

凹面光栅拉曼光谱仪的光学设计

金星焕 陈 和 董家宁 陈思颖 郭 磐 张寅超

北京理工大学光电学院光电成像技术与系统教育部重点实验室, 北京 100081

摘要 在传统 Czerny-Turner 光谱仪结构的基础上, 设计了基于凹面光栅和球面聚焦反射镜结构的便携式拉曼光谱仪。在子午面内利用凹面光栅像差理论得到了消初级彗差公式, 并结合几何关系, 得出了像面大小和系统参数的关系式。以 532 nm 的激光作为激发光源, 物方数值孔径为 0.12, 探测器选用 1024 pixel×64 pixel 的电荷耦合器件 (CCD), 其中像元合并使用变成了一个线阵 CCD。利用 Zemax 软件对设计结果进行模拟和分析, 得到了一个在 537~615 nm 波长范围内均能实现 0.3 nm 光谱分辨率的紧凑结构。在 Zemax 软件非序列模式下对像面进行分析, 整个波段都在 CCD 接收范围内, 证明了该结构的可行性。

关键词 光谱学; 拉曼光谱仪; 凹面光栅; 便携性; Zemax

中图分类号 O436

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201535.0930004

Optical Design of Concave Grating Raman Spectrometer

Jin Xinghuan Chen He Dong Jianing Chen Siying Guo Pan Zhang Yinchao

*Key Laboratory of Photoelectronic Imaging Technology and System, Ministry of Education,
School of Optoelectronics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China*

Abstract Portable Raman spectrometer is designed with concave grating and spherical mirror on basis of classic Czerny-Turner spectrometer in this paper. The equation of primary coma-free is concluded according to aberration theory of concave grating. Combined with geometrical relationship in tangential plane, the relation of size of image plane and parameter of this system is concluded. Laser of 532 nm is selected as excitation light source with object numerical aperture (NA) of 0.12. Charge-coupled device (CCD) with 1024 pixel×64 pixel is selected as detector, in which 64 pixels is combined to make a linear array CCD. This design is simulated and analyzed by Zemax, and spectral resolution of 0.3 nm is realized at the band from 537 nm to 615 nm with a portable institutions. Image plane is analyzed in Zemax non-sequential mode. The whole band is in the receiving range of CCD, which proves the feasibility of this structure.

Key words spectroscopy; Raman spectrometer; concave grating; portability; Zemax

OCIS codes 300.6450; 170.5660; 300.6190

1 引言

拉曼光谱分析法是分析物质成分常用的方法,其原理是对与入射光频率不同的拉曼散射光谱进行分析得到分子振动、转动的信息,从而判断物质分子组成。激光作为一种很重要的光源,自20世纪60年代出现以来促进了拉曼光谱仪的迅速发展。国外对拉曼光谱仪的研制起步比较早,其中主要的公司有美国的尼高力(Nicolet)公司等^[1],这些公司具有很高的市场占有率。国内专业进行光谱仪研制生产的机构相对较少^[2],浙江大学和中科院都自主研制出了拉曼光谱仪并在科研中得到了应用。目前,多数拉曼光谱仪采用的都是基于平面光栅的 Czerny-Turner 结构^[3-4],此种结构一般需要两个反射镜配合平面光栅进行成像,光线经过多次反射能量损耗比较高,在拉曼能量本来就很低的情况下会导致信噪比更低。随着光栅制造技术^[5]的发展,出

收稿日期: 2015-04-02; 收到修改稿日期: 2015-05-28

基金项目: 国家自然科学基金(61178072)

作者简介: 金星焕(1991—),男,硕士研究生,主要从事光谱仪设计和装调方面的研究。E-mail: xinghuan@bit.edu.cn

导师简介: 陈 和(1982—),男,博士,讲师,主要从事激光雷达遥感探测方面的研究。E-mail: shinianshao@gmail.com

现了结构更为简单的平场光栅光谱仪^[6-8],只应用一块全息凹面光栅而不需要准直和聚焦结构即可完成,提高了光能量的传输效率。但此结构设计比较复杂,工作所需要的横向长度较大,近似等于凹面光栅的曲率半径 R ,不利于结构的便携性,且在数值孔径一定时,结构长度越大所需的凹面光栅面积越大。

