

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУКНОВЫЕ ПРИБОРЫ И МЕТОДЫ ИЗМЕРЕНИЙ

РЕАЛЬНЫЕ СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПРИБОРЫ

С. Г. Раутман

§ 1. ИДЕАЛЬНЫЕ И РЕАЛЬНЫЕ ПРИБОРЫ

1. Реальные спектральные приборы не являются, как известно, идеальными гармоническими анализаторами излучения, т. е. распределение энергии по спектру, получаемое с помощью реального спектрального прибора, отличается от того «идеального» или «истинного» распределения, которое дает фурье-разложение исследуемого излучения. Отличия наблюдаемого распределения от истинного (или, как мы будем говорить, — искажения) вызываются многочисленными и весьма разнообразными причинами, в той или иной степени имеющими место в любом реальном приборе. Представляется целесообразной следующая классификация искажающих факторов по роду вносимых ими искажений. К первой группе мы относим искажения, проявляющиеся при исследовании спектра даже со сравнительно грубой структурой, т. е. с медленно изменяющейся яркостью, например, при исследовании непрерывного спектра. Такого рода искажениями являются изменения с длиной волны телесного угла выходного зрачка, пропускания прибора, его дисперсии, углового и линейного увеличения, чувствительности приемника излучения и т. п. В большинстве случаев эти факторы приводят к медленному изменению масштаба вдоль спектрограммы, либо к медленному изменению коэффициента пропорциональности между измеряемой освещенностью (или потоком) и истинной спектральной плотностью излучения. К этой же группе факторов можно отнести паразитную засветку спектрограммы, вызванную рассеянием излучения на деталях прибора и приводящую, как правило, к добавлению к истинному распределению некоторой медленно изменяющейся величины. Эти искажения обычно сравнительно легко учесть, и в настоящее время существуют разработанные методы такого учета (см., например,^{1,2}). В последующем эти факторы рассматриваться не будут.

При исследовании тонкой структуры спектра (одиночные, двойные и т. п. спектральные линии, узкие полосы и т. д.), на протяжении которых искажения первой группы можно не принимать во внимание, становятся существенными искажения другого типа, которые мы относим ко второй группе. Эти искажения обусловлены тем, что даже при монохроматическом излучении реальный спектральный прибор дает некоторое распределение энергии по спектрограмме, обладающее конечной шириной. Форма этого распределения и его ширина определяются различными причинами: дифракцией на диафрагмах оптической системы спектрального прибора, ее абберациями, конечностью ширины щелей, инерционностью записывающего устройства, рассеянием в светочувствительном слое

фотопластинки и др. Существенно подчеркнуть, что, независимо от своей природы, сам факт конечности ширины распределения при монохроматическом излучении является общим для всех реальных спектральных приборов и в значительной степени определяет возможности при исследовании тонких деталей или структуры спектра.

Кроме искажений систематического характера, вызванных факторами первой и второй групп, различие между «истинным» и «наблюдаемым» распределениями обуславливается также факторами, которые приводят к случайным ошибкам измерений. Эти факторы мы отнесем к третьей группе. Появление случайных ошибок связано с изменением параметров

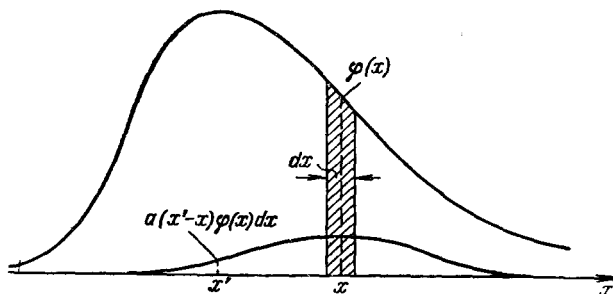


Рис. 1. К выводу соотношения (1).

оптической системы во время опыта, флуктуационными явлениями в приемнике света и т. п. причинами. В ряде случаев изменения яркости источника света и флуктуации светового потока, связанные с корпускулярной структурой света, также являются факторами, приводящими к случайным ошибкам измерения.

Разграничение случайных и систематических искажений целесообразно в связи с тем, что они вызываются физически разнородными причинами и, следовательно, для их уменьшения требуются различные (иногда — прямо противоположные) изменения в установке. Однако возможности прибора в целом ограничиваются факторами второй и третьей групп совместно, и при рассмотрении таких вопросов, как разрешение, точность измерения истинного распределения энергии и т. п. необходимо принимать во внимание их совместное действие.

2. Рассмотрим теперь количественное описание искажений, обусловленных факторами второй группы. Пусть истинное распределение энергии по спектру описывается функцией $\varphi(x)$, а распределение, получаемое с помощью реального прибора при монохроматическом излучении, — функцией $a(x)$, которую мы будем называть аппаратной функцией спектрального прибора. Наблюдаемое распределение можно построить следующим образом. Каждая монохроматическая компонента $\varphi(x)dx$ истинного распределения заменяется аппаратной функцией, вследствие чего в некоторой произвольной точке x' создается освещенность (или поток) $a(x'-x)\varphi(x)dx$ (см. рис. 1). Другие монохроматические вклады в освещенность в точке x' , и в результате наблюдаемое распределение $f(x')$ будет выражаться следующим интегралом:

$$f(x') = \int_{-\infty}^{\infty} a(x' - x) \varphi(x) dx. \quad (1)$$

Функция $a(x)$ и, следовательно, формула (1) учитывает искажения как в оптической, так и в регистрирующей частях прибора. Легко видеть,

что каждая из этих частей может быть охарактеризована своими аппаратными функциями $a_1(x)$ и $a_2(x)$. Например, распределение освещенности $f_1(x')$ в фокальной плоскости камерного объектива есть

$$f_1(x') = \int_{-\infty}^{\infty} a_1(x' - x) \varphi(x) dx. \quad (2)$$

Аппаратная функция спектрального прибора $a(x)$ выражается через $a_1(x)$ и $a_2(x)$, как нетрудно показать, следующим образом:

$$a(x) = \int_{-\infty}^{\infty} a_1(x - y) a_2(y) dy. \quad (3)$$

Применимость уравнений (1)–(3) может ограничиваться следующим обстоятельством. При выводе (1) было предположено, что аппаратная функция неизменна в различных длинах волн. Легко видеть, что условие неизменности должно выполняться по существу лишь в сравнительно небольшой окрестности точки x' , где $a(x' - x)$ существенно отлична от нуля.

В подавляющем большинстве случаев это условие выполнено, хотя в далеко отстоящих друг от друга областях спектра аппаратная функция будет существенно изменяться. Например, если аппаратная функция почти полностью определяется дифракцией на апертурной диафрагме, то ее ширина пропорциональна длине волны и при переходе, например, от 5000 Å к 10 000 Å удваивается. Однако аппаратная функция практически отлична от нуля лишь в области, размеры которой порядка $2\lambda/R$, где R — рэлеевская разрешающая сила, и совершенно ясно, что на протяжении такой области можно пренебречь изменением аппаратной функции. Впрочем, иногда эти условия не соблюдаются, и необходимо совместно учитывать факторы первой и второй групп (см., например³). В дальнейшем такие случаи не рассматриваются.

Уместно сделать некоторые замечания терминологического характера. Для функции $a(x)$ в литературе применяются несколько названий: инструментальный контур, функция аппарата, функция искажения и др. В английской и американской литературе по инфракрасной спектроскопии используется термин «функция щели» (slit function). Везде в дальнейшем мы будем применять термин «аппаратная функция» как для всего прибора в целом, так и при описании отдельных искажающих факторов: аппаратная функция щели, аппаратная функция дифракции, аппаратная функция фотослоя и т. п., причем под аппаратной функцией какого-либо фактора понимается наблюдаемое распределение освещенности (потока) при монохроматическом излучении и исчезающе малом влиянии остальных искажающих факторов.

До сих пор мы говорили об истинном и наблюдаемом распределении энергии по длинам волн, отождествляя, следовательно, аргументы x , x' , y с длиной волны. Однако под x , y и т. д. можно понимать и частоты, либо координаты в плоскости спектра, либо координаты на записи спектра, полученной микрофотометрированием или сканированием спектра некоторым регистрирующим устройством.

Связано это, очевидно, с тем, что мы ограничиваемся учетом только искажающих факторов второй группы, рассматривая сравнительно узкие спектральные интервалы, где переходные коэффициенты (типа линейной дисперсии) от длин волн к координатам или частотам можно считать постоянными.

Отметим, наконец, что для соотношений типа (1) в математической литературе установилось вполне определенное название. Именно говорят,

что функция $f(x)$, выражаемая формулой (1), есть свертка функций $a(x)$ и $\varphi(x)$. В физической литературе для различных частных случаев иногда используют особые названия. Например, при рассмотрении искажающего действия только регистрирующего устройства уравнение (1) в работе⁴ называют «общим временным уравнением спектрометра». Для свертки двух функций существует ряд математических теорем, в частности свертка обладает свойствами коммутативности, ассоциативности и дистрибутивности⁵, т. е.:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} a(x-y) \varphi(y) dy &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x-y) a(y) dy; \\ \int_{-\infty}^{\infty} g(x-y) dy \int_{-\infty}^{\infty} a(y-z) \varphi(z) dz &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x-y) dy \int_{-\infty}^{\infty} a(y-z) g(z) dz; \quad (4) \\ \int_{-\infty}^{\infty} a(x-y) [g(y) + \varphi(y)] dy &= \int_{-\infty}^{\infty} a(x-y) g(y) dy + \int_{-\infty}^{\infty} a(x-y) \varphi(y) dy. \end{aligned}$$

Важное свойство свертки состоит в том, что интеграл от нее равен произведению интегралов от функций $a(x)$ и $\varphi(x)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a(x-y) \varphi(y) dy dx = \int_{-\infty}^{\infty} a(z) dz \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(y) dy. \quad (5)$$

Некоторые другие свойства свертки будут рассмотрены ниже.

Следует иметь в виду, что для правомерного использования понятия истинного распределения энергии по спектру необходима вполне определенная нормировка аппаратной функции $a(x)$. Связано это с двойной ролью щели (или щелей) в спектральном приборе. Конечная ширина щели приводит к искажению распределения по спектру, и, следовательно, в идеальном приборе щель должна быть бесконечно узкой. С другой стороны, при бесконечно узкой щели в прибор входит бесконечно малый поток, и мы не имеем возможности оперировать с реальными величинами. Это затруднение можно обойти, если искусственно представлять, что по мере уменьшения ширины щели увеличивается яркость спектра, так что полная энергия, входящая в прибор, остается неизменной. Математически это означает, что аппаратная функция должна быть нормирована по площади, например, следующим образом*):

$$\int_{-\infty}^{\infty} a(x) dx = 1. \quad (6)$$

При такой нормировке истинному распределению приписывается полная энергия, равная полной энергии наблюдаемого распределения. Действительно, интегрируя (1) по x' и учитывая (5) и (6), получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x') dx' = \int_{-\infty}^{\infty} a(z) dz \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(y) dy. \quad (7)$$

Таким образом, если принять (6), то наличие аппаратной функции приводит только к перераспределению энергии в спектре, т. е. к изменению формы линий, полос и т. п. Это позволяет разделить вопрос

*) Для периодических аппаратных функций интерференционных спектрометров интеграл распространяется на один период.

об искажении формы распределения от вопросов, связанных с абсолютной величиной освещенностей, светосилой прибора и т. п. Для этой цели достаточно нормировать функции $f(x)$ и $\varphi(x)$ аналогично (6):

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) dx = 1. \quad (8)$$

Подчеркнем, что соотношение (7) есть непосредственное следствие определения аппаратной функции, не зависящее ни от вида $\varphi(x)$, ни от природы $a(x)$. Поэтому экспериментальное подтверждение (7), полученное в опытах⁶, показывает лишь, что область интегрирования в (7), на опыте всегда конечная, была взята достаточно большой.

Нормировка (6), (8) дает возможность использовать аппарат теории δ -функции*) для описания предельных случаев — монохроматического излучения и идеального спектрального прибора. Если $a(x) = \delta(x)$, то:

$$f(x') = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x' - x) \varphi(x) dx = \varphi(x'),$$

т. е. прибор, аппаратная функция которого есть δ -функция, является идеальным неискажающим прибором. В другом предельном случае монохроматического излучения имеем

$$\varphi(x) = \delta(x); \quad f(x') = \int_{-\infty}^{\infty} a(x' - x) \delta(x) dx = a(x'),$$

в соответствии с определением аппаратной функции.

3. Соотношение типа (1) связывает истинные и наблюдаемые с помощью реальных приборов величины не только в случае спектроскопических измерений, но и во многих других областях физических измерений. Искажение сигнала, подаваемого на вход электрической линейной системы, описывается уравнением (1) (см., например,⁸), причем аналогом аппаратной функции является ответ системы на мгновенный импульс. Теория флуорескопа, равно как и других приборов с временной разверткой быстропеременных процессов, также может быть сведена к уравнению (1). Методы Майкельсона определения структуры спектральных линий и структуры астрономических объектов⁹ количественно описываются по существу формулой (1). Методы рентгенографического определения размеров частиц также опираются на соотношение типа (1) (см., например,¹⁰). Уравнение (1) возникает в ряде задач астрофизики¹¹, теории уширения спектральных линий^{11, 12} и в других областях. Искажения, вносимые реальными оптическими приборами и радиотелескопами,

*) δ -функция формально определяется следующим образом (см. например,⁷):

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & x = 0; \\ 0, & x \neq 0; \end{cases} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1.$$

В дальнейшем нам понадобятся следующие свойства δ -функции:

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(x) \delta(x) dx = g(0); \quad \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ix\omega} d\omega.$$

описываются двумерным аналогом соотношения (1)

$$f(x', y') = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a(x' - y, y' - y) \varphi(x, y) dx dy,$$

где $a(x, y)$ физически означает распределение измеряемой величины (освещенности, потока, яркостной температуры) при точечном источнике излучения¹³.

Во всех этих и многих других случаях речь идет о линейном интегральном соотношении между истинным распределением некоторой физической величины $\varphi(x)$ по тому или иному аргументу x и экспериментально измеренным распределением $f(x)$, причем ядром уравнения является характеристная для данного прибора или явления функция $a(x)$. Несмотря на физическую разнородность этих величин и огромное многообразие конкретных видов функций $a(x)$, постановки задач, возникающих в связи с уравнением (1), и методы математического решения этих задач имеют много общего и порою почти тождественны в совершенно различных областях физических измерений. Поэтому многие результаты, полученные в других областях, могут оказаться полезными, а иногда и непосредственно использоваться для спектральных приборов. Это относится прежде всего к внедрению в теорию реальных приборов так называемого спектрального подхода или метода фурье-анализа, получившего, как известно, всеобщее признание в теории линейных электрических систем и во многих других случаях.

Изложенный выше метод количественного описания искажающего действия реального спектрального прибора не является единственно возможным. Действительно, наблюдаемое распределение можно построить следующим, более общим способом. Произвольное истинное распределение $\varphi(x)$ разлагается на сумму некоторых стандартных распределений; рассматривается искажение стандартных распределений реальным прибором, и затем уже искаженные стандартные распределения складываются, образуя наблюдаемое распределение $f(x)$. В том математическом аппарате, который излагался выше, в качестве стандартного распределения было принято монохроматическое излучение, и соответственно этому реальный прибор описывался аппаратной функцией. Такой вид стандартного распределения имеет ясное физическое содержание и исторически первым был использован для анализа свойств реальных оптических и спектральных приборов. Однако это отнюдь не означает, что нельзя эффективно использовать другие стандартные распределения. Например, в теории линейных электрических систем используются также ступенчатое и гармоническое распределения.

Возможность и целесообразность спектрального подхода для реальных оптических приборов, т. е. использования в этом случае гармонического стандартного распределения, была впервые ясно показана еще Аббе в его теории образования изображения несамосветящихся объектов (см., например, ¹⁴). В дальнейшем Л. И. Мандельштам ^{15, 16} и Рэлей ¹⁷ развили концепцию Аббе на случай частично когерентных и самосветящихся объектов. Другое раннее применение спектрального подхода в оптических измерениях связано с исследованием сверхтонкой структуры спектральных линий, выполненным Майкельсоном на двухлучевом интерферометре. Им же, по-видимому, впервые был построен гармонический анализатор для анализа спектроскопических данных ⁹. Однако широкое признание в интересующей нас области спектральный подход получил лишь за последние 15—20 лет в связи с развитием теории информации и распростране-

нием ее результатов и математических методов на оптические приборы (см., например, ¹⁸⁻²²).

Плодотворность спектрального подхода обусловлена следующим замечательным свойством гармонического распределения интенсивности, установленным Л. И. Мандельштамом¹⁶. Если истинное распределение имеет вид

$$\varphi(x) = \cos(\omega x + \beta), \quad (9)$$

то наблюдаемое распределение так же будет гармоническим с той же частотой ω , но, вообще говоря, с другой амплитудой и фазой¹⁶. Действительно, подстановкой (9) в (1) легко убедиться, что

$$|f(x) = A \cos(\omega x + \beta'), \quad (10)$$

причем величины A и β' зависят от ω и от вида аппаратной функции. Ниже будет показано, что в общем случае произвольного реального прибора справедливо и обратное утверждение, т. е. что только гармоническое распределение сохраняет свою форму при искажающем воздействии реального прибора.

