

Czerny-Turner 正交型光栅单色仪的波长校准

寇婕婷^{1,2}, 巴音贺希格^{1*}, 唐玉国¹, 齐向东¹, 于宏柱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. 中国科学院研究生院, 北京 100049

摘要 研究了 Czerny-Turner 正交型光栅单色仪的波长校准技术。结合单色仪的结构参数和特点, 提出以符合光栅方程的正弦曲线作为仪器出射波长的校准方程, 基于最小二乘法原理给出校准方程的拟合残差表达式, 由于校准方程的非线性, 应用二维 Nelder-Mead 单纯形法求解拟合残差的待定系数, 建立了波长与光栅转角精确表达式, 并通过实验验证了该算法的准确性。结果表明, 经过校准的单色仪波长定位精度小于 0.1 nm, 比设计要求提高一个数量级。该方法在 Czerny-Turner 正交型光栅单色仪的波长校准过程中, 应用简单, 容易实现, 只需稍加修改步进电机的控制程序, 即可完成对仪器出射波长的快速实时校准, 实用性强。

关键词 光栅单色仪; Czerny-Turner 结构; 波长校准; Nelder-Mead 单纯形法

中图分类号: O433.4 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2012)04-1127-05

引言

光栅单色仪是一种以光栅为色散元件的分光仪器, 可以把一束复色光分解成不同波长的单色光, 由于其光谱范围宽、色散均匀、分辨率高等优点, 已经广泛应用于物理、化学、冶金、农业、环保和医药卫生等部门^[1-3]。单色仪的波长扫描是通过转动光栅来实现的, 通过控制程序, 可以实现波长的自动扫描, 符合先进光谱技术的发展趋势^[4]。在光栅单色仪中, 由于波长与光栅转角并非简单的线性关系, 而是正弦函数关系, 因此, 光栅的旋转通常需要采用凸轮机构、正弦杠杆机构或者余割杠杆机构等扫描机构, 使出射波长按线性变化, 便于使用简单的线性拟合的方法来完成出射波长的校准^[5,6]。

其实, 还有一款光栅单色仪及其波长校准方法有待研究, 例如, 中国科学院长春光机所研制的光栅衍射效率自动测试仪中的前置单色仪。由于实际工作的需要, 要求前置单色仪尽可能体积小、质量轻、便于安装, 因此, 采用了结构简单、紧凑, 有利于消除杂散光的 Czerny-Turner 正交型光栅单色仪装置^[7], 它是直接将光栅固定在步进电机转杆上实现

波长扫描, 并没有采用上述常规的扫描机构, 如此, 势必导致出射波长与光栅转角的非线性变化, 线性拟合的方法显然无法满足校准要求, 因此, 其出射波长的校准研究则成为亟待解决的关键问题。

目前, 使用多项式拟合的方法对出射波长进行校准是一种通用的波长标定方法^[8], 其拟合精度的高低取决于标准波长的数量。通过分析光栅方程可知, Czerny-Turner 正交型光栅单色仪中出射波长与光栅转角成正弦函数关系, 由于标准波长的数量有限, 使用多项式拟合成正弦函数的方法必然引入拟合误差^[9]; 采用常规的波长扫描机构虽然可以避免波长校准的难题, 但势必会增大系统体积, 增加装调的难度, 不利于整套仪器的组合。鉴于此, 提出以符合光栅方程的正弦曲线作为波长校准方程, 结合最小二乘法原理给出拟合残差的表达式, 由于校准方程的非线性, 应用二维 Nelder-Mead 单纯形法求解拟合残差的待定系数, 提出建立单纯形而未利用任何求导运算得到函数极值, 建立了波长与光栅转角的精确表达式, 使出射波长的定位精度小于 0.1 nm, 满足仪器的使用要求。通过实验验证了该方法的实用性, 完成了对 Czerny-Turner 正交型光栅单色仪的波长校准。

