

文章编号:1004-4213(2011)04-0591-5

小型快速扫描近红外光谱仪的研制

施嫚嫚, 黄梅珍

(上海交通大学 物理系 光学工程研究所, 上海 200240)

摘 要:介绍了一种基于 Czerny-Turner 光路结构并采用谐波电机直接驱动光栅的小型快速近红外光谱仪的设计、仿真及初步测试结果. 为了减小多次反射及衍射产生的杂散光, 运用 Cary 理论进行光路布局与设计, 使用光学软件 TracePro 进行了仿真, 结果显示改进之后的结构有效抑制了系统的杂散光. 为了减小体积并提高扫描光谱速度, 采用谐波电机直接驱动光栅代替传统的电机传动正弦丝杆再驱动光栅的结构, 在近红外光波段对样机性能进行了初步测试, 并对葡萄糖水溶液进行了定性测量. 初步测试结果显示: 波长范围 800~1 500 nm, 扫描速度达到 75 nm/s, 光谱分辨率 6 nm, 波长准确性 ± 0.5 nm, 重复性 ≤ 1 nm, 信噪比为 1 000 : 3, 吸光度重复性 ≤ 0.008 AU, 基线稳定性 0.000 5 A/h, 简单葡萄糖水溶液的定性测试结果比较清晰地反映了样品的特性.

关键词:近红外光谱仪; Cary 原理; Czerny-Turner 结构; 谐波电机; TracePro

中图分类号: TH744.1

文献标识码: A

doi: 10.3788/gzxb20114004.0591

0 引言

近红外光谱技术是一种无损快速检测方法, 能做定性分析和定量分析, 适合在线实时检测, 已在众多领域得到应用. 由于环境监测、生物医学、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, 要求分析仪器小型化、轻量化, 目前国外仪器的发展趋向于智能化、微型化、集成化、芯片化和系统工程化^[1].

近红外光谱仪主要有扫描光栅单元探测型、固定光栅阵列探测型、声光可调谐滤波型 (Acousto-optic Tunable Filter, AOTF)^[2] 和傅立叶变换光谱型 (Fourier Transform Spectrometer, FT)^[3] 等四类, 其中产品又以扫描光栅型为主^[4], 这类产品普遍采用步进电机加丝杆的结构, 这样的结构有助于提高仪器的扫描准确度和重复性, 但由于丝杆自身结构的限制也造成了其扫描速度低的缺点, 丝杆传动系统为正弦机构, 扫描波长值与丝杆的行程成线性关系. 如在一些精密光栅型仪器中电机带动丝杆每旋转一周, 其行程变化 1 mm, 波长扫描了 3 nm^[5], 这样扫描一遍全谱光谱图速度很慢. 另外, 近红外光谱仪器中杂散光问题也一直存在, 主要涉及光学系统中多次衍射的光线以及路径中光学表面引起的杂

散辐射^[6], 通常采用添加遮光罩和消光光阑来消除系统杂散光^[7].

本文运用 Cary 原理对传统型 Czerny-Turner (C-T) 结构单色器的光路布局进行了改进, 旨在减少光路系统中二次衍射及多次衍射, 从根本上抑制因此产生的杂散光, 并对光路结构使用光学软件进行了仿真; 采用了谐波电机直接驱动光栅代替传统的电机传动正弦丝杆再驱动光栅的结构, 减小了体积并提高了扫描速度; 最后对样机进行了初步的性能测试, 并对葡萄糖水溶液进行了简单的定性实验.

1 仪器的整体设计

1.1 光路设计

在常见的 Czerny-Turner 光路结构中, 由于准直镜和聚焦镜的位置以及其本身宽度, 出射光线容易反射到镜子表面形成多次衍射^[8]. 从光栅衍射出的边缘光线或照到两个镜子之间的空白或返回准直镜, 到达聚焦镜的光线也有部分到达光栅的边缘形成二次衍射, 如图 1. 这样经过二次衍射或多次衍射使得其他波长的光重叠到仪器设定的要出射波长的光束上去, 增大了仪器的杂散光, 使输出光束的纯度变差.

