

文章编号: 1003-501X(2008)06-0042-06

紫外辐射计的波长定标及不确定度分析

王加朋^{1,2}, 王淑荣¹, 徐领娣^{1,2}, 宋克非¹, 林雪松¹,

黄煜^{1,2}, 汪龙祺^{1,2}, 王锐^{1,2}, 张振铎^{1,2}, 李福田¹

(1. 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所应用光学国家重点实验室, 长春 130031;

2. 中国科学院研究生院, 北京 100039)

摘要: 限于常规汞灯谱线法波长定标的局限性, 构建了紫外辐射计波长定标装置, 研究了紫外辐射计波长定标的物理过程和测量链, 并对紫外辐射计中臭氧十二个吸收波长进行了光谱定标, 通过对定标影响量的分析和计算, 得到定标影响量的测量不确定度和波长定标合成标准不确定度, 其中波长定标合成标准不确定度为 0.026 nm, 同时通过光学 CAD 分析和实验验证紫外辐射计的光谱带宽可以达到 1.0 nm。应用自行构建的紫外波长定标装置较好地完成了紫外辐射计臭氧吸收谱线的定标工作, 满足了臭氧反演所需的波长精度要求和光谱带宽要求。

关键词: 紫外辐射计; 波长定标; 定标不确定度; C-T 单色仪; 漫透射器

中图分类号: TH744.1

文献标志码: A

Wavelength Calibration for Ultraviolet Spectroradiometer and Analysis of its Uncertainty

WANG Jia-peng^{1,2}, WANG Shu-rong¹, XU Ling-di^{1,2}, SONG Ke-fei¹, LIN Xue-song¹,

HUANG Yu^{1,2}, WANG Long-qi^{1,2}, WANG Rui^{1,2}, ZHANG Zhen-duo^{1,2}, LI Fu-tian¹

(1. State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics,

Chinese Academy of Sciences, Changchun 130031, China;

2. Graduate School of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

Abstract: Referring to limitation of the conventional mercury lamp spectral calibration in ultraviolet wave band, a spectral calibration device was built for ultraviolet spectroradiometer. The physical process and measurement chain of spectral calibration were studied and twelve ozone absorptive spectral lines were calibrated. The measurement uncertainty and combined standard uncertainty of influenced quantities of wavelength calibration were analyzed and the combined standard uncertainty was 0.026nm. Spectral bandwidths can reach 1.0nm according to the analysis of optical CAD and experiment results. The spectral calibration system does well in ultraviolet spectral calibration for spectroradiometer. The calibrated results satisfy the spectral precision for ozone retrieval.

Key words: ultraviolet spectroradiometer; wavelength calibration; calibration uncertainty; C-T monochromator; transmissive diffuser

1 引言

紫外辐射计为风云三号气象卫星上的紫外光学遥感仪器之一。它的主要任务是进行太阳紫外光谱辐照度/太阳后向散射紫外光谱辐亮度测量(太阳模式测量/大气模式测量)并通过数据反演, 得到臭氧含量的垂直

收稿日期: 2007-07-10; 收到修改稿日期: 2008-01-10

基金项目: 国家自然科学基金资助(40675083)

作者简介: 王加朋(1980-), 男(汉族), 吉林长春人, 博士生, 主要研究方向为真空紫外遥感仪器。E-mail: wjp1009@126.com

分布,为气象预测和全球气候变化的研究提供重要的参数^[1-2]。它能够在 250~340 nm 间对 12 条臭氧吸收谱线处地球大气的太阳后向散射紫外光谱辐亮度实现观测,根据臭氧反演要求,12 条臭氧吸收谱线要求有一定的波长精度,指标为 ± 0.05 nm,带宽 1.1 nm。紫外辐射计为艾伯特—法斯蒂(Ebert-Fastie)光栅双单色仪,步进电机和凸轮机构带动光栅转动实现波长扫描。凸轮机构的加工误差、光学和机械结构的最后装调误差、环境温度的变化、机构空回、摩擦力、电子系统噪声等随机因素都会影响输出波长的精度^[3]。