针对拉曼光谱仪对分辨率、光能量传输效率和便携性的要求,本文设计了一种应用凹面光栅的拉曼光谱仪光学结构。该结构由一块凹面光栅和一个聚焦球面反射镜组成,聚焦反射镜的作用是使光栅衍射出射的光线聚焦在接收面上同时缩短整个结构的横向长度到凹面光栅曲率半径的一半,在实现高分辨率的同时实现了结构的小型化。

2 设计方法

2.1 初始结构

凹面光栅兼有成像性能而具特色,但也因受其成像性能限制一般不能获得平直的聚焦曲线^[9],所以需要配合球面反射镜使像聚焦在像面上。图1所示为凹面光栅光谱仪的光学结构示意图。拉曼散射光经入射狭缝入射到凹面光栅,发生衍射并准直出射。聚焦镜对衍射光进行汇聚,由探测器接收。 α 为入射光在凹面光栅的入射角即凹面光栅的倾角, β 为衍射光的衍射角, θ 为聚焦镜的倾角。凹面光栅和聚焦镜的曲率半径分别为 R_1 和 R_2 。

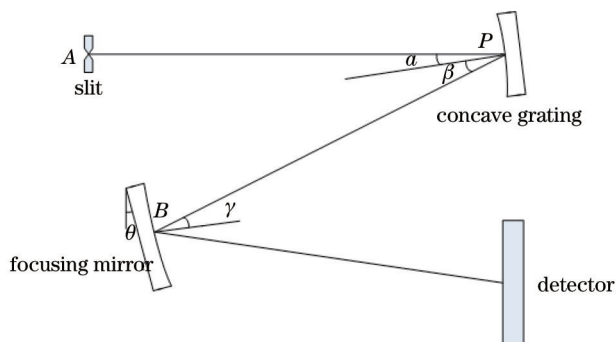


图1 拉曼光谱仪光学结构示意图

Fig.1 Optical configuration of Raman spectrometer

选择532 nm激光器作为光源,一般物质的拉曼光谱分布在 $200\sim 2500\text{ cm}^{-1}$ 范围内,实验中采用的波长范围为537.7~614.5 nm。拉曼光谱信息一般要求分辨率为 10 cm^{-1} 左右,即在全波段达到0.3 nm的分辨率。选择 $1024\text{ pixel}\times 64\text{ pixel}$ 的线阵电荷耦合器件(CCD)作为光谱接收器件,每个像元大小为 $7\text{ }\mu\text{m}\times 7\text{ }\mu\text{m}$,CCD接收面长度为7.168 mm。按照每4个像素分辨0.3 nm计算,恰好可分辨上述波长范围。选择物方数值孔径(NA)为0.12,光栅常数为 $1/900\text{ mm}$,狭缝宽度为 $50\text{ }\mu\text{m}$ 。综上所述,本结构的初始参数如表1所示。

表1 拉曼光谱仪的初始结构参数

Table 1 Initial structure parameters of Raman spectrometer

Parameters	Values
Laser wavelength /nm	532
Wavelength range /nm	537.7~614.5
Spectral resolution /nm	0.3
NA of object space	0.12
Grating constant /mm	1/900
Slit / μm	50
CCD pixels	1024×64
Size of pixel /($\mu\text{m}\times\mu\text{m}$)	7×7

2.2 结构设计

为了合理利用线阵CCD并使CCD能完整地接收光谱信号,应该使线阵CCD的尺寸和像面大小相匹配^[3],如图2所示。图中 β_1 和 β_2 分别为两边边缘波长经凹面光栅后的衍射角,与聚焦镜分别交于 A' 和 B' , γ_1 和 γ_2 分别为两边边缘波长在聚焦镜上的反射光与水平线的夹角,最后分别汇聚在线阵CCD的两个边缘A点和B点。 d_1

