

高分辨率光栅单色仪

巢志成

摘要: 本文主要介绍一种高分辨率光栅单色仪的结构和性能。对该仪器的主要性能作了一般的分析。经测试仪器分辨率优于 0.007nm 。

一、前言

为研究物质、光源等精细结构的需要,现研制了一种用微机控制的光栅单色仪。该仪器具有分辨率高、操作方便、功能齐全等特点。是物理、化学、激光、计量等实验室的理想设备。

二、仪器结构

1. 光学结构的安排

仪器光路结构采用典型之字形排列的采纳——特纳 (Czerny—Turner) 型光路。焦距 $f = 1.5\text{m}$ 。借助于二块小平面反射镜和一个中间狭缝,可使 1.5m 的单通单色仪变为色散加倍的双通单色仪。单色仪的狭缝做成圆弧状,其圆心在仪器中心轴上,半径等于 $\pm f \cdot \text{tg}\phi$,此处 f 为焦距, ϕ 为入射光与衍射光之间夹角之半。这样弯曲的狭缝均与各波长上的谱线弯曲相吻合。仪器光路系统如图 1 所示,光从入缝 S_1 进入仪器,经准直镜 M_4 反射成平行光线投射到光栅 G 上,此光栅为全息平面光栅, 1800 条/ mm , 面积 $110 \times 110\text{mm}^2$ 。经衍射后的光线投射到聚光镜 M_5 上,在单程时,光线聚焦在出缝 S_3 处,或经转向镜 M_6 反射聚焦于照相干板上。双程光路时,在入缝 S_1 前加一块光栏,使光轴沿狭缝高度方向向上移 9mm ,将反射镜 M_1 和 M_2 移入光路,这样自入缝轴上方 9mm 处射入的光线就经准直镜 M_4 上部投射到光栅上,经衍射后

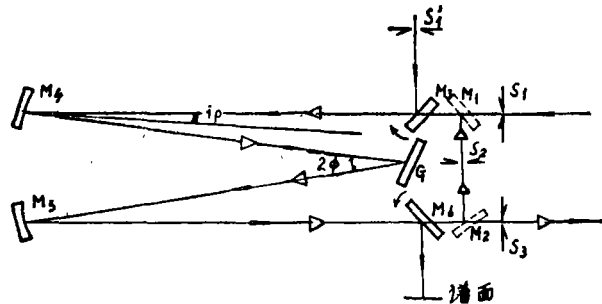


图1 光路图

投射到聚光镜 M_6 下部, 然后经 M_2 反射后聚焦在中间狭缝 S_2 处, 再次进入单色器。光线经反射镜 M_1 , 并以同样的光程经准直镜 M_4 下部、光栅 G 、聚光镜 M_5 上部, 最后由出缝 S_3 轴上方9mm处射出经两次色散的单色光束。

2. 扫描机构

根据光栅衍射方程^[1]

