

ВОЗМОЖНОСТИ РАСШИФРОВКИ СПЕКТРОГРАММ С ПОМОЩЬЮ ПЕРСОНАЛЬНОГО КОМПЬЮТЕРА И СКАНЕРА

Д.Бямбажав, Р.Галбадрах
Факультет физики и электроники МонГУ

Түлхүүр үг: *Микрофотометр, спектрограмма железа, MATLAB, разрешающая способность сканера.*

Товч утга : Атомын спектрийг бүртгэсэн спектрограммыг сканераар уншуулан компьютерт тоон хэлбэрээр оруулах туршилтыг анх удаа хийв. Автомат микрофотометр ашиглан спектрограмм дээр хийж болох бүх хэмжилт, тооцоог спектрийн тоон дүрслэлийг боловсруулдаг программын тусламжтайгаар гүйцэтгэж болохыг зарчмын хувьд харуулав.

Аналитические методы определения элементарного состава веществ помощью атомных спектров эмиссии, флуоресценции и абсорбции достигли высокого уровня автоматизации. Как обычно, встроенный современный спектральный прибор микропроцессор управляет всеми этапами аналитической процедуры, начиная от процесса атомизации проб до выдачи конечного результата анализа, указывая при этом погрешность анализа. От оператора требуется лишь загрузка ячеек пробами и запуск прибора к работе. Но такая высокая степень автоматизации достигается ценой потери значительной части первичной информации о пробе. Это связано с фотоэлектрическим способом регистрации спектра, используемого в автоматических спектрометрах. Фотоэлектрический способ позволяет регистрировать одновременно отдельные участки спектра, а не весь широкий спектральный диапазон. Такого недостатка лишен другой, старейший способ регистрации спектра - фотографический. Фотопластинка-спектрограмма информативности до сих пор удерживает первенство среди спектрограмм, получаемых разными методами. Поэтому этот метод актуален и сейчас, и широко используется для регистрации атомных эмиссионного, масс-, астро-, бета-, рентгено-спектров и применяется также в аэрофотосъемке, физике плазмы, биологии и других областях [1].

В нашей стране существует значительный контингент спектрографов ИСП-30, ДФС-8 и им подобных, предназначенных

эмиссионного спектрального анализа с фотографической регистрацией спектров (ЭСАФР). Удачно автоматизируя отдельные этапы ЭСАФР можно существенно уменьшить себестоимость спектро-аналитических работ и сохранить конкурентоспособность этого метода даже в нынешних условиях малого спроса на аналитические виды работ.

Центральным вопросом автоматизации ЭСАФР является автоматизация процесса микрофотометрирования. На ручном микрофотометре этот этап ЭСАФР наиболее трудоёмок даже для квалифицированного спектроскописта. Эта трудность привела к разработке автоматических микрофотометров (АМФ) [2-7]. Краткий обзор пионерских работ по АМФ можно увидеть в книге [8]. Из этих работ следует, что на АМФ возложены следующие задачи: 1) поиск нужных участков спектрограммы; 2) поиск и определение длин волн заданных спектральных линии; 3) определение спектральных характеристик фотослоя; 4) построение характеристической кривой для перехода от почернений к истинным значениям интенсивностей; 5) восстановление относительных и абсолютных интенсивностей; 6) запись истинных спектров и т.д.

Мы полагаем, что перечисленные выше и последующие аналитические задачи можно быстро и комплексно решить без дорогостоящего АМФ, а используя ПК средней мощности и сканер средней (1200 dpi) или повышенной разрешающей способности. Покажем это на примере обработки фрагмента спектра железа.

