

文章编号:1005-4642(2020)11-0048-05

Czerny-Turner 型光栅光谱仪的虚拟仿真

马 艳

(同济大学 物理科学与工程学院, 上海 200092)

摘 要:针对 Czerny-Turner 型光栅光谱仪的光学系统的虚拟仿真实验提出了设计方案. 利用计算机模拟软件 COMSOL 对光谱仪的光学系统进行建模, 实现了入射狭缝宽度与光栅常量对光谱仪分辨率影响的数值模拟. 学生通过该仿真实验可理解 Czerny-Turner 型光栅光谱仪的光学结构、工作原理及光谱学的基础知识.

关键词:Czerny-turner 光栅光谱仪; 虚拟仿真; 校准; 光谱仪分辨率

中图分类号:O4-39; G642. 423

文献标识码:A

DOI:10. 19655/j. cnki. 1005-4642. 2020. 11. 008

光谱分析是科学工作中应用广泛的方法, 被用来研究物理学、化学、生物学、地质学、地球物理学、医学和其他学科中的基础问题 and 应用问题^[1-3]. 光谱仪器是光谱分析方法中必不可少的工具, 它是应用光学技术及光谱技术原理对物质的结构和成分进行观测、分析和处理的基本设备.

光栅光谱仪具有分析精度高、测量范围大、速度快和样品用量少等优点, 高等院校利用光谱仪开设相应实验课程, 是解决学生学习中“理论多实践少”的有效途径. 国内部分高校已经设立相应的实验课程, 为对光谱仪感兴趣的学生提供了学习和实验研究的平台, 帮助他们熟悉和掌握关于光谱仪所需的软硬件知识, 同时也有助于提高光谱学的教学质量^[4-9].

Czerny-Turner(CT)光栅光谱仪^[10]由于结构简单, 便于机械装调, 能避免二次或多次衍射带来的杂光问题^[11-12], 目前被用于高分辨率微型光谱仪与微弱光谱探测中. 然而, 由于仪器价格昂贵、对环境要求较高, 或为了保证仪器的稳定性及测量结果的准确性^[13], 绝大多数的仪器厂商都会将仪器的各个元件进行固定, 并封闭在“黑盒子”里^[14-15], 不允许操作者拆开进行调整, 操作者在使用过程中只能看到平面的原理图, 并不能深入了解仪器内部的工作状态和过程. 为此, 建议采用

虚拟仿真实验的方式实现光谱仪的构造和工作原理的教学. 虚拟仿真实验的教学方式可节约成本, 经济性高; 操作灵活, 便于学生自主学习, 若加入建模过程则更有助于加强学生对实验原理的深刻理解. 近年来, 国内外高校已经开始出现虚拟仿真实验教学方案, 并越来越受到实验教学领域的重视^[13, 16-17].

本文借助 COMSOL 软件的几何光学模块中的光线追迹法, 仿真模拟了 Czerny-Turner 型光栅光谱仪的工作模式, 并分析了各实验参量对其光谱分辨率的影响. 学生还可以利用仿真出的参量结合商售的光学元器件自行搭建光谱仪并测量相关数据, 与理论结果对照, 使得学生能够在目前的先进的光谱探测和分析方面得到训练, 并且培养独立科研能力.

1 Czerny-Turner 型光栅光谱仪结构及工作原理

Czerny-Turner 型光谱仪的光路系统如图 1 所示, 该系统沿光传播方向, 依次为入射狭缝、准直凹面镜、光栅、会聚凹面镜和光谱探测器, 其中入射狭缝、准直凹面镜和光栅构成入射光路, 光栅和会聚凹面镜构成出射光路, 平面光栅置于经准直镜反射后形成的平行光中.

收稿日期:2020-08-17

基金项目:国家自然科学基金资助项目(No. 61565004, No. 91123022, No. 11573020); 同济大学实验教学改革专项基金资助项目

作者简介:马 艳(1974—), 女, 山西太原人, 同济大学物理科学与工程学院副教授, 博士, 主要从事纳米光学、激光光学以及光学实验的模拟仿真等方面的研究. E-mail: mayan@tongji. edu. cn