В соответствии с общим способом построения наблюдаемого распределения, представим истинное распределение в виде суперпозиции гармонических распределений, т. е. в виде интеграла Фурье²³:

$$\varphi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\omega) e^{i\omega x} d\omega. \quad (11)$$

Вводя это в (1) и меняя порядок интегрирования, получаем:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(\omega) \Phi(\omega) e^{i\omega x} d\omega, \quad (12)$$

где

$$A(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} a(x) e^{-i\omega x} dx \quad (13)$$

есть Фурье-трансформация аппаратной функции. Из (12) легко видеть, что Фурье-трансформация наблюдаемого распределения

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx, \quad (14)$$

т. е. амплитуда гармонической составляющей наблюдаемого распределения, оказывается равной

$$F(\omega) = A(\omega) \Phi(\omega). \quad (15)$$

Смысл преобразования уравнения (1) к уравнениям (12) и (15) заключается, очевидно, в следующем. Каждая гармоническая составляющая истинного распределения с частотой ω и амплитудой $\Phi(\omega)$ переводится реальным прибором в гармоническую же составляющую наблюдаемого распределения с той же частотой, но с другой, вообще говоря, амплитудой, $F(\omega)$, даваемой формулой (15). Сумма всех искаженных прибором гармоник дает наблюдаемое распределение (12).

В случае электрических систем имеет место соотношение, аналогичное (15), между амплитудой гармонического сигнала на входе системы, $\Phi(\omega)$, и на ее выходе $F(\omega)$. Комплексная функция $A(\omega)$ называется

частотнофазовой характеристикой системы. В оптических приборах вообще (и спектральных — в частности) эта функция не имеет обычно простого физического смысла, за тем исключением, когда аппаратная функция определяется только дифракцией, аберрациями и щелями. В этом случае, как можно показать, $A(\omega)$ выражается через амплитуды электромагнитного поля в плоскости апертурной диафрагмы системы, т. е. через первичное (по Аббе) изображение, и ω пропорциональна координате в этой плоскости²⁴. В остальных же случаях такой физической интерпретации найти не удастся.

С математической точки зрения формулы (1) и (15) выражают общую теорему о свертке и ее Фурье-трансформации. Именно, Фурье-трансформация свертки двух функций есть произведение Фурье-трансформаций этих функций. На основании формулы обращения интеграла Фурье можно утверждать также, что Фурье-трансформация произведения двух функций есть свертка Фурье-трансформаций этих функций (см., например,²³).

Кроме рассмотренных выше методов описания реальных приборов существует и быстро прогрессирует еще один метод, основанный на представлениях и математическом аппарате теории информации (см., например, ^{19-22, 25-27}). В настоящем обзоре, однако, этот подход рассматриваться не будет.

4. Как уже говорилось, аппаратная функция реальных спектральных приборов определяется многочисленными и весьма разнообразными факторами. В зависимости от того, какой из факторов играет основную роль, аппаратная функция будет иметь тот или иной вид, ту или иную ширину. В наиболее совершенных приборах аппаратная функция почти целиком определяется дифракцией на апертурной диафрагме^{28, 29}. Если, как это обычно бывает в спектральных приборах, апертурная диафрагма прямоугольна, то, как известно³⁰:

$$a(x) = \frac{1}{s_0} \left[\frac{\sin \pi x/s_0}{\pi x/s_0} \right]^2, \quad (16)$$

где $s_0 = \lambda f/D$, λ — длина волны, D — ширина поперечного сечения пучка на выходе диспергирующей системы и f — фокусное расстояние камерного объектива. Фурье-трансформация такой аппаратной функции имеет вид

$$A(\omega) = \begin{cases} 1 - \frac{s_0}{2\pi} |\omega|, & |\omega| \leq \frac{2\pi}{s_0}; \\ 0 & |\omega| \geq \frac{2\pi}{s_0}. \end{cases} \quad (16a)$$

В ряде приборов осуществляется другой предельный случай, именно, в них аппаратная функция определяется только ширинами щелей, а дифракцией, аберрациями и т. д. оказывается возможным пренебречь. Аппаратная функция такого спектрографа имеет вид прямоугольника

$$a(x) = \begin{cases} \frac{1}{s}, & |x| < \frac{s}{2}; \\ 0 & |x| > \frac{s}{2}, \end{cases} \quad (17)$$

а ее Фурье-трансформация есть

$$A(\omega) = \frac{\sin s\omega/2}{s\omega/2}. \quad (17a)$$

Аппаратная функция монохроматора, также при учете только щелевых искажений, есть свертка двух прямоугольных функций ³¹:

$$a(x) = \begin{cases} \frac{1}{s_1}, & s_1 > s_2, |x| \leq \frac{s_1 - s_2}{2}; \\ \frac{1}{s_1 s_2} \left[\frac{s_1 + s_2}{2} - |x| \right], & \frac{s_1 - s_2}{2} \leq |x| \leq \frac{s_1 + s_2}{2}; \\ 0 & \frac{s_1 + s_2}{2} \leq |x|, \end{cases} \quad (18)$$

где s_2 — ширина выходной, а s_1 — ширина геометрического изображения входной щели. В частном, но практически наиболее важном случае $s_1 = s_2 = s$ (18) принимает вид

$$a(x) = \begin{cases} \frac{1}{s} \left[1 - \frac{|x|}{s} \right], & |x| \leq s; \\ 0, & |x| \geq s, \end{cases} \quad (19)$$

т. е. $a(x)$ имеет треугольную форму. Фурье-трансформации функций, определяемых формулами (18) и (19), можно написать, не проводя непосредственных вычислений, но основываясь на теореме о Фурье-трансформации свертки двух функций, упомянутой выше. Поскольку (18) есть свертка двух прямоугольных аппаратных функций, то ее Фурье-трансформация есть произведение двух функций вида (17а):

$$A(\omega) = \frac{\sin s_1 \omega / 2}{s_1 \omega / 2} \cdot \frac{\sin s_2 \omega / 2}{s_2 \omega / 2}. \quad (18a)$$

Для треугольной аппаратной функции (19) имеем

$$A(\omega) = \left[\frac{\sin s \omega / 2}{s \omega / 2} \right]^2. \quad (19a)$$

Выражения (16) — (19) редко соответствуют действительности с достаточной степенью точности, и, начиная с работы Шустера ³², делались многочисленные попытки совместного учета щелевых и дифракционных искажений. Если считать щель самосветящейся и полагать, следовательно, что световые волны, образующие дифракционное изображение бесконечно узкого элемента щели, не интерферируют с волнами, приходящими в изображение от соседних элементов, то аппаратная функция есть свертка дифракционной и щелевой аппаратных функций. Для спектрографа, например, имеем

$$\left. \begin{aligned} a(x) &= \frac{1}{s s_0} \int_{-s/2}^{s/2} \left\{ \frac{\sin [\pi (x-y)/s_0]}{\pi (x-y)/s_0} \right\}^2 dy; \\ A(\omega) &= \begin{cases} \frac{\sin s \omega / 2}{s \omega / 2} \left[1 - \frac{s_0}{2\pi} |\omega| \right], & |\omega| \leq \frac{2\pi}{s_0}, \\ 0 & |\omega| \geq \frac{2\pi}{s_0}. \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Сложность этих формул затрудняет их практическое использование и заставляет искать приближенное представление аппаратной функции с помощью элементарных функций. Для случая $s \gg s_0$ такие приближенные выражения найдены как для спектрографа ^{33, 34}, так и для монохроматора ³⁵. Учет частичной когерентности освещения щели в практически интересных случаях приводит лишь к сравнительно небольшой поправке в ширине аппаратной функции и почти не меняет ее форму ^{36, 37, 24}.

Положение значительно усложняется при наличии заметных аберраций. Немногочисленные расчеты, существующие в настоящее время ^{24, 38, 39},

не позволяют сделать сколько-нибудь универсальных выводов, справедливых для широкого класса приборов. Поэтому здесь обычно используется экспериментально измеренная аппаратная функция, задаваемая графически или таблично, либо аппроксимируемая подходящими простыми аналитическими выражениями. Во многих случаях, когда дифракционные и абберационные искажения не очень велики, для монохроматоров оказывается удобной аппроксимация гауссовой кривой^{40, 24}:

$$a(x) = \frac{2\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi}\alpha} \exp \left\{ -\frac{4 \ln 2}{\alpha^2} x^2 \right\}; \quad A(\omega) = \exp \left\{ -\frac{\omega^2 \alpha^2}{16 \ln 2} \right\}. \quad (21)$$

Для спектрографов малой, средней, а иногда и большой дисперсии используют следующие приближенные выражения^{41, 42}:

$$a(x) = \frac{\alpha/2\pi}{x^2 + (\alpha/2)^2}; \quad A(\omega) = \exp \left\{ -\frac{\alpha}{2} |\omega| \right\}. \quad (22)$$

Возможность такой аппроксимации связана с тем, что в указанных спектрографах аппаратная функция в значительной степени определяется рассеянием света в фотослое. Аппаратная функция фотослоя согласно⁴³⁻⁴⁵ хорошо описывается экспоненциальной кривой

$$a(x) = \frac{\ln 2}{\alpha} \exp \left\{ -\frac{2 \ln 2}{\alpha} |x| \right\}, \quad A(\omega) = \frac{1}{1 + \left[\frac{\alpha \omega}{2 \ln 2} \right]^2}, \quad (23)$$

которая в «крыльях» сравнительно близка к кривой дисперсионной формы с той же шириной α .

В последнее время в ряде работ⁴⁶⁻⁴⁹ использовалась более сложная аппроксимация аппаратной функции с помощью функции Фойхта, являющейся сверткой дисперсионной и гауссовой функций

$$\left. \begin{aligned} a(x) &= \frac{\sqrt{\ln 2}}{\pi^{3/2}} \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp \left\{ -\frac{4 \ln 2}{\alpha_2^2} y^2 \right\}}{(x-y)^2 + (\alpha_1/2)^2} dy; \\ A(\omega) &= \exp \left\{ -\frac{\alpha_1}{2} |\omega| - \frac{\alpha_2^2 \omega^2}{16 \ln 2} \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

На рис. 2 приведены графики рассмотренных функций, а на рис. 3 — их Фурье-трансформации. Для удобства сравнения все аппаратные функции приведены к одной ширине и единичному значению в максимуме.

При исследовании спектров рэлеевского и комбинационного рассеяния дополнительные искажения связаны с немонахроматичностью возбуждающего излучения. Наблюдаемый контур линии представляется в виде свертки истинного контура линии возбуждения и наблюдаемого контура линии рассеяния, получающегося при монахроматическом возбуждении^{50, 33}. В ряде случаев суммарная аппаратная функция, учитывающая указанное искажение, практически совпадает с наблюдаемым контуром линии возбуждения^{51, 41}.

Аппаратные функции интерференционных спектрографов (эталон Фабри — Перо, пластинка Луммера — Герке, эшелон Майкельсона) общеизвестны (см., например,^{2, 52, 53}), и мы не будем приводить здесь их выражения. Отметим лишь, что ввиду относительно малого числа интерферирующих пучков в этих приборах приходится иногда принимать во внимание периодический характер их аппаратных функций, т. е. учитывать переналожение интерференционных полос близких порядков.

Аппаратная функция регистрирующего устройства, обусловленная его инерционностью, и связанные с этим искажения спектра рассма-

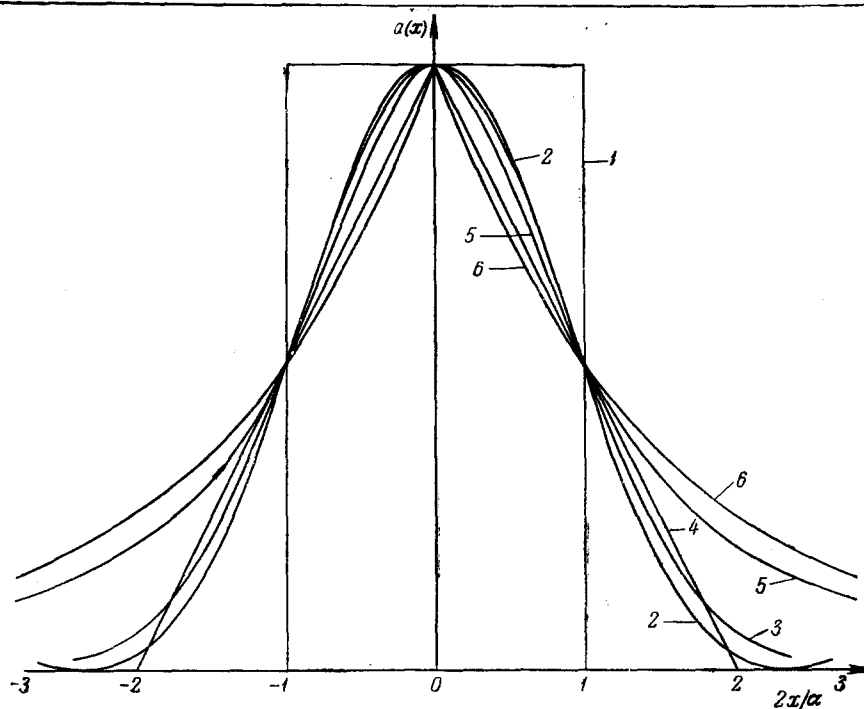


Рис. 2. Аппаратные функции различных форм ширины α : 1—щелеобразная (17); 2—дифракционная (16); 3—гауссовая (21); 4—треугольная (19); 5—дисперсионная (22); 6—экспоненциальная (23).

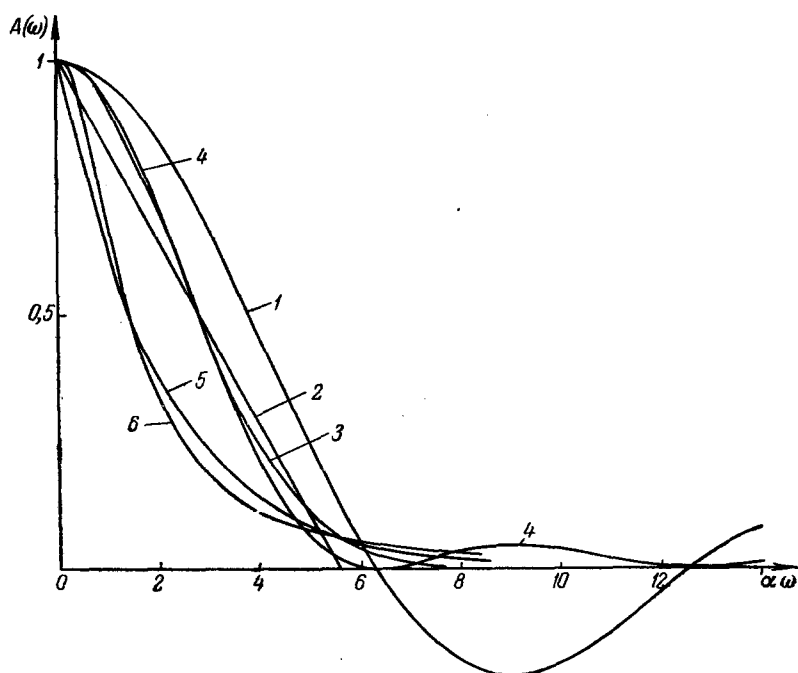


Рис. 3. Фурье-трансформации аппаратных функций. Нумерация кривых соответствует рис. 2.

тривались в ^{6,54-58}. Мы не будем подробно останавливаться на этих работах, поскольку основные результаты, полученные в них, детально изложены в обзоре ⁴. Кроме того, как будет видно из дальнейшего (см. § 3), условия записи должны выбираться таким образом, чтобы эти искажения были малы по сравнению с искажениями, вызванными аппаратной функцией оптической части прибора, и случайными ошибками измерений. Поэтому мы приведем лишь некоторые результаты, полученные в работе ⁵⁸, после выхода в свет ⁴.

Регистрирующее устройство, эквивалентное RC -цепочке, описывается, как известно, следующей аппаратной функцией и ее Фурье-трансформацией:

$$\left. \begin{aligned} a(x) &= \begin{cases} 0, & x < 0; \\ \frac{1}{v\tau} e^{-x/v\tau}, & x > 0; \end{cases} \\ A(\omega) &= \frac{1}{1 + i v \tau \omega} = \frac{e^{-i \arctg v \tau \omega}}{\sqrt{1 + (v \tau \omega)^2}}, \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

где τ — постоянная времени, v — скорость сканирования. При достаточно медленном сканировании такая аппаратная функция приводит к смещению спектра любой формы на величину, равную

$$\Delta x = v\tau. \quad (26)$$

Условие достаточной медленности сканирования для случая, например, одиночной линии означает, что $v\tau \ll \delta$, где δ — наблюдаемая ширина линии. Если учесть указанное смещение спектра, то при медленном сканировании относительная ошибка записи интенсивности в произвольной точке контура дается формулой

$$p = k(v\tau)^2, \quad (26a)$$

где коэффициент k определяется второй производной наблюдаемого распределения в интересующей нас точке. Например, для максимума одиночной линии гауссовой формы $k = \frac{4 \ln 2}{\sigma^2}$. На основании формул (26) и (26a) можно будет выбрать надлежащие условия сканирования спектра (см. § 3).

