

物质的光谱学探究与实作——期末专题报告
从几何光学理论矫正光谱仪并增加其适用带宽

组别：第三组

成员：辛翔钧 C24104713、简嘉玮 L26131073

目录

一、摘要	3
二、实验目的	3
三、实验原理	3
1. 实验原理	3
(1) 球面镜在傍轴区域的几何光学	3
(a) 高斯公式.....	3
(b) 准直	3
(c) 聚焦.....	4
(2) 衍射光栅.....	5
(a) 光栅方程.....	5
(3) 光谱仪的结构.....	6
(a) 混合信号输入.....	7
(b) 准直	7
(c) 衍射分光.....	8
(d) 聚焦	8
(e) 光谱信号输出.....	9
四、实验方法与实验设计.....	9
1. 实验方法	9
(1) 实验所需器材.....	9
(2) 实作中发现的问题	9
(3) 增加可测量的谱线数量	11
(4) 提高成像质量的调整方式	12
2. 实验设计	12
(1) 微调.....	12
(2) 粗调.....	12
五、结果与讨论	12
1. 实验数据	12
(1) 矫正前的光谱.....	12
(2) 微调角度的光谱	13
(3) 微调距离的光谱	14
(4) 粗调角度和距离的光谱	15

(5) 聚焦面镜调整的尺度	17
2. 数据处理与分析方法	18
(1) 定出谱线的波长	18
(2) 作图拟合得到像素与波长的关系	19
(3) 比较拟合波长与实际波长	20
(a) 三次函数拟合	20
(b) 二次函数拟合	21
3. 讨论数据误差以及合理程度	23
(1) 三次函数拟合与二次函数拟合	23
4. 实验过程中，特殊现象的发现与解释	23
(1) 未知的谱线	23
(a) 二级光	23
(b) 助教以前测量到的数据	25
(c) 总结	26
六、结论	26

一、摘要

本次专题实验是从球面镜的几何光学角度，推测光谱仪成像质量不好的原因。我们推测成像质量不好的原因是由于最后聚焦的球面镜摆放的位置不好。

在之前（20241108）“光谱仪的原理实作”的实作中有两个比较明显的问题，一个是成像的波段范围不好，只能在 CCD 中观察到汞灯的两条谱线（黄光、绿光波段）。另一个问题是当我们把汞灯的谱线调整到对称后，在氪灯波段的谱线（红光、橙光波段）又不对称了。

所以在实验中我们通过调整成像球面镜的位置和角度，使我们能在 CCD 直接观察到汞氪灯的两条汞灯谱线以及氪灯的两条谱线（红光波段）。并且这两个波段的谱线都能在 CCD 上产生对称的良好成像。

除了矫正成像，我们还发现有 8 条波长不确定的谱线，在后续通过几种方法确定其中的 6 条谱线。

二、实验目的

1. 调整光谱仪的聚焦面镜，使其能观察到更多谱线。
2. 调整光谱仪的聚焦面镜，使其成像良好的带宽更大。
3. 利用函数拟合得到 CCD 像素对应的波长，并与理论值比较。

三、实验原理

1. 实验原理

(1) 球面镜在傍轴区域的几何光学

(a) 高斯公式

球面镜在傍轴近似下，物像关系满足：

$$\frac{1}{s_o} + \frac{1}{s_i} = \frac{1}{f} \quad (1)$$

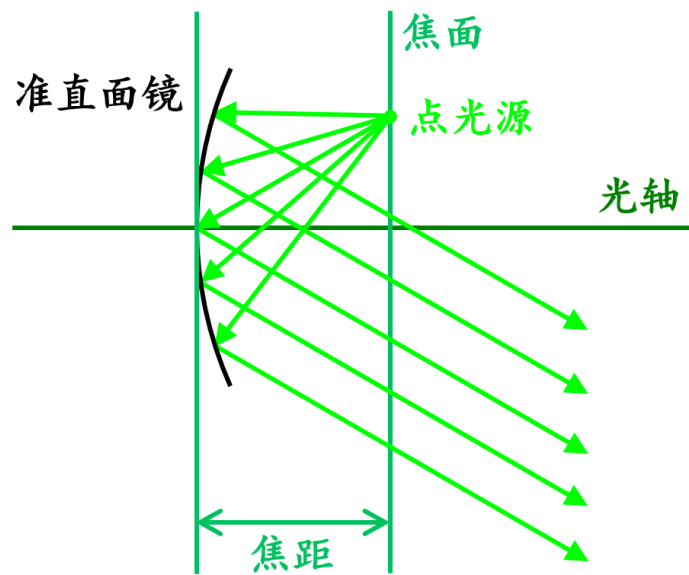
其中 s_o 是物距、 s_i 是像距、 f 是焦距。

$f > 0$ 对应凹面镜、 $f < 0$ 对应凸面镜。

$s_o > 0$ 物在镜前（实物）、 $s_o < 0$ 物在镜后（虚物）。

$s_i > 0$ 像在镜前（实像）、 $s_i < 0$ 像在镜后（虚像）。

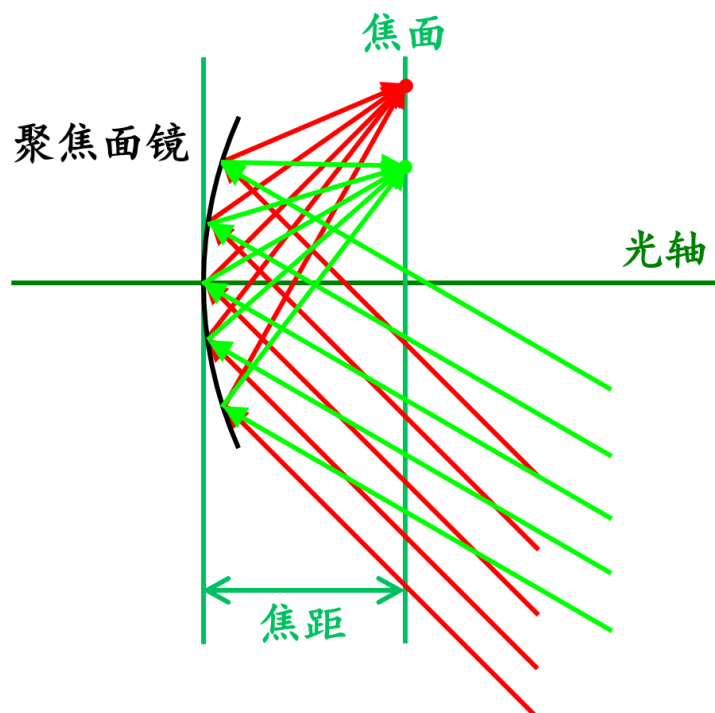
(b) 准直



图一、球面镜作为准直面镜

如图一所示，当物体位于凹面镜的焦面时，物距 $s_o = f$ ，根据公式 (1) 可知像距 $s_i = \infty$ 。像位于无穷远处，也就是说出射光是平行光。

(c) 聚焦



图二、球面镜作为聚焦面镜

如图二所示，当入射平行光到凹面镜（物距 $s_o = \infty$ ）时，根据公式 (1) 可知像距 $s_i = f$ 。像位于焦面处，也就是说平行光会聚在焦面上。两道入射角不同的平行光将会聚到焦面的不同位置。

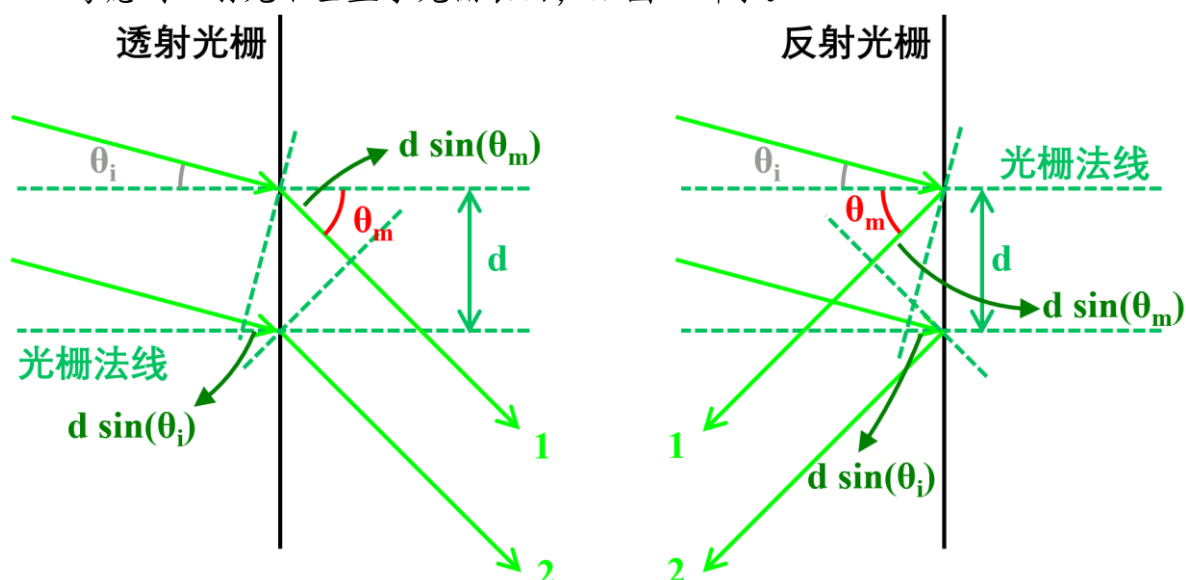
(2) 衍射光栅

光栅是任意衍射单元进行周期排列而成的光学元件，它可以对入射光进行周期性的振幅或相位调制。根据衍射波的位置可以分成反射式光栅与透射式光栅，根据调制类型可以分成振幅光栅与相位光栅。