为入射狭缝到凹面光栅的水平距离, d_2 为凹面光栅到聚焦镜的水平距离, d_3 为聚焦镜到探测器的水平距离。

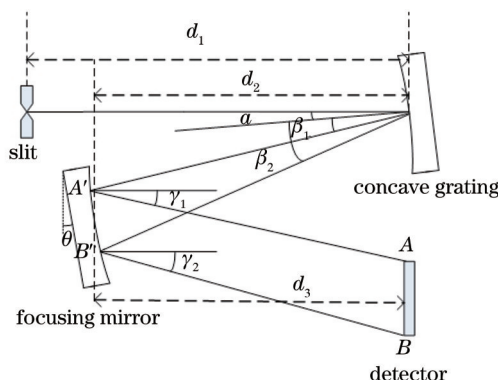


图2 拉曼光谱仪的像面分析图

Fig.2 Analysis of the imaging plane in Raman spectrometer

确定参数时除了利用几何条件外,还需要考虑系统的像差特点,利用系统可控制的参数尽量消除特征像差,为结构设计和优化提供依据和方向。如图1所示,凹面光栅的光程函数可以表示为

$$F = \langle AP \rangle + \langle PB \rangle + nm\lambda, \quad (1)$$

其中 n 是从光栅中心数起 P 所在位置的刻线数, m 是光谱级数。根据凹面光栅的功能,可以把它分为分光和准直两部分,作为平面光栅分光时不产生像差,所以在设计时只考虑作为反射镜准直时所产生的像差。Namioka 对这一函数进行了展开^[10],若把球面反射镜看做是光栅狭缝区域无穷大的一种形式^[11],可以得到球面镜的光程函数:

$$\begin{aligned} F = & r + r' - \omega(\sin \alpha + \sin \beta) + \frac{\omega^2}{2} \sum_{n=1}^{\infty} w^n \left[\left(\frac{\sin \alpha}{r} \right)^n \left(\frac{\cos^2 \alpha}{r} - \frac{\cos \alpha}{R} \right) + \left(\frac{\sin \beta}{r'} \right)^n \left(\frac{\cos^2 \beta}{r'} - \frac{\cos \beta}{R} \right) \right] + \\ & \frac{l^2}{2} \left(\frac{1}{r} - \frac{\cos \alpha}{R} + \frac{1}{r'} - \frac{\cos \beta}{R} \right) + \frac{l^2 w}{2} \left[\frac{\sin \alpha}{r} \left(\frac{1}{r} - \frac{\cos \alpha}{R} \right) + \frac{\sin \beta}{r'} \left(\frac{1}{r'} - \frac{\cos \beta}{R} \right) \right] - \\ & \frac{\omega^2}{8} \left\{ \frac{1}{r} \left(\frac{\cos^2 \alpha}{r} - \frac{\cos \alpha}{R} \right) \left[\frac{w^2}{2} \left(\frac{\cos^2 \alpha}{r} - \frac{\cos \alpha}{R} \right) + l^2 \left(\frac{1}{r} - \frac{\cos \alpha}{R} \right) \right] \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2) \left(\frac{w \sin \alpha}{r} \right)^n + \right. \\ & \left. \frac{1}{r'} \left(\frac{\cos^2 \beta}{r'} - \frac{\cos \beta}{R} \right) \left[\frac{w^2}{2} \left(\frac{\cos^2 \beta}{r'} - \frac{\cos \beta}{R} \right) + l^2 \left(\frac{1}{r'} - \frac{\cos \beta}{R} \right) \right] \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2) \left(\frac{w \sin \beta}{r'} \right)^n \right\} + \\ & \frac{l^2 w^2}{2} \left[\frac{\sin^2 \alpha}{r^2} \left(\frac{1}{r} - \frac{\cos \alpha}{R} \right) + \frac{\sin^2 \beta}{r'^2} \left(\frac{1}{r'} - \frac{\cos \beta}{R} \right) \right] + \frac{(w^2 + l^2)}{8R^2} \left(\frac{1}{r} - \frac{\cos \alpha}{R} + \frac{1}{r'} - \frac{\cos \beta}{R} \right) - \\ & \frac{l^2}{8} \left\{ \frac{1}{r} \left[l \left(\frac{1}{r} - \frac{\cos \alpha}{R} \right) \right]^2 + \frac{1}{r'} \left[l \left(\frac{1}{r'} - \frac{\cos \beta}{R} \right) \right]^2 \right\} + o\left(\frac{w^5}{R^4} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