$$\frac{m\lambda}{d} = \sin\alpha + \sin\beta \quad (1)$$

可得
$$\lambda = \frac{2d}{m} \cos\phi \sin\theta \quad (2)$$

如图2所示, 式中 α ——入射角 β ——衍射角

ϕ ——入射光与衍射光夹角之半 $\phi = \frac{\alpha - \beta}{2}$

θ ——光栅转动角度 (从零级算起) $\theta = \frac{\alpha + \beta}{2}$

m ——衍射级数 d ——光栅常数

λ ——波长

从图中可看出 $OK = OK_1 = L$

$$L \cdot \sin\theta = x \quad (3)$$

式中 L 为杠杆长度, x 为丝母从零级光谱位置算起的移动距离。将(3)式代入(2)式可得波长随 x 线性变化的波长扫描方程

$$\lambda = \left(\frac{2d}{mL} \cdot \cos\phi \right) x = c \cdot x \quad (4)$$

其中

$$c = \frac{2d}{mL} \cdot \cos\phi$$

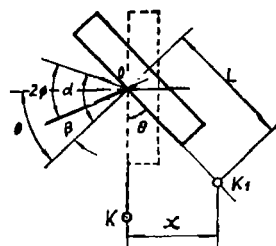


图2 光栅扫描原理图

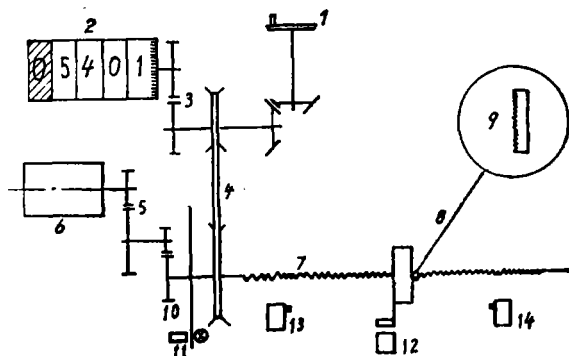


图3 扫描机构示意图

- | | | | |
|-------|---------|----------|---------|
| 1—手轮 | 2—机械计数器 | 3—齿轮组 | 4—齿皮带 |
| 5—齿轮组 | 6—步进电机 | 7—丝杆 | 8—杠杆 |
| 9—光栅台 | 10—讯号盘 | 11—光电接收器 | 12—霍尔元件 |
| | 13—起始开关 | 14—终点开关 | |

为获得足够的波长扫描精度,本仪器取 $c=6\text{nm/mm}$ 。

波长扫描机构和读数原理如图3所示,丝杆7由步进电机6通过齿轮组5传动,移动螺母,推动杠杆8,使光栅台9转动,实现波长扫描。丝杆螺距 0.5mm ,转动一圈相当于扫描波长 3nm 。光栅架采用三点定位与光栅台相联接更换、安装方便,重复性好。用齿皮带4和齿轮组3将丝杆7与计数器3相联接,计数器为四位数,读数精度 0.01nm 。

步进电机可由电机驱动控制器控制,也可以由微机控制。在驱动控制器控制扫描时,通过按键可以进行正常扫描、快速返回、停止等操作。扫描机构上的微动开关14、13分别控制扫描到终点时自动快速返回和返回到起点时自动停止。改变电阻和用变频方法控制步进电机转速,可得 $0.05\sim 50\text{nm/min}$ 十种扫描速度。

仪器设置一套起始扫描位置预置系统,可为波长自动扫描提供一个可靠的波长基准。其工作原理如下:随丝母一起移动的磁铁,当其与霍尔元件12位置对准时,霍尔元件产生一个宽脉冲输入计算机,用以粗略识别扫描机构起始位置。当随丝杆一起转动的信号盘10上的小孔与光电接收器11的位置对准时,光电接收器得到一个光信号,产生一个窄脉冲输入计算机。当两个预置信号同时加给计算机时,计算机就能精确识别扫描机构的起始位置,并自动按预置的起始波长进行扫描计算。由于该信号盘与丝杆同轴,预置精度能好于 0.01nm 。

3. 微机功能

本仪器所用的智能化步进电机驱动器及数据采集系统通过IEEE-488接口与Apple II plus微型机相接。根据预先选定的操作方式,在自编的BASIC程序引导下自动进行单色仪波长扫描、光电信号采集、数据处理及最终结果的打印、显示、绘图等操作功能。

除了以屏幕方式设置扫描速度、预置采样速率,给定测试精度外,尚有十余种子程序,如自动寻找光谱线峰值波长、光谱图曲线平滑、光谱卷积、谱线积分、面积修正等,可供使用者选用。

4. 摄谱

在仪器正面右上方备有可供安置摄谱暗盒的装置,机构简单,装卸方便。摄谱面积为 $60\times 25\text{mm}^2$,一次可摄 22nm 的光谱范围。在入缝前插入阶梯形光栏,移动光栏的不同位置,一张底片可摄谱5次。

三、性能分析

1. 分辨率

决定和影响仪器分辨率因素有以下几个方面:

(1) 光栅衍射的分辨极限

按瑞利分辨准则光栅理论分辨为^[2]

$$R_0 = kmN \quad (5)$$

光栅实际分辨率为

$$R = \eta R_0 = \eta kmN \quad (6)$$

式中 k ——衍射次数 m ——衍射级次

N ——光栅表面总刻线数 η ——光栅分辨率系数

由此光栅面形及产生全息光栅刻线的干涉条纹精度等决定,这里取 $\eta = \frac{2}{3}$ (图4)

