

光栅光谱仪的光谱重建

张 漠, 王忠杰, 岑 刍

(复旦大学 物理学系, 上海 200433)

摘要:用光栅光谱仪进行光谱测量,不同的入射缝、出射缝宽度导致测量得到的光谱不同,狭缝宽度越大,测得的光谱越不准确。为了消除入射缝、出射缝的影响,需要对测量光谱进行数学处理以获得尽可能真实的光谱,这就是光谱重建。本文通过光谱与入射缝、出射缝的关系,用实验测得的谱线,通过出射缝还原、入射缝还原,直接恢复重建真实光谱。

关键词:光栅光谱仪; 狹缝宽度; 光谱重建

中图分类号:O433

文献标识码:A

文章编号:1005-4642(2017)05-0050-05

在光谱测量中,光谱仪^[1-4]的狭缝宽度对测得光谱的分辨率有很大影响。光栅光谱仪的分辨率与其光通量之间存在折中的关系,一般而言,增大狭缝宽度会降低光谱的分辨率,所以在测量时应尽量使用窄的狭缝;另一方面,在弱光测量中,为最大限度地收集信号光,通常尽量增大狭缝宽度以提高信号强度,但这同时也增大了谱线的半高全宽,降低了分辨率^[5-6]。为了解决上述问题,目前存在亚像元-反卷积序列光谱图复原在不降低光通量的前提下提高光栅光谱仪分辨率的方法和反卷积光谱重建技术计算还原真实光谱的方法^[7]。

本文介绍了另一种解决上述问题、还原真实光谱的方法:通过建立出射缝、入射缝对扫描光谱影响的模型,通过积分差值计算还原消除出射缝对光谱的影响,建立函数模型数值计算推导还原消除入射缝对光谱的影响,即消除了假响应^[8],从而计算得到真实精细光谱。该方法与上述目前解决该问题的方法相比,能得到与上述方法相同精度的还原真实光谱,但该方法的计算更加简单,且操作方便,更具有实用性。

1 出射缝效应

在光栅光谱仪实验中,出射缝越大,得到的光谱越不准确。考虑出射缝效应,可以通过数学计算由出射缝较大时得到的谱线推导计算没有出射

缝宽的影响时的真实光谱。

光栅光谱仪的出射缝处对光的扫描过程如下:在出射缝平面,随光栅转动,光栅所成的像在出射缝平面移动并经过出射缝得到光谱。可认为像具有一定宽度(与光谱上的半高全宽有对应关系),用一定宽度出射缝扫描该像,透过出射缝的光强值为光谱上该扫描点的值。

由于出射缝宽的影响,扫描光谱上每一点为真实光谱上一定范围的积分值,不同出射缝宽扫描的光谱不同,此即出射缝效应。

1.1 出射缝宽与光谱上光波长的对应关系

光栅光谱仪将不同波长的光在出射缝平面分开,需要确定光的波长差对应出射缝平面上的距离差,亦即确定出射缝宽与光谱上横坐标的对应关系。

确定该关系有很多方法,由光谱仪的参量就可以直接算得,在这里介绍一种通过实验来测量的方法。

高压汞灯 578.0 nm 处左右有黄光的双黄线,双黄线的波长差为 2.0 nm。将入射缝开得很小,入射缝宽使像半高全宽增大的效应很小以致可以忽略。改变出射缝宽 d_1 ,当出射缝宽 d_1 对应的波长差等于 2.0 nm 时,对扫描得到的双黄线峰值处是平坦的。实验测得 $d_1 = 0.700 \text{ mm}$ 时,出射缝宽与出射缝平面上的双黄线间距离大致相等。以此可得出射缝的 1.000 mm 宽度对应光谱

“第9届全国高等学校物理实验教学研讨会”论文

收稿日期:2016-05-28;修改日期:2016-07-17

作者简介:张 漠(1995—),男,上海人,复旦大学物理学系 2014 级本科生。

指导教师:岑 刍(1980—),男,海南万宁人,复旦大学物理学系工程师,硕士,从事物理实验教学与研究工作。



上的 2.9 nm ,由此得出射缝宽度 $d(\text{mm})$ 扫描的光谱,其上每一点值为真实光谱上该点处 $2.9d(\text{nm})$ 范围光强的积分值.

