

气泡散射型微型光谱仪的设计与仿真研究

杨 涛¹ 许 超¹ 周馨慧¹ 李兴鳌¹ 韦 玮¹ 黄 维^{1,2*} 秦亦强³ 朱永元³

¹南京邮电大学材料科学与工程学院江苏省有机电子与信息显示重点实验室, 江苏 南京 210023
²南京工业大学先进材料研究院, 江苏 南京 210009
³南京大学固体微结构物理国家重点实验室, 江苏 南京 210093

摘要 为克服传统光谱仪普遍存在的体积较大、分辨率不高、光谱测量波段窄、对振动敏感、价格昂贵等不足。根据光散射原理,提出了一种由不同大小气泡构成散射介质的新型光谱仪,并对光谱复原过程进行仿真研究。光谱复原时,待测光首先照射到基底表面的气泡涂层,由于不同波长的光照射在不同大小气泡后在各散射角有不同的散射光强分布,因此置于气泡后方的像素元阵列可以测量到不同的散射光强。所得数据可代入到一个线性方程组,采用 Tikhonov 正则化方法解此方程组即可得到复原后的光谱图形。仿真结果表明:所得的复原光谱图形与待测光的入射光谱图形基本吻合;光谱仪的光谱测量范围至少覆盖 300~1100 nm 的波段;光谱测量的波长分辨率接近皮米量级。

关键词 光谱学; 微型光谱仪; 气泡; 光谱复原

中图分类号 TN744 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/CJL201441.s115004

Design and Simulation of Bubble Scattering Micro-Spectrometer

Yang Tao¹ Xu Chao¹ Zhou Xinhui¹ Li Xing'ao¹ Wei Wei¹ Huang Wei^{1,2}
Qin Yiqiang³ Zhu Yongyuan³

¹Jiangsu Key Laboratory of Organic Electronics and Information Displays, School of Materials Science and Engineering, Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing, Jiangsu 210023, China
²Institute of Advanced Materials, Nanjing University of Technology, Nanjing, Jiangsu 210009, China
³National Key Laboratory of Solid State Microstructures, Nanjing University, Nanjing, Jiangsu 210093, China

Abstract Traditional spectrometers commonly suffer disadvantages of bulky size, low resolution, narrow spectral range, vibration sensibility and high price. In order to overcome the limitations of traditional devices, a novel micro-spectrometer based on optical scattering theory is proposed and demonstrated by using finite difference time domain (FDTD) simulations. The design contains a series of bubbles with different sizes, which are used to scatter the incident beams. As lights with different wavelengths have different scattering intensity angular distributions, the pixels after the bubbles can obtain different data which can be substituted into a linear system. The reconstructed spectrum can be obtained by solving the linear system with the Tikhonov regularization method. Simulation results show that the reconstructed spectrum and the incident spectrum are basically coincident. The spectrometer can at least realize a very wide measurement range of 300~1100 nm. Furthermore, the spectrometer can be anticipated to reconstruct the input spectrum with minimum resolutions at picometer order.

Key words spectroscopy; micro-spectrometer; bubble; spectral reconstruction

OCIS codes 120.4570; 230.3990; 300.6190

收稿日期: 2013-10-20; 收到修改稿日期: 2013-11-06

基金项目: 国家自然科学基金青年基金(61106116, 21001065)、国家自然科学基金面上项目(61377019, 51372119, 51172110)、国家 973 计划(2009CB930600)

作者简介: 杨 涛(1978-), 男, 副教授, 硕士生导师, 主要从事表面等离子体波技术、光谱测量技术、太赫兹波技术等方面的研究。E-mail: iamtyang@njupt.edu.cn

* 通信联系人。E-mail: wei-huang@njut.edu.cn

1 引 言

光谱仪是一种重要的光学分析仪器,它将光学方法与现代电子数据处理系统相结合,通过获取物质的光谱信号精确分析物质的结构、成分和含量,已在现代科学实验、生物、医学及医药、工农业生产、国防、天文观测等众多领域已得到了广泛的应用^[1-5]。

