

# 中空型平板波导红外光谱仪的波长定标

吴越<sup>1,2,3\*</sup>, 刘家祥<sup>1,3</sup>, 方勇华<sup>1,3\*\*</sup>, 杨敏<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>中国科学院安徽光学精密机械研究所, 安徽 合肥 230031;

<sup>2</sup>中国科学技术大学, 安徽 合肥 230026;

<sup>3</sup>中国科学院通用光学定标与表征技术重点实验室, 安徽 合肥 230031

**摘要** 为了实现中空型平板波导小型红外光谱仪光谱数据的定量化, 在分析实验室常用波长定标方法的基础上, 搭建了一种基于 CO<sub>2</sub> 激光器+积分球的波长定标装置。该装置的光谱定标范围宽, 且具有较高的分辨率, 克服了传统实验室定标方法的缺点, 提高了定标精度。首先介绍了中空型平板波导红外光谱仪的工作原理, 接着利用该定标装置对光谱仪进行波长定标, 然后采用多项式拟合算法完成定标数据的分析, 最后通过对两片窄带滤光片的测量完成定标结果的验证。实验结果表明: 采用 CO<sub>2</sub> 激光器+积分球组合的方式得到的波长定标方程, 其中心波长定标误差不超过 0.02 μm, 光谱分辨率可达 144 nm。

**关键词** 光谱学; 小型红外光谱仪; 平板波导; 波长定标; 激光器

中图分类号 O433

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201838.1130002

## Wavelength Calibration of Infrared Spectrometer Based on Hollow Planar Waveguide

Wu Yue<sup>1,2,3\*</sup>, Liu Jiexiang<sup>1,3</sup>, Fang Yonghua<sup>1,3\*\*</sup>, Yang Min<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China;

<sup>2</sup>University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026, China;

<sup>3</sup>Key Laboratory of Optical Calibration and Characterization, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China

**Abstract** In order to quantify the spectral data of a miniature infrared spectrometer based on hollow planar waveguide, we built a wavelength calibration device based on carbon dioxide (CO<sub>2</sub>) laser and integrating sphere on the basis of analyzing the common wavelength calibration method used in the laboratory. The spectrum calibration range of the device is wide and the resolution is high, which overcomes the shortage of traditional laboratory calibration methods and improves the calibration precision. We first introduce the working principle of the infrared spectrometer based on hollow planar waveguide, then use the calibration device to calibrate the wavelength of the spectrometer, and then complete the calibration data analysis by the polynomial fitting algorithm. Finally, the calibration results are verified by the measurement of two narrow band filters. The experimental results show that the calibration error of the central wavelength is not more than 0.02 μm and the spectral resolution can reach 144 nm by using the combination of CO<sub>2</sub> laser and integrating sphere.

**Key words** spectroscopy; miniature infrared spectrometer; hollow planar waveguide; wavelength calibration; lasers

**OCIS codes** 300.6340; 230.7370; 120.5630; 140.3460

## 1 引 言

许多有机物和无机物在中波红外光谱范围(2.5~25 μm)内有丰富的指纹图谱, 所以红外光谱仪在工业生产监测、材料科学、医学和生物技术、环

境分析等领域具有广泛应用<sup>[1]</sup>。随着相关领域市场需求量的增加, 研究和开发低成本、高性能的微型红外光谱仪成为近年来国内外研究的一个热点<sup>[2]</sup>。