5. Обратимся теперь к рассмотрению искажающих факторов третьей группы, т. е. факторов, приводящих к появлению случайных ошибок измерений. Формальное обобщение основного соотношения (1) теории реальных приборов, учитывающее наличие случайных ошибок измерений, состоит, очевидно, в том, что к правой части уравнения (1) добавляется некоторая случайная функция, которую мы будем обозначать $\xi(x)$ ²⁴:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} a(x-x') \varphi(x') dx' + \xi(x). \quad (27)$$

Аналогично тому, как для описания суммарного действия искажающих факторов второй группы необходимо знание аппаратной функции $a(x)$, для описания случайных ошибок необходимо задать статистические, средние характеристики функции $\xi(x)$, которые, естественно, зависят от происхождения $\xi(x)$, т. е. от тех причин, которые вызывают случайные ошибки.

Мы не ставим перед собою цель привести хорошо известные сведения из теории ошибок и дать сколько-нибудь исчерпывающий анализ ошибок при спектроскопических измерениях. Частично это связано с тем, что в литературе эти вопросы освещены с достаточной полнотой (см.,

например, ^{1, 8, 59-66}). Основной же причиной является то обстоятельство, что в настоящее время анализ уравнения (27), т. е. совместный учет и систематических и случайных ошибок, проведен в литературе лишь для одного типа функций $\xi(x)$, именно для случая, когда средние характеристики $\xi(x)$ не зависят от $f(x)$. Такое положение реализуется, в частности, в современных инфракрасных спектрофотометрах, где случайные ошибки почти целиком определяются флуктуационными процессами в приемнике радиации (джонсоновские шумы болометра, фотосопротивления и т. п.). При фотографической же регистрации случайные ошибки, по-видимому, пропорциональны освещенности на фотопластинке ¹, и излагаемая ниже теория не применима к этому случаю.

При сформулированных выше ограничениях среднее значение ошибок равно нулю, так что нормировки (6) и (8) можно оставить без изменения. Случайная функция $\xi(x)$ с достаточной для наших целей полнотой может быть задана функцией корреляции ⁸:

$$\psi(|x - x'|) = \overline{\xi(x) \xi(x')}, \quad (28)$$

характеризующей взаимозависимость случайных ошибок в различных точках спектрограммы. При $x = x'$ функция корреляции равна, очевидно, среднеквадратичной ошибке

$$\psi(0) = \overline{\xi^2} = \overline{\Delta f^2}. \quad (29)$$

Если электрическая инерционность приемника радиации много меньше инерционности регистрирующего устройства, что обычно имеет место, то, как можно показать ⁸, функция корреляции $\psi(x)$ равна

$$\psi(z) = c \int_{-\infty}^{\infty} a_2(x) a_2(z+x) dx, \quad (30)$$

т. е. выражается через аппаратные функции регистрирующего устройства. Коэффициент c пропорционален среднеквадратичной ошибке записи и может быть определен из условия (29). Напомним, что функция $f(x)$ подчинена условию нормировки (8), и, следовательно, для перехода от $\xi(x)$ к флуктуациям на собственно записи необходимо домножить $\xi(x)$ на интеграл от непосредственно записанного наблюдаемого распределения, а среднеквадратичные комбинации типа (28) — на квадрат этого интеграла.

Из формулы (30) можно видеть, что функция корреляции существенно отлична от нуля в интервале порядка постоянной времени регистрирующего устройства. Это означает, что случайные ошибки существенно зависимы лишь в точках, отстоящих друг от друга на расстояние порядка постоянной времени, что физически очевидно. В точках, удаленных на большие расстояния, ошибки практически статистически независимы.

На спектральном языке описание случайных ошибок дается Фурье-трансформацией функции корреляции

$$\Psi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(z) e^{-i\omega z} dz, \quad (31)$$

называемой обычно средней спектральной плотностью интенсивности флуктуаций ⁸. Из формулы обращения интеграла Фурье имеем

$$\psi(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\omega) e^{i\omega z} d\omega. \quad (32)$$

Полагая в этой формуле $z = 0$ и учитывая (29), получаем:

$$\psi(0) = \overline{\xi^2} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\omega) d\omega. \quad (33)$$

Эта формула допускает следующую интерпретацию. В записи распределения энергии по спектру кроме «полезного сигнала» (первый член в (27)) со спектром $A(\omega)\Phi(\omega)$ присутствуют флуктуации, случайные ошибки $\xi(x)$, которые можно представить в виде совокупности случайных гармоник, средняя мощность которых, отнесенная на единичный интервал частот, есть $\Psi(\omega)$. Следовательно, $\Psi(\omega)d\omega$ можно рассматривать как среднюю мощность флуктуаций, приходящуюся на бесконечно узкую полосу частот $d\omega$. Среднеквадратичная же ошибка записи есть сумма всех этих гармоник флуктуаций.

Приведем теперь выражение $\Psi(\omega)$ через Фурье-трансформацию $A_2(\omega)$ аппаратной функции регистрирующего устройства, т. е. через его частотную характеристику. Выполняя преобразование Фурье над левой и правой частями уравнения (30), можно получить, что

$$\Psi(\omega) = c |A_2(\omega)|^2. \quad (34)$$

Эта формула, как и (30), справедлива лишь в тех случаях, когда инерционность регистрирующего устройства намного превышает электрическую инерционность приемника радиации. Такое положение обычно имеет место при спектроскопических измерениях.

В противном случае правую часть в (34) необходимо домножить на спектральную плотность мощности флуктуации в приемнике радиации. Из (34) легко установить физический смысл коэффициента c . В силу нормировки (8), имеем $A_2(0) = 1$. Следовательно, c есть не что иное, как спектральная плотность интенсивности флуктуаций при $\omega = 0$

$$c = \Psi(0). \quad (35)$$

§ 2. РЕДУКЦИЯ К ИДЕАЛЬНОМУ ПРИБОРУ

1. Анализ общего уравнения (27) целесообразно предпослать рассмотрение предельного случая абсолютно точных измерений, описываемых уравнением (1). Настоящий параграф посвящен именно этому случаю, а в § 3 будут изложены те следствия, которые вытекают из наличия случайных ошибок.

В зависимости от обстоятельств интересуются различными вопросами, связанными с выражением (1), и в соответствии с физической постановкой вопроса будут иметь место различные математические задачи. Исторически первой была следующая постановка вопроса: если истинное распределение состоит из двух монохроматических линий, отстоящих друг от друга на расстоянии d , т. е.

$$\varphi(x) = \frac{1}{2} \left[\delta\left(x - x_0 - \frac{d}{2}\right) + \delta\left(x - x_0 + \frac{d}{2}\right) \right],$$

то при какой величине d в точке $x = x_0$ будет иметь место минимум интенсивности с определенной величиной контраста? Эта задача непосредственно связана с проблемой разрешения или проблемой определения минимального разрешаемого интервала длин волн, которая будет рассмотрена в § 4, и является частным случаем более общей задачи вычисления наблюдаемого распределения $f(x)$ по заданным истинному распределению $\varphi(x)$ и аппаратной функции $a(x)$. Несмотря на принципиальную

простоту математического решения задачи, сводящегося к вычислению интеграла в (1), такие расчеты редко приводят к простым выражениям $f(x)$ через элементарные функции. В большинстве же случаев приходится довольствоваться графическими или численными результатами. Тем не менее, такой материал оказывается полезным в практической

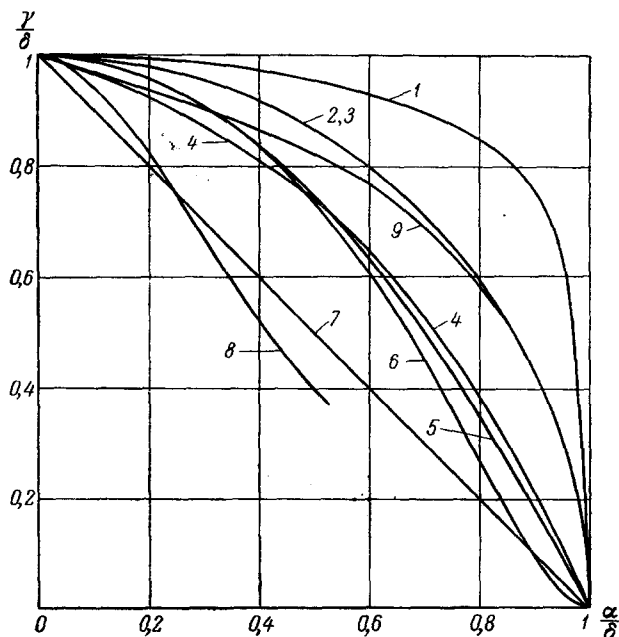


Рис. 4. Связь между шириной δ свертки $f(x)$ функций $\varphi(x)$ и $a(x)$ с ширинами γ и α для различных форм $\varphi(x)$ и $a(x)$: 1—прямоугольная (a) и дифракционная (γ); 2—щелеобразная (a) и дисперсионная (γ); 3—гауссова (a) и гауссова (γ); 4—дифракционная (a) и дисперсионная (γ); 5—гауссова (a) и дисперсионная (γ); 6—треугольная (a) и дисперсионная (γ); 7—дисперсионная (a) и дисперсионная (γ); 8—экспоненциальная (a) и дисперсионная (γ); 9—гауссова (a) и треугольная (γ).

работе. Поэтому на рис. 4 приведены графики, задающие связь между ширинами истинного и наблюдаемого распределений для различных видов $\varphi(x)$ и $a(x)$. На рис. 5 даны зависимости интенсивности в максимуме линий. Эти параметры наиболее часто используются при всевозможных оценках.

Принципиально важное значение имеет задача установления таких распределений $\varphi(x)$, которые передаются реальным прибором без искажений или в виде подобного распределения, т. е. распределений, для которых имеет место следующее соотношение:

$$f(x) = \lambda \varphi(x). \quad (36)$$

Решение этой задачи, рассмотренной Л. И. Мандельштамом¹⁶, состоит в том, что в общем случае условию (36) удовлетворяет только синусоидальное распределение. Действительно, истинное распределение не будет искажено реальным прибором лишь в том случае, когда все его гармонические компоненты будут уменьшены по амплитуде в одно и то же

число раз, т. е. если

$$A(\omega) = \text{const.} \quad (37)$$

Анализ, проведенный в § 1, показал, что Фурье-трансформации аппаратных функций реальных спектральных приборов не удовлетворяют этому условию, и речь, следовательно, может идти лишь о достаточно малом отличии $f(x)$ от $\varphi(x)$. Критерий малости, однако, можно установить только при учете случайных ошибок измерений*).

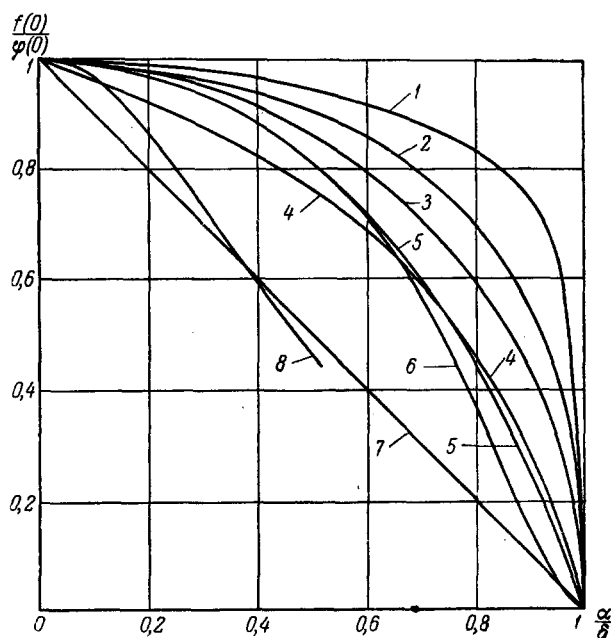


Рис. 5. Максимальное значение свертки $f(0)$ функций $\varphi(x)$ и $a(x)$ в зависимости от отношения ширины α (β) функций $a(x)$ и $f(x)$. Нумерация кривых соответствует рис. 4.

Практически наиболее важной задачей теории является проблема редукции к идеальному прибору. Под редукцией к идеальному прибору мы будем понимать отыскание истинного распределения по заданным наблюдаемому распределению $f(x)$ и аппаратной функции $a(x)$ **). Именно проблеме редукции будут, в основном, посвящены §§ 2 и 3.

2. При абсолютно точных измерениях редукция сводится, как видно из (1), к решению линейного интегрального уравнения первого рода с разностным ядром $a(x-y)$ и наблюдаемым распределением $f(x)$ в качестве левой части уравнения. В литературе описано много разнообразных методов решения этого уравнения, которые будут изложены ниже. При этом для выяснения связи между различными методами, их преимуществ и недостатков целесообразно вести рассмотрение с точки зрения спектрального подхода.

*) При некоторых специальных видах $\varphi(x)$ и $a(x)$ условие (36) выполняется (см. ¹⁸ и ²³ стр. 389 и 441). Однако такие аппаратные функции невозможны в спектральных приборах.

**) Иногда используются другие термины, например, «исправление экспериментальных результатов на аппаратные искажения», «исключение аппаратной функции» и др.

Общее решение проблемы редукции с точки зрения спектрального подхода состоит в следующем: редуцируется каждая гармоническая составляющая наблюдаемого распределения, т. е. $F(\omega)$ множится на $1/A(\omega)$, и суммируются все редуцированные гармоники. Формально дело сводится к решению уравнения (15) относительно $\Phi(\omega)$ и подстановки получающегося выражения в (11)²³:

$$\varphi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(\omega)}{A(\omega)} e^{ix\omega} d\omega. \quad (38)$$

Формула (38) дает общее решение уравнения (16) и, тем самым, — общее решение проблемы редукции при абсолютно точных измерениях. Однако в настоящее время выражением (38) редко пользуются для непосредственной обработки экспериментальных данных. Объясняется это тем, что спектральный прибор измеряет не $F(\omega)$, а распределение энергии $f(x)$ *, и непосредственное использование (38) требует довольно трудоемкого предварительного пересчета от $f(x)$ к $F(\omega)$. Впрочем, с развитием машинной вычислительной техники этот процесс не будет вызывать затруднений, и, возможно, редукция будет проводиться сразу по (38). В настоящее же время в большинстве случаев стараются для $F(\omega)$ и $A(\omega)$ подобрать простые аналитические выражения, для которых интеграл в (38) вычисляется в явном виде, либо так преобразовать (38), чтобы непосредственные операции, приводящие к $\varphi(x)$, можно было бы производить над $f(x)$. В соответствии с этим различные методы редукции, имеющиеся в литературе, допускают следующую классификацию: 1) аналитические методы, исходящие из задания или аппроксимации $F(\omega)$ и $A(\omega)$ простыми функциями, допускающими выполнение интегрирования в (38) в явном виде; 2) методы, сводящие вычисление (38) к последовательности некоторых операций над $f(x)$ (дифференцирование, интегрирование и т. п.) вне зависимости от вида $f(x)$; обычно эти методы графические и численные; 3) существуют, наконец, смешанные методы; таким методом является, например, вариант метода последовательных приближений, в котором нулевым приближением является решение, полученное аналитическим методом, а последующие приближения находятся графически или численно.

Рассмотрим прежде всего аналитические методы. Широкое распространение получили аппроксимации $F(\omega)$ и $A(\omega)$ выражениями вида

$$\exp \{ -\beta_1 |\omega| - \beta_2 \omega^2 \}. \quad (39)$$

Например, если

$$F(\omega) = \exp \{ -\delta |\omega| \}; \quad A(\omega) = \exp \{ -\alpha |\omega| \}, \quad (40)$$

что соответствует описанию наблюдаемого распределения и аппаратной функции кривыми дисперсионной формы

$$f(x) = \frac{\delta/\pi}{x^2 + \delta^2}; \quad a(x) = \frac{\alpha/\pi}{x^2 + \alpha^2}, \quad (41)$$

*) Исключение в этом отношении составляет определение структуры линий на двухлучевом интерферометре⁹, где $|F(\omega)|$ совпадает с «кривой видности», и обработка результатов заключается в гармоническом анализе «кривой видности». Следует отметить, что в работах^{67, 68} применены некоторые усовершенствования метода, которые позволяют избежать известной неопределенности, имевшей место в опытах Майкельсона⁶⁹.