近年来由于环境监测、科技农业、军事分析以及工业流程监控等领域的现代化发展,要求光谱仪小型化、轻量化,在特殊场合(如航天遥感遥测、地质矿产勘探、星载分析检测等)还要求光谱仪牢固耐振。因此需要一种微型化、集成化、智能化、芯片化和系统工程化的光谱仪,具有分辨率高、测量频段宽、抗振动干扰能力强、性能价格比高,且能快速、实时、直观地获取光谱信号等特点。传统的光谱仪不仅分辨率不够高,测量频带不够宽,而且普遍存在体积大、价格昂贵、安装调试困难、使用条件苛刻等不足。如傅里叶变换光谱仪不仅体积较大,而且对振动敏感,其分辨率受制于动镜的移动范围^[6-8]。光栅衍射型光谱仪所用光栅体积虽然相对较小,但该种光谱仪分辨率不高,而且价格昂贵^[9-10]。伴随着微纳制造工艺和光电子技术的发展,目前也有不少微型光谱仪出现^[11-14],但这些光谱仪普遍存在分辨率不高、抗振动干扰能力差、制作成本高等不足。因此,对于光谱仪,要求其在微型化的同时能够降低成本,性能上能够达到较高的光谱分辨率,结构简单并且易于制作,而现有的技术很难实现。为此,本文提出了一种气泡散射型微型光谱仪。

2 器件结构和工作原理

2.1 器件结构

图 1 为设计的微型光谱仪的横截面示意图。该光谱仪沿光路入射方向依次为光学准直装置、气泡涂层、基底和阵列式探测芯片。光学准直装置包括两个共焦的透镜,以及设置于两个透镜的共同焦点处的小孔光阑。气泡涂层中包含有一系列大小不等的微纳结构气泡。基底为透明材料制成,可采用聚甲基丙烯酸甲酯(PMMA)等有机聚合物材料。阵列式探测芯片可采用电荷耦合器件(CCD)或互补金属氧化物半导体元件(CMOS)。

气泡涂层可由以下两种方法制备:1)将 PMMA 或者聚苯乙烯(PS)等聚合物溶于四氢呋喃或者丙酮等有机溶剂中,形成聚合物溶液,搅拌所述聚合物溶液使之产生气泡后,将聚合物溶液涂覆在基底表面,然后通过加热除去有机物溶剂,形成气泡涂层;

2)将惰性气体通入到 PMMA 或者 PS 等聚合物熔体中生成惰性气体气泡,并利用超声波将惰性气体气泡进行细化,待聚合物熔体中气泡含量和分布趋近于稳定后,将聚合物熔体涂覆在透明基底上,降温形成气泡涂层。

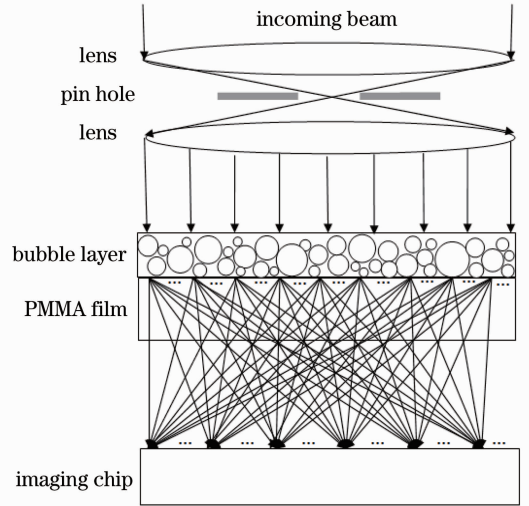


图 1 微型光谱仪横截面图

Fig. 1 Cross-section of the micro-spectrometer

2.2 工作原理

入射光经光学准直装置准直后,通过气泡涂层,最后照射在阵列式探测芯片的各像素元上。当经过准直后的待测光穿过气泡涂层中大小不等的气泡时,根据散射气泡的大小会发生不同类型的光散射:

1) 当气泡粒径远小于入射光波长时,此时发生的光散射是瑞利散射,与入射光传播方向成 θ 角的散射光强度

$$I_{\theta} \propto \frac{1}{\gamma^2 \lambda^4} I_i (1 + \cos^2 \theta), \quad (1)$$

式中 γ 为气泡到像素元的距离, λ 为光波长, I_i 为入射光强度。由(1)式可知,发生瑞利散射时某角度上的散射光强与波长的四次方成反比^[15]。

2) 当气泡粒径接近入射光线的波长时,瑞利散射不再适用,此时的散射规律遵从米氏散射。在与入射光传播方向成 θ 角方向上的散射光强分布

$$I_{\theta} = \frac{\lambda^2}{4\pi^2 \gamma^2} (i_1 \sin^2 \varphi + i_2 \cos^2 \varphi) \cdot I_i, \quad (2)$$

