

基于 TracePro 软件的荧光信号光收集光路的设计与仿真

王岩, 陈平*, 龚诚, 孙德川, 刘伟伟, 林列

南开大学电子信息与光学工程学院现代光学研究所, 天津 300350

摘要 摇头丸、冰毒和海洛因等常见的毒品在特定波长激发下都可以发射荧光,但这些分子结构中的荧光基团数量较少或量子效率很低,当毒品的浓度较低时,荧光信号很弱,很难被检测到,从而限制了荧光光谱技术在毒检领域的应用。为了提高荧光光谱技术的灵敏度,从荧光信号的发散特性考虑,利用 TracePro 软件设计用于荧光信号收集的光路,这与传统的采用高功率激光器增加激发光能量和选用高灵敏探测器的解决方案不同;在光路中,选用抛物面型反射镜和非涅耳透镜对不同发散角的荧光光束进行准直,采用平凸透镜和双凸透镜对光束进行缩束,采用特定尺寸的微透镜阵列对光束进行聚焦。对设计的光路进行仿真的结果表明:光路对荧光信号光的收集效率约为 21.08%,比传统荧光收集光路的效率高 6 倍。所设计的光路可为改进本课题组已经开发的便携式高灵敏毒品荧光检测系统提供技术参考。

关键词 光学设计; 荧光信号光收集效率; TracePro 软件; 荧光信号光收集光路; 毒品; 建模与仿真

中图分类号 O433

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201838.1117001

Design and Simulation of Optical Path for Collecting Fluorescence Signal Based on TracePro Software

Wang Yan, Chen Ping*, Gong Cheng, Sun Dechuan, Liu Weiwei, Lin Lie

Institute of Modern Optics, College of Electronic Information and Optical Engineering,

Nankai University, Tianjin 300350, China

Abstract The narcotics such as ecstasy, methamphetamine, and heroin normally can emit fluorescence under excitation with certain wavelengths. Because of the small number of fluorescent groups in the molecular structure or the low quantum efficiency, the fluorescence intensity of narcotics is relatively weak and the narcotics with low concentration are difficult to be detected, which severely hampers the detection of the narcotics. In this paper, for improving the detection sensitivity of the fluorescence spectrum technology, the divergent characteristics of fluorescence signal are considered to increase the collection efficiency, which is different from traditional methods such as choosing high power laser to increase the excitation light energy and selecting high sensitive detector. In the optical path, parabolic mirror and Fresnel lens are used to collimate the fluorescence light, while the plano convex lens and double convex lens are used to contract the fluorescence beam, and the beam is focused by a certain size micro-lens array. Simulation results show that the fluorescence collection efficiency of the optical path is enhanced up to about 21.08%, which is six times more than that of the traditional collection method. The research work provides a technical reference for improving our portable and high sensitive narcotics fluorescence detection system.

Key words optical design; fluorescence signal collection efficiency; TracePro software; fluorescence signal collection optical path; narcotics; modeling and simulation

OCIS codes 170.6280; 300.6280; 300.2530

1 引 言

近年来,毒品泛滥呈现日益蔓延的趋势,毒品不仅会损害人类身心健康,还会危害国家公共安全。毒品的检测分析是物证提取中至关重要的技术手

段,可有效地固定证据,打击毒品犯罪,因此已成为公共安全领域研究的热点^[1]。目前,广泛应用的毒品检测技术主要包括常规理化检测法^[2-3]、免疫分析法^[4-5]、色谱法^[4,6]和光谱技术^[7-8]。其中,光谱(主要是荧光光谱和拉曼光谱)技术是通过测量样本的特

收稿日期: 2018-04-13; 修回日期: 2018-06-07; 录用日期: 2018-06-12

基金项目: 天津市科技支撑重点项目(15ZCZDZX00250,08ZCKFGX09400)、发光学及应用国家重点实验室开放基金

* E-mail: chping@nankai.edu.cn

征光谱来研究其结构或测定其化学成分的方法,具有不与样品直接接触,无需对样品进行前处理,所需样品量少,检测过程简单、快速等优势。鉴于此,许多科研人员将光谱技术应用于毒品的检测^[9-10]。拉曼光谱是指纹光谱,具有响应快、准确率高的优势,但是样本的拉曼散射信号极其微弱,而且拉曼光谱检测系统以激光器为光源,仪器体积较大,造价较高,不利于实现检测设备的小型化。