实验中使用的是反射式闪耀光栅，属于反射式相位光栅。

(a) 光栅方程

考虑到入射光不垂直于光栅表面，如图三所示。



图三、光栅方程的推导

在图三中， θ_i 是入射光相对于光栅法线的入射角、 θ_m 是第 m 级衍射光相对于光栅法线的衍射角。

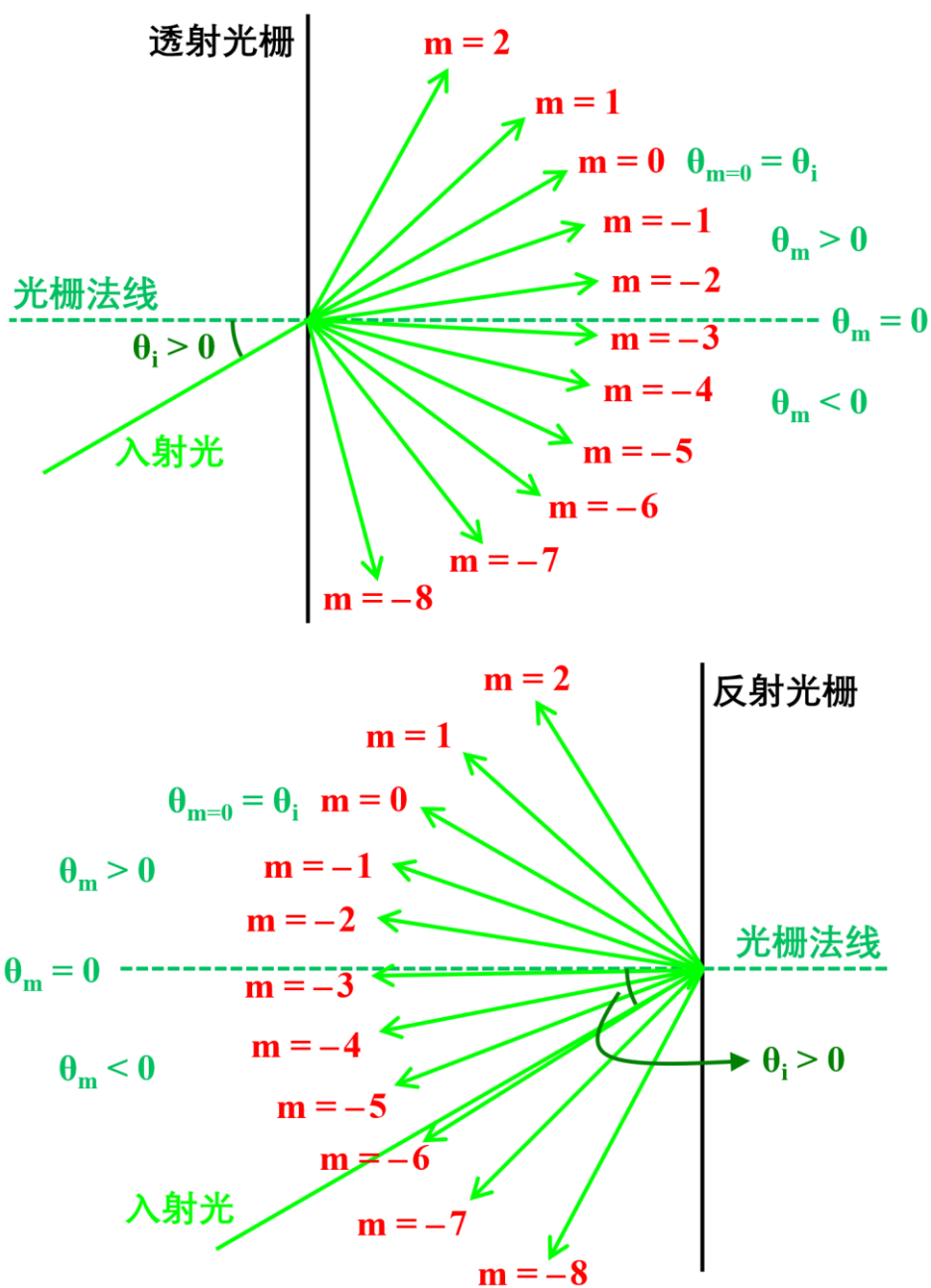
设图中所有角度都是正值，第 m 级衍射亮线要求光线 1 和光线 2 的光程差为 $m\lambda$ 。

所以光栅方程的表达式如下：

$$d (\sin(\theta_m) - \sin(\theta_i)) = m \lambda \quad (m \text{ 为整数}) \quad (2)$$

