

研究与试制

DOI:10.19453/j.cnki.1005-488x.2020.03.004

面向生化分析应用的小型平像场分光光度计 结构研究*

马婷婷¹, 杨 晋^{2**}, 朱继伟¹, 孙 慈², 宋 楠², 彭 勇¹, 郭雪强¹,
张 健¹, 冯树龙², 郭汉洲³

(1. 长春长光格瑞光电技术有限公司, 长春 130102; 2. 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 长春 130033;
3. 长春国科医工科技发展有限公司, 长春 130000)

摘 要: 设计了一种后分光式的小型平像场分光光度计。采用多通道硅光电二极管阵列探测器与平场凹面全息光栅, 并集成准直-聚焦单元进行一体封装, 基于选定的平场凹面光栅完成光谱仪单元结构分析及设计, 提出了光谱带宽增宽效应分析及波长误差评估预计方法。在预定的工作波段范围内得到了近似平直的光谱面, 实现单次接收信号光束的多波长同步测量, 工作波段覆盖 340 nm~800 nm, 光谱带宽优于 8 nm。

关键词: 分光光度计; 光谱仪; 生化分析; 吸光度

中图分类号: TN83 **文献标志码:** A **文章编号:** 1005-488X(2020)03-0170-06

Study on the Structure of a Miniature Flat-field Spectrophotometer Based on Biochemical Analysis

MA Tingting¹, YANG Jin², ZHU Jiwei¹, SUN Ci², SONG Nan², PENG Yong¹,
GUO Xueqiang¹, ZHANG Jian¹, FENG Shulong², GUO Hanzhou³

(1. Changchun SPKTRM Optronics co.Ltd, Changchun 130102, CHN; 2. Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, CHN; 3. Changchun Guoke Medical Engineering Technology Development co.Ltd, Changchun 130000, CHN)

Abstract: A miniature flat-field spectrophotometer was designed by using the mode of "first absorption then spectroscopy". The multi-channel silicon photodiode array detector and flat-field concave holographic grating were used and the collimating and focusing structure were integrated into one. Based on the selected flat field concave grating, the structure analysis and design of the spectrometer

收稿日期: 2019-12-10

* **基金项目:** 国家自然科学基金项目(61805240), 长春市科技计划项目(18DY003), 吉林省科技发展计划项目(20180201049SF), 吉林省科技发展计划项目(20180201123GX), 吉林省科技发展计划项目(20180201122GX), 国家重大科学仪器设备开发专项项目(2018YFF01011102)

作者简介: 马婷婷(1991—), 女, 硕士, 主要从事光谱仪器开发, 光谱分析技术研究; (E-mail: mtt0828@sina.com)
杨 晋(1988—), 男, 博士, 主要从事光谱仪器设计开发, 成像光谱及光谱分析技术研究; (E-mail: yang_jin1988@163.com)

朱继伟(1980—), 男, 博士, 主要从事光谱仪器设计开发及光谱分析应用技术等方面研究。

** 通讯作者

unit was completed. By studying the structure of the miniature flat-field spectrophotometer, a method for the analysis of spectral bandwidth broadening effect and the estimation of wavelength error was proposed. The near-straight spectrum was obtained within the predetermined working band range, and the multi-wavelength synchronous measurement of a single signal beam received could be realized. The working band covered 340 nm~800 nm, and the spectral bandwidth was better than 8 nm.

Key words: spectrophotometer; spectrometer; biochemical analysis; absorbance

引言

现今,分光光度法和分析、检测行业应用最为广泛的分析方法,作为生化检测分析仪器的关键组成单元,分光光度计集成分光仪器与光度计功能结构,通过获取并解读分子及原子吸收、荧光发射、散射光谱,实现对物质成分的有效定性、定量,具有实时、高效、用样少、成本低、近乎无损及不改变样本理化特性的优点,是工业、农业、环保、制药、生物等领域的优选源头信息科技之一。

随着分光元件、探测器、微处理、先进加工制造技术的与日俱进,衍射光栅取代棱镜色散及滤光器件,全息复制取代蚀刻工艺,以及阵列探测微处理技术的出现,都大大促进了分光光度计的性能提升和普及应用,简化了生化检测分析系统结构、缩减成本及测量周期。近几十年,智能化、自动化、轻量化兼顾的分光光度计为生化检测技术的革新发展带来了质的飞跃^[1-2]。

