

阶梯光栅光谱响应校准方法研究

朱存光^{1,2}, 亓洪兴², 张 骏^{1,2}, 舒 嵘²

(1. 烟台大学光电信息学院, 山东 烟台 264005; 2. 中国科学院上海技术物理研究所, 上海 200083)

摘要:阐述了阶梯光栅光谱仪的工作原理和成像特征,分析了阶梯光栅光谱仪存在特殊光栅响应的原因以及给定量探测带来的影响。在此基础上,有针对性地提出一种基于标准灯的光栅响应的校准方法,校准后可以给出不同波长信号强度的真实分布关系,给光谱定量分析提供了现实依据。

关键词:阶梯光栅光谱仪;光栅响应;标准灯;定量分析

中图分类号:TH744.1 **文献标识码:**A

Investigations on the calibration method of grating response in the application of echelle

ZHU Cun-guang^{1,2}, QI Hong-xing², ZHANG Jun^{1,2}, SHU Rong²

(1. School of Optoelectronic Information University of Yantai, Yantai 264005, China;

2. Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Science, Shanghai 200083, China)

Abstract: The working principle and imaging identity of the echelle spectrograph was interpreted. The reason for the existing of the special grating response in the echelle spectrograph and the effect on the work of quantitative detection. In this basis, a calibration method for the grating response based on the standard lamp was presented. It can give the real distributed relationship of the spectra-line intensity in different wavelength with calibration and offer the realistic basis for spectrum quantitative analysis.

Key words: echelle spectrograph; grating response; standard lamp; quantitative analysis

1 引言

光栅作为光谱仪的最常用到的色散元件,它的色散率、分辨率、集光本领等成为评价一台光栅光谱仪性能高低的重要指标。在传统的光栅设计中,通过增加刻线密度和光栅有效宽度来提高光栅的色散率和分辨率,但由于技术与成本的原因,刻线密度的增加在一定程度上实现起来很困难,增加光栅有效宽度则使仪器尺寸变得非常庞大,对实际制作与应用造成诸多不便。1949年美国麻省理工学院的Harrison教授摆脱常规光栅的设计思路,从增加衍射角,利用“短槽面”获得高衍射级次着手,增加两刻线间距离的方法研制成阶梯光栅(Echelle),这种光栅刻线数目较少(8~80条),使用的光谱级次高(28~200),具有光谱范围宽、色散率大、分辨率好

等突出优点^[1-3]。交叉色散的实现解决了其光谱级次间重叠的问题,使以阶梯光栅为色散元件的阶梯光栅光谱仪的应用得到推广。但是阶梯光栅光谱仪由于其内部光栅的特殊构造和独特的工作机制,成像特征与传统光栅光谱仪有着较大的区别。本文对阶梯光栅光谱仪的工作原理和成像特征进行了分析,并针对此类光谱仪提出了一种基于标准灯的光栅响应校准方法,目的在于提供被检测信号强度的真实分布关系,并通过实验验证了此方法的合理性与准确性。

基金项目:国家自然科学基金(No. 60678057)资助。

作者简介:朱存光(1985-),男,硕士,研究方向为激光光谱技术。E-mail:2003410572@163.com

收稿日期:2009-04-13

2 阶梯光栅光谱仪的工作原理^[4-5]