其中, R 是球面反射镜的半径, r 和 r' 分别是物距和像距, α 和 β 分别是球面反射镜的入射角和反射角, w 和 l 分别是光束口径子午方向和弧矢方向的微元,二者均是可以积分的变量。

在离轴光学系统中,球面镜的彗差会使谱线轮廓单边化,降低光谱仪的分辨率,还会使谱线的极大值发生偏移,甚至产生假线,所以在设计中主要考虑消除子午方向的彗差。考虑对应像距 $r' = \infty$ 时子午面内的物距为

$$r = \frac{R \cos \alpha}{2}, \quad (3)$$

将(3)式代入到(2)式中并进行偏微分,整理后得到子午方向上的表达式:

$$\frac{\partial F}{\partial w} = \frac{\sin \alpha}{R^2} [3w^2 + l^2(1 + 2 \tan^2 \alpha)] - \left(\frac{w}{R} \right)^2 \cos \alpha - \frac{wl^2}{R^3 \cos \alpha} + \left(\frac{\sin^2 \alpha}{R^3 \cos \alpha} \right) [9w^3 + 4wl^2(1 + 2 \tan^2 \alpha)], \quad (4)$$

针对本结构对(4)式进行积分,可以得到系统在子午方向上的总像差:

$$\Delta F_h = \int_0^{\frac{w}{2}} \frac{\partial F_1}{\partial w_h} dw_h + \int_0^{-\frac{w}{2}} \frac{\partial F_2}{\partial w_h} dw_h = \Delta F_{w_1} - \Delta F_{w_2}, \quad (5)$$

其中 W_1 和 W_2 分别为凹面光栅和反射镜的高度,根据几何结构,二者的关系为

$$W_1 = W_2 \frac{\cos \beta_c}{\cos \gamma}, \quad (6)$$

其中 β_c 为中心波长 λ_c 的衍射角。

子午方向的像差包括彗差和球差,结合(4)~(6)式得到彗差的表达式:

$$\Delta F_h^{\text{coma}} = \sin \gamma \left(\frac{W_2}{2 \cos \gamma} \right)^3 \left(\frac{\cos^3 \alpha}{R_1^2} - \frac{\cos^3 \beta_c}{R_2^2} \right) + \frac{f^2 w^2}{2} \tan \gamma (1 + \tan^2 \gamma) \left[\left(\frac{\cos \alpha}{R_1^2} \right)^3 + \left(\frac{\cos \beta_c}{R_2^2} \right)^3 \right], \quad (7)$$

其中 R_1 和 R_2 分别为凹面光栅和反射镜的曲率半径。

在忽略高级像差时,由(7)式可以得到消初级彗差的条件:

$$\frac{\cos^3 \alpha}{R_1^2} = \frac{\cos^3 \beta_c}{R_2^2}. \quad (8)$$

结合图1和图2对各参数几何关系进行确定。拉曼光从狭缝进入,离轴入射到凹面光栅。为使同波长的衍射光平行出射,狭缝应该位于凹面的焦点上。离轴入射时焦距会在子午面和弧矢面分别发生改变^[12],其中子午方向上的焦距会变小,而弧矢方向上的焦距会变大,由于使用线阵 CCD 接收,这里主要考虑子午方向的成像。经上述分析,得到

$$d_1 = \frac{R_1 \cos \alpha}{2}. \quad (9)$$

根据光栅方程可分别计算出两个衍射角 β_1 和 β_2 :