鉴于此,文章针对一种小型平像场分光光度计的结构进行研究,通过基于给定光栅的设计方法研究,有效配置结构参数,完成通用、高性能、一体化的分光光度计开发。

1 仪器原理

以平场全息凹面光栅为分光元件的小型分光光度计,主要用于测定样品中吸收光的介质浓度,基于所测得介质对信号光束的吸收光谱,采用比尔定律即吸光度的单位信号正比于摩尔吸收率、光程和样品浓度,由此完成样品中吸光介质的浓度分析^[3],实现样品组分的定性定量。

小型分光光度计的组成部分如图1所示,由光源模块、准直-聚焦装置、样品室、光谱仪模块、探测及后端分析处理系统组成。光源模块用于提供连续的光源信号输入,经准直单元收集并产生平行光,经样品室通过光的吸收作用得到携带样品信息

的光束,经聚焦单元会聚获得有效信号光束,并将其导入光谱仪系统。通过光谱仪结构内部平场凹面光栅进行色散分光,得到按波长顺序分布的平直光谱。通过硅光电池二极管阵列探测器完成光谱信号的接收并进行光电转换,输出表示各单波长通道光信号强度的电流信号,由后端分析处理系统对特定通道信号进行AD转换及解读分析,最终基于特定波长对应通道的光谱信号强度变化,实现对样本成分的定量检测^[4-5]。

此类分光光度计无需扫描操作能够一次接收多波长的信号光束,实现全谱同步的光电直读,不仅操作方便、成本低且响应快速、信号处理简单,适用于各类生化样本的定性定量快检分析。

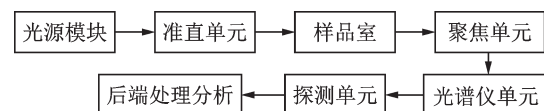


图1 小型平像场分光光度计结构

Fig.1 Structure of the miniature flat-field spectrophotometer

文中基于生化分析仪器的常用需求确定了光谱通道及光谱带宽参数,选定了平场凹面全息光栅,依据其结构参数,完成了基于生化分析应用的小型平像场分光光度计的结构研究。通过详尽的光谱带宽增宽、杂散光分析及误差精度研究,完成光谱仪单元设计及探测器装置的二极管排布设计;通过误差分析,保证了仪器的高波长准确度这一关键指标。最终完成了高稳定、高精度的后分光式小型平像场分光光度计的设计开发。

2 仪器设计与讨论

2.1 光栅选择

所选定的平场凹面光栅的使用参数见表1,其在距离光栅中心 85.9 mm 处可获得宽度为 37 mm 且成像质量较好的平直谱面,其中 350 nm 与 750

nm 光束所对应的出射臂长分别为 83.9 mm 及 100.5 mm, 基于光栅的结构参数及尺寸, 可以获得光谱仪单元的基本光路结构^[6], 如图 2 所示。

表 1 平场凹面全息光栅使用参数

Tab.1 Parameters of flat field concave holographic grating

参数名称	指标
刻线密度/(g·mm ⁻¹)	800
线分散/(nm·mm ⁻¹)	11.1
工作波长范围/nm	350~750
闪耀波长/nm	450
入射角/(°)	0
入射臂/mm	86.3
谱面位置距离/mm	85.9
谱面位置角度/(°)	3.54

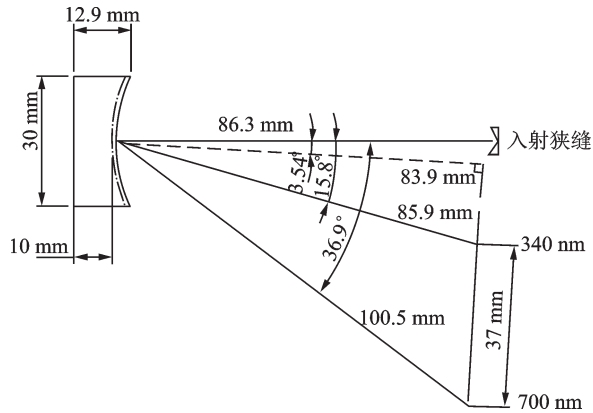


图 2 平场凹面光栅结构参数

Fig.2 Structural schematic of the flat field concave holographic grating

2.2 光谱带宽增宽

光谱带宽作为分光光度计的重要性能指标, 代表了仪器分辨解读光谱的能力。文中所研究的基于给定光栅及采用硅光电二极管阵列探测器的分光光度计, 其光谱带宽指标主要取决于狭缝、探测器、光栅等组成部分对光谱带宽的增宽效应。下文对实现高光谱带宽指标配置的参考依据进行分析。