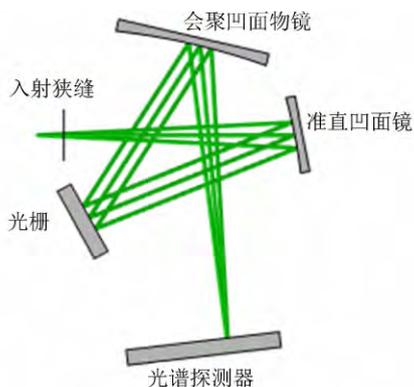


图 1 Czerny-Turner 型光栅光谱仪的结构示意图

光栅的工作原理: $d(\sin \theta + \sin \alpha) = k\lambda$, 式中 d 为光栅常量, θ 角为光线入射角, α 为光的衍射角, k 为衍射级次, λ 为入射光波长. 光栅把不同频率的光以不同的衍射角出射, 而这些光线会以不同的入射角与位置照射在成像镜上. 如果选择合适的参量(如光学元件之间的距离与角度)使得只有 +1 级衍射光可以通过系统入射到探测器上. 为了保障入射到平面光栅的光线以同一角度 θ (平行)入射, 入射狭缝需放置在准直镜的前焦平面上. 同时, 为了尽可能减小成像面的像差, 系统设计中必须满足 $F_{\text{number}} > 3$ 的条件, 如果小于 3 由于色差影响, 各种色光无法会聚在同一平面.

$$F_{\text{number}} = \frac{1}{2R_{\text{NA}}}, \quad (1)$$

其中, R_{NA} 为系统入射光路的数值孔径, 与入射狭缝的缝宽、准直镜及光栅的尺寸有关.

当以 CCD 为光谱检测器件时, 光谱仪的光谱分辨率可表示为

$$\delta\lambda = \frac{\Delta\lambda w_i}{N w_p}, \quad (2)$$

其中, $\Delta\lambda$ 是 CCD 可探测的光谱范围, N 为 CCD 像素, w_p 为像元大小, w_i 某一色光的宽度.

2 Czerny-Turner 型光栅光谱仪仿真

2.1 建模

首先利用 COMSOL 软件的几何光学模块中的射线追踪功能实现 Czerny-Turner 型光栅光谱仪的三维建模. 建模主要步骤: 几何模型建立、输入光学元件材料参量、物理场的选择、光谱数据的引入、网格划分.

1) 几何结构建立

Czerny-Turner 型光栅光谱仪的三维几何结

构如图 2 所示. 初步设置的几何参量沿光传播的路径依次为: 入射狭缝的尺寸 $1 \text{ mm} \times 15 \text{ mm}$; 准直镜尺寸 $15 \text{ mm} \times 20 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ 、曲率半径为 100 mm 、倾斜角 11° ; 光栅尺寸 $15 \text{ mm} \times 20 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ 、刻线数 600 mm^{-1} 、倾斜角 28.76° ; 成像物镜尺寸 $30 \text{ mm} \times 20 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ 、曲率半径 130 mm 、倾斜角 77° ; 光谱探测器尺寸 $30 \text{ mm} \times 20 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ 、像数数 $N = 1 \times 3\ 648$ 、像元尺寸 $8 \mu\text{m}$ 、倾斜角 6.76° , 光谱探测器采用线阵 CCD.

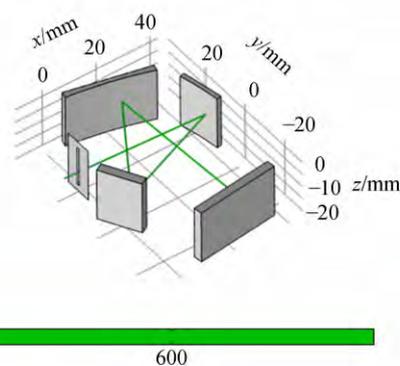


图 2 Czerny-Turner 型光栅光谱仪的三维几何结构

2) 输入材料参量

从 COMSOL 的材料库中选择光栅材料为 Silica glass, 准直镜与会聚镜的材料为 Schott N-SK2.

3) 物理场的选择

选择添加物理场, 在下拉菜单中选择光学 \rightarrow 射线光学 \rightarrow 几何光学. 最后在研究方法中选择射线追踪.

4) 光谱数据引入

采用低压汞灯光谱作为分析数据, 常用可识别的低压汞灯特征谱线波长如表 1 所示.

表 1 常用可识别的低压汞灯的特征谱线波长

n	λ/nm	n	λ/nm
1	253.652	6	435.834
2	296.728	7	546.075
3	365.016	8	576.960
4	404.657	9	579.066
5	407.784		

5) 网格的划分

在 Czerny-Turner 型光栅光谱仪的模拟中, 采用由细网格向粗网格、由内向外进行迭代运算.