对于相同的物质,其荧光信号强度比拉曼散射信号高 3 个数量级以上,而且荧光光谱具有检测速度快、检测设备体积较小、价格低廉等优点。荧光光谱技术目前已被广泛应用于蛋白质检测^[11-12]、细胞检测^[13-14]和药物分析^[15-16]等领域。不同的荧光物质具有不同的分子结构和能量分布,因而具有不同波长的荧光发射峰,这种特性决定了荧光光谱具有选择性和可鉴别性。常见的毒品,如摇头丸、冰毒和海洛因等都属于芳香族化合物,它们的分子结构中都含有荧光基团,在特定波长的激发下会发出荧光^[17],这说明采用荧光光谱技术检测毒品是可行的。但是,许多毒品分子结构中荧光基团的数量较少,或者量子效率较低,当毒品浓度较低时,荧光信号很弱,难以检测到毒品,从而限制了荧光光谱技术

在毒检领域的应用。

针对此问题,目前常见的解决方案是采用大功率激光器,以提高激发光的强度,同时选用高灵敏度的探测器,以提高检测灵敏度。但是,这会导致仪器的体积增大,成本大幅度提高,不利于检测设备的小型化。荧光是一种光致发光现象,样本产生的荧光信号是向四面八方发散的,在传统的荧光检测系统中,只有少部分信号光经透镜准直和聚焦后被探测器检测到,其余的信号光均未被有效利用,从而导致荧光信号的收集效率很低。为此,本课题组利用 TracePro 软件设计了一种用于收集荧光信号光的光路,并对其收集效率进行仿真。

2 分子荧光的 TracePro 模型

TracePro 软件在光学分析、照明系统、光度分析及辐射度分析中的应用很广泛^[18-19],具有强大的光学测试功能,常用于追踪光线的行进踪迹。以摇头丸(最强吸收在 285 nm,对应的荧光发射波长为 345 nm)为例,基于 TracePro 软件建立荧光发光模型,以模拟荧光信号光的收集光路。对于荧光物质模型的建立,优先考虑小尺寸模型。图 1(a)所示为荧光物质的模型和光线追迹,其中:半径为 0.05 mm

