

文章编号: 1001-3806(2012)05-0682-04

## 微型光纤光谱仪的波长定标分析

武传龙<sup>1</sup>, 冯国英<sup>1\*</sup>, 韩旭<sup>1</sup>, 姜海涛<sup>1</sup>, 欧群飞<sup>1</sup>, 王建军<sup>2</sup>, 李密<sup>3</sup>

(1. 四川大学 电子信息学院, 成都 610064; 2. 中国工程物理研究院 激光聚变研究中心, 绵阳 621900; 3. 中国工程物理研究院 应用电子学研究所, 绵阳 621900)

**摘要:** 为了提高光纤光谱仪的测量精度, 采用标准汞氩灯谱线和最小二乘法的 3 阶线性拟合, 取得了完整的波长定标方案。结果表明, 算术平均误差小于 0.167nm, 标准差小于 0.217nm, 波长与像素的拟合相关程度较高; 定标后波长不确定度优于 0.11nm, 误差小于 0.15nm, 波长重复性可达 0.01nm。这一结果对提高光谱仪实际应用中的测量精度是非常有益的。

**关键词:** 光谱学; 波长定标; 最小二乘; 光纤光谱仪

中图分类号: TH744.1 文献标识码: A doi: 10.3969/j.issn.1001-3806.2012.05.027

## Wavelength calibration for miniature fiber optical spectrometers

WU Chuan-long<sup>1</sup>, FENG Guo-ying<sup>1</sup>, HAN Xu<sup>1</sup>, JIANG Hai-tao<sup>1</sup>, OU Qun-fei<sup>1</sup>, WANG Jian-jun<sup>2</sup>, LI Mi<sup>3</sup>

(1. College of Electronics and Information Engineering, Sichuan University, Chengdu 610064, China; 2. Research Center of Laser Fusion, Chinese Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China; 3. Institute of Applied Electronics, Chinese Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

**Abstract:** In order to improve the measurement accuracy of the miniature fiber spectrometer, a complete calibration scheme was obtained based on the standard emission spectrum of mercury and argon lamp and three-order linear fitting of the least squares. Calibration results show that the arithmetic mean error is less than 0.167 nm, standard deviation is less than 0.217 nm and the fitting related degree is high. Test results show that after calibration the wavelength uncertainty is better than the 0.11 nm, the error is less than 0.15 nm, and the wavelength repeatability can reach 0.01 nm. This result is beneficial for improving the measurement precision of spectrometers in the practical applications.

**Key words:** spectroscopy; wavelength calibration; the least squares; fiber spectrometer

### 引 言

近年来, 伴随着光纤技术、电荷耦合器件 CCD 及个人数字助理阵列器件和计算机技术的迅速发展, 微型光纤光谱仪成为现代光谱测量中的核心元件<sup>[1-3]</sup>。与传统的分光扫描式光谱仪相比, 它具有体积小、耗电小(可通过 USB 接口直接供电)、效率高、光谱范围宽(从紫外到红外波段)等诸多显著的优点, 而广泛应用于化学分析、临床医学、工业检测、航空航天等各个领域<sup>[4-7]</sup>。

### 1 波长定标原理

微型光纤光谱仪是基于光栅和 CCD 阵列的高性

能光谱探测器, 其工作原理<sup>[8]</sup>如图 1 所示。狭缝接收单芯光纤传来的光, 经准直镜反射转变成平行光照射到固定的衍射光栅, 衍射光再经聚焦镜汇聚到线阵 CCD 探测器上, 线阵 CCD 光电传感器接收光信号并转换成电信号, 经数字化后输给计算机, 由计算机系统完成数据的处理和最终结果的显示、储存。

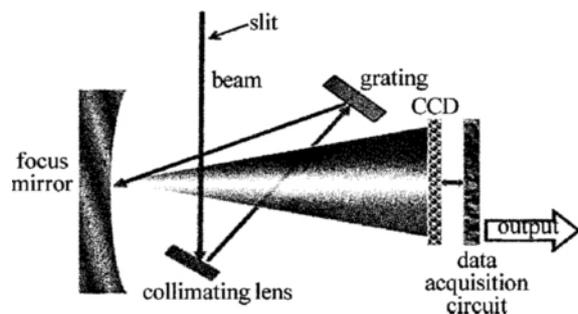


Fig. 1 Schematic of USB4000 spectrometer

实时检测、现场检测是微型光纤光谱仪的主要应用, 其受气压、温度、使用环境、使用年限等外部因素的影响, 光纤的发散角、光栅的衍射能力和 CCD 探测效率等很有可能发生漂移, 进而影响光谱仪波长探测的准确性<sup>[9-10]</sup>, 因此, 定期对光纤光谱仪进行波长校正