1.2 出射缝关系的验证

用大出射缝扫描,光谱上每个点的光强值可看作在出射缝上每一个精确点(即每一个缝宽无限小的出射缝)光强值的和,即在大出射缝扫描得到的光谱上,每一点的相对光强值看作真实光谱上一段区域的积分.

为验证该关系,入射缝保持 0.500 mm ,用出射缝为 0.010 mm 的实测光谱积分求和计算得出出射缝为 0.200 mm 时的理论光谱并与实际测得 0.200 mm 光谱相比较,得到的图线如图1所示,理论计算谱线与实际测量谱线基本一致,验证了出射缝关系.

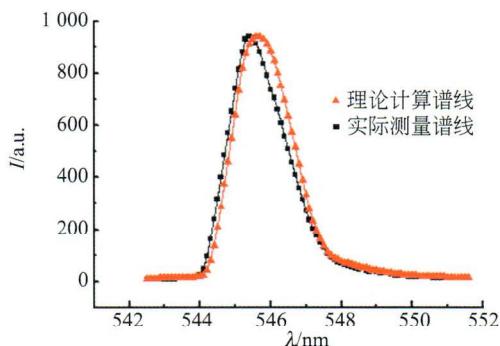


图1 出射缝关系验证曲线

1.3 对汞灯光谱双黄线的出射缝还原

用如前所述的出射缝关系,对出入射缝宽都为 1.000 mm 的汞灯光谱进行出射缝还原的光谱重建.该光谱每一点的光强值都为真实光谱 2.9 nm 范围的积分值.该光谱每一点的值与其旁边相隔 0.1 nm (最小分度值)的点之差即为积分边缘的2个边缘位置真实光谱的光强差,用这种方法,从光强为0点开始,依次求积分差值,则一步步还原出每一点光强的真实值,即可计算得到消除了出射缝效应后的真实光谱.

图2为由出射缝宽 1.000 mm 的实测光谱线计算得理论光谱值,入射缝保持 0.100 mm 不变;图3为将该理论光谱与实际测量的入射缝宽为 1.000 mm 、出射缝宽为 0.100 mm 的谱线相比较,可以发现计算得到的谱线与实测谱线除了峰值处的相对强度外均吻合得较好,因此也基本验证了这一还原方法的正确性.