基金项目: 上海市科技基金项目 (No. 10142200600) 资助

第一作者: 施嫚嫚 (1985-), 女, 硕士研究生, 主要研究方向为光谱测量及光谱仪器. Email: walicew@163.com

导师 (通讯作者): 黄梅珍 (1966-), 女, 副教授, 博士, 主要研究方向为光学检测和生物医疗光学. Email: mzhuang@sjtu.edu.cn

收稿日期: 2010-09-30; 修回日期: 2010-12-15

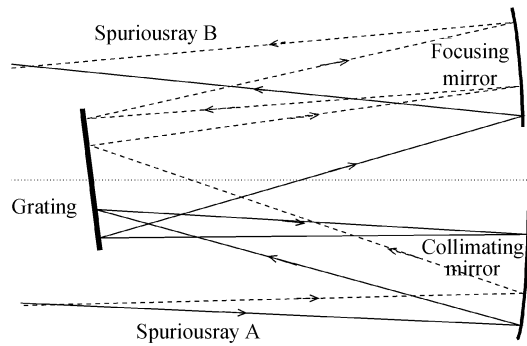


图 1 常见 C-T 结构中的二次衍射示意图

Fig. 1 Schematic diagram with two double diffraction paths

图 1 中实线表示光线在准直镜上反射两次;虚线表示在聚焦镜上反射了两次. 为了避免这种多次衍射的产生,简单的方法可以增大离轴角度,但也同时会增加彗差和像散^[9]. Cary 原理指出在系统设计中存在一个最小离轴角,使得光栅转动的轨迹始终处于物镜外缘法线的外侧,这样光栅出射的任何一条衍射光线投射到物镜后都不可能再返回到光栅上,因而不会产生多次衍射^[9],如图 2.

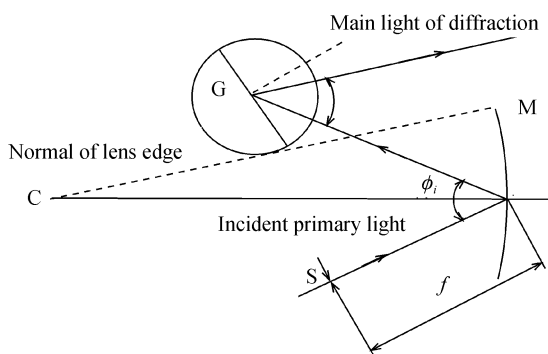


图 2 Cary 原理

Fig. 2 The diagram of cary principle

Cary 原理表达式为

$$f^\# \varphi_i > (4-K)/2K \quad (1)$$

式中 $f^\#$ 为仪器色散系统的 F 数; φ_i 为凹面镜的离轴角; K 为表征平面光栅与凹面镜之间距离的因子. 若 f 为球面镜的焦距,则 Kf 为光栅与凹面镜之间的距离. $f^\# \varphi_i$ 随 K 值变化的关系一般是 K 值变化范围为 $0.8 \sim 2$,相应的 $f^\# \varphi_i$ 值为 $0.5 \sim 2$ ^[9]. 常见 C-T 结构光谱仪器中多取 K 值 ≤ 1 ,本实验通过运用 Cary 原理对结构进行计算得出 K 值为 1.5 .

实验样机的光学元件参量如下:凹面反射镜尺寸为 $30 \text{ mm} \times 26 \text{ mm} \times 6 \text{ mm}$, $R=240 \text{ mm}$,光栅尺寸为 $26 \text{ mm} \times 26 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$,线密度为 300 gl/mm ,离轴角 φ_i 为 14° , Kf 为 180 mm . 仪器的光路结构如图 3. 光线从光源室经过透镜聚焦照进样品

池,出射的光再次经过透镜会聚到入射狭缝,然后到达准直镜表面,这样光线就以平行光入射到平面光栅上,光栅在谐波电机直接驱动下转动,将分光的结果依次照到聚焦镜表面,从而经过出射狭缝被探测器接受. 由于电机传动系统省略了丝杆,体积较小,外形尺寸 $220 \text{ mm} \times 110 \text{ mm} \times 180 \text{ mm}$,设计达到了小型化轻量化的要求.

