

单光束紫外分光光度计波长准确度分析与修正

陈建波^{1,2} 林冠宇¹ 杨小虎¹

(1.中国科学院长春光学精密机械与物理研究所,吉林长春 130033; 2.中国科学院大学,北京 100049)

摘要: 为了提高单光束紫外分光光度计的波长准确度,基于光栅色散原理对影响紫外分光光度计系统波长输出准确度的各项因素及特征进行了分析,提出了将结构修正与光学定标修正相结合的综合波长修正方法。利用该综合修正方法对研制的单光束紫外分光光度计进行波长修正,修正后在 100~400 nm 波段范围内的波长精度由 ± 0.2 nm 提高到 ± 0.07 nm。实验结果证明了单光束紫外分光光度计波长准确度分析的合理性以及结构修正与光学定标修正相结合的综合波长修正方法的有效性。

关键词: 分光光度计; 波长准确度; 波长精度; 波长修正; 凹面光栅

中图分类号: TP212 文献标识码: A 文章编号: 1002-1841(2023)02-0027-07

Analysis and Correction of Wavelength Accuracy of Single-beam UV Spectrophotometer

CHEN Jian-bo^{1,2}, LIN Guan-yu¹, YANG Xiao-hu¹

(1.Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China; 2.University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: In order to improve the wavelength accuracy of the single-beam UV spectrophotometer, the factors and characteristics affecting the wavelength output accuracy of the UV spectrophotometer system were analyzed based on the grating dispersion theory, and comprehensive wavelength correction method combining of structural correction and optical calibration correction was proposed. This comprehensive correction method was used to correct the wavelength of the single-beam UV spectrophotometer developed in the laboratory. After correction, the wavelength accuracy in the range of 100~400 nm was improved from ± 0.2 nm to ± 0.07 nm. The experimental results demonstrate the rationality of the wavelength accuracy analysis of the single-beam UV spectrophotometer and the effectiveness of the comprehensive wavelength correction method combining structural correction and optical calibration correction.

Keywords: spectrophotometer; wavelength accuracy; wavelength accuracy; wavelength correction; concave grating

0 引言

在紫外空间光学遥感仪器的研制中,需要对紫外光学元件本体的光谱透射率、光谱反射率、光谱偏振特性和光栅效率等光谱传输特性进行分析^[1-3]。紫外分光光度计是研究光学元件光谱传输特性的重要工具。波长准确度和光谱分辨力是分光光度计的重要指标,为了满足紫外分光光度计的波长准确度,需要对系统的波长准确度进行修正。

Seya-Namioka IV 型消像差凹面光栅成像质量好,结构简单,能量利用率高,是目前紫外分光光度计系统的主流分光设计方案,其波长和光栅转角的关系呈正弦关系。因此对光栅的驱动常采用正弦机构、凸轮机

构或余割杠杆机构,其波长输出准确度取决于扫描机构的加工精度和装调精度。

当光栅扫描机构在加工和装调过程中存在误差时,必然会对光度计系统的波长准确度造成影响。光度计系统的性能依赖于波长准确度,对光度计的波长准确度进行修正是值得思考问题。同类型的色散型光谱仪器采用波长精度修正方法一般从定标修正和结构修正 2 个方向出发^[4-6]。从定标修正出发, J. Cho 等在对基于 CCD 的光栅光谱仪研究时采用双三角函数对波长和像素的位置进行标定^[7];王明志等在对光栅色散性成像光谱仪分析时通过二次拟合函数对光谱通道的中心波长进行标定^[8]。采用三角函数和二次拟合函数对光栅光谱仪进行定标修正时依赖于标准谱线,定标修正的精度会受到标准谱线的数量和分布的影响,定标修正的共同缺点是在偏离标准谱线位置其波长精度会下降。从结构修正出发,王智宏等提

基金项目:国家重点研发计划项目(2018YFB0504600);中国电波传播研究所稳定支持科研经费资助项目(A132001W03)
收稿日期:2022-02-16

出基于粒子群寻优的光谱仪波长误差修正方法^[9],获得波长修正的杆长比参量,对便携式近红外光谱仪进行了修正,其他研究者在对光谱仪波长进行修正时多采用类似方法,但这种方法不能对光栅转角的零位偏差进行修正。许典等在双光栅光谱仪波长扫描机构精度分析中对光栅转角零位偏差进行了阐述^[10],其通过测量波长定标直线度来估计光栅转角零位误差的大小,并未提出针对性的消除方法。

本文针对研发的单光束紫外分光光度计,从光栅扫描机构的工作原理出发,推导出影响单色仪系统波长准确度的因素,并对其逐一分析建立结构修正和定标修正相结合的波长准确度综合修正方法,对包含光栅转角零位偏差在内的多项误差进行有效修正。