阶梯光栅光谱仪的工作原理如图1所示,首先一束白光由狭缝入射,经校正透镜准直后平行入射,通过标准色散光栅(或色散棱镜)纵向分光,这次分

光是为了解决阶梯光栅不同波长的衍射光的不同衍射级光谱发生光谱重叠的问题,纵向分光后不同波段的光经阶梯光栅横向分光,最终由探测器接收,反馈出光谱图。

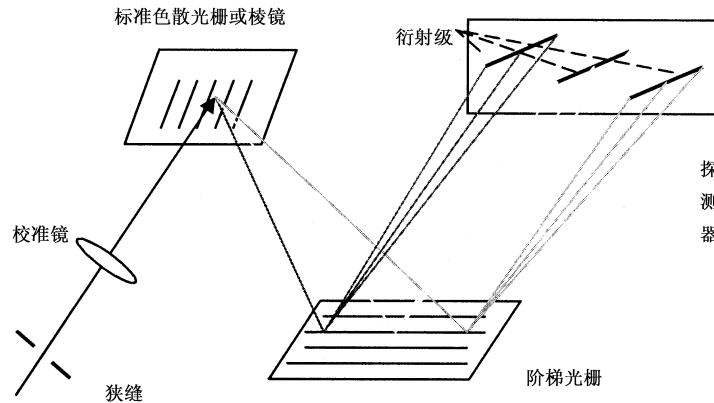


图1 阶梯光栅光谱仪工作原理图

Fig.1 schematic diagram of the echelle spectrograph

3 阶梯光栅光谱仪的成像特征

不同于传统光栅光谱仪的线状谱,阶梯光栅光谱仪探测器最初产生的是二维光谱,衍射级上的每一处“亮点”就代表了一个峰值,不同衍射级反映出

了不同的波段,同一衍射级则反映了衍射角近似相同的一个波段的光谱性质,如图2所示,最终由软件将不同的衍射级谱段拼合起来成为一个全波段的光谱。

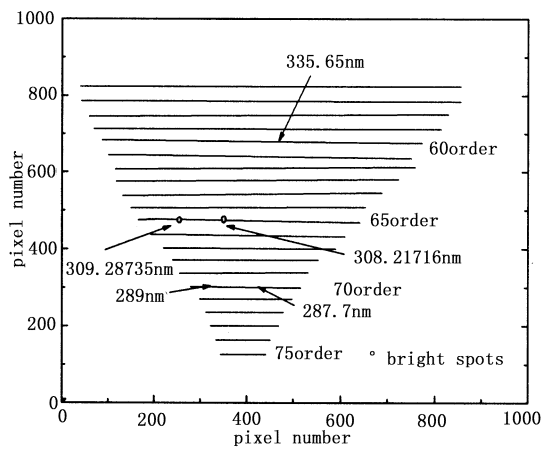
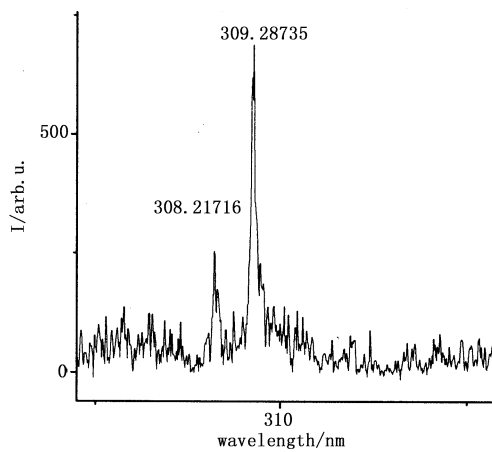


图2 阶梯光栅光谱仪成像原理图

Fig.2 imaging principle diagram of the echelle spectrograph

阶梯光栅光谱仪每一衍射级中的衍射光光强能量主要集中在该级闪耀波长(在每级光谱中,衍射角与入射角相同的波长为光栅该级的闪耀波长,也是光栅该级次最大衍射效率点)附近,最佳闪耀波段两侧能量锐减,如图3所示,也就是说即使入射信号相同,衍射光强也会由于衍射效率的不同发生变化,反映在光谱图上为谱线的高低起伏。闪耀波段处信号强,闪耀波段两侧信号低。使得阶梯光栅光谱仪采集到的光谱信号强度分布不能正确反映入射光谱线的真实强度分布,阶梯光栅光谱仪闪耀特性

造成的光栅效率不同是产生不同光栅响应的主要原因;其次,探测器灵敏度、交叉色散等因素也造成衍射光强分布与入射光强分布的偏移,形成了不同的光栅响应。光栅响应的存在造成了获取光谱强度分布与真实值的不符。现在光谱分析的量化研究的基本思想就是通过待测目标中某种元素光谱线的相对强度的强弱来确定此种元素在待测目标中的含量大小。如果不能反映出真实的相对强度分布,量化研究就很难甚至无法进行,所以必须对光栅响应进行校准。

