

文章编号:1002-2082(2007)05-0564-05

# 基于线阵CCD的小型光谱仪光度特性研究

黄振宇, 孙利群

(清华大学 精密测试技术及仪器国家重点实验室, 北京 100084)

**摘要:** 基于线阵电荷耦合器件(CCD)的小型光谱仪具有便于携带和快速探测的优点,故特别适于现场检测应用。介绍一种自行研制的小型光栅光谱仪,它采用Czerny-Turner式光学结构,并用线阵CCD作为探测器。该光谱仪光度特性的实验检测结果证明,实验样机的光度精密密度优于 $\pm 0.04$  Abs,光度准确度为 $\pm 0.04$  Abs( $0 \text{ Abs} \sim 1 \text{ Abs}$ )。实验分析了光谱仪的杂散光、光度噪声和基线平直度等指标对仪器光度准确度的影响。最后针对小型光谱仪的特点提出改善其光度特性的措施。

**关键词:** 小型光谱仪;光度精密密度;光度准确度;杂散光;噪声

中图分类号:TN15-3

文献标志码:A

## Photometric performance of miniature spectrometer based on linear CCD

HUANG Zhen-yu, SUN Li-qun

(State Key Laboratory of Precision Measurement Technology and  
Instrument, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

**Abstract:** Miniature spectrometers based on linear charge couple devices (CCD) find wide applications in field detection because of their compact size and high-speed measurement. Photometric performances such as photometric reproducibility and photometric accuracy are most important specifications for a spectrometer. A self-developed miniature grating spectrometer was introduced, which incorporated the Czerny-Turner optical system and a linear CCD detector. The photometric performance of the prototype was tested in experiments according to the relevant standards in UV/Vis/NIR spectrophotometer. The results show that the photometric reproducibility of the spectrometer is better than  $\pm 0.04$  Abs, and the photometric accuracy is  $\pm 0.04$  Abs ( $0 \sim 1 \text{ Abs}$ ). Moreover, the influence of stray light, photometric noise and baseline flatness of the spectrometer on photometric accuracy were analyzed with experiment results and theoretical calculation. Finally, the solutions to improve the photometric performance were discussed based on the characteristics of the miniature spectrometer.

**Key words:** miniature spectrometer; photometric reproducibility; photometric accuracy; stray light; noise

收稿日期:2007-05-08; 修回日期:2007-06-02

作者简介:黄振宇(1982—),男,广东人,清华大学光学工程专业硕士研究生,从事小型光谱仪的设计和研究。论文联系人:孙利群 E-mail:sunlq@mail.tsinghua.edu.cn

引言

光谱仪器是研究、测定光辐射频率、强度特性及其变化规律的光学仪器,在社会生产、科学实验、生物医学、环境监测等领域有着广泛的应用。传统的光谱仪主要采用单通道光电探测器,需要配合复杂的机械结构进行波长扫描,因此体积大,成本高,调试使用困难。近年来,随着多通道探测电荷耦合器件(CCD)的发展,具有小型化、全自动、快速探测、价格低廉等优点的小型光谱仪获得了越来越多的应用<sup>[1]</sup>。然而,与传统光谱仪器相比,小型光谱仪在性能上还存在一定的差距,特别是仪器在光度特性方面。本文介绍一种自行研制的基于线阵 CCD 的小型光谱仪,并参考相关行业标准<sup>[2-3]</sup>对其性能指标进行检测,在实验结果的基础上,对小型光谱仪光度特性的各种影响因素进行了分析。

1 系统原理及实现

本系统采用光栅作为色散器件,选用 Czerny-Turner 式的光学结构。这种光路最大的优点是慧差小,具有比较好的成像质量,并且系统结构简单紧凑,特别适用于小型化的光谱仪,具体光路如图1所示。被测光辐射经过光纤探头 S 进入分光系统中,经过反射镜 M1 准直后入射到光栅 G 上进行衍射分光,分光后得到不同波长的光辐射再经过反射镜 M2 聚焦,成像在 CCD 上。在本系统中用芯径 9 μm 的光纤代替入射狭缝。由于像散的存在,经过分光系统成像以后,在 CCD 像素上得到的依然是竖条状谱线。为了提高能量的利用率,在 CCD 的窗口前面加上一个柱透镜对谱线进行会聚,以增大 CCD 接收到的光辐射强度。

