

# 简易光谱仪测量液体的吸收光谱

洪玲儿<sup>1</sup>, 杨泽斌<sup>1</sup>, 刘朝辉<sup>12\*</sup>

(1. 华南师范大学物理与电信工程学院, 广东 广州 510006;

2. 华南师范大学物理学科基础课实验教学示范中心, 广东 广州 510006)

**摘要:** 吸收光谱有利于分析原子分子能级结构, 对物理化学等学科发展有重要意义。本实验结合图像采集技术和虚拟仪器测量技术自制出简易光谱仪, 测量了液体的吸收光谱。利用透射光栅和 USB 摄像头相结合获得光谱图, 通过虚拟仪器进行图像分析以及数据处理, 最后对吸收光谱进行快速傅里叶变换滤波去噪。通过测量得到的罗丹明 B 在最大吸收波长处吸光度的相对误差在 0.92%~1.43% 之间, 实现了低成本、高精度测量, 在误差允许范围内用叶绿素 a 和辣椒红素验证了一维势阱模型估算共轭分子的吸收光谱。

**关键词:** 简易光谱仪; 吸收光谱; 虚拟仪器; 一维势阱模型

中图分类号: O433.4 文献标识码: A

## Measurement of absorption spectrum of liquid by simple spectrometer

Ling Er Hong<sup>1</sup>, Ze Bin Yang<sup>1</sup>, Zhao Hui Liu<sup>12\*</sup>

(1. School of physics and Telecommunications Engineering, South China Normal University, Guangzhou, Guangdong 510006 China;

2. Experimental teaching demonstration center of physics basic courses of South China Normal University, Guangzhou, Guangdong 510006 China)

**Abstract:** Absorption spectrum is helpful to analyze the energy level structure of atoms and molecules, and is of great significance to the development of physical chemistry and other disciplines. In this experiment, a simple spectrometer was made by combining image acquisition technology and virtual instrument measurement technology to measure the absorption spectrum of liquid. The spectrum is obtained by combining transmission grating and USB camera. The image analysis and data processing are carried out by virtual instrument. Finally, the absorption spectrum is denoised by fast Fourier transform filtering. The relative error of the absorbance of Rhodamine B at the maximum absorption wavelength is between 0.92% ~ 1.43%, which realizes the low-cost and high-precision measurement. Within the allowable error range, the one-dimensional potential well model is verified by chlorophyll a and capsanthin to estimate the absorption spectrum of conjugated molecules.

**Key words:** simple spectrometer; absorption spectrum; virtual instrument; one dimensional potential well model

#基金项目: 国家自然科学基金 (61975058)

#作者简介: 洪玲儿 (1996—), 女, 广东潮汕人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生. E-mail: 20192321127@m.scnu.edu.cn; 杨泽斌 (2001—), 男, 广东广州人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生. E-mail: 20192321098@m.scnu.edu.cn;

#通信作者: 刘朝辉 (1987—), 男, 山东莱州人, 华南师范大学物理与电信工程学院实验师, 博士, 研究方向为信息技术在物理教学中的应用和虚拟仪器技术.



目前大多数实验采用光谱仪来测量吸收光谱。朱玲<sup>[1]</sup>等用 WDS-8 型光栅单色仪测量了不同浓度的罗丹明 6G 溶液在 400~650nm 的吸收光谱。王泓鹏<sup>[2]</sup>等采用 SolidSpec-3700 / 3700DUV 分光光度计测量出不同植物油的可见吸收光谱,并探究了其光谱相关系数。娄毅<sup>[3]</sup>等用 WGD-8A 型多功能光栅光谱仪得出不同浓度乙醇汽油的吸收光谱并探究各溶液浓度与吸光度的关系。郭献章<sup>[4]</sup>等用 WGD-3 型组合式多功能光栅光谱仪分析了 3 种溶液在特定波长下梯度温度、梯度浓度与吸光度之间的规律。

本实验搭建了双光束光路,可以使得装置在分辨率和杂散光等方面的性能大大提高<sup>[5]</sup>。利用自制简易光谱仪,将机器视觉技术和虚拟仪器测量相结合,提出了一种快速测量出液体吸收光谱的新方法。实验中得到罗丹明 B 的吸收光谱与文献<sup>[6]</sup>中用 TU-1901 型双光束紫外可见分光光度计测得的吸收光谱一致性很高,在最大吸收波长处不同浓度下吸光度的相对误差在 2% 以内,表明装置具有测量精度较高的特点。另本实验在误差允许范围内测量叶绿素 a 和辣椒红素的吸收光谱,验证了一维势阱模型估算的共轭分子吸收光谱的可行性。

## 1 基本原理

### 1.1 吸收光谱

复合光通过样品溶液时,会发生反射、透射,还有一部分光会被样品溶液吸收。定义入射光强为  $I_i$ ,透射光强为  $I_o$ 。则吸光度为:

$$A = \lg \frac{I_i}{I_o} \quad (1)$$

从溶液中透射出来的复合光经过透射光栅时会发生衍射,透射光栅中刻有多条相互平行、等距、等宽的狭缝,如图 1 所示,透射光栅满足的光栅方程<sup>[7]</sup>为:

$$d(\sin \alpha + \sin \beta) = k\lambda \quad (2)$$

其中  $d$  是光栅常数,  $\alpha$  是入射角,  $\beta$  是衍射角,  $k$  是整数。复合光中各种波长的光入

射角相同,而衍射角随波长的变化而变化。因此可以得到光谱图。

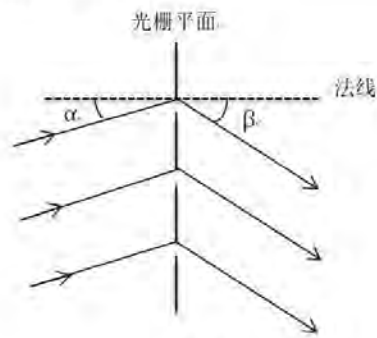


图 1

将参比溶液的光谱图上各个波长的光强作为相应波长的入射光强  $I_i$ ,样品溶液的光谱图上对应波长的光强为透射光强  $I_o$ ,代入式 (1) 计算即可得出各个波长的吸光度,以波长  $\lambda$  为横轴,吸光度  $A$  为纵轴,便可以得到溶液的吸收光谱。