то

$$\left. \begin{aligned} \Phi(\omega) &= \exp \{ -(\delta - \alpha) |\omega| \}; \\ \varphi(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\delta - \alpha) |\omega| + i x \omega} d\omega = \frac{(\delta - \alpha)\pi}{x^2 + (\delta - \alpha)^2}, \end{aligned} \right\} \quad (42)$$

т. е. истинное распределение также имеет дисперсионную форму, причем его ширина 2γ равна разности ширин наблюдаемого распределения и аппаратной функции $2\gamma = 2(\delta - \alpha)$. Аппроксимации (40) или (41) часто применяются при исследовании линий эмиссионных спектров атомов (см., например, ⁷⁰), линий рэлеевского и комбинационного рассеяния света ^{33, 41, 51, 71, 72}, в рентгенографии ^{10, 73, 74}, астрофизике ^{11, 75} и в других случаях. В этих же областях, а также в инфракрасной спектроскопии находит применение другой частный случай выражения (39) ^{4, 11, 12, 33, 40, 75, 76}:

$$F(\omega) = \exp \{ -\delta^2 \omega^2 / 4 \}; \quad A(\omega) = \exp \{ -\alpha^2 \omega^2 / 4 \}, \quad (42')$$

что соответствует аппроксимации наблюдаемого распределения а аппаратной функции гауссовыми кривыми

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \delta} \exp \{ -x^2 / \delta^2 \}; \quad d(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \alpha} \exp \{ -x^2 / \alpha^2 \}. \quad (43)$$

В этом случае истинное распределение имеет также гауссовую форму

$$\Phi(\omega) = \exp \{ -(\delta^2 - \alpha^2) \omega^2 / 4 \}; \quad \varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi(\delta^2 - \alpha^2)}} \exp \{ -x^2 / (\delta^2 - \alpha^2) \}, \quad (44)$$

а ширина его равна

$$2\gamma = 2 \sqrt{\delta^2 - \alpha^2}. \quad (45)$$

Использование полного выражения (39), т. е. аппроксимация

$$F(\omega) = \exp \{ -\delta_1 |\omega| - \delta_2^2 \omega^2 / 4 \}; \quad A(\omega) = \exp \{ -\alpha_1 |\omega| - \alpha_2^2 \omega^2 / 4 \}, \quad (46)$$

приводит к аналогичному виду для $\Phi(\omega)$ и представлению истинного распределения $\varphi(x)$ через функцию Фойхта

$$\left. \begin{aligned} \Phi(\omega) &= \exp \{ -(\delta_1 - \alpha_1) |\omega| - (\delta_2^2 - \alpha_2^2) \omega^2 / 4 \}; \\ \varphi(x) &= \frac{\delta_1 - \alpha_1}{\pi \sqrt{\pi(\delta_2^2 - \alpha_2^2)}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp \{ -y^2 / (\delta_2^2 - \alpha_2^2) \}}{(x - y)^2 + (\delta_1 - \alpha_1)^2} dy. \end{aligned} \right\} \quad (47)$$

Несмотря на довольно громоздкое выражение для $\varphi(x)$, обработка экспериментальных данных по этому способу сравнительно проста благодаря наличию прекрасных таблиц функций Фойхта в ⁷⁷. В ^{12, 47-49, 75} приведены детально разработанные методики определения по наблюдаемым величинам параметров $\alpha_1, \alpha_2, \delta_1, \delta_2$, необходимых для вычисления $\varphi(x)$ по (47).

Характерной особенностью приведенных выше и некоторых других методов (см. ^{51, 74, 78, 79}) является описание исходных кривых сравнительно простыми выражениями, зависящими от одного-двух параметров, причем при введении второго параметра расчеты, как правило, значительно усложняются. Надо полагать, что введение еще третьего параметра может быть уже нецелесообразным. Между тем, во многих случаях рассмотренные аппроксимации оказываются недостаточными. В связи с этим были развиты более гибкие методы, не связанные непосредственно с конкретным видом наблюдаемого распределения.

3. Рассмотрение приближенных универсальных методов редукции целесообразно начать с такого преобразования уравнения (38), чтобы выделить то, что вызвано неидеальностью прибора. Аппаратная функция идеального прибора есть δ -функция, а ее Фурье-трансформация равна единице:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) e^{-i\omega x} dx = 1. \quad (48)$$

Поэтому естественно под знаком интеграла в (38) к $A^{-1}(\omega)$ прибавить и вычесть 1; тогда имеем

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) [A^{-1}(\omega) - 1] e^{i\omega x} d\omega + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega x} d\omega = \\ &= f(x) + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [A^{-1}(\omega) - 1] F(\omega) e^{i\omega x} d\omega. \end{aligned} \quad (49)$$

Второй член в этой формуле часто является сравнительно небольшой поправкой, которая исчезает для идеального прибора, и большая часть приближенных методов сводится к тому или иному варианту расчета этого члена.

Следует подчеркнуть, что $A(\omega)$ есть характерная для данного прибора функция, в то время как распределение энергии по спектру и, следовательно, функции $F(\omega)$ могут быть весьма разнообразны. В связи с этим методы редукции естественно основывать лишь на предположениях о свойствах $A(\omega)$, но не $F(\omega)$. Поэтому большинство приближенных универсальных методов решения уравнения (1) получается с помощью разложений $A^{-1}(\omega) - 1$ в функциональные ряды.

Рассмотрим сначала разложение в степенной ряд

$$\overline{A^{-1}(\omega)} - 1 = \sum_n b_n \omega^n. \quad (50)$$

Подставим это выражение в (38) и изменим порядок интегрирования и суммирования

$$\varphi(x) = f(x) + \sum_n b_n \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^n F(\omega) e^{i\omega x} d\omega.$$

Получающиеся интегралы можно вычислить n -кратным дифференцированием $f(x)$:

$$\frac{d^n f}{dx^n} = \frac{d^n}{dx^n} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega x} d\omega \right\} = \frac{i^n}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^n F(\omega) e^{i\omega x} d\omega.$$

Следовательно,

$$\varphi(x) = f(x) + \sum_n \frac{b_n}{i^n} \frac{d^n f}{dx^n}. \quad (51)$$

Таким образом, разложению $A^{-1}(\omega) - 1$ в степенной ряд отвечает выражение $\varphi(x)$ через $f(x)$ и ее производные, причем коэффициенты определяются только аппаратной функцией. Решение в форме (51) было получено Эддингтоном⁸⁰, Харди и Юнгом⁸¹ и другими авторами^{49, 82, 83} для некоторых конкретных видов аппаратной функции спектральных приборов. В работе⁸⁴ сделана попытка исправить искажения, вносимые

инерцией теплового приемника света, с помощью дифференцирующей цепочки, что является обычным в радиотехнике приемом коррекции на высоких частотах. Легко видеть, что это соответствует учету первого члена формулы (51).

Формула (51) принимает особенно простой вид при исключении аппаратной функции фотослоя. Согласно (23) в этом случае только b_2 отлично от нуля, т. е. ⁴⁹:

$$\varphi(x) = f(x) - \left[\frac{\alpha}{2 \ln 2} \right]^2 \frac{d^2 f}{dx^2}. \quad (52)$$

Обращая этот результат, можно поставить вопрос об отыскании такого аппроксимирующего выражения для аппаратной функции, чтобы разложение (50) содержало два члена, т. е., чтобы все $b_n = 0$, кроме, например b_2 и b_4 . Если задаться следующим выражением для $A(\omega)$:

$$A(\omega) = [1 + \alpha_1^2 \omega^2]^{-1} [1 + \alpha_2^2 \omega^2]^{-1}, \quad (53)$$

то точное решение уравнения (1) будет иметь вид

$$\varphi(x) = f(x) - (\alpha_1^2 + \alpha_2^2) \frac{d^2 f}{dx^2} + \alpha_1^2 \alpha_2^2 \frac{d^4 f}{dx^4}. \quad (54)$$

Аппаратная же функция, соответствующая (53), есть (см., например, ⁸⁵).

$$a(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ix\omega} d\omega}{(1 + \alpha_1^2 \omega^2)(1 + \alpha_2^2 \omega^2)} = \frac{1}{2(\alpha_1^2 - \alpha_2^2)} [\alpha_1 e^{-|x|/\alpha_1} - \alpha_2 e^{-|x|/\alpha_2}]. \quad (55)$$

График этой функции, в отличие от (23), имеет экстремум в точке $x=0$, а наличие двух параметров позволяет в некоторых пределах изменять форму для «подгонки» под аппаратные функции реальных приборов.

Недостаток решения вида (51) заключается в том, что вычисление производных по экспериментально измеренной кривой, полученной с некоторой ошибкой, фактически весьма трудно и по существу сводится к вычислению конечных разностей. Из дальнейшего (§ 3) будет видно, что это затруднение не случайно, но принципиально имеет место в любом методе редукции, который может оказаться точным для какого-либо вида аппаратной функции.

Естественное обобщение вывода уравнения (51) состоит в следующем. Пусть $A^{-1}(\omega) - 1$ разлагается в некоторый функциональный ряд

$$A^{-1}(\omega) - 1 = \sum_n b_n u_n(\omega). \quad (56)$$

Подставляя (56) в (49) и меняя порядок суммирования и интегрирования, получаем:

$$\varphi(x) = f(x) + \sum_n b_n \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} u_n(\omega) F(\omega) e^{ix\omega} d\omega. \quad (57)$$

По аналогии с рассмотренным выше случаем, можно сказать, что умножение Фурье-трансформации $F(\omega)$ функции $f(\omega)$ на некоторую функцию $u_n(\omega)$ означает определенную операцию над самой функцией $f(x)$. Если $u_n(\omega) = \omega^n$, то эта операция есть n -кратное дифференцирование; если $u_n(\omega) = \exp\{-in\alpha\omega\}$, то соответствующая операция состоит в сдвиге по оси x на величину $n\alpha$, и т. д. Разумеется, умножение $F(\omega)$ на $A^{-1}(\omega) - 1$ также можно считать некоторой операцией. Смысл же приближенных методов и заключается в том, чтобы оператор $A^{-1}(\omega) - 1$ заменить совокупностью операторов $u_n(\omega)$, которые определяют более удобные (в том

или ином отношении) операции, чем операции, определяемые самим оператором $A^{-1}(\omega) - 1$.

Рассмотрим с этой точки зрения другие методы решения. Исторически, по-видимому, первым был развит метод конечных разностей. Этот метод получается при следующем разложении:

$$A^{-1}(\omega) - 1 = \sum_n b_n \sin^n \frac{a\omega}{2}. \quad (58)$$

Вычисляя первый член ряда в (57),

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sin \frac{a\omega}{2} F(\omega) e^{ix\omega} d\omega &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2i} [e^{i(x+a/2)\omega} - e^{i(x-a/2)\omega}] F(\omega) d\omega = \\ &= \frac{1}{2i} [f(x+a/2) - f(x-a/2)] \equiv \frac{1}{2i} \Delta_a^1 f(x), \end{aligned}$$

закключаем, что умножение $F(\omega)$ на $2i \sin \frac{a\omega}{2}$ соответствует операции взятия конечной разности от $f(x)$ на интервале a , а умножение на $(2i)^n \sin^n \frac{a\omega}{2}$ — n -кратному применению этой операции, т. е. взятию конечной разности $\Delta_a^n f(x)$ порядка n на интервале a (см., например, ⁸²). Таким образом мы получаем следующее выражение для $\varphi(x)$:

$$\varphi(x) = f(x) + \sum_n \frac{b_n}{(2i)^n} \Delta_a^n f(x). \quad (59)$$

Этот метод был предложен Рэлеем еще в 1871 году ⁸⁶ для редукции наблюдаемых спектров к бесконечно узким щелям монохроматора или спектрографа, причем он ограничился лишь первой исчезающей поправкой. Затем метод был развит Пашеном ⁸⁷ и Рунге ⁸⁸, которые приняли во внимание высшие приближения. В последующих исследованиях был рассмотрен случай монохроматора с неравными ширинами входной и выходной щелей ⁸⁹, учтено изменение дисперсии на протяжении ширины щели ⁹⁰ и, наконец, дано обобщение метода конечных разностей на другие «нецелевые» аппаратные функции ⁹¹.

Метод конечных разностей применяется в настоящее время в самых разнообразных случаях. Широкое распространение этого способа редукции в значительной степени объясняется чрезвычайной простотой расчета поправок при помощи геометрического построения, указанного также Рэлеем. В работе ⁹² поправка рассчитывалась по коэффициентам при параболической интерполяции наблюдаемого распределения. Этот способ, будучи эквивалентным построению Рэля по существу, значительно менее удобен практически и применяется редко.

Интересно отметить то обстоятельство, что параметр a в формулах (58) и (59) никак не детализирован и может быть выбран произвольно, и, в частности, при $a \rightarrow 0$ метод конечных разностей переходит в метод Эддингтона. В выражениях, полученных Пашеном и Рунге ^{87, 88}, конечная разность берется на интервале, равном ширине щелей s монохроматора, в то время как Рэлей использует интервал, равный $s/\sqrt{2}$ ⁸⁶. В § 3 мы увидим, что этот произвол устраняется разумным образом лишь при учете случайных ошибок измерений.

Если представить $A^{-1}(\omega) - 1$ в виде тригонометрического ряда

$$A^{-1}(\omega) - 1 = \sum_n b_n e^{-ian\omega}, \quad (60)$$

то решение уравнения (1) имеет следующую форму:

$$\varphi(x) = f(x) + \sum_n b_n f(x - an), \quad (61)$$

поскольку $u_n(\omega) = \exp\{-ian\omega\}$ есть «оператор сдвига». Легко видеть, что два последних метода весьма родственны, так как $\sin^n \frac{a\omega}{2}$ можно выразить через кратные гармоники, и от (58) перейти к (60). С практической же точки зрения эти методы отличаются, так как они определяют различные операции над реальным распределением $f(x)$ при учете конечного числа членов: в (59) мы будем ограничиваться конечной разностью определенного порядка, допустим второго, а в (61) — значениями функции в точках, удаленных на достаточно большое расстояние от точки x , например, на $\pm 2a$.

К решению в форме (61) можно прийти различными путями. В большинстве работ, где выдвигалась такая форма, авторы исходят из приближенной замены интегрального уравнения (1) системой линейных алгебраических уравнений с помощью различных формул приближенного интегрирования, а затем тем или иным способом решают эту систему⁹³⁻⁹⁵.

В ряде работ использовались тригонометрические разложения для решения уравнения (1). Такое выражение можно получить, если представить

$$A^{-1}(\omega) - 1 = \sum_n b_n \delta\left(\omega - \frac{n}{a}\right). \quad (62)$$

Тогда, очевидно,

$$\varphi(x) = f(x) + \frac{1}{2\pi} \sum_n b_n F\left(\frac{n}{a}\right) e^{\frac{in}{a}x}, \quad (63)$$

т. е. разложению (62) соответствует замена интеграла в (49) рядом, или, практически, суммой конечного числа членов. Этот метод часто применяется в рентгенографии^{96,97} и, как показано в⁹⁸, может оказаться удобным при исследовании спектральных линий на эталоне Фабри — Перо (в силу периодичности его аппаратной функции).

Рассмотрим теперь метод последовательных приближений, предложенный Бургером и ван Ситтертом^{99,100} и часто применяемый при редукции к идеальному прибору в различных случаях^{75, 82, 92, 98}. Этот метод соответствует разложению $A^{-1}(\omega) - 1$ в геометрическую прогрессию^{82, 93 101}:

$$\frac{1}{A(\omega)} - 1 = \frac{1 - A(\omega)}{1 - [1 - A(\omega)]} = \sum_{n=1}^{\infty} [1 - A(\omega)]^n. \quad (64)$$

В отличие от ранее рассмотренных случаев, оператор $[1 - A(\omega)]^n$ является интегральным оператором. Действительно, согласно упоминавшейся выше теореме о представлении функции, Фурье-трансформация которой равна произведению Фурье-трансформаций двух других функций, имеем при учете, например, первого члена ряда в (64)

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [1 - A(\omega)] F(\omega) e^{ix\omega} d\omega = f(x) - \int_{-\infty}^{\infty} a(x-y) f(y) dy.$$

Если учитываются n первых членов ряда (52), то решение можно представить в виде

$$\varphi(x) = f(x) + \{nf(x) - \int_{-\infty}^{\infty} U_n(x-y)f(y)dy\}, \quad (65)$$

где «разрешающее ядро» $U_n(x)$ выражается следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} U_n(x) &= \frac{(n+1)n}{2!} a(x) - \frac{(n+1)n(n-1)}{3!} a_1(x) + \dots + (-1)^n a_{n-1}(x); \\ a_1(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} a(x-y)a(y)dy; \quad a_k(x) = \int_{-\infty}^{\infty} a(x-y)a_{k-1}(y)dy. \end{aligned} \right\} \quad (66)$$

Для каждого конкретного прибора разрешающее ядро может быть рассчитано заранее и редукция сводится к вычислению интеграла в (65). Для расчета поправок по методу последовательных приближений были разработаны специальные интеграторы^{99,102}, позволяющие быстро производить вычисление интегралов типа (66).

При практическом использовании метода последовательных приближений могут оказаться полезными следующие замечания. В реальных условиях ширина щели спектрального аппарата часто меняется в соответствии с ширинами исследуемых линий, полос и другими обстоятельствами. Чтобы не было необходимости для каждого значения ширины щели вычислять разрешающее ядро, можно проводить последовательное исключение щелевых и нещелевых искажений, причем первые во многих случаях целесообразно, по-видимому, учитывать по более простому способу конечных разностей (59). Второе замечание связано с тем, что погрешности, с которыми известны $f(x)$ и $a(x)$ накапливаются в высших приближениях, т. е. при увеличении n . Поэтому, как указывают авторы метода, решение будет удовлетворительным, если можно ограничиться первым приближением.

Кроме рассмотренных выше, существует ряд других методов решения уравнения (1), которые не нашли, однако, применения в спектроскопической практике. Можно указать методы, включающие в себя одновременное применение операторов сдвига и дифференцирования⁸², а также интересный с математической точки зрения метод разложения по ортогональным полиномам Эрмита и Бернулли¹⁰³.

