大口径光谱系统狭缝弯曲的分析与矫正

李 哲 余安澜 左都罗 王新兵

华中科技大学武汉光电国家实验室,湖北武汉 430074

摘要随着大口径光谱仪的发展,传统光谱仪中并不明显的狭缝弯曲越来越成为制约光谱仪分辨率的一大因素。 根据由离轴光线光栅方程获得的偏移量公式对狭缝弯曲进行矫正。为消除公式与实际图像不契合的问题,详细分 析了各装配误差对公式的影响,总结出相关矫正参数,并利用光谱线丰富的光源拟合出相关预矫正参数来消除装 配误差造成的影响,再结合偏移量公式对待处理光谱图像进行矫正。利用氖光谱灯拟合预矫正参数,对氪光谱灯 与汞蒸汽荧光灯进行了光谱测试,经矫正后光谱分辨率有很大改善,接近于光谱仪点源照射时的分辨率。 关键词 光谱学;狭缝弯曲矫正;离轴光线光栅方程;大口径光谱仪;图像矫正 中图分类号 0433.4 **文献标识码** A doi: 10.3788/AOS201535.0630004

Analysis and Correction of Slit Curvature in Spectrograph with High NA

Li Zhe Yu Anlan Zuo Duluo Wang Xinbing

Wuhan National Laboratory for Optoelectronics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, Hubei 430074, China

Abstract Slit curvature becomes an important factor which introduces the decline of spectral resolution in the developing of spectrograph with high NA. Slit curvature is corrected according to the correction formula obtained from the grating equation of off-axis ray. To cope with the problem that the real image of spectral lines usually deviate from the formula at ideal condition, calibration with a spectral lamp which has lines distributed across the full span of the spectrograph is used to fit out the assembly error parameters. Neon lamp is used to fit out these parameters, slit curvature in the spectral image of krypton lamp and fluorescent lamp of mercury vapor is corrected with these parameters. Resolution has be significantly improved, which is nearly close to the spectral resolution limit of the spectrograph when irradiated by a spot light source.

Key words spectroscopy; correction of slit curvature; grating equation of off-axis ray; spectrograph with high NA; image correction

OCIS codes 310.6170; 100.1220; 100.2960

1 引 言

光谱仪是一种对物质结构和成分进行观察、分析和处理的重要检测设备。主流的光谱仪大多是 Czerny Turner 结构^[1],这种经典的结构通常是由狭缝,两块共心球面反射镜与一块位于反射镜之间的反射光 栅构成。这种结构及其改进型具有结构简单、畸变小、无色散、分辨率高等优点而受到广泛应用^[2]。但由于 反射结构的固有缺点,其相对口径一般在 *f*/4 以下,很难有更大的相对口径以达到更高的灵敏度。随着体积 相位全息(VPH)光栅的发展以及商用化^[3],光谱仪的结构设计有了新的选择。使用大口径透镜与 VPH 光栅设 计光谱系统,与传统的 Czerny-Turner 结构相比有很多好处,如透射率高、衍射效率高、相对口径大、像差小、 灵敏度高等,特别适合微弱光信号分析,如气体自发拉曼光谱的探测^[4-5]。

收稿日期: 2015-01-30; 收到修改稿日期: 2015-03-10

基金项目:国家重大科学仪器设备开发专项资助课题(2012YQ16000702)

作者简介: 李 哲(1990—),男,硕士研究生,主要从事大口径光谱仪的设计与研制方面的研究。E-mail:563891338@qq.com 导师简介: 左都罗(1966—),男,博士,教授,主要从事激光技术与激光光谱等方面的研究。

E-mail:zuoduluo@mail.hust.edu.cn(通信联系人)

光学学报

这种透射式结构虽然在衍射效率、通光孔径、光透射率等方面比 Czemy-Turner 结构有很大的优势,但也有一些不足,如透射式结构只能探测固定的光谱范围,缺乏扫描的功能,而且使用大口径透镜会带来严重的狭缝弯曲。在 Czemy-Turner 结构中,由于相对口径较小,这种弯曲并不明显,对系统分辨率造成的影响有限。为获得更高的分辨率,传统采用反方向弯曲狭缝的方法¹⁶。在大口径的透射式结构中,狭缝弯曲程度急剧增加,将严重影响光谱系统的分辨率。本文将依据由离轴光线光栅方程得到的狭缝弯曲偏移量计算公式¹⁶⁻⁷⁷对狭缝弯曲进行矫正。为使公式与实际图像更加契合,首先分析了各装配误差对公式的影响,对偏移量公式进行了修正。其后利用修正的公式对光谱图像进行了矫正,并比较了纠正前后的光谱分辨率变化。结果表明,对光谱图像的矫正可有效地提高光谱仪的分辨率。