分光光度计系统内光谱仪单元的入射狭缝是影响光谱带宽指标的关键, 入射狭缝的宽度 S_1 决定的光谱带宽可表示为狭缝空间成像宽度与线分散的乘积^[7], 依据光栅方程(1):

$$d(\sin i + \sin \theta) = m\lambda \quad (1)$$

则各波长衍射角的余弦值为公式(2):

$$\cos \theta = \sqrt{1 - (N \cdot \lambda)^2} \quad (2)$$

则光栅的线色散率为公式(3):

$$\frac{dl}{d\lambda} = \frac{d\theta}{d\lambda} \cdot r_H = \frac{mN}{\cos \theta} \cdot r_H = \frac{mNr_H}{\sqrt{1 - (N \cdot \lambda)^2}} \quad (3)$$

其中, m 为衍射级次, N 为光栅线密度, r_H 为平场光栅焦面到光栅中心的距离, 则入射狭缝宽度决定的光谱带宽可表示为公式(4):

$$\Delta\lambda_1 = S_1' \cdot \frac{d\lambda}{dl} = S_1' \cdot \gamma \cdot \beta \cdot \frac{d\lambda}{dl} = S_1' \cdot \frac{\cos i}{mNr} \quad (4)$$

其中, S_1' 为入射狭缝经光学系统后的空间成像宽度, γ 、 β 分别为光学系统的横向放大率及垂轴放大率, i 为光栅入射角, r 为平场光栅的入射臂长。

平场凹面光栅是该分光光度计光谱仪单元内限制光束孔径的光阑, 依据夫朗和费衍射理论, 考虑光栅衍射带来的光谱带宽增宽, 可表示为公式(5):

$$\Delta\lambda_2 = r_H \cdot \delta \cdot \frac{d\lambda}{dl} = \frac{2\lambda}{W} \cdot \frac{d\lambda}{d\theta} \quad (5)$$

其中, δ 为中央主极大的角宽度, W 为光栅刻面宽度, 据此可基于长波段的使用通道光束波长, 依据光栅及角色散率等参数, 获得光栅最大增宽量。

此外, 根据实际带宽需求及阵列探测器的加工难度, 选择是否添加出射狭缝阵列, 在单通道二极管接收面宽度较大的情况下, 通过添加出射狭缝阵列, 能够有效地限制光谱带宽, 提高系统的检测精度。以每个光电二极管或出射狭缝为出光口, 可将其作用分离出的带宽视为出射端的增宽量, 为公式(6):

$$\Delta\lambda_3 = \frac{d\lambda}{dl} \cdot b \quad (6)$$

其中, b 为出射狭缝或单通道二极管接收面的宽度。

通过如上分析, 平场凹面光谱仪单元内部组件作用所得光谱带宽量可表示为公式(7):

$$\Delta\lambda = \Delta\lambda_1 + \Delta\lambda_2 + \Delta\lambda_3 + \Delta\lambda_n \quad (7)$$

其中, $\Delta\lambda_n$ 为实际系统中光栅像差、离焦等难以计算的增宽效应预留量。

通过如上公式(2)~(7), 可以基于给定光栅完成光谱仪系统的参数计算配置。有关阵列探测器的摆放设计, 则在光栅的有效工作范围内, 依据光栅方程获得不同波长通道的衍射角度, 参照图 1 所示结构可以得到其在焦平面的衍射位置。由此, 小型平像场分光光度计的分光系统及探测单元结构通过计算可得。