$$d(\sin \alpha + \sin \beta_1) = m \lambda_1, \quad (10)$$

$$d(\sin \alpha + \sin \beta_2) = m \lambda_2, \quad (11)$$

其中衍射级次 m 为 1。为了使光谱成像在一个平面上^[13], d_2 应满足

$$d_2 = \left[1 - \left(\frac{\sqrt{3}}{3} \right) \right] R_2, \quad (12)$$

根据几何关系可以得到

$$A'B' = d_2 [\tan(\alpha + \beta_2) - \tan(\alpha + \beta_1)], \quad (13)$$

两条衍射光线经聚焦镜反射后水平夹角分别改变了 2θ , 可知

$$\gamma_1 = \alpha + \beta_1 - 2\theta, \quad (14)$$

$$\gamma_2 = \alpha + \beta_2 - 2\theta, \quad (15)$$

根据几何关系,像面大小可以表示为

$$AB = A'B' - d_3 (\tan \gamma_2 - \tan \gamma_1), \quad (16)$$

即 CCD 的接收面长度。根据所给出的初始结构和(8)~(16)式可以计算出系统的整体结构参数。

2.3 设计结果

表2为根据上述过程计算得出的设计参数,导入光学软件 Zemax 中进行模拟并优化。优化后 d_1 增大为 100 mm,由光栅衍射的光具有一定的会聚角,对应 d_3 减小为 70 mm,其他参数基本不变,整个结构的最大长度为 100 mm,满足便携性的要求。图3为优化后的两边缘波长及中心波长处相邻波长的点列图,即不同波长在光谱仪像面所成的像,可以看到不同位置相邻波长都被明显区分开,边缘波长处的分辨率达到 0.3 nm 的要求,而中心波长处的分辨率可达到 0.2 nm。图3中每一格的宽度为 40 μm ,不同波长像的宽度均小于 400 μm ,小于线阵 CCD 的感应范围,可以被完全接收不造成能量的损失。图4为用几何线性响应函数表示的不同波长的子午方向的能量分布,线响应函数是像密度分布的横切面表示,从图中可以看出,不同波长处相邻的波长能量分布都能被明显区分开。图5为中心波长处的调制传递函数(MTF)图,MTF表示输入与输出像的对比度之比,MTF值越大系统成像质量越好,由于是非成像光谱仪,这里主要考虑子午面内的传递效率。在整个波段内 MTF 曲线近似相同,所以这里只给出中心波长的曲线图。如图5所示,在空间频率为 10 $\text{lp} \cdot \text{mm}^{-1}$ 时,光学传递函数均大于 0.9,表明了在这一方向上光谱仪系统的成像质量比较好。

表2 光谱仪结构的设计参数

Table 2 Design parameter of spectrometer structure

Parameters	Values
R_1/mm	160
R_2/mm	240
d_1/mm	74.4
d_2/mm	101
d_3/mm	95
$\alpha /(^{\circ})$	21.5
$\beta_c /(^{\circ})$	8.68