中空型平板波导红外光谱仪是一种基于平板波导介质结合交叉非对称 Czerny-Turner 结构的微型

收稿日期: 2018-05-08; 修回日期: 2018-06-05; 录用日期: 2018-06-11

基金项目: 中国科学院创新基金

\* E-mail: yhfang@aiofm.ac.cn; \*\* E-mail: wuyue499@163.com

光栅光谱仪,具有体积小、成本低、方便在室外作业的特点。中空型平板波导红外光谱仪的光谱探测范围为 8~12  $\mu\text{m}$ ,数值孔径为 0.22。

定标是中空型平板波导红外光谱仪精确量化应用的前提和基础,其中一项主要的定标是波长定标<sup>[3-4]</sup>。波长定标可以确定仪器的光谱特性指标,进而为提高仪器本身的可靠性提供依据。波长定标的本质是利用波长定标物质建立波长与像素的关系,利用光谱仪测量得到的已知波长与对应像素点位置建立一个多项式关系,再利用多项式拟合的方法将整个像素映射到波长上。实验室常用的波长定标方法包括标准谱线法和单色仪波长扫描法<sup>[5-12]</sup>。标准谱线法一般采用汞灯、钠灯等作为标准灯,利用标准灯发射的特征谱线对仪器进行标定,这种方法易于实现,且具有结构简单、操作方便的优点,但无法实现全波段的波长定标及光谱分辨率定标,适用范围窄,常用来实现光谱分辨率较高的线性色散仪器的波长标定。单色仪波长扫描法利用连续输出的单色准直光作为定标光源对仪器的光谱响应进行标定,该方法可同时实现宽光谱范围的中心波长和光谱分辨率的标定,具有定标精度高、实用性强的优点。但是,单色仪输出的单色光的波长会发生漂移,不能保证光谱定标的精度。

本文针对中空型平板波导红外光谱仪研究了相应的波长定标方法,结合标准谱线法和单色仪波长扫描法的优点,研制了一套基于二氧化碳( $\text{CO}_2$ )激光器与积分球的波长定标实验装置。该装置采用激光作为光源,可以减小波长偏移和光源本身光谱带宽的影响。该装置结构简单,操作方便,能同时完成光谱中心波长和光谱分辨率的标定,定标精度高。利用该实验装置对中空型平板波导红外光谱仪进行波长定标,并对定标数据进行分析处理。结果表明:采用该波长定标方法得到的定标方程在 9.1~10.9  $\mu\text{m}$ 波段的中心波长定标误差不超过 0.02  $\mu\text{m}$ ,光谱分辨率可达 144 nm。

## 2 波长定标装置的工作原理

### 2.1 光谱仪简介

中空型平板波导红外光谱仪采用平板波导压缩光束的原理,如图 1 所示,将光束限制在一块很薄且具有高折射率的介质中。本课题组研制的波长定标实验装置以空气为传播介质。当光束沿 Z 轴传播时,在 Y 轴上正常传播,但在 X 轴上被限制,可以认为光束变成二维传播。然后结合交叉非对称

Czerny-Turner 结构设计非成像红外光谱仪<sup>[13]</sup>。光谱仪的具体参数如表 1 所示。

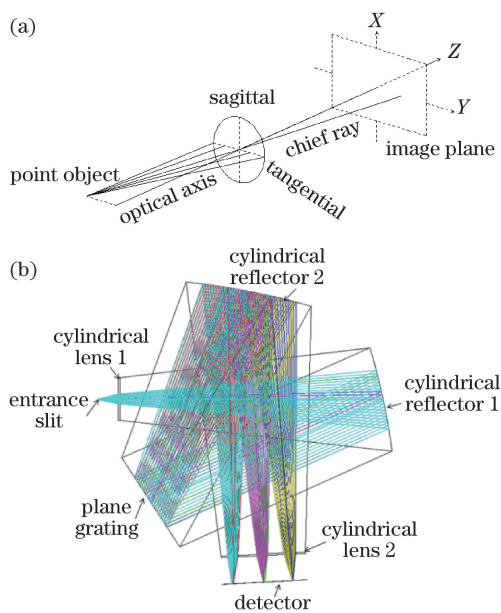


图 1 中空型平板波导红外光谱仪的结构原理图。

(a)光束空间传播示意图;(b)光路设计图

Fig. 1 Structural schematics of the hollow planar waveguide infrared spectrometer. (a) Schematic of beam propagation in space; (b) scheme of optical path design