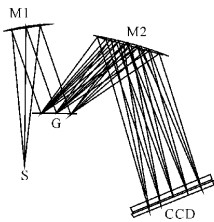


图1 小型光谱仪光学系统

Fig. 1 Optical system of the miniature spectrometer

由于大部分 CCD 器件只在可见光谱区内有较高的响应,因此本系统设计的工作光谱范围(400 nm~800 nm)与普通可见光分光光度计相

近。CCD 芯片选择 SONY 生产的 ILX554A,像素总数为 2048,像素大小为 14 μm×56 μm。由于工作光谱范围不大,因此选择 600 线/mm 的光栅,充分利用 CCD 的全部像素,便可以获得较高的分辨率。因光栅的闪耀波长为 500 nm,与工作光谱范围相匹配。综合考虑光学系统成像质量和仪器体积因素,2 个球面镜 M1 和 M2 的焦距分别选择  $f_1=46\text{ mm}$ ,  $f_2=65\text{ mm}$ 。仿真计算和实验结果均表明:系统的光谱带宽为 0.6 nm。测量时使用的光源为 12V30W 的溴钨灯。

数据采集和处理系统由 DSP 芯片编程控制,主要完成光电信号的转换和数据采集处理。CCD 将入射各个波长的光强信号转变为电信号,经过 A/D 转换后将数据传送到 DSP 进行初步处理,最终通过计算机进行光谱曲线的绘制以及数据的保存和分析。

2 光度特性测量

表征光谱仪测光性能的主要参数包括光度精密度和光度准确度。由于分光光度计的测量是基于朗伯-比尔定律的相对测量<sup>[3]</sup>,因此上述 2 个参数一般是指仪器进行吸光度测量时的精密度和准确度。为测定样机的光度特性,利用标准硫酸铜溶液对不同波长的吸光度进行测量<sup>[4]</sup>,实验测量结果见表 1 所示。

表1 吸光度测量结果

| Table 1 Measuring results of absorbency |      | Abs     |         |         |
|-----------------------------------------|------|---------|---------|---------|
| 吸光度<br>测量次数                             | 测量波长 | 650 nm  | 700 nm  | 750 nm  |
|                                         |      |         |         |         |
| 1                                       |      | 0.207 0 | 0.506 3 | 0.833 2 |
| 2                                       |      | 0.212 5 | 0.522 0 | 0.848 9 |
| 3                                       |      | 0.223 9 | 0.536 1 | 0.866 4 |
| 4                                       |      | 0.217 4 | 0.523 7 | 0.847 0 |
| 5                                       |      | 0.212 4 | 0.518 6 | 0.843 9 |
| 6                                       |      | 0.217 3 | 0.527 2 | 0.853 9 |
| 7                                       |      | 0.211 3 | 0.521 9 | 0.844 4 |
| 8                                       |      | 0.206 3 | 0.513 1 | 0.832 9 |
| 9                                       |      | 0.210 9 | 0.518 4 | 0.853 8 |
| 10                                      |      | 0.207 0 | 0.506 3 | 0.833 2 |

2.1 光度精密度

光度精密度  $\delta A$ (又称为光度重复性)被定义为多次测量中最大值  $A_{\max}$  与最小值  $A_{\min}$  之差<sup>[5]</sup>,即

$$\delta A = A_{\max} - A_{\min} \tag{1}$$

根据(1)式和表1 计算得到实验样机在650 nm,700 nm,750 nm 3 个波长上的光度精密度分别为0.0176 Abs,0.0298 Abs 和0.0335 Abs,因此可认为其光度精密度优于±0.04 Abs。从小型光谱仪的原理和结构上考虑,影响光度精密度的因素包括光源、CCD 和电路系统的漂移以及其他环境因素,其中 CCD 和电路系统的漂移是最主要的影响因素。因此,要提高小型光谱仪的光度精密度,主要工作就是对电路进行优化设计,降低系统的漂移。