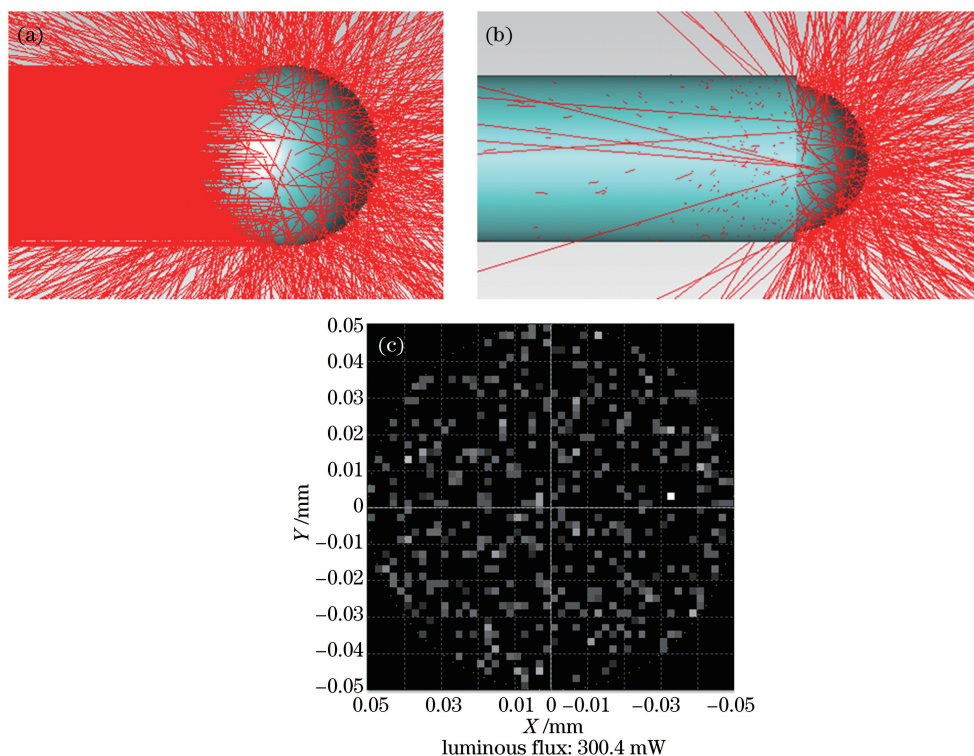


图 1 (a) 荧光物质的模型和光线追迹; (b) 加入遮光筒后荧光物质的光线追迹; (c) 荧光功率分布

Fig. 1 (a) Model and ray tracing of fluorescent material; (b) ray tracing of fluorescent material after adding shading cylinder; (c) distribution of fluorescence power

的蓝色球体为荧光物质,将荧光物质的浓度设为 10^{-4} mol/L;左侧平行光线表示激发光(波长为285 nm的平行光)。为了简化计算与分析,将光源的光斑尺寸设为半径为0.05 mm的圆形光斑,将荧光物质表面的发光类型设为垂直发光场,总光线条数设为3000,激发光功率设定为1.5 W。进行荧光光线追迹后得到发散的荧光信号光线,如图1(a)所示。

考虑到实际的实验情况,将荧光物质接近光源的一侧放置在暗室中,这样可以在较大程度上消除背景噪声和杂散光等因素的干扰。插入半径为0.051 mm、厚度为0.001 mm的遮光圆筒^[20](将其内表面设定为完美吸收),进行荧光光线追迹,结果如图1(b)所示,其中左侧为遮光圆筒,右侧球体为放入遮光圆筒的荧光物质。图1(c)所示为加入遮光圆筒后荧光功率的分布。由图1(c)可知,在1.5 W的激发光照射下,荧光物质发出的荧光功率约为300.4 mW。

3 荧光信号光收集光路的设计与仿真

荧光信号光的发射方向具有很大的随机性。有效地收集发散的光线,对提高荧光收集效率至关重要。随机发散的光线一般可分为大发散角光线和小发散角光线。对于大发散角光线,可以考虑用反射的方法改变其方向性。当光源放置于抛物面型反射镜的焦点上时,经过反射镜反射的光线可以达到良

好的平行准直效果。通过对比市售抛物面型反射镜,并考虑到元件的几何尺寸,选取直径为100 mm、长度为32 mm、焦距为19 mm、中心孔直径为30 mm、厚度为0.5 mm的抛物面型反射镜,定义其内表面的特性为完美反射。图2(a)所示为抛物面型反射镜和荧光物质模型,其中A为荧光物质,将其放置于抛物面型反射镜C的焦点处,B为遮光筒。光线追迹结果如图2(b)所示,可见,抛物面型反射镜将大发散角光线变为近似平行的光束,起到了良好的准直作用。

对于小发散角光线,考虑选用焦距小但几何尺寸相对较大的透镜。菲涅耳透镜是一种结构极其细微的光学透镜,其表面刻有许多同心圆形槽,每个凹槽都类似于一个独立的折射面,这些凹槽可以将入射的平行光会聚于同一个焦点。研究^[21-22]表明,相比于普通透镜,菲涅耳透镜的厚度更小,焦距相对较小,而且具有更好的准直效果,可以很好地满足要求。加入一个厚度为1 mm、外半径为35 mm、环距为0.2 mm、物距为10 mm、焦距为10 mm的菲涅耳透镜,并将其放置在荧光物质右侧10 mm处。为了方便建模,将其材料设置为BK7。模型如图3(a)所示,其中A为荧光物质,D为菲涅耳透镜。对上述光路进行光线追迹,结果如图3(b)所示,可见,菲涅耳透镜对小发散角光线具有良好的准直平行效果。