Остановимся на вопросе о выборе нулевого приближения. Как говорилось выше, во многих случаях за нулевое приближение в разложении $A^{-1}(\omega)$ принимают единицу, и, в соответствии с этим, нулевым приближением для решения уравнения (1) является наблюдаемое распределение $f(x)$. Рациональный вид разложения $A^{-1}(\omega)$ определяется в основном свойствами аппаратной функции. В ряде случаев, однако, когда высшие приближения имеют большие значения, может оказаться целесообразным учесть и характер самого наблюдаемого распределения. Это можно сделать следующим образом. Представим

$$f(x) = f_0(x) + f_1(x); \quad a(x) = a_0(x) + a_1(x), \quad (67)$$

где $f_0(x)$ и $a_0(x)$ — некоторые, заданные в аналитическом виде функции, для которых известно решение $\varphi_0(x)$ уравнения (1) и которые удачно передают общий ход функций $f(x)$ и $a(x)$ соответственно, так что $a_1(x)$ и $f_1(x)$ можно считать малыми. Например, в качестве $f_0(x)$ и $a_0(x)$ можно принять гауссовы или дисперсионные кривые. Функцию $\varphi_0(x)$ примем за нулевое приближение. Подставив (67) в (1), приходим к следующему

уравнению:

$$f_1(x) - \int_{-\infty}^{\infty} a_1(x-y) \varphi_0(y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} a(x-y) \varphi_1(y) dy \quad (68)$$

относительно функции $\varphi_1(y) = \varphi(y) - \varphi_0(y)$. Это уравнение можно теперь решать рассмотренными выше методами, и его решение будет определять поправку к нулевому приближению.

5. В заключение настоящего параграфа отметим некоторые специальные случаи редукции, не укладывающиеся в принятую выше схему изложения. Прежде всего мы имеем в виду интересный метод редукции, предложенный в¹⁰⁴ для случая эталона Фабри — Перо. Аппаратная функция эталона Фабри — Перо, как показано в¹⁰⁴, может быть представлена в виде суперпозиции эквидистантных контуров дисперсионной формы с одинаковыми интенсивностями

$$a(x) = \frac{(1+r)/(1-r)}{1 + \frac{4r}{(1-r)^2} \sin^2 \pi x} = \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha/\pi}{(x-m)^2 + \alpha^2}; \quad \alpha = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{1}{r}. \quad (69)$$

Отсюда следует, что при дисперсионной форме истинного распределения наблюдаемое распределение также выражается рядом дисперсионных кривых, аналогичным (69), и который можно, после несложных преобразований, привести к следующему виду:

$$f(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta/\pi}{(x-m)^2 + \delta^2} = \frac{\operatorname{cth} \pi \delta}{1 + \left[\frac{\sin \pi x}{\operatorname{sh} \pi \delta} \right]^2}; \quad \delta = \gamma + \alpha, \quad (70)$$

где γ — ширина истинного распределения. Таким образом, определяя параметры δ и α наблюдаемого распределения и аппаратной функции, можно вычислить истинную ширину линии. Формулы (69) и (70) учитывают переналожение соседних интерференционных максимумов и уточняют обычную методику⁵³, в которой аппаратная функция эталона аппроксимировалась лишь одной дисперсионной кривой. Отметим, что разложение (70) может также оказаться полезным при обработке почти периодической структуры вращательных спектров.

Второй специальный случай относится к измерению спектра поглощения. Здесь уравнение (1) связывает истинное, $\varphi(x)$, и наблюдаемое, $f(x)$, пропускания. Характеристикой же вещества является собственно не пропускание, а коэффициент поглощения, определяемый, согласно закону Бугера, соотношением

$$k(x) = \frac{1}{d} \ln \frac{1}{\varphi(x)} \equiv \frac{1}{d} D(x), \quad (71)$$

где d есть толщина поглощающего образца и $D(x)$ — его оптическая плотность. Следовательно, истинная форма полосы поглощения, определяемая функцией $1 - \varphi(x) = 1 - e^{-dk(x)}$, лишь при малых величинах $dk(x)$ не будет зависеть от d . В связи с этим некоторые авторы рассматривали уравнение, в котором неизвестной функцией является непосредственно оптическая плотность, т. е. следующее нелинейное интегральное уравнение:

$$D_n(x) = -\ln \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} a(x-y) e^{-D(y)} dy \right\}, \quad (72)$$

где $D_n(x) = \ln \frac{1}{f(x)}$ есть наблюдаемая величина оптической плотности^{35, 105, 106}. Разложение правой части уравнения позволяет до известной степени упростить это выражение, представив $D_n(x)$ в виде ряда по степеням величин истинного поглощения^{35, 107}. Например, для случая одиночной линии поглощения (72) принимает следующий вид:

$$D_n(x) = J_1(x) D_m - \beta_1(x) D_m^2 + \dots, \quad (73)$$

где D_m есть истинная плотность в максимуме линии, а коэффициенты J_1, β_1, \dots должны рассчитываться по известной аппаратным функциям монохроматора и по кривой $k(x)$ истинного коэффициента поглощения, форма которой предполагается также известной. Если эти данные имеются, то численным или графическим интегрированием в (72) или, что, по-видимому, проще, использованием ряда (73), можно табулировать истинные значения поглощения и ширины линии в зависимости от наблюдаемых плотности и ширины полосы и ширины аппаратной функции. Результаты подробных расчетов такого рода приведены в^{35, 107} для случая треугольной формы аппаратной функции и дисперсионной формы $k(x)$. В общем случае, когда форма кривой истинного коэффициента поглощения неизвестна и задача состоит в ее отыскании, использование уравнения (72) и (73) не упрощает, а скорее усложняет расчеты. Здесь целесообразнее, по-видимому, универсальными методами, приведенными выше, решать уравнение (1) относительно пропускания $\varphi(x)$ и последующим логарифмированием переходить к плотностям.

Все изложенные в настоящем параграфе методы относились к определению всего истинного распределения $\varphi(x)$. В ряде случаев, особенно при массовых измерениях с аналитическими целями, достаточно знания менее полных характеристик истинного спектра, например, интегрального коэффициента поглощения, «эффективной ширины» линии, интенсивности в максимуме линии и т. п. Не вдаваясь в подробности, укажем лишь работы^{1, 24, 75, 105, 107}, где рассмотрена методика и конкретно проведена такая «неполная» редукция.

§ 3. ОДНОЗНАЧНОСТЬ И ТОЧНОСТЬ РЕДУКЦИИ К ИДЕАЛЬНОМУ ПРИБОРУ

1. Фундаментальным для теории редукции является вопрос об однозначности редукции. Важность этого вопроса очевидна, поскольку лишь полное выяснение его позволяет обоснованно обсуждать экспериментальные данные и делать на их основании те или иные выводы.

В предельном случае абсолютно точных измерений вопрос об однозначности редукции сводится к выяснению условий единственности решения уравнения (1). Брейсвеллом и Робертсом¹⁰¹ и Торальдо ди Франчия¹⁰⁸ было показано, что уравнение (1) не имеет единственного решения, если Фурье-трансформация $A(\omega)$ аппаратной функции $a(x)$ в некоторых точках (или в некоторой области) обращается в нуль. Действительно, если в точках $\omega = \omega_j$ функция $A(\omega)$ обращается в нуль, $A(\omega_j) = 0$, то $\Phi(\omega)$ остается неопределенным, так как уравнение (15) удовлетворяется не только функцией

$$\Phi_1(\omega) = F(\omega) A^{-1}(\omega), \quad \omega \neq \omega_j, \quad (74)$$

но и функцией вида

$$\Phi_2(\omega) = \Phi_1(\omega) + \sum_j a_j \delta(\omega - \omega_j), \quad (75)$$

где a_j — произвольные числа. Если $A(\omega)$ обращается в нуль и в области частот $\omega_1 < \omega < \omega_2$, то

$$\left. \begin{aligned} \Phi_2(\omega) &= \Phi_1(\omega) + \sum_j a_j \delta(\omega - \omega_j) + b(\omega) s(\omega); \\ s(\omega) &= \begin{cases} 1, & \omega_1 < \omega < \omega_2; \\ 0, & \omega_1 > \omega; \omega > \omega_2, \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (76)$$

где $b(\omega)$ — опять-таки произвольная функция. Производя обратное преобразование Фурье, для решения $\varphi_2(\omega)$ уравнения (1) получаем следующее выражение¹⁰¹:

$$\varphi_2(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_1(\omega) e^{ix\omega} d\omega + \frac{1}{2\pi} \sum_j a_j e^{i\omega_j x} + \frac{1}{2\pi} \int_{\omega_1}^{\omega_2} d(\omega) e^{i\omega x} d\omega. \quad (77)$$

Таким образом, если Фурье-трансформация $\Phi(\omega)$ исследуемого распределения $\varphi(x)$ содержит гармоники с частотами, совпадающими с нулями Фурье-трансформации $A(\omega)$ аппаратной функции, то эти гармоники не сказываются на наблюдаемом распределении $f(x)$ и, следовательно, никак не могут быть «восстановлены» из него.

Рассмотрим с этой точки зрения конкретные выражения для аппаратной функции, приведенные в § 2. Если, например, аппаратная функция определяется только конечностью ширины щели (см. (17) и (17а)), то ее Фурье-трансформация обращается в нуль в точках

$$\omega_j = \pm \frac{2\pi}{s} j, \quad j = 1, 2, 3, \dots$$

Следовательно,

$$\varphi_2(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_1(\omega) e^{ix\omega} d\omega + \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^{\infty} [a_j e^{i\frac{2\pi}{s} jx} + a_{-j} e^{-i\frac{2\pi}{s} jx}],$$

т. е. $\varphi_2(x)$ определено с точностью до периодической функции, период которой равен ширине щели s , а среднее значение — нулю. Эта неопределенность не является, однако, принципиально неустранимой. Действительно, изменяя ширину щели, можно изменить период неопределенного члена в $\varphi_2(x)$ и тем самым экспериментально определить его наличие или отсутствие. Аналогичное положение имеет место и для чисто щелевой аппаратной функции монохроматора (18).

Обратимся теперь к другому предельному случаю, когда аппаратная функция определяется только дифракцией. Обычно принимают, что аппаратная функция при щелеобразной, например, апертурной диафрагме дается формулой (16), а ее Фурье-трансформация — формулой (16а). Следовательно, в этом случае

$$\varphi_2(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-2\pi/s_0}^{2\pi/s_0} \Phi_1(\omega) e^{ix\omega} d\omega + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{-2\pi/s_0} b(\omega) e^{ix\omega} d\omega + \frac{1}{2\pi} \int_{2\pi/s_0}^{\infty} b(\omega) e^{ix\omega} d\omega.$$

В связи с таким положением в¹⁰¹ и¹⁰⁸ сделан вывод, что однозначная редукция к идеальному прибору невозможна и, следовательно, дифракционные явления в приборе приводят к ограничению его возможностей как инструмента исследования даже в предельном случае абсолютно точных измерений.

В рассуждениях, приведших к этому выводу, имеется, однако, внутреннее противоречие. Дело в том, что выражение (16а) для $A(\omega)$, получаемое при решении дифракционной задачи по методу Кирхгоффа,

является приближенным выражением, годным лишь с определенной степенью точности. Следовательно, при рассмотрении предельного случая полного отсутствия случайных ошибок измерений выражение (16а) не может быть использовано и должно быть заменено точным. С другой стороны, в ¹⁰⁹ было показано, что при строгой постановке дифракционной задачи точная Фурье-трансформация аппаратной функции не может обращаться в нуль в целой области частот (см. также ²⁴). Таким образом, в противоположность выводам ^{101, 108}, можно утверждать, что дифракционные явления в реальном приборе не приводят к неоднозначности редукции, при абсолютно точных измерениях.

2. Положение изменяется, однако, когда мы принимаем во внимание случайные ошибки измерений и, соответственно этому, переходим от уравнения (1) к более полному уравнению (27). В этих случаях возникают явления, по существу эквивалентные неоднозначности редукции. Ван де Хюльст отметил в частности ¹⁰³, что по мере повышения точности метода редукции редуцированное распределение перестает иметь «гладкую» форму, появляются резкие «пики» и «провалы», связанные с ошибками измерений. Ван де Хюльст называет это явление «неустойчивостью» решения и подчеркивает, что оно присуще самому интегральному уравнению, а не какому-либо частному методу его решения. К сожалению, в ¹⁰³ утверждение о неустойчивости решения приводится как эмпирический факт, которому не дается какого-либо объяснения или обоснования.

Природу неустойчивости решения и отношение этого явления к вопросу об однозначности редукции можно легко выяснить следующим образом ²⁴. Как говорилось выше (§ 2), редукция к идеальному прибору сводится к умножению Фурье-трансформации наблюдаемого распределения $F(\omega)$ на $A^{-1}(\omega)$ — величину, обратную Фурье-трансформации аппаратной функции. Но эта операция неизбежно коснется и случайной флуктуационной составляющей $F(\omega)$, и каждая гармоническая компонента мощности шума $\Psi(\omega)$ будет множиться на $|A^{-1}(\omega)|^2$. Следовательно, ошибка редуцированного распределения будет

$$\overline{\Delta\varphi^2} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\omega) |A^{-1}(\omega)|^2 d\omega. \quad (78)$$

Нетрудно видеть, что этот интеграл всегда расходится. Действительно, согласно (34) средняя спектральная плотность мощности флуктуаций $\Psi(\omega)$ пропорциональна квадрату модуля частотной характеристики $A_2(\omega)$ регистрирующего устройства. С другой стороны, эта же частотная характеристика воздействовала и на исследуемое распределение, т. е. $A(\omega)$ есть произведение $A_2(\omega)$ на Фурье-трансформацию аппаратной функции оптического происхождения (см. (3)). Обозначая последнюю величину через $A_1(\omega)$, имеем

$$\overline{\Delta\varphi^2} = \frac{C}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |A_1(\omega)|^{-2} d\omega. \quad (79)$$

Поскольку $|A_1(\omega)|$ стремится к 0 при увеличении ω , интеграл расходится.

Из сказанного выше непосредственно следует, что вопрос о том, какую можно ожидать ошибку $\overline{\Delta\varphi^2}$, если задана величина ошибки $\overline{\Delta f^2}$ в наблюдаемом распределении, — вопрос, обычный в целом ряде физических измерений, — в общем случае редукции к идеальному прибору имеет неутешительный ответ: ошибка может быть произвольной. Это означает, далее, что наличие случайных ошибок приводит по существу к

неоднозначности редукции. Устранение этой неоднозначности возможно только путем привлечения дополнительных сведений об исследуемом распределении, полученных независимым образом.

При спектроскопических измерениях (и во многих других случаях), кроме сведений, получаемых в данном эксперименте в виде записи наблюдаемого распределения $f(x)$, часто располагают дополнительной информацией о $\varphi(x)$. Например, может оказаться известной форма истинного распределения энергии по спектру $\varphi(x)$ (одиночная или двойная линия гауссовой формы — Доплер-эффект; одиночная линия дисперсионной формы — естественное и лорентцево затухание и т. п.). Здесь определению подлежат лишь параметры истинного распределения (интенсивность в максимуме, ширина и положение линии, расстояние между линиями в случае нескольких линий и т. п.), а не все распределение, и о точности их измерения можно говорить в обычном смысле. Математически это выражается в том, что при заранее известной форме $\varphi(x)$ можно предвычислить интеграл в (1), и редукция будет сведена не к решению интегрального уравнения, а к решению алгебраического либо трансцендентного уравнения, или системы уравнений относительно неизвестных параметров истинного распределения^{24, 27}.

Во многих случаях мы не располагаем достаточно подробной информацией об истинном распределении, чтобы налагать столь жесткие априорные ограничения на $\varphi(x)$, как постулирование его формы. Оказывается, однако, что для «стабилизации» решения, для того, чтобы редукция стала однозначной и можно было в обычном смысле говорить о точности определения редуцированных величин, на $\varphi(x)$ достаточно наложить значительно менее жесткие требования, а именно, предположение о поведении Фурье-трансформации истинного распределения при больших значениях ω ²⁴. Действительно, расхождение интеграла (79) происходит за счет высоких частот. Следовательно, средняя ошибка редуцированного распределения будет конечной, если высокочастотные гармоники наблюдаемого распределения не только не редуцируются, но наоборот, еще более подавляются в процессе редукции. Но такая редукция будет приближенной и, следовательно, оправдана лишь тогда, когда Фурье-трансформация $\Phi(\omega)$ истинного распределения не содержит высокочастотных гармоник. Таким образом, достаточным условием однозначности редукции является постулат о малости амплитуд гармоник истинного распределения, лежащих вне некоторой конечной области частот. Если такой постулат принят, то задача редукции к идеальному прибору получает определенный смысл: нужно производить редукцию внутри этой области частот, а гармоники, лежащие вне ее, по возможности уменьшить, или, в крайнем случае, не редуцировать.

Мы не рассматриваем здесь вопроса о физическом обосновании указанного условия. В конкретных случаях оно может быть самым различным. Например, нижняя граница ширины одиночной линии и, следовательно, верхняя граница ширины Фурье-трансформации истинного распределения может обуславливаться эффектом Доплера. Для наших целей вопрос обоснования постулата не существен; принципиальное значение имеет лишь сам факт необходимости такого рода постулата.

3. Известные в литературе методы редукции (см. § 2) по существу отражают описанное положение вещей, т. е. во всех из них редукция осуществляется лишь в какой-то ограниченной области частот. Например, разложение $A^{-1}(\omega) - 1$ по степеням $\sin \frac{a\omega}{2}$, соответствующее методу конечных разностей, как нетрудно видеть, периодически с периодом $\frac{4\pi}{a}$.