1 分光光度计单色仪系统的工作原理

紫外分光光度计系统利用单Ⅳ型全息凹面光栅进行分光,其优点是减少工作波段的反射次数,在提高能量传输效率的同时,有效减小系统体积和重量^[11]。

1.1 凹面光栅色散原理

凹面光栅色散原理为

$$d(\sin i \pm \sin \theta) = m\lambda \quad (1)$$

式中: d 为光栅刻线距; i 为入射光线和光栅法线的夹角; θ 为衍射光线和光栅法线的夹角; m 为衍射光谱的级次; λ 为光栅出射位置对应的波长。

当所使用的衍射光谱级次和入射光在法线同一侧时,式(1)中取正号;反之则取负号。光栅分光原理如图1所示。

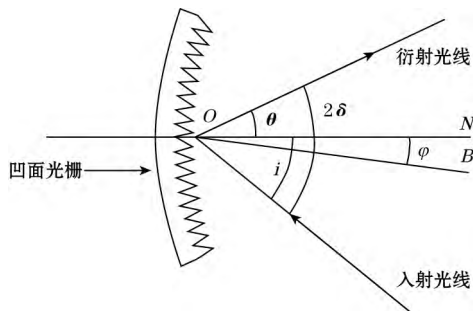


图1 光栅分光原理

图1中, ON 为光栅法线, OB 为出射光线和入射光线的角平分线, i 为入射光线和光栅法线的夹角, θ 为出射光线和光栅法线的夹角, φ 为光栅法线 ON 与 OB 的夹角, 2δ 为出射光线和衍射光谱的夹角。

采用异侧衍射光谱作为光度计分光系统的出射光^[12-13],则式(1)可以简化为

$$\sin i - \sin \theta = \frac{m\lambda}{d} \quad (2)$$

在式(2)中,本文对应的光度计系统, $m=1$, $d=1/1\ 200\text{ mm}$ 。

在图1中可以得到夹角 φ 、 δ 、 θ 、 i 之间的几何关系,入射角和出射角表示为:

$$\begin{cases} i = \delta + \varphi \\ \theta = \delta - \varphi \end{cases} \quad (3)$$

将式(3)代入式(2)进行化简得到波长关于光栅转角 φ 的关系式:

$$\lambda = \frac{2d\cos\delta}{m} \sin\varphi \quad (4)$$

式中:光栅衍射级次 $m=1$ 为定值;设 $a=2d\cos\delta/m$; $d=1/1\ 200\text{ nm}$ 为定值;入射光线和衍射光线的夹角 $2\delta=64^\circ$ 为定值。

则式(4)可以简化为

$$\lambda = a\sin\varphi \quad (5)$$

根据式(5)可知,只需要保证光栅转角的正弦值和波长成线性关系,就能够保证光度计系统的输入和输出的波长成线性关系。

1.2 正弦机构驱动原理

正弦机构驱动光栅转动的扫描方式如图2所示。卷簧拉紧摆杆使摆杆和滑块始终紧密接触,通过丝杠旋转带动滑块前后移动,并带动光栅轴摆杆及光栅转动,从而完成光谱扫描。本文分光光度计的工作波段 $\lambda=100\sim 400\text{ nm}$,对应光栅轴的转角 $\varphi=4.057\ 106\ 311^\circ\sim 16.439\ 504\ 25^\circ$ 。

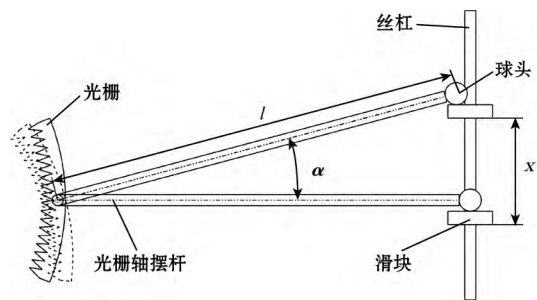


图2 正弦机构原理

在装调过程中,若将光栅轴摆杆垂直于丝杠,即入射光线和衍射光谱夹角角平分线位置和光栅法线位置重合,那么光栅轴摆杆转过的角度 α 和光栅法线 ON 与入射光线和出射光线角平分线 OB 的夹角 φ 始终相等^[14],可以得到关系式如下:

$$\sin\alpha = \sin\varphi = \frac{x}{l} \quad (6)$$

将式(6)代入式(4)得:

$$\lambda = \frac{2d \cos \delta}{ml} x \quad (7)$$

在式(7)中,光栅常数 d 、入射光线和衍射光线的夹角 2δ 、光栅衍射级次 m 、光栅摆杆长度 l 为常量,仅滑块位置 x 为变量。通过正弦机构将光谱扫描的输入量和输出量建立线性关系,简化了控制系统的控制关系,为波长扫描机构的扫描精度和重复性提供了理论保证。