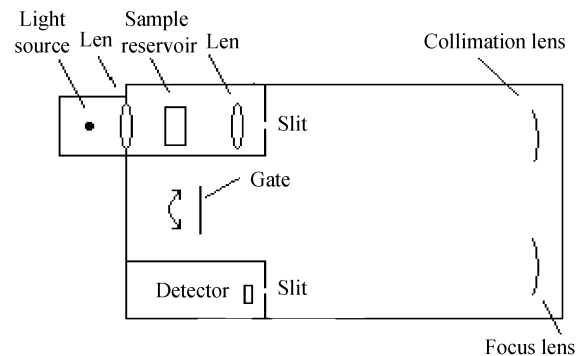


图 3 仪器的整体结构

Fig. 3 The whole structure diagram of the instrument

1.2 光学软件仿真

对于一个光学系统,评价杂散光对该系统影响的主要指标有:点源透射比,照度分析图和杂散辐射比等. 杂散辐射比是最能直接反应杂散光水平的指标. 在设计视场范围之内,用到达像面的杂散光能量 N_{str} (或光线数量)除以到达成像面上的总辐射能量 N_{tot} (或光线数量)来表示杂散辐射比 NSR ^[10]. 其表达式为

$$NSR = \frac{N_{\text{str}}}{N_{\text{tot}}} = \frac{N_{\text{tot}} - N_{\text{sig}}}{N_{\text{tot}}} \quad (2)$$

通过光学软件 TracePro 对系统进行设计仿真,选择光线波长为 1200 nm ,通光孔径为 26 mm ,成像物镜焦距为 120 mm ,光栅线数为 300 gl/mm ,狭缝大小为 0.4 mm ,追迹光线数 10000 . 对改进结构之前和引入 Cary 原理设计的光路结构分别进行模拟,通过 TracePro 对 1200 nm 单波长入射(作信号光 N_{sig})和 $800 \text{ nm} \sim 1500 \text{ nm}$ 以 10 nm 间隔入射(作总辐射能量 N_{tot})两种情况下追迹光线(见图 4),可以计算出光线的杂散辐射比.

通过对比图 4 中(a)和(b)两幅图,可以明显看出,运用 Cary 原理后系统杂散光数量得到了有效的控制,而探测器上的照度分布也更为均匀,进一步对两种情况下的杂散辐射比作比较可得: NSR_a 为 0.035 , NSR_b 为 0.015 . 改进结构后的杂散辐射比更小,有效地抑制了杂散光.