2.3 波长误差

波长准确度作为光谱仪单元的重要指标, 决定了整个光谱分析系统对样品组分识别定量的准确

度,其主要取决于光谱定标的精度,以及仪器在装配或运输过程中,光栅、入射狭缝、探测器间的相对位置变化,过大的工作温度、湿度变化,记录系统的机械零件磨损、积尘等。因此,在仪器设计阶段,通过对单块光栅刻线数误差、探测器加工误差、装调误差等影响因素的分析,可对波长准确度指标进行有效预计评估。

首先,在装调过程中光栅及探测器位置可以微调,则装调过程带来的波长误差主要取决于由狭缝位置偏差所带来的光栅入射角度变化,如图3所示。

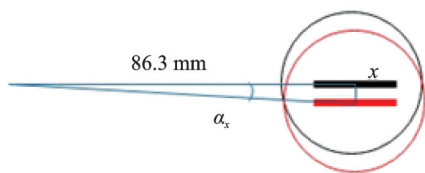


图3 狭缝装调误差示意图

Fig.3 Schematic of slot setting error

则基于选定光栅结构及光栅方程,可得狭缝位置偏差量为 x mm 时所引入的波长误差为公式(8):

$$\sigma\lambda_1 = 1250 \cdot \sin \left[\arctan \left(\frac{x}{86.3} \right) \right] \quad (8)$$

通过如图4所示的拟合分析,狭缝装调误差0.1 mm以内对波长准确度的影响小于1.5 nm。

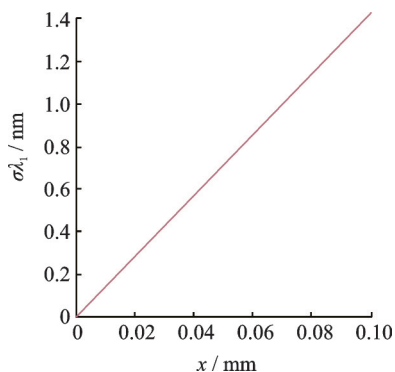


图4 狭缝装调误差引起的波长误差

Fig.4 Wavelength error caused by slit setting error

刻线数及刻线弯曲误差是光栅刻划过程常见的误差类型,刻线弯曲误差会影响衍射波前质量,而刻线数的误差会改变光栅常数,对光谱仪单元的波长准确度会产生一定影响。若光栅刻线数为 $N + \Delta N$ (ΔN 为光栅加工的刻线数误差,可正可负),则根据光栅方程,光栅刻线数误差 ΔN 带来的波长误差为公式(9):

$$\sigma\lambda_2 = \frac{-\Delta N}{(N + \Delta N) \cdot N} \cdot \sin \theta = \frac{-\Delta N}{(800 + \Delta N)} \cdot \lambda \quad (9)$$

如图5所示,基于部分通道波长的拟合分析,在340 nm~800 nm间,光栅刻线数误差对长波段通道的波长准确度影响较大。

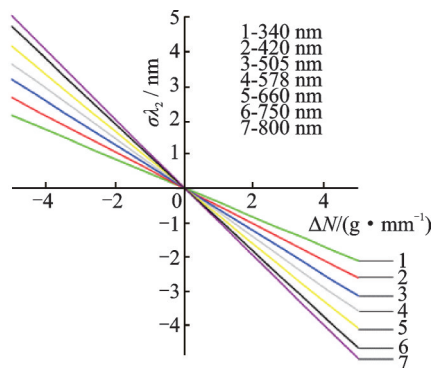


图5 光栅刻线数误差引起的波长误差

Fig.5 Wavelength error caused by the error of the number of grating lines

此外,由于探测单元的探测装置采用多通道硅光电二极管阵列形式,其基于特定波长光束经过光学系统衍射于特定位置这一原理,实现多通道的同步直读。因此,探测器位置或出射狭缝位置的误差会影响仪器的波长准确度,如图6所示,进而导致各通道接收到的信号光束中掺入邻近波段杂光,影响定量检测的准确度。基于空间成像原理,可将探测器或出射狭缝加工中心偏差 Δx 带来的波长误差表示为光栅线分散参数与 Δx 的乘积,如公式(10):

$$\sigma\lambda_3 = \frac{d\lambda}{dl} \cdot \Delta x = \frac{\sqrt{1 - (N \cdot \lambda)^2}}{m N r_H} \cdot \Delta x = \frac{\sqrt{1 - (800 \cdot \lambda)^2}}{800 \times 83.9} \cdot \Delta x \quad (10)$$