光谱定标的任务是确定各通道的光谱中心波长位置和通过特性(等效通带宽度和通带函数)。常用的光谱仪波长定标方法为低压汞灯特征谱线法。汞灯特征谱线群中没有与大气特征谱线重合的谱线,因此需要通过更高精度的光谱辐射源实现紫外辐射计的波长定标。本试验构建了高光谱分辨力紫外波长定标装置,不仅解决了依靠汞灯特征谱线定标的局限性,而且解决了由于紫外波段能量弱而引发的一系列问题。

2 构建高光谱分辨力紫外辐射计波长定标装置

紫外辐射计由于自身波长机构的加工误差、机械空回、环境温度变化、电子学系统噪声等因素具有一定的波长非线性。仅由常规的低压汞灯谱线法并不能满足紫外辐射计臭氧 12 条吸收谱线的高精度波长定标要求。因此自行构建了高光谱分辨力紫外辐射计波长定标装置,见图 1。

该系统主要由具有高稳定性的大功率氙灯系统和高光谱分辨力的切尔尼—特纳(Czerny-Turner)型非对称式单色仪^[4]以及后置光学系统组成。C-T 单色仪光源为 500 W 风冷滨松氙灯,采用单透镜照明方式。单色仪工作波段为 200~840 nm,准直镜和成像镜焦距均为 1.5 m, K9 玻璃材料,镜表面镀 Al + MgF₂ 膜,250~400 nm 波段镜面光谱反射率高于 80%。单色仪为避免二次衍射和多次衍射采用 Carry 理论确定最小离轴角。其中 100 mm×100 mm 光栅频率为 1 200 grooves/mm,表面镀 Al + MgF₂ 膜,光谱分辨力 0.007 nm。步进电机驱动正弦机构实现光栅转动。

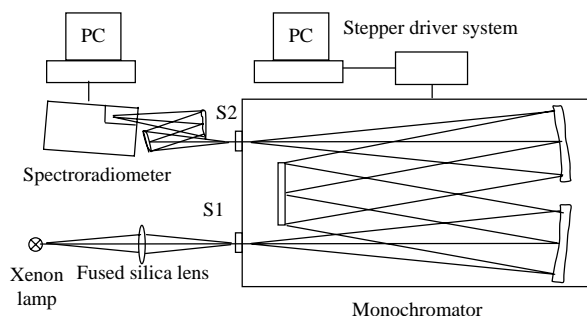


图 1 紫外辐射计波长定标的仪器布置图

Fig.1 Illustration of wavelength calibration for ultraviolet Spectroradiometer

为去除紫外辐射计在光路中的角度偏差即由不同光辐射入射角度而引起的角度响应,在紫外辐射计入射狭缝前放置石英材料的漫透射器提供均匀光辐射以消除仪器的角度响应。

紫外辐射计由于机械结构的限制无法与单色仪的出射狭缝实现对接,因此综合考虑光学系统像差和能量需求,利用两块离轴抛物面反射镜设计了 $F\#=5$ 的后置光学系统^[5-6],使单色仪出射辐射投射到紫外辐射计前置漫透射器上,在紫外辐射计入射狭缝处形成均匀辐射。

3 C-T 单色仪自身波长定标

高光谱分辨力的 C-T 单色仪是紫外辐射计波长定标系统的主要部分。在使用前也需要对其进行波长定标。C-T 单色仪波长定标单元包括低压汞灯、石英聚光镜、光电倍增管探测器(EMI9558QB)、光电倍增管高压电源、静电计放大器 Keithley 617、波长扫描控制器及计算机,图 2 为 C-T 单色仪波长定标的仪器布置图。

作为波长定标光源的笔形汞灯或 Philips 汞灯,经石英透镜聚焦,照明单色仪的入射狭缝。经单色仪出射狭缝出射的单色辐射由光电倍增管接收,转变为电信号,随后馈送给静电计放大器,进行 A/D 转换,在计算机操作程序控制下通过 IEEE-488 接口进行数据采集。同时,在计算机操作程序控制下通过步进电机驱动器驱动 C-T 单色仪波长扫描步进电机,转动单色仪正弦机构的精密丝杠,进而转动光栅,完成光谱扫描,绘出光谱图。步进电机步长当量约为 0.001 648 nm/步,即步进电机每走一步,就带动光栅转动使出缝处波长位移 0.001 648 nm,完全小于紫外辐射计步进电机步长当量(0.035 nm),满足应用高光谱分辨力的 C-T