2 光度计波长准确度分析和修正方法

2.1 影响光度计波长准确度的因素分析

当光栅衍射级次 $m=1$ 时,对式(7)的等号两边进行微分可得:

$$d\lambda = \frac{2d \cos \delta}{ml} dx + \frac{2d \cos \delta}{ml} x d\sigma - \frac{2xd}{ml} \sin \delta d\delta - \frac{2d \cos \delta}{ml^2} x dl \quad (8)$$

式中: dx 为光栅轴摆杆沿丝杠方向位移误差; $d\sigma$ 为光栅刻线引起的光栅常数误差; $d\delta$ 为光栅入射光线和衍射光谱的半角误差; dl 为光栅轴摆杆的长度误差。

根据式(8)可知,在光栅光度计中影响波长准确度的因素主要有 dx 、 $d\sigma$ 、 $d\delta$ 、 dl 。

将式(8)记为

$$\Delta\lambda = \Delta\lambda_1 + \Delta\lambda_2 - \Delta\lambda_3 - \Delta\lambda_4 \quad (9)$$

根据式(9)可以发现单色仪输出的波长误差由 4 个部分共同作用,即光栅轴摆杆沿丝杠方向的位移误差 Δx 引起的波长误差 $\Delta\lambda_1$; 光栅常数误差 $\Delta\sigma$ 引起的波长误差 $\Delta\lambda_2$; 光栅入射光线和衍射光谱半角误差 $\Delta\delta$ 引起的波长误差 $\Delta\lambda_3$; 光栅轴摆杆长度 Δl 引起的波长误差 $\Delta\lambda_4$ 。

2.1.1 丝杠位移误差引起的波长误差 $\Delta\lambda_1$

光栅轴摆杆沿丝杠方向的位移误差主要包括以下 5 个因素: 丝杠螺距累积误差、丝杠轴向支撑间隙误差、丝杠螺母空回误差、滑块和光栅轴摆杆接触面倾斜产生的滑动面倾斜误差、光栅轴摆杆零位偏差。

光度计分光系统采用丝杠定位,其中丝杠螺距累积误差体现在光栅轴摆杆沿丝杠方向上的位移误差,记此项误差为 x' 。这部分产生的误差为

$$\Delta\lambda_{1x'} = \frac{2d \cos \delta}{ml} x' \quad (10)$$

丝杠轴向支撑间隙误差通过结构的设计可以消除,同时对于丝杠螺母空回误差,如果不考虑光度计的反向读数,此项误差也可以不予考虑。

丝杠上滑块和光栅轴摆杆倾斜产生的误差记为滑动面倾斜误差,主要体现在光栅轴摆杆沿丝杠方向

的位移误差,其误差形式大致如图 3 所示。摆杆初始位置为 OA , 光栅轴摆杆转过角度 α 时处于 OC 位置,当丝杠滑块和光栅轴摆杆球头处于理想位置时,滑块在丝杠上的位移为 x ,当丝杠摆杆球头和丝杠上滑块的滑动面存在倾斜时,滑块在丝杠上的位移为 x_0 。当光栅轴摆杆处于同一角度时,由于滑动面倾斜角 θ 产生的位移误差 BC 为

$$BC = l \tan \theta (1 - \cos \alpha) \quad (11)$$

可以得到当光栅转角为 α 时的波长和由滑动面倾斜引起的误差为:

$$\lambda_{1\theta} = \frac{2d \cos \delta}{ml} x + \frac{2d \cos \delta \tan \theta}{m} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{x^2}{l^2}} \right) \quad (12)$$

$$\Delta\lambda_{1\theta} = \lambda - \lambda_{1\theta} = \frac{2d \cos \delta \tan \theta}{m} \left(\sqrt{1 - \frac{x^2}{l^2}} - 1 \right) \quad (13)$$

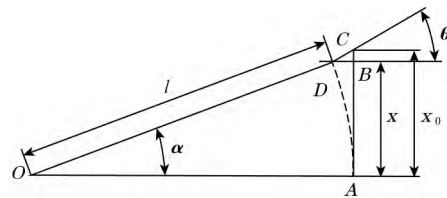


图 3 滑动面倾斜误差

由 1.2 节可知,式(7)成立条件为在光栅轴摆杆和丝杠垂直时,即滑块处于零位时,入射光线和衍射光谱角平分线和光栅法线重合。但在实际加工装调过程中,光栅轴摆杆零位偏差不可避免,假设光栅轴摆杆零位偏差为 α' ,即入射光线和衍射光谱的角平分线与光栅法线之间存在的初始零位偏差为 α' 。那么式(6)可以写为

$$\begin{aligned} \sin(\alpha + \alpha') &= \sin(\varphi + \alpha') \\ &= \frac{x}{l} \cos \alpha' + \sqrt{1 - \frac{x^2}{l^2}} \sin \alpha' \end{aligned} \quad (14)$$

