

光谱仪杂散光的测量方法

刘 宁¹⁾

(中国科学院长春光学精密机械研究所)

一、紫外和可见光波段的光谱仪杂散光的测量

光谱仪是进行光谱分析的重要工具。此外,还可以利用光谱仪输出的单色光进行其他工作,例如反射率和透过率的测定等。但是当光谱仪用于定量测量时,会遇到光谱仪的杂散光问题。光谱仪的杂散光就是光谱仪输出的、正常通带以外的光辐射。由于光谱仪存在这部分杂散光辐射,因此给测量带来了误差。目前人们对紫外和可见波段的光谱仪杂散光的测量已经作了一些工作。测量方法归纳起来主要有:(1)测量截止滤光片透过率的方法^[1];(2)级数透过率方法^[2];(3)光学方法^[3];(4)卷积计算的方法^[4]。现分别介绍如下:

1. 测量截止滤光片透过率的方法

这种方法主要是利用具有图1所示透过率特性的截止滤光片作为样品。然后用光谱仪测量滤光片截止波长以下的透过率。这时所测得的滤光片的透过率就是光谱仪的杂散光比。然

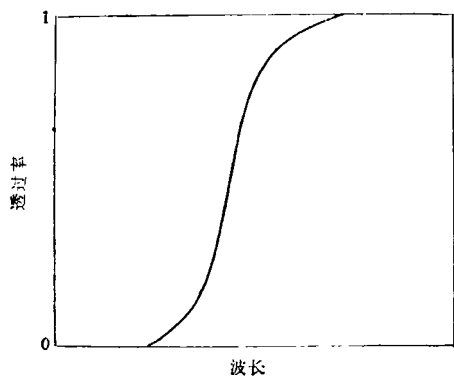


图1 截止滤光片

而这种方法只能测出截止波长以上的光辐射所产生的杂散光,因此这种方法测出的杂散光值比光谱仪实际的杂散光值要小。但这种测量方法比较简单,可广泛应用于紫外和可见分光光度计中杂散光的测量。

2. 级数透过率方法

这种方法是 C. Mirand 和 P. Conte 提出的。其基本原理是利用某种满足 Beer 定律的溶液,将其配成几种不同的浓度,并且使其浓度成等差级数,即 $c_i = ic_1$ (其中 c 是溶液的浓度 (mol/l), $i = 1, 2, 3, \dots, n$)。然后用光谱仪测量这 n 种溶液的透过率 T_i 。由计算可以知道(不考虑溶液对杂散光的吸收),各透过率之间存在以下关系:

$$T_{i+1} = \alpha T_i + \beta, \quad (1)$$

式中

$$\alpha = 10^{-\epsilon c_1 l}, \quad \beta = \frac{(1 - \alpha)S}{1 + S},$$

ϵ 是摩尔吸收系数, l 是光程长度, S 是杂散光比,它定义为光谱仪输出的通带以外的光辐射(即杂散辐射)与通带内的光辐射之比。

由 T_{i+1} 和 T_i 作图可得到一条直线。由直线的斜率和截距即可得到杂散光比 S 。

3. 光学方法

这种方法是利用单色光照射光谱仪测量光谱仪输出的光谱分布。这种方法需要有较强的单色光源,并且探测器的信噪比要比较高。

4. 卷积计算的方法

这种方法是 Wilbur Kaye 提出的。其基本原理是进行卷积计算。光谱仪输出的光强 I 可以表示为下面卷积形式:

1) 现在华南师范大学量子电子学研究所工作。

$$I(\lambda) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} P(\lambda)F(\lambda, \lambda)d\lambda, \quad (2)$$

式中 $P(\lambda) = E(\lambda)D(\lambda)M(\lambda)$, $E(\lambda)$ 是光源的光谱分布, $D(\lambda)$ 是探测器的灵敏度, $M(\lambda)$ 是光谱仪的效率, $F(\lambda, \lambda)$ 是光谱仪的仪器函数. λ 是光谱仪指示的波长, λ_1 和 λ_2 是光源发出光的波段范围.