表 1 光谱仪的参数

Table 1 Specific parameters of spectrometer

Parameter	Value
Wavelength range / $\mu\text{m}$	8-12
Spectral sampling interval / $\mu\text{m}$	0.0625
Numerical aperture	0.22
Detector array size	64 $\times$ 1
Detector pixel size / (mm $\times$ mm)	0.5 $\times$ 1.5

### 2.2 波长定标原理

图 2 为中空型平板波导红外光谱仪实验室波长定标流程框图。

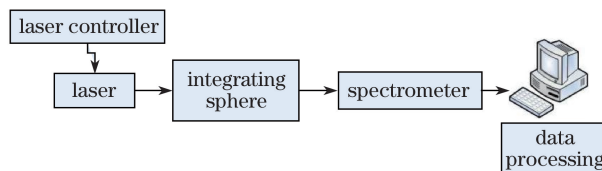


图 2 实验室波长定标流程图

Fig. 2 Flow chart of laboratory wavelength calibration

如图 3 所示,波长定标装置主要包括激光器控制系统、 $\text{CO}_2$ 激光器、积分球、中空型平板波导红外光谱仪、主控计算机。打开激光控制器,将可调谐激

激光器发射的激光导入积分球,通过功率稳定等措施得到一个均匀、稳定的光源场,将光源场对准光谱仪的入射狭缝,启动计算机采集光谱仪接收到的光谱信息。定标装置实物图如图 4 所示。

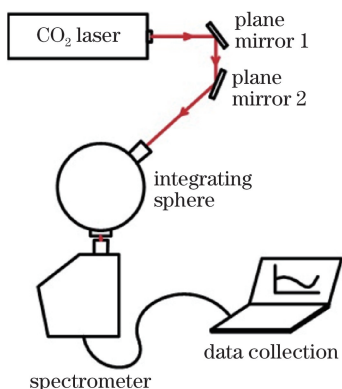


图 3 实验室波长定标示意图

Fig. 3 Sketch map of laboratory wavelength calibration

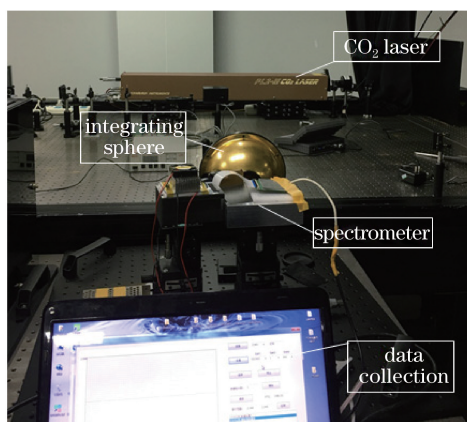


图 4 实验室波长定标装置实物图

Fig. 4 Physical map of wavelength calibration device in laboratory

红外光谱仪的数据采集以探测器线阵像元为接收单位,光谱曲线是由光谱仪的光栅特性与探测器阵列之间的相对位置决定的。通过建立波长与线阵探测器像元序号之间的函数关系,可以得到像元位置与光谱波长的对应关系,从而完成波长定标。由于光谱仪在工作波长范围内的光栅色散为线性,经过光学系统后,光谱在线阵探测器像面上近似成线性排列,因此可用多项式算法进行拟合。

### 2.3 波长定标光源的选择

由于激光具有单色性好、波长可调和波长准确性高的优点,因此成为代替灯-单色仪系统的极佳选择。与传统单色仪出射的单色光相比,采用激光作为光源可以减小波长偏移和光源本身的光谱带宽对光谱定标的影响。本实验选用的是 PL2-M 型 CO<sub>2</sub> 激光器,它是一种紧凑的高稳定性激光器,理论上可