收稿日期: 2011-09-29, 修订日期: 2011-12-27

基金项目: 国家“十一五”科技支撑计划重大项目(2006BAK03A02), 中国科学院重大科研装备研制项目(YZ200804), 吉林省科技发展计划项目(20070523, 20086013)和吉林省重大科技攻关项目(09ZDGG005)资助

作者简介: 寇婕婷, 女, 1983年生, 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所博士研究生 e-mail: koujieting@163.com

* 通讯联系人 e-mail: bayin888@sina.com

1 仪器结构与原理

Czerny-Turner 正交型光栅单色仪的结构示意图如图 1 所示, 其入射光线和成像光线在空间路径上交叠, 既减小了光谱仪的整体尺寸又可以使光谱像面与其他元件在空间上不产生重叠。这种系统有着结构简单、紧凑, 有利于消除杂散光等优点, 符合仪器的使用要求; 光栅固定在步进电机的转杆上, 当驱动步进电机时, 光栅随之一起转动; 在入射狭缝前安置滤光片, 可以将二级以上的光谱级次滤掉, 在本仪器中, 只使用+1级光谱。

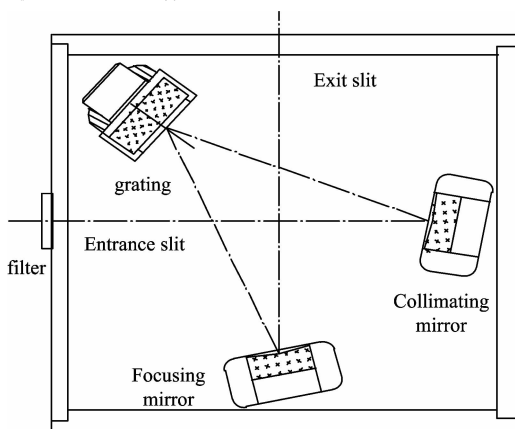


Fig. 1 The schematic of the monochromator

仪器的主要结构参数: 狭缝宽度: 0.2 mm, 狭缝高度: 5 mm, 光栅: 1 200 线·mm⁻¹, 反射镜焦距: 100 mm, 入射、出射光束的夹角: 45°, 系统体积: 120 mm×120 mm×50 mm。

光源发出的连续光谱经过入射狭缝照射到准直镜上, 经准直镜反射形成平行光, 平行光经光栅衍射后, 不同的波长会聚位置不同, 通过旋转光栅, 使不同波长的单色光依次通过出射狭缝, 从而实现波长扫描。根据光栅方程, 单色仪的出射波长 λ 与光栅转角 δ 的关系可以表示为^[4]

$$\lambda = \frac{2d}{m} \cos \frac{A}{2} \sin \delta \quad (1)$$

其中, d 为光栅常数, 1 200 线·mm⁻¹; m 是光谱级次, 本仪器中取 $m=1$; A 为入射光束与出射光束的夹角, $A=45^\circ$; 那么, $\frac{2d}{m} \cos \frac{A}{2}$ 为常数, 出射波长只由光栅转角 δ 决定。

光栅固定在步进电机的转杆上, 当驱动步进电机时, 光栅随之一起转动, 因此, 光栅转角 δ 由步进电机的步进脉冲数决定, 在本仪器中, 步进电机的步距角为 1.8°, 硬件电路采用 200 倍细分, 进而使电机每走一步的角度细化为 0.009°, 式(1)可以改写为

$$\lambda = \frac{2d}{m} \cos \frac{A}{2} \sin(0.009 \times n) \quad (2)$$

式中, n 为电机的步进脉冲数。根据需要的出射波长 λ , 计算机程序根据式(2)自动计算并控制步进电机走过的步进脉冲数 n , 从而确定该波长的输出。

2 波长校准

2.1 波长校准过程

在固定光栅的电机转杆上设置一个零位卡片, 由零位开关控制, 通过多次重复测量, 确定光栅的出射零级光位置与之相重合, 以此作为仪器的零点位置, 光栅或者步进电机以此为零点, 记录步进电机转过的步进脉冲数, 从而确定出射波长。