其中 d 是光栅的空间周期。

入射角、衍射角、衍射级的正负定义如图四

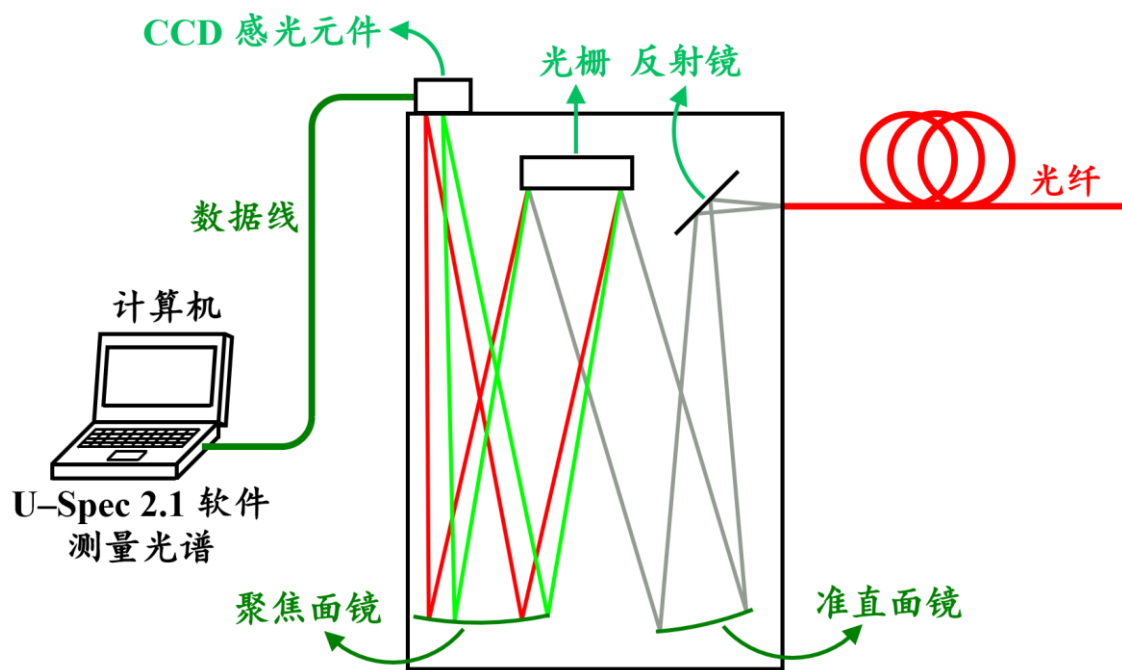


图四、透射光栅与反射光栅，入射角、衍射角、衍射级的正负定义

由图四可知，入射角总是非负的，而衍射光与入射光在法线异侧时，定义衍射角为正。

公式 (2) 适用于任何光栅，但是它只能给出主极大的位置，不能判断主极大的相对辐照度。

(3) 光谱仪的结构

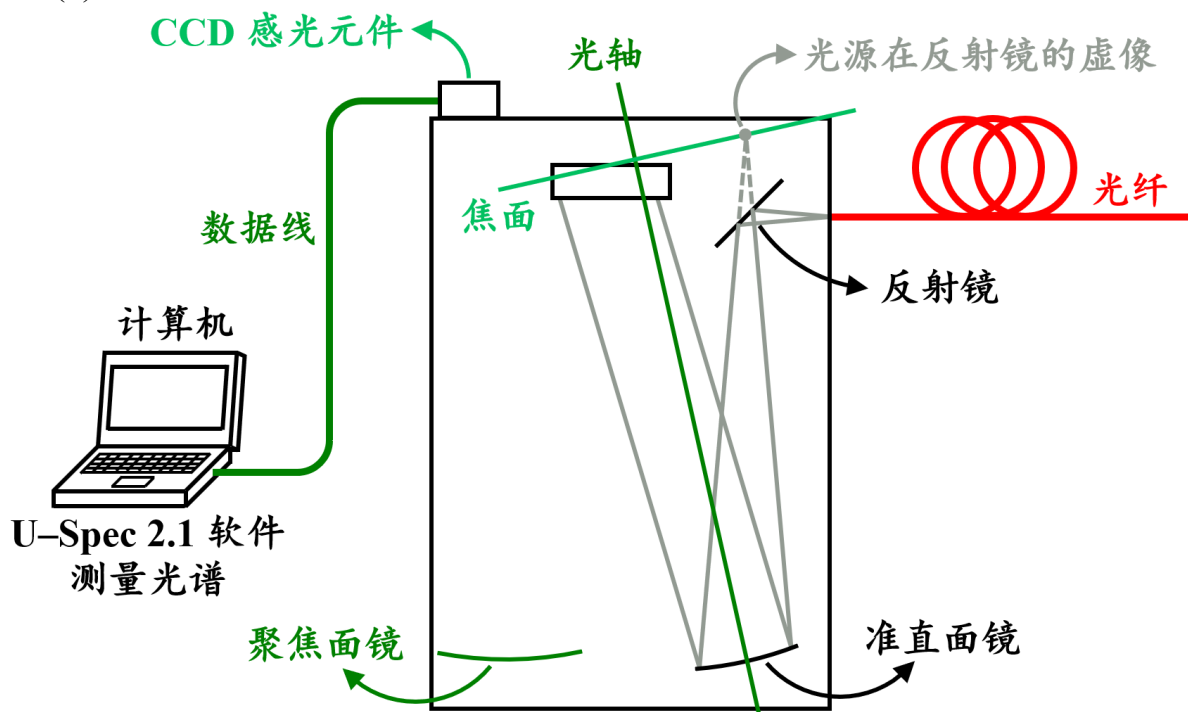


图五、光谱仪结构

(a) 混合信号输入

图五是光谱仪的结构，混合信号从光纤进入系统。

(b) 准直

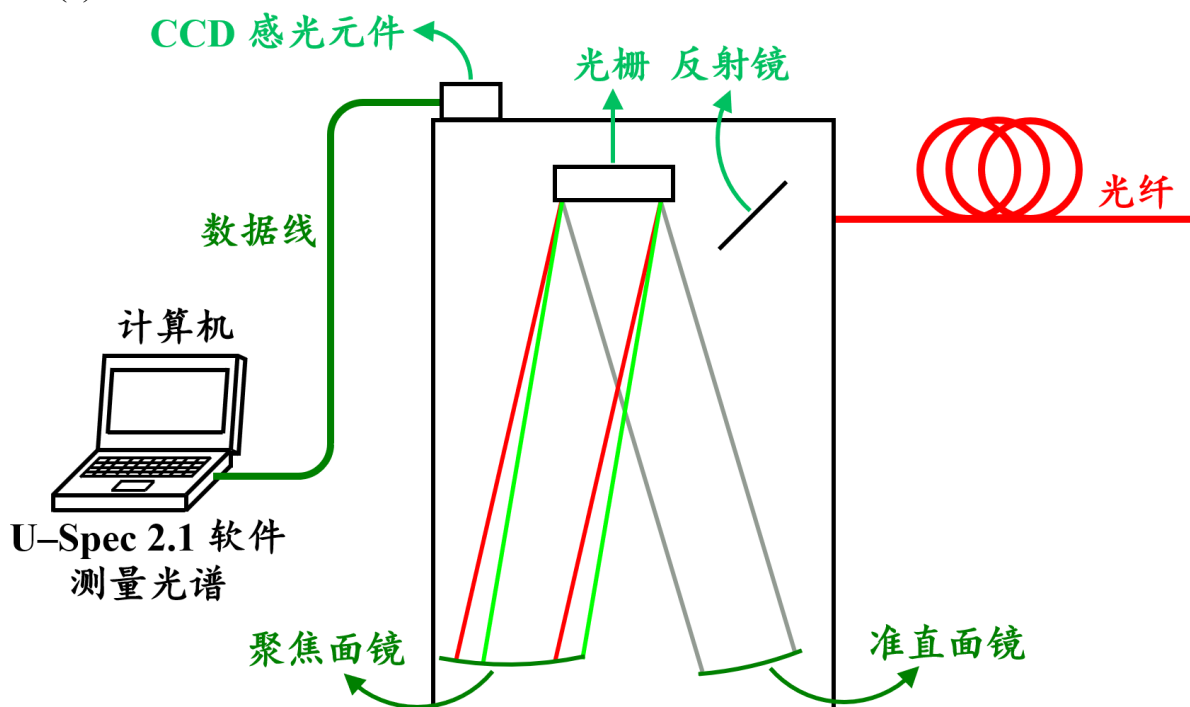


图六、光谱仪结构（准直部分）

如图六所示，混合信号进入系统后，首先经过反射镜改变方向。由于光纤出射的光近似点光源（球面波），调整反射镜与准直面镜的位置，使得光源

的在反射镜的虚像正好位于准直面镜的焦面上。
和图一同理，混合光入射准直面镜后将平行出射。

(c) 衍射分光



图七、光谱仪结构（衍射部分）

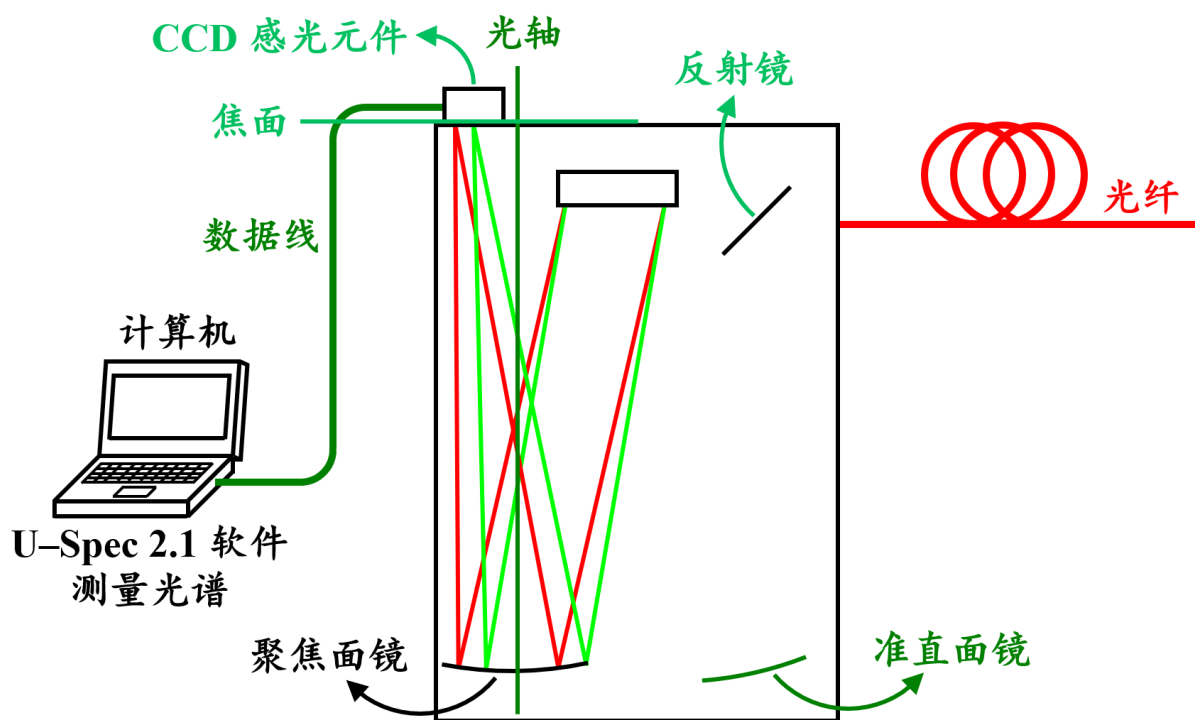
从准直面镜后将平行出射的混合光都以相同的入射角 θ_i 入射光栅。根据光栅方程（公式(2)）可知 m 级光的衍射角 θ_m 满足：

$$\theta_m = \arcsin\left(\sin(\theta_i) + \frac{m\lambda}{d}\right) \quad (3)$$

不同波长的入射光有不同的衍射角。

衍射的平行光入射聚焦面镜。

(d) 聚焦



图八、光谱仪结构（聚焦部分）

从光栅衍射的平行光入射聚焦面镜，调整聚焦面镜的位置，使得 CCD 正好位于聚焦面镜的焦面上。

和图二同理，衍射光入射聚焦面镜后将成像在 CCD 上，不同波长的光成像在不同位置，从而达到分光的效果。

(e) 光谱信号输出

CCD 接收到光谱信号，从数据线传输到计算机。使用 U-Spec 2.1 软件测量光谱信号。

四、实验方法与实验设计

1. 实验方法

(1) 实验所需器材

光栅光谱仪（反射镜、准直面镜、反射式闪耀光栅、聚焦面镜、CCD）、光纤（直径 $25\text{ }\mu\text{m}$ ）、汞氙灯标准光源、CCD 数据线、电脑（下载 U-Spec 2.1 软件）。

(2) 实作中发现的问题

在摘要中有提到，“光谱仪的原理实作”的实作中有两个主要问题

第一个问题：成像的波段范围不好，只能在 CCD 中观察到三条的汞灯谱线（黄光、绿光波段）。

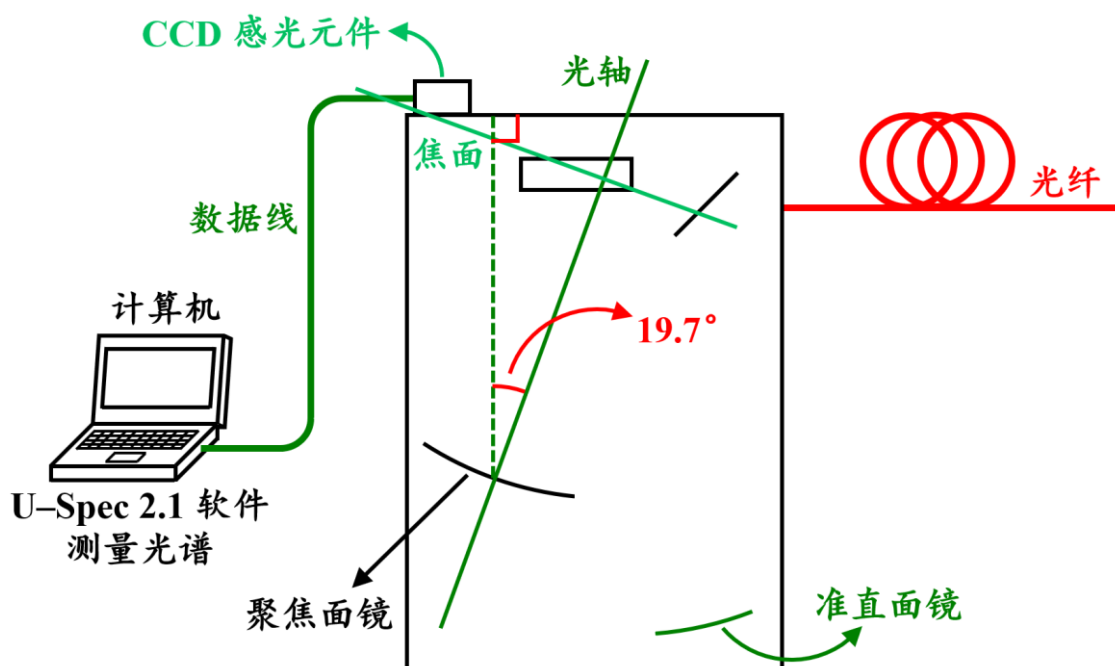
第二个问题：当我们把汞灯的谱线调整到对称后，改用氙灯标准光源，结果在氙灯波段的谱线（红光、橙光波段）又不对称了。

后来我们将光谱仪的盖子拆开，如图九。



图九、矫正前的光谱仪

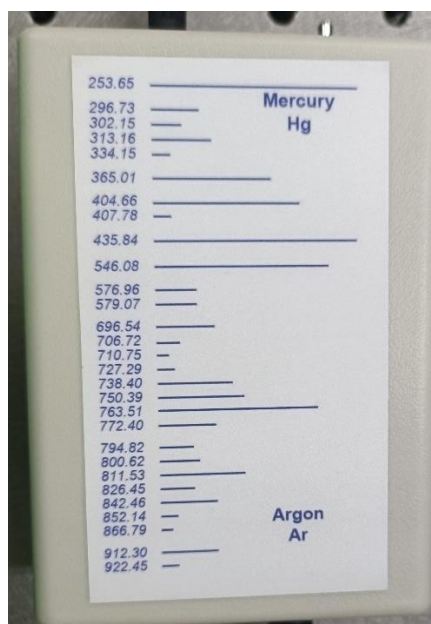
在图九中可以发现，聚焦面镜（左下区域的凹面镜）的光轴和 CCD 的法线明显不是平行的，经过测量这个夹角约为 19.7° ，是个很大的角度。