单色仪进行紫外辐射计波长定标的基本要求。

通过重复测量低压 Philips 汞灯 275.278 nm 谱线得知 C-T 单色仪波长重复性好于 ± 0.009 nm, 见图 3。用汞灯六条特征谱线对 C-T 单色仪进行波长定标, 零位修正之后, C-T 单色仪波长精度为 ± 0.023 nm, 见图 4。以上波长定标结果表明: 波长精度优于 ± 0.023 nm 和波长重复性好于 ± 0.009 nm 的 C-T 单色仪完全满足紫外辐射计的波长定标要求(紫外辐射计波长精度为 ± 0.05 nm)。

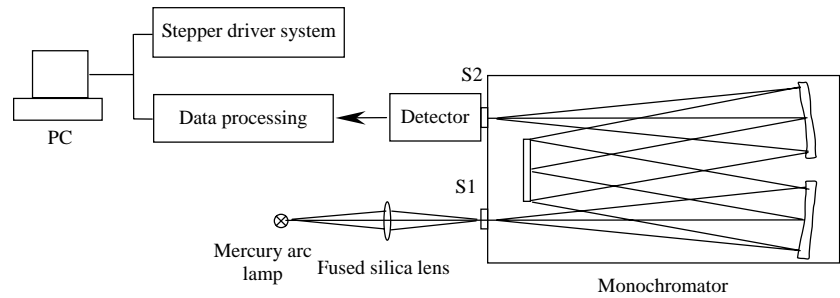


图 2 C-T 单色仪波长定标的仪器布置图
Fig.2 Illustration of wavelength calibration for C-T monochromator

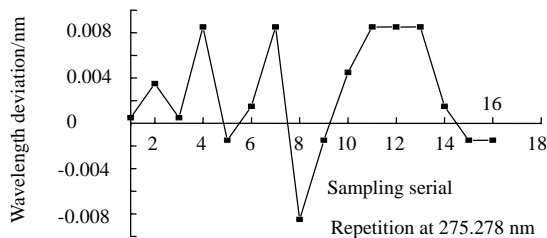


图 3 C-T 单色仪波长重复性曲线
Fig.3 Curve of wavelength repeatability in C-T monochromator

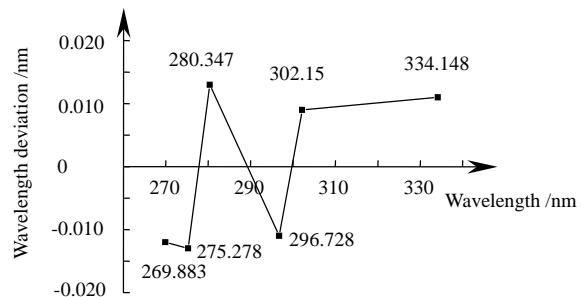


图 4 用汞灯六条特征谱线进行 C-T 单色仪波长定标的波长精度曲线
Fig.4 Curve of wavelength precision in C-T monochromator

4 紫外辐射计中十二个臭氧吸收谱线的波长定标

4.1 紫外辐射计中十二个臭氧吸收谱线的中心波长

为了提高波长定标的精度, 紫外辐射计波长定标前氙灯预热半小时, 同时保证室温(20 ± 3)。如图 1 所示, 氙灯光源经石英透镜照明 C-T 单色仪的入射狭缝, 在计算机指令的控制下光栅转动在出射狭缝处相继出射 12 个特征波长的单色辐射。经过后置光学系统将紫外辐射传递到紫外辐射计前置石英漫透射器上, 紫外辐射计启动光谱扫描测量程序, 人工判读中心波长位置和光谱带宽。表 1 为紫外辐射计读数与标准波

表 1 紫外辐射计读数与标准十二个特征波长偏差

Table 1 Deviation between readings and standard 12 wavelength nm			
12 wavelength	First time	Second time	Third time
252.000	0.006	0.006	0.007
273.620	-0.019	-0.006	-0.005
283.100	-0.006	-0.005	-0.001
287.700	0.006	-0.005	0.003
292.290	0.018	-0.005	0.007
297.590	0.012	-0.006	0.005
301.970	-0.016	-0.006	-0.004
305.870	0.001	0.018	0.009
312.570	-0.018	-0.018	-0.009
317.560	-0.019	0.006	-0.001
331.260	-0.005	-0.005	0.000
339.890	-0.009	0.006	0.002
Calibration error	0.006	0.006	0.007