以输出波长范围为 9.1~10.9 μm 的准连续光谱。激光器的具体参数见表 2(M<sup>2</sup>为质量因子)。

表 2 PL2-M 型 CO<sub>2</sub> 激光器的参数

Table 2 Parameters of PL2-M CO<sub>2</sub> laser

Parameter	Value
Wavelength range /μm	9.1-10.9
Mode	>90% TEM <sub>00</sub> , M <sup>2</sup> <1.25
Amplitude stability	±1% short term (unstabilized)
Frequency stability / (kHz·s <sup>-1</sup> )	200
Beam diameter (1/e <sup>2</sup> )	4.8 mm@output coupler
Beam divergence /mrad	6.5

## 3 定标过程及结果

### 3.1 定标过程

定标过程中所选取的特征谱线数量要尽可能多,且分布越均匀,测算结果就越准确。本实验通过可调谐 CO<sub>2</sub> 激光器选择 9R22、9P12、9P28、10R22、10P8 和 10P36 的单色光,它们对应的波长 λ 分别为 9.261,9.488,9.621,10.233,10.476,10.764 μm。激光器发射的光束进入光谱仪后,采集探测器上响应的光谱响应曲线,再通过寻峰算法求得 6 条光谱响应曲线对应的像元序号 x<sub>1</sub>、x<sub>2</sub>、x<sub>3</sub>、x<sub>4</sub>、x<sub>5</sub>、x<sub>6</sub>。假设 6 条谱线的中心波长分别为 y<sub>1</sub>、y<sub>2</sub>、y<sub>3</sub>、y<sub>4</sub>、y<sub>5</sub>、y<sub>6</sub>。

将 6 组中心波长和像元序号采用一阶多项式进行拟合,就可以得到方程式的系数解。拟合的一阶多项式为

$$y_i = a_1 x_i + a_0 (i = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6), \quad (1)$$

式中:y 为对应标准波长;x 为探测器像元序号。

由于光谱数据中存在异常或者其他原因,采用一阶多项式拟合时通常会出现较大误差,所以在实际研究过程中的定标通常利用多项式进行拟合。随着多项式拟合的幂次提高,拟合效果会有所改善,但是过拟合的风险也会随之升高<sup>[14-16]</sup>。综合考虑后认为,波长定标选择三阶多项式比较合理。曲线拟合方程为

$$\begin{cases} y_1 = A_0 + A_1 x_1 + A_2 x_1^2 + A_3 x_1^3 \\ y_2 = A_0 + A_1 x_2 + A_2 x_2^2 + A_3 x_2^3 \\ \vdots \\ y_5 = A_0 + A_1 x_5 + A_2 x_5^2 + A_3 x_5^3 \\ y_6 = A_0 + A_1 x_6 + A_2 x_6^2 + A_3 x_6^3 \end{cases}, \quad (2)$$

式中:A<sub>j</sub>(j=0,1,2,3)为 4 个待求的系数。通过求解(2)式可以得到 A<sub>j</sub> 不同阶次的最小二乘方程式的系数解。

### 3.2 数据分析

光谱仪的波长定标过程主要包括寻峰和最小二乘多项式拟合。对于每条光谱,首先通过寻峰处理找出每条光谱响应曲线峰值对应的像元。由于高斯函数可以较好地表征光谱的响应,因此采用高斯拟合的方法寻峰,拟合函数为

$$G(x) = a \exp\left(-\frac{x - x_0}{\sigma}\right), \quad (3)$$

式中: $a$  为拟合系数; $x_0$  为谱线中心峰对应的像元序号; $\sigma$  为谱线的半峰全宽。图 5 为平板波导光谱仪在 6 组不同波长处的像元与响应关系图,可以看出:图 5 中各个波长的响应较好地符合高斯函数的特征。