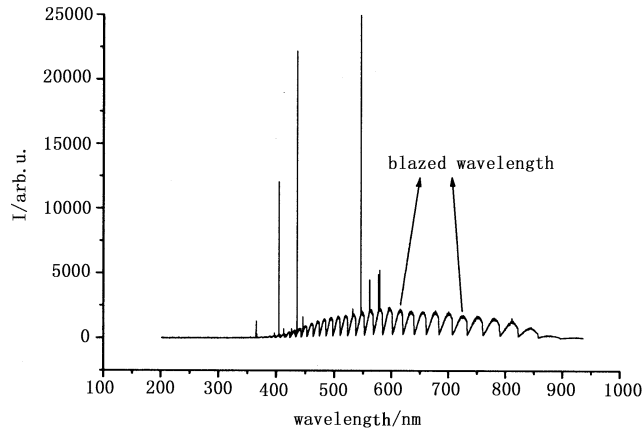


图3 基于阶梯光栅的日光灯光谱采集图

Fig.3 the obtained spectrum of the daylight lamp based on the echelle spectrograph

4 校准原理

基于光谱仪生产公司提供的标准灯与标准灯参考谱线,在外界条件相同的情况下,用光谱仪采集标准灯光谱与待测样本光谱,将标准灯光谱进行拟合去噪,通过比较标准灯光谱与标准灯实际谱线的关系,获得在此外界条件下光谱仪各波长处的光栅响应系数。然后利用得出的光栅响应系数对于待测样品光谱进行校准,得出待测样本校准后的光谱便能较为真实的反映出各波长处的相对光强关系。

5 校准过程

5.1 求出标准灯的标准值

以某公司生产的阶梯光栅光谱仪产品的校准为例,光谱仪生产公司提供的标准灯为 QTH (quartz tungsten halogen) 灯(波长范围为 380 ~ 975 nm)和紫外(UV)灯(波长范围为 200 ~ 400 nm)。由于要对 200 ~ 1050 nm 的波长范围的谱线强度进行校准,所以截取 UV 灯 200 ~ 380 nm 和 QTH 灯 380 ~ 1050 nm 的波段的参考标准数据进行拼接,拟合后得出标准灯的标准谱线图,如图 4 所示,依据拟合公式可以求出 200 ~ 1050 nm 波段任意波长处的标准光强值。

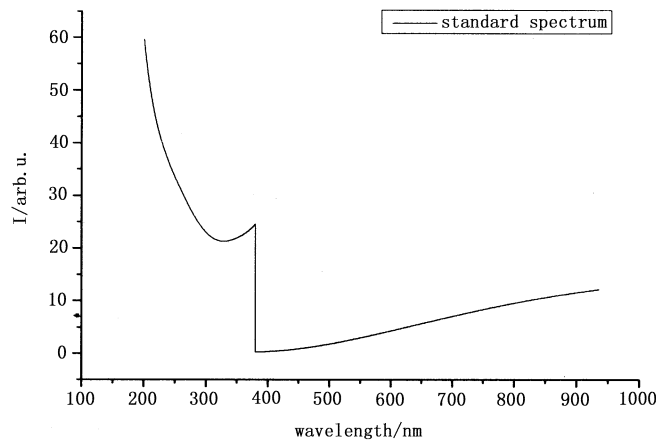


图4 标准灯的标准光谱

Fig.4 the standard spectrum of the standard lamp

5.2 光谱仪实测标准灯光谱的获取和处理

利用阶梯光栅光谱仪来测定标准灯和待测样本的光谱图,由于光谱仪采集到的光谱会随外界参数(环境参数、实验仪器、样本参数等)的不同而变化,所以光栅响应的校准系数只在其获取时特定的外界参数下有意义,这就需要保证标准灯和待测样本的测量条件尽量一致,时间间隔尽量要

短。两个标准灯分别采集 5 组光谱,取平均(消除每次试验引入的系统随机误差)后,取 UV 灯 200 ~ 380 nm 和 QTH 灯 380 ~ 1050 nm 的实测光谱进行拼接,得到实测光谱与标准光谱的对比关系如图 5 所示,实线为两个标准灯拼接后的光谱仪实测光谱,虚线是两个标准灯拼接后的标准光谱。