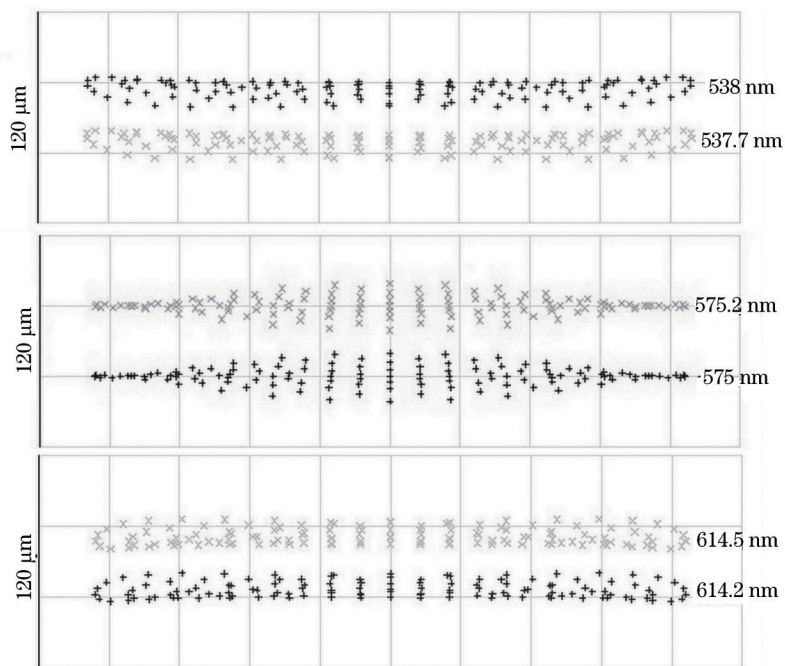


图3 不同波长处的点列图

Fig.3 Spot diagram at different wavelengths

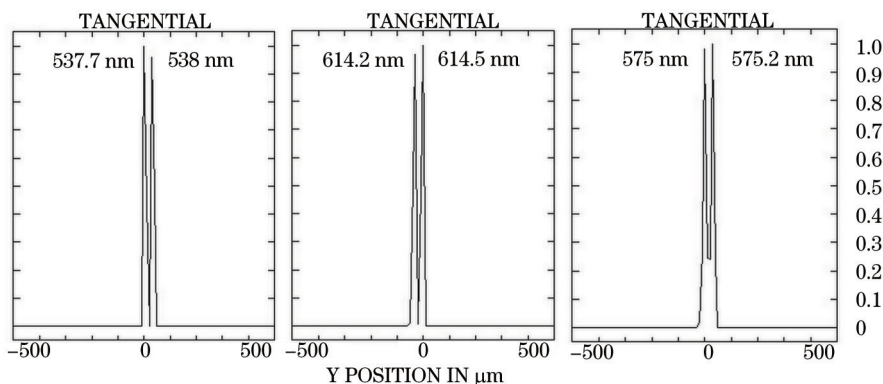


图4 不同波长处子午方向的能量分布

Fig.4 Energy distribution at different wavelengths in tangential plane

以上结果是在 Zemax 软件的序列模式下得到的,在这一模式中只能通过改变点光源的高度来模拟狭缝宽度,无法实现光源的连续性,同时也无法确定整个波段都能成像在 CCD 探测器的接收范围内。为了进一步论证结构的实际可行性,在非序列模式下对本结构进行仿真。首先根据狭缝宽度 $20\ \mu\text{m}$ 以及物方 NA 数确定光源的尺寸及光线的发散角,再根据线阵 CCD 的参数设置对应探测器的 XY 方向的像素数和宽度,选择分析的光线数为 100000 条。按照上述设置对光线进行追迹,在这种模式下得到的结果与实际情况更相近。

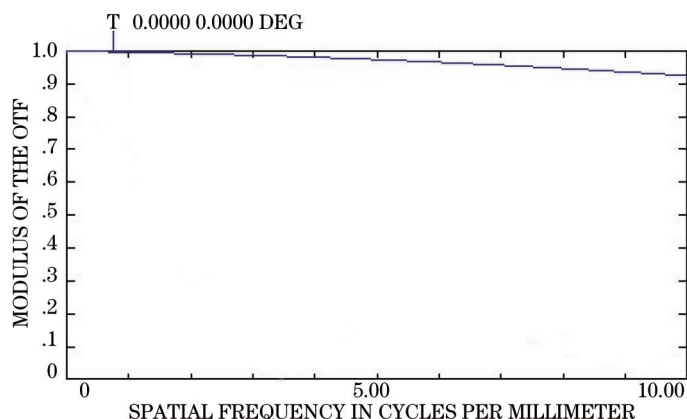


图 5 575 nm 处的 MTF 曲线图

Fig.5 MTF graph at 575 nm

图 6 为仿真得到的探测器像面图,探测器的接收面长度宽度分别为 7.2 mm 和 0.45 mm。可以看出整个波段都能成像在探测器上,并且两边缘光线所成的像分别接近探测器的两端,充分利用了线阵 CCD 的尺寸;不同波段相邻波长的光线也能被区分开,说明了相邻波长的光成像在不同的像素上。这一结果进一步论证了本结构的实际可行性。

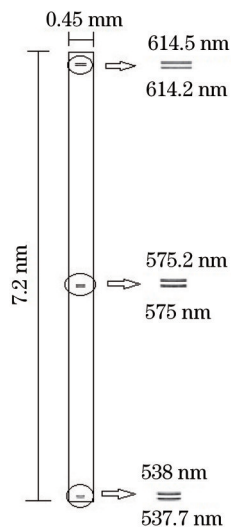


图 6 探测器上的像面图

Fig.6 Image plane of detector

3 结 论

应用凹面光栅的拉曼光谱仪结合了传统 Czerny-Turner 结构和平场光栅光谱仪结构的特点,利用像元和波长,线阵 CCD 接收面长度和像面大小的对应关系提出了结构设计方法。以 532 nm 波长的激发光为例,在子午平面内,利用球面反射镜的成像特点以及几何关系得到了结构参数。在光学设计软件 Zemax 中进行了模拟和优化,并对设计结果进行了分析。分析结果表明最终结构可以同时满足分辨率和小型化性的要求,是一种可行的便携式拉曼光谱仪光学结构。