图十、聚焦面镜光轴与 CCD 法线不平行

如图十所示，如果聚焦面镜光轴与 CCD 法线不平行，则聚焦面镜的焦面就不会与 CCD 重合，只能在小范围有良好的成像。

(3) 增加可测量的谱线数量



图十一、汞氩灯的谱线

图十一是实验中使用的汞氩灯标准光源上标识的谱线，可以发现在长波区域还有非常多谱线可以测量。

可以调整聚焦面镜的角度，使得长波区域的谱线能够成像在 CCD 上。

(4) 提高成像质量的调整方式

推测成像不好的原因是聚焦面镜光轴与 CCD 法线不平行，聚焦面镜的焦面就不会与 CCD 重合。

为了让聚焦面镜的焦面落在 CCD 上，需要调整聚焦面镜的位置和角度。

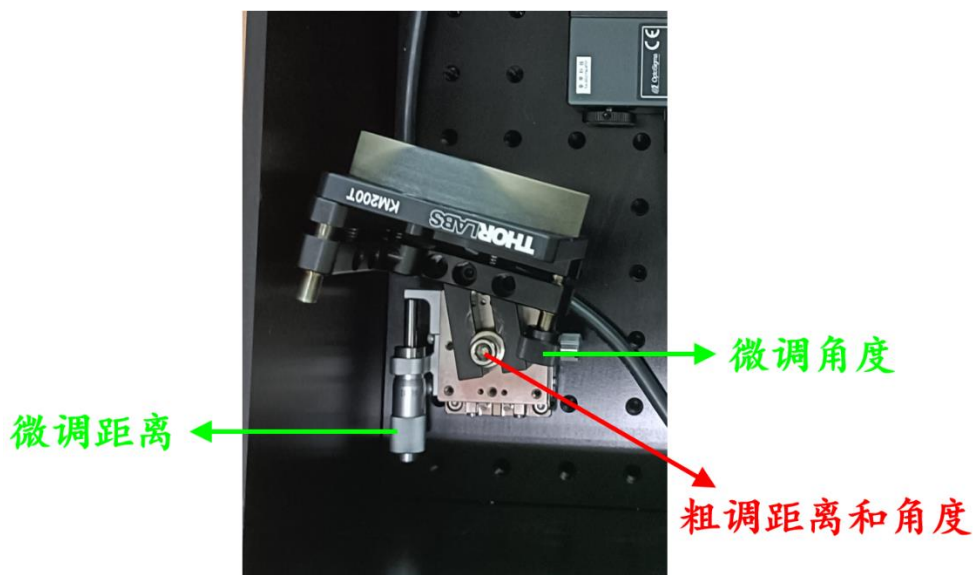
2. 实验设计

(1) 微调

如果良好成像的凹面镜位置与矫正前的凹面镜位置差异不大，只需要调整凹面镜的角度旋钮以及螺旋测微器即可。

(2) 粗调

如果微调的旋钮已经转到底，仍然无法产生良好成像，则需要调整凹面镜的螺丝，移动整个凹面镜底座的位置。



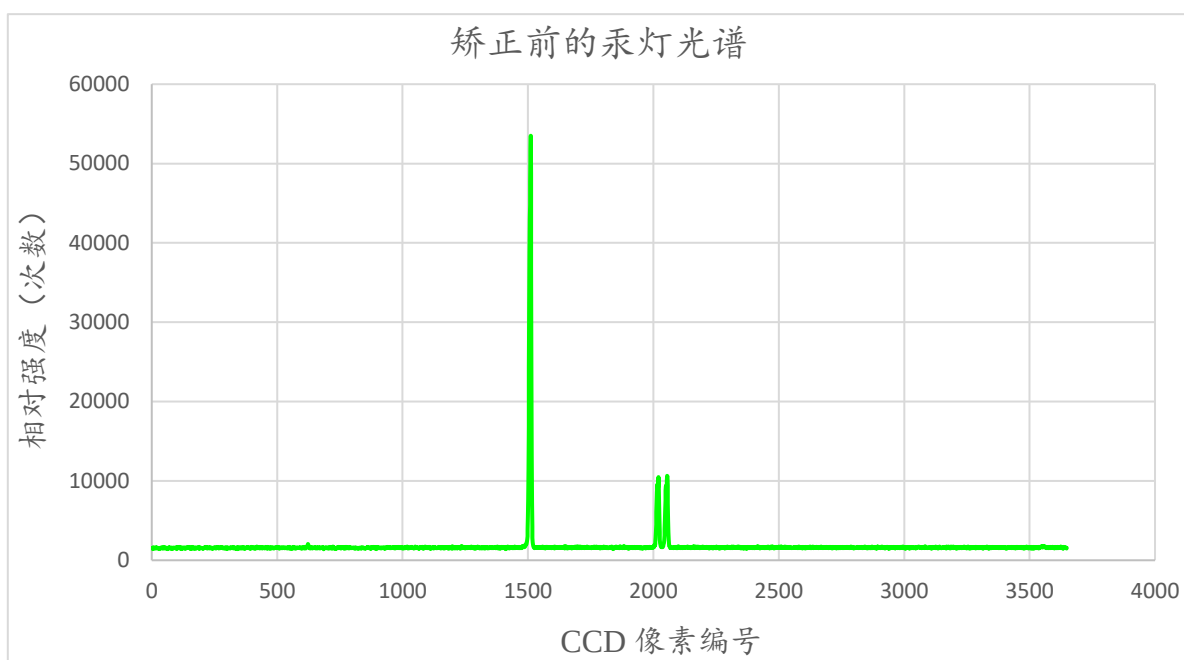
图十二、微调聚焦面镜与 CCD 的距离和聚焦面镜光轴的角度

调整的位置如图十二所示。

五、结果与讨论

1. 实验数据

(1) 矫正前的光谱

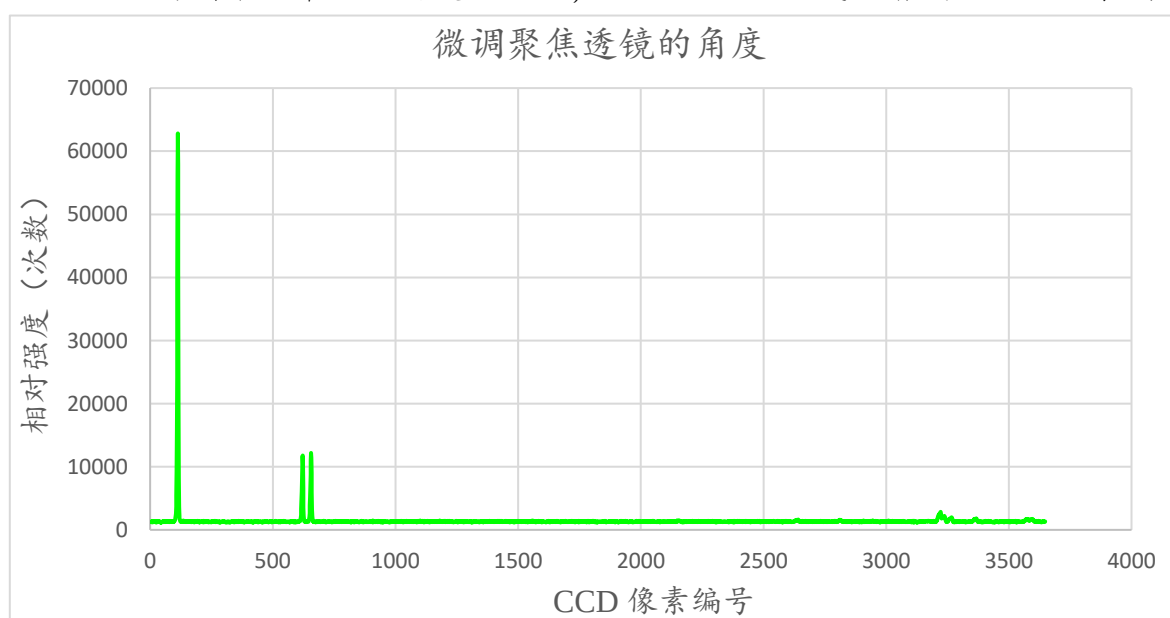


图十三、校正前的汞灯光谱

由图十三可知，在矫正前只能观察到三条汞灯的谱线。如果要做像素和波长的拟合，数据量太少。

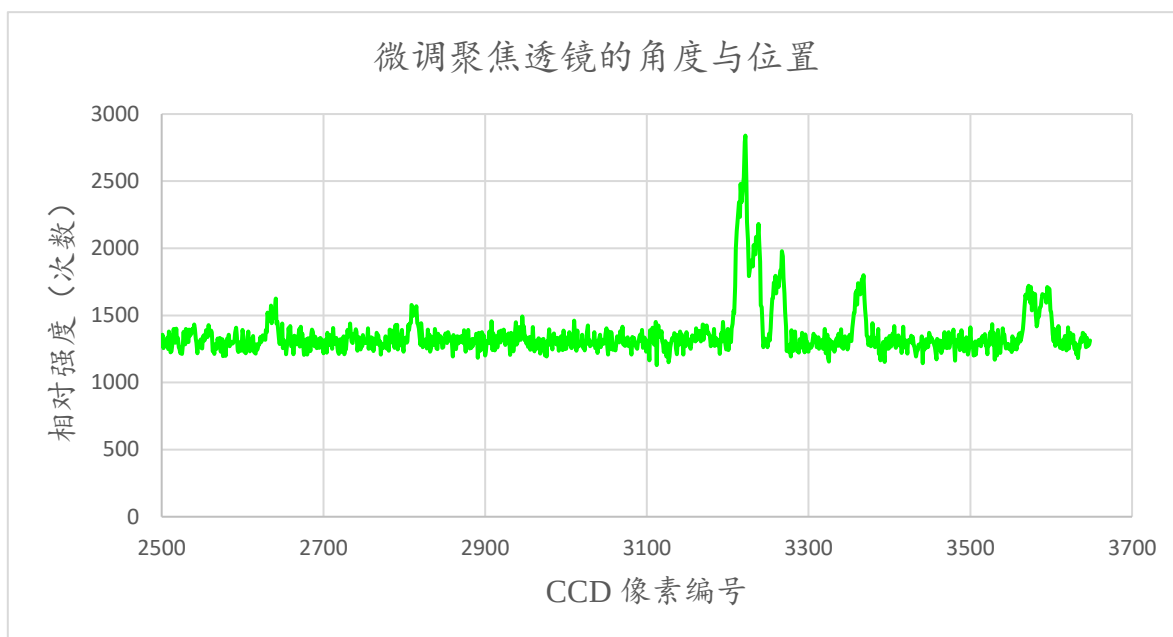
(2) 微调角度的光谱

通过旋转图十二中微调角度的旋钮，让长波区域的氙灯谱线可以被观察到。



图十四、微调聚焦透镜的角度后测量到的谱线

从图十四可以发现，在右侧有些许的起伏，推测是氙灯的谱线。