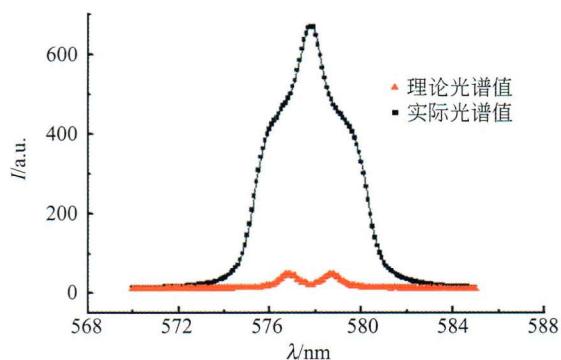


图2 梅灯双黄线出射缝还原谱线图

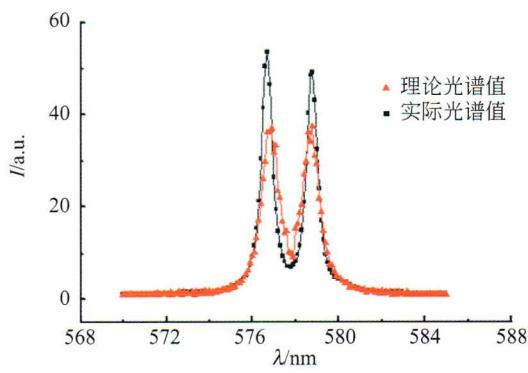


图3 梅灯双黄线出射缝还原谱线与实测谱线对比图

2 入射缝还原

通过积分值作差的思想对谱线进行了出射缝还原,得到了小出射缝条件下的谱线图样,但此时入射缝的影响尚未消除.实际测量中,外光路汞灯经凸透镜会聚所成的像成在入射缝平面上,入射缝大小决定了对于光谱仪内光栅成像光路的物宽,进而当出射缝为一较小定值时也决定了谱线的半高全宽与峰值.以下将进一步进行入射缝还原,以得到入射缝、出射缝均很小时的精细谱线.

2.1 参照谱线拟合

为了从大入射缝谱线推算出小入射缝谱线,实验选取 546.1 nm 单峰谱线作为参照,测量出射缝为较小定值、一系列不同入射缝的光谱,并将其作为已知条件.其次选取高斯函数对这一系列参照谱线进行拟合,可以得出高斯函数中一些参数与入射缝缝宽 d_2 之间的对应关系.假定汞灯各谱线在入射缝变化时其主要参数(半高全宽、峰值)的变化比例一致,则可通过改变高斯函数参数的方式得到精细谱线.

以形如 $y = \frac{A}{w\sqrt{\pi/2}} \exp\left[-\frac{2(X-X_c)^2}{w^2}\right]$ 的高斯函数对一系列绿光单峰参照谱线进行拟合。事实上实验中由于外界条件及光谱仪本身误差会产生一定本底值 y_0 , 但这一值本身并不属于光源光谱信号, 也不会影响谱线的形状, 因此在作图拟合时可直接去除这一值。由图 4 可以发现高斯函数与实际谱线吻合得较好(入射缝为 0.500 mm, 出射缝为 0.100 mm 的参照谱线拟合结果), 只是在图线接近底部处两者略有差异。参量 w 表示峰的宽度, 并应与半高全宽成一定比例关系,

$\frac{A}{w\sqrt{\frac{\pi}{2}}}$ 这一整体表示了峰值的高度, 不妨以 H 代

替。实验发现 w 和 H 起先随入射缝增大而增大, 但当入射缝增大到一定值时(本实验中采用 0.600 mm), w 增大的趋势放缓, 而 H 则基本不变。这是由于此时入射缝宽度已经接近甚至大于了汞灯在入射缝平面像的宽度。

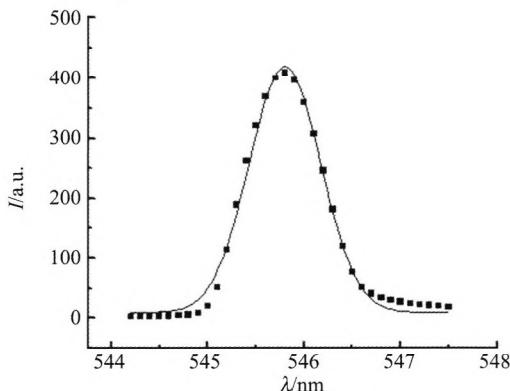


图 4 $d_1=0.500 \text{ mm}, d_2=0.100 \text{ mm}$ 参照谱线拟合图

图 5 和图 6 分别显示了 w 和 H 随入射缝 d_2 的变化关系, 可以看出随着 d_2 的增大, w 增大的趋势越来越慢, 而 H 则最终趋于定值。可近似认为入射缝 $d_2 > 0.600 \text{ mm}$ 时 $H=140$ 不变。

2.2 改变高斯函数参量进行入射缝还原

将经过了出射缝还原的数据进行高斯函数拟合。由于此时的谱线已经能够区分出双黄线, 只是宽度的参量与小出射缝时不符, 因此先分别用 2 个峰远离中心一侧的数据进行高斯函数拟合。