图6 探测器或出射狭缝加工误差带来的波长误差示意图

Fig.6 Schematic of the wavelength error caused by machining error of detector or exit slit

通过如图 7 所示基于部分通道波长的拟合分析,在 340 nm~1 000 nm 间,探测器或出射狭缝加工误差对短波段通道的波长准确度影响较大。

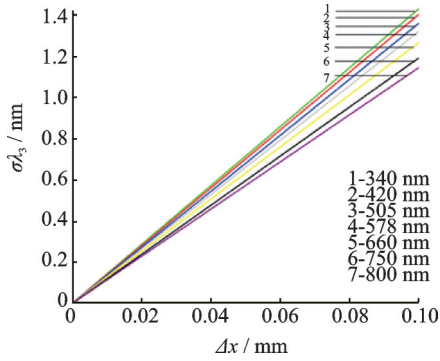


图 7 探测器或出射狭缝加工误差带来的波长误差

Fig.7 Wavelength error caused by machining error of detector or exit slot

通过如上分析,准确的波长可以预估为公式(11):

$$\delta\lambda = \delta\lambda_1 + \delta\lambda_2 + \delta\lambda_3 + \delta\lambda_n \quad (11)$$

其中, $\delta\lambda_n$ 为光谱仪定标所用仪器及实际操作过程产生的波长误差的预留量。通过公式(11),可以基于光谱仪系统的参数完成分光光度计波长的准确预测评估。

3 仪器设计结果

参考如上有关生化分析应用的小型平像场分光光度计结构研究及相应误差分析研究结果,文中设计基于给定的光栅,同时使用了出射及入射狭缝,通过减小狭缝的空间成像及限制成像宽度使仪器的分辨率指标满足设计要求;通过对出、入狭缝及探测器的加工误差限定保证了波长准确度。此外,为了除去光谱仪内部部分杂散光,在探测器表面加装相应的截止滤光片。由于靠近紫外波段光的强度较弱,340 nm 通道处于工作波段边缘,杂散光较多,为提高该通道处的信噪比,在此处加装透紫外滤光片,并在可见波段区域及长波段区域分别加装金黄色、红色截止滤光片,消除二极光谱。最终完成了参数指标如表 2 所示的平像场分光光度计结构设计,如图 8 所示。

光源模块采用了卤钨灯光源,具有发光效率高、色温稳定、寿命长、成本低且近乎无衰光的特点,可提供 350 nm~2 000 nm 的连续光源;比色装置由准直单元、样品室及聚焦单元组成,采用了双

表 2 小型平像场分光光度计技术指标

Tab.2 Specifications of the miniature plat-field spectrophotometer

参数名称	指标
光谱带宽/nm	8
工作范围/nm	340~800
波长准确度/nm	±2
通道数	16

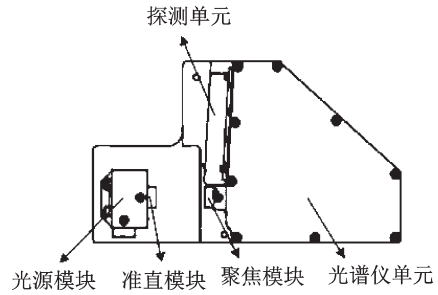


图 8 小型平像场分光光度计结构

Fig.8 Structural schematic of the miniature flat-field spectrophotometer

平凸透镜及熔石英比色皿组成,通过将入射光束准直成平行光束,透过比色皿再进行光线的会聚收集等过程,基于样品组分对特定波长光束吸收的原理,能够获得携带样品信息的信号光束;光谱仪系统主要采用了平场凹面全息光栅,其同时满足光谱仪器的色散与准直、聚焦的需求,不仅大大缩减光路体积,且能在预定的工作波段范围内产生近似平直的光谱面,使得集成检测系统摒弃传统机械扫描的宽光谱获取方式;光电探测单元采用硅光电池二极管阵列,相较线阵 CCD 芯片等常用探测器件,响应效率高、速度快、成本低且便于开发。