参 考 文 献

- 1 Chen Yulun. Development of Raman Spectrometer and Its Spectroscopy Pretreatment[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2006.
陈玉伦. 拉曼光谱仪的研制及预处理方法研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2006
- 2 Ge Haijun. Design of Optical Fiber Raman Spectroscope[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2009.
葛海军. 光纤拉曼光谱仪设计[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2009.

- 3 An Yan, Liu Ying, Sun Qiang. *et al.*. Design and development of optical system for portable Raman spectrometer[J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(3): 0330001.
安 岩, 刘 英, 孙 强, 等. 便携式拉曼光谱仪的光学系统设计及研制[J]. *光学学报*, 2013, 33(3): 0330001.
- 4 Yu Lei, Lin Guanyu, Yu Xiangyang. Optical system of far ultraviolet imaging spectrometer for space-based upper atmosphere remote sensing[J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(1): 0122001.
于 磊, 林冠宇, 于向阳. 空间高层大气遥感远紫外成像光谱仪的光学系统[J]. *光学学报*, 2013, 33(1): 0122001.
- 5 Kong Peng. The Research on Design Methods and Key Fabricating Technologies of Flat-Field Holographic Concave Grating[D]. Changchun: Changchun Institute of Optics, Fire Mechanics and Physics, 2011.
孔 鹏. 平场全息凹面光栅设计方法及制作关键技术研究[D]. 长春: 长春光学精密机械与物理研究所, 2011
- 6 Xue Qingsheng, Wang Shurong. Optimum design of imaging spectrometer based on toroid uniform-line-spaced (TULS) spectrometer[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2013, 33(5): 1433-1437.
薛庆生, 王淑荣. 基于超环面均匀线距光栅的成像光谱仪优化设计研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2013, 33(5): 1433-1437.
- 7 Kong Peng, Bayanheshig, Li Wenhao, *et al.*. Optimization of double-grating flat-field holographic concave grating spectrograph[J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, 31(2): 0205001.
孔 鹏, 巴音贺希格, 李文昊, 等. 双光栅平场全息凹面光栅光谱仪的优化设计[J]. *光学学报*, 2011, 31(2): 0205001.
- 8 Li Z, Jamal Deen M, Fang Q, *et al.*. Design of a flat field concave-grating-based micro-Raman spectrometer for environmental applications [J]. *Appl Opt*, 2012, 51(28): 6855-6863.
- 9 Liu Hu, Shen Weimin. The scanning flat holographic concave gratings[J]. *Acta Optica Sinica*, 1991, 11(6): 545-552.
刘 虎, 沈为民. 扫描平场全息凹面光栅[J]. *光学学报*, 1991, 11(6): 545-552.
- 10 Namioka T. Theory of the concave grating. III. Seya-Namiokamonochromator[J]. *JOSA*, 1959, 49(10): 951-959.
- 11 An Yan. Research on Technology of Opto-Mechanical System of Handheld Raman Spectrometer[D]. Changchun: Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, 2014.
安 岩. 手持式拉曼光谱仪的光机系统技术研究[D]. 长春: 长春光学精密机械与物理研究所, 2014.
- 12 Dane R. Austin, Tobias Witting, Ian A. Walmsley. Broadband astigmatism-free Czerny-Turner imaging spectrometer using spherical mirrors[J]. *Appl Opt*, 2009, 48(19): 3846-3853.
- 13 Joseph Reader. Optimizing Czerny-Turner Spectrographs: a comparison between analytic theory and ray tracing[J]. *JOSA*, 1969, 59(9): 1189-1196.

栏目编辑: 韩 峰