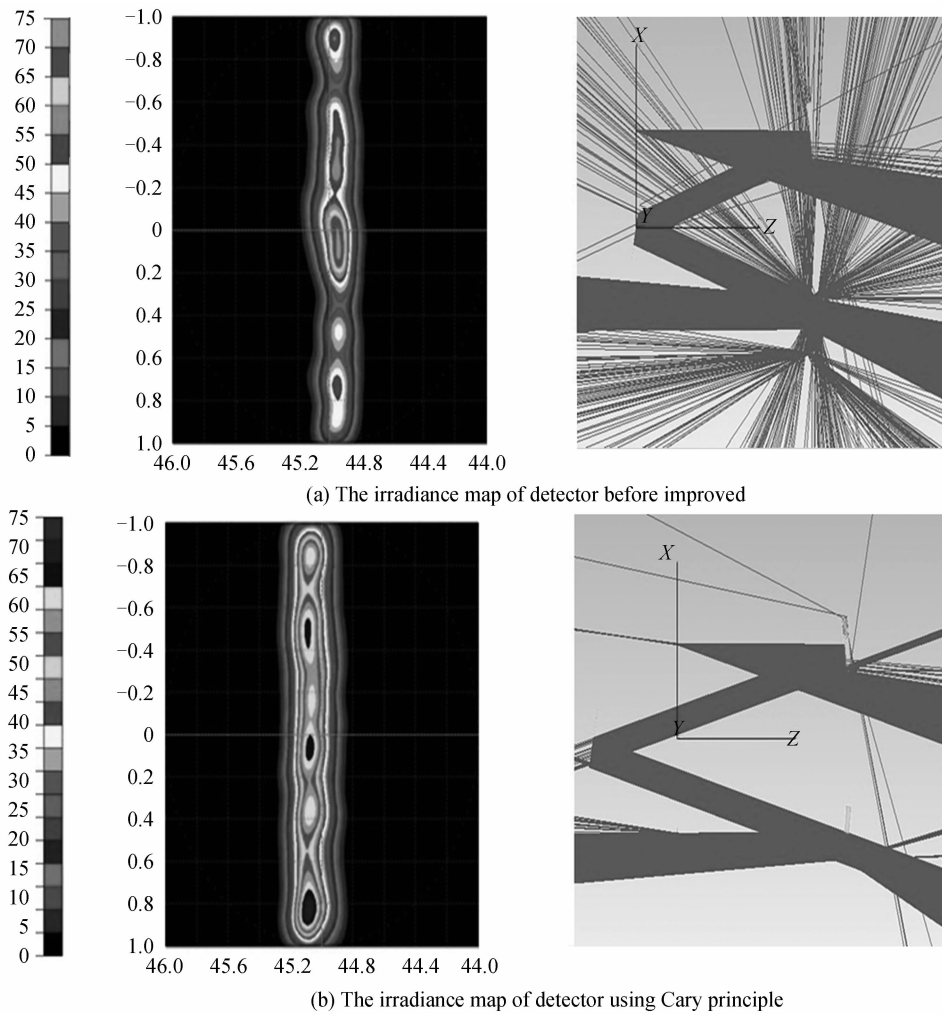


图 4 TracePro 光线追迹仿真结果
Fig. 4 Ray-tracing simulation results

1.3 电子电路系统设计

系统的电路控制与采集流程示意图如图 5,探测器将探测到的光信号转成电信号,经前置放大器将弱电信号放大,放大后的信号经滤波器去除高频噪音及工频干扰送给模数转换器进行量化采集,下位机对采集数据进行简单处理后将数据打包上传给计算机分析软件,由分析软件对光谱信号进行进一步的分析处理.

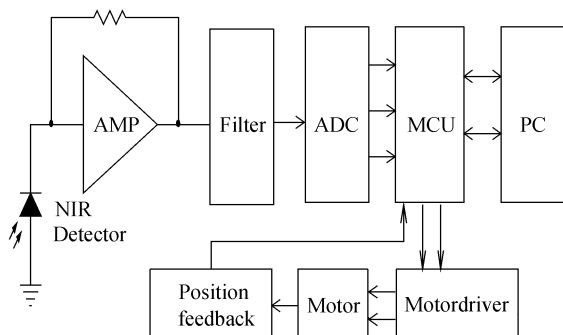


图 5 NIR 电路部分
Fig. 5 Circuit part diagram of NIR

软件部分由上位机软件部分和下位机软件部分构成,上位机软件主要完成对信号的分析及

对下位机的通讯.下位机软件主要是接收上位机软件件的配置完成对系统的自检、调零、扫描控制、电机状态检测、数据采集与处理等工作.

本实验采用谐波电机直接驱动光栅扫描,谐波减速机拥有无可比拟的优异定位准确度特性,相较于其他类型的步进电机,谐波减速电机具有高准确度定位,容许转矩和最大转矩较大,同时具有高的减速比和分辨率. MCU 发送脉冲信号驱动电机,电机将转过相应的角步数,即直接带动光栅转过一定的角度,与传统的丝杆正弦传动扫描相比,这样直接带动扫描的方式提高了扫描速度,而扫描准确度也由谐波减速电机的基本分辨率 $0.0072^\circ/\text{步距}$ 得到了保证.无齿隙型谐波减速电机能够做到高准确度定位,不需要另外的细分设置,平滑驱动能够达到更好的减振效果.最后根据出射波长与光栅角度的对应关系,进一步得到当前输出的波长.