图 7 为 0.500 mm 入射缝时双黄线的拟合结果, 可以看出与原数据点吻合较好。将 2 个高斯函数相加就可以得到双黄线的函数解析式。随后

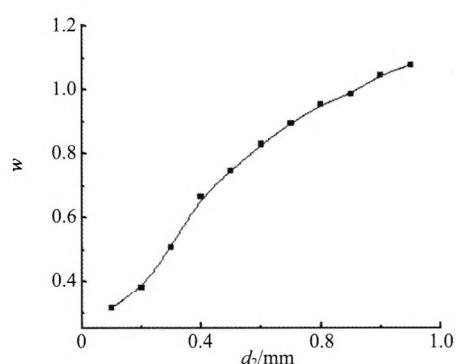


图 5 参照谱线 $w-d_2$ 关系图

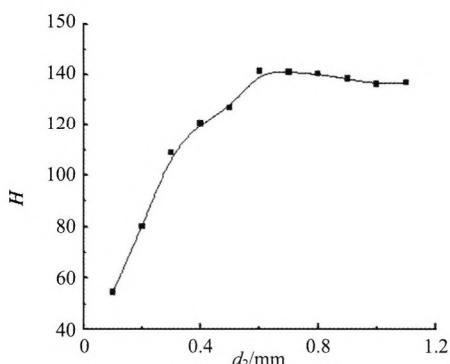
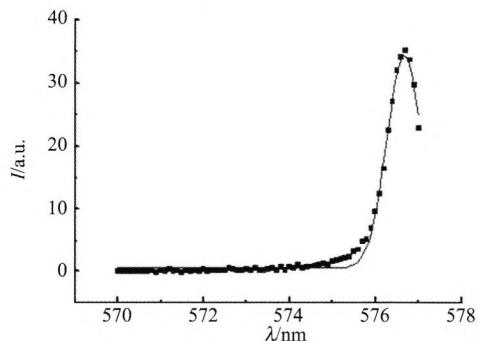
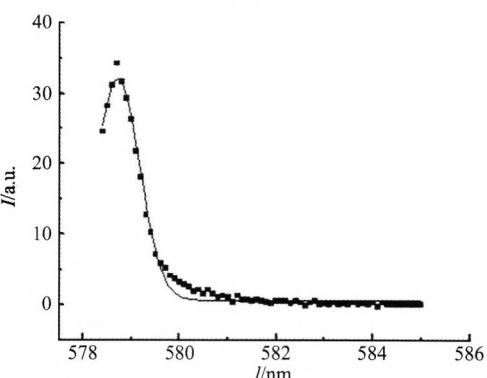


图 6 参照谱线 $H-d_2$ 关系图



(a)



(b)

图 7 汞灯双黄线高斯函数拟合图

对 w 和 H 进行改变。假设谱线拟合参量分别为 w_1 和 H_1 , 改变后的小入射缝(此处取 0.100 mm)时参量分别为 w_1' 和 H_1' , 对应入射缝时参照谱线的参量分别为 w_0 , H_0 , w_0' 和 H_0' , 则应有关系为

$$\frac{w_1'}{w_1} = \frac{w_0'}{w_0}, \quad \frac{H_1'}{H_1} = \frac{H_0'}{H_0},$$

w_0 , H_0 , w_0' 和 H_0' 值都可以从 w , H 随入射缝的关系图线上读取得到。计算得到 w_1' 和 H_1' 的值代入高斯函数再次作出 2 个高斯函数相加后的图像, 此时函数再乘以系数 C 就可以得到还原后的精细谱线了, 如图 8 和图 9 所示。