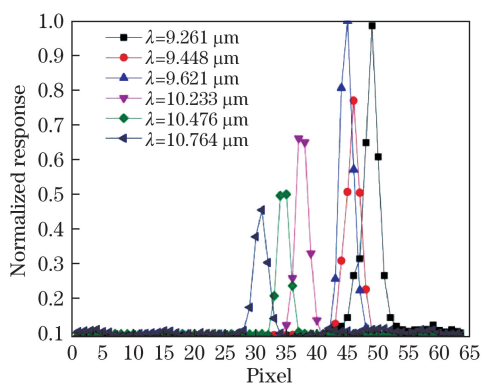


图 5 不同波长处的像元与响应关系图

Fig. 5 Relation of pixel and response at different wavelengths

对各个谱线进行寻峰处理,可以得到中心波长与像元的对应关系,以及各个波长对应的光谱分辨率,如表 3 所示,光谱分辨率能达到 144 nm。

表 3 波长定标结果

Table 3 Results of wavelength calibration

Central wavelength / $\mu\text{m}$	Pixel	Spectral resolution /nm
9.261	48.925	139
9.488	45.925	144
9.621	44.822	137
10.233	37.558	134
10.476	34.535	129
10.764	30.828	135

将波长定标结果分别代入(1)式和(2)式,就可以求得定标两组方程组的系数解。图 6 为中空型平板波导光谱仪的波长定标拟合结果。

图 6 中的黑色实点为定标装置输出的原始数据点,红色曲线为一阶多项式拟合曲线,拟合定标方程为

$$y = -0.084x + 13.37, \quad (4)$$

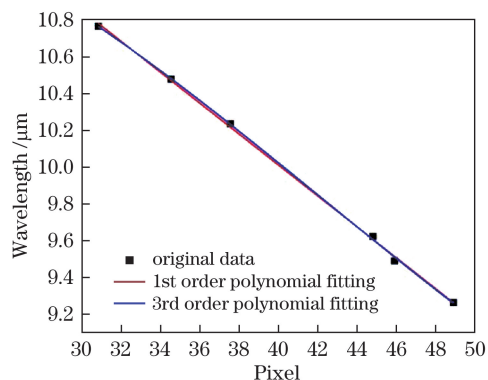


图 6 波长定标拟合曲线图

Fig. 6 Fitting curves of wavelength calibration

决定系数  $R^2 = 0.99898$ 。蓝色曲线为 3 阶多项式拟合曲线,拟合定标方程为

$$y = 10.61 + 0.1179x - 0.004842x^2 + 3.813 \times 10^{-5}x^3, \quad (5)$$

决定系数  $R^2 = 0.99828$ 。

图 7 为波长定标拟合残差,可以看出:采用三阶多项式拟合的最大偏差为  $0.02 \mu\text{m}$ ,比一阶多项式的拟合精度高。说明采用  $\text{CO}_2$  激光器+积分球的方法进行波长定标,其中心波长定标精度能达到  $0.02 \mu\text{m}$ 。

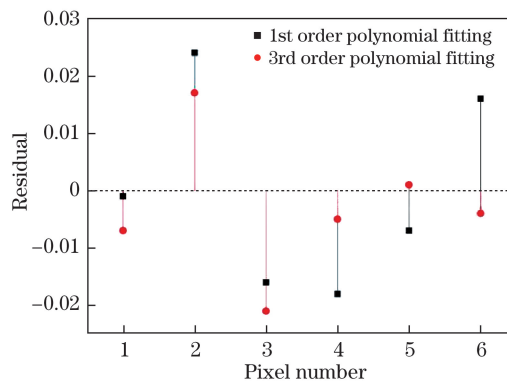


图 7 波长定标拟合残差图

Fig. 7 Fitting residual of wavelength calibration

### 3.3 实验验证

PL2-M 型  $\text{CO}_2$  激光器的波长输出范围仅为  $9.1 \sim 10.9 \mu\text{m}$ ,而中空型平板波导光谱仪的波长范围为  $8 \sim 12 \mu\text{m}$ ,由于多项式拟合在两端的误差相对较大,所以通过测量两片窄带滤光片[中心波长分别为  $(8.5 \pm 0.05) \mu\text{m}$ 、 $(11.52 \pm 0.1) \mu\text{m}$ ]进行实验,用两种拟合方式对测得的滤光片谱线进行运算,结果如表 4 所示。