在单色散时, 采用1800条/mm光栅一级光谱, 可

$$\Delta\lambda_1 = \frac{\lambda}{R} = 8.4 \times 10^{-6} \lambda \quad (7)$$

在双色散时 $\Delta\lambda_1' \approx 4.2 \times 10^{-6} \lambda$

(2) 象差对光谱纯度的影响

C-T型单色仪的主要象差是球差、彗差和象散。

球差之波差可按式计算^[1]

$$OPD_{sA} = \frac{y_{max}^4}{8r^3} = \frac{D^4}{1024f^3} \quad (8)$$

式中 OPD_{sA} ——球面镜的波前象差

y_{max} ——光线在球面镜上边缘到中心的距离

r ——球面镜曲率半径 D ——球面镜通光口径

f ——球面镜焦距

按本仪器所用参数可得

$$OPD_{sA} = 0.00005676 \approx \frac{\lambda}{8.8} \quad (\lambda = 0.5\mu\text{m}) \quad (9)$$

由于系统离轴角不大, 为了简便起见, 系统仅在零级消彗差, 在其余波长彗差相消后的残余量不大, 其值可按式计算

$$\begin{aligned} OPD_{coma} &= \frac{H}{r^3} \left(\frac{\cos^3 \alpha}{\cos^3 \beta} - 1 \right) y_2^3 \\ &= \frac{\text{tgi}_p}{4f^2} \left(\frac{\cos^3 \alpha}{\cos^3 \beta} - 1 \right) \end{aligned} \quad (10)$$

式中 OPD_{coma} ——彗差 y_2 ——光线在最后一块球面镜上边缘到中心的距离

i_p ——球面镜的离轴角经计算, 本系统彗差残余量是

$$OPD_{coma} = 0.0000628 \approx \lambda/8 \quad (\lambda = 0.5\mu\text{m}) \quad (11)$$

根据瑞利判断, 当象差小于 $\lambda/4$ 时, 单色仪的分辨率接近光栅实际率辨。从上述两项主要象差可见, 它们均比瑞利判据小得多, 因此本仪器的球差和彗差可以忽略不计。

由于离轴角 i^4 较小, 在调整光路时, 狭缝位置又选在子午焦点处, 象散焦线正好与狭缝完全相吻。另外, 前面已述, 谱线弯曲在各波长上均与狭缝弯曲相吻合, 所以象散和谱线弯曲几乎不影响分辨率。

(3) 反射镜误差

准光镜和聚光镜的制造误差, 一般以平行光成像的像点弥散圆直径 ε 表示。设准光镜和聚光镜的制造误差相同, 此弥散圆相当于谱线增宽

$$\Delta\lambda_2 = 2\varepsilon \left/ \frac{dl}{d\lambda} \right. \quad (12)$$

式中 $\frac{dl}{d\lambda}$ 为仪器的线色散。

(4) 光学调整误差

光学调整得不正确, 即使光学零件制造得再好, 也会引起像的增宽。光学调整得好时,

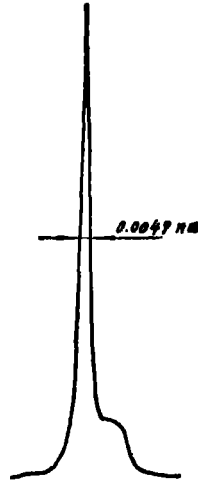


图4 用5m单色仪测光栅分辨率曲线
低压水银灯546.074nm谱线
谱线半宽度0.0049nm

不但不会产生因调整引起像的增宽,而且有时能补充准光镜和聚光镜引起的像增宽,可使实际分辨能力很接近计算值,作为合理的分配公差,可以认为光学调整的允许误差与准光镜的工艺公差大致相同, $\Delta\lambda_3 \approx \Delta\lambda_2$ 。由此平方相加上述各项误差,得单色仪的固有分辨宽度^[9]

$$\Delta\lambda_0 = \sqrt{\Delta\lambda_1^2 + \left(\frac{1}{2}\Delta\lambda_2\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\Delta\lambda_3\right)^2} \quad (13)$$