在引入光栅轴摆杆零位偏差后,可以得到光栅轴摆杆末端沿丝杠方向位移和波长的关系式为:

$$\lambda_{1\alpha'} = \frac{2d \cos \delta}{ml} x \cos \alpha' + \frac{2d \cos \delta}{ml} \sqrt{l^2 - x^2} \sin \alpha' \quad (15)$$

$$\Delta\lambda_{1\alpha'} = \lambda - \lambda_{1\alpha'} = \frac{2d \cos \delta}{ml} x (1 - \cos \alpha') - \frac{2d \cos \delta}{ml} \sqrt{l^2 - x^2} \sin \alpha' \quad (16)$$

根据式(16)可以看出,光栅轴摆杆零位偏差对波长的准确度和线性度均存在影响,单纯通过调节摆杆长度并不能对由光栅轴摆杆零位偏差引起的误差进行补偿,在误差修正过程中必须对光栅轴零位偏差进行修正,从而达到误差抵偿的目的。

通过式(16)计算由零位偏差引起的误差比较复杂,根据 $\sin\alpha = \sin\varphi$,由式(4)得:

$$\Delta\lambda_{1\alpha} = \frac{2d\alpha'\cos\delta}{ml}\cos\alpha \quad (17)$$

根据式(17)对零位偏差引起的误差进行计算。

2.1.2 光栅常数误差引起的波长误差 $\Delta\lambda_2$

光栅常数误差引起的波长误差 $\Delta\lambda_2$ 可表示为

$$\Delta\lambda_2 = \frac{2\cos\delta}{ml}x\Delta\sigma \quad (18)$$

根据式(18)可知光栅常数引起的波长误差主要取决于光栅常数误差 $\Delta\sigma$,在光度计系统中采用光栅为一块单光栅,光栅常数误差是不会发生改变的,因此光栅常数误差引起的波长误差为系统误差,其大小与光栅轴摆杆沿丝杠方向的位移呈线性关系。

2.1.3 入射光线和衍射光谱的半角误差引起的波长误差 $\Delta\lambda_3$

入射光线和衍射光谱的半角误差引起的波长误差 $\Delta\lambda_3$

$$\Delta\lambda_3 = -\frac{2d\sin\delta}{ml}x\Delta\delta \quad (19)$$

在光度计的光栅装配过程中,采用高精度的水平仪和经纬仪对光栅进行辅助装配,可使入射光线和衍射光谱之间的夹角精确达到 64° ,其可能存在较小的随机误差。且光栅装配完成后便进行固定,因此入射光线和衍射光谱之间的半角误差为定值。根据式(19)可以发现,由入射光线和衍射光谱的半角误差引起的波长误差与光栅轴摆杆沿丝杠方向的位移误差呈线性关系。

2.1.4 光栅轴摆杆长度引起的波长误差 $\Delta\lambda_4$

光栅轴摆杆长度引起的波长误差 $\Delta\lambda_4$ 表示为

$$\Delta\lambda_4 = -\frac{2d\cos\delta}{ml^2}x\Delta l \quad (20)$$

根据式(20)可以看出,光栅摆杆长度对波长误差的影响表现在摆杆长度的变化对波长误差的影响是线性的,在前述中可以发现丝杠螺距累积误差、光栅常数误差、入射光线与衍射光谱半角误差对波长误差的影响同样是线性的。在一般设计中,将光栅轴摆杆长度设计成可调形式对波长误差进行修正,对此这部分摆杆长度引起的误差可以不考虑。

2.2 光度计波长准确度修正方法

由分析可知,根据误差消除方法的不同,将引起光度计波长准确度的误差分为3种:

误差变化和光栅轴摆杆末端在丝杠上位移呈线性关系的误差,由于光度计的定标曲线为线性曲线,因此

这部分误差在后期确定定标曲线时可消除,代表性误差为光栅常数误差和入射光线和衍射光谱的半角误差;