从表 4 中可以看出:相比于一阶多项式拟合,三阶多项式拟合确定波长的绝对误差较小; $8.0 \sim 9.1 \mu\text{m}$ 波段的定标精度为  $0.039 \mu\text{m}$ , $10.9 \sim 12.0 \mu\text{m}$



表 4 定标后两种拟合方式的结果

Table 4 Calculation results of two fitting methods

Central Wavelength / $\mu\text{m}$	Pixel	1st order polynomial fitting		3rd order polynomial fitting	
		Fitted value / $\mu\text{m}$	Error / $\mu\text{m}$	Fitted value / $\mu\text{m}$	Error / $\mu\text{m}$
8.50	60.55	8.284	-0.216	8.461	-0.039
11.52	13.60	12.228	0.707	11.415	-0.100

波段的定标精度约为  $0.100 \mu\text{m}$ 。10.9~12.0  $\mu\text{m}$  波段的定标精度比在 9.1~10.9  $\mu\text{m}$  波段的略差, 主要原因为: 1) 实验中选用的窄带滤光片的中心波长的精度误差较大, 导致实际定标得到的中心波长偏差较大; 2) 采用的多项式拟合方法会在两端产生较大偏差, 导致在 8.0~9.1  $\mu\text{m}$  波段和 10.9~12.0  $\mu\text{m}$  波段的定标精度比 9.1~10.9  $\mu\text{m}$  波段差。

## 4 结 论

平板波导是一种新颖的结构, 其结合交叉非对称 Czerny-Turner 分光结构应用在光谱仪上, 可以满足低成本、小型化的要求。本课题组针对中空型平板波导红外光谱仪确定了波长定标方案, 选取 PL2-M 型  $\text{CO}_2$  可调谐激光器作为定标光源, 构建了基于  $\text{CO}_2$  激光器+积分球的波长定标装置, 并对仪器进行了波长定标。该波长定标装置可在 9.1~10.9  $\mu\text{m}$  范围内输出波长不同、分辨率很高的单色光。最后通过测量 2 片窄带滤光片, 验证了该波长定标装置的可行性。定标实验结果表明: 在 9.1~10.9  $\mu\text{m}$  波段范围内, 波长与像元间的拟合程度较高, 定标后的定标精度可以达到  $0.02 \mu\text{m}$ , 光谱分辨率可以达到 144 nm, 在 8.0~9.1  $\mu\text{m}$  波段和 10.9~12.0  $\mu\text{m}$  波段的定标精度分别能达到  $0.039 \mu\text{m}$  和  $0.100 \mu\text{m}$ 。本实验的研究结果对中空型平板波导红外光谱仪的研制和高精度定标具有一定的现实意义。中空型平板波导红外光谱仪的体积小, 可适用于野外环境。为了进一步提高光谱仪的稳定性和适用性, 今后将通过抑制其自身背景辐射和提高辐射定标精度两种途径来实现更准确的测量。