### 1.2 一维势阱模型

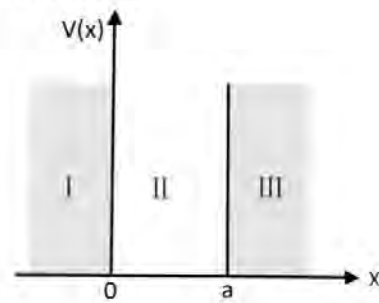


图 2

一维无限深势阱<sup>[8]</sup>中粒子在外力场中的势函数如图 2 所示,其满足:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & x \leq 0 \text{ 或 } x \geq a \end{cases} \quad (3)$$

由薛定谔方程:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (4)$$

再结合波函数的连续性条件可以得到一维势阱中粒子的能量量子化公式:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8\mu a^2} \quad (n \text{ 为正整数}) \quad (5)$$

对于共轭分子来说,  $\pi$  键的键级作调节

#基金项目: 国家自然科学基金 (61975058)

#作者简介: 洪玲儿 (1996—), 女, 广东潮汕人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321127@m.scnu.edu.cn; 杨泽斌 (2001—), 男, 广东广州人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321098@m.scnu.edu.cn;

#通信作者: 刘朝晖 (1987—), 男, 山东莱州人, 华南师范大学物理与电信工程学院实验师, 博士, 研究方向为信息技术在物理教学中的应用和虚拟仪器技术。



系数,  $n$  也是双键的数量, 满足:

$$a = n \cdot d \quad (6)$$

其中:

$$d = \text{单键长度 } 154 \text{ pm} * p_{23} \cos 30^\circ + \text{双键长度 } 134 \text{ pm} * p_{12} \cos 30^\circ = 163.4 \text{ pm} \quad (7)$$

由式(6)可知 HOMO 与 LUMO 的能级差为:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{(2n+1)h^2}{8\mu n^2 d^2} = \frac{hc}{\lambda} \quad (8)$$

因此用一维势阱模型估算得到共轭分子的最大吸收波长为:

$$\lambda_{max} = \frac{8\mu c n^2 d^2}{(2n+1)h} = \frac{n^2}{2n+1} 88 \text{ nm} \quad (9)$$

## 2 实验装置

### 2.1 双光束光路

如图 3 所示为实验光路图。通过双光束光路, 可以让光线分别通过参比溶液和样品溶液。复合光经过透射光栅发生衍射后, 由 USB 摄像头装置实时采集得出光谱图。

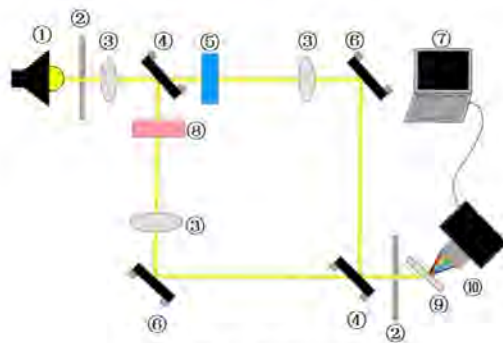


图 3 实验光路图

- ①: LED 全光谱灯
- ②: 狭缝
- ③: 凸透镜
- ④: 分光镜
- ⑤: 参比溶液
- ⑥: 全反射镜
- ⑦: 计算机
- ⑧: 样品溶液
- ⑨: 透射光栅
- ⑩: USB 摄像头

### 2.2 数据采集处理系统

如图 4 所示是系统采集处理数据的基本流程。在进行实验前, 需要用汞灯对装置进行定标。首先摄像头采集汞灯的光谱图, 利用自主设计的程序对光谱图分析, 获得相对光强-像素图。通过标准汞灯光谱图的 4 个特征峰来确定相对光强-像素图中对应的 4 个特征峰的准确波长值, 完成定标。

汞灯定标完成后, 用其他光源时就可以分别获得参比溶液和样品溶液的波长-相对光强图。利用式(1)得出吸收光谱, 并对其进行快速傅里叶变换实现滤波、寻峰, 从而得出最大吸收波长以及对应的吸光度。



图 4 系统采集处理数据的基本流程。

#基金项目: 国家自然科学基金 (61975058)

#作者简介: 洪玲儿 (1996—), 女, 广东潮汕人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321127@m.scnu.edu.cn; 杨泽斌 (2001—), 男, 广东广州人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321098@m.scnu.edu.cn;

#通信作者: 刘朝辉 (1987—), 男, 山东莱州人, 华南师范大学物理与电信工程学院实验师, 博士, 研究方向为信息技术在物理教学中的应用和虚拟仪器技术。





本实验采用图像采集和虚拟仪器相结合的技术, USB摄像头高灵敏度的检测使由透射光栅衍射出来的光谱能够被直观、清晰地观察; 通过自主设计的程序高效处理光谱, 将样品溶液的吸收光谱实时地呈现出来。装置一经汞灯定标, 便可以实时检测样品溶液吸收光谱, 大量的数据使得对样品质量的检测更高效、精准。总体上, 该测量装置具有测量效率高, 监测性、实时性强, 灵敏度高等优点。

### 3 实验结果

#### 3.1 光谱仪定标

将汞灯作为光源, 利用 4 个特征峰对应的波长 404.66nm、435.84nm、546.07nm 和 576.96nm 对简易光谱仪进行定标。光束由透射光栅分成不同波长的单色光后, 分布在 USB 摄像头不同位置上, 经过摄像头采集获得如图 5 所示汞灯的相对光强-像素 x 的关系图:

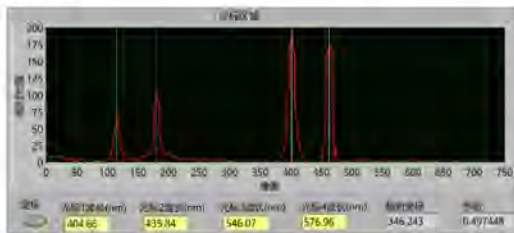
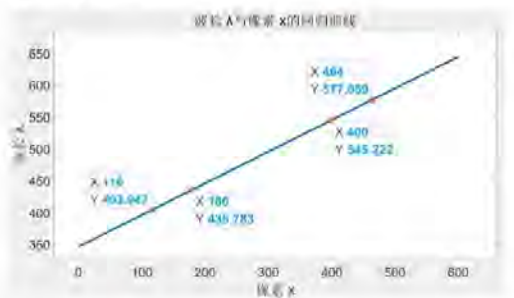


图 5 相对光强-像素 x 的关系图

在图像上选中汞灯四个特征峰并输入各峰对应的波长值, 点击“定标”即可完成对光谱仪的定标。由于各波长的衍射光方向较小, 可以近似认为像素 x 和波长之间的关系为线性关系<sup>[9]</sup>, 图 6 为定标后波长 $\lambda$ -像素 x 关系图:



#基金项目: 国家自然科学基金(61975058)

#作者简介: 洪玲儿(1996—), 女, 广东潮汕人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321127@m.scnu.edu.cn; 杨泽斌(2001—), 男, 广东广州人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321098@m.scnu.edu.cn;

#通信作者: 刘朝晖(1987—), 男, 山东莱州人, 华南师范大学物理与电信工程学院实验师, 博士, 研究方向为信息技术在物理教学中的应用和虚拟仪器技术。

图 6 波长 $\lambda$ -像素 x 关系图

利用最小二乘法拟合求得:

$$\lambda = 0.49745 \cdot x + 346.24$$

其线性相关系数为: 0.9999, 线性程度高与理论相符合。

#### 3.2 测量不同浓度下罗丹明 B 的吸收光谱

用蒸馏水作溶剂, 分别配制了浓度为 4 mg/L~10 mg/L, 梯度为 1 mg/L 的罗丹明 B 溶液, 以蒸馏水作为参比溶液得出如图 7 所示不同浓度下的罗丹明 B 溶液的吸收光谱。从图中可以看到, 溶液在不同浓度下的吸收光谱在最大吸收波长 $\lambda_{max}$ 处不会发生重叠, 随着样品溶液浓度的增大, 吸光度也逐渐增大, 因此可以用最大吸收波长处的吸光度作为分析对象。

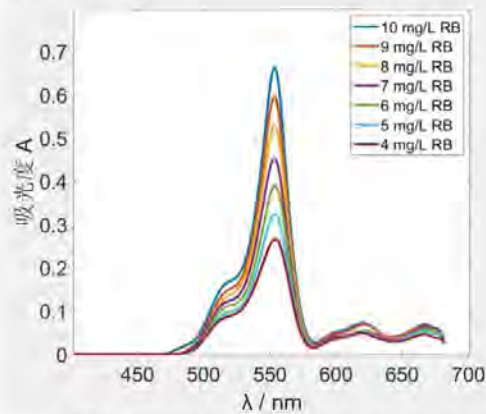


图 7 不同浓度下罗丹明 B 溶液的吸收光谱

表 1 为不同浓度罗丹明 B 溶液在 $\lambda_{max}$

处的吸光度数据。其中 $A_{参考}$ 是参考刘春艳<sup>[6]</sup>

等用 TU-1901 型双光束紫外可见分光光度计所测得的数据。从表中可以看出, 由简易光谱仪测量出罗丹明 B 溶液在不同浓度下吸光度的相对误差保持在 0.92%~1.43%之间, 说明该实验装置具有价格低廉, 测量精度高等优点。

表 1

| 浓度 c (mg/L) | 最大吸收波长 $\lambda_{max}$ (nm) | 测量值 $A_{测}$ | 参考值 $A_{参考}$ | 相对误差 (%) |
|-------------|-----------------------------|-------------|--------------|----------|
| 4           | 550                         | 0.25        | 0.25         | 0.00     |
| 5           | 550                         | 0.35        | 0.35         | 0.00     |
| 6           | 550                         | 0.45        | 0.45         | 0.00     |
| 7           | 550                         | 0.55        | 0.55         | 0.00     |
| 8           | 550                         | 0.65        | 0.65         | 0.00     |
| 9           | 550                         | 0.75        | 0.75         | 0.00     |
| 10          | 550                         | 0.85        | 0.85         | 0.00     |



|    |        |        |        |      |
|----|--------|--------|--------|------|
| 4  | 0.2654 | 0.2629 | 0.95   |      |
| 5  | 0.3235 | 0.3278 | 1.31   |      |
| 6  | 0.3891 | 0.3927 | 0.92   |      |
| 7  | 554    | 0.4522 | 0.4576 | 1.18 |
| 8  | 0.5274 | 0.5225 | 0.94   |      |
| 9  | 0.5954 | 0.5874 | 1.36   |      |
| 10 | 0.6616 | 0.6523 | 1.43   |      |

由数据拟合出如图 8 所示的在 $\lambda_{max}$ 下吸光度 A-浓度 c 的曲线:

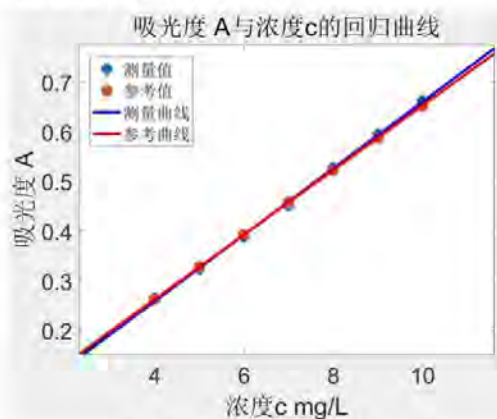


图 8 吸光度 A-浓度 c 的曲线

由图 8 可以看出测量值和参考值随浓度 c 变化的趋势基本上一致,其回归方程为:

$$A = 0.0668c - 0.00845$$

相关系数 $r^2 = 0.99904$ ,说明罗丹明 B 浓度在测量范围 4 mg/L~10 mg/L 之间与吸光度呈现良好的线性关系。

### 3.3 测量叶绿素 a 和辣椒红素的吸收光谱

分别取适量叶绿素 a、辣椒红素,以 95% 乙醇作为溶剂进行溶解,如图 9、图 10 所示分别是叶绿素 a 和辣椒红素的吸收光谱,测得叶绿素 a 的最大吸收波长为: $\lambda_{max1} = 422nm$ ,辣椒红素的最大吸收波长为: $\lambda_{max2} = 459nm$ 。

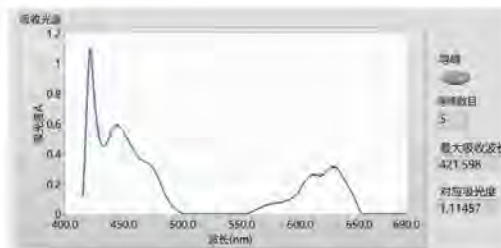


图 9 叶绿素 a 吸收光谱

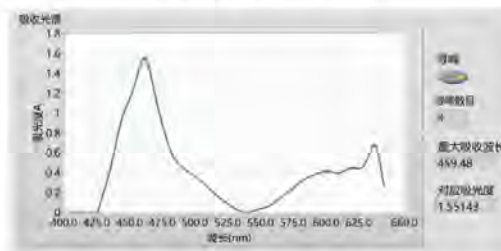


图 10 辣椒红素吸收光谱

表 2 为利用式 (10) 计算的理论值和测量值对比:

表 2

| 样品   | 共轭双键数目 n | 理论值 $\lambda_{理}$ (nm) | 测量值 $\lambda_{测}$ (nm) | 相对误差 (%) |
|------|----------|------------------------|------------------------|----------|
| 叶绿素a | 10       | 419.05                 | 422                    | 0.609    |
| 辣椒红素 | 11       | 462.96                 | 459                    | 0.752    |

由于分子结构直链化过程中,原子间的键长没有做相应的换算<sup>[10]</sup>,因此计算值与实验值有一定的误差。本实验在误差允许范围内,验证了一维势阱模型估算的共轭分子吸收光谱。

## 4 结束语

本实验结合图像采集技术和虚拟仪器测量技术自制了简易光谱仪。用该光谱仪测量到的数据与用 TU-1901 型双光束紫外可见分光光度计所测得的数据相比,误差在 2% 以内。结果表明罗丹明 B 浓度在 4 mg/L~10 mg/L 之间与吸光度呈现良好的线性关系。实验测量到叶绿素 a 和辣椒红素的最大吸收波长与一维势阱模型的预测值相比,误差分别为 0.609%、0.752%。因此在误差允许范围内验证

#基金项目:国家自然科学基金(61975058)

#作者简介:洪玲儿(1996—),女,广东潮汕人,华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生,E-mail: 20192321127@m.scnu.edu.cn; 杨泽斌(2001—),男,广东广州人,华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生,E-mail: 20192321098@m.scnu.edu.cn;

#通信作者:刘朝辉(1987—),男,山东莱州人,华南师范大学物理与电信工程学院实验师,博士,研究方向为信息技术在物理教学中的应用和虚拟仪器技术。



---

了一维势阱模型估算共轭分子吸收光谱的准确性。总的来说,该光谱仪有操作简单,可视化程度高,测量结果精确,成本低等特点。

## 参考文献

- [1] 朱玲,郑虹,王中平,等.利用光栅单色仪测量罗丹明6G溶液吸收光谱[J].物理实验,2018,38(S1):1-3.
- [2] 王泓鹏,万雄.基于植物油可见吸收光谱的相关系数鉴别特级初榨橄榄油[J].光谱学与光谱分析,2018,38(09):2814-2819.
- [3] 娄毅,陈士伟,牛法富,等.利用光栅光谱仪研究乙醇汽油溶液的吸收特性[J].物理实验,2010,30(01):43-45.
- [4] 郭献章,李琛,杨蕾,等.利用WGD-3型组合式多功能光栅光谱仪研究温度和高浓度溶液对吸光度的影响规律[J].物理实验,2013,33(09):27-31.
- [5] 倪一,黄梅珍,袁波,等.紫外可见分光光度计的发展与现状[J].现代科学仪器,2004(03):3-7+11.
- [6] 刘春艳,柏沫含,徐雨靓,等.紫外-可见分光光度法测定可溶微针贴片中罗丹明B的含量[J].蚌埠医学院学报,2020,45(11):1558-1560.
- [7] 姚启钧.光学教程(第六版)[M].北京:高等教育出版社,2019:89-93.
- [8] 周世勋.量子力学教程(第二版)[M].北京:高等教育出版社,2009:26-29.
- [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(02):52-56.
- [10] 徐辉,朱拓,虞锐鹏.乙二醇和丙三醇的吸收光谱和荧光光谱研究[J].光谱学与光谱分析,2007(07):1381-1384.

#基金项目:国家自然科学基金(61975058)

#作者简介:洪玲儿(1996—),女,广东潮汕人,华南师范大学物理与电信工程学院2019级本科生.E-mail:20192321127@m.scnu.edu.cn;杨泽斌(2001—),男,广东广州人,华南师范大学物理与电信工程学院2019级本科生.E-mail:20192321098@m.scnu.edu.cn;

#通信作者:刘朝辉(1987—),男,山东莱州人,华南师范大学物理与电信工程学院实验师,博士,研究方向为信息技术在物理教学中的应用和虚拟仪器技术.