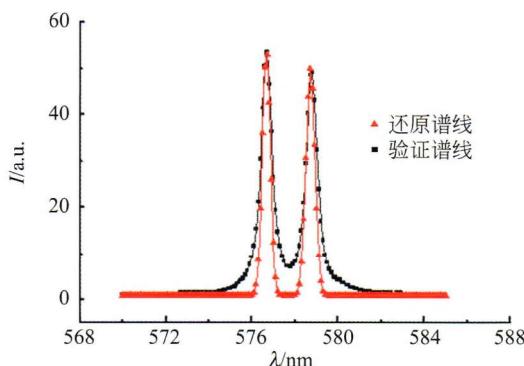


图 8 0.500 mm 出入射缝推得精细谱线与实测对比图

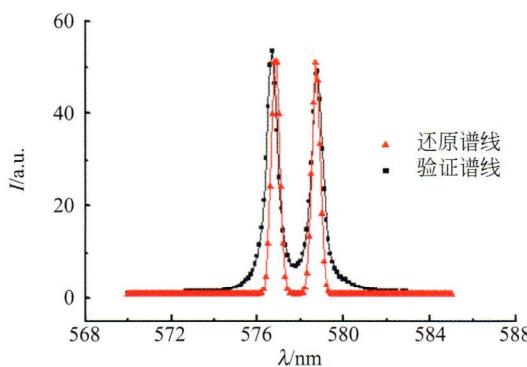


图 9 1.000 mm 出入射缝推得精细谱线与实测对比图

图 8 为人射缝均为 0.500 mm 推得的出入射缝均为 0.100 mm 时的谱线图, 图 9 是出入射缝均为 1.000 mm 推得的出入射缝均为 0.100 mm 时的谱线图。可以看出谱线的双峰与实测符合得较好, 而只是在下降到接近本底处时有一定差距,

推算出的谱线相较于实测谱线更加陡峭, 这一方面是由谱线本身并非严格的高斯函数, 使用高斯函数只是一种近似; 另一方面, 在出射缝还原的计算中还原出的出射缝值事实上已经在 0.010 mm 数量级上, 而实测时出射缝取值是 0.100 mm, 这样也造成了实测的谱线底部更宽。

而对于谱线峰值 H 这一参量进一步分析可以发现, 由于峰值很大程度上还取决于负高压的值, 并且在出射缝还原的计算中还原出的谱线与实际谱线也只是成比例的关系(这也正是最后高斯函数再乘以一个系数的原因), 因此 H 这一参量也显得不重要。鉴于在测量中可以通过改变负高压来改变谱线峰值高度, 甚至可以无视 H 的具体值, 只需保持各峰值之间比例一定来得出精细谱线。因此决定谱线宽度的 w 才是还原的重点。

3 钠灯双黄线还原

运用上述汞灯双黄线的还原方法, 尝试对钠灯双黄线进行还原。由于钠灯双黄线 $\Delta\lambda = 0.6$ nm 小于汞灯的 2.1 nm, 故测量中更容易出现双峰无法分辨的现象。还原过程与汞灯双黄线类似, 同样先采取积分值作差的方法进行出射缝还原(如图 10 所示, 方块数据点连成曲线为出入射缝均为 1.000 mm 时测得谱线, 三角为经出射缝还原的谱线, 此时尚未消除入射缝影响); 入射缝还原的过程中, 由于钠灯谱线非常窄, 峰值附近的数据点极少, 故并不能采取高斯函数拟合的方法, 而是直接按比例改变峰值附近数据横轴(波长)坐标得到精细谱线。图 11 为钠灯双黄线出射缝的还原结果, 可以发现还原的谱线与真实测得谱线相比吻合较好。