Wilbur kaye 把离开指示波长 (λ) L 单位以外的光辐射定义为杂散光, 这时可以得到杂散光比为

$$S(\lambda, L) = K \left[\int_{\lambda_1}^{\lambda_1-L} P(\lambda)F(\lambda, \lambda)d\lambda + \int_{\lambda_2}^{\lambda_2+L} P(\lambda)F(\lambda, \lambda)d\lambda \right], \quad (3)$$

其中 K 是常数.

通过测量光谱仪的仪器函数 $F(\lambda, \lambda)$ 和光源强度分布 $P(\lambda)$, 就可由(3)式计算出光谱仪的杂散光分布.

由于这种方法需要测量光谱仪的仪器函数, 因此需要有较强的不同波长的单色光源. 另外这种方法只适用于光源光谱分布较窄的情况.

二、真空紫外光谱仪杂散光的测量

以上几种方法都是用于紫外和可见波段. 在真空紫外波段, 以上几种方法并不是很适用. 这是因为: (1) 在真空紫外波段可使用的截止滤光片比较少; (2) 在真空紫外波段, 获得较强的单色光比较困难. 为了测量真空紫外光谱仪的杂散光, 我们利用气体吸收光谱和参数拟合的方法测量真空紫外光谱仪的杂散光.

采用的测量装置如图 2 所示. 实验中使用的来源是壁稳氩弧连续光源. 光源前面加了石英窗口, 它发出 1650 Å 到可见范围的连续辐射. 使用的光谱仪是 N-100 真空紫外单色仪, 它的波段范围是 500—3000 Å. 吸收室放在光谱仪出射狭缝和探测器之间, 在吸收室内充入氧气作为吸收介质.

当一束平行的单色光入射到一均匀的气体吸收介质时, 入射光强 I_0 和透射光强 I 满足

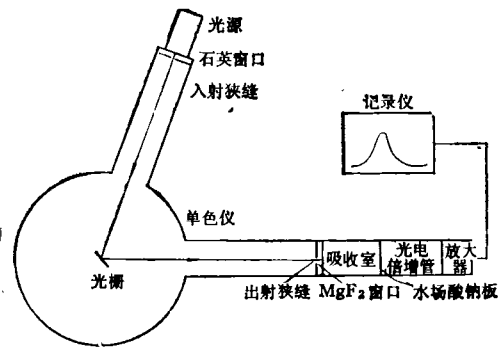


图 2 实验装置

Beer-Lambert 定律, 即

$$I = I_0 \exp\left(-\mu \frac{273}{t} \frac{p}{760} l\right), \quad (4)$$

式中 μ 是气体的吸收系数, t 是气体的绝对温度, p 是气体的压强, l 是气体的几何吸收长度.

由于光谱仪存在杂散光, 即由光谱仪输出的并不完全是单色光. 因此我们所测得的氧气的透过率并不满足 Beer-Lambert 定律. 此时氧气的透过率 T 与吸收系数和杂散光比的关系近似为

$$T = \frac{I}{I_0} = \frac{\exp\left(-\mu \frac{273}{t} \frac{p}{760} l\right) + S}{1 + S}, \quad (5)$$

其中 S 为杂散光比.

(5) 式是在假设杂散光不被氧气吸收的情况下得到的. 如果考虑氧气对杂散光的吸收, 我们可以作进一步的近似. 实际上, 在我们这种情况下, 实验中发现被氧气吸收掉的杂散光是很少的, 因此(5)式中的近似是可行的.

实验中我们改变吸收室中氧气的压强 p , 同时测出氧气的透过率 T , 即可得到

$$T_i = \frac{\exp\left(-\mu \frac{273}{t} \cdot \frac{p_i}{760} l\right) + S}{1 + S} \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (6)$$

其中 n 为测量次数, 一般取 $n = 10$.