误差关系变化在整个光谱范围内不呈线性规律,在误差修正过程中需要使用综合方法进行修正的误差,代表性误差为滑动面倾斜产生的误差和光栅轴摆杆零位偏差。

误差变化规律和机械件本身相关,自身的误差变化规律难以确定,在其他误差消除后表现比较明显的误差,代表性误差为丝杠螺距累积误差。

根据以上分析,在误差修正过程中采用结构修正方法对滑动面倾斜误差、光栅轴摆杆零位偏差进行修正,采用定标修正方法对丝杠螺距累积误差进行修正。

2.2.1 基于光栅轴零位偏差参量的结构修正

在光度计线性关系的推导过程中,式(7)需要满足严格的限制条件:在出射光谱零级时光栅轴摆杆需要垂直于丝杠,满足入射光线和衍射光谱的角平分线和光栅平面法线重合的条件。在前面的分析中已经了解到如果光栅轴摆杆存在零位偏差,波长输出不呈现线性关系,而是一种复杂变化的关系,其表现在对波长线性和波长准确度方面的影响。

一般光度计均采用电机驱动,对此光栅轴摆杆零位偏差的结构修正步骤为:

(1) 在光度计组装完成后,对其进行波长定标,获得其输出波长和脉冲步数的理论曲线 $f_0(n)$ 。根据定标曲线计算出特征谱线 184.892、253.652、365.016 nm 时的波长误差 $\delta\lambda_0^2 = \sum \delta\lambda_{0i}$,记录电机步数 n_0 。

(2) 计算出射狭缝可以接收到 $\lambda = 253.625$ nm 波长信号时光栅的理论转角,并制作该角度的标准斜块。

(3) 松开光栅轴和光栅轴摆杆之间的连接,控制步进电机带动滑块到 $n_1 = n_0 + \Delta n$ 和 $n_2 = n_0 - \Delta n$ 位置处,使用标准滑块固定光栅角度,测定此时光度计的波长输出曲线 $f_1(n)$ 、 $f_2(n)$,并根据定标曲线分别计算出特征谱线 184.892、253.652、365.016 nm 时的波长误差的平方和 $\delta\lambda_1^2 = \sum \delta\lambda_{1i}$ 和 $\delta\lambda_2^2 = \sum \delta\lambda_{2i}$;

(4) 比较 $\delta\lambda_0^2$ 、 $\delta\lambda_1^2$ 、 $\delta\lambda_2^2$ 的大小判断误差变化的趋势;

(5) 根据误差变化的趋势取一定步数为间隔,按照步骤(3)测定此时的波长输出曲线,根据定标曲线分别计算出特征谱线 184.892、253.652、365.016 nm 时的波长误差的平方和 $\delta\lambda_i^2$;

(6) 比较步骤(5)中波长误差的平方和 $\delta\lambda_i^2$ 的大小对应的电机步数位置, 利用标准滑块固定光栅转角。

2.2.2 基于光栅轴摆杆杆长参量的结构修正

光栅轴摆杆零位偏差在经过结构修正后依然存在较小的误差值, 此项剩余误差可以通过在对滑动面倾斜误差的结构修正过程中予以修正, 在光栅轴摆杆零位偏差经过结构修正后可以认为此项误差和丝杠螺距累积误差相等, 即有:

$$\Delta\lambda_{1\alpha} = \Delta\lambda_{1x} = \frac{2d\cos\delta}{ml} x' \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \Delta\lambda_{1\theta} &= \frac{2d\cos\delta\tan\theta}{m} \left(\sqrt{1-\frac{x^2}{l^2}} - 1 \right) \\ &= \frac{2d\cos\delta\tan\theta}{m} \left(\sqrt{1-\frac{\lambda^2}{a^2}} - 1 \right) \end{aligned} \quad (22)$$

由式(22)可以看出, 在同一波长处由滑动面倾斜引起的误差为定值, 在误差计算中为定值 c 。

结合 2.1 节的分析, 可以得到光度计在同一波长位置的综合误差为

$$\begin{aligned} \Delta\lambda &= \Delta\lambda_{1\alpha} + \Delta\lambda_{1\theta} + \Delta\lambda_4 \\ &= -\frac{2d\cos\delta}{m} x \Delta l \left(\frac{1}{l^2} \right) + \frac{4\cos\delta}{m} x' \frac{1}{l} + c \end{aligned} \quad (23)$$

将式(23)进行简化可以发现光度计在同一波长位置波长误差为

$$\Delta\lambda = a \frac{1}{l^2} + b \frac{1}{l} + c \quad (24)$$

对此设计滑动面倾斜误差和光栅轴摆杆剩余零位偏差的结构修正方法为:

(1) 光栅轴摆杆设计为连续可调, 在杆长的调节范围内调节不同长度的光栅轴摆杆 l_i ;