式中 φ 为入射光振动面与散射面的夹角,强度函数 i_1, i_2 为

$$i_1(\theta) = \left| \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2l+1}{l(l+1)} (a_l \pi_l + b_l \tau_l) \right|^2, \\ i_2(\theta) = \left| \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2l+1}{l(l+1)} (a_l \tau_l + b_l \pi_l) \right|^2, \quad (3)$$

式中 a_l, b_l 为米氏系数,是粒子相对周围介质的折射

率 m 及微粒无因次粒径参数 α ($\alpha = \pi d/\lambda$, d 为微粒粒径) 的函数, 可以用半整数阶贝塞尔函数和第二类汉克尔函数表示, π_l, τ_l 是与散射角有关的函数, 可以用 $\cos \theta$ 的勒让德函数和一阶缔合勒让德函数表示。综上所述, 在入射光与散射光成 θ 角方向上, 光强满足

$$I_\theta \propto 1/\lambda^a, \quad (4)$$

式中 $a < 4$, 具体取值取决于气泡尺寸。由(4)式可知, 散射光强随波长的变化规律是与波长的较低幂次方成反比^[16]。

由上述分析可知, 入射光在经过气泡涂层后, 部分光线偏离原始传播方向。各波长光能量的角分布不均, 最终这些光照射在 CCD 像素元上, 各个 CCD 像素元将采集到一系列大小不等的的数据。按照所用像素元的个数, 将像素元所能探测的频率范围均匀划分, 每一份的中心频率在入射光中的归一化功率作为未知数; 将阵列式探测芯片的不同位置处的像素元探测到的值作为增广矩阵; 事先测得探测阵列芯片不同位置处的各像素元对各频率分量的探测率, 并将该探测率作为系数矩阵; 通过正则化方法求解矩阵方程, 并将所得结果进行线性拟合、光谱定标就可以得到待测光的光谱。

具体的计算过程如下:

输入光谱划分如图 2 所示, 根据探测阵列芯片有效像素元的数量将探测阵列芯片所能探测的入射光频率范围均匀划分成 n 份, 每一份的中心频率为 f_1, f_2, \dots, f_n , 频宽为 Δf , 入射光中每段频率的光功率近似为图中每个小矩形的面积。需要测的入射光光谱可以由图中各个频率所对应的光功率幅度进行线性拟合得到, 所以光谱复原的目标转化为求图中各个小矩形的高度 $P(f_1), P(f_2), \dots, P(f_n)$ 。

根据微积分原理, 入射光的总功率可以近似为

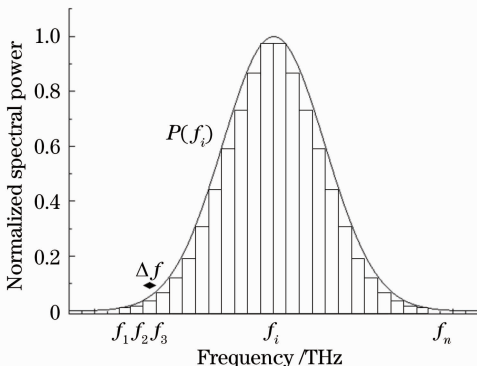


图 2 输入光谱划分

Fig. 2 Division of the input spectrum

图中曲线下面各个小矩形面积的总和, 即各频率分量功率的迭加。如果用数学公式表示, 可表示为

$$P_0 = \sum_{k=1}^n P(f_k) \Delta f. \quad (5)$$

假设入射光经过气泡涂层后被第 i 个像素元所探测, 该像素元上得到的光功率大小可表示为

$$P_i = \sum_{k=1}^n C_{ik} P(f_k) \Delta f, \quad (6)$$

式中 $C_{i1}, C_{i2}, \dots, C_{in}$ 分别为频率为 f_1, f_2, \dots, f_n 的光经过气泡涂层后被第 i 个像素元所探测的探测率。因此, 探测阵列芯片 CCD 的 n 个像素元就可以测得一系列功率, 这些功率可以利用线性方程组表示为

$$\begin{aligned} P_1 &= C_{11} P(f_1) \Delta f + C_{12} P(f_2) \Delta f + \dots + C_{1n} P(f_n) \Delta f, \\ P_2 &= C_{21} P(f_1) \Delta f + C_{22} P(f_2) \Delta f + \dots + C_{2n} P(f_n) \Delta f, \\ &\vdots \\ P_n &= C_{n1} P(f_1) \Delta f + C_{n2} P(f_2) \Delta f + \dots + C_{nn} P(f_n) \Delta f, \end{aligned} \quad (7)$$