6) 计算

建模后,利用光线追迹法计算空间内光线传播轨迹.结果如图 3 所示,图中表示了入射的低压汞灯光源在光谱仪中的传播轨迹.颜色条为波长的大小变化.由于受仪器分辨率限制,波长间隔较小的几条谱线 404.657 nm 与 407.784 nm,以及 576.960 nm 与 579.066 nm 无法有效区分.

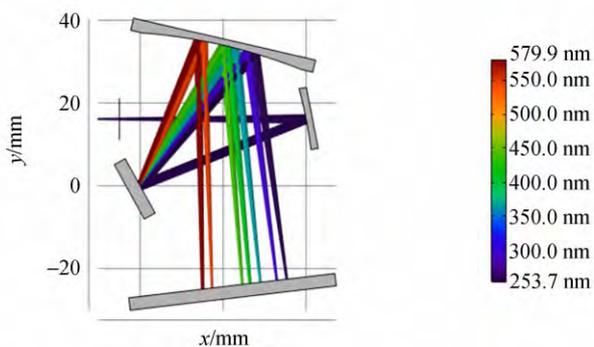


图 3 Czerny-Turner 型光栅光谱仪的 +1 级光线轨迹图

通过选择合适的光谱仪结构参量,使得只有 +1 级衍射光谱可以到达 CCD,其他级次的光谱传播情况如图 4 所示.

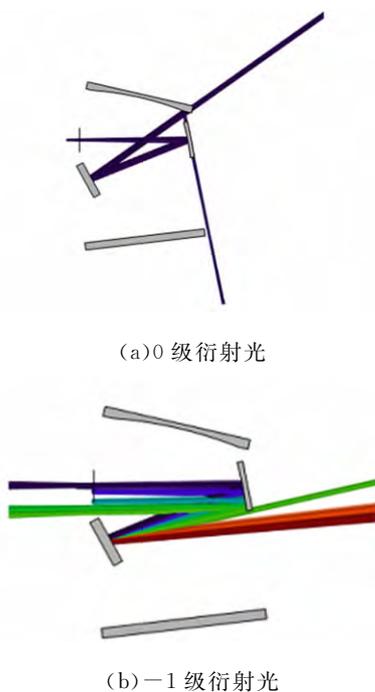


图 4 Czerny-Turner 型光栅光谱仪的 0 级与 -1 级光线轨迹图

2.2 光谱波长与对应的像元位置的曲线关系

入射光源被光栅衍射分光后,根据光栅原理,不同频率的光线以不同的角度传播.根据结构设

计只有 +1 级衍射光能在系统中传输.根据光栅公式,+1 级衍射光满足小角度衍射,则有 $\sin \alpha \approx \alpha = \lambda/d$,即衍射角与对应波长成线性关系.

衍射光经成像镜会聚后成像在 CCD 探测面上,对应的像元位置可表示为

$$p_{\text{num}} = \text{ceil} \left(\frac{N}{2} - \frac{q_x - Q_{dx}}{\omega_p \cos \theta_d} \right),$$

其中, N 表示 CCD 的像数, q_x 表示某一频率的衍射光在 CCD 上的位置坐标, Q_{dx} 表示 CCD 中心的坐标, θ_d 表示 CCD 相对于轴向的偏转角, ω_p 为像元的大小,ceil 表示向上取整.

图 5 为像元位置随光谱仪的狭缝宽度、光栅常量、CCD 像素变化的关系图,可见调整狭缝宽度不会改变像元位置,而改变其他参量像元的位置都会发生改变.而像元位置是与光谱的波长一一对应的.所以,在光谱测量过程中除了入射狭缝的宽度可以调整其他参量都不可以改变.如果改变了这些参量需要对光谱仪的重新进行校准.

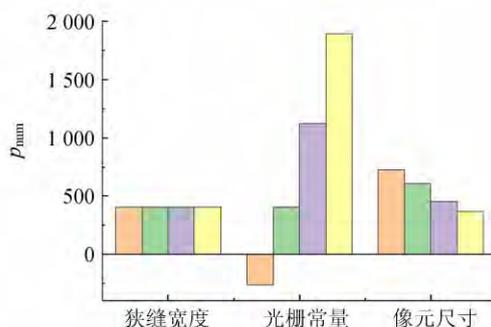


图 5 像元位置随光谱仪参量的变化

3 光谱仪分辨率的影响因素分析

3.1 入射狭缝的宽度

图 6 为光谱分辨率随入射狭缝宽度变化的关系曲线,可以看出,入射狭缝的宽度对光谱分辨率的影响很大.由 407.784 nm 的谱线可以看出:在狭缝宽度从 2.00 mm 减小到 0.02 mm 的过程中,光谱分辨率从 5.64 nm 变化为 0.064 nm,光谱分辨率提高了 98.8%,可见减小入射狭缝宽度可以有效地提高光谱分辨率.由图 6 可见其他波长的谱线也可得到类似的结论.但是,在实际的光谱实验中狭缝宽度变小会影响光谱信号的强度,影响光谱的探测灵敏度,实际实验时需根据需求综合考虑,选择合适的狭缝宽度.