Излучение железа фотографировался нами на фотопластинке WU-3 с помощью спектрографа ИСП-30 и дуги переменного тока силой 3-4 А. Готовая фотопластинка-спектрограмма затем сканировалась обычным сканером как обычный печатный материал и вводилась в память компьютера. На рис.1 показано увеличенное около 12.5 раз и распечатанное на лазерном принтере изображение фрагмента спектра железа от ~3000 до 3150 Е. Здесь же цифрами отмечены некоторые спектральные позиции, в которых на самой спектрограмме зарегистрированы атомные линии Fe и Ni (следы никеля обычно присутствуют в спектре железа). Другие линии, кроме отмеченных, не обнаружены визуально. Длины волн и яркости отмеченных линии определялись из [9] и вписаны в таблицу:

№	λ, E	Яркость	№	λ, E	Яркость	№	λ, E	Яркость
1	3015.91	70	12	3040.43	M 17	25	3068.17	150
2	3017.63	M 20	13	3041.75	M 12	26	3075.72	M 34
3	3018.98	M 18		3042.02	M 06	27	3078.02	100
4	3020.49	M 60	14	3042.67	300		3078.43	80
	3020.64	M 280	15	3045.08	150	3079.98	30	
5	3021.07	M 160	16	3047.61	800	28	3080.11	30
	3024.03	M 26	17	3050.82	M 280	29	3083.74	M 24
6	3025.64	M 18	18	3053.44	80	30	3091.58	M 20
	3025.84	M 38		19	3055.26	M 06	31	3093.88
7	3026.46	M 18	20	3057.44	M 65	32	3098.19	70
8	3030.15	M 19	21	3059.09	M 100	33	3099.97	M 55
9	3031.21	150	22	3060.98	50		3100.30	M 26
10	3031.64	M 19	23	3063.93	40	3100.67	M 26	
11	3037.39	M 95	24	3067.24	M 40			

Здесь яркости линии в дуговом разряде даны по Меггерсу [10] и [9].
Значения яркостей с буквой М соответствуют [10], без таковой-[9].

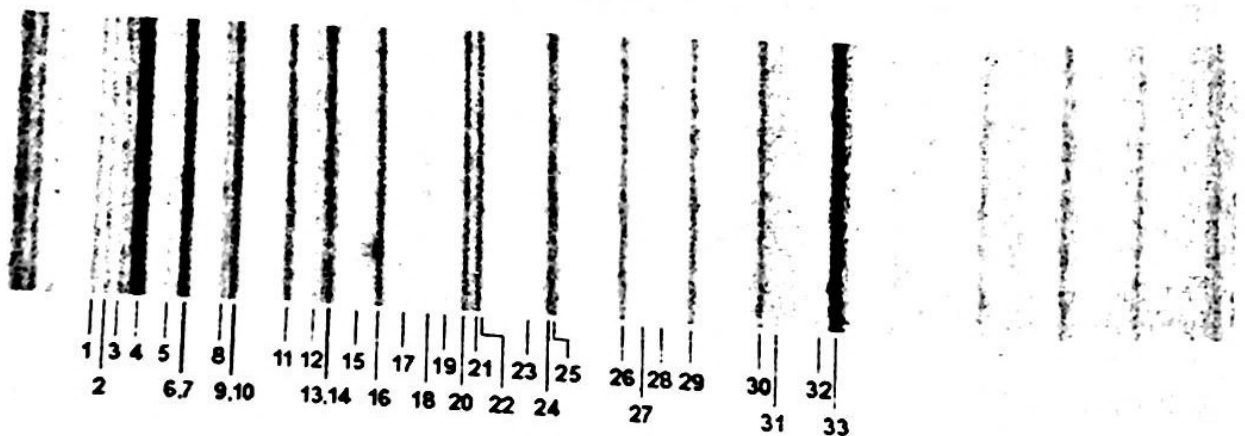


Рис 1. Изображение фрагмента спектра сканированием фотопластинки-спектрограммы. Цифрами отмечены позиции спектральных линии (см.табл.).