以汞灯为定标光源, 选用其特征谱线 579, 546.1, 435.8, 404.7, 365.0 和 253.7 nm 为标准波长, 将光电倍增管置于出射狭缝处探测出射光强, 启动计算机控制步进电机带动光栅旋转, 电机程序将根据上述标准波长自动计算并控制电机需要走过的脉冲数, 理想情况下, 对应波长的强度中心应从出射狭缝输出, 多次测量发现, 出射狭缝处并没有输出标准波长的强度中心, 存在偏差。因此, 当出射狭缝输出对应波长时, 记录步进电机走过的实际步进脉冲, 根据式(2)计算实际的出射波长, 与标准波长对比, 所得结果如表 1 所示。

Table 1 The list of the corresponding data

	Standard wavelength /nm	Ideal pulses	Actual pulses	Actual wavelength/nm	Error /nm
1	579.0	2 454.17	2 445	576.9	2.1
2	546.1	2 307.78	2 301	544.5	1.6
3	435.8	1 826.67	1 821	434.3	1.5
4	404.7	1 693.33	1 688	403.5	1.2
5	365.0	1 523.33	1 520	364.2	0.8
6	253.7	1 053.33	1 054	254.0	-0.2

从表 1 可以看出, 单色仪实际出射波长与标准波长存在偏差, 最大达到 2.1 nm。原因是仪器运转过程中, 存在不可避免的系统误差, 比如根据出射波长 λ , 对应实际电机的步进脉冲数只能取整数, 不能取分数; 另外, 在仪器结构上, 电机转杆和轴承之间存在摩擦和间隙, 会造成步进空回; 由此必然引入计算误差, 均会影响实际出射波长的准确性。而仪器设计要求波长定位精度小于 1 nm, 因此, 需要进行波长校准。

由式(2)可知, 出射波长是步进脉冲的正弦函数, 由于实际电机的脉冲只能取整数以及步进空回的存在, 为表示一般性, 写出正弦拟合函数的通用表达式^[10]

$$\lambda_i(\Delta n, \Delta \lambda) = K \sin(0.009 \times (n_i + \Delta n)) + \Delta \lambda \quad (3)$$

其中, $\lambda_i(\Delta n, \Delta \lambda)$ 为仪器的实际出射波长, 与 Δn 和 $\Delta \lambda$ 两个待定参数有关; $K = \frac{2d}{m} \cos \frac{A}{2}$ 为常数; 电机的步进角度为 0.009°, n_i 为对应输出各个标准波长所需要的实际步进; Δn 为步进偏差; $\Delta \lambda$ 为波长偏差。

根据最小二乘法原理, 结合表 1 中的已知标准波长, 联立式(3), 可以写出测量数据的最小二乘拟合的残差 Q 的表达式

$$Q = \sum_{i=1}^6 [\lambda_{0i} - K \sin 0.009 \times (n_i + \Delta n) - \Delta \lambda]^2 = \min(4)$$

其中, λ_{0i} 为表 1 中的对应 6 个标准波长; 可以看出, 式(3)为非线性方程, 求解式(4)时, 由于其法方程组中的元素线性相关, 不能通过求多元函数极值的方法来确定其待定参数; 即使采用近似线性方程的解法, 拟合精度也无法保证^[10]。因此, 需要通过搜索算法来求解。

2.2 波长校准算法

Nelder-Mead 单纯形法的基本原理是: 在 n 维空间中, 用 $n+1$ 个顶点构成一个多面体, 即单纯形, 通过计算单纯形顶点的函数值, 根据函数值大小的分布来判断单纯形顶点的变化方向, 然后按一定的规则不断改变单纯形的顶点, 形成新的单纯形, 目的是使其朝着目标函数最小值的方向移动, 直到找到目标函数最小值的近似解, 是解决非线性最优化问题的一种搜索算法^[11-14]。对于二维函数最小值的求解问题, 对应的单纯形为三角形, 其搜索方法的规则如下:

选取 3 对单纯形顶点 $B(x_1, x_2)$, $G(x_1, x_2)$ 和 $W(x_1, x_2)$, 分别计算各顶点的目标函数值 $f(B)$, $f(G)$ 和 $f(W)$, 根据目标函数值的大小进行排序, 使 $B(x_1, x_2)$ 为最小值点 (best), $G(x_1, x_2)$ 为次小值点 (good), $W(x_1, x_2)$ 为最大值点 (worst), 构成初始单纯形 $\triangle BGW$, 如图 2 所示。

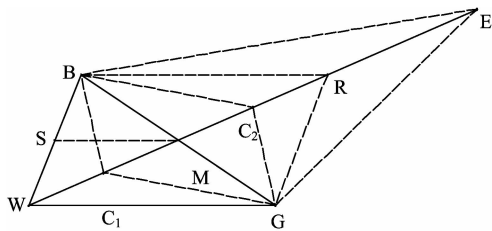


Fig. 2 Principle illustration of the N-M simplex method

(1) 反射过程 (Reflection): 取 BG 的中点 M 为反射中心, 在 WM 延长线上求出点 W 关于点 M 的反射点 R , $R = 2M - W$, 根据 R 点的目标函数值判断单纯形顶点的移动方向。若 $f(B) < f(R) < f(G)$, 则以 $\triangle BGR$ 为新的单纯形;

(2) 扩展过程 (Expansion): 若 $f(R) < f(B)$, 说明沿反射方向的搜索有利, 继续沿 WR 方向将点 R 扩展至点 E , $E = 2R - M$, 若 $f(E) < f(R)$, 则构成新的单纯形 $\triangle BGE$, 否则, 仍以 $\triangle BGR$ 为新的单纯形;

(3) 压缩过程 (Contraction): 若 $f(R) > f(G)$, 说明沿反射方向走的太远, 应该压缩, 取 WM 的中点 C_1 , MR 的中点 C_2 , 比较 $f(C_1)$ 和 $f(C_2)$, 取函数值较小者为新的顶点 C , 构成新的单纯形 $\triangle BGC$;

(4) 收缩过程 (Shrinkage): 若 $f(C) > f(W)$, 说明 WR 方向不是正确的搜索方向, 应将初始单纯形顶点 W, G 分别移动至点 S 和点 M , S 为 BW 的中点, 形成新的单纯形 $\triangle BSM$;

在每形成一个新的单纯形后, 均从求最大值点的反射过程开始, 按上述步骤依次判断, 重复迭代, 不断以新的可接受点来取代最差点, 直到找到目标函数的最小值。

2.3 进行波长校准

根据表 1 中的实测数据, 分别选取三组 $(\Delta n, \Delta \lambda)$ 值, 根据式(4)分别计算其对应的残差 Q , 按残差值大小进行排序, 确定最小值点 B 、次小值点 G 、最大值点 W 。根据二维 Nelder-Mead 单纯形法的原理编制 nelder.m 文件对式(4)进行求解。令程序的终止条件为 $\epsilon = |\lambda_{0i} - \lambda_i(\Delta n, \Delta \lambda)|$, ϵ 的取值要根据实际需要设定, 仪器设计要求波长精度小于 1 nm 即可, 而 ϵ 的取值不同, 校准精度往往不同。本仪器中, 当 $\epsilon < 0.1$ nm 时, 可以达到最高的校准精度。其算法的流程图如图 3 所示。

经过计算, 目标函数式(4)取得的最小值为 $Q = 0.019$, 对应的顶点取值为: $\Delta n = 1.25$, $\Delta \lambda = 0.96$ 。在计算过程中, 初始单纯形顶点 $(\Delta n, \Delta \lambda)$ 的选取对目标函数的收敛性影响较大, 大量的反复实验表明, 单纯形顶点 $(\Delta n, \lambda)$ 的初始值应在 $0 \sim 1$ 之间选取, 才能使目标函数较好的收敛。本文中初始顶点 $(\Delta n, \Delta \lambda)$ 的选取分别为: 最小值点 $B(0, 0.6)$ 、次小值点 $G(0.8, 0)$ 、最大值点 $W(0, 0)$ 。