Следовательно, при заданном значении параметра a правильно редуцируется не вся Фурье-трансформация наблюдаемого распределения, а только гармоники с низкой частотой^{82, 91}. Те же соображения относятся и к разложению (60). При разложении решения в тригонометрический ряд (см. (63)) используется лишь конечное число членов N . Это эквивалентно тому, что в соответствующем разложении (62) для $A^{-1}(\omega) - 1$ полагают $b_n = 0$ для всех $n > N$, т. е. опять-таки высокочастотные гармоники не редуцируются⁹⁶. Относительно разложения в степенной ряд и выражения $\varphi(x)$ через $f(x)$ и $\frac{d^n f}{dx^n}$ нужно заметить, что практически используются приближенные значения производных, а это эквивалентно либо

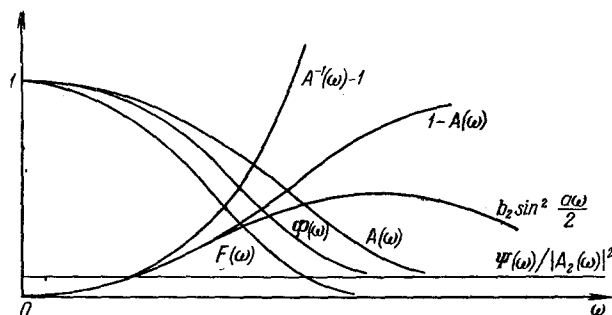


Рис. 6.

их замене конечными разностями⁹¹, либо ограничению пределов в интегралах $\int \omega^n F(\omega) e^{ix\omega} d\omega$ ⁸⁴, т. е. и здесь дело сводится к правильной редукции в конечной области частот. Не являются исключением в этом отношении и те методы редукции, в которых аппаратная функция аппроксимируется аналитическими выражениями. Например, аппроксимацию истинного распределения аппаратной функции профилями Фойхта можно рассматривать как разложение $\ln A(\omega)$ и $\ln F(\omega)$ по степеням ω ⁴⁷, причем используются два первых члена разложения, что достаточно точно лишь при малых частотах.

Для наглядного представления изложенных соображений полезно привести графическую иллюстрацию. На рис. 6 схематически нанесены графики Фурье-трансформаций, входящих в рассмотрение функций: $\Phi(\omega)$, $A(\omega)$, $F(\omega)$, $A^{-1}(\omega) - 1$ и $\Psi(\omega)/|A_2(\omega)|^2$. Кроме того, даны кривые, соответствующие первым членам разложений $A^{-1}(\omega) - 1$ в методах Рэлея и последовательных приближений $\left(b_2 \sin \frac{a\omega}{2} \text{ и } 1 - A(\omega)\right)$. Из рис. 6 видно прежде всего, что в процессе редукции случайные ошибки измерений увеличиваются, причем это увеличение тем значительней, чем шире та область частот, в которой правильно редуцируется наблюдаемое распределение. Следовательно, уменьшение систематических аппаратных искажений достигается ценою увеличения случайных ошибок в редуцированном распределении, по сравнению с наблюдаемым. Наоборот, стремление незначительно трансформировать случайные ошибки означает плохую редукцию и, следовательно, большое отличие редуцированного распределения от истинного, т. е. большие остаточные систематические ошибки.

Из изложенного, естественно, возникает вопрос об отыскании такого «оптимального» метода редукции, при котором суммарное среднеквадратичное отклонение P^2 редуцированного распределения от истинного, складывающееся из остаточной систематической ошибки и случайной ошибки,

возросшей в процессе редукции, имело бы минимальную величину. Нетрудно, записать это условие математически. Если обозначить через $G(\omega)$ приближенное выражение для Фурье-трансформации аппаратной функции, используемое при редукции, то P^2 имеет вид²⁴

$$P^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |G(\omega)|^{-2} \Psi(\omega) d\omega + \left| \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [1 - A(\omega) G^{-1}(\omega)] \Phi(\omega) e^{ix\omega} d\omega \right|^2. \quad (80)$$

Первый член этого выражения есть случайная ошибка, второй — остаточная систематическая. Следовательно, отыскание оптимального метода редукции означает такой выбор функции $G(\omega)$, при которой выражение (80) имеет минимальную величину. При этом, как видно из (80), должны быть фиксированы $\Phi(\omega)$, $A(\omega)$ и $\Psi(\omega)$, т. е. объект исследования и прибор.

Возможна другая постановка вопроса. Можно фиксировать $\Phi(\omega)$ и метод редукции, т. е. форму $G(\omega)$, и интересоваться выбором параметров прибора. Такая постановка вопроса практически важна по следующим причинам. Во-первых, различные приближенные методы редукции, как будет видно, приводят к примерно одинаковым величинам P^2 . С другой стороны, в спектральных приборах имеются параметры, которые существенно влияют как на аппаратную функцию, так и на величину случайных ошибок измерений, и в то же время могут легко варьироваться экспериментатором (ширины щелей, скорость сканирования, постоянная времени, толщина поглощающего слоя и т. п.). Поэтому весьма существенно знать, при каких значениях этих параметров нужно проводить измерения, чтобы P^2 было минимально.

В качестве иллюстрации рассмотрим, следуя⁵⁸, выбор ширины щели s монохроматора, постоянной времени τ и скорости сканирования v при измерении интенсивности в максимуме одиночной линии. Для простоты предположим, что редукция к идеальному прибору не проводится (т. е. $G(\omega) = 1$), аппаратная функция определяется только щелями монохроматора и что s много меньше ширины линии. Тогда для регистрирующего устройства, эквивалентного RC -цепочке, и при медленном сканировании P^2 выражается следующим образом:

$$[P^2 = \frac{c^2}{s^4 \tau} + [as^2 + b(v\tau)^2]^2]. \quad (81)$$

Первый член в (81) описывает случайные ошибки измерений, а второй — систематическую ошибку, связанную с аппаратными функциями монохроматора и регистрирующего устройства. Коэффициенты a , b и c определяются формой, шириной и яркостью линии, а также свойствами приемника света. Для линии гауссовой формы ширины γ и при аппроксимации аппаратной функции гауссовой кривой ширины $\alpha = s$ (см. (21)) оказывается, что

$$a = 1/2\gamma^2; \quad b = 4 \ln 2/\gamma^2. \quad (82)$$

Оптимальные величины $s = s_m$ и $\tau = \tau_m$, обращающие P^2 в минимум, находятся из условия $\frac{\partial P}{\partial s} = 0$, $\frac{\partial P}{\partial \tau} = 0$, откуда легко получить следующие выражения для s_m , τ_m и P_{\min} :

$$\left. \begin{aligned} s_m^9 &= \frac{8}{5} \sqrt{\frac{b}{a^5}} v c^2 = 16\gamma^4 v c^2; \\ \tau_m v &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{a}{b}} s_m = 0,21 s_m; \\ P_{\min} &= 1,86 [\sqrt{b} a^2 v c^2]^{2/9} = 1,53 \left(\frac{v}{\gamma} \right)^{2/9} \left(\frac{c}{\gamma^2} \right)^{4/9}. \end{aligned} \right\} \quad (83)$$

В правых частях этих выражений подставлены значения a и b из (82) для функций гауссовой формы.

Как легко видеть из (81), минимум P по параметру v достигается при $v=0$, так как ошибка монотонно падает с уменьшением скорости сканирования. Следовательно, выбор v определяется только общим временем измерения T и сканируемым интервалом частот. Поскольку этот интервал, очевидно, пропорционален γ , то отношение γ/v пропорционально T и тем самым оказывается заданной величиной, так как T должно фиксироваться в каждом конкретном случае. Следовательно, P_{\min} имеет вид

$$P_{\min} = \frac{P_0}{T^{2/3} M^{4/3}}, \quad (84)$$

где P_0 — коэффициент пропорциональности, не зависящий ни от характеристик прибора, ни ширины и яркости линий. Таким образом, величина P_{\min} зависит от отношения «сигнала к шуму» $M = \frac{\gamma^2}{c}$ при $s = \gamma$ и $\tau = 1$ и от общего времени измерения T , т. е. только от таких характеристик объекта, аппаратуры и других условий опыта, от которых, исходя из самых общих соображений, вообще можно ожидать зависимости ошибок при разумном выборе условий измерений.

Из (81) и (83) легко получить, что в оптимальных условиях систематическая ошибка $b v^2 \tau^2$, вызванная инерционностью регистрирующего устройства, в четыре раза меньше искажений из-за аппаратной функции монохроматора. Это важное следствие непосредственно связано с тем обстоятельством, что случайные ошибки пропорциональны $\frac{1}{s^2 \sqrt{\tau}}$, т. е. что

показатель степени при s в 4 раза больше показателя степени при τ . Поскольку, далее, s_m и P_{\min} очень слабо зависят от скорости сканирования (как $v^{1/3}$ и $v^{2/3}$ соответственно), то становится ясным, что выбор τ не очень критичен, т. е. отличие τ и v от оптимальных значений не приведет к существенному увеличению ошибки. Из этого вытекает, что в практических измерениях и при анализе более сложных случаев, чем рассмотренный пример (применение точной или приближенной редукции и т. п.), можно считать, что инерционные искажения должны быть пренебрежимо малы по сравнению с систематическими ошибками из-за аппаратной функции монохроматора, а τ можно считать фиксированной.

Приведенные выше рекомендации резко противостоят результатам, полученным в работах ¹¹⁰⁻¹¹², где также анализируется вопрос о выборе параметров установки. Связано это с двумя обстоятельствами. Во-первых, в ^{110, 111} не рассматриваются искажения из-за аппаратной функции монохроматора. Во-вторых, в ¹¹⁰⁻¹¹² параметры прибора выбираются, исходя из совершенно другого критерия, и это, по-видимому, самое существенное. Именно, в ^{110, 111}, например, не ставится требование минимизации суммарной среднеквадратичной ошибки, а независимо задаются величины случайной и систематической ошибок. Определенные из этого критерия условия работы, конечно не являются оптимальными с точки зрения минимума P .

Изложенная выше схема выбора параметров прибора в принципе может быть распространена на самые разнообразные случаи. В настоящее время такие расчеты еще весьма немногочисленны, однако, они уже позволили сделать ряд важных выводов.

В ^{66,76} был рассмотрен вопрос о выборе ширины щелей монохроматора и толщины поглощающего слоя*) при редукции оптической плотности

*) Постоянная времени считалась фиксированной, а инерционные искажения не учитывались. В силу изложенных выше причин, это вполне оправдано.

в максимуме одиночной линии гауссовой формы. Было показано, что значения этих параметров должны быть различными при использовании различных методов редукции. Кроме того, оказалось, что для типичного инфракрасного прибора использование первой поправки в методе редукции Рэлея (59) обеспечивает всего в 1,5—2 раза худшую точность по сравнению с теми случаями, когда форма линии заранее известна, и редукция полностью устраняет систематические ошибки.

Последний результат позволяет сделать важное сопоставление различных методов редукции. Действительно, если первая поправка в методе Рэлея приводит к практически тому же результату, что и «точные» методы редукции, то, надо полагать, все приближенные методы будут давать, примерно, тот же результат. Таким образом, случайные ошибки измерений и их трансформация в процессе редукции нивелируют различие в точности между разными методами редукции, и выбор метода редукции должен основываться лишь на простоте и удобстве его применения.

Разумеется, этот вывод останется в силе лишь при правильном выборе ширины щелей и других параметров прибора. Кроме того, он получен для определенной аппаратуры и вида исследуемого распределения. Поэтому распространение указанных результатов на другие случаи требует дополнительных обоснований.

Резюме настоящего параграфа можно выразить следующим образом. В предельном случае абсолютно точных измерений редукция к идеальному спектральному прибору однозначна, и в этом смысле наличие только аппаратной функции у реального прибора не приводит к ограничению его возможностей. В действительности случайные ошибки конечны, и это приводит к невозможности единственным образом вычислить истинное распределение по наблюдаемому распределению $f(x)$. Практически эта неоднозначность проявляется в том, что по мере повышения точности метода решения уравнения (27) в редуцированном распределении появляется некоторая ложная структура. Для установления нереальности этой структуры первостепенное значение имеет дополнительная информация об исследуемом распределении $\varphi(x)$, полученная независимым от данного опыта путем. Во многих случаях дополнительная информация о $\varphi(x)$ позволяет считать редукцию однозначной и в обычном смысле слова говорить об ошибке вычисления истинного распределения.

Существенно подчеркнуть, что за исключением тех случаев, когда достоверно известна форма истинного распределения и речь идет лишь об измерении конечного числа его параметров, — во всех остальных случаях наличие случайных ошибок измерений приводит к тому, что нельзя ставить вопрос о получении данных, полностью не зависящих от аппаратуры, и можно лишь говорить об отыскании такого метода редукции и таких условий измерений, когда отличие истинного и редукционного распределений минимально (например, в смысле среднеквадратичного отклонения).

§ 4. ПРОБЛЕМА РАЗРЕШЕНИЯ

1. Критерий разрешения, данный Рэлеем³⁰, и введенное им понятие разрешающей силы спектрального прибора первоначально относились лишь к визуальному наблюдению двух монохроматических линий на приборах, аппаратная функция которых определяется только дифракцией на прямоугольной апертурной диафрагме, т. е. имеет вид $\frac{1}{s_0} \left[\frac{\sin \pi x/s_0}{\pi x/s_0} \right]^2$.

Критерий этот сводится, как известно, к следующему: две монохроматические линии равных интенсивностей считаются разрешенными, если

расстояние d между ними не меньше, чем $s_0 = \frac{\lambda f}{D}$. При этом максимум интенсивности в дифракционной картине от одной линии совпадает с первым минимумом в дифракционной картине другой линии, а интенсивность посередине результирующей картины равна $\frac{8}{\pi^2} \cong 0,81$ от максимальной интенсивности.

В дальнейшем появилось большое число работ, в которых прямо или косвенно рассматривается вопрос о развитии и обобщении рэлеевского понятия разрешающей силы. Обобщения эти относятся прежде всего к распространению критерия разрешения на приборы, аппаратная функция которых отлична от дифракционной. Шустер^{32, 113} рассмотрел случай спектроскопа, когда аппаратная функция определяется дифракцией и конечной шириной щели. В качестве критерия разрешения он сохраняет то условие, что интенсивность в средней точке суммарного распределения от двух линий должна равняться 81% от максимальной интенсивности.

Для отношения $\frac{\lambda}{\Delta\lambda}$, где $\Delta\lambda$ есть минимально разрешаемый интервал длин волн при конечной ширине щели, Шустер вводит особое название «чистота» спектра. Однако этот термин используется редко, и большинство авторов применяет термин разрешающая сила как в рассмотренных выше, так и в других случаях, когда имеют место иные формы аппаратных функций. Аналогичный критерий разрешения был применен для характеристики эталона Фабри — Перо^{2, 53, 114}, имеющего аппаратную функцию (69). Небольшое отличие, заключающееся в том, что величина «провала» в суммарном распределении от двух монохроматических линий принимается здесь равной 20%, практического значения, естественно, не имеет.

Дальнейшее развитие критерия разрешения связано с тем, что глаз, фотопластинка и другие приемники света способны замечать много меньшие изменения интенсивности, чем 20%, т. е. то изменение, которое положено в основу критерия Рэлея (см., например, ¹¹⁵). В связи с этим были предложены некоторые видоизменения критерия разрешения, основанные на различных предпосылках. Наиболее простым развитием является постулирование величины провала, отличного от 20%, например, 5%. Такой критерий рассмотрен в ¹¹⁶ в применении к аппаратной функции дисперсионной формы. В ^{52, 117} минимальный разрешаемый интервал длин волн принимают равным ширине аппаратной функции. При таком критерии в случае различных форм аппаратных функций величина «провала» оказывается различной. Например, для дисперсионной формы он равен 17%, т. е. незначительно отличается от рэлеевского критерия, в то время как для дифракционного распределения имеет место провал в 2%, и в соответствии с этим разрешающая сила при таком критерии оказывается на 13% больше рэлеевского значения. Упомянем, наконец, критерий Спэрроу¹¹⁸, который считает, что две линии находятся на пределе разрешения, если расстояние между ними таково, что вторая производная в средней точке суммарного распределения интенсивности от двух линий обращается в нуль, т. е. что провал между линиями только что исчез. Этот критерий был применен для разнообразных форм аппаратных функций ^{118 - 120, 25}, и, как показало экспериментальное исследование ¹¹⁸, очень близко соответствует визуальному определению наличия провала между линиями. В таблице (стр. 508) дано сравнение перечисленных выше критериев разрешения для наиболее часто встречающихся форм аппаратных функций. Здесь α — ширина аппаратной функции и $\Delta\lambda_R$, $\Delta\lambda_S$ и $\Delta\lambda_\Sigma$ означают минимально разрешаемые интервалы длин волн соответственно

при критериях Рэлея, Спэрроу и критерии, в которых минимальная величина провала полагается равной 5% от максимальной интенсивности.

Аппаратная функция	$\frac{\Delta\lambda_R}{\alpha}$	$\frac{\Delta\lambda_5}{\alpha}$	$\frac{\Delta\lambda_S}{\alpha}$
Дифракционная *)	1,13	1,02	0,94
Треугольная	1,20	1,05	1,00**)
Гауссовая	1,13	0,99	0,85
Дисперсионная	1,05	0,80	0,58

*) Величины α , $\Delta\lambda_R$, $\Delta\lambda_S$ при учете дифракции и конечных щелей рассчитаны в ²⁴, ²⁵, ³², ³⁶, ¹¹⁸, ¹²¹.

**) Для треугольной аппаратной функции вторая производная в срединной точке суммарного распределения всегда равна нулю. В таблице, в духе основной идеи Спэрроу, приведено то значение $\Delta\lambda_S$, при котором провал только что обратился в нуль, хотя в ²⁵ дано значение 1,156 α .