(2) 在不同杆长下利用汞灯对光度计进行定标, 得到不同杆长下光度计的波长输出曲线 $f_i(x)$, 同时分别计算此波长输出曲线在波长为 184.892、253.652、365.016 nm 处的误差, 记为 $\delta\lambda_{1i}$ 、 $\delta\lambda_{2i}$ 、 $\delta\lambda_{3i}$;

(3) 根据光栅轴摆杆长度 l_i 和特征波长处的误差 $\delta\lambda_{1i}$ 、 $\delta\lambda_{2i}$ 、 $\delta\lambda_{3i}$, 建立起波长误差对应杆长的误差表达式 $f_{\lambda 1}(l)$ 、 $f_{\lambda 2}(l)$ 、 $f_{\lambda 3}(l)$;

(4) 杆长 l 与特征谱线误差平方和的关系式为:

$$f(l) = \sum_{i=1}^3 f_{\lambda i}^2(l);$$

(5) 计算各个特征点误差的平方和最小时 $f_{\min}(l)$ 所对应的杆长 l , 将光栅轴摆杆长度调节为对应的杆长, 即完成滑动面倾斜误差和光栅轴摆杆剩余零位偏

差的结构修正。

2.2.3 丝杠螺距累积误差的定标修正

丝杠螺距累积误差的特征和光度计选用丝杠本身的误差有关, 在光栅轴摆杆零位偏差和滑动面倾斜误差消除后丝杠螺距累积误差的表现特征比较明显。因此对丝杠螺距累积误差的消除, 可以通过观察其误差分布特征, 利用分段线性的方法对波长输出曲线进行拟合, 从而达到修正丝杠螺距累积误差的目的。

3 实验验证

3.1 光度计系统实验原理图

实验采用的紫外分光光度计系统测试方案如图 4 所示。

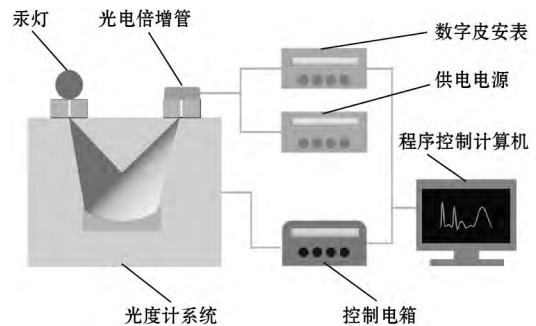


图 4 光度计系统测试方案

测试系统工作原理为, 利用程序控制计算机驱动光度计系统扫描汞灯光谱, 通过数字皮安表采集光电倍增管探测的单色仪系统输出信号。光度计系统参数光栅常数 $d = 1/1200$ mm, 入射光线和衍射光谱的夹角为 64° ; 光电倍增管型号为 McPHERSON Model 654; 数字皮安表型号为 Keithley 6485。

3.2 基于光栅轴摆杆零位偏差参量的结构修正

根据式(4)计算得到在输出波长为 253.652 nm 时, 光栅轴的转角为 10.33834148° , 制作斜块角度为 79.66° 。经过测定当斜块和光栅座紧密贴合时, 对应步进电机的步数为 $n_0 = 161261$, 为了观察误差的变化趋势, 在 $n_1 = 162000$ 、 $n_2 = 160000$ 时分别通过斜块调节光栅的角度。得到各特征谱线对应的波长误差平方和, 如表 1 所示。

表 1 n_0 、 n_1 、 n_2 对应特征谱线波长误差的平方和

电机步数	汞灯特征谱线/nm			误差平方和
	184.892	253.652	365.016	
160000	0.117369	-0.189345	0.0719758	0.0548078
161261	0.124916	-0.201487	0.0765707	0.0620646
162000	0.102029	-0.164654	0.0626246	0.0414430

步进电机带动丝杠一个节距的步数为 8000, 指标要求光度计的波长输出精度控制在 0.1 nm 以内, 对此

取步数间隔为5 000 得到测量数据如表 2 所示。

表 2 特征谱线波长误差的平方和

电机步数	汞灯特征谱线/nm			误差平方和
	184.892	253.652	365.016	
160 000	0.102 029 0	-0.164 654	0.062 624 6	0.041 443 0
155 000	0.084 237 1	-0.135 994	0.051 757 0	0.028 269 1
150 000	0.081 682 8	-0.131 877	0.050 195 1	0.026 583 4
145 000	0.081 352 0	-0.131 344	0.049 992 7	0.026 368 9
140 000	0.090 198 7	-0.135 374	0.055 400 8	0.029 531 3
135 000	0.091 119 3	-0.147 082	0.055 963 3	0.033 067 9
130 000	0.105 436 0	-0.170 139	0.064 702 6	0.044 250 5

