and Photonics: Principles and Applications*. Dolgoprudny, Russia: Intellect Publishing House, 2012, p. 760.
- [14] V.I. Kazakov, D.O. Moskaletz, O.D. Moskaletz, and M.A. Vaganov, "Transformation of a harmonized random process by spectral devices that perform instantaneous spectrum analysis," *Proc. SPIE*, vol. 10680, Optical Sensing and Detection V, p. 1068024, 2018.
- [15] A.S. Paraskun, "Measuring signals and their processing in spectroscopic control system of rocket engine operation," *Sensors and Systems*, no. 5 (264), pp. 33-37, 2022.
- [16] A.R. Bestugin, M. A. Vaganov, and V.I. Kazakov, "Application of optical fiber as transmission line for analyzed radiation in remote optical spectroscopy systems," *T-Comm*, vol. 17, no. 12, pp. 4-14, 2023.
- [17] K.V. Serdyuk, O.D. Moskaletz, and V.I. Kazakov, "Application of prism spectral instrument in process control and management system," *Sensors and Systems*, no. 7 (249), pp. 23-29, 2020.

Information about authors:

Vasily I. Kazakov, PhD, Associate Professor, Associate Professor, Department of Electronic and Laser Devices Design and Technology, Saint Petersburg State University of Aerospace Instrumentation (SUAI), Saint Petersburg, Russia, ORCID: 0000-0002-1617-2275

Aleksandr R. Bestugin, Doctor of Engineering, Professor, Director of the Institute of Radio Engineering and Infocommunication Technologies, Saint Petersburg State University of Aerospace Instrumentation (SUAI), Saint Petersburg, Russia, ORCID: 0000-0003-3847-2516