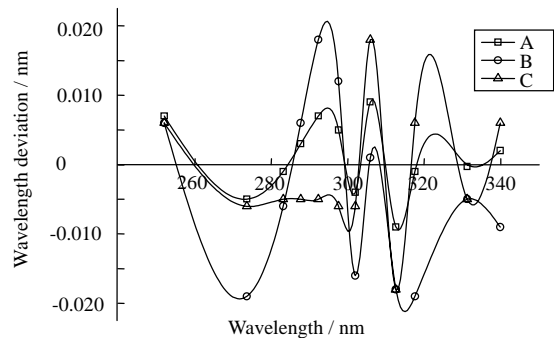


图 5 紫外辐射计 12 条臭氧吸收谱线
波长定标结果
Fig.5 Result of 12 ozone absorptive spectrums calibration
for ultraviolet spectroradiometer

长偏差数据，图 5 为波长偏差数据的三次样条插值曲线。由图 5 可见，紫外辐射计三次扫描测量单色仪发送的 12 个特征波长的偏差曲线走向大致相同，但由于仪器的重复性和各种影响因素所限，各测量曲线间存在一定的偏差。其中曲线 B 在长波范围内与曲线 A 和 C 偏差较大，但偏差在 $\pm 0.02\text{ nm}$ 以内。如果中心波长位置偏差超过 $\pm 0.05\text{ nm}$ ，需要紫外辐射计在软件上进行修正。

4.2 紫外辐射计中十二个臭氧吸收谱线的光谱通带宽度

应用光学 CAD 软件(Code-V)对这一光栅双单色仪进行过性能评价，得到单色仪光学系统固有特性对光谱分辨力的影响及实际输出的光谱带宽。单色仪带宽 $\Delta\lambda$ 可表示为

$$\Delta\lambda = (\Delta\lambda_0^2 + \Delta\lambda_s^2)^{1/2} \tag{1}$$

它由单色仪的固有光谱分辨力 $\Delta\lambda_0$ 和狭缝开启宽度所对应的光谱增宽 $\Delta\lambda_s$ 决定。式中固有光谱分辨力 $\Delta\lambda_0$ 可表示成：

$$\Delta\lambda_0 = (\Delta\lambda_1^2 + \Delta\lambda_2^2 + \Delta\lambda_3^2 + \Delta\lambda_4^2)^{1/2} \tag{2}$$

其中： $\Delta\lambda_1$ ， $\Delta\lambda_2$ ， $\Delta\lambda_3$ 和 $\Delta\lambda_4$ 分别代表光栅衍射分辨力、光学系统像差、谱线弯曲及加工误差对光谱分辨力的影响。表 2 给出紫外辐射计 1.2 mm 缝宽所对应的光谱带宽、单色仪光学系统固有特性对光谱分辨力的影响及实际输出的光谱带宽。

表 2 单色仪光学系统固有特性对光谱带宽的影响

Table 2 Influence of inherent characteristic in monochromator to spectrum bandwidth

Wavelength λ /nm	120	160	340	400
$\Delta\lambda_s$ (Slit width=1.2 mm)	0.974	0.965	0.890	0.852
Grating theoretical resolution $\Delta\lambda_1$ / nm	0.000 5	0.000 67	0.001 42	0.001 67
$\Delta\lambda_2$ / nm	Blur circle/ mm	0.1	0.14	0.14
	$\Delta\lambda_2$ /nm	0.11	0.11	0.104
$\Delta\lambda_3$ /nm	Straight slit η =12.5 mm	0.029	0.042	0.093
	Curve slit(r =207 mm) η =12.5 mm	0.047	0.034	0.024
Machining error $\Delta\lambda_4$ / nm		0.02	0.02	0.02
$\Delta\lambda_0$ / nm		0.121	0.117	0.109
$\Delta\lambda$ / nm		0.981	0.972	0.897