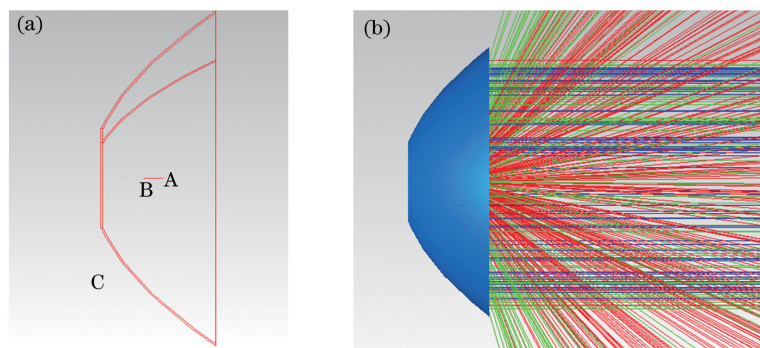


图2 (a)抛物面型反射镜和荧光物质模型;(b)抛物面型反射镜对大发散角光线的准直作用

Fig. 2 (a) Model of parabolic mirror and fluorescent material; (b) collimating effect of parabolic mirror on large divergence angle rays

将抛物面型反射镜与菲涅耳透镜同时加到整个光路中,验证其对随机发散的荧光信号光的准直效果。具体摆放位置与前文所述相同。光线追迹结果如图3(c)所示,可见,发散的荧光信号光经抛物面型反射镜和菲涅耳透镜共同准直后,变为近似平行的光束。

因经准直后的光线尺寸过大,故而考虑采用望

远系统对光线进行缩束。由于抛物面型反射镜的外半径为50 mm,同时考虑到市售透镜的参数不同,因此加入一个两面材料均为BK7的平凸透镜,其半孔径为50 mm,厚度为14.5 mm,第一面曲率半径为10000 mm,第二面曲率半径为-129.24 mm。考虑到探测器的尺寸,再加入一个曲率半径为24.19 mm、两面半孔径均为12.5 mm、厚度为

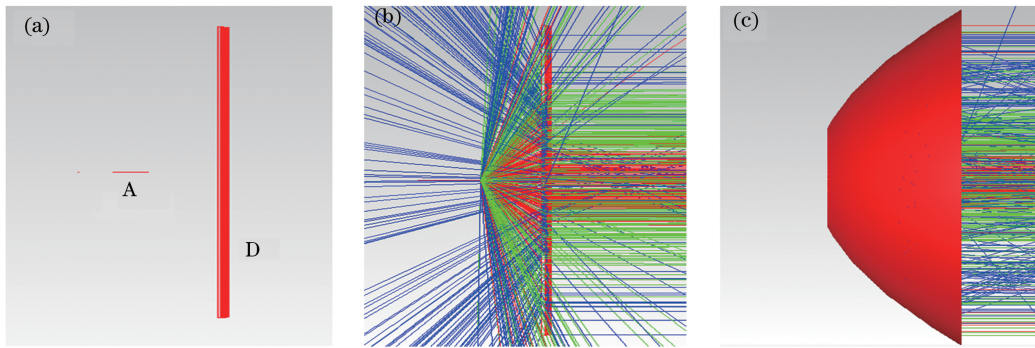


图 3 (a)菲涅耳透镜和荧光物质模型;(b)菲涅耳透镜对小发散角光线的准直作用;(c)菲涅耳透镜和抛物面型反射镜对光线的准直作用

Fig. 3 (a) Model of Fresnel lens and fluorescent material; (b) collimation effect of Fresnel lens on small divergence angle rays; (c) collimation effect of Fresnel lens and parabolic mirror on rays

8.96 mm、材料为 BK7 的双凸透镜。望远系统的模型如图 4(a)所示。将该望远系统放置在菲涅耳反射镜右侧 3 mm 处,其中平凸透镜与双凸透镜之间的距离为两者的焦距之和。对上述光学系统进行光线追迹,结果如图 4(b)所示,可见,望远系统可以很好地对光线进行缩束,经过望远系统缩束后的荧光信号光仍具有良好的准直性。