2 初步实验结果与分析

2.1 波长范围

样机波长范围为 $800 \sim 1\,500\text{ nm}$,光源为欧司

朗的溴钨灯(12V_G4 20W),探测器采用 InGaAs MOCVD 结构的平面型近红外大光敏面积探测器(GD3562T)。

2.2 分辨率

测量高压汞灯(GY-13,天津市拓普仪器有限公司)特征谱线,实验选定绿光(波长 546.1 nm)测得其半高宽度 ≤ 6 nm,优于近红外光谱仪的一般要求 10 nm^[11]。

2.3 基线(100%T线)稳定性

在吸光度 0AU 条件下,测试基线稳定性为 0.000 5 A/h. 具体测量方法如下:样品室无样品放入,即空白对空白 100T%测量,在一定的时间内(通常为 1 h)连续测量多次,用多次光谱测量的标准偏差表示^[11]. 1 小时内测试 3 次基线(100%T),如图 6 是测量 3 次的基线放大图. 通常近红外光谱仪的基线漂移指标满足 0.000 3 A/h,本实验还需进一步提高光源的稳定性和减少系统电学噪音漂移。

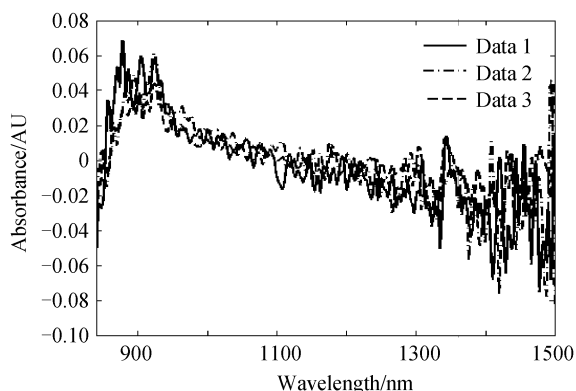


图 6 基线稳定性测试

Fig. 6 Stability test of baseline

2.4 信噪比

近红外仪器的信噪比是判断近红外仪器性能好坏的一项重要技术指标,影响信噪比的因素有:测量时间、分辨率以及光通量等等. 但目前信噪比的测试方法还没有统一公认的标准,各个仪器厂商所给的仪器信噪比不具可比性. 测量仪器的信噪比实际上是测量仪器的噪音水平,本实验采用的方法是多次测量信号取平均值作为信号和噪音的叠加结果,再扣除叠加在基线上的噪音,计算出信噪比. 实验测试结果表明仪器信噪比为 1 000 : 3.

2.5 波长准确性和重复性

利用高压汞灯的绿光(波长 546.07 nm)和黄光(波长 576.96 nm)以及其二级谱来进行定标. 实验连续测量 3 次(室温 21℃湿度 53%),按照国家近红外仪器检定规程,计算波长准确性是求其平均值与标准值之差,实验测得波长准确性为 ± 0.5 nm(见表 1),波长重复性为连续测 3 次中最大值与最小值

的差值,实测波长重复性为 ≤ 1 nm(如表 1). 与丝杆方式相比,本实验逊色地方在于重复性不够好,这也是今后样机改进工作努力的方向。

表 1 高压汞灯定标波长准确性测试

Table 1 Mercury lamp wavelength accuracy test

Standard wavelength/nm	Test1	Test2	Test3	Repeat ability	Accuracy
546.1	546.1	545.8	546.4	0.6	0.0
577.2	576.8	576.4	577.2	0.8	-0.2
546.1 * 2	1 092.2	1 092.1	1 091.8	0.9	-0.5
577.0 * 2	1 154.1	1 154.2	1 154.2	0.1	0.2