式中 C_{ij} ($i, j = 1, 2, \dots, n$) 是频率为 f_j 的光被第 i 个像素元所探测的探测率, 即中心频率为 f_j 的光被第 i 个像素元探测到的功率与入射到气泡涂层之前该频率光功率的比值。当器件做好后, 这个比值是固定值, 可以事先测量得到。由此, 可以用如(7)式所示的线性方程组表示出探测阵列芯片 CCD 各像素元所测得的光功率。如果用矩阵形式表示, 设每一份的中心频率在入射光中的归一化功率作为未知数矩阵 \mathbf{x} , 探测率组成系数矩阵 \mathbf{C} , 而各探测阵列芯片像素元测得数据组成增广矩阵 \mathbf{y} , (7)式可表示为

$$\begin{bmatrix} P_1 \\ P_2 \\ \vdots \\ P_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1n} \\ C_{21} & C_{22} & \dots & C_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{n1} & C_{n2} & \dots & C_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P(f_1) \Delta f \\ P(f_2) \Delta f \\ \vdots \\ P(f_n) \Delta f \end{bmatrix}. \quad (8)$$

求解(8)式得 \mathbf{x} , 并进一步计算得

$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} / \Delta f = \begin{bmatrix} P(f_1) \\ P(f_2) \\ \vdots \\ P(f_n) \end{bmatrix}. \quad (9)$$

此时, 就可以求得入射光谱中各频率分量所对应功率 $P(f_i)$ 的大小, 将 $P(f_1), P(f_2), \dots, P(f_n)$ 进行线性拟合, 就得到了入射光谱。在求解方程组过程中, 探测阵列芯片 CCD 的各像素元所采集到的功率和各频率光对气泡涂层的探测率都是测量值, 由

于测量误差等原因,该方程组实为病态方程组,再加上方程组中方程的数量较多,用普通方法很难求解,而采用 Tikhonov 正则化的方法求解该线性方程组可以消除明显失真而且求解速度快^[17-18],该方程组求解后即可得入射光各频率对应的归一化光谱功率,最后进行光谱辐射定标就得到了入射光的复原光谱。

3 仿真结果与分析

3.1 可见光范围内的光谱复原

根据图 1 所示的结构,采用光学仿真软件设计出了微纳米气泡涂层光谱仪,并利用用时域有限差分法(FDTD)进行仿真实验。光源采用 TE 模平面波,边界条件采用完美匹配层(PML)。利用 Tikhonov 正则化方法编写的 Matlab 程序对仿真实验所采集到的数据进行计算,求解方程组完成一次光谱复原的时间通常为 1~2 s。

图 3 为入射光谱与复原光谱的比较,其中实线代表入射光谱,带圆点实线代表复原光谱。由图 3

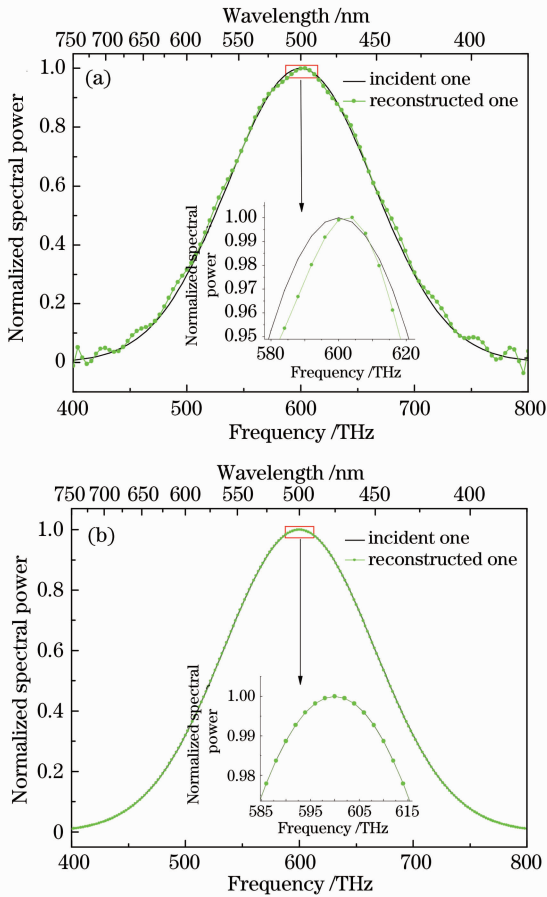


图 3 不同划分份数的光谱复原。

(a) $n=100$; (b) $n=200$

Fig. 3 Spectral reconstructions with different n .