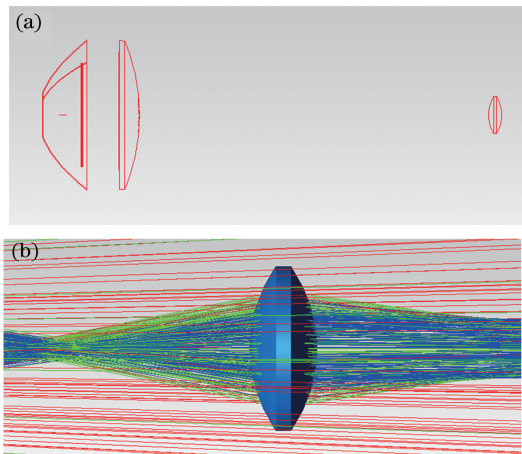


图 4 (a)望远系统的模型;(b)经过望远系统缩束后的光束
Fig. 4 (a) Model of telescopic system; (b) beam contracted by telescopic system

与普通的聚焦透镜相比,微透镜阵列可以实现均匀的光场分布和较好的聚焦效果,同时具有体积小、质量小、传输损耗小、便于集成化和阵列化等特点^[23-24]。加入一个尺寸为 10 mm × 10 mm × 0.9 mm 的长方体,在其 10 mm × 10 mm 的表面上,以 0.3 mm 作为间隔,设计规格为 11 × 11 的圆柱形(半径为 0.3 mm)孔洞阵列,然后再插入 121 个厚度为 1 mm、第一面曲率半径为 0.76 mm、第二面为曲率半径为 -0.76 mm、材料为 BK7 的双凸透镜。为了方便建模,透镜材料与曲率半径均已进行等效化

处理,透镜焦距约为 0.6 mm。这里重点考虑微透镜阵列的聚焦效果,因此将长方体的表面特性设为完美吸收。微透镜阵列模型如图 5(a)所示。光线追迹结果如图 5(b)所示。由图 5(b)可知,光线追迹产生了良好的聚焦效果。

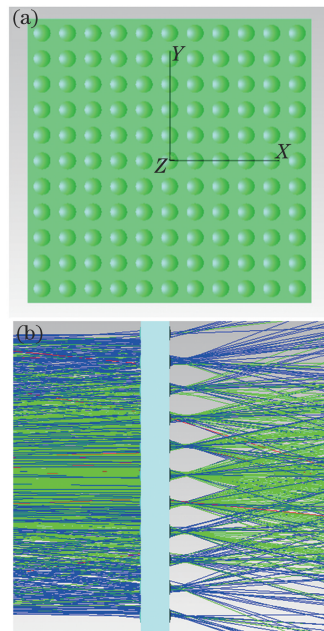


图 5 (a)微透镜阵列模型;(b)微透镜阵列的聚焦效果
Fig. 5 (a) Model of microlens array; (b) focus effect of microlens array

最后对设计的荧光信号光收集光路的效果进行仿真。在上述光路中的微透镜阵列后焦点附近插入观测平板,平板尺寸大小与微透镜阵列相同,光线追迹结果如图 6(a)所示。由图 6(a)可知,入射到此焦面上的荧光功率约为 63.2 mW,收集效率约为 21.08%。将上述光路中的所有光学元件去除,改为传统的透镜收集荧光,得到入射到焦面上的荧光功

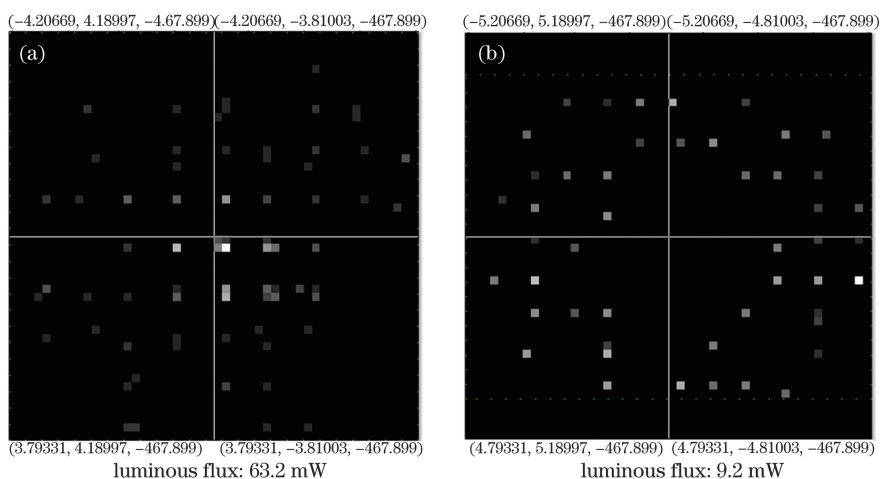


图 6 (a)微透镜阵列与(b)普通透镜聚焦后的荧光功率分布

Fig. 6 Distributions of fluorescence power focused by (a) microlens array and (b) ordinary lens