В ряде работ была рассмотрена зависимость величины провала от таких факторов как различие интенсивностей двух монохроматических линий¹¹⁸, конечность ширин линий²⁵, уровня «фона» постоянной интенсивности и др. И в этих случаях отношение $\frac{\lambda}{\Delta\lambda}$, где $\Delta\lambda$ —минимальное рас-

стояние между еще разрешаемыми линиями, авторы называют разрешающей силой. Учет этих обстоятельств безусловно необходим при анализе конкретных реальных приборов, экспериментальном определении их предельных характеристик и в других вопросах. Однако анализ в этих случаях проводится на основании тех же критериев разрешения, которые были рассмотрены выше, и не вносит принципиально новых идей в проблему разрешения.

Необходимо отметить, что включение случайных ошибок измерений в проблему разрешения, с одной стороны, весьма важно и, с другой стороны, представляет известные трудности. Вариация глубины провала при неизменной аппаратной функции не может считаться вполне удовлетворительным приемом. Сложность вопроса заключается в том, что величина случайных ошибок измерений и ширина аппаратной функции не независимы. Например, при расширении щели ширина линии увеличивается и величина провала быстро уменьшается. Однако одновременно уменьшаются ошибки измерений, и, следовательно, провал заданной глубины регистрируется с большей достоверностью. Поэтому при определении разрешаемых интервалов длин волн необходимо совместно учитывать и случайные ошибки, и аппаратную функцию, и их взаимную зависимость. В применении к визуальным методам наблюдения и для дифракционно-щелевой аппаратной функции анализ этого существенного фактора качественно был проделан Шустером^{32,113} и ван Ситтертом³⁶. Для фотоэлектрических методов регистрации такой анализ вообще отсутствовал до последнего времени. Первый шаг в этом направлении сделан в¹²² для случая инфракрасных спектров поглощения. Были вычислены такие величины поглощения и ширины щелей монохроматора, при которых отношение глубины провала к среднеквадратичной ошибке измерений имеет максимальное значение. При этом для аппаратной функции принята треугольная форма, а для коэффициента поглощения — дисперсионная. Расчеты привели к несколько неожиданному результату. Именно, ширина щели s_m , при которой имеет место наилучшее разрешение (в указанном выше

смысле), почти полностью определяется расстоянием между линиями d , причем оказалось, что

$$s_m \cong \frac{1}{2} d$$

для линий практически любой ширины.

2. Характерной чертой всех рассмотренных выше работ по разрешающей силе спектральных приборов является то обстоятельство, что при рассмотрении распределения энергии от двух линий и сравнении его с распределением от одной строго монохроматической линии, т. е. с аппаратной функцией, все внимание было обращено исключительно на одну точку получающегося распределения и на константацию наличия в ней максимума или минимума. Такой подход вполне естественен: если у аппаратной функции в средней точке максимум, а у наблюдаемого распределения — минимум, то ясно, что это распределение вызвано немонохроматическим излучением. Нетрудно видеть, однако, что обратное утверждение несправедливо. Другими словами, такой подход по существу предполагает, что в основу критерия разрешения должно быть положено некоторое качественное различие наблюдаемого распределения и аппаратной функции, различие, заметное с «первого взгляда», без количественных измерений всего распределения энергии по спектру. Между тем, во всех точках контура будут некоторые количественные различия, которые можно измерить и использовать для установления спектрального состава исследуемого излучения ¹²³. Таким образом, рассмотренные выше критерии разрешения ориентированы по существу на качественные наблюдения, а величины разрешающих сил, полученные на основании таких критериев, лишь по порядку величины определяют расстояние между линиями, которые могут быть разделены на данном реальном приборе.

В качестве иллюстрации рассмотрим следующий пример. Наблюдаемое распределение от двух монохроматических линий при абсолютной точности измерений имеет вид

$$f_1(x) = I_1 a(x - x_1) + I_2 a(x - x_2). \quad (81')$$

Предположим ради простоты, что аппаратная функция известна с абсолютной точностью, а реально наблюдаемое распределение $f(x)$ от двух монохроматических линий измерено с некоторыми случайными погрешностями. Эту реальную запись естественно аппроксимировать функцией $f_1(x)$, и задача сводится, следовательно, к определению четырех параметров: I_1 , x_1 , I_2 и x_2 . Выбор этих параметров произведем по способу наименьших квадратов, т. е. наиболее вероятными значениями I_1 , x_1 , I_2 , x_2 будем считать такие, при которых суммарное среднеквадратичное отклонение реальной записи $f(x)$ от аппроксимирующей функции $f_1(x)$ имеет минимальное значение*), т. е.

$$\int_{x_1}^{x_2} [f(x) - f_1(x)]^2 dx = \min.$$

С точки зрения проблемы разрешения представляет интерес ошибка измерения расстояния $d = x_2 - x_1$ между линиями в зависимости от величины этого расстояния и ширины аппаратной функции. Несложные вычисления, выполненные в предположении гауссовой формы аппаратной функции (см. (21)) и равных интенсивностей линий ($I_1 = I_2$), приводят

*) Аналогичное рассмотрение для случая одиночной линии проведено в ²⁴, ⁷⁶.

к следующему выражению для среднеквадратичной ошибки определения d :

$$\overline{\Delta d^2} = 2\overline{\Delta x_1^2} \frac{1 + \exp \left\{ -2 \ln 2 \frac{d^2}{\alpha^2} \right\}}{1 - \exp \left\{ -4 \ln 2 \frac{d^2}{\alpha^2} \right\} + 4 \ln 2 \frac{d^2}{\alpha^2} \exp \left\{ -2 \ln 2 \frac{d^2}{\alpha^2} \right\}}, \quad (82')$$

где $\overline{\Delta x_1^2}$ есть среднеквадратичная ошибка определения положения максимума одиночной линии. Рассмотрим предельные случаи (82'). Если $d \gg \alpha$, т. е. линии не перекрываются, то, как и следовало ожидать, $\overline{\Delta d^2} = 2\overline{\Delta x_1^2}$. Если же $d \ll \alpha$, то (82') принимает вид

$$\overline{\Delta d^2} = 2\overline{\Delta x_1^2} \frac{1}{4 \ln 2} \frac{\alpha^2}{d^2}, \quad (83')$$

т. е. ошибка сильно возрастает при расстояниях между линиями малых, по сравнению с шириной аппаратной функции. Общий ход кривой $\sqrt{\overline{\Delta d^2}/2\overline{\Delta x_1^2}}$ в зависимости от d/α дан на рис. 7. Можно видеть, что резкое возрастание $\sqrt{\overline{\Delta d^2}}$ начинается лишь для $d < \frac{\alpha}{2}$, когда в средней точке наблюдаемого распределения $f_1(x)$ нет никакого «провала» (рис. 8).

Предельно малое расстояние между линиями d_{\min} , которое еще можно измерить в рассматриваемом случае, получается из условия $\sqrt{\overline{\Delta d^2}} = d_{\min}$. Используя формулу (83'), имеем:

$$\frac{d_{\min}^2}{\alpha^2} = \sqrt{\frac{1}{2 \ln 2} \frac{\overline{\Delta x_1^2}}{\alpha^2}}. \quad (84')$$

Если, например, ошибка определения положения одиночной линии составляет десятую долю ширины аппаратной функции, т. е. $\sqrt{\overline{\Delta x_1^2}}/\alpha = 1/10$, то $d_{\min} = 0,29\alpha$, что в 3—4 раза меньше, чем минимально разрешаемые интервалы, определяемые различными критериями разрешения (см. ранее приведенную таблицу). Если точность измерения будет выше, то отличие d_{\min} и α будет еще больше.

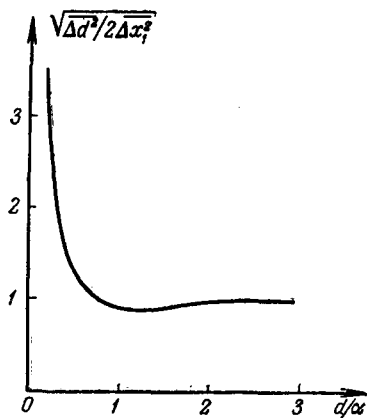


Рис. 7.

Рассмотренный пример наглядно показывает, что при количественных измерениях и последующей математической обработке наблюдаемого распределения возможности реальных приборов далеко не ограничиваются тем, что дает критерий Рэлея или какой-либо другой критерий, основанный на анализе поведения суммарного распределения в одной точке, но могут быть гораздо более богатыми, если учитывать отличие $f(x)$ от $a(x)$ во всех точках контура.

Несоответствие рэлеевского понятия разрешающей силы (и его рассмотренных выше видоизменений) экспериментам с количественными измерениями привело в последние годы к широкому обобщению понятия разрешения, появившемуся в непосредственной связи с применением в оптических измерениях модуляционного метода. Мы имеем в виду работы Горелика Г. С. и его сотрудников¹²⁴⁻¹²⁶ по повышению точности измерений в различного рода интерференционных экспериментах. Общие же

соображения без труда распространяются и на спектроскопические измерения¹²⁴.

Проблема разрешения в цитированных работах ставится как проблема обнаружения в наблюдаемом распределении того или иного признака истинного распределения — протяженности источника света, расщепления спектральной линии при наложении на источник света магнитного поля, числа линий и т. п. Другими словами, под разрешающей способностью понимается способность заметить на реальном приборе отличие наблюдаемого распределения от аппаратной функции, возникающее в результате заданного отличия истинного распределения от δ -функции.

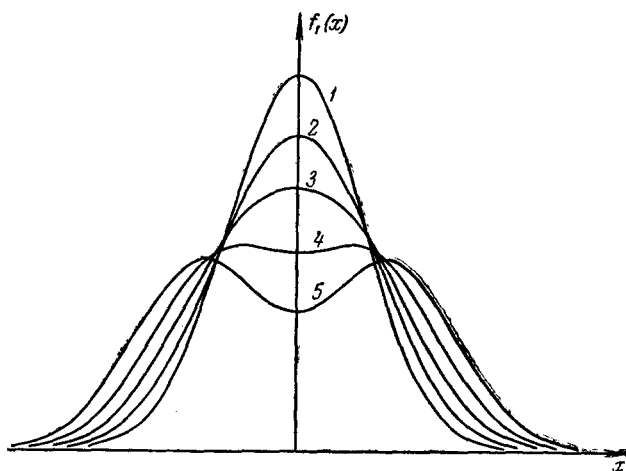


Рис. 8. Суммарное распределение интенсивности при двух монохроматических линиях равных интенсивностей и при гауссовой форме аппаратной функции ширины α :

1— $d=0$; 2— $d=0,5\alpha$; 3— $d=0,72\alpha$; 4— $d=0,96\alpha$; 5— $d=1,20\alpha$.

Следует отметить прежде всего, что при таком подходе речь идет не о каком-либо качественном признаке вроде наличия или отсутствия минимума, но о количественном различии каких-то двух распределений. Если, например, рассматриваются две спектральные линии, то предел разрешения соответствует такому расстоянию между ними, когда отклонение наблюдаемого распределения от аппаратной функции равно, скажем, среднеквадратичной ошибке измерений.

Далее, под проблемой разрешения понимается не только возможность установить наличие двух монохроматических линий равной интенсивности, но и многие другие задачи, связанные с обнаружением в наблюдаемом распределении того или иного признака истинного распределения. При таком подходе особенно ясно видно, что величины типа разрешающей силы не являются характеристиками только аппаратуры, но существенно зависят от исследуемого распределения, и определяют чувствительность прибора только при измерении заданного распределения, очень мало говоря о том, как будет обстоять дело в другом случае.

При изложенном подходе проблема разрешения является частным случаем общей проблемы редукции к идеальному прибору, рассмотренной в § 2 и 3 *).

*) Пример, рассмотренный в начале настоящего раздела, хорошо иллюстрирует это утверждение.

ления $\varphi(x)$ редукция сводится к вычислению параметров, характеризующих $\varphi(x)$ (ширины линии, ее интенсивности, расстояния между линиями и т. п.), исходя из наблюдаемого распределения $f(x)$. В результате погрешностей измерений параметры истинного распределения становятся известными с некоторой ошибкой, причем эта ошибка тем больше, чем шире аппаратная функция. При достаточно больших погрешностях измерений или достаточно малой величине интересующего нас параметра ошибка его определения оказывается равной его собственной величине. Это значение измеряемого параметра и характеризует разрешающую способность реального прибора при исследовании распределения данного типа. Таким образом, величина разрешающей силы (в рассматриваемом смысле) характеризует условия опыта (аппаратуру и измеряемый объект), при котором редукция к идеальному прибору еще не бессмысленна.

Указанная связь между проблемами редукции и разрешения позволяет разъяснить одно весьма распространенное недоразумение, сводящееся, грубо говоря, к следующему. Часто возникает желание использовать величину разрешающей силы для выяснения предельных возможностей прибора в различении истинных распределений разных и, вообще говоря, неизвестных форм. Например, желают узнать, при каких условиях можно на данном реальном приборе отличить совокупность из трех близких линий от одной линии конечной ширины и т. п.

Такая постановка вопроса означает по существу использование понятия разрешающей силы за пределами его применимости. Действительно, в § 3 было показано, что при конечных ошибках измерений возможность редукции к идеальному прибору существенно зависит от дополнительной информации об истинном распределении, которая получена независимыми от данного опыта путями. Было выяснено, в частности, что лишь при заранее известной форме истинного распределения можно полностью исключить систематические искажения, вносимые аппаратной функцией. В случае же отсутствия столь подробной информации редукция не позволяет получить данные, полностью независимые от аппаратуры.

Все, сказанное выше о редукции, относится (быть может с еще большим основанием) и к предельным возможностям редукции и, следовательно, к разрешающей силе. Рассмотренное понятие разрешения имело отношение исключительно к тому случаю, когда форма истинного распределения заранее известна и речь идет только об измерении его параметров. При отсутствии такой информации это понятие, разумеется, теряет свой прежний смысл и должно быть соответствующим образом доопределено, причем для информации различного типа это доопределение, по-видимому, будет различным. В настоящее время, однако, этот вопрос не освещен в литературе.

3. В заключение кратко рассмотрим некоторые возможности, которые открывает в проблеме разрешения спектральный подход. Мы имеем прежде всего в виду работу Д. С. Рождественского¹¹⁵, в которой для испытания качества спектральных приборов предлагается использовать гармоническое распределение энергии по спектру. Преимущество этого метода заключается в том, что гармоническое распределение сравнительно легко осуществить экспериментально путем скрещивания спектрального прибора с двухлучевым интерферометром. При этом, без учета действия искажающих факторов первой группы (см. § 1), имеет место точное гармоническое распределение. В то же время использование с той же целью линейчатых спектров часто бывает осложнено (особенно для приборов сравнительно высокой разрешающей силы) в силу наличия сверхтонкой структуры линий и других факторов.

Сущность метода Рождественского состоит в том, чтобы по мере увеличения частоты гармонического распределения (практически, — по мере увеличения разности хода между пучками интерферометра) следить за амплитудой распределения, доходя до таких частот, когда «видимость» интерференционной картины обращается в нуль. Другими словами, пользуясь принятой здесь терминологией, речь идет об обнаружении нулей фурье-трансформации $A(\omega)$ аппаратной функции. Если, например, аппаратная функция определяется дифракцией, то согласно (16а) $A(\omega) = 0$ при $|\omega| \geq \frac{2\pi}{s_0}$, т. е. начиная с периода гармонического распределения, равного рэлеевскому минимально разрешаемому расстоянию. Если же $A(\omega)$ не имеет нулей, то доходят до таких частот, когда видимость становится равной ошибке измерения.

Принцип, положенный в основу метода Рождественского, используется во многих и весьма разнообразных случаях. А. И. Салищевым были проведены некоторые измерения по методу Рождественского с целью выяснить влияние дефектов изготовления прибора на его разрешающую силу¹²⁷. Сам Рождественский указывал (см. ¹²⁷), что его метод с принципиальной стороны совпадает с известным методом Майкельсона⁹ измерения угловых размеров звезд. В интересной работе¹²⁸ на основании того же принципа рассмотрен вопрос об измерении спектральной ширины щели и разрешающей силы инфракрасных спектрометров. Общеприятный способ измерения разрешающей силы фотообъективов с помощью периодических мир (см., например, ¹²⁹) принципиально основан также на методе Рождественского. Связано это с тем, что действие аппаратной функции скажется прежде всего в уменьшении амплитуд высших гармоник Фурье-разложения функции пропускания мира. Поэтому любая периодическая мира, с произвольным распределением пропускания на протяжении периода, будет давать практически гармоническое наблюдаемое распределение интенсивности при частотах, близких к предельно разрешаемым, а вторая и более высокие гармоники практически никакой роли играть не будут. Можно указать, наконец, работу¹³⁰, в которой разрешающая сила фотослоя определялась непосредственно с помощью гармонического распределения освещенности, полученного интерференцией от двух точечных источников.