由列表数据可以看出：像差、谱线弯曲、机加工误差引起光谱分辨力损失 0.1 nm，当入缝和出缝宽度取为 1.2 mm 时光谱宽度约为 1.0 nm。光学设计结果表明：所选用的光栅双单色仪方案其光谱带宽可达 1.0 nm。本试验的光谱带宽数据表 2 也证明了这一点。

表 3 紫外辐射计测量十二特征波长带宽数据

Table 3 Bandwidth data of 12 characteristic wavelengths in ultraviolet spectroradiometer. nm

Center wavelength	Required FWHM	Spectral FWHM			Average	Standard deviation
		First time	Second time	Third time		
252.00	1+0.2,-0	1.167	1.156	1.167	1.16	0.01
273.62	1+0.2,-0	1.143	1.106	1.119	1.12	0.02
283.10	1+0.2,-0	1.156	1.131	1.144	1.14	0.01
287.70	1+0.2,-0	1.143	1.119	1.119	1.13	0.01
292.29	1+0.2,-0	1.119	1.107	1.131	1.12	0.01
297.59	1+0.2,-0	1.131	1.107	1.119	1.12	0.01
301.97	1+0.2,-0	1.131	1.095	1.119	1.12	0.02
305.87	1+0.2,-0	1.119	1.107	1.106	1.11	0.01
312.57	1+0.2,-0	1.143	1.131	1.107	1.13	0.02
317.56	1+0.2,-0	1.107	1.095	1.095	1.10	0.01
331.26	1+0.2,-0	1.095	1.095	1.071	1.09	0.01
339.89	1+0.2,-0	1.083	1.071	1.059	1.07	0.01

5 波长定标的影响量及其不确定度分析

在仪器的测量标定过程中,存在一些不确定因素(如由光源照明引起的仪器波长不确定度、单色仪波长重复性和精度、后置光学系统引进的波长误差、紫外辐射计自身的不确定因素等),直接或间接地影响着最终测量结果的可靠性。下面对波长定标的影响量进行不确定度分析。

5.1 单色仪波长定标不确定度

1) 低压汞灯采用美国国家辐射计量实验室标准,波长不确定度小于 $u_1=0.000\ 1\ \text{nm}^{[7]}$ 。

2) 单色仪波长重复性和波长非线性:主要由仪器理论误差、内部杂散光、机械空回、齿轮丝杠传动误差、电路系统噪声和谱线中心波长读数误差引起。具体分析起来很困难,因此根据单色仪的定标数据,采用 A 类不确定度,由多次测量的低压汞灯谱线(275.278 nm)计算得到其重复性标准不确定度 $u_1=0.005\ \text{nm}$,由单色仪测量低压汞灯六条特征谱线的偏差得到其波长非线性标准不确定度 $u_2=0.012\ \text{nm}^{[8-9]}$ 。

5.2 漫反射白板 and 漫透射器光谱偏差

紫外辐射计在轨大气工作模式下,仪器直接对天底观测,大气层相当于理想的漫透射器。本实验在紫外辐射计入射狭缝处装置的石英漫透射器近似符合朗伯特特性。在利用 C-T 单色仪高精度定标之前,紫外辐射计在其太阳模式下利用汞灯的 6 条谱线预先进行了波长定标,是采用汞灯直接照射紫外辐射计铝漫反射板进行定标的。虽然铝漫反射板和石英漫透射器的辐射特性都可近似为朗伯体,但是二者是存在差异的。经实际测试得出二者偏差不确定度约为 $u_3=0.001\ \text{nm}$ 。

5.3 紫外辐射计的不确定度

紫外辐射计本身由于内部光学系统、凸轮摆杆机构、探测器、A/D 变换及数据处理部分存在不可靠因素,导致测量结果的发散性。为消除实际中这些不确定因素带来的偶然误差,我们采用多次采样取平均的方法。此外,波长定标环境、探测器的温度、大气吸收与散射、探测器光谱灵敏度的稳定性等也会给测量结果带来一定的影响。此外,光谱定标还受漫透射板的制作工艺水平的影响。经实验多次测量紫外辐射计在低压汞灯谱线 253.652 nm 下的波长偏差,确定由紫外辐射计波长重复性引进的定标不确定度为 $u_4=0.023\ \text{nm}$ 。根据以上紫外辐射计波长定标不确定度分析以及 NIST 的 TN1297 综合不确定度公式^[10]:

$$u_c^2(y) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2 \cdot u^2(x_i) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial f}{\partial x_j} \cdot u(x, y) \quad (3)$$