(a) $n=100$; (b) $n=200$

可知,在复原入射光谱的频率 400~800 THz 范围内,实线和带圆点实线几乎完全吻合,这说明复原的光谱没有明显失真;但从放大的图中还是可以看出复原光谱与原入射光谱存在微小差异。图 3(a)为探测阵列芯片中像素元的数量 n 取 100 时的光谱复原结果,其频率分辨率为 4 THz,最高波长分辨率为 1.88 nm。图 3(b)为探测阵列芯片中像素元的数量 n 取 200 时的光谱复原结果,光谱复原的频率范围与图 3(a)相同,但由于像素元数量增多,频率分辨率达到了 2 THz,最高波长分辨率为 0.939 nm。比较图 3(a)与(b)中入射光谱和复原光谱吻合情况可知,当像素元的数量增多,即分辨率更高时,复原光谱与入射光谱误差更小。如今 CCD 的像素元可以达到百万以上,所以整个光谱测量装置可以达到很高的分辨率。

3.2 高分辨率的光谱复原

既然该光谱仪有可能达到很高的分辨率,那么最高分辨率的量级值得研究,以下为高分辨率光谱复原的仿真研究。为了减少计算量,在一个较窄的光谱范围内进行光谱复原。图 4 为高分辨率光谱复原仿真结果,图 4 中光谱复原的频率范围为 595~605 THz,划分份数 n 取 200。图 4 中显示该光谱复原的最大频率分辨率达到 50 GHz,最高波长分辨率为 20.8 pm。当然,这里的频宽有 10 THz,划分份数 n 达到 200,如果再缩小光谱复原的频率范围和增加划分份数 n ,还可以进一步提高分辨率。这表明,该光谱仪的波长分辨率可以接近皮米量级,可以满足很多实际应用需求。

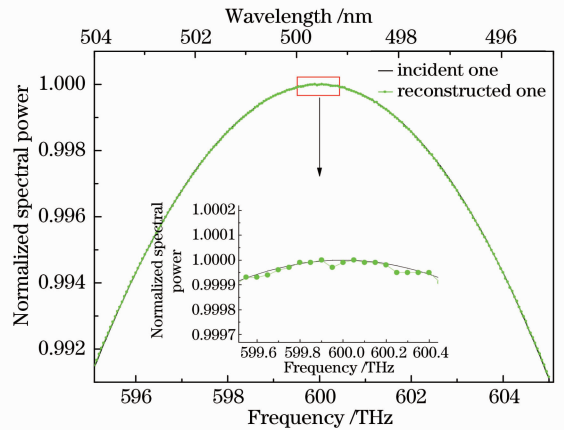


图 4 高分辨率光谱复原

Fig. 4 Spectral reconstruction with high spectral resolution

3.3 宽谱范围内的光谱复原

该微型光谱仪还可以在较宽的光谱范围内实现光谱复原。实际器件的光谱探测范围主要由所用探

测器的光谱响应范围决定,而目前普通 CCD 可以探测从紫外到近红外波段的光,其波长范围为 300~1100 nm,相应的频率范围为 273~1000 THz。这段波长范围内的仿真实验的结果如图 5 所示。可见,光谱复原效果良好,从而证明了该光谱仪可以在较宽的波长或频率范围内进行光谱复原。