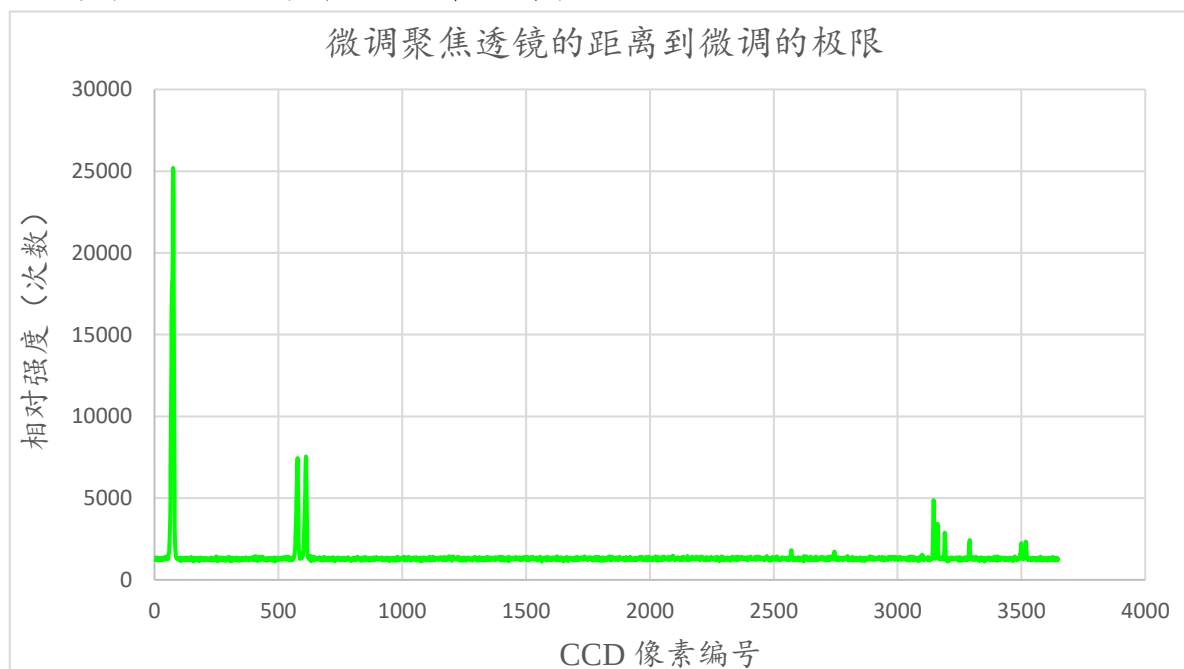


图十五、放大观察图十四右侧的谱线

从图十五可知，目前氩灯的谱线成像非常的差（形状变形），需要再调整图十二中微调距离的螺旋测微器。

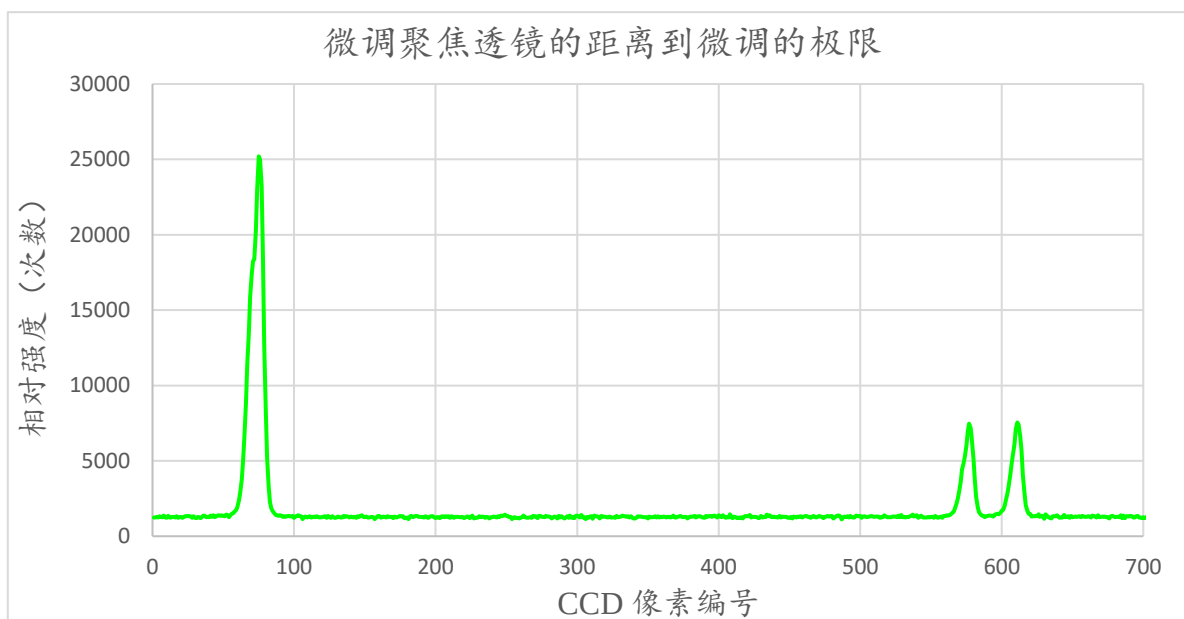
(3) 微调距离的光谱

将螺旋测微器转到底的结果如图十六



图十六、螺旋测微器转到底测量到的谱线

此时右侧的谱线成像变好了，但是在观察左侧的汞灯谱线。



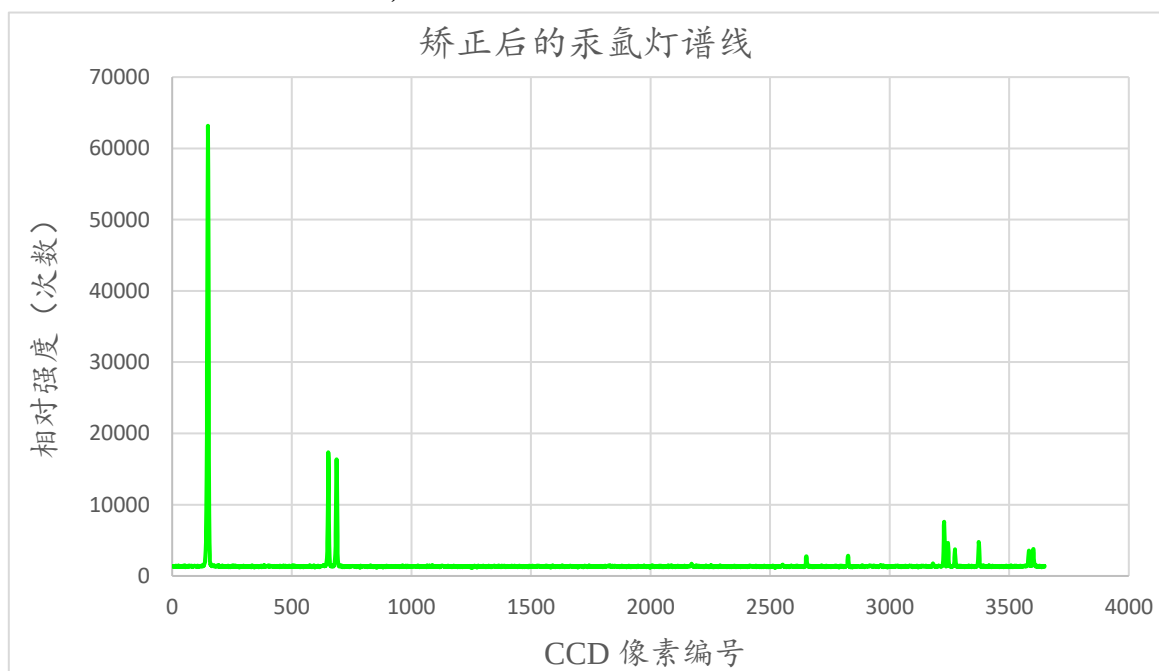
图十七、放大观察图十六左侧的谱线

从图十七可以发现，汞灯的谱线已经明显不对称了。当我们把氩灯的谱线调整好了之后，汞灯的谱线成像质量又会变差。

由于螺旋测微器已经转到底了，如果还要进一步矫正，则需要使用粗调的方式移动聚焦面镜了。

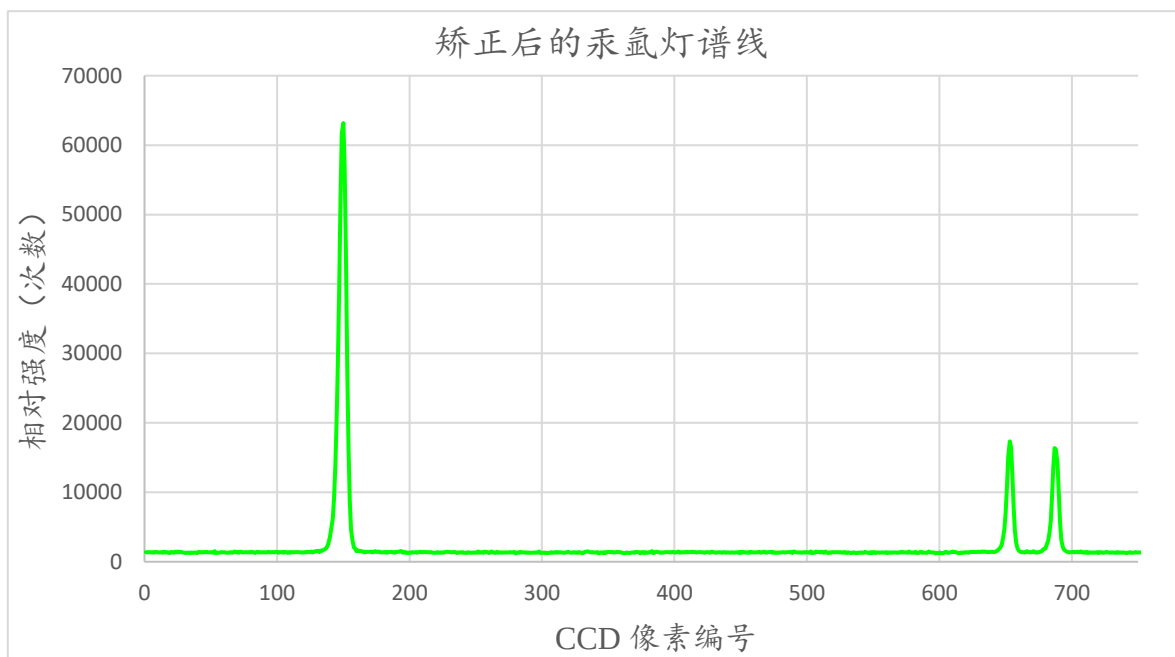
(4) 粗调角度和距离的光谱

松开图十二的粗调螺丝，进行大尺度的调整。



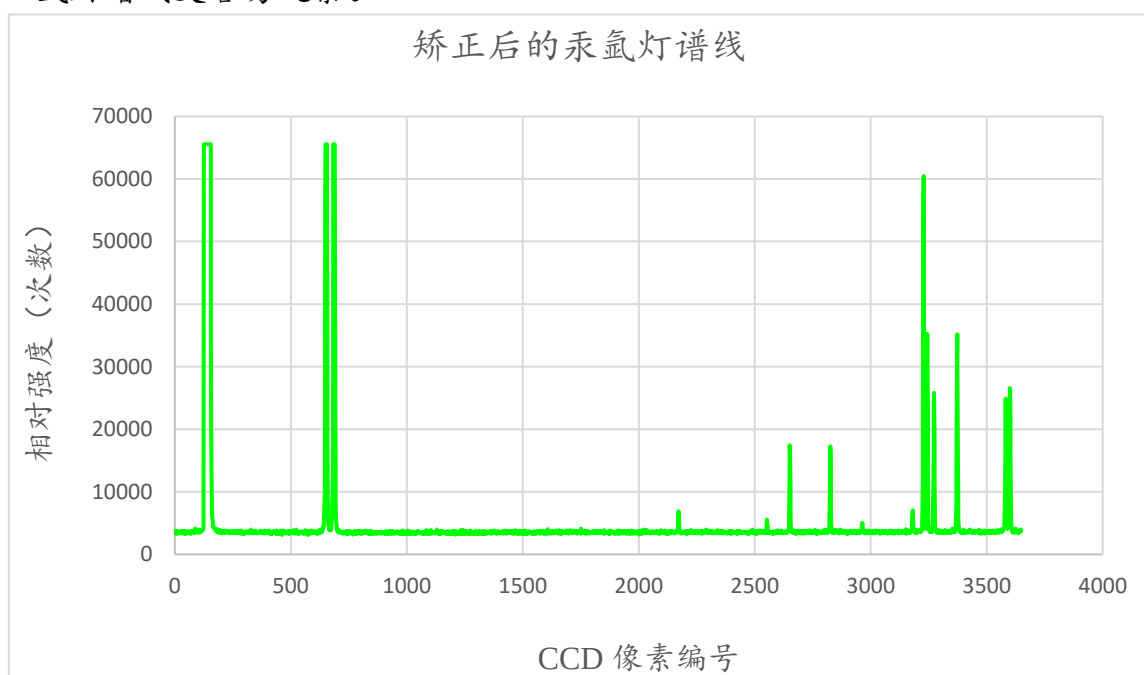
图十八、粗调后的汞氩灯谱线

图十八的参数如下：曝光时间 60 (ms)、平均次数 1 次、平滑数 0。



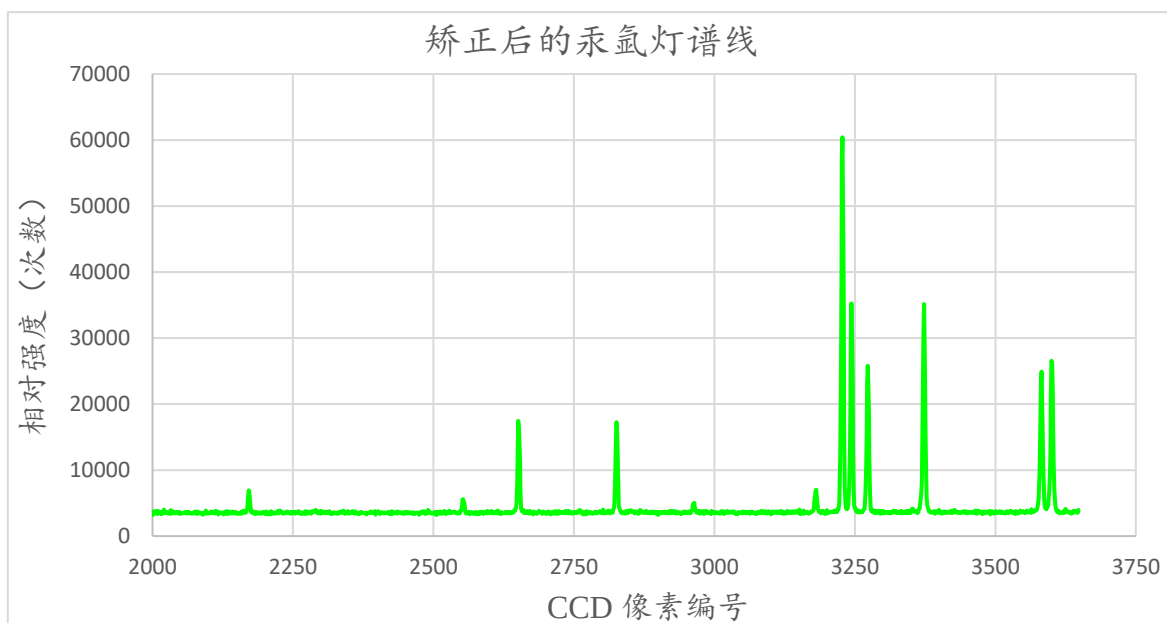
图十九、粗调后氙汞灯的汞灯谱线

由于图十八氙灯的谱线强度较低，通过增加曝光时间使得汞灯谱线过曝，让氙灯谱线更容易观察。



图二十、粗调后的氙汞灯谱线（增加曝光时间）

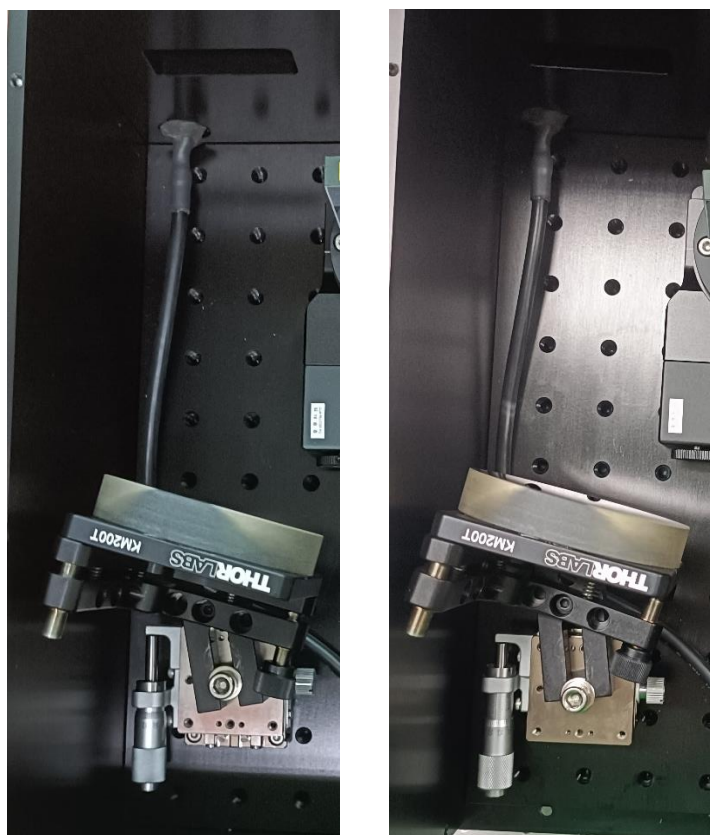
图二十的参数如下：曝光时间 500 (ms)、平均次数 1 次、平滑数 0。
放大图二十氙灯部分的谱线观察成像质量。



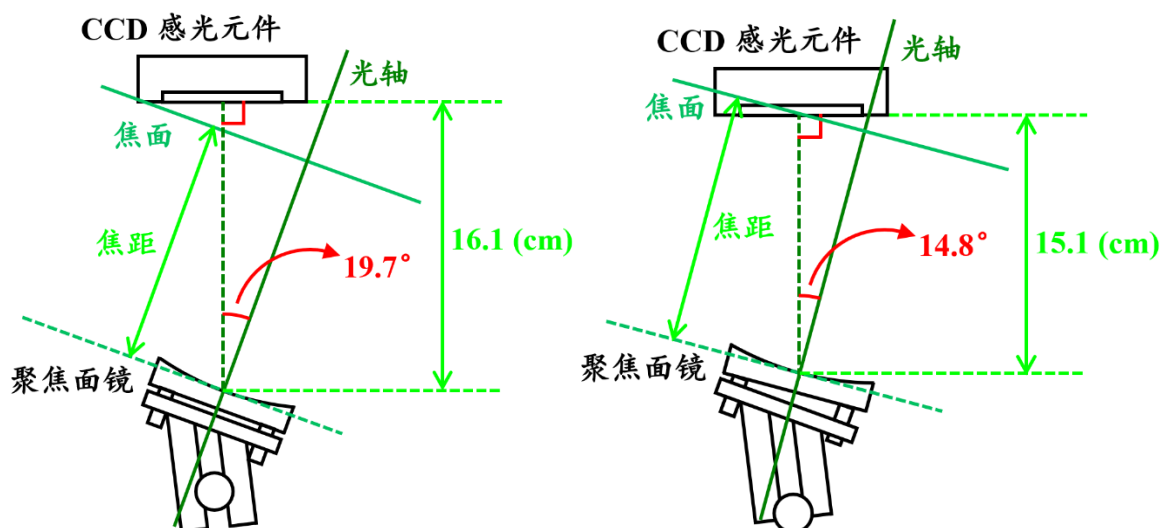
图二十一、粗调后氩汞灯的氩灯谱线