2 狭缝弯曲偏移量的理论分析

大口径光谱仪一般使用透镜作为准直与汇聚元件,一种典型的透射式透镜光谱仪系统如图1所示。



图1 透射式透镜光谱仪系统图

Fig.1 Transmission type lens spectrometer system

光谱仪在理想状态下,入射狭缝垂直于色散平面(即垂直于光栅刻线的平面,不同波长的光谱线在色散 平面内展开),电荷耦合器件(CCD)阵列探测器的行方向也与色散平面平行,并且准直光轴和汇聚光轴均与光 栅的色散平面平行。假设入射狭缝位于准直光轴的子午线上,准直光轴对应的入射角为 α ,入射狭缝上偏 离准直光轴所在色散平面高 h 处出发的光线对应的仰角为 γ ,则在这种理想情况下,波长 λ 干涉级次 m 出 射角度 β 的光线对应的离轴光线光栅方程为^[7]:

$$m\lambda = d\cos\gamma(\sin\alpha + \sin\beta), \qquad (1)$$

由此可以得到,狭缝上偏离准直光轴所在色散平面高 h 的点在光谱成像平面 CCD 探测器(假设准直系统焦距 f₁,汇聚系统焦距 f₂)的水平方向(CCD 探测器行方向, x 轴方向)偏移量为

$$p = f_2 \cdot \tan \left\{ \arcsin\left(\sin\alpha - \frac{m\lambda}{d}\right) - \arcsin\left|\sin\alpha - \frac{m\lambda}{d\cos\left(\arctan\frac{h}{f_1}\right)}\right| \right\}.$$
 (2)

但实际光谱仪在安装和使用过程中,与以上的理想状态可能存在一定的偏差。主要的偏差包括:1)光 栅平面安装可能存在偏折;2)仪器安装一般存在一参考平面(如水平面),汇聚光轴和准直光轴可能与参考平 面有一定的夹角,处于不共面状态;3)入射狭缝方向、光栅刻线方向均可能偏离参考面的垂直线,CCD探测 器的行方向也可能与参考平面存在一定夹角;4)CCD探测器记录的光谱图像上准直光轴所在色散平面对应 的直线不一定在几何对称中心位置。情形1造成入射角α、仰角γ与设计值的偏离,情形2不改变光线传播 角度,这两种情况对(2)式的形式没有影响。因此,下面重点考察情形3和情形4。

偏差情形 4 不易确定准直光轴所在色散平面的位置。在计算谱线的偏移时,选择的参考行具有一偏差量 h₀,即(2)式右侧括号内的第一项和第二项应该有类似的形式。

对于偏差情形3,可以选定色散平面为参考平面,在CCD获得的光谱图像中,可通过连接狭缝上同一点

在不同谱线上的像找到色散平面的方向。可在调整光谱仪时旋转 CCD 探测器的方向或者对光谱图像进行旋转处理,使色散平面方向与 CCD 的行方向一致。

这样,就只需处理入射狭缝参考点(波长校准点)相对于色散平面高度为 h₀,狭缝与光栅刻线(即色散平 面垂直线)方向的夹角为 θ 的情形。在入射狭缝的任意高度 h 处出发的点光源,经焦距 f₁的准直镜头准直 后,对应平行光束在色散平面的入射角 α 和相对于色散平面的仰角 γ 分别为

$$\begin{cases} \alpha = \alpha_0 + \frac{(h - h_0)\tan\theta}{f_1} = \alpha_0 + \frac{(H - H_0)\tan\theta}{f_2}, \\ \gamma = \arctan\left(\frac{h}{f_1}\right) = \arctan\left(\frac{H}{f_2}\right), \end{cases}$$
(3)

其中 α₀为参考点对应的入射角。为图像处理的方便,(3)式同时给出了狭缝像空间高度 H 表达的角度值。 定义参考点对应的仰角为 γ₀,狭缝高度 h 的谱线位置,在像平面 CCD 探测器处的相对于参考点的水平偏离 可表达为:

$$p = f_2 \cdot \tan \left\{ \arcsin \left[\sin \alpha_0 - \frac{m\lambda}{d \cos \left(\arctan \frac{H_0}{f_2} \right)} \right] - \arcsin \left[\sin \alpha - \frac{m\lambda}{d \cos \left(\arctan \frac{H}{f_2} \right)} \right] \right\}.$$
 (4)