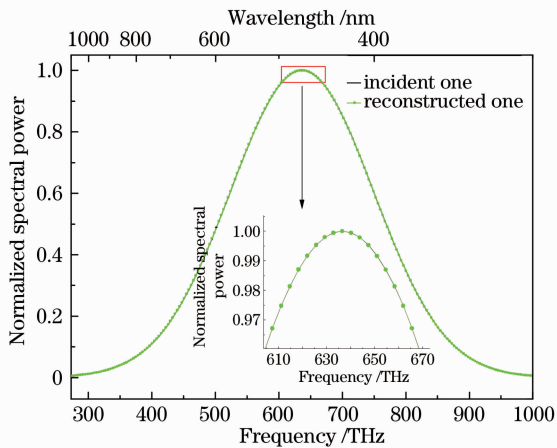


图 5 从紫外到近红外波段的复原光谱

Fig. 5 Reconstructed spectrum from ultraviolet to infrared

4 结 论

介绍了气泡散射型微型光谱仪的系统结构、制作方法和工作原理,并进行了仿真研究。该光谱仪的原理为待测光照射到基底表面的气泡涂层后,由于不同波长的光在不同的散射角有不同的散射光强分布,通过 CCD 或 CMOS 中的像素元阵列可以测量到不同的散射光功率,所得数据可代入到一个线性方程组,由 Tikhonov 正则化方法解此方程组可复原光谱。设计的气泡散射型微型光谱仪具有体积小、成本低、分辨率高、光谱测量频段宽、可在复杂的环境中进行实时测量等优点。仿真结果表明,该光谱仪的光谱测量的波长范围至少覆盖从 300~1100 nm 的波段,光谱测量的波长分辨率接近皮米量级,在航天遥感遥测、地质矿藏勘探、环境监测、生物细胞检测等众多领域会有广阔的应用前景。

参 考 文 献

1 Z Chen, L Chen, H Ma, *et al.*. Aptamer biosensor for label-free impedance spectroscopy detection of potassium ion based on DNA G-quadruplex conformation [J]. *Biosensors & Bioelectronics*, 2013, 48: 108-112.

2 D Andueza, C Agabriel, I Constant, *et al.*. Using visible or near infrared spectroscopy (NIRS) on cheese to authenticate cow feeding regimes[J]. *Food Chemistry*, 2013, 141(1): 209-214.

3 M Van der Meijde, N M Knox, S L Cundill, *et al.*. Detection of hydrocarbons in clay soils: a laboratory experiment using spectroscopy in the mid- and thermal infrared[J]. *Int J Applied Earth Observation and Geoinformation*, 2013, 23: 384-388.

4 R Boggia, M C Casolino, V Hysenaj, *et al.*. A screening method based on UV-visible spectroscopy and multivariate analysis to assess addition of filler juices and water to pomegranate juices[J]. *Food Chemistry*, 2013, 140(4): 735-741.

5 A Barducci, F Castagnoli, G Castellini, *et al.*. Developing a new hyperspectral imaging interferometer for earth observation[J]. *Opt Eng*, 2012, 51(11): 111706.

6 C Ataman, H Urey. Compact Fourier transform spectrometers using FR4 platform[J]. *Sensors and Actuators*, 2009, 151(1): 9-16.

7 C Ataman, H Urey, A Wolter. A Fourier transform spectrometer using resonant vertical comb actuators [J]. *J Micromechanics and Microengineering*, 2006, 16(12): 2517-2523.

8 K Dietmar, S Helmut, R B Sameer, *et al.*. Silicon-based micro-Fourier spectrometer [J]. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2005, 52(3): 419-425.

9 J C Yang, H Jung, G J Lee, *et al.*. Micro-electro-mechanical-systems-based infrared spectrometer composed of multi-slit grating and bolometer array [J]. *Jpn J Appl Phys*, 2008, 47(8): 6943-6948.

10 S H Kong, D D L Wijngaards, R F Wolffenbuttel. Infrared micro-spectrometer based on a diffraction grating[J]. *Sensors and Actuators*, 2001, 92(1-3): 88-95.

11 J Chen, Y Zhu, B Liu, *et al.*. The principle and analysis of micro-Fourier transform based on spectrometer MEMS micro-mirror[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, 32(11): 3151-3154.

12 B Luo, Z Wen, H Liu. A novel micro mirror spectrometer and test experiment[J]. *Key Engineering Materials*, 2012, 503: 266-271.

13 X Mo, Z Wen, Z Zhang, *et al.*. The optimizing design and experiment for a MOEMS micro-mirror spectrometer [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, 31(12): 3412-3416.

14 Z Li, M J Deen, Q Fang, *et al.*. Design of a flat field concave-grating-based micro-Raman for spectrometer environmental applications[J]. *Appl Opt*, 2012, 51(28): 6855-6863.

15 李锦瑜,曾道刚. 瑞利散射公式讨论[J]. *大学化学*, 1992, 7(1): 58-60.

16 Sun Xin, Zhang Guizhong, Jia Guangming, *et al.*. Study of laser sizers based on Mie scattering theory [J]. *Modern Scientific Instruments*, 2004, (5): 40-42.

孙 昕,张贵忠,贾光明,等. 基于米氏散射理论的激光粒度仪的介绍[J]. *现代科学仪器*, 2004, (5): 40-42.

17 L Wu. A parameter choice method for Tikhonov regularization [J]. *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 2003, 16: 107-128.

18 Z Wang, J Liu. New model function methods for determining regularization parameters in linear inverse problems[J]. *Applied Numerical Mathematics*, 2009, 9(10): 2489-2506.

栏目编辑: 史 敏