实验中采用汞灯可见光的二级谱来标定样机波长是为了保证样机在近红外波段的波长准确性. 从实验结果看来,波长的准确性和重复性已达到国产仪器的一般要求,通常要求在长波近红外范围波长准确性应优于 1.0 nm,在短波近红外范围波长的准确性应好于 0.5 nm^[11]。

2.6 吸光度的重复性

吸光度重复性对近红外检测来说是一个极其重要的指标,它直接影响模型建立的质量和测量的准确性^[10]. 实验测试材料为中性玻璃衰减片,连续测试三次测得光度重复性 ≤ 0.008 AU (在吸光度 1.0 AU 条件下,波长 1 200 nm 处),实际样品测试曲线图谱结果见 2.8 节。

2.7 扫描速度

在确保数据的采集准确度和仪器良好重复性的情况下,波长扫描速度优于 75 nm/s,扫描一遍全谱并给出光谱图谱画出的总时间 < 10 s,相比较于现有国内产品的近红外光谱仪(如南京中地 ZDJ1PB-1 扫描全谱时间 30~120 s)速度上有所提升. 在改善速度的同时,样机的波长准确性和重复性不具优势,只达到一般国产仪器水平(如南京中地 ZDJ1PB-1 波长准确度优于 ± 1 nm,波长重复性优于 ± 1 nm)。

2.8 简单液体样品的定性测试

实验选用葡萄糖水溶液为测试对象,图 7 为连

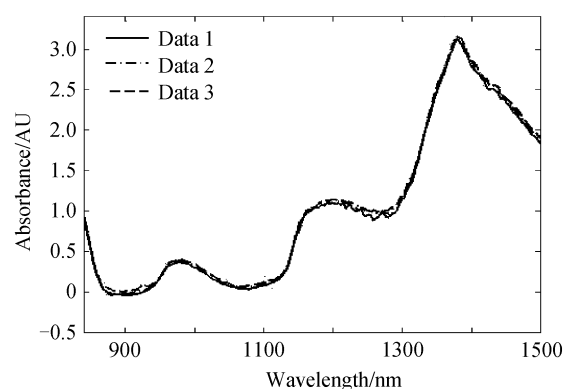


图 7 葡萄糖水溶液吸光度曲线

Fig. 7 Absorbance of glucose water solution

续测量三次葡萄糖水溶液的吸光度曲线图。测试结果表明在 1 000~1 300 nm 之间有明显吸收峰,之后的谱图曲线是水的吸收影响,这与一般的葡萄糖水溶液的吸光度测试图谱相吻合^[12]。在此基础建立大量的不同浓度葡萄糖水溶液测试数据库,通过建模分析便可以进行深入的定量分析。

3 结论

为了减少光学系统中的杂散光,本文利用 Cary 原理对于 Czerny-Turner 结构的光路进行了设计,使用光学软件 TracePro 对仪器光路结构进行了仿真分析。采用谐波电机直接带动光栅扫描方式提高了仪器的扫描速度,并在近红外光波段对该小型近红外光谱仪进行了性能测试以及简单的实际样品的定性测试实验。初步测试结果显示:波长范围 800~1 500 nm,扫描速度达到 75 nm/s,光谱分辨率 6 nm,波长准确性 ± 0.5 nm,重复性 ≤ 1 nm,信噪比为 1 000:3,吸光度重复性 ≤ 0.008 AU,基线稳定性 0.000 5 A/h,简单葡萄糖水溶液的定性测试结果比较清晰地反映了样品的特性。该仪器结构紧凑小巧,测量速度快,操作简便成本优势突出。目前,进一步的改进还在进行中。