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (60890200; 10976017; 10876022); 固体激光技术国家级重点实验室基金资助项目

作者简介: 武传龙(1987-), 男, 硕士研究生, 现主要从事激光与光通信的研究。

\* 通讯联系人。E-mail: guoing\_feng@scu.edu.cn

收稿日期: 2011-11-23; 收到修改稿日期: 2012-02-15

非常必要的。光纤光谱仪的波长定标是指仪器的辐射定标,是确定光谱仪的波长测量范围、波长准确度、波长重复性、最大偏差等性能指标的前提。实验中采用海洋公司 USB4000 微型光纤光谱仪进行波长的定标分析,该光谱仪内置东芝公司的高性能 3648 像元的线阵 CCD 探测器,探测器的响应波长范围为 340nm ~ 1100nm,其结构如图 2 所示。

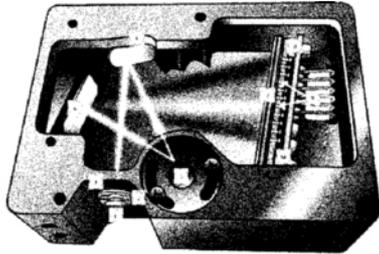


Fig. 2 Structure of USB4000 spectrometer

微型光纤光谱仪的数据采集是以 CCD 像元为接收单位,光谱曲线是由光纤光谱仪的光栅特性与 CCD 阵列之间的相对位置决定的。波长定标的基本原理是:采用具有特征谱线的光源(汞氙灯),精确确定定标谱线对应的像元位置,通过多项式拟合、最小二乘法等算法,得出仪器的波长定标方程,实现 CCD 像元与波长数学关系上的匹配。定标光源、谱线中心位置计算、曲线拟合是影响波长定标精度的主要因素,定标用光源所含的已知光谱线数量越多,分布越均匀,测算结果就越准确<sup>[11-12]</sup>。

曲线拟合是指用最小二乘法将 CCD 像元序数与定标光源峰值波长之间的离散数据关系转变为连续函数关系。微型光纤光谱仪与 CCD 像元之间服从下列一个多项式分布<sup>[13-15]</sup>:

$$\lambda = A + Bx + Cx^2 + Dx^3 + \dots \quad (1)$$

式中  $x$  为 CCD 的像元序数,  $\lambda$  为第  $x$  个像元对应的波长,  $A, B, C, D$  等为待定系数。采用最小二乘法的不同阶拟合来标定光谱仪,即采用标准光源的峰值光谱线  $\lambda_i$  和其在光谱仪中对应的中心像元序数  $x_i$  来确定  $A, B, C, D$  等参量,采用误差分析来确定最优化的拟合方案。假设测定了  $n$  条光谱线  $\lambda_i (i=1, 2, 3, \dots, j, \dots, n)$  对应的像元序数  $x_i (i=1, 2, 3, \dots, j, \dots, n-1)$ , 则可得到下列方程:

$$\begin{cases} \lambda_1 = A + Bx_1 + Cx_1^2 + Dx_1^3 \dots \\ \lambda_2 = A + Bx_2 + Cx_2^2 + Dx_2^3 \dots \\ \lambda_3 = A + Bx_3 + Cx_3^2 + Dx_3^3 \dots \\ \vdots \\ \lambda_i = A + Bx_i + Cx_i^2 + Dx_i^3 \dots \end{cases} \quad (2)$$

解(2)式可以得到  $A, B, C, D$  的不同阶次的最小二乘法估计,进而得到波长与像元的拟合方程。

由误差分析检测中测量列(集合)的误差,依据 CCD 像元序数  $x$  和因变量  $\lambda$  之间不同阶拟合关系,分别求得其绝对算术平均误差、方差及标准误差:

$$E = \frac{\sum d_i}{n}, D = \frac{1}{n} \sum (d_i - E)^2, \\ \delta = \sqrt{\frac{1}{n} \sum (d_i - E)^2} \quad (3)$$