率约为 9.2 mW,收集效率约为 3.1%,如图 6(b)所示。结果表明,本研究设计的光路的荧光信号光收集效率远高于传统收集光路的收集效率。

4 结 论

本研究分析了毒品荧光检测中影响荧光信号光收集效率的因素。从荧光的发光特性考虑,利用 TracePro 软件设计了用于荧光信号光收集的光路,光路中选用抛物面型反射镜和非涅耳透镜对不同发散角的荧光光束进行准直,然后用平凸透镜和双凸透镜对光束进行缩束,最后用特定尺寸的微透镜阵列对光束进行聚焦。仿真结果表明,所设计光路对荧光信号光的收集效率约为 21.08%,比传统收集光路的收集效率高 6 倍。在后续工作中,本课题组将不断优化光路设计,定制光路中的元器件,并将其应用于实际的毒品荧光检测,从而为改进本课题组已经开发的便携式高灵敏毒品荧光检测系统提供技术参考。

参 考 文 献

- [1] Volkow N D, Chang L, Wang G J, *et al.* Loss of dopamine transporters in methamphetamine abusers recovers with protracted abstinence[J]. *Journal of Neuroscience*, 2001, 21(23): 9414-9418.
- [2] Morozov Y N, Fedorov V V, Shabatin V P, *et al.* Cryochemical modification of drugs: nanosized form III piroxicam and its physical and chemical properties [J]. *Moscow University Chemistry Bulletin*, 2016, 71(5/6): 287-294.
- [3] Elkashef M, Williams R C, Cochran E W. Physical and chemical characterization of rejuvenated reclaimed asphalt pavement (RAP) binders using rheology testing and pyrolysis gas chromatography-mass spectrometry[J]. *Materials and Structures*, 2018, 51(1): 12.
- [4] Boutboul A, Lenfant F, Giampaoli P, *et al.* Use of inverse gas chromatography to determine thermodynamic parameters of aroma-starch interactions [J]. *Journal of Chromatography A*, 2002, 969(1/2): 9-16.
- [5] Hall M P, Gegg C, Walker K, *et al.* Ligand-binding mass spectrometry to study biotransformation of fusion protein drugs and guide immunoassay development: strategic approach and application to peptibodies targeting the thrombopoietin receptor[J]. *The AAPS Journal*, 2010, 12(4): 576-585.
- [6] Sauvage F L, Saint-Marcoux F, Duretz B, *et al.* Screening of drugs and toxic compounds with liquid chromatography-linear ion trap tandem mass spectrometry[J]. *Clinical Chemistry*, 2006, 52(9): 1735-1742.
- [7] Feng S Y, Chen W W, Huang W, *et al.* Surface-enhanced Raman spectroscopy of morphine in silver colloid[J]. *Chinese Optics Letters*, 2009, 7(11): 1055-1057.
- [8] O'Connell M L, Ryder A G, Leger M N, *et al.* Qualitative analysis using Raman spectroscopy and chemometrics: a comprehensive model system for narcotics analysis[J]. *Applied Spectroscopy*, 2010, 64(10): 1109-1121.
- [9] Wang Y, Chen P, Sun L, *et al.* Detecting trace amounts of narcotics in serum by delayed luminescence[J]. *IEEE Photonics Journal*, 2016, 8(2): 1-8.