3 校准结果对比

将所得 Δn 和 $\Delta \lambda$ 值代入式(3), 可以得到经过校准后仪器的出射波长 λ 与电机步进脉冲 n 的关系式为

$$\lambda = K \sin 0.009 \times (n + 1.25) + 0.96 \quad (5)$$

计算对应标准波长处的误差如表 2 所示, 其中, 误差 I 和误差 II 分别代表未经校准的出射波长和经过校准的出射波长与标准波长的差。

Table 2 Error comparison

Wavelength/nm	Error I	Error II
579.0	2.1	0.08
546.1	1.6	0.06
435.8	1.5	-0.01
404.7	1.2	-0.02
365.0	0.8	-0.05
253.7	-0.2	-0.08

从表 2 的数据可以看出, 校准后的出射波长与标准波长的误差均在 0.1 nm 以内。将式(5)编入单色仪步进电机的控制程序中, 以汞灯为光源, 使用校准后的单色仪分别在上述各个标准波长范围附近 ± 5 nm、间隔 0.2 nm 扫描输出光谱图, 使用光电倍增管记录对应的出射光强, 确保出射狭缝处输出的是对应标准波长的强度中心。测量结果如图 4 所示, 图中数据点代表出射狭缝处的波长。从实验结果上看, 扫描输出的光谱图基本对称, 波长校准精度均达到了仪器的设计要求。