# 自制简易光谱仪测量溶液浓度

杨泽斌<sup>1</sup>, 洪玲儿<sup>1</sup>, 刘朝辉<sup>1,2\*</sup>

(1. 华南师范大学物理与电信工程学院, 广东 广州 510006;

2. 华南师范大学物理学科基础课实验教学示范中心, 广东 广州 510006)

**摘要:** 浓度是表征溶液特征的物理量, 其测量在生物医学、材料科学等领域具有重要的研究意义。本文利用自制简易光栅光谱仪搭建了溶液浓度测量系统, 其中光路采用双光束以减小吸收光谱的抖动; 简易光谱仪结合虚拟仪器测量技术可实现对溶液浓度的测量。先由朗伯-比尔定律建立吸光度  $A$ -浓度  $c$  的工作曲线, 通过自主设计程序测量待测样品的吸收光谱得出吸光度  $A$  后, 就可根据工作曲线确定样品的浓度。由该装置测量所得高锰酸钾溶液浓度的相对误差在 3% 以内, 表明该测量系统能够快速、精确地测量溶液浓度。

**关键词:** 简易光谱仪; 吸收光谱; 虚拟仪器; 浓度

中图分类号: O433.4 文献标识码: A

## Real time measurement of solution concentration based on double beam optical path

Ze Bin Yang<sup>1</sup>, Ling Er Hong<sup>1</sup>, Zhao Hui Liu<sup>1,2\*</sup>

(1. School of physics and Telecommunications Engineering, South China Normal University, Guangzhou, Guangdong 510006 China;

2. Experimental teaching demonstration center of physics basic courses of South China Normal University, Guangzhou, Guangdong 510006 China)

**Abstract:** Concentration is a physical quantity that characterizes the characteristics of solution. Its measurement has important research significance in biomedicine, materials science and other fields. In this paper, a self-made simple grating spectrometer is used to build a solution concentration measurement system, in which two beams are used to reduce the jitter of the absorption spectrum; The simple spectrometer combined with virtual instrument measurement technology can realize the measurement of solution concentration. Firstly, the working curve of absorbance  $a$ -concentration  $C$  is established according to Lambert Beer law. After the absorbance  $A$  is obtained by measuring the absorption spectrum of the sample to be measured through the self-designed program, the concentration of the sample can be determined according to the working curve. The relative error of potassium permanganate solution concentration measured by the device is less than 3%, which shows that the measurement system can measure the solution concentration quickly and accurately.

**Key words:** simple spectrometer; absorption spectrum; virtual instrument; concentration

#基金项目: 国家自然科学基金 (61975058)

#作者简介: 洪玲儿 (1996—), 女, 广东潮汕人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321127@m.scnu.edu.cn; 杨泽斌 (2001—), 男, 广东广州人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321098@m.scnu.edu.cn

#通信作者: 刘朝辉 (1987—), 男, 山东莱州人, 华南师范大学物理与电信工程学院实验师, 博士, 研究方向为信息技术在物理教学中的应用和虚拟仪器技术。



目前测量溶液浓度的光学方法主要有折射法,旋光法和光透射法。折射法<sup>[1]</sup>利用标准溶液折射率和浓度的关系来测量未知溶液浓度。该实验操作简单,但实验仪器较为昂贵。旋光法<sup>[2]</sup>是通过转动检偏器观测不同方向上光强的变化来测量光线经过旋光性溶液后所偏转的角度,并建立浓度和旋光角的经验公式来测量液体浓度,实验测量精确度高,但仪器内部结构复杂。光透射法<sup>[3]</sup>利用溶液对光吸收使得透射光强度衰减的原理,由于入射光被衰减的程度与溶液中溶质的浓度具有一定函数关系,可由该函数关系来进行浓度的测量,其稳定性高,但实验误差较大。

由此,本实验采用自制简易光谱仪测量溶液的浓度,该装置结构简单、价格低廉。光谱仪是将成分复杂的光转化为光谱线的装置,本实验的光谱仪为简易光栅光谱仪,其色散元件是透射光栅。复合光经过样品溶液后通过透射光栅发生衍射,由摄像头采集光谱图并通过虚拟软件计算后显示出溶液吸收光谱和浓度。实验中测得高锰酸钾溶液浓度的相对误差在3%以内,说明该测量装置还具有测量精度高、稳定性好的特点。

## 1 基本原理

### 1.1 光栅衍射

透射光栅中刻有多条相互平行、等距、等宽的狭缝,如图1所示,透射光栅满足的光栅方程<sup>[4]</sup>为:

$$d(\sin \alpha + \sin \beta) = k \lambda \quad (1)$$

其中  $d$  是光栅常数,  $\alpha$  是入射角,  $\beta$  是衍射角,  $k$  是整数。复合光中各种波长的光入射角相同,而衍射角随波长  $\lambda$  变化而变化。发生衍射后,利用透镜将不同波长的平行光汇聚在观察平面上的不同位置,从而形成光谱图。

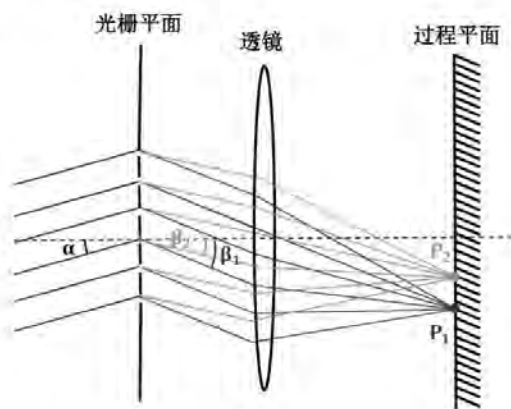


图 1

### 1.2 浓度测量

如图2所示,当一束平行光通过均匀的溶液时,一部分光被溶液吸收;一部分光通过溶液;还有一部分光发生反射<sup>[5]</sup>。因此有:

$$I_{in} = I_o + I_a + I_r \quad (2)$$

其中:

$I_{in}$ : 入射光光强

$I_o$ : 透射光光强

$I_a$ : 吸收光光强

$I_r$ : 反射光光强

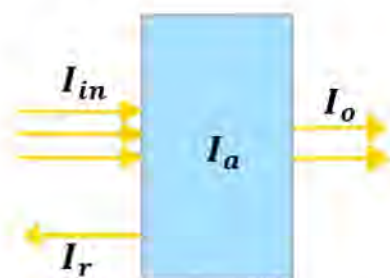


图 2

如果采用相同材质、相同尺寸的比色皿,其中一个比色皿盛装样品溶液,另一个比色皿盛装去离子水,那么由于是用相同的比色皿,反射光强的影响可以相互抵消,所以(2)式可以简化为:

$$I_{in} = I_o + I_a \quad (3)$$

透光率  $T$  是指透射光强与入射光强之比,即:

#基金项目: 国家自然科学基金(61975058)

#作者简介: 洪玲儿(1996—),女,广东潮汕人,华南师范大学物理与电信工程学院2019级本科生, E-mail: 20192321127@m.scnu.edu.cn; 杨泽斌(2001—),男,广东广州人,华南师范大学物理与电信工程学院2019级本科生, E-mail: 20192321098@m.scnu.edu.cn

#通信作者: 刘朝辉(1987—),男,山东莱州人,华南师范大学物理与电信工程学院实验师,博士,研究方向为信息技术在物理教学中的应用和虚拟仪器技术。





$$T = \frac{I_o}{I_{in}} \quad (4)$$

而吸光度  $A$  是指光线通过溶液或物质前的入射光强与光线通过溶液或物质后的透射光强的比值  $\frac{I_{in}}{I_o}$  以 10 为底的对数, 即:

$$A = -\lg T = \lg \frac{I_{in}}{I_o} \quad (5)$$

将参比溶液的光谱图上各个波长的光强作为相应波长的入射光强  $I_{in}$ , 样品溶液的光谱图上对应波长的光强为透射光强  $I_o$ , 代入 (5) 式计算即可得出各个波长的吸光度, 以波长  $\lambda$  为横轴, 吸光度  $A$  为纵轴, 便可得到溶液的吸收光谱。

由朗伯-比尔定律:

$$A = Kbc \quad (6)$$

其中:

$K$ : 摩尔吸光系数

$b$ : 吸收层厚度

$c$ : 吸光物质浓度

可知, 吸光度  $A$  和溶液浓度  $c$  是成正比的关系。建立以溶液浓度  $c$  为横轴, 吸光度  $A$  为纵轴的工作曲线, 通过测得待测溶液的吸收光谱的吸收度  $A$ , 便可根据曲线测量出溶液的浓度<sup>[5]</sup>。

## 2 实验装置

实验装置主要由双光束光路和图像采集处理系统构成, 如图 3 所示。

### 2.1 双光束光路

双光束光路由全光谱 LED 聚光灯、狭缝、凸透镜、分光镜、比色皿和全反镜组成。光束经过分光镜分光后, 一束光经过样品溶液, 一束光经过参比溶液。将透过参比溶液后的光强作为入射光强  $I_{in}$ ; 透过样品溶液后的光强作为透射光强  $I_o$ 。由于比色皿材质、尺寸相同, 且两束光线的光程相同, 因此可以抵消一部分杂散光、噪声和因光源波动而对仪器稳定性产生的影响<sup>[6]</sup>。

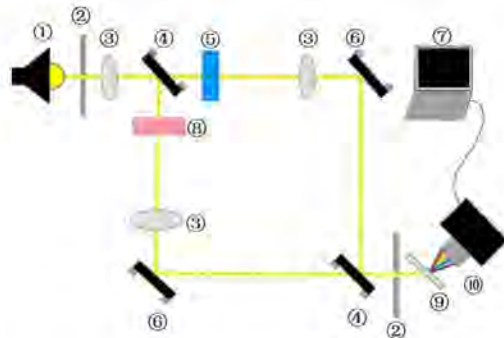


图 3 实验光路图

- |             |            |
|-------------|------------|
| ①: LED 全光谱灯 | ②: 狭缝      |
| ③: 凸透镜      | ④: 分光镜     |
| ⑤: 参比溶液     | ⑥: 全反镜     |
| ⑦: 计算机      | ⑧: 样品溶液    |
| ⑨: 透射光栅     | ⑩: USB 摄像头 |

### 2.2 图像采集处理系统

简易光谱仪和浓度测量程序共同构成图像采集处理系统。简易光谱仪主要由衍射光栅 (1200 线) 以及带镜头的 USB 摄像头组成。光束经过透射光栅时, 光栅会把不同波长的光衍射到不同的方向, 并由摄像头的透镜把不同方向的光汇聚在摄像头感光芯片的不同位置, 从而得出光谱图。

浓度测量程序的流程图如图 4 所示:

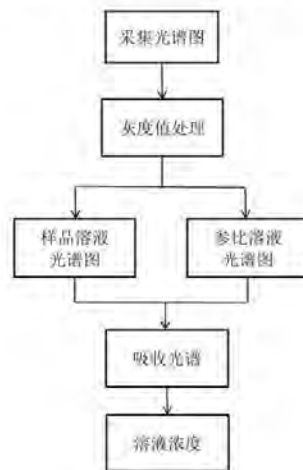


图 4 测量程序流程图

由摄像头对光谱线进行采集, 将光谱分析区域中像素点的 RGB 值转化为灰度值<sup>[7]</sup> 得出灰度值与像素点关系图, 并利用高压示

#基金项目: 国家自然科学基金 (61975058)

#作者简介: 洪玲儿 (1996—), 女, 广东潮汕人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321127@m.scnu.edu.cn; 杨泽斌 (2001—), 男, 广东广州人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321098@m.scnu.edu.cn