- [10] Ryder A G, O'Connor G M, Glynn T J. Identifications and quantitative measurements of narcotics in solid mixtures using near-IR Raman spectroscopy and multivariate analysis[J]. *Journal of Forensic Sciences*, 1999, 44(5): 1013-1019.
- [11] Zhang X T, Zhang L, Zhu W H, *et al.* Study on interaction between mitoglinide calcium and bovine serum albumin by spectroscopy [J]. *Acta Optica Sinica*, 2017, 37(11): 1130002.
张啸天, 张林, 朱卫华, 等. 米格列奈钙与牛血清白蛋白相互作用的光谱研究[J]. *光学学报*, 2017, 37(11): 1130002.
- [12] Yu B, Lan X F, Zhang L, *et al.* Spectroscopic study on interaction of famotidine with bovine serum albumin [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2018, 55(4): 043003.
俞波, 兰秀凤, 张林, 等. 法莫替丁与牛血清白蛋白相互作用的光谱研究[J]. *激光与光电子学进展*, 2018, 55(4): 043003.
- [13] Yao B, Feng X, Luo G A, *et al.* Flow cytometry and single cell fluorescence detection on a microfluidic device[J]. *Chemical Journal of Chinese Universities*, 2005, 26(1): 43-45.
姚波, 冯雪, 罗国安, 等. 微流控芯片系统流式细胞术及单细胞荧光检测[J]. *高等学校化学学报*, 2005, 26(1): 43-45.
- [14] Mayer G, Ahmed M S, Dolf A, *et al.* Fluorescence-activated cell sorting for aptamer SELEX with cell mixtures[J]. *Nature Protocols*, 2010, 5(12): 1993-2004.
- [15] Kawanabe S, Araki Y, Uchimura T, *et al.* Applying fluorescence lifetime imaging microscopy to evaluate the efficacy of anticancer drugs [J]. *Methods and Applications in Fluorescence*, 2015, 3(2): 025006.
- [16] Gaudet M, Remtulla N, Jackson S E, *et al.* Protein denaturation and protein: drugs interactions from intrinsic protein fluorescence measurements at the nanolitre scale [J]. *Protein Science*, 2010, 19(8): 1544-1554.
- [17] Xu B Y, Ye Y, Ruan R Y, *et al.* Determination of illegal drugs in urine using excitation-emission matrix fluorescence coupled with second-order calibration [J]. *Chemical Journal of Chinese Universities*, 2015, 36(9): 1667-1673.
徐布一, 叶懿, 阮若云, 等. 三维荧光光谱结合二阶校正算法用于尿液中常见毒品的检测[J]. *高等学校化学学报*, 2015, 36(9): 1667-1673.
- [18] Mei C, Zhou S Z, Zhang H J, *et al.* Method of first-order ghost-image analysis in imaging system based on code V and TracePro [J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(4): 0411003.
梅超, 周泗忠, 张恒金, 等. 基于 Code V 和 TracePro 的成像光学系统一阶鬼像分析方法[J]. *光学学报*, 2013, 33(4): 0411003.
- [19] Jing L, Wang Y, Zhao H, *et al.* Optical design and fabrication of palm/fingerprint uniform illumination system with a high-power near-infrared light-emitting diode[J]. *Applied Optics*, 2017, 56(17): 4961-4966.
- [20] Wang W F, Yang X X, Jiang K, *et al.* Stray light analysis of catadioptric infrared optical system with large field[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2013, 42(1): 138-142.
王文芳, 杨晓许, 姜凯, 等. 大视场红外折反光学系统杂散光分析[J]. *红外与激光工程*, 2013, 42(1): 138-142.
- [21] Ren H W, Fan Y H, Wu S T. Tunable Fresnel lens using nanoscale polymer-dispersed liquid crystals[J]. *Applied Physics Letters*, 2003, 83(8): 1515-1517.
- [22] Koshelev A, Calafiore G, Piña-Hernandez C, *et al.* High refractive index Fresnel lens on a fiber fabricated by nanoimprint lithography for immersion applications [J]. *Optics Letters*, 2016, 41(15): 3423-3426.
- [23] Yin Z Y, Wang Y F, Jia W W, *et al.* Performance analysis of beam integrator system based on microlens array[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2012, 39(7): 0702007.
殷智勇, 汪岳峰, 贾文武, 等. 基于微透镜阵列的光束积分系统的性能分析[J]. *中国激光*, 2012, 39(7): 0702007.
- [24] Chan E P, Crosby A J. Fabricating microlens arrays by surface wrinkling[J]. *Advanced Materials*, 2006, 18(24): 3238-3242.