根据表 2 可以看出 在电机步数145 000~150 000 的范围内调节 误差的平方和值变化不大 可认为在此范围内光栅轴摆杆零位偏差的影响基本被消除 在电机步数为145 000的位置利用滑块对光栅轴的角度进行调整 即完成光栅轴摆杆零位偏差的修正。

3.3 基于杆长参量的结构修正

根据滑动面倾斜误差和光栅轴摆杆剩余零位偏差的机械修正 在杆长可调节范围内(100~107 mm) 分别选用 6 个不同的杆长进行测试 得到 3 个汞灯特征谱线的测试结果误差 如表 3 所示。

表 3 不同杆长下的特征谱线误差

杆长值的倒数	汞灯特征谱线/nm		
	184.892	253.652	365.031
0.009 974 36	0.108 269 0	-0.082 467 2	0.146 284
0.009 922 21	0.082 393 0	-0.054 318 6	0.123 235
0.009 795 18	0.080 293 7	-0.022 635 8	0.143 822
0.009 610 94	0.085 618 9	-0.052 134 2	0.125 815
0.009 577 90	0.083 432 6	-0.044 064 9	0.128 864
0.009 343 34	0.091 060 6	-0.050 409 8	0.138 012

根据表 3 数据可以得到随杆长变化的汞灯特征谱线的误差表达式为:

$$f_{\lambda 1}(l) = 83\ 910.290x^2 - 1\ 616.514x + 7.915$$

$$f_{\lambda 2}(l) = 148\ 584.432x^2 - 2\ 862.425x + 13.866$$

$$f_{\lambda 3}(l) = -248\ 278.088x^2 - 4\ 775.230x - 22.998$$

根据在杆长为 l 时对应各个特征谱线误差的平方和 $f(l) = \sum f_{\lambda i}^2(l)$ 可以得到各个特征点误差的平方和最小时 $f_{\min}(l) = 0.024\ 8$ 时对应的杆长为 103.850 mm 将光栅轴摆杆长度调节为对应的杆长 即完成滑动面倾斜误差和光栅轴摆杆零位偏差的二次修正。

3.4 丝杠螺距累积误差的定标修正

经过 2 次修正后 对光度计仍利用汞灯特征谱线进行波长定标 采用一次线性曲线对波长输出进行拟合得到汞灯在特征谱线的误差 如图 5 所示。

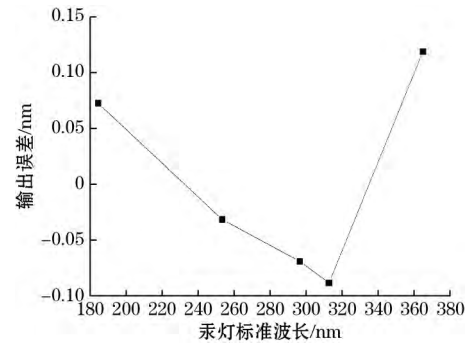


图 5 汞灯特征谱线误差

由图 5 可以发现 在对光度计的光栅轴零位偏差和滑动面倾斜误差进行修正后 最大误差和最小误差的差值为0.207 855 785 nm 且在 184.892 nm 和 365.016 nm 处误差均为正值误差 根据误差的分布特征可以认为产生误差的主要因素是丝杠螺距累积误差。从丝杠螺距累积误差的分布特征出发 采用分段函数光度计的定标曲线进行拟合。由于在 312~313 nm 处存在连续谱线 为避免其他特征谱线的干扰 选用 296.728 nm 的特征谱线作为分界点对波长输出曲线进行拟合 利用汞灯定标得到光度计的波长输出曲线。定标完成后扫描得到汞灯在光度计工作波长范围内一级光谱的输出误差 如表 4 所示。

表 4 波长准确度修正结果 mm

波长	测量均值	测量误差
184.892	184.941 136	0.049 136 6
253.652	253.582 486	-0.069 513 3
296.728	296.706 696	-0.021 303 3
302.150	302.136 173	-0.013 826 6
312.567	312.632 356	0.065 356 6
313.170	313.226 300	0.056 300 0
365.016	364.989 340	-0.026 660 0

在表 4 中 由于在 313 nm 处存在的汞灯光谱为 313.155 nm 和 313.184 nm 实验所用光度计的最低分辨力为 0.1 nm 因此可以认为此处光谱的中心位置为 313.170 nm。