4 结论

波长校准是单色仪在投入使用前必不可少的步骤之一, 是仪器研制的重要组成部分, 对仪器的实际应用有着非常重要的意义。本工作分析了导致仪器出射波长不准确性的原

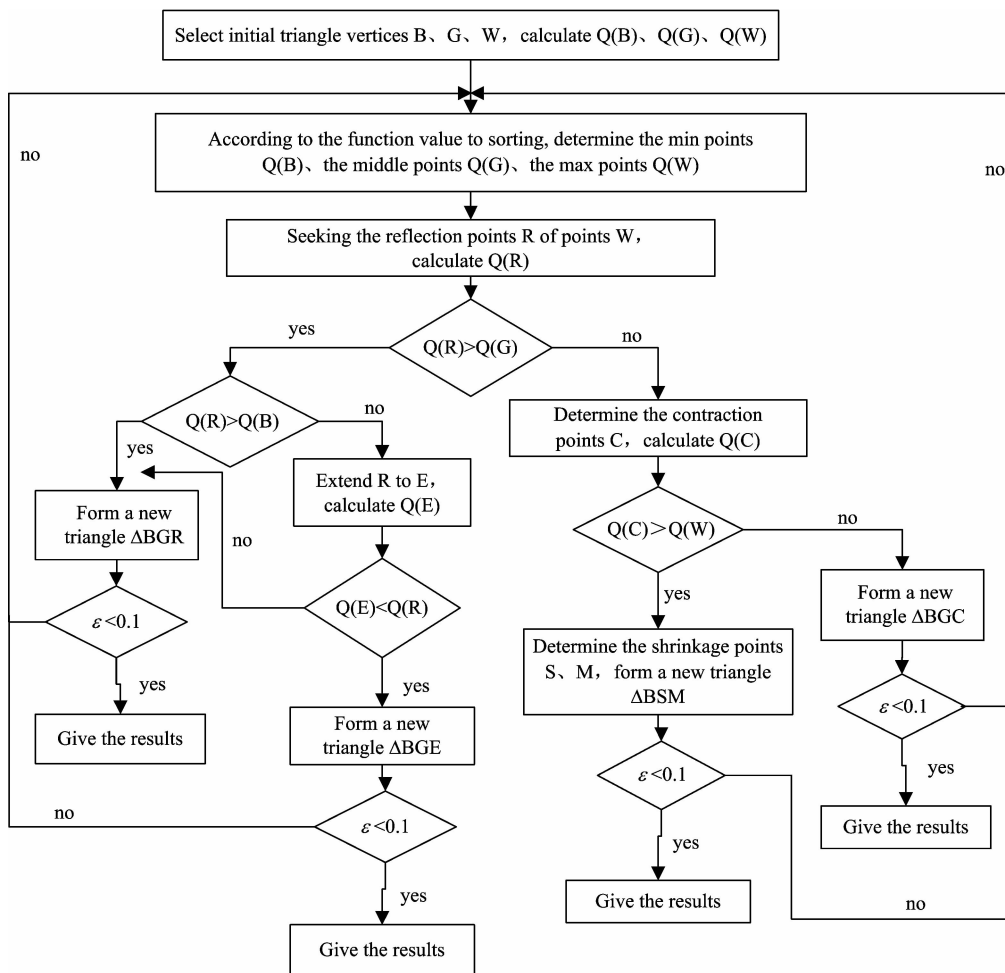


Fig. 3 The flowchart of the N-M simplex method

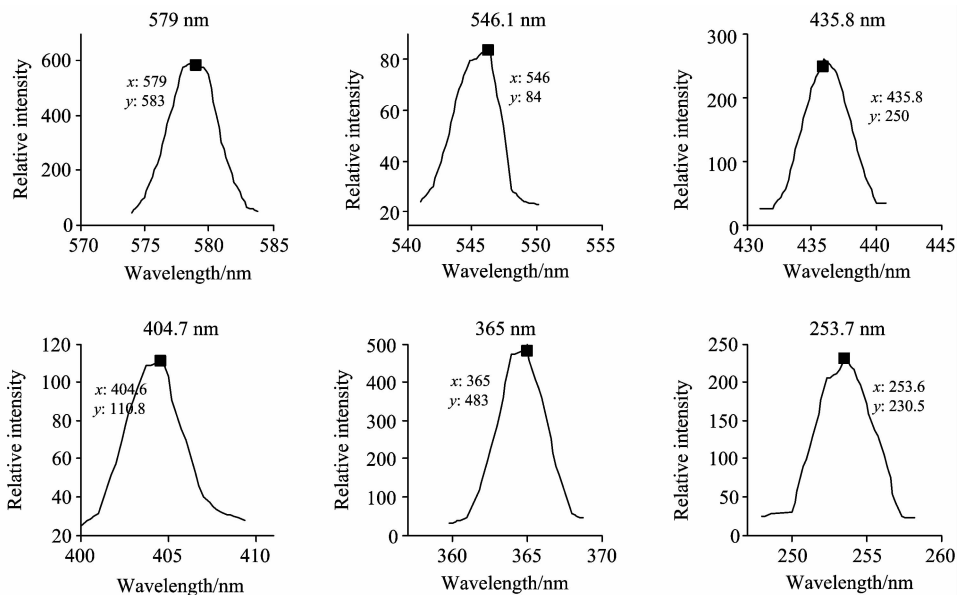


Fig. 4 The scanning spectrogram after calibration

因，采用二维 Nelder-Mead 单纯形法对 Czerny-Turner 正交型光栅单色仪的出射波长公式进行校准，使其波长定位精度

小于 0.1 nm，比仪器的设计要求提高一个数量级。该方法不需要对目标函数进行复杂的求导运算，只需借助于简单的单

纯形顶点搜索来寻找目标函数的最优值,算法简单,容易实现,其准确性和精度已经在实验中得到证实。而且,只需稍加修改电机的控制程序,即可完成对仪器出射波长的快速实时校准,实用性强。