(5) 狭缝的光谱宽度

为了得到最大分辨率,仪器总是以宽度相等的入射和出射狭缝工作,使扫描所得单色光强度分布成为三角形,其半宽度

$$\Delta\lambda_s = s \cdot \frac{d\lambda}{dl} \quad (14)$$

式中 s 为狭缝机械宽度, $\frac{d\lambda}{dl}$ 为仪器线色散倒数。

分辨率研究表明,当缝宽等于仪器固有分辨宽度时,再减小缝宽,分辨率提高极为有限。必须注意:在使用全息光栅时,一般情况下,所用狭缝宽度必须大于 $5\mu\text{m}$ 。

通常仪器分辨率以有效分辨宽度表示,这样我们就需同时考虑狭缝宽度和固有分辨宽度两者的影响,并将其平方相加,得单色仪的有效分辨宽度为

$$\Delta\lambda = \sqrt{\Delta\lambda_0^2 + \Delta\lambda_s^2} \quad (15)$$

表1

$\lambda(\mu\text{m})$	0.2	0.3	0.5	0.7
$d\lambda/dl(\text{nm/mm})$	0.366	0.361	0.339	0.298
$\Delta\lambda_0$	0.054	0.058	0.061	0.068
$\Delta\lambda_s$	0.037	0.036	0.034	0.03
$\Delta\lambda$	0.065	0.068	0.07	0.074

今取反射镜制造误差像点弥散圆直径为 0.01mm ,狭缝开启宽度为 $10\mu\text{m}$,按公式(7),(12)~(15)计算出的光谱带宽 $\Delta\lambda_0$ 、 $\Delta\lambda_s$ 和 $\Delta\lambda$ 列于表(1)由表可见,仪器的分辨极限为 0.008nm ,其中, $\Delta\lambda_0$ 偏大,如果提高光学元件加工精度,改善光学系统调整,使用较高质量的光栅,仪器分辨光谱宽度可优于 0.006nm 。

2. 波长准确度

从公式(2),(4)可以看出,如果把光栅常数 d 看作不变量,则波长精度与杠杆长度 l ,入射和出射光之间夹角 2ϕ ,丝母在丝杆上的移动距离 x 和光栅转角 θ 有关,分别对公式中的自变量偏微分得

$$d\lambda_1 = \frac{2d}{ml} \cos\phi dx = \lambda \frac{dx}{x} \quad (16)$$

$$d\lambda_2 = -\frac{2xd}{ml^2} \cos\phi dl = -\lambda \frac{dl}{l} \quad (17)$$

$$d\lambda_3 = -\frac{2xd}{ml} \cdot \sin\phi d\phi = -\lambda \cdot \text{tg}\phi d\phi \quad (18)$$

$$d\lambda_4 = \lambda \cdot \text{ctg}\theta d\theta \quad (19)$$

式中 dx ——螺母在丝杆上的进程误差

dl ——杠杆长度误差

$d\phi$ ——反射镜角度调整误差

$d\theta$ ——光栅转角误差

整个单色仪的波长精度误差为

$$d\lambda = \sqrt{d\lambda_1^2 + d\lambda_2^2 + d\lambda_3^2 + d\lambda_4^2} \quad (20)$$

今取螺母在丝杆上的进程误差为0.007mm,其中包括丝杆螺距累积误差,螺母附加转角误差等,杠杆长度调整精度为0.01mm,并考虑仪器位在 $20^\circ \pm 5^\circ\text{C}$ 的室温中工作,反射镜角度调整误差为 $20''$,光栅转角调整误差为 $20''$ 。则单色仪的波长精度误差可好于0.08nm,整台仪器的波长准确度可在0.1mm内。