#通信作者: 刘朝辉 (1987—), 男, 山东莱州人, 华南师范大学物理与电信工程学院实验师, 博士, 研究方向为信息技术在物理教学中的应用和虚拟仪器技术。



灯中已知波长单色光对其校准得到标准光谱图<sup>[4]</sup>，将样品溶液和参比溶液的光谱图对比后便可显示出溶液的吸收光谱。之后根据工作曲线分析处理即可得到溶液的浓度值。

本实验采用图像采集和虚拟仪器相结合的技术，USB 摄像头高灵敏度的检测使由透射光栅衍射出来的光谱能够被直观、清晰地观察；通过自主设计的程序高效处理光谱，可将样品溶液的吸收光谱清晰地呈现出来。装置一经汞灯定标，便可测量样品溶液吸收光谱，使得对未知溶液浓度的检测更高效、精准。

### 3 实验结果

#### 3.1 光谱仪的定标

本实验首先利用高压汞灯对自制简易光谱仪进行定标。由摄像头对光谱图进行采集，如图 5 为摄像头采集的光谱图：

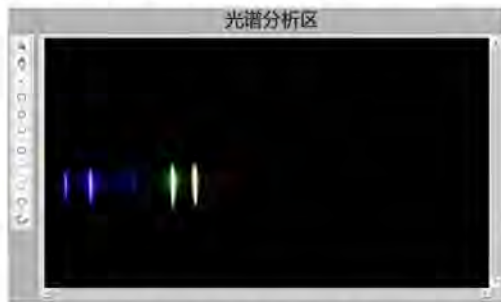


图 5 摄像头采集的光谱图

将汞灯作为光源，利用 5 个特征峰对应的波长 404.66nm、435.84nm、506.31nm、546.07nm 和 576.96nm 对简易光谱仪进行定标。经过摄像头采集后获得如图 6 所示汞灯的灰度值-像素关系图：

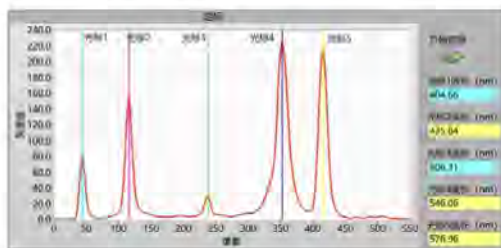


图 6 灰度值-像素关系图

在图像上选中汞灯的 5 个特征峰并输入

各峰对应的波长值，点击“定标”即可完成对光谱仪的定标。由于各波长的衍射角较小，可近似认为像素  $x$  和波长之间的关系为线性关系<sup>[9]</sup>，如图 7 所示为定标后波长  $\lambda$ -像素  $x$  关系图：

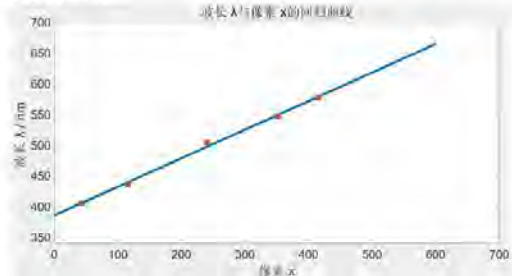


图 7 波长  $\lambda$ -像素  $x$  关系图

利用最小二乘法拟合求得：

$$\lambda = 0.46475 \cdot x + 386.97$$

其线性相关系数为 0.9971，线性程度高，与理论相符合。

#### 3.2 测量不同浓度下高锰酸钾的吸收光谱

以 LED 全光谱灯作为光源，用去离子水作溶剂，配制 15 mg/L~60 mg/L，梯度为 5 mg/L 的高锰酸钾溶液。如图 8 所示为不同浓度下的高锰酸钾溶液所对应的吸收光谱：

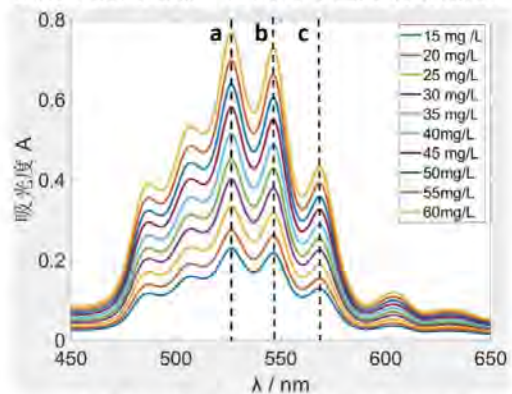


图 8 不同浓度下高锰酸钾溶液的吸收光谱

其中较高的吸收峰 a、b、c 所对应的波长分别为 526.6nm、546.5nm、568.5nm。将这三个波长作为分析波长，分别测量出各浓度下对应的吸光度值，所测数据如表 1 所示：

表 1 各吸收峰在不同浓度下吸光度测量数据

| c (mg/L) | 吸光度 A (吸收峰 a) | 吸光度 A (吸收峰 b) | 吸光度 A (吸收峰 c) |
|----------|---------------|---------------|---------------|
| 15       | 0.2186        | 0.2069        | 0.1279        |

#基金项目：国家自然科学基金（61975058）

#作者简介：洪玲儿（1996—），女，广东潮汕人，华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生，E-mail: 20192321127@m.scnu.edu.cn；杨泽斌（2001—），男，广东广州人，华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生，E-mail: 20192321098@m.scnu.edu.cn

#通信作者：刘朝辉（1987—），男，山东莱州人，华南师范大学物理与电信工程学院实验师，博士，研究方向为信息技术在物理教学中的应用和虚拟仪器技术。





|    |        |        |        |
|----|--------|--------|--------|
| 20 | 0.2731 | 0.2591 | 0.1529 |
| 25 | 0.3337 | 0.3166 | 0.1868 |
| 30 | 0.3993 | 0.3789 | 0.2235 |
| 35 | 0.4611 | 0.4280 | 0.2525 |
| 40 | 0.5139 | 0.4877 | 0.2877 |
| 45 | 0.5792 | 0.5496 | 0.3242 |
| 50 | 0.6367 | 0.6041 | 0.3565 |
| 55 | 0.6979 | 0.6622 | 0.3907 |
| 60 | 0.7671 | 0.7279 | 0.4295 |