References

- [1] FENG Zhi-qing, BAI Lan, LI Fu-tian(冯志庆,白兰,李福田). Acta Optica Sinica(光学学报), 2004, 24(3): 393.
- [2] Lu F C, Esimbek J, Zhou J J, et al. Chinese Journal of Astronomy and Astrophysics, 2007, 7(2): 297.
- [3] TANG Yu-guo, SONG Nan, Bayanheshig, et al(唐玉国,宋楠,巴音贺希格,等). Optics and Precision Engineering(光学精密工程), 2010, 18(9): 1989.
- [4] GU Yu-hai, QIAO Dao-e, XU Xiao-li(谷玉海,乔道鄂,徐小力). Chinese Journal of Scientific Instrument(仪器仪表学报), 2009, 30(3): 668.
- [5] LI Quan-chen, JIANG Yue-juan(李全臣,蒋月娟). The Theory of Spectrometer(光谱仪器原理). Beijing: Beijing Institute of Technology Press(北京:北京理工大学出版社), 1999. 190.
- [6] LI Xin, ZHANG Guo-wei, XUN Li-na, et al(李新,张国伟,寻丽娜,等). Acta Optica Sinica(光学学报), 2008, 28(5): 902.
- [7] KOU Jie-ting, Bayanheshig, TANG Yu-guo, et al(寇婕婷,巴音贺希格,唐玉国,等). Acta Optica Sinica(光学学报), 2011, 31(7): 0705002.
- [8] TANG Yu-guo, CHEN Shao-jie, Bayanheshig, et al(唐玉国,陈少杰,巴音贺希格,等). Optics and Precision Engineering(光学精密工程), 2010, 18(10): 2130.
- [9] QIAO Dao-e, GU Yu-hai, XU Xiao-li(乔道鄂,谷玉海,徐小力). Acta Photonica Sinica(光子学报), 2009, 38(9): 2283.
- [10] FEI Ye-tai(费业泰). Error Theory and Data Processing(误差理论与数据处理). Beijing: China Machine Press(北京:机械工业出版社), 1999. 94.
- [11] John H Mathews, Kurtis D Fink. Numerical Methods using Matlab. Prentice Hall, 1999. 207.
- [12] ZHANG Kai, HUANG Ming-you, ZHANG Ran, et al(张凯,黄明游,张然,等). Chinese Journal of Engineering Mathematics(工程数学学报), 2007, 24(6): 977.
- [13] NIU Ming, YANG Li-wen, CHEN Hao(牛铭,杨利文,陈昊). Journal of Hohai University Changzhou(河海大学常州分校学报), 2007, 21(1): 15.
- [14] KONG Rui-rui, QIU Ru-chen, ZHOU Tian-hui(孔锐睿,仇汝臣,周田惠). Journal of Nanjing University of Science and Technology(南京理工大学学报), 2003, 27(2): 209.

Wavelength Calibration Research on the Automatic Grating Monochromator for Orthogonal Czerny-Turner Structure

KOU Jie-ting^{1,2}, Bayanheshig^{1*}, TANG Yu-guo¹, QI Xiang-dong¹, YU Hong-zhu¹

1. Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China

2. Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract The wavelength calibration research on the automatic grating monochromator for orthogonal Czerny-turner structure was investigated. Combined with the structure parameters and characteristic of this monochromator, the sinusoid that accords with the grating equation was proposed as the function of the wavelength calibration. Based on the principle of the least square method, the formula of the fitting residual error of the wavelength calibration was given. Using the Nelder-Mead simplex method, the undetermined coefficient of the fitting residual error was solved, which founded the precise formula between the wavelength and the grating turning angle. The accuracy of the method was verified through the experiment. The calibrated wavelength precision of the monochromator is less than 0.1 nm, which satisfies the application requirement. Applied in the wavelength calibration of the automatic grating monochromator with orthogonal Czerny-Turner structure, this method is simple to apply and easy for implementation. Using this method, the wavelength calibration can be realized quickly and real-timely, but it is only needed to modify the control program of the stepping motor slightly, which shows a better practicability.

Keywords Grating monochromator; Czerny-Turner structure; Wavelength calibration; Nelder-Mead simplex method

* Corresponding author

(Received Sep. 29, 2011; accepted Dec. 27, 2011)