通过表 4 可以看出 改变定标方法后 可以将光度计在其波长范围内的波长输出误差控制在 ± 0.07 nm 以内。

4 结束语

本文从光栅色散原理出发 对影响紫外分光光度

计系统波长准确度的因素进行了分析,包括光栅轴摆杆末端在丝杠上的位移误差、光栅常数误差、光栅轴摆杆长度误差、入射光线和衍射光谱的半角误差。通过误差分析后采用结构修正和定标修正的综合修正方法对影响光栅轴摆杆末端在丝杠上位移误差的因素(光栅轴摆杆零位偏差、丝杠滑块滑动面倾斜误差和丝杠螺距累积误差)进行了修正,使得光栅光度计的波长准确度提高到 ± 0.07 nm。

实验采用的综合误差修正方法,对双参量(光栅轴零位偏差参量和光栅轴摆杆长度参量)进行结构修正,结合分段线性的定标修正,保证了紫外分光光度计系统波长输出的准确度,对同类光栅光谱仪器波长准确度的修正具有借鉴意义。

参考文献:

- [1] 李博,王淑荣,黄煜. 球面镜真空紫外光谱反射率的高精度测量[J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(1): 277-281.
 - [2] 鞠学平. 通道型偏振光谱遥感器强度调制模块误差分析与修正研究[D]. 长春: 中国科学院大学(中国科学院长春光学精密机械与物理研究所), 2019.
 - [3] 李寒霜,李博,王淑荣. 空间紫外遥感光谱仪器偏振特性研究[J]. 光学学报, 2018, 38(1): 193-197.
 - [4] 郑伟,林日成,贾乐敏,等. 一种真空紫外光探测器的光谱响应标定系统及测试方法: CN110967111A [P]. 2020.
 - [5] 陈少杰. 宽波段叶阶梯光栅光谱仪设计与标定方法研究[D]. 长春: 中国科学院研究生院(长春光学精密机械与物理研究所), 2013.
 - [6] 朱继伟,孙慈,杨晋,等. 基于多项式拟合的中阶梯光栅光谱仪谱图还原[J]. 光学精密工程, 2020, 28(8): 1627-1633.
 - [7] CHO J, GEMPERLINE P J, WALKER D. Wavelength calibration method for a CCD detector and multichannel fiber-optic probes [J]. Applied Spectroscopy, 1995, 49(12): 1841-1845.
 - [8] 王明志,晏磊,杨彬,等. 光栅色散型成像光谱仪室内外光谱定标中心波长偏移研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2013, 33(8): 2280-2285.
 - [9] 王智宏,陈琛,千承辉,等. 基于粒子群寻优的光谱仪波长误差修正方法[J]. 仪器仪表学报, 2017, 38(10): 2430-2436.
 - [10] 许典,林冠宇,曹佃生,等. 双光栅光谱仪波长扫描机构精度分析[J]. 应用光学, 2017, 38(1): 24-30.
 - [11] 薛庆生,王淑荣,宋克非,等. 一种单光束紫外-真空紫外分光光度计的设计[J]. 光电工程, 2008(10): 102-106.
 - [12] 孙慈,杨晋,朱继伟,等. 超宽谱段高分辨率中阶梯光栅光谱仪的光学设计[J]. 光学精密工程, 2021, 29(1): 45-53.
 - [13] 魏焯艳,白先勇,张志勇,等. 太阳 CO 4.66 μm 光栅光谱仪的光学设计[J]. 光学精密工程, 2021, 29(9): 2009-2018.
 - [14] 曹佃生,林冠宇,杨小虎,等. 紫外双光栅光谱仪结构设计与波长精度分析[J]. 中国光学, 2018, 11(2): 219-230.
- 作者简介: 陈建波(1998—), 硕士研究生, 主要研究方向为紫外光学遥感仪器研究。E-mail: 1649716137@qq.com
- 通信作者: 林冠宇(1976—), 博士, 研究员, 主要研究方向为紫外光学遥感仪器研究。E-mail: linguanyv1976@163.com

(上接第 11 页)

- [9] 齐虹,丁文波,张松,等. 圆片级叠层键合技术在 SOI 高温压力传感器中的应用[J]. 传感器与微系统, 2019, 38(2): 154-156.
- [10] 李哲. 基于微泡结构的耐高温光纤法珀传感器关键技术研究[D]. 太原: 中北大学, 2018.
- [11] 姚宗,梁庭,张迪雅,等. 基于 SOI 的 MEMS 压阻式高温压力敏感芯片的研制[J]. 仪表技术与传感器, 2017(1):

15-18.

- [12] 袁方超. 车用高温压力传感器的设计与分析[D]. 南京: 南京航空航天大学, 2016.
- 作者简介: 王天靖(1998—), 硕士研究生, 主要研究方向为 MEMS 压力传感器的设计与封装。
E-mail: 1965972249@qq.com
- 梁庭(1979—), 副教授, 博士, 主要从事气体传感器和高温压力传感器方面的研究。