2.2 光度准确度

光度准确度  $\Delta A$  指的是光谱仪对吸光度的测量平均值  $\bar{A}$  与真实值(理论值)  $A_0$  之差<sup>[5]</sup>,即

$$\Delta A = \bar{A} - A_0 \tag{2}$$

根据表1 中的数据,计算得到实验样机对标准硫酸铜溶液在 650 nm,700 nm,750 nm 3 个波长上的吸光度测量平均值。此外,将被测样品在普析通用公司生产的 TU-1901 型光谱仪上进行测试,其光度准确度为 ±0.002 Abs (0~0.5 Abs)/±0.004 Abs (0.5~1 Abs),可作为本实验样机标准结果进行比对,最终结果如表2 所示。

表2 光度准确度指标

| Table 2 Indexes of photometric accuracy |                |                    |                                 |
|-----------------------------------------|----------------|--------------------|---------------------------------|
| 测量波长/nm                                 | 标准值 $A_0$ /Abs | 测量值 $\bar{A}$ /Abs | $\Delta A = \bar{A} - A_0$ /Abs |
| 650                                     | 0.227 8        | 0.213 2            | -0.014 6                        |
| 700                                     | 0.523 5        | 0.520 8            | -0.002 7                        |
| 750                                     | 0.816 9        | 0.847 2            | 0.030 3                         |

从表2 中可以看出,实验用小型光谱仪样机的光度准确度在实验测量范围内优于±0.04 Abs。小型光谱仪光度准确度受到多方面因素的影响,包括仪器的杂散光、光度噪声、基线平直度等性能参数以及测量时所选择的光谱带宽、试样和比色皿的状况等等。由于在实验中已对比色皿配对误差进行了修正,因此可以认为其不影响实验结果。而本系统的光谱带宽为0.6 nm,该值远小于硫酸铜溶液吸收峰的自然带宽,因此光谱带宽对光度准确度的影响也可忽略。

3 影响光度准确度的主要因素

3.1 杂散光

杂散光通常是指偏离正常光路到达探测器的

光,它主要由光学系统中的缺陷所造成,如不必要的反射面、灰尘散射、光学表面擦伤、光学系统像差等。杂散光的影响将使吸光度的测量结果偏离真实值,其差值可以通过下式计算<sup>[6]</sup>:

$$\Delta A_s = \lg(1 - S + 10^A S) \tag{3}$$

式中:  $S$  为杂散光能量与探测器检测到的总能量的比值;  $A$  为真实吸光度。对于本实验样机,考虑到 CCD 的光谱响应范围,杂散光测量实验选择在620 nm 波长处<sup>[3]</sup>,得到的结果为  $S = 0.8\%$ 。值得注意的是,在工作光谱范围的边缘波段,由于光源发射光强和 CCD 的光谱响应度都比较小,探测器检测到的能量较低,因此杂散光的影响将增大。

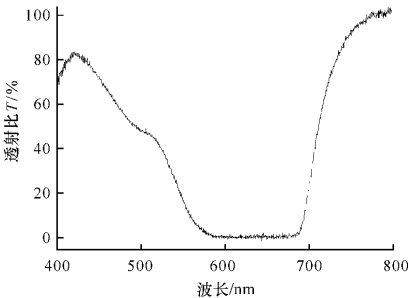


图2 杂散光测量结果

Fig. 2 Measured result of stray light

从(3)式可知,  $S = 0.8\%$  的杂散光水平对于1 Abs 的测量值将造成3%的误差,而对于3 Abs 测量值,其误差超过了30%。由此可见,杂散光对于光谱仪的测量结果影响极大,必须予以抑制。通常采用滤光片抑制杂散光,但对于小型光谱仪来说,使用过多的杂散光控制元件必然会导致体积增大和成本增加,因此更合理的做法是改善仪器的结构,减少光路中可能的缺陷。

3.2 光度噪声

光度噪声是指单一波长的光强信号随时间的无规则变化,它主要取决于探测器的噪声性能,此外,还包括电路系统的噪声和光源噪声。对于分光光度计的噪声检测,通常需要检测透射比100%和0% 2 种情况下的噪声。前者表征的是系统整体的噪声水平,包括光噪声和电噪声,而后者只包含电路噪声。对于本实验样机,首先关心的是总体噪声水平对光度准确度的影响,因此光度噪声指标以100%噪声为准,参考标准<sup>[2]</sup>进行实验,检测结果为