## 参 考 文 献

- [1] Haas J, Mizaikoff B. Advances in mid-infrared spectroscopy for chemical analysis[J]. Annual Review of Analytical Chemistry, 2016, 9(1): 45-68.
- [2] Liu K. Research on the key technology of the miniature spectrometer and its application system[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2013.  
刘康. 微型光谱仪关键技术及其应用研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2013.
- [3] Mirapeix J, Cobo A, Cubillas A M, *et al.* In-process automatic wavelength calibration for CCD-spectrometers[J]. Proceedings of SPIE, 2008, 7003: 70031T.
- [4] Mao J H, Wang Y M, Shi E T, *et al.* Spectral calibration based on echelle[J]. Chinese Journal of Optics, 2017, 10(3): 376-382.  
毛靖华, 王咏梅, 石恩涛, 等. 基于中阶梯光栅的波长定标方法研究[J]. 中国光学, 2017, 10(3): 376-382.
- [5] Davis C O, Bowles J, Leathers R A, *et al.* Ocean PHILLS hyperspectral imager: design, characterization, and calibration[J]. Optics Express, 2002, 10(4): 210-221.
- [6] Kohler D D R, Bissett W P, Steward R G, *et al.* New approach for the radiometric calibration of spectral imaging systems[J]. Optics Express, 2004, 12(11): 2463-2477.
- [7] Liu E C, Zheng X B, Li X, *et al.* Wavelength calibration of absolute irradiance spectra-radiometer[J]. Optics and Precision Engineering, 2013, 21(3): 608-615.  
刘恩超, 郑小兵, 李新, 等. 绝对光谱辐照度仪的波长定标[J]. 光学精密工程, 2013, 21(3): 608-615.
- [8] Qi X D, Han P P, Pan M Z, *et al.* Spectral calibration of imaging spectrometer with convex grating[J]. Optics and Precision Engineering, 2011, 19(12): 2870-2876.  
齐向东, 橄芑芑, 潘明忠, 等. 凸面光栅成像光谱仪的光谱定标[J]. 光学精密工程, 2011, 19(12): 2870-2876.
- [9] Zhao M J, Si F Q, Jiang Y, *et al.* In-lab calibration of space-borne differential optical absorption spectrometer[J]. Optics and Precision Engineering, 2013, 21(3): 567-574.  
赵敏杰, 司福祺, 江宇, 等. 星载大气痕量气体差分吸收光谱仪的实验室定标[J]. 光学精密工程, 2013, 21(3): 567-574.
- [10] Zhai W C, Li J J, Zheng X B, *et al.* Research on method of calibrating sun channels of sun radiometers[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(4): 0412004.  
翟文超, 李健军, 郑小兵, 等. 太阳辐射计直射通道

- 实验室定标方法研究[J]. 光学学报, 2012, 32(4): 0412004.
- [11] Ma L, Wei J, Huang X X, *et al.* Laboratory spectral calibration method of grating dispersive imaging spectrometer[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2013, 50(2): 023001.  
马亮, 危峻, 黄小仙, 等. 光栅色散型成像光谱仪的实验室光谱定标方法研究[J]. 激光与光电子学进展, 2013, 50(2): 023001.
- [12] Li Z W, Xiong W, Shi H L, *et al.* Study on laboratory calibration of spatial heterodyne spectrometer[J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(4): 0430002.  
李志伟, 熊伟, 施海亮, 等. 空间外差光谱仪实验室定标技术研究[J]. 光学学报, 2014, 34(4): 0430002.
- [13] Li Y Y, Fang Y H, Li D C, *et al.* Optical design of miniature infrared gratings spectrometer based on planar waveguide[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2015, 35(3): 841-845.  
李扬裕, 方勇华, 李大成, 等. 基于平板波导的小型红外光栅光谱仪光学设计[J]. 光谱学与光谱分析, 2015, 35(3): 841-845.
- [14] Wei W, Cui J C, Tang Y G, *et al.* Spectral calibration of medical microscopic imaging spectrometer[J]. Optics and Precision Engineering, 2016, 24(5): 1015-1020.  
魏巍, 崔继承, 唐玉国, 等. 医用显微成像光谱仪的光谱定标技术[J]. 光学精密工程, 2016, 24(5): 1015-1020.
- [15] Dong B, Zheng F, Shi X G, *et al.* Wavelength calibration of the fiber optic spectrometer based on the polynomial fitting residual error method[J]. Journal of Changchun University of Science and Technology, 2017, 40(1): 14-18.  
董冰, 郑峰, 石晓光, 等. 基于多项式拟合残差法的光纤光谱仪的波长定标方法研究[J]. 长春理工大学学报(自然科学版), 2017, 40(1): 14-18.
- [16] Asimellis G, Giannoudakos A, Kompitsas M. Accurate wavelength calibration in the near-infrared for multielement analysis without the need for reference spectra[J]. Applied Optics, 2006, 45(35): 8855-8862.