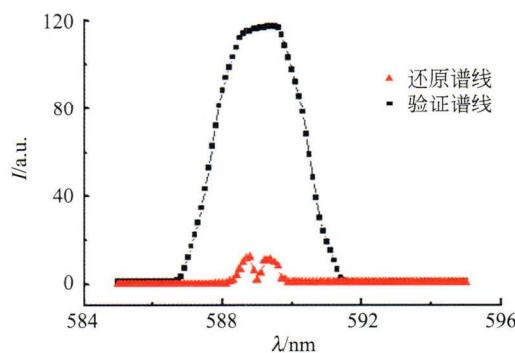


图 10 钠灯双黄线出射缝还原谱线图

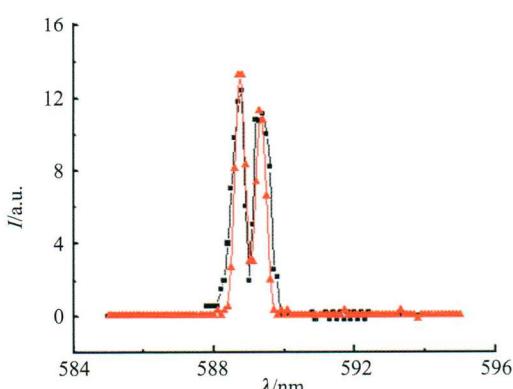


图 11 钠灯双黄线还原精细谱线与实测对比图

4 结束语

依次通过考虑出射缝效应计算积分差值进行出射缝还原和利用高斯函数对光谱的拟合进行入射缝还原 2 个步骤进行光谱的还原,用该方法将汞灯和钠灯在低分辨率条件下的 2 个光谱(均为单峰)成功还原成了双峰,并将理论还原的光谱与实测的光谱进行对比,二者吻合程度相当好,从而验证了该方法的准确性。该方法对解决光栅光谱仪实验中波长相近的谱线无法分辨的问题具有实际意义,很大程度上放宽了对于入射缝、出射缝宽度设置的要求,得到了由低分辨光谱理论计算真实精细光谱的方法,解决了光谱仪测量弱光光谱中光强与光谱精细度相矛盾的问题。还原谱线中

所用到的处理数据的方法对于今后的实验也具有参考。

参考文献:

- [1] 李国玉, 刘波, 郭团, 等. 基于线阵 InGaAs 光电二极管阵列的光纤光栅传感解调[J]. 光子学报, 2007, 36(9):1591-1594.
- [2] 陈思, 柯福顺, 乐永康. 光栅光谱仪的定标[J]. 物理实验, 2012, 32(3):44-46.
- [3] 陈少杰, 崔继承, 刘玉娟, 等. 高分辨率中阶梯光栅光谱仪精确装调与标定[J]. 光谱学与光谱分析 2012, 32(8):2280-2285.
- [4] 俞清华, 温志渝, 陈刚, 等. 基于微型光谱仪的微小型快速生化检测仪器设计与实验[J]. 光谱学与光谱分析, 2012, 32(3):854-857.
- [5] 许梦泽, 郭阳宽, 祝连庆, 等. 光栅单色仪中光谱重建的影响因素分析[J]. 光学仪器, 2014, 36(2): 112-115.
- [6] 杨晓冬, 李正灯, 李惠玲, 等. 光栅光谱仪入射与出射狭缝宽度对测量谱线线宽影响研究[J]. 嘉应学院学报, 2008, 26(6):38-41.
- [7] 肖跃. 反卷积光谱重建技术研究[D]. 南京: 东南大学, 2003:56-57.
- [8] 杨怀栋, 陈科新, 黄星月, 等. 光栅光谱仪的整体建模与分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2009, 29(1): 281-284.

Spectrum restoration of filter-grating infrared spectrometer

ZHANG Meng, WANG Zhong-jie, CEN Yan

(Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China)

Abstract: In spectrum measurement with filter-grating infrared spectrometer, the resolution of a received spectrum was greatly affected by the width of the entrance slit and the exit slit. Generally, large slit width would degrade the spectrum. To remove the influence of the entrance slit and the exit slit, some mathematical methods were adopted to process the received spectrum to restore the original spectrum. In this work, using the mathematical relations between the spectrum, incident slit and exit slit, the influence of the slits were removed, and the original spectrum was restored from the received spectrum directly.

Key words: filter-grating infrared spectrometer; slit width; spectrum reconstruction

[责任编辑:郭伟]