我们采用参数拟合的方法求 S 和 μ , 即使

$$R = \sum_{i=1}^n \left[T_i - \frac{\exp\left(-\mu \frac{273 p_i}{760 l}\right) + S}{1 + S} \right]^2 \quad (7)$$

为最小的 S 和 μ 值。我们采用 LMF 算法^[5]求出了使上式为最小的 S 和 μ 值。由于同时还得到了氧气的吸收系数 μ ，因此由氧气吸收系数测量的准确性就可以判断杂散光测量的准确性。

实验中，我们测量了氧气在 1650—1750 Å 的吸收系数和光谱仪在此波段的杂散光比。

图 3 表示在 1700 Å 处，不同的压强 p 与氧气的透过率 T 之间的关系，图 3 还给出了由参数拟合所得到的曲线。

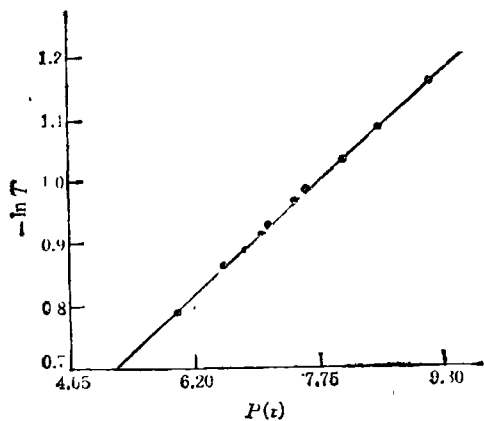


图 3 实验数据

我们将所测量的氧气在 1650—1700 Å 的吸收系数与前人的工作^[6]进行了比较，如图 4 所示(其中 ▲ 表示我们所测得的结果)。由图 4

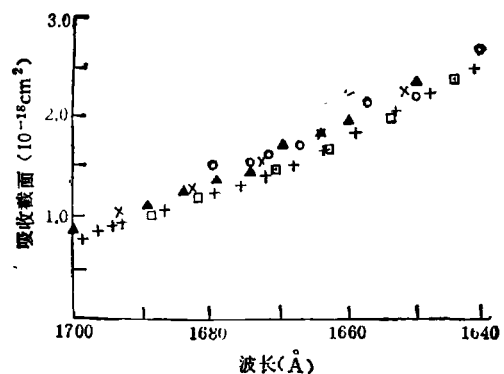


图 4 O₂ 在 1640—1700 Å 的吸收截面 σ ¹⁾
+ Watanabe 等(1953); × Blake 等(1966);
○ Metzger 等(1964); □ Hudson 等(1966)

可以看到，用参数拟合方法测出的氧气的吸收系数是准确的。因此所测得的杂散光比也是准确的。

- [1] K. D. Mielenz et al., *Appl. Opt.*, **21** (1982), 3354.
- [2] C. Miranda et al., *Appl. Spectrosc.* **25** (1971), 557.
- [3] A. W. S. Tarrant, *Opt. Acta*, **25** (1978), 1167.
- [4] Wilber Kaye, *American Laboratory*, November (1983), 18.
- [5] 邓乃扬著，无约束最优化计算方法，科学出版社，(1982).
- [6] R. D. Hudson, *Rev. Geophys. and Space Phys.*, **9** (1971), 305.

1) 吸收系数 μ 和吸收截面 σ 的关系为 $\mu = n \cdot \sigma$, $n = 2.69 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$

(上接第252页)

参 考 文 献

- [1] 邵念诚，*外国史知识*，**4**(1985)，18.
- [2] [美] 蔡尔兹著，陈家宁、姚踪译，一个美国天才，原子能出版社，(1984)，379.
- [3] [西德] R. Jungk 著，何纬译，比一千个太阳还亮，中

- 国工业出版社，(1966)，138.
- [4] 同[2]，423.
- [5] G. Holton, *Bulletin of the Atomic Scientists* **40-4**(1984), 20.
- [6] 同[5]，21.
- [7] *Phys. Today*, **20-10**(1967), **52**.
- [8] 同[3]，14.