参考文献

- [1] 陆婉珍,袁洪福,徐广通,等.现代近红外光谱分析技术[M].第一版.北京:中国石化出版社,2000.
- [2] GAO Ming-hui, LIN Jie-qiong, LIAN Feng-hui, et al. Portable NIR spectrometer based on AOTF[J]. *Changchun University of Technology (Natural Science)*, 2008, **29**(3): 314-318.
高明辉,林洁琼,廉风慧,等.基于 AOTF 的便携式近红外光谱测量仪的研制[J].长春工业大学学报(自然科学版),2008, **29**(3): 314-318.
- [3] ZHOU Xue-qiu, ZHU Yu-jie, LIU Xu. Instrument technology and applications of modern fourier transform near infrared spectrometer[J]. *Modern Instruments*, 2002, (4): 29-33.
- [4] QIN Xi-yun, LI Jun-hui, YANG Yu-hong, et al. Influence of spectrometer scanning requirements in homemade grating diffuse NIR instrument on NIR veracity[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2007, **27**(2): 411-413.
秦西云,李军会,杨宇虹,等.国产光栅近红外光谱仪扫描条件对检测结果的影响[J].光谱学与光谱分析,2007, **27**(2): 411-413.
- [5] CAO Yan-bo, WANG Xing-hua, HUAN Yan-fu, et al. Design of an interface and drive circuit for precision grating monochromator[J]. *Analytical Instruments*, 2004, (3): 11-14.
曹彦波,王兴华,郝延富,等.精密光栅单色仪接口与驱动电路的研制[J].分析仪器,2004, (3): 11-14.
- [6] CEN Zhao-feng, LI Xiao-tong, ZHU Qi-hua. Stray light analysis for optical system [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2007, **36**(3): 300-304.
岑兆丰,李晓彤,朱启华.光学系统杂散光分析[J].红外与激光工程,2007, **36**(3): 300-304.
- [7] ZHONG Xing, ZHANG Lei, JIN Guang. Stray light removing of reflective optical system [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2008, **37**(2): 316-318.
钟兴,张雷,金光.反射光学系统杂散光的消除[J].红外与激光工程,2008, **37**(2): 316-318.
- [8] JOSHUA J M, DONTALD O L. Multiply diffracted light in the Czerny-Turner spectrometer[J]. *Applied Optics*, 1968, **8**(7): 1431-1435.
- [9] MURTY M V R K. Cary principle in monochromator design [J]. *Applied Optics*, 1973, **12**(9): 2018-2020.
- [10] DU Shu-song, WANG Yong-mei, DU Guo-jun, et al. Stay light analysis of fabry-perot interference imaging spectrometer [J]. *Journal of Applied Optics*, 2009, **30**(2): 246-251.
杜述松,王咏梅,杜国军,等.干涉成像光谱仪的杂散光分析[J].应用光学,2009, **30**(2): 246-251.
- [11] TIAN Gao-you, ZHU Xiao-li, YUAN Hong-fu, et al. The main specifications of near infrared spectroscope and their evaluation methods [J]. *Modern Scientific Instruments*, 2005, (4): 17-20.
田高友,褚小立,袁洪福,等.近红外光谱仪主要技术指标与评价方法概述[J].现代科学仪器,2005, (4): 17-20.
- [12] 向毅贤,温志渝.微型近红外光谱仪系统的研究[M].重庆大学,2008: 39-46.

Design of a Small Rapid Scanning Near Infrared Spectroscopy

SHI Man-man, HUANG Mei-zhen

(Institute of Optical Engineering, Department of Physics, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: The design method, simulation and test results of a small rapid scanning type near-infrared spectrometer (NIR) based on improved Czerny-Turner optical structure were presented. To reduce the stray light caused by multiple diffractions and multiple reflections, the optical structure was arranged and optimized by the Cary principle. The simulation and analysis result using optical software TracePro were also presented. Stray light was suppressed in the improved structure effectively. On the other hand, in order to increase the scanning speed, a harmonic motor was used to drive the grating directly instead of the traditional structure with a screw driver between the motor and the grating. Finally some basic test results of the near infrared spectrometer were presented, and glucose solution was analyzed by qualitative experiments.

Key words: Near infrared spectroscopy; Cary principle; Czerny-Turner structures; Harmonic motor; TracePro