而在实际操作过程中,会通过拟合谱线对称中心来确定参考行位置,使参考行与入射平面之间距离 H₀≈0。因此,在实际矫正过程中依据的偏移量公式为:

$$p = f_2 \cdot \tan \left\{ \arcsin\left(\sin\alpha_0 - \frac{m\lambda}{d}\right) - \arcsin\left[\sin\alpha - \frac{m\lambda}{d\cos\left(\arctan\frac{H}{f_2}\right)}\right] \right\}.$$
 (5)

称(3)式和(5)式中的 α₀ 和 θ 为预矫正参数。最简单的方法,可在波长标定时确定第一个参数,然后选定 一条谱线进行拟合获得后一参数。也可利用最小二乘法进行精确的拟合。

3 狭缝弯曲纠正

按照图1搭建体相位全息光栅透镜光谱仪的实验装置,该光谱仪是为激光拉曼散射气体检测而搭建的,抽运激光波长532 nm,因此该光谱仪设置的波长范围约为540~700 nm。首先通过对氖灯光谱进行检测获得相关预矫正参数,然后利用预矫正参数对氪光谱灯与汞蒸汽荧光灯图像进行矫正,对矫正方法进行验证。

3.1 预矫正参数的拟合与氖光谱灯图像的矫正

信号光源为氖光谱灯时,使用成像模式拍摄光谱灯图案如图2所示。将其转换为光谱模式,谱线图3如 图所示。图中亮线有较为明显的弯曲现象,光谱模式下,其最高峰半峰全宽为2.17个像素点宽度。每像素 点宽度折合波长为0.11 nm,即其分辨率为0.24 nm。



图 2 CCD 成像模式拍得的氖光谱灯图案

Fig.2 Spectral image of neon lamp with CCD

依据(4)式编写狭缝弯曲纠正程序。由图(2)可以看出,氖光谱灯在光谱仪光谱探测范围内有较丰富的谱线,有利于拟合出准确的预矫正参数。利用氖光谱图拟合出来的预矫正参数可以应用到其他信号光源光谱 图像上,避免信号光源谱线较少难以精确拟合的问题。



Fig.3 Spectrum of fig.2

根据图 2 拟合预矫正参数,包括图像参考行位置 *l*、光线入射光栅的实际入射角 α_0 、狭缝倾斜角 θ 与 CCD 安装误差导致的图像倾斜角 β。拟合出每条谱线的对称中心,记为谱线中心点。将所有谱线中心点拟合为直 线 *l*₁,直线 *l*₁斜率的反正切角为 CCD 安装误差导致的图像倾斜角 β,整体旋转图像 β角(若 β 为正,则顺时针 旋转,若 β 为负,则逆时针旋转)矫正 CCD 安装误差,使参考行回到水平位置。CCD 安装误差矫正后,直线 *l*₁ 变 为水平直线,即为图像水平对称中心,直线 *l*₁所在像素行 *n*₀即为参考行 *l*。完成图像的旋转矫正后,在每条谱 线的中心附近进行直线拟合,因狭缝倾角一般较小,取拟合直线公式为: *ax* + *by* + *c* = 0,则 θ = arctan $\left(\frac{b}{a}\right)$,对所 有谱线重复操作取平均值,得到拟合的狭缝与光栅刻线之间夹角 $\bar{\theta}$ 。图像中狭缝像高 *H* 即为该像素点沿竖直 方向到参考行 *l*的距离。根据氖光谱灯的光谱特征拟合参考行 *l*上像素点与波长的对应关系。根据波长拟合 式与光栅方程 sin α + sin $\beta = \frac{m\lambda}{d}$ (在图像中心行, cos γ = 1),拟合出光栅入射角 α_0 。预矫正参数拟合完成。

然后根据(5)式对像面坐标为 (x_n, y_n) 像素点进行矫正。由波长拟合式可以根据像素点横坐标 x_n 得到相应 波长 λ_n ,根据像素点纵坐标 y_n 到参考像素行 n_0 的距离及 CCD 像素点沿 y 轴方向尺寸计算像高 H,与光谱仪 中其他固定参数,包括入射准直透镜焦距 f_1 、出射汇聚透镜焦距 f_2 、光栅 G 刻线周期 d、拟合参数光栅入射角 α_0 与狭缝倾斜角 θ 一起代入(5)式中,即可得到其沿 x 轴方向偏移距离 p。此距离除以 CCD 像素点沿 x 轴方向 尺寸得到像面上此像素点偏移的像素量 Δn ,沿水平方向反方向矫正此偏移量(校正后 $x'_n = x_n - \Delta n$,),可以将该 像素点的偏移矫正。对整个像面所有像素点进行一次矫正,可以整体上矫正像面弯曲。