由图十九与图二十一可知，矫正后的谱线在汞灯波段和氩灯波段都能够良好的成像了。

(5) 聚焦面镜调整的尺度



图二十二、调整前（左）与调整后（右）的聚焦面镜



图二十三、调整前（左）与调整后（右）的聚焦面镜示意图

从图二十二和图二十三可以发现，聚焦面镜与 CCD 的距离才是成像不好的主要原因，而不是聚焦面镜的角度。实际上球面镜的焦面是一个球面，所以旋转球面反射镜的角度对成像的影响相对较小。

2. 数据处理与分析方法

根据图十八以及图二十的峰值，与图十一标识的谱线比较，先确定几条谱线的波长。

(1) 定出谱线的波长

表一、从测量到的光谱定出谱线对应波长

谱线编号	左像素	右像素	峰值像素	修正像素	波长 (nm)
1	146.0	152.5	149.3	-1675.8	546.08
2	650.5	655.5	653.0	-1172.0	576.96
3	684.5	689.5	687.0	-1138.0	579.07
4	2169.5	2173.5	2171.5	346.5	未知
5	2551.0	2556.0	2553.5	728.5	未知
6	2649.0	2653.0	2651.0	826.0	696.54
7	2823.5	2828.0	2825.8	1000.8	706.72
8	2961.0	2966.0	2963.5	1138.5	未知
9	3178.0	3183.0	3180.5	1355.5	727.29
10	3225.0	3230.0	3227.5	1402.5	未知
11	3242.0	3247.0	3244.5	1419.5	未知
12	3271.0	3275.5	3273.3	1448.3	未知
13	3371.0	3375.0	3373.0	1548.0	738.4
14	3580.0	3584.0	3582.0	1757.0	未知
15	3598.0	3603.0	3600.5	1775.5	未知