Интересное применение спектрального подхода к задаче о разрешении двух линий было указано Г. Г. Петрашом. Нетрудно показать, что фурье-трансформация $F(\omega)$ наблюдаемого распределения от двух линий одинаковой интенсивности есть

$$F(\omega) = F_0(\omega) \cos \omega d / 2, \quad (85)$$

где $F_0(\omega)$ — фурье-трансформация распределения в одиночной линии, d — расстояние между линиями. Как легко видеть, $F(\omega)$ обращается в нуль в точках (рис. 9)

$$\omega_k = (2k - 1) \frac{\pi}{d}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (86)$$

причем при сближении линий величины ω_k «уходят» в сторону все больших и больших частот. Таким образом, если произвести гармонический анализ распределения интенсивности даже тогда, когда в средней точке нет никакого «провала», то по наличию нулей в $F(\omega)$ можно судить о существовании двух линий. Обнаружению нулей функции $F(\omega)$ препятствуют два обстоятельства: уменьшение фурье-трансформации $F_0(\omega)$ одиночной линии при увеличении частоты и наличие случайных ошибок измерений. Предел разрешения соответствует такому сближению линий,

когда первый максимум после частоты $\omega_1 = \frac{\pi}{d}$, где $F(\omega)$ впервые обращается в нуль, станет равным ошибке измерений. Рассмотрение конкретных случаев показывает, что такой метод обнаружения двух линий приводит к меньшим разрешаемым интервалам, чем даже критерий

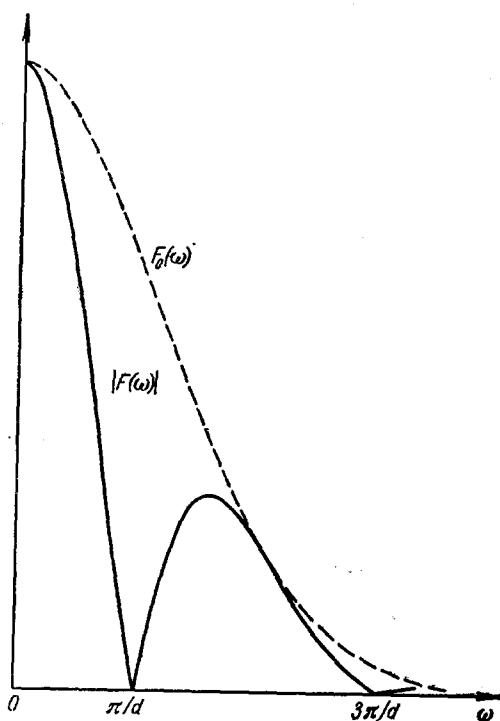


Рис. 9.

Спэрроу. Например, при дисперсионной форме линий можно легко различить две линии, если расстояние d между ними равно половине их ширины γ , в то время, как «провал» в средней точке наблюдаемого распределения исчезает при $d = 0,58\gamma$ (см. таблицу на стр. 508).

Заметим, что критерий Петраша, как и критерии Рэлея, Спэрроу и других основан на наблюдении за одной точкой, с той лишь разницей, что в последних случаях эта точка выбирается в наблюдаемом распределении, а в первом — на его фурье-трансформации. Однако критерий Петраша обладает тем важным преимуществом, что при бесконечном повышении точности измерений минимальный разрешаемый интервал стремится к нулю, тогда как в других критериях это естественное требование не удовлетворяется.

Интересно отметить, что рассмотренный способ оценки разрешающей силы спектрального прибора по существу является обобщением того подхода, который принят при анализе разрешающей силы известного метода исследования строения линий на двухлучевом интерферометре, применявшемся Майкельсоном и другими авторами^{9, 67, 68}. Действительно, кривая «видимости» V интерференционных полос, по которой судят о строении линий, является модулем фурье-трансформации распределения энергии по спектру. В случае двух одинаковых линий, следовательно, кривая видимости имеет вид

$$V(\omega) = |F(\omega)| = \left| F_0(\omega) \cos \frac{\Delta\lambda\omega}{2} \right|,$$

и минимальная обнаруживаемая разность длин волн $\Delta\lambda$ определяется из того условия, что «видимость» полос после $\omega = \frac{2\pi}{\Delta\lambda}$ не превышает случайных ошибок измерений.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Г. С. Ландсберг, П. А. Бажулин, М. М. Сущинский, Основные параметры спектров комбинационного рассеяния углеводов, Изд. АН СССР, М., 1956.
2. С. Э. Фриш, Техника спектроскопии, Изд. ЛГУ, Л., 1936.

3. W. E. Forsythe, Measurement of radiant energy, MC Graw-Hill Book Company, Inc., New York, London, 1937.
4. О. Д. Дмитриевский, Б. С. Непорент, В. А. Никитин, УФН 64, 437 (1958).
5. Я. Микусинский, Операторное исчисление, ИЛ, М., 1956.
6. О. Д. Дмитриевский, В. А. Никитин, Журн. ОМП, № 4, 9 (1957).
7. Д. Д. Иваненко, А. А. Соколов, Классическая теория поля, Гостехиздат, М.—Л., 1949.
8. В. М. Бунимович, Флуктуационные процессы в радиоприемных устройствах, Изд. Сов. радио, М., 1951.
9. А. А. Майкельсон, Световые волны и их применения, ГТТИ, Изд. 2-е, М.—Л., 1934.
10. А. И. Китайгородский, Рентгеноструктурный анализ мелкокристаллических и аморфных тел, Гостехиздат, М.—Л., 1952.
11. R. J. Trumpler, H. F. Weaver, Statistical Astronomy, University of California Press, Berkeley Los Angeles, 1953.
12. А. Митчел, М. Земанский, Резонансная флуоресценция и возбужденные атомы, ГТТИ, М.—Л., 1937.
13. R. N. Bracewell, Austral. Journ. Phys. 9, 198, 297 (1956).
14. М. Борн, Оптика, ОНТИУ, Харьков—Киев, 1937.
15. Л. И. Мандельштам, Собр. тр., т. 1, 211 (1911), Изд. АН СССР, М., 1948.
16. Л. И. Мандельштам, Собр. тр., т. 1, 229 (1912), Изд. АН СССР, М., 1948.
17. Rayleigh, Sci. Pap., т. 4, 241 (1896).
18. А. А. Харкевич, Очерки общей теории связи, Гостехиздат, М., 1955.
19. P. M. Duffieux, L'integrale de Fourier et ses application à l'Optique, Rennes, 1946.
20. A. Blanc-Lapierre, Ann. inst. Henri Poincaré, 13, 245 (1953).
21. P. Elias, D. S. Gray, D. Z. Robinson, J. Opt. Soc. Am. 42, 127 (1952).
22. E. H. Leanfoot, J. Opt. Soc. Am. 45, 808 (1955).
23. Е. Титчмарш, Введение в теорию интегралов Фурье, Гостехиздат, М.—Л., 1948.
24. С. Г. Раутиан, Диссертация, ФИАН, М., 1957.
25. A. G. Emslie, G. W. King, J. Opt. Soc. Am. 41, 405 (1951); J. Opt. Soc. Am. 43, 658 (1953).
26. G. W. King, J. Opt. Soc. Am. 43, 664 (1953); G. W. King, E. H. Blauton, J. Frawley, J. Opt. Soc. Am. 44, 397 (1954).
27. Л. А. Халфин, ДАН, в печати.
28. H. Moser, Zeits. f. Phys. 140, 36 (1955).
29. D. H. Rank, E. R. Shull, J. M. Bennett, T. A. Wiggins, J. Opt. Soc. Am., 43, 952 (1953).
30. Рэлей, Волновая теория света, Гостехиздат, М.—Л., 1940.
31. А. С. Топорев, Монохроматоры, Гостехиздат, М.—Л., 1955.
32. A. Schuster, Astroph. J. 21, 197 (1905).
33. М. М. Сущинский, Труды ФИАН 5, 185 (1950).
34. М. М. Сущинский, Изв. АН СССР, сер. физич. 11, 348 (1947).
35. А. В. Иогансен, Диссертация, ВНИИ нефтяной пром-сти, М., 1954.
36. P. H. van Cittert, Zeits. f. Phys. 65, 547 (1930).
37. P. H. van Cittert, Zeits. f. Phys. 69, 298 (1931).
38. Г. Г. Слюсарев, Е. И. Ежова-Гагенторн, Труды ГОИ, 9, вып. 100 (1935).
39. И. В. Пейсахсон, Материалы X Всесоюзного совещания по спектроскопии, т. 2, Львовск. универс., в печати, 1958.
40. J. B. Willis, Austral. Journ. Sci. Res. A4, 172 (1951).
41. П. А. Бажулин, С. Г. Раутиан, А. И. Соколовская, М. М. Сущинский, ЖЭТФ 29, 822 (1955).
42. R. O. Redman, Mon. Not. R. Astron. Soc. 95, 742 (1935).
43. А. И. Тудоровский, Теория оптических приборов, ч. II, Изд. АН СССР, М.—Л., 1952.
44. H. Moser, Optik 12, 362 (1955).
45. H. Frieser, Photohog. Korresp. 92, 183 (1956).
46. H. C. van de Hulst, Bull. Astron. Ins. Nath. 10, 79 (1946).
47. H. C. van de Hulst, J. J. Reesinck, Astroph. Journ. 106, 121 (1946).
48. G. Elste, Zeits. f. Astrophys. 33, 39 (1953).
49. М. М. Сущинский, Диссертация, ФИАН, М., 1957.
50. П. И. Шорыгин, ЖФХ 15, 1072 (1941).
51. М. М. Сущинский, ЖЭТФ 25, 87 (1953).

52. Ф. А. Королев, Спектроскопия высокой разрешающей силы, Гостехиздат, Москва, 1953.
53. С. Толанский, Спектроскопия высокой разрешающей силы, ИЛ, М., 1955.
54. E. F. Daly, G. B. M. Sutherland, Proc. Phys. Soc. A62, 205 (1949).
55. S. Brodersen, J. Opt. Soc. Am. 43, 1216 (1953).
56. И. С. Абрамсон, А. Н. Могилевский, Изв. АН СССР, сер. физич. 19, 49 (1955).
57. Л. А. Грибов, П. Т. Э., № 2, 65 (1958).
58. Г. Г. Петраш, Опт. и спектр., в печати.
59. С. Л. Мандельштам, Введение в спектральный анализ, Гостехиздат, М.—Л., 1946.
60. R. C. Jones, J. Opt. Soc. Am. 45, 799 (1955).
61. Н. О. Чечик, С. М. Файнштейн, Т. М. Ли́фши́ц, Электронные умножители, Гостехиздат, М., 1954.
62. R. C. Jones, J. Opt. Soc. Am. 39, 941 (1949).
63. W. Z. Hyde, Spectrochimica Acta 6, 9 (1953).
64. R. Schnurmann, R. Kendrick, Anal. Chem. 26, 1263 (1952).
65. В. А. Никитин, Журн. ОМП, № 2, 20 (1956).
66. Г. С. Ландсберг, Избран. труды, стр. 291, Изд. АН СССР, М., 1958; Г. Г. Петраш, С. Г. Раутиан, Материалы X Всесоюзного совещания по спектроскопии, т. 1, вып. 3, стр. 102, Львовск. ун-в. (1957); Г. Г. Петраш, С. Г. Раутиан, Инж.-физ. журн. 1, 61 (1958).
67. H. A. Gebbie, G. A. Vanasse, Nature 178, 432 (1956).
68. P. Fellgett, Journ. phys. radium 19, 187 (1958).
69. Rayleigh, Phil. Mag. 34, 407 (1892).
70. Н. Н. Соболев, Э. М. Межеричер, Г. М. Родин, ЖЭТФ 21, 350 (1951).
71. Х. Е. Стерин, Труды ФИАН, 9, 13 (1958); Изв. АН СССР, сер. физич. 14, 411 (1950).
72. И. Л. Фабелинский, Труды ФИАН 9, 181 (1958).
73. L. P. Smith, Phys. Rev. 46, 343 (1934).
74. F. W. Jones, Proc. Roy. Soc. A166, 16 (1938).
75. А. Унзольд, Физика звездных атмосфер, ИЛ, М., 1949.
76. Г. Г. Петраш, С. Г. Раутиан, Материалы X Всесоюзного совещания по спектроскопии, т. 1, вып. 3, стр. 107, Львовск. ун-в. (1957); Инж.-физ. журн., в печати.
77. В. Н. Фаддеева, Н. М. Терентьев, Таблицы значений интеграла вероятностей от комплексного аргумента, Гостехиздат, М., 1954.
78. C. W. Allen, Mem. Commonwealth Solar. Obs. Canberra 1, № 75 (1934).
79. В. М. Чулановский, М. П. Бургова, А. Н. Миронова, Изв. АН СССР, сер. физич. 14, 411 (1950).
80. A. Eddington, Mon. Not. R. Astron. Soc. 73, 359 (1913).
81. A. C. Hardy, T. M. Young, J. Opt. Soc. Am. 39, 265 (1949).
82. В. Ван дер Поль, Х. Бреммер, Операционное исчисление, ИЛ, М., 1952.
83. И. В. Пейсахсон, Изв. АН СССР, сер. физич., 18, 680 (1954).
84. А. М. Бонч-Бруевич, Я. А. Имас, Изв. АН СССР, сер. физич. 19, 54 (1955); ЖТФ 25, 2565 (1955).
85. И. М. Рыжик, И. С. Градштейн, Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, Изд. 3-е, Гостехиздат, М.—Л., 1951.
86. Rayleigh, Sci. Pap., v. 1, 135 (1871).
87. F. Paschen, Wied. Ann. 60, 712 (1897).
88. C. Runge, Zeits. f. Math. 42, 205 (1897).
89. E. P. Hyde, Astroph. Journ. 35, 237 (1912).
90. W. H. Eberhardt, J. Opt. Soc. Am. 40, 172 (1950).
91. R. N. Bracewell, J. Opt. Soc. Am. 45, 873 (1955).
92. В. М. Чулановский, А. В. Тиморева, Изв. АН СССР, сер. физич. 11, 376 (1947).
93. H. C. van de Hulst, Bull. Astron. Inst. Nath. 9, 225 (1941).
94. С. Г. Михлин, Интегральные уравнения, Гостехиздат, М., 1947.
95. M. Paterson, Proc. Phys. Soc. A63, 477 (1950).
96. A. R. Stokes, Proc. Phys. Soc. 61, 382 (1948).
97. М. А. Блохин, Изв. АН СССР, сер. физич. 20, 142 (1956).
98. L. C. Ornstein, W. R. Wyk, Zeits. f. Phys. 78, 734 (1932).
99. H. C. Burger, P. H. van Cittert, Zeits. f. Phys. 79, 722 (1932).
100. H. C. Burger, P. H. van Cittert, Zeits. f. Phys. 81, 428 (1933).
101. R. N. Bracewell, J. A. Roberts, Austral. Journ. Phys. 7, 605 (1954).
102. T. Gray, J. Francl. Inst. 212, 77 (1931).
103. H. C. van de Hulst, Bull. Astron. Inst. Nath. 10, 75 (1946).

104. В. К. Аблеков, *Опт. и спектр.*, в печати.
 105. D. A. Ramsay, *J. Am. Chem. Soc.*, **74**, 72 (1952).
 106. A. R. Philpotts, W. Thain, P. G. Smith, *Anal. Chem.* **23**, 268 (1951).
 107. А. В. Иогансен, *ДАН* **87**, 527 (1952); сб. *Методы исследования нефти и нефтепродуктов*, ГНТИ нефт. и горнотопливной лит., М., 1955.
 108. G. Torgaldo di Francia, *J. Opt. Soc. Am.* **45**, 497 (1955); **46**, 72 (1956).
 109. С. Г. Раутиан, *ДАН* **109**, 743 (1956).
 110. О. Д. Дмитриевский, В. А. Никитин, *Журн. ОМП*, № 2, 26 (1958).
 111. О. Д. Дмитриевский, В. А. Никитин, *Журн. ОМП*, № 6, 25 (1958).
 112. R. Zbinden, E. Baldinger, *Helv. Phys. Acta*, **26**, 111 (1953).
 113. А. Шустер, *Введение в теоретическую оптику*, ОНТИ—ГТТИ, Л.—М., 1935.
 114. К. Meissner, *J. Opt. Soc. Am.* **31**, 405 (1941); **32**, 185 (1942) (есть русский перевод в ⁵³).
 115. Д. С. Рождественский, *Изв. АН СССР, сер. физич.* **425** (1930); *Труды ГОИ*, вып. 68 (1931).
 116. S. S. Mitra, *Sci. and Industr. Res.* **14**, B., 303 (1955).
 117. W. V. Houston, *Phys. Rev.* **24**, 478 (1927).
 118. С. М. Sparrow, *Astroph. Journ.* **44**, 76 (1916).
 119. P. C. von Planta, *J. Opt. Soc. Am.* **47**, 629 (1957).
 120. B. P. Ramsay, E. L. Cleavland, O. J. Korpius, *J. Opt. Soc. Am.* **31**, 26 (1941).
 121. G. K. Conn, *American J. Phys.* **24**, 451 (1956).
 122. Г. Г. Петраш, *Инж.-физ. журн.* **1**, № 9, 74 (1958).
 123. Г. С. Горелик, *Колебания и волны*, стр. 505, Гостехиздат, М.—Л., 1950.
 124. Г. С. Горелик, *ДАН* **83**, 549 (1952).
 125. И. Я. Брусин, Г. С. Горелик, С. А. Пиковский, *ДАН* **83**, 553 (1952).
 126. С. М. Кóзел, *ЖЭТФ* **32**, 738 (1957); *Диссертация*, МФТИ, М., 1957.
 127. А. И. Салищев, *Труды ГОИ* **14**, 55 (1941).
 128. V. J. Coates, H. J. Hausdorff, *J. Opt. Soc. Am.* **45**, 425 (1955).
 129. А. Т. Ащеулов, Т. А. Павлинчук, М. Д. Хухрина, *Журн. ОМП*, № 3, 3 (1958); № 5, 12 (1958).
 130. Ritschel, *Experim. Techn. Phys.*, в печати.
-