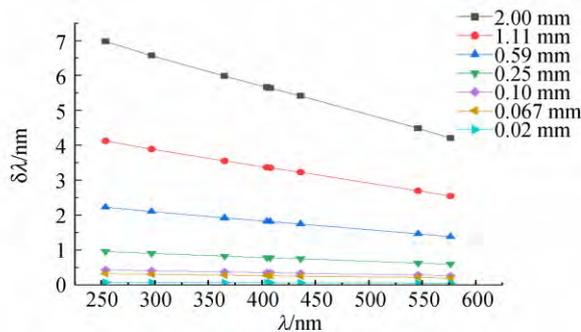


图 6 光谱分辨率随入射狭缝宽度的变化

3.2 光栅常量

图 7 为光谱分辨率随光栅常量变化的关系曲线图。图中给出了在光栅常量为 400, 600, 800, 950 mm^{-1} 时不同波长的光谱的最小分辨率。可以看出, 光栅常量是影响光谱分辨率的又一因素。同样以 407.784 nm 的谱线为例, 可以看出在光栅常量为从 400 mm^{-1} 变化到 950 mm^{-1} 过程中, 光谱分辨率从 0.93 nm 变化为 0.52 nm, 光谱分辨率提高了 43.4%, 可见增加光栅常量有利于提高光谱分辨率。由图 7 可见其他波长的谱线也可得到类似的结论。但是, 提高光栅刻线会增加加工难度, 提高成本, 实际实验时需根据需求综合考虑, 选择合适的光栅。

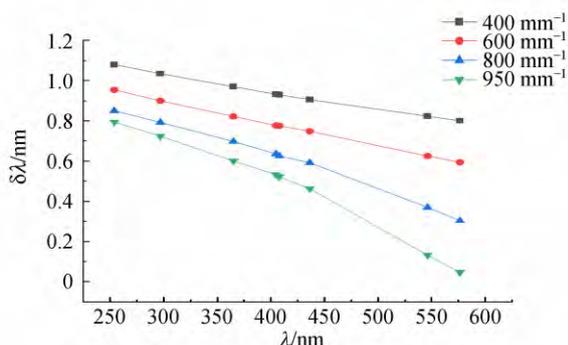


图 7 光谱分辨率随光栅常量的变化

4 结束语

光栅光谱仪是光谱分析方法中必不可少的工具, 本实验充分考虑了本科生与研究生教学中对光栅光谱仪的需求, 建立了基于科学研究的实验教学平台。对光栅光谱仪统的仿真实验提出了完整的设计实施方案, 利用计算机模拟软件 COMSOL 对 Czerny-Turner 型光栅光谱仪光学系统进行了模拟仿真, 实现了光学系统的建模并以直观

的形式展示模拟结果。通过计算机模拟仿真, 在降低实验成本基础上, 使学生深刻理解并掌握光栅光谱仪结构、工作原理及光谱学的基础知识。另外, 本模拟结果可用于在大学物理实验教学中针对高年级光学及相关专业学生设计相关实验, 要求学生根据理论模拟参量搭建简易光栅光谱仪, 并对未知频率成分的光源进行光谱分析。

参考文献:

- [1] 刘汉臣, 王秋萍, 张崇辉, 等. 光栅扫描光谱仪参数的研究[J]. 应用光学, 2008, 29(4): 595-598.
- [2] 石小丽, 朱睿, 黄彦林. 实验教学用热释光光谱仪的设计[J]. 实验科学与技术, 2012, 10(3): 184-187.
- [3] 王彬宇, 王南朝, 刘崇, 等. 基于法布里-珀罗干涉仪的激光谱线特性测量研究[J]. 物理实验, 2019, 39(8): 1-8.
- [4] 吴泉英, 姚庆香, 朱爱敏. 大学物理实验[M]. 北京: 高等教育出版社, 2015: 184-187.
- [5] 马雪梅, 张卫平, 黄创高, 等. 基于光栅衍射的实验分析[J]. 大学物理实验, 2010, 23(4): 34-36.
- [6] 赵永潜, 张亚萍, 许广建, 等. 基于分光计的光栅光谱特性研究[J]. 大学物理实验, 2016, 29(4): 29-32.
- [7] 徐美嘉, 王海林, 谭伟石. 斜入射时光栅衍射特性的理论分析及实验研究[J]. 大学物理实验, 2014, 27(4): 34-37.
- [8] 胡岚, 王春梅, 沈国土. 基于光栅光谱仪的 2 个拓展实验[J]. 物理实验, 2018, 38(S1): 108-110.
- [9] 龙勇机, 田毓琛, 刘文军, 等. 实验教学用简易光谱仪的研制[J]. 物理实验, 2018, 38(2): 52-56.
- [10] 车念曾, 阎达远. 辐射度学和光度学[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1990: 129.
- [11] Dalton M L. Astigmatism compensation in the Czerny-Turner spectrometer [J]. Applied Optics, 1966, 5(7): 1121-1123.
- [12] 陈谭轩, 杨怀栋, 陈科新, 等. 宽光谱 Czerny-Turner 光谱仪中的彗差与分辨率[J]. 光谱学与光谱分析, 2010, 30(6): 1692-1696.
- [13] 黎海文, 郝鹏, 吴一辉. 微硅狭缝紫外-可见光谱仪杂散光的产生与抑制[J]. 光学精密工程, 2011, 19(4): 737-742.
- [14] Bougot-Robin K, Paget J, Atkins S C, et al. Optimization and design of an absorbance spectrometer controlled using a raspberry Pi to improve analytical skills [J]. Journal of Chemical Education, 2016, 93(7): 1232-1240.

- [15] Wang J J, Rodríguez Núñez J R, Maxwell E J, et al. Build your own photometer: A guided-inquiry experiment to introduce analytical instrumentation [J]. *Journal of Chemical Education*, 2016, 93(1): 166-171.
- [16] 高东锋,王森. 虚拟现实技术发展对高校实验教学改革的影响与应对策略[J]. *中国高教研究*, 2016(10):56-59.
- [17] 洪澜,蔡修奋,李俊洋,等. 基于虚拟仿真实验的创新能力的培养[J]. *物理实验*, 2018, 38(9):43-47.

Virtual simulation experiment of Czerny-Turner grating spectrometer

MA Yan

(School of Physical Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China)

Abstract: Based on the computer simulation software COMSOL, a simulation program of the optical system of the Czerny-Turner grating spectrometer was designed. The simulations of the effect of entrance slit width and grating constant on the resolution of grating spectrometer were realized, and the simulation results were displayed in an intuitive way. Through the simulation experiments, students could deeply understand the optical structure and working principle of Czerny-Turner grating spectrometer, as well as the basic knowledge of optical spectroscopy.

Key words: Czerny-Turner grating spectrometer; virtual simulation; calibration; resolution of grating spectrometer

[责任编辑:郭 伟]

(上接 47 页)

Virtual simulation experiment of Ne atom Doppler-free spectrum

HUANG Wan-hui¹, ZHANG Shi-an¹, DENG Li¹, CHENG Lin¹, QIN Ling-ze¹,
XIN Jing¹, YIN Ya-ling¹, HONG Xian-feng²

(1. School of Physics & Electronic Science, East China Normal University, Shanghai 200241, China;
2. AH UST Original Technology Co. LTD. , Hefei 230089, China)

Abstract: Based on the virtual simulation experiment platform, the super fast light field and matter interaction was designed. Six gradients of experiments were designed to realize the measurement of Ne atom Doppler-free spectrum according to students' cognitive gradients, including two Doppler broadening absorption and excitation spectra, Doppler-free out cavity intensity saturation absorption spectrum and intensity internal modulation spectrum, Doppler-free polarization spectrum and polarization internal modulation spectrum. These series of experiments had been carried out in the teaching of spectrum measurement technology. Through the virtual simulation experiment, students got a deeper understanding of the mechanism of Doppler broadening, lamb depression, atomic saturation absorption, atomic polarization selective absorption and other basic concepts and the experimental design idea to eliminate Doppler broadening. The application method and application scope of lock-in amplification sensitive detection technology were also grasped.

Key words: Doppler-free broadening; virtual simulation experiment; blended learning

[责任编辑:郭 伟]