3. 波长重复性

波长重复性与运动机构的下列误差因素有关:如丝杆的轴向窜动 dx_1 ,丝母的晃动引起轴向移动 dx_2 和零位定位误差 dx_3 ,光栅转台晃动引起光栅转角误差 $d\theta$ 。用下式进行估算

$$d\lambda' = \sqrt{\left[\frac{2d}{ml} \cos\phi (dx_1 + dx_2 + dx_3) \right]^2 + \left[\frac{2d}{m} \cos\phi \cdot \cos\theta d\theta \right]^2} \quad (21)$$

设 $dx_1 = 0.005\text{mm}$ $dx_2 = dx_3 = 0.002\text{mm}$

$d\theta = 8''$

则 $d\lambda' = \pm 0.03\text{nm}$

即整台仪器的波长重复性好于 $\pm 0.03\text{nm}$ 。

4. 杂散光

杂散光是仪器性能重要指标之一。为消除杂光,本仪器采取如下措施:采用前截止滤光片,消除光谱叠级;用全息光栅作为分光元件,它无鬼线,且具有最低的杂散光;对光学零件表面光洁度和清洁度都提出较高的要求;仪器密封严密,以防漏光和进尘埃;仪器内壁及金属零件表面均涂以反射系数较低的消光材料;光路设计考虑了Cary原理,并在光路中加上栏光板以消杂光。由于采取以上措施,因此仪器具有较低的杂散光。

四、测试结果

为了证实上述性能的分析结果和考查结构设计及制造的优劣,分别对分辨率、杂光、波长精度和波长重复性进行了测试,其结果如表2所示。分辨率测试结果如图5所示,图中所画曲线为低压汞灯546.074nm谱线,采用入缝、出缝宽 $10\mu\text{m}$,纸速 $60\text{mm}/\text{min}$,扫描速度 0.25nm 其半宽度约 0.007nm 。杂散光测试采用氙灯作光源,入缝、出缝宽 $50\mu\text{m}$,高 10mm ,安置波长于 220nm 处,先在入缝前插入滤光片 ZWB_1 ,然后移去滤光片放上等厚的石英片,再关光闸,分别从 PZ_3 表上读数,如此重复5次,并按公式 $\frac{V_3 - V_2}{V_1 - V_2}$ 计算杂散光^[4],式中 V_1 、 V_2 、 V_3 分别为移去滤光片、关光闸、放上滤光片在 PZ_3 表上的读数。测得结果表明,仪器杂光 $<10^{-3}$ 。对仪器波长精度测试结果为 $\pm 0.05\text{nm}$ 波长重复性为 $\pm 0.03\text{nm}$ 。

表2 测试结果

波段范围	200~700nm
分辨率	优于0.007nm
波长精度	±0.05nm
波长重复性	±0.03nm
杂散光	10 ⁻⁸

以上测试结果表明，上述性能分析是正确的，仪器性能已达到设计技术指标。

参加本仪器设计工作的还有：翁志成、李福田、徐正良、李家孔、张丽华、谷尚贤、张福成、孙国华、张力群、孙剑辉等同志。

参 考 文 献

- [1] M.V.R.K.Murty, Theory and principles of monochromators, spectrometers and spectrographs, Optical Engineering, 1974, 13, NO.1, 23.
- [2] Division Jobin—Yvon, Very high resolution grating monochromator model THR, operating instructions, January 1977.
- [3] 唐九华, 红外分光光度计的性能设计, 光学机械, 1976, 2, 7.
- [4] 李昌厚, 光栅单色仪杂散光的测试及有关问题的探讨, 光学与光谱技术, 1984, 2, 34.

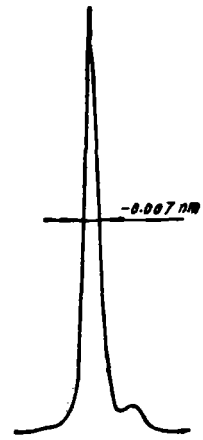


图5 仪器分辨率曲线
 低压水银灯 546.074nm谱线。入
 缝、出缝宽10μm。记录纸速度 60
 mm/min波长扫描速度 0.05nm/
 min谱线半宽度0.007nm

High Resolution Grating Monochromator

Chao Zhicheng

Abstract

The construction and performance of a high resolution grating monochromator are described and analysed in this paper. The resolution of the monochromator is proved to be better than 0.007nm by testing.