由于每个不确定度之间并不相关,式(3)改为如下:

$$u_c^2(y) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial y}{\partial x_i} \right)^2 \cdot u^2(x_i) \quad (4)$$

其自由度按式(5)计算

$$\nu = \frac{u_c^4}{\sum_{i=1}^N u_i^4 / \nu_i} \quad (5)$$

经计算,得到紫外辐射计波长定标合成标准不确定度和自由度,见表 4。

表 4 紫外辐射计波长定标不确定度源和合成标准不确定度及其自由度

Table 4 Uncertainties sources of wavelength calibration, overall uncertainty and freedom

Uncertainty component	Uncertainty /nm	Freedom
Mercury lamp standard wavelength	0.0001	
Repeatability of monochromator	0.005	15
Nonlinearity of monochromator	0.012	5
Differences between two diffusers	0.001	5
Repeatability of ultraviolet radiometer	0.023	14
Overall uncertainty	0.026	28 911

结束语

基于紫外辐射计高精度光谱定标需求,构建了紫外光谱定标装置,并对紫外辐射计中 12 条臭氧吸收谱线进行了光谱定标,通过对定标过程的测量链进行不确定度分析,得出定标合成标准不确定度优于 0.026 nm 的结论。其中紫外辐射计的光谱带宽也达到了 1.0 nm。满足了臭氧反演所需的波长精度要求和光谱带宽要求。光谱定标的实验结果证明了这种定标方法的可行性与可靠性。此次定标受到实际条件的限制,今后在 C-T 单色仪波长精度和仪器照明方式以及杂散光屏蔽水平方面还有望进一步提高,从而减小仪器的定标总不确定度。

参考文献：

- [1] Health D F, Krueger A J. The Solar Backscatter Ultraviolet and Total Ozone Mapping Spectrometer (SBUV/TOMS) for NIMBUSG [J]. **Optical Engineering**, 1975, 4(4): 323-331.
- [2] 黄煜. 臭氧垂直探测仪辐射定标的研究[D]. 长春: 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 2007.
HUANG Yu. Study on Radiometric Calibration of Ozone Vertical Detector [D]. Changchun: Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, 2007.
- [3] 林雪松. 臭氧垂直探测仪波长精度和油膜润滑技术的研究[D]. 长春: 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 2007.
LIN Xue-song. Study on Wavelength Accuracy and Lubrication Technology of Ultraviolet Ozone Vertical Probe [D]. Changchun: Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, 2007.
- [4] 林中, 范世福. 光谱仪器学[M]. 北京: 机械工业出版社, 1989.
LIN Zhong, FAN Shi-fu. **Spectrometer** [M]. Beijing: Mechanics Industry Press, 1989.
- [5] Geary J M. **Introduction to Lens Design: with Practical Zemax Examples** [M]. California: Willmann-Bell Publishing Company, Inc, 2002.
- [6] 袁旭沧. 光学设计[M]. 北京: 机械工业出版社, 1983.
YUAN Xu-cang. **Optical Design** [M]. Beijing: Mechanics Industry Press, 1983.
- [7] Joseph Reader, Corliss Charles H. **Wavelengths and Transition Probabilities for Atoms and Atomic Ions** [M]. Washington, D. C, USA: Center for Radiation Research, National Measurement Laboratory, 1980.
- [8] 费业泰. 误差理论与数据处理[M]. 北京: 机械工业出版社, 2005.
FEI Ye-tai. **Error Principle and Data Processing** [M]. Beijing: Mechanics Industry Press, 2005.
- [9] 李慎安. 测量不确定度表达 10 讲[M]. 北京: 中国计量出版社, 1999.
LI Shen-an. **Chapter of Expression of Uncertainty in Measurement** [M]. Beijing: China Metrology Publishing House, 1999.
- [10] 周磊, 郑小兵. 高精度分光光度计测量光谱透射率[J]. 光电工程, 2006, 33(12): 32-38.
ZHOU Lei, ZHENG Xiao-bing. High-accuracy Spectrometer for Measurement of Spectral Transmissivity [J]. **Opto-Electronic Engineering**, 2006, 33(12): 32-38.