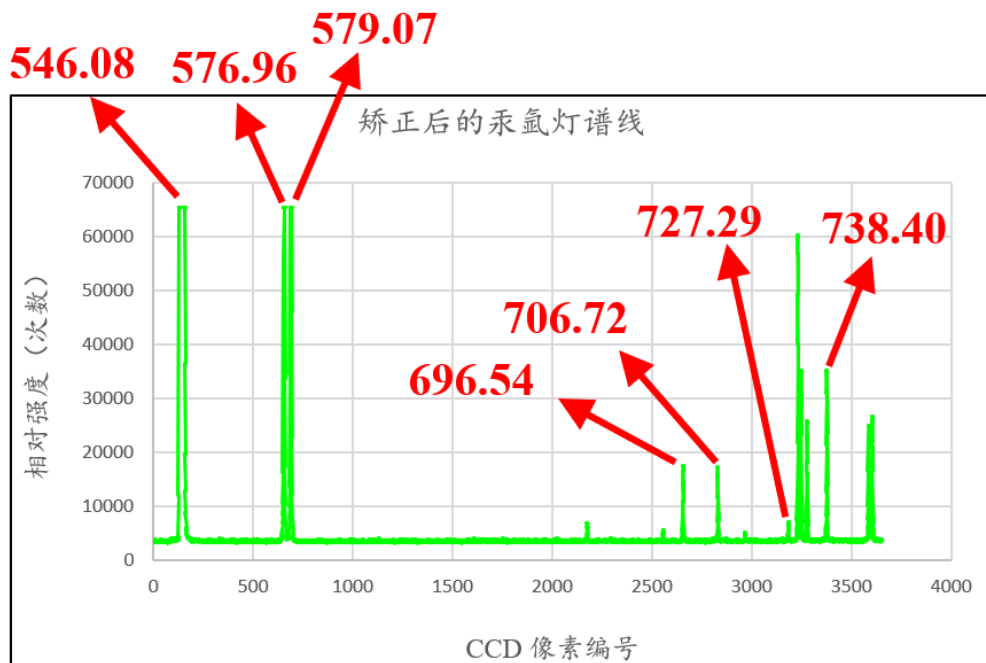
其中：

左像素是谱线极大值一半对应的左侧像素

右像素是谱线极大值一半对应的右侧像素

峰值像素是左像素和右像素的平均值

修正像素是峰值像素减去 CCD 中央像素。(CCD 中央像素 = 1285)。

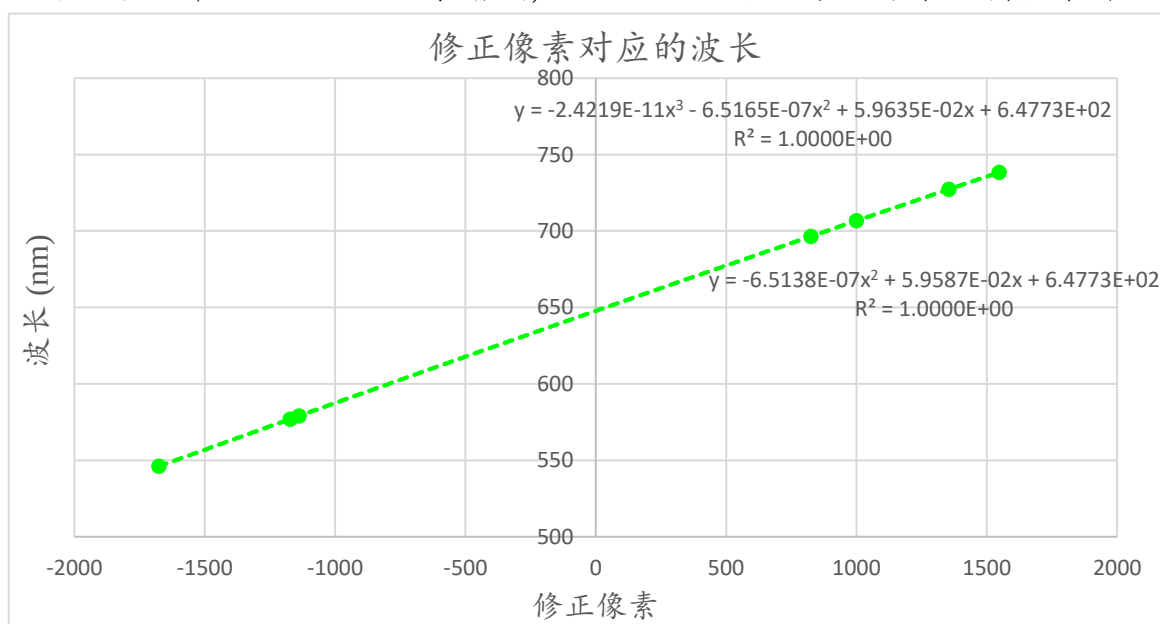


图二十四、表一确定的谱线在图二十的对应位置

在图二十四中，标识出了表一中确定波长的谱线在图二十对应的位置，图中的红色数字单位是纳米。

(2) 作图拟合得到像素与波长的关系

根据表一中已知波长的七条谱线，以波长为纵轴、修正像素为横轴作图：



图二十五、修正像素与波长的关系

分别以三次函数和二次函数拟合数据点：

$$\lambda = A_3 + B_3 p + C_3 p^2 + D_3 p^3 \quad (4)$$

$$\lambda = A_2 + B_2 p + C_2 p^2 \quad (5)$$

其中 λ 是波长、 p 是修正像素。

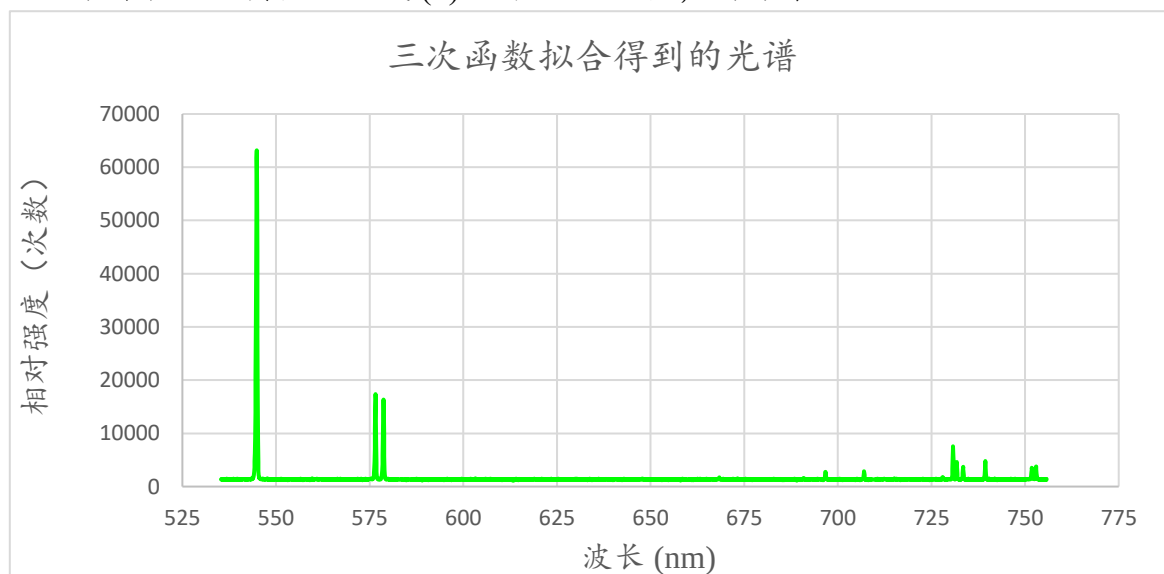
表二、分别以三次函数和二次函数拟合得到的系数

系数	三次项 (nm)	二次项 (nm)	一次项 (nm)	常数项 (nm)
三次函数	2.4219E-10	-6.5165E-07	5.9635E-02	647.73
二次函数	无	-6.5138E-07	5.9587E-02	647.73

(3) 比较拟合波长与实际波长

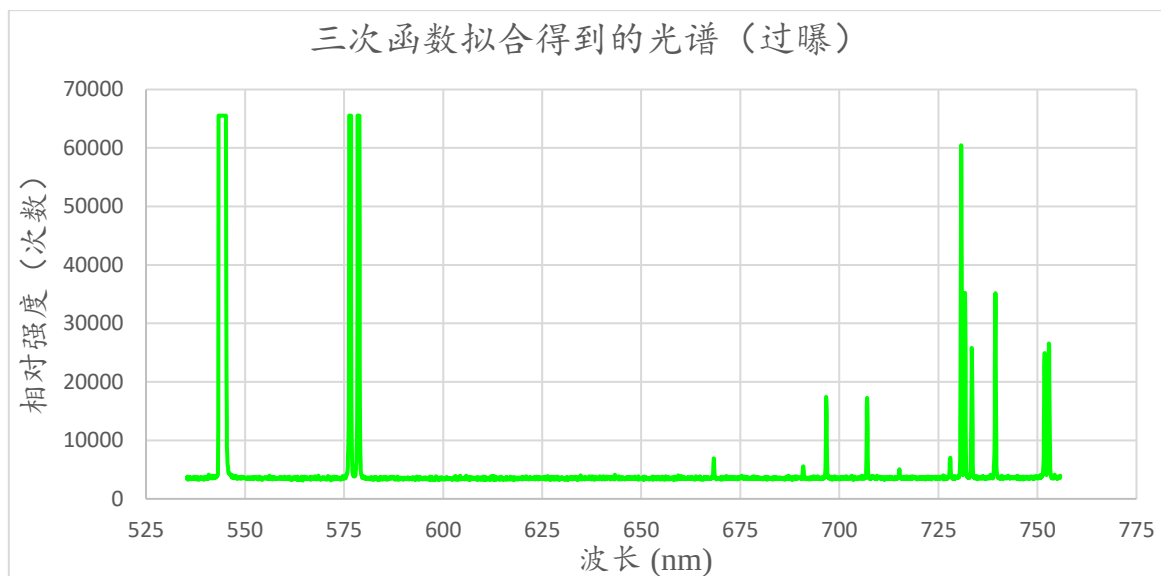
(a) 三次函数拟合

将图十八的横轴以公式 (4) 和表二的数值，将像素改为波长。



图二十六、三次函数拟合的波长与光谱的关系

将图二十一横轴以公式 (4) 和表二的数值，将像素改为波长。



图二十七、三次函数拟合的波长与光谱的关系（过曝）

表三、三次函数拟合的波长与实际波长比较

谱线编号	理论波长 (nm)	左波长 (nm)	右波长 (nm)	线宽 (nm)	峰值波长 (nm)	波长绝对误差 (nm)
1	546.08	544.62	545.07	0.45	544.85	-1.24
2	576.96	576.37	576.80	0.43	576.59	-0.38
3	579.07	578.48	578.91	0.43	578.70	-0.38
6	696.54	696.56	696.86	0.30	696.71	0.17
7	706.72	706.90	707.19	0.29	707.05	0.33
9	727.29	727.82	728.12	0.30	727.97	0.68
13	738.40	739.26	739.56	0.30	739.41	1.01

其中：左波长是谱线极大值一半对应的左侧波长

右波长是谱线极大值一半对应的右侧波长

线宽是右波长减左波长

峰值波长是左波长和右波长的平均值

波长绝对误差是峰值波长减理论波长。

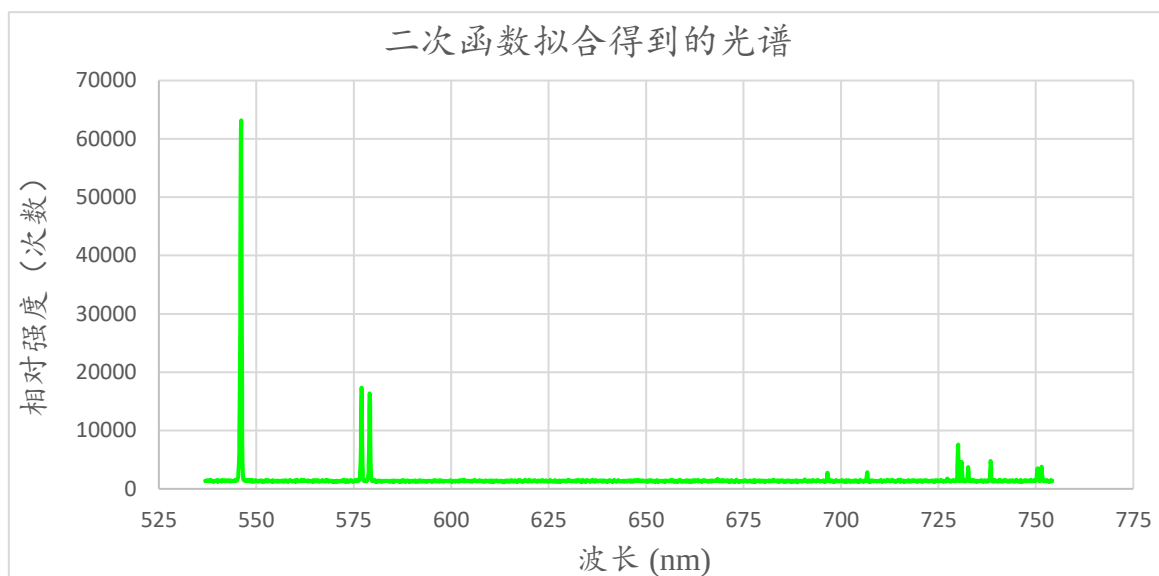
由表三的波长绝对误差计算误差的标准差：

$$\text{误差的标准差} = \sqrt{\text{平均值} \left\{ \left(\text{绝对误差} - \text{平均值} \{ \text{绝对误差} \} \right)^2 \right\}} \quad (6)$$

误差的标准差 = 0.71 (nm)，大于谱线的线宽。

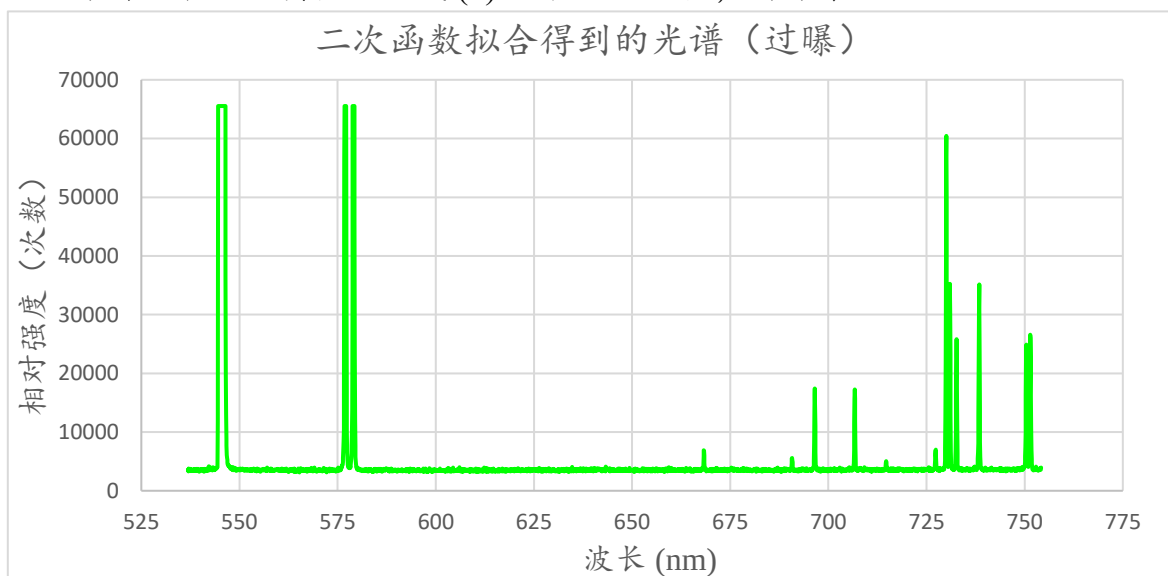
(b) 二次函数拟合

将图十八的横轴以公式 (5) 和表二的数值，将像素改为波长。



图二十八、二次函数拟合的波长与光谱的关系

将图二十一横轴以公式 (5) 和表二的数值，将像素改为波长。



图二十九、二次函数拟合的波长与光谱的关系（过曝）

表四、二次函数拟合的波长与实际波长比较

谱线编号	理论波长 (nm)	左波长 (nm)	右波长 (nm)	线宽 (nm)	峰值波长 (nm)	波长绝对误差 (nm)
1	546.08	545.91	546.28	0.37	546.10	0.01
2	576.96	576.88	577.18	0.30	577.03	0.07
3	579.07	578.95	579.32	0.37	579.14	0.06
6	696.54	696.45	696.74	0.29	696.60	0.06
7	706.72	706.61	706.90	0.29	706.76	0.03
9	727.29	727.16	727.45	0.29	727.31	0.02
13	738.40	738.29	738.58	0.29	738.44	0.03