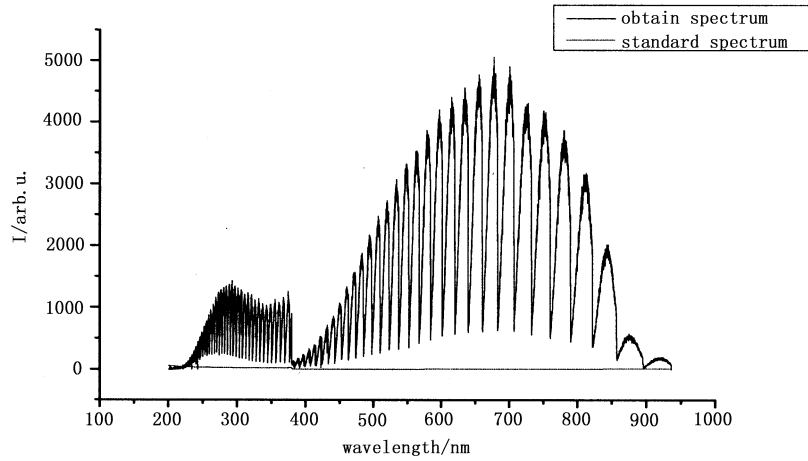


图5 标准灯实测光谱与标准光谱

Fig. 5 obtain spectrum and actual spectrum of the standard lamp

任意截取一段实测光谱,如图6所示,可以看出实际采到的光谱信噪比差别很大在闪耀波长附近信噪比较高,而最佳闪耀波段两侧信号强度几乎降低为0,噪声却并没有随着信号强度的减弱而变小,信

噪比很低,如果直接在不加噪的情况下进行校准,校准结果会产生较大的失真。光谱仪自带的校准程序由于没有进行去噪,校准结果不够理想,无法满足很多精确量化工作的需求。

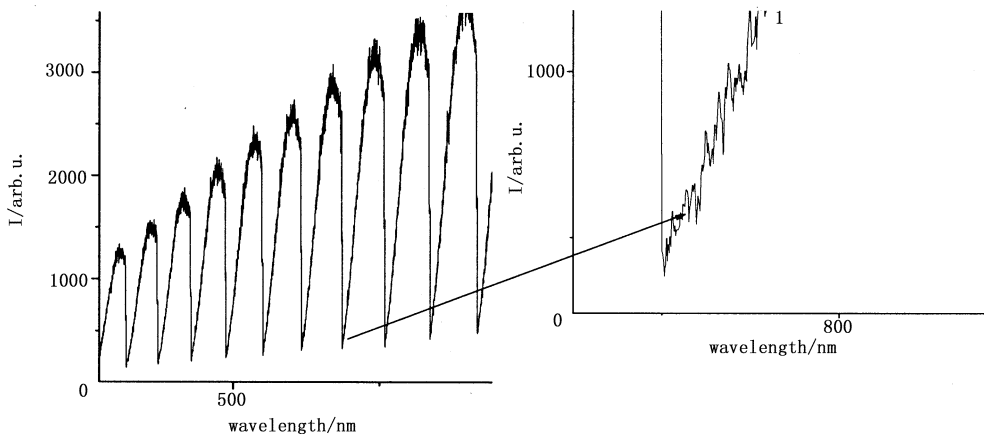


图6 阶梯光栅光谱仪的实测光谱信噪比

Fig. 6 the S/N of the obtain spectrum based on the echelle spectrograph

所以首先要进行分段拟合平滑去除噪声,试验证明,采用3次多项式拟合,标准差最小。去除噪声后的光谱图如图7所示。

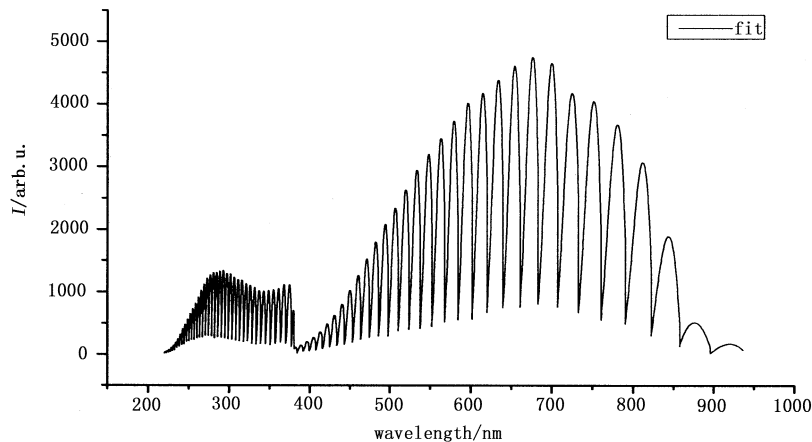


图7 去噪声后的光谱图

Fig. 7 obtain spectrum of noise elimination

5.3 光栅响应校准系数的获取

可以通过式(1)来确定某一波长位置的光栅响应的校准系数:

$$X = I_1 / I_2 \quad (1)$$

其中, X 是光栅响应校准系数; I_1 为标准光谱中特定波长处谱线的光强值; I_2 为经过去除噪声后的实测光谱中特定波长处谱线的光强值。

利用式(1)得出的校准系数,对另外获取的一

组标准灯原始信号进行校准(将原始信号去除噪声后,通过去噪后的原始信号各波长处的信号强度与上述方法获取的各波长处光栅响应校准系数相乘得到校准值),如图8所示,将此方法校准效果图8(a)与仪器自带的未经去噪处理的校准效果图8(b)进行对比,可以看出图8(a)和标准谱线图4基本一致,准确性要高于未去噪的图8(b)图效果,说明了此校准方法的准确性。

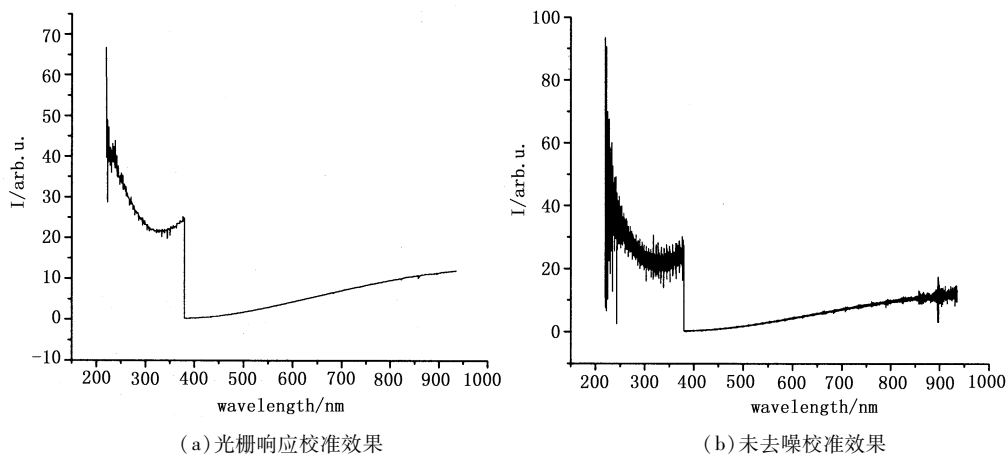


图8 原始信号在不同校准下的光谱图对比

Fig. 8 the contrast spectrum of the original signal with different calibration

6 总结

本文基于阶梯光栅光谱仪的工作原理和成像特征,分析了阶梯光栅光谱仪存在特殊光栅响应的原因以及给定量探测带来的影响,在此基础上有针对性地提出一种基于标准灯的光栅响应的校准方法,该方法能够更为真实的反映出不同波长处光强的相对的大小关系,对类似问题的解决提供了一种切实可行的参考方案。

参考文献:

[1] Harrison G R, Archer J E, Camus [J]. A fixed-focus broadrange echelle spectrograph of high speed and resol-

ving power[J]. J Opt Soc Am, 1952, 42(10): 706-712.

[2] Harrison G R, Davis S P, Robertson H J. Precision measurement of wavelengths with echelle spectrographs[J]. J Opt Soc Am, 1953, 43(10): 853-861.

[3] Harrison G R, Loewen E G, Wiley R S. Echelle gratings: their testing and improvement [J]. Appl Opt, 1976, 15(4): 971-975.

[4] Su Xue Zheng. Innovation in spectrographs-the andor mechelle[J]. Modern Scientific Instruments, 2005, (3): 89-90. (in Chinese)

[5] Palmer Christopher. Diffraction grating handbook[M]. 6th ed. Irvine: Newport Corporation, 2005.