$\Delta A_N=0.012\text{ Abs}$ 。

要降低光度噪声对光度准确度所造成的测量误差,主要措施之一是通过 CCD 芯片致冷降低其热噪声;之二是改善 CCD 和电路系统的性能,降低其读出噪声<sup>[7]</sup>。此外,在 CCD 不发生饱和的前提下,适当地延长其曝光时间,可以在一定程度上提高系统的信噪比,从而降低噪声所带来的测量误差。对 CCD 设置不同的曝光时间,测量样机的光度噪声值,得到的结果如图 3 所示。从图 3 可以看到,延长曝光时间可使光度噪声指标有所改善。

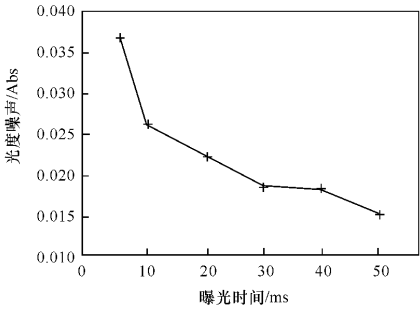


图 3 光度噪声测量结果

Fig. 3 Measured result of photometric noise

3.3 基线平直度

基线平直度是指光谱仪 0 Abs 线的平直程度,它是反映光谱仪噪声性能的又一指标。与光度噪声有所区别的是,它反映的是系统在整个工作光谱范围内的噪声值。对于小型光谱仪来说,一般不存在切换光栅和探测器等操作,因此影响系统基线平直度指标的因素主要是光路、电路的性能以及 CCD 像素的不均匀性。参考行业标准<sup>[2-3]</sup>,实验样机基线平直度的检测结果为  $\Delta A_B=0.014\text{ Abs}$ 。

作为对比,取下 CCD 前端的柱面透镜之后,测到基线的平直度为 0.036 Abs。可见,在光路中加入柱面透镜起到了提高信噪比的作用。另外,从图 4 中还可以看到,基线起伏较大的波段主要是 400 nm~450 nm,原因是 CCD 在该波段内的光谱响应很低,造成了信噪比的下降。

3.4 误差合成及讨论

如上所述,杂散光、光度噪声和基线平直度是小型光谱仪中影响光度准确度的最主要因素,根据实验样机的性能检测结果,按照(4)式将这 3 项参数造成的吸光度误差进行合成:

$$\Delta A=\sqrt{\Delta A_S^2+\Delta A_N^2+\Delta A_B^2}$$
 (4)

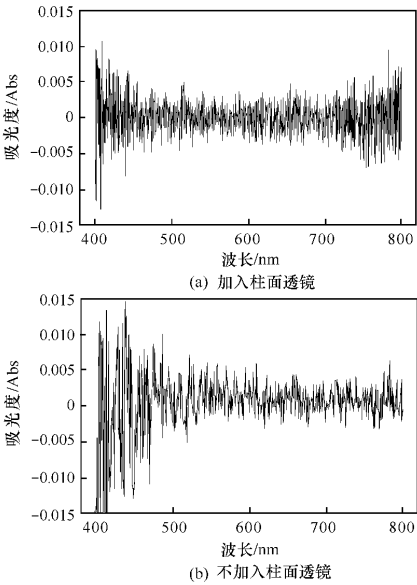


图 4 基线平直度对比实验

Fig. 4 Comparative experiment of baseline flatness

依据(4)式估算吸光度的误差限,得到的结果如表 3 所示。

表 3 吸光度误差合成

| Table 3 Synthesis error of absorbency measurement |                  |                         |                         |                         |                       |
|---------------------------------------------------|------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-----------------------|
| 测量波长/nm                                           | $A_0/\text{Abs}$ | $\Delta A_S/\text{Abs}$ | $\Delta A_N/\text{Abs}$ | $\Delta A_B/\text{Abs}$ | $\Delta A/\text{Abs}$ |
| 650                                               | 0.227 8          | 0.002                   |                         |                         | 0.019                 |
| 700                                               | 0.523 5          | 0.008                   | 0.012                   | 0.014                   | 0.020                 |
| 750                                               | 0.816 9          | 0.019                   |                         |                         | 0.026                 |