其中：

左波长是谱线极大值一半对应的左侧波长

右波长是谱线极大值一半对应的右侧波长
 线宽是右波长减左波长
 峰值波长是左波长和右波长的平均值
 波长绝对误差是峰值波长减理论波长。

由表四的波长绝对误差计算误差的标准差：
 根据公式 (6)，误差的标准差 = 0.05 (nm)，小于谱线的线宽。

3. 讨论数据误差以及合理程度

(1) 三次函数拟合与二次函数拟合

表五、比较三次函数拟合与二次函数拟合的误差

误差比较	平均线宽 (nm)	误差的标准差 (nm)
三次函数	0.36	0.71
二次函数	0.31	0.05

由表五可知，三次函数拟合的误差大于谱线的平均线宽，而二次函数拟合的误差小于谱线的平均线宽。说明二次函数的拟合误差较小。

4. 实验过程中，特殊现象的发现与解释

(1) 未知的谱线

在实验过程中有发现八条波长无法确定的谱线（表一），这些谱线在图十一中并没有标识出来。

利用二次函数的拟合公式计算未知谱线对应的波长。

表六、定出未知谱线的波长

谱线编号	左波长 (nm)	右波长 (nm)	线宽 (nm)	峰值波长 (nm)
4	668.21	668.45	0.24	668.33
5	690.65	690.94	0.29	690.80
8	714.58	714.87	0.29	714.73
10	729.93	730.22	0.29	730.08
11	730.86	731.15	0.29	731.01
12	732.53	732.82	0.29	732.68
14	750.30	750.59	0.29	750.45
15	751.39	751.67	0.28	751.53

(a) 二级光

推测无法确定的谱线可能是汞灯短波谱线的二级光。

回到公式 (3)：

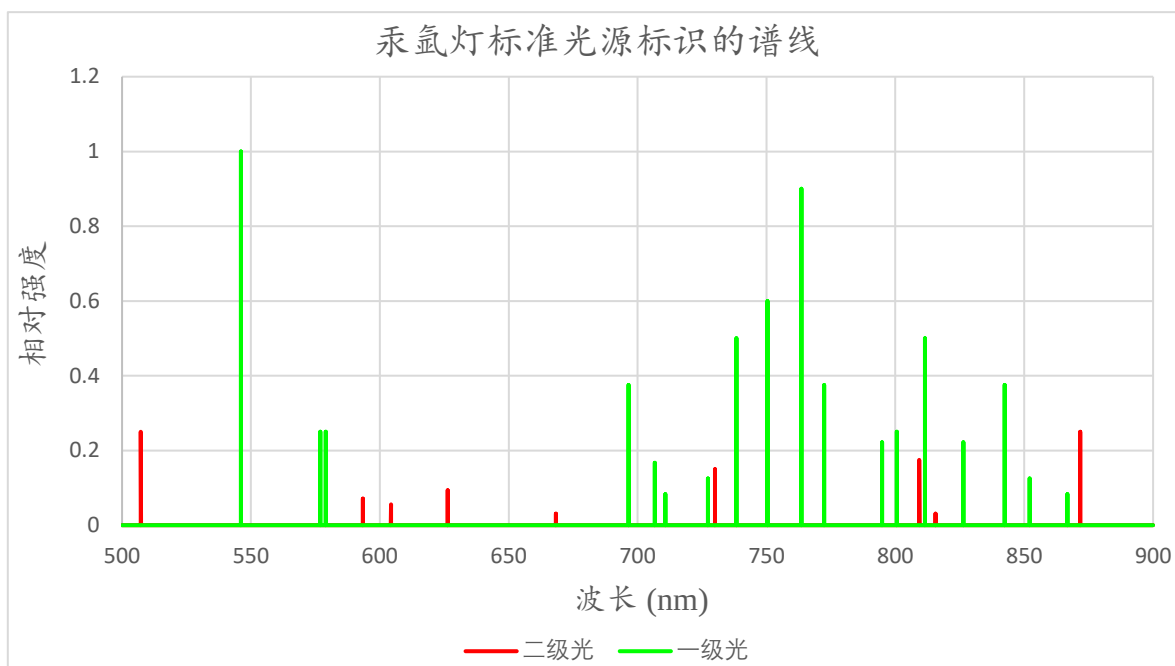
$$\theta_m = \arcsin\left(\sin(\theta_i) + \frac{m\lambda}{d}\right) \quad [3]$$

一级光 $m = 1$ ，二级光 $m = 2$ 。对于二级光在公式中的表达，就像是波长变成 2 倍一级光，所以可以将图十一的短波波长乘 2，重叠到原本标识的谱线上观察：

表七、一级光与二级光对应的波长

衍射级数 m	实际波长 λ (nm)	对应波长 $m\lambda$ (nm)
2	253.65	507.30
1	546.08	546.08
1	576.96	576.96
1	579.07	579.07
2	296.73	593.46
2	302.15	604.30
2	313.16	626.32
2	334.15	668.30
1	696.54	696.54
1	706.72	706.72
1	710.75	710.75
1	727.29	727.29
2	365.01	730.02
1	738.40	738.40
1	750.39	750.39
1	763.51	763.51
1	772.40	772.40
1	794.82	794.82
1	800.62	800.62
2	404.66	809.32
1	811.53	811.53
2	407.78	815.56
1	826.45	826.45
1	842.46	842.46
1	852.14	852.14
1	866.79	866.79
2	435.84	871.68

其中绿底为一级光、红底为二级光。



图三十、汞氙灯的一级谱线与二级谱线

由图三十可以发现，表六的 4 号谱线（668.33 (nm)）可能是表七中波长 334.15 (nm) 的二级光（对应 668.30 (nm)）。（百分误差为 0.0045%）

(b) 助教以前测量到的数据

目前表六中未知的谱线中

10 号谱线（730.08 (nm)）、11 号谱线（731.01 (nm)）、12 号谱线（732.68 (nm)）都非常接近表七中波长 365.01 (nm) 的二级光（对应 730.02 (nm)）。

14 号谱线（750.45 (nm)）、15 号谱线（751.53 (nm)）都非常接近表七中波长 750.39 (nm) 的谱线。

这两组谱线在汞氙灯标识的数据都是单一的一条谱线。

后来和助教讨论此问题时，助教提供她以前测量这台汞氙灯的谱线数据，发现在这两个区域确实有多条非常靠近的谱线。

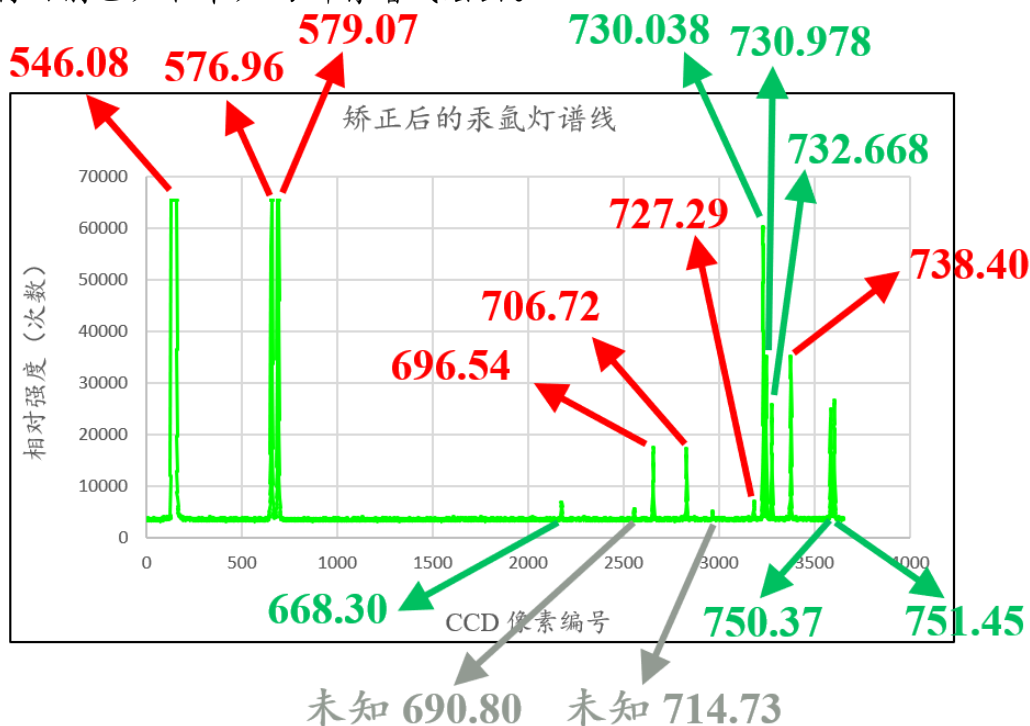
表八、比较测量到的数据和助教的数据

谱线编号	测量数据 (nm)	助教的数据 (nm)	百分误差
10	730.08	730.038	0.0051%
11	731.01	730.978	0.0037%
12	732.68	732.668	0.0010%
14	750.45	750.37	0.0100%
15	751.53	751.45	0.0106%

从表八可以发现，我们测量到的数据和助教的数据是吻合的。

(c) 总结

将目前已知和未知的所有谱线绘出。



图三十一、十五条谱线中已知谱线和未知谱线对应的波长

图三十一中的粗体数字单位是纳米，红色数字是最初确定的谱线，绿色数字是后来确定的谱线，灰色数字是未知的谱线。

从相对强度来说，两条未知谱线（5号谱线和8号谱线）的强度非常小，可能是光源的杂讯。

六、结论

矫正后的光谱仪可以适用更大的带宽（红光到绿光），聚焦面镜与 CCD 的距离不正确是之前实作中成像不好的主要原因。

使用二次函数拟合的误差会比使用三次函数拟合的误差小。

实验中测量到 15 条谱线，其中 7 条是一开始直接从标准光源标识的谱线确定的、1 条是从二级光的波长确定的、5 条是从助教的数据得知的，最后还有 2 条未知的且光强度非常弱的谱线。