矫正后的图像如图4所示。经矫正后,图像弯曲基本消除。光谱模式下,其最高峰半峰全宽为1.57个像 素点宽度,对比原图,分辨率有很大的提高。取光谱图像 n₀行查看单行谱线图,所取图像高度为单像素点沿 y方向尺寸大小,不受到狭缝弯曲的影响,其谱线半峰全宽为1.53个像素点宽度,两种半峰全宽对比可以说 明,此时光谱仪的分辨率主要受限于其本身的精度,狭缝弯曲造成的谱线加宽已基本消除。



图4 经矫正之后氖光谱灯的图案

Fig.4 Spectral image of neon lamp after correction

3.2 利用预矫正参数矫正信号光谱图像

根据氖光谱灯光谱图像拟合出的预矫正参数:光栅入射角 α₀=34.86°、狭缝倾斜角 θ=4.3°、准直光轴所 在色散平面偏离 CCD 中心 0.8mm(即40个像素点大小)对氪光谱灯与汞蒸汽荧光灯光谱图进行矫正,验证方法 的有效性。氪光谱灯与汞蒸汽荧光灯的光谱图像如图6与图7所示,



Fig.10 Spectral image of krypeon tamp after correction

Fig.11 Spectral image of fluorescent tamp after correction

经矫正后,氪光谱灯谱线图半峰全宽为1.82个像素点宽度,其n₀行单行谱线图半峰全宽为1.75个像素 点宽度。汞蒸汽荧光灯谱线图半峰全宽为1.88个像素点宽度,其n₀行单行谱线图半峰全宽为1.83个像素点 宽度。可以看出,经过矫正后,图像弯曲都有大幅度减小,分辨率有较大提高,十分接近光谱仪本身分辨 率。说明本方法对光谱仪狭缝弯曲的矫正是有效的。

4 结 论

依据光谱仪偏移量计算公式对图像弯曲进行纠正,为使公式与图像更加契合,分析了各元件装配误差



Fig.12 Spectrum of krypton tamp after correction

Fig.13 Spectrum of fluorescent tamp after correction

对公式的影响。分别对氛光谱灯、氪光谱灯与汞蒸汽荧光灯的光谱图像进行了矫正,其谱线图半峰全宽依次由2.17、2.79、2.47个像素点宽度变为1.57、1.82、1.88个像素点宽度,有很大的改善,与各自单行谱线图半峰全宽对比都十分接近,说明矫正后,光谱仪的分辨率主要受限于其本身的精度,狭缝弯曲造成的谱线加宽已基本消除。

参 考 文 献

1 Yang Huaidong, Chen Kexin, Huang Xinyue, *et al.*. Comparison of dispersion parts of conventional spectrometers[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2009, 26(6): 1707-1712.

杨怀栋,陈科新,黄星月,等.常规光谱仪器分光系统的比较[J].光谱学与光谱分析,2009,26(6):1707-1712.

2 Liu Jianpeng, Tang Yi, Huang Gang, *et al.*. Design method of optical system of improved Czerny-Turner imaging spectrometer[J]. Acta Optica Sinca, 2012, 32(3): 0322007.

刘健鹏, 唐 义, 黄 刚, 等. 改进型 Czerny-Turner 成像光谱仪光学系统设计方法[J]. 光学学报, 2012, 32(3): 0322007.

3 Li Jianlong, Fu Kexiang, Zhang Lijuan, *et al.*. The optimized design of high diffractive efficiency volume phase holographic grating[J]. Laser Journal, 2005, 26(5): 57–59.

李建龙,傅克祥,张丽娟,等.高衍射效率的体积相位全息光栅优化设计[J].激光杂志,2005,26(5):57-59.

- 4 Michael P Buric, Kevin P Chen, Joel Falk, *et al.*. Enhanced spontaneous Raman scattering and gas composition analysis using a photonic crystal fiber[J]. Appl Opt, 2008, 47(23): 4255-4261.
- 5 Michael P Buric, Kevin P Chen, Joel Falk, *et al.*. Improved sensitivity gas detection by spontaneous Raman scattering[J]. Appl Opt, 2009, 48(22): 4424-4429.
- 6 C S Rupert. Slit curvature in grating monochromators employing single or multiple diffraction[J]. Journal of the Optical Society of America, 1952, 52(10): 779-779.
- 7 R E Bell. Exploiting a transmission grating spectrometer[J]. Review of Scientific Instruments, 2004, 75(10): 4158-4161.

栏目编辑: 韩 峰