利用以上所得数据分别拟合出各吸收峰的吸光度 A-浓度 c 曲线如图 9 所示:

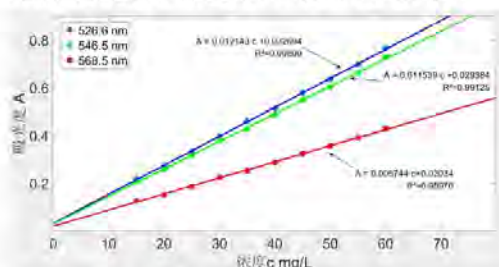


图 9 各吸收峰的吸光度 A-浓度 c 曲线

由图 9 易知,三条拟合曲线的线性程度良好,其中 526.6nm 的波长所对应的拟合曲线线性程度最高,其拟合方程为:

$$A = 0.012143 \cdot c + 0.032694$$

相关系数  $R^2 = 0.99899$ , 因此选择该曲线作为工作曲线,526.6nm 作为定量分析波长值。

### 3.3 测量高锰酸钾溶液的浓度

如图 10 为虚拟仪器测量界面,在界面中输入定量分析波长值后点击“测量浓度”的按钮,便可得到待测溶液的实时吸收光谱和浓度值。

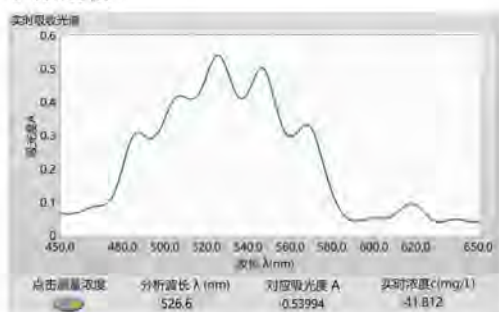


图 10 虚拟仪器测量界面

在相同条件下多次测量 42 mg/L 的高锰酸钾溶液浓度,所得数据如表 2 所示:

#基金项目:国家自然科学基金(61975058)

#作者简介:洪玲儿(1996—),女,广东潮汕人,华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321127@m.scnu.edu.cn; 杨泽斌(2001—),男,广东广州人,华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321098@m.scnu.edu.cn

#通信作者:刘朝辉(1987—),男,山东莱州人,华南师范大学物理与电信工程学院实验师,博士,研究方向为信息技术在物理教学中的应用和虚拟仪器技术。

表 2

| 次数 | 对应吸光度 A | c (mg/L) | 相对百分误差 (%) |
|----|---------|----------|------------|
| 1  | 0.5353  | 41.391   | 1.45       |
| 2  | 0.5320  | 41.118   | 2.10       |
| 3  | 0.5285  | 40.832   | 2.78       |
| 4  | 0.5382  | 41.628   | 0.886      |
| 5  | 0.5350  | 42.258   | 1.52       |
| 6  | 0.5300  | 41.854   | 2.49       |

由表 2 中数据计算得到高锰酸钾溶液浓度的相对百分误差均在 3%以内,说明本装置的稳定性好,测量相对误差小,能够在浓度线性范围内较准确地测量出待测溶液浓度。

## 4 结束语

本实验利用双光束光路和简易光栅光谱仪搭建出测量溶液浓度的装置。双光束光路减小了吸收光谱的抖动,从而有效提高了测量系统的稳定性;将简易光栅光谱仪和虚拟仪器测量技术相结合实现了浓度的测量。由此装置可一键获取待测溶液的吸收光谱和浓度。利用该装置对高锰酸钾溶液浓度进行测量,所得结果相对误差在 1%以内,不确定度为 0.313 mg/L,表明本实验装置具有测量精度较高,重复性好等优点。

## 参考文献

- [1] 廖昱博, 赖昭胜, 聂泰, 等. 阿贝折射仪测量溶液浓度研究[J]. 赣南师范学院学报, 2012, 33 (03): 28-30.
- [2] 裴世鑫, 崔芬萍, 华亚南, 等. 基于旋光效应的溶液浓度测量系统设计与实现[J]. 实验科学与技术, 2017, 15 (05): 15-19.
- [3] 潘玉凯, 邱白晶, 殷磊. 透射率法实时检测农药浓度的实验研究[J]. 农机化研究, 2013, 35 (03): 171-173+179.
- [4] 姚启钧. 光学教程(第六版)[M]. 北京: 高等教育出版社, 2019: 89-93.
- [5] 徐宝荣, 吕波. 分析化学[M]. 北京: 中国农业出版社, 2009: 209.
- [6] 孙德藩, 刘鹏. 基于光纤光谱仪的溶液浓度





- 
- 测量系统[J]. 大学物理实验, 2019, 32(03): 82-85.
- [7] 赵恒. 一种改进型双光束分光光度计的设计 An Improved Design of Spectrophotometer with Double Beam[Z], 2011.
- [8] 王军, 唐运海, 陈宝华, 等. 教学用简易光谱仪的研制及其实验项目的开发[J]. 物理教师, 2018, 39(08): 56-59.
- [9] 吴抒阳, 王军, 徐康怡, 等. 自制简易光谱仪测量护眼灯显色指数[J]. 大学物理实验, 2021, 34(04): 62-65.

#基金项目: 国家自然科学基金(61975058)

#作者简介: 洪玲儿(1996—), 女, 广东潮汕人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321127@m.scnu.edu.cn; 杨泽斌(2001—), 男, 广东广州人, 华南师范大学物理与电信工程学院 2019 级本科生, E-mail: 20192321098@m.scnu.edu.cn

#通信作者: 刘朝晖(1987—), 男, 山东莱州人, 华南师范大学物理与电信工程学院实验师, 博士, 研究方向为信息技术在物理教学中的应用和虚拟仪器技术。