式中  $d_i$  为不同波长处的拟合波长与标准波长之间的绝对误差;  $n$  是所取点数;  $E$  为绝对误差的算术平均值,  $E$  越小表示测量精度越高;  $D$  为拟合波长与标准波长之间差值的均方差;  $\delta$  为标准差,用来表示测量值对算术平均误差的分散程度,其值越小测量越稳定,像元序数  $x$  和因变量  $\lambda$  之间拟合程度就越高。

为进一步检验拟合模型的准确性,用定标后的光谱仪和标准光谱仪分别测量某一光谱,并确定光谱仪的主要性能指标,如波长准确度、波长重复性、最大偏差等<sup>[16]</sup>,即完成对光谱仪的完整定标。波长准确度  $\Delta$  指标准物质某一峰值谱线的波长测定值与该谱线的标定波长之间的差值,是光谱仪最重要的技术指标之一,直接影响仪器测量结果的可信和可靠程度。

$$\Delta = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\lambda_i - \lambda_0) \quad (4)$$

波长重复性是指光谱仪返回标准波长的能力,多次测量同一标准波长值时所给出的波长值的变化量。可以用  $\delta$  进行表征:

$$\delta = \max(\lambda_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \lambda_i) \quad (5)$$

波长最大偏差指多次测量同一标准波长值时偏离标准波长的最大值:

$$\Delta \lambda_{\max} = \max\{\lambda_i - \lambda_0\} \quad (6)$$

(4)式、(5)式、(6)式中  $n$  是测量次数,  $\lambda_0$  为标准波长,  $\lambda_i$  为第  $i$  次的测量波长。

## 2 实验及其结果分析

定标光源采用低压汞氙灯<sup>[17]</sup>,在不同的积分时间下用 USB4000 微型光纤光谱仪分别测量了汞、氙灯 340nm ~ 1000nm 范围内的谱线分布,其光谱线分布如图 3 所示,实线表示汞灯的光谱线分布,虚线表示氙灯的光谱线分布,纵轴仅表示相对幅值大小。根据美国国家标准技术研究院(National Institute of Standards and Technology, NIST)元素光谱灯发射线数据库与光谱仪探测波段,通过峰值法<sup>[18]</sup>精确确定 22 条谱线的标准波长及其对应的中心像元序数,重复测量 5 次求平均,整理后的数据如表 1 所示。

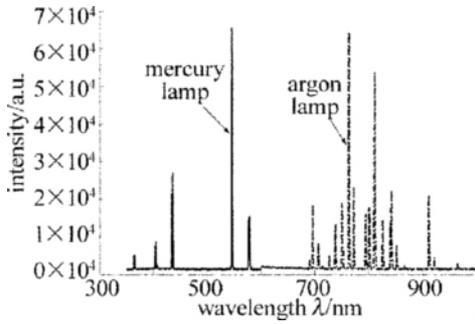


Fig.3 Emission spectrum of mercury and argon lamp

Table 1 Standard wavelength and ordinal numbers of CCD's pixels

average number of CCD pixels	standard wavelength $\lambda_1$ /nm	average number of CCD pixels	standard wavelength $\lambda_1$ /nm
90.0	365.01	1998.4	750.39
275.6	404.66	2065.4	763.51
290.6	407.78	2112.8	772.4
424.0	435.84	2233.4	794.82
957.4	546.08	2268.8	800.62
1108.4	576.96	2323.8	811.53
1118.8	579.07	2405.4	826.45
1713.4	696.54	2493.8	842.26
1766.4	706.72	2547.4	852.14
1873.8	727.29	2887.4	912.30
1932.6	738.40	2945.8	922.45