误差限估算的结果与标准硫酸铜溶液吸光度实验的结果基本吻合,实验结果表明:本实验样机的光度准确度为  $\pm 0.04\text{ Abs}$  (0~1 Abs)。在 750 nm 处的实际误差超出了误差限的估算值,原因可能是此波长下实际的杂散光指数较 620 nm 处的杂散光测量值更大。从表 3 还可以发现,在低吸光度测量中,噪声和基线平直度是影响光度准确度的主要因素,而在高吸光度测量中,杂散光的影响将是主要的,这与(3)式是一致的。

4 结论

小型光谱仪的光度精密度和光度准确度受多种因素影响,综合反映了仪器性能的指标。根据本

文的实验结果分析,可以得到以下结论:

1) 杂散光是影响光度特性的主要因素,特别是在高吸光度的测量中,由于杂散光一般是由光学系统缺陷造成的,因此对于小型光谱仪而言,抑制杂散光比较可行的方法是优化仪器结构,提高加工质量。

2) 提高系统中的信噪比是提高小型光谱仪光度特性的关键。一方面,可以通过改善 CCD 性能、致冷 CCD 芯片和优化电路设计来降低系统中的噪声和漂移。另一方面需要提高信号强度。从图 3 和图 4 中可以看到,适当延长曝光时间以及加入柱面透镜可以在一定程度上提高系统的信噪比,从而提高光度准确度。另外,还可以在分光系统前端使用宽度合适的狭缝作为二次光源,这样可以增大狭缝前端光纤探头的芯径,从而增大入射光强度。

参考文献:

- [1] 李宏光,吴宝宁,施浣芳,等.一种小型光谱色彩分析仪的设计[J].应用光学,2005,26(6):66-69.  
LI Hong-guang, WU Bao-ning, SHI Huan-fang, et al. Design of a miniature color measuring spectrophotometer[J]. Journal of Applied Optics, 2005, 26(6):66-69. (in Chinese)
- [2] 国家标准物质研究中心. JJG689-1990 紫外、可见、近红外分光光度计检定规程[S]. 北京:中国计量出版社,1990.

National Research Center for CRM'S. JJG689-1990 verification regulation of UV/Vis/NIR spectrophotometer[S]. Beijing: China Metrology Publishing House, 1990. (in Chinese)

- [3] 中华人民共和国机械工业部. JB/T 6777-93 紫外可见分光光度计[S]. 北京:中国计量出版社,1993.  
Ministry of Machinery Industry PRC. JB/T 6777-93 UV/Vis spectrophotometer [S]. Beijing: China Metrology Publishing House, 1993. (in Chinese)
- [4] 李在清. 光谱光度测量与标准[M]. 北京:中国计量出版社,1993.  
LI Zai-qing. Spectral photometry measurement and standard [M]. Beijing: China Metrology Publishing House, 1993. (in Chinese)
- [5] 李昌厚. 紫外可见分光光度计[M]. 北京:化学工业出版社,2005.  
LI Chang-hou. UV/Vis spectrophotometer [S]. Beijing: Chemical Industry Press, 2005. (in Chinese)
- [6] 洪吟霞,范世福,祝绍箕. 光学仪器丛书——分光光度计[M]. 北京:机械工业出版社,1982.  
HONG Yin-Xia, FAN Shi-fu, ZHU Shao-ji. Optical instruments series —— spectrophotometer [M]. Beijing: China Machine Press, 1982. (in Chinese)
- [7] 邱虹云,刘阳,章恩耀,等. 科学级 CCD 并联过采样低噪声模拟信号通道[J]. 应用光学,2007,28(1):24-29.  
QIU Hong-yun, LIU Yang, ZHANG En-yao, et al. Parallel analog channels for oversampling scientific CCD camera signal[J]. Journal of Applied Optics, 2007, 28(1):24-29. (in Chinese)