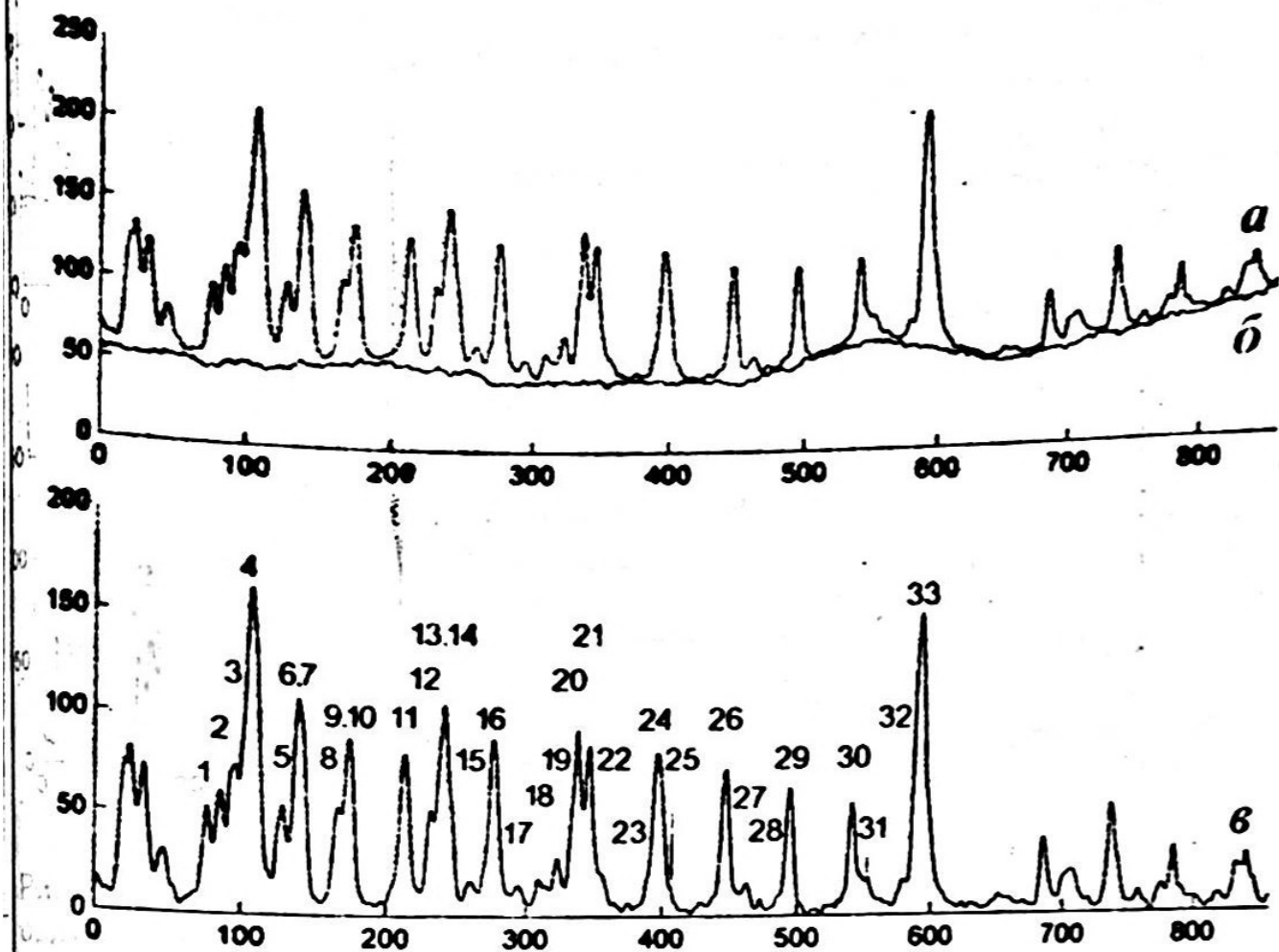


Рис.2. Графическое представление спектра (рис.1). По оси ординат почернение в условных единицах, по оси абсцисс расстояние вдоль дисперсий спектра в единицах dr_i , а-общий вид спектра, б-фон, в-разность а и б.

Численное представление спектра обрабатывалось в среде программы MATLAB. На рис.2 кривая "а" показывает зависимость почернения от расстояния вдоль дисперсий спектра. Каждое значение почернения усреднено вдоль высоты спектра, т.е. перпендикулярно к направлению дисперсий. Кривая "б" представляет усредненный фон, а "в" является разностью "а" и "б".