Table 2 Difference order fitting wavelength and its difference value compare with standard wavelength

the third fitting wavelength/nm	the second fitting wavelength/nm	the first fitting wavelength/nm	$\lambda_2 - \lambda_1$ /nm	the third fitting error /nm	the second fitting error /nm	the first fitting error /nm
365.04	364.67	372.81	0.04	0.03	0.34	7.8
404.53	404.52	409.21	0.11	0.13	0.14	4.55
407.7	407.72	412.15	0.12	0.08	0.06	4.37
435.7	436.03	438.31	0.09	0.14	0.19	2.47
545.93	546.65	542.92	0.19	0.15	0.57	3.16
576.74	577.22	572.53	0.16	0.22	0.26	4.43
578.96	579.31	574.57	0.2	0.11	0.24	4.5
696.47	696.38	691.18	0.15	0.07	0.16	5.36
706.69	706.57	701.58	0.11	0.03	0.15	5.14
727.2	727.09	722.64	0.06	0.09	0.2	4.65
738.43	738.25	734.17	0.16	0.03	0.15	4.23
751.3	750.69	747.08	0.37	0.91	0.3	3.31
763.54	763.28	760.21	1.84	0.03	0.23	3.3
772.34	772.15	769.51	0.16	0.06	0.25	2.89
794.85	794.58	793.16	0.15	0.03	0.24	1.66
801.31	801.12	800.11	0.45	0.69	0.50	0.51
811.42	811.25	810.89	0.25	0.11	0.28	0.64
826.41	826.19	826.89	0.16	0.04	0.26	0.44
842.36	842.28	844.23	0.02	0.10	0.02	1.97
852.09	851.98	854.75	0.11	0.05	0.16	2.61
912.08	912.52	921.42	0.30	0.22	0.22	9.12
922.09	922.75	932.88	0.17	0.36	0.30	10.43

Table 3 Error analysis of difference order fitting wavelength

order	arithmetic mean difference /nm	variance /nm	standard deviation /nm
1	3.979	6.336	2.517
2	0.237	0.015	0.121
3	0.167	0.047	0.217

对比表2与表3中的数据,1阶拟合测量精度与稳定性最差,2阶与3阶拟合都具有很好的稳定性,但3阶拟合的测量精度最高,所以采用最小二乘法的3阶拟合来标定光谱仪波长与像素之间的相对关系。定标后的拟合方程为:

$$\lambda = 345.70335 + 0.2151399x - 5.48638 \times 10^{-6}x^2 - 3.689045 \times 10^{-10}x^3 \quad (7)$$

如表2所示,拟合结果定标后波长与标准值的最大偏差为0.64nm,由(3)式求得拟合算术平均误差小于0.167nm,标准差小于0.217nm,证明拟合后的 $\lambda$ 与 $x$ 之间的相关程度非常高。

### 3 结果检验

用USB4000光谱仪测量He-Ne激光器、普通汞灯的特征谱线,并将其与标准光谱仪测得光谱线进行比较,其中图4是汞灯的光谱分布,图5是He-Ne激光器光谱分布。He-Ne激光与汞灯的两个峰值的相关参数重复测量3次,计算波长准确度、重复性及最大偏差,测量及计算结果见表4。

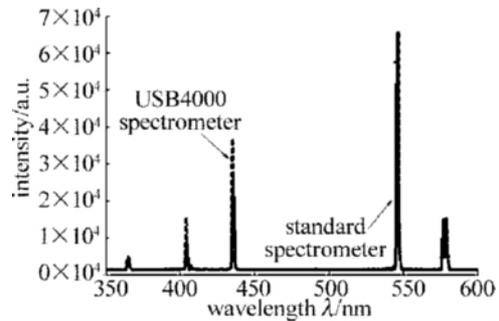


Fig.4 Emission spectrum of mercury lamp

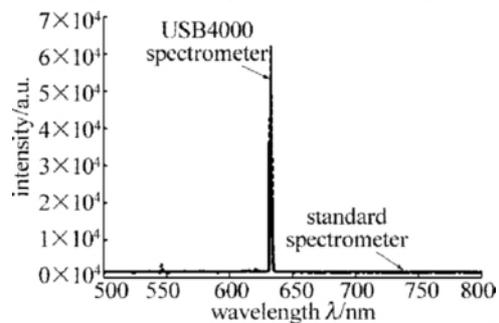


Fig.5 Emission spectrum of He-Ne laser

Table 4 Measurement result for specific spectral

peak emission spectrum	He-Ne laser	mercury lamp 1	mercury lamp 2
standard wavelength/nm	632.80	435.58	546.08
the first measurement/nm	632.67	435.54	545.98
the second measurement/nm	632.69	435.62	546.01
the third measurement/nm	632.70	435.59	545.93
$\Delta\lambda_{\max}$	0.13	0.04	0.15
$\Delta$	0.11	0.03	0.11
$\delta$	0.01	0.04	0.11

## 4 结论

微型光纤光谱仪作为一种精密仪器,要获得高精度的波长测量结果在使用前对其进行定标是必要且重要的步骤。针对短光纤光谱仪的特点,确定了完整的波长定标方案。采用汞氙灯峰值谱线解决了定标要求波长范围大、波长点多的问题,采用峰值法精确计算波长中心像元位置降低了不确定度,重复测量提高了定标精度,确定了最小二乘和3阶多项式拟合完整的定标模型。定标后平均误差小于0.167nm,标准差小于0.217nm,波长与像素的拟合相关程度较高。波长不确定度优于0.11nm,最大误差小于0.15nm,波长重复性可达0.01nm,证明实验采用的定标模型是完全合理的。

### 参考文献

- [1] JU H, WU Y H. The state of the art of micro spectrometers[J]. Optics Precision Engineering, 2001, 9(4): 372-376( in Chinese).
- [2] HU Y, RONG J. The development and expectation of CCD[J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2005, 26(8): 718-720( in Chinese).
- [3] ZHANG Y, ZHAO Y, WU X M, *et al.* Advancement on multi-spectrum detecting and laser multi-spectrum detecting mtechnology [J]. Laser Technology, 2007, 31(2): 187-191( in Chinese).
- [4] ZHANG Zh W. Microminiature fiber optic spectroscopy[J]. Life Science Instruments, 2006, 4(8): 51-54( in Chinese).
- [5] JIA H, YAO Y. Characteristics of typical optical systems with diffractive gratings of micro spectrometers and improvement of spectrometer's resolution[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2007, 27(8): 1653-1656( in Chinese).
- [6] DONG Sh R, HOU L T. Fabrication and the spectrum property of Yb<sup>3+</sup>-doped silicate glass[J]. Laser Technology, 2010, 34(2): 236-239( in Chinese).
- [7] WANG W L, TAN T, WANG L, *et al.* Development of micro-spectrometer based on linear CCD clip [J]. Journal of Atmospheric and Environmental Optics, 2011, 6(4): 299-304( in Chinese).
- [8] SHI J F, HUI M, WANG D Sh, *et al.* Micromation and applications of spectrometers [J]. Optical Technique, 2003, 29(1): 13-15( in Chinese).
- [9] JIA H, LI F T. Analysis of factors affecting spectral radiance calibration by applying a diffuse plane [J]. Acta Optica Sinica, 2004, 24(3): 383-387( in Chinese).
- [10] LI X, ZHANG G W, XUN L N, *et al.* Wavelength calibration of shortwave infrared flat spectroradiometer [J]. Acta Optica Sinica, 2008, 28(5): 902-906( in Chinese).
- [11] HOPKINSON G R, GOODMAN T M, PRINCE S R, *et al.* A guide to the use and calibration of detector array equipment [M]. Washington, DC, USA: Sira Technology Ltd. 2004: 123-136.
- [12] QIAO D E, GU Y H, XU X L, *et al.* Wavelength calibration algorithm in grating spectrometer [J]. Acta Photonica Sinica, 2009, 38(9): 2283-2287( in Chinese).
- [13] SHEN H Ch, PAN J G, FENG H J, *et al.* Calibration of the fast scan multichannel spectrometer [J]. Optical Instruments, 2006, 28(2): 51-55( in Chinese).
- [14] SHI H L, XIONG W, ZUO M M, *et al.* Study on calibration method of spatial heterodyne spectrometer [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2010, 30(6): 1683-1687( in Chinese).
- [15] XIE Y Zh, ZHUANG S L, ZHANG B Zh. Research on calibration of spectrometer based on linear CCD [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2011, 32(3): 546-550( in Chinese).
- [16] XU Zh M, YU B X. Wavelength calibration for PC20002PC/104 spectrometer [J]. Optics and Precision Engineering, 2004, 12(1): 11-14( in Chinese).
- [17] SANSONETTI C J, SALIT M L, READER J. Wavelengths of spectral lines in mercury pencil lamps [J]. Applied Optics, 1996, 35(1): 74-77.
- [18] ZHANG T Q, ZHENG Y M. Research on demarcating methods of spectrum by CCD [J]. Optical Technique, 2002, 28(3): 257-258( in Chinese).