Сравнение показывает удовлетворительное совпадение графического представления спектра (рис.2в) с истинным. Так, например, слабым линиям 23 и 28 (см.табл.) соответствуют пички 23 и 28 на рис.2в, хотя на рис.1 эти линий не заметны. Отношения площадей свободных от наложений линий, сравнимы с измеренными на микрофотометре МФ-4, т.е. по чувствительности сканер не уступает микрофотометру.

По разрешающей способности дело стоит несколько хуже. Если считать графически разрешенными линиями 8 и 9, то фактическая разрешающая способность сканера $R = (\lambda_9 + \lambda_8) / 2(\lambda_9 - \lambda_8) = (3031.21 + 3030.15) \text{ \AA} / 2(3031.21 - 3030.15) \text{ \AA} \approx 2.9 \cdot 10^3$, тогда как на спектрограмме разрешается визуально и микрофотометрически узкий триплет железа 33 (см.табл.), что соответствует разрешающей способности $(3100.30 + 3099.97) \text{ \AA} / 2(3100.30 - 3099.97) \text{ \AA} \approx 9.4 \cdot 10^3$.

Малость разрешающей способности сканера не является принципиальной, как видно, она и не столь мала чтобы повлиять на точность анализа большинства химических элементов. При необходимости разрешающую способность можно улучшить выбором другого сканера и способа сканирования.

Для точного знания и определения длины волны спектральной линии можно ввести используя мощный аппарат корреляционного анализа, реализованный в MATLAB. Для этого нужно создать компьютерный банк данных по линиям элементов, подобный таблицам [9] и указать принадлежность и длин волн нескольких, а может быть, одной лишь спектральной линии в исследуемом спектре.

Отметим в конце важное отличие сканера от микрофотометра: сканер регистрирует отраженную интенсивность, а микрофотометр — пропущенную. Неселективность поглощения зерен серебра в фотослое позволяет не учитывать эту разницу и поэтому для перехода от почернения к интенсивностям достаточно ввести в алгоритм вычисления соответствующую процедуру учета характеристической кривой фотослоя.

Литература

1. Гришин М.П., Курбанов Ш.М., Маркелов В.П. Автоматический ввод и обработка фотографических изображений на ЭВМ. М.: Энергия, 1976. 220 с.
2. Palmer B.A., Sansonetti C.J., Andrew K.L. Automatic Precision Measurement of Spectrograms. - Appl. Opt., 1978, v.17, N 15, p.2280-2290.
3. Taylor B.L., Birks F.T. A Method of Processing Data from Automatic Microphotometers for Emission Spectrographic Analysis. -Analyst, 1972, v.97, №1187, p.681-690.
4. Witmer A.W., Jansen J.A.J., Gool G.H., van Brouwer G. A System for the Automatic Analysis of Photographically Recorded Emission Spectra. -Phillips Techn. Rev., 1974, v. 34 N11-12, p. 322-329.
5. Kylstra C.D., Schneider R.T. Computerized Spectrum Analysis. - Appl. Spectroscopy, 1970, v.24, №1, p.115-120.
6. Thomas C.P. A Minicomputer-Based Emission Spectrographic Analysis System Dependent on Scanning Microphotometry. -Appl. Spectroscopy, 1979, v.33, N6, p.604-612.
7. Pilate A., Adams F. A Microcomputer-Based System for the Processing of Spark-Source Mass Spectrometry Photoplates. - Analyt.Chem. acta, 1980, v.122, N1, p.57-86.
8. Новые методы спектрального анализа. изд-во Наука, Новосибирск, 1983, стр.97-107.
9. Зайдель А.Н., Прокофьев В.К., Райский С.К. и др. Таблица спектральных линий. изд-во Наука, М., 1969.
10. Meggers W.F., Corliss C.H., Scribner B.F. Tables of Spectral-Line Intensities, 1961.

Резюме

Показана возможность численной обработки атомных спектров в среде программы MATLAB. Впервые осуществлен ввод спектра в компьютер прямым сканированием фотопластинок-спектрограммы на обычном сканере.