最终所设计的小型平像场分光光度计样机及上位机软件如图 9 所示,实现了 340 nm~800 nm 间 16 个通道采集光谱信号的 AD(Analog to Digital)数据的输出,并通过其所集成的生化分析检测仪器对各通道光谱数据进行调用,可依据吸光度法检测原理,基于吸收光谱的能量变化实现对样品成分的定性、定量分析。



图 9 小型平像场分光光度计样机图

Fig.9 Prototype of the miniature flat-field spectrophotometer

4 结束语

文章基于现代生化分析检测仪器对分光光度计成本低、响应快、操作简单、小型智能等需求,设计了一种后分光式小型平像场光谱仪结构,主要采用了多通道硅光电二极管阵列探测器与平场凹面全息光栅,能在预定的工作波段范围内实现单次接收信号光束的多波长同步测量,相较通过步进电机控制光栅转动并依次扫描输出单色光实现对样品检定分析的分光形式,大大提升了检测效率,且便于集成兼容应用。此外,文章对基于给定光栅的结构设计原理及误差分析、精度预计等问题进行了详细说明,对该类仪器的设计、改进具有指导意义。由于该类分光光度计无法单独实现样品分析,需集成于生化检测仪器应用,在接下来的研究工作中将通过样机的实际集成测试,验证所提出设计方法

的正确性及仪器的使用性能,同时辩证最优的小型平像场分光光度计配置方案。

参 考 文 献

- [1] 萧泽新,陈 宽.自动生化分析仪的发展和展望[J].光学与光电技术,2006,1(3):62-64.
- [2] 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,2004,3:3-7.
- [3] 苏建坡,马海涛,吴再辉,等.基于平场光栅的分光光度计在生化分析仪中的应用[J].现代仪器,2006,12(6):39-42.
- [4] 霍建伟,马海涛,王丽秋,等.全自动生化分析仪用分光光度计[J].光学精密工程,2003,11(5):457-460.
- [5] 周 辉.小型高分辨平场凹面光栅光谱仪的研究[D].长春:中国科学院长春光学精密机械与物理研究所,2015.
- [6] 耿 超.用于全自动生化分析仪的分光光度计的研究[D].南京:南京理工大学,2013.
- [7] 李全臣,蒋月娟.光谱仪器原理[M].北京:北京理工大学出版社,1999:201-205.
- [8] Ko M, Kim J Y, Lee M J, et al. A silicon balanced subharmonic optoelectronic mixer for 60 GHz fiber-wireless downlink application[J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2011, 23(23):1805-1807.
- [9] Novoselov K S, Falco V I, Colombo L, et al. A roadmap for graphene[J]. Nature, 2012, 490(7419):192-200.
- [10] Prechtel L, Song L, Schuh D, et al. Time-resolved ultrafast photocurrents and terahertz generation in freely suspended graphene[J]. Nature Communications, 2012, 3:646.
- [11] Bonaccorso F, Sun Z, Hasan T, et al. Graphene photonics and optoelectronics [J]. Nature Photonics, 2010, 4(9):611-622.
- [12] Capmany J, Domenech D, Munoz P. Graphene integrated microwave photonics [J]. Journal of Lightwave Technology, 2014, 32(20):3785-3796.
- [13] Mueller T, Xia F, Avouris P. Graphene photodetectors for high-speed optical communications [J]. Nature Photonics, 2010, 4(5):297-301.
- [14] Mao X, Cheng C, Huang B, et al. Optoelectronic mixer based on graphene FET [J]. IEEE Electron Device Letters, 2015, 36(3):253-255.
- [15] Montanaro A, Mzali S, Mazellier J P, et al. Thirty gigahertz optoelectronic mixing in chemical vapor deposited graphene[J]. Nano Letters, 2016, 16(5):2988-2993.
- [16] Sugawara K, Kawasaki T, Tamamushi G, et al. Photonic frequency double-mixing conversion over the 120 GHz band using InP- and Graphene-based transistors[J]. Journal of Lightwave Technology, 2016, 34(8):2011-2019.
- [17] Muench J E, Ruocco A, Giambra M A, et al. Waveguide-integrated, plasmonic enhanced graphene photodetectors[J]. Nano Letters, 2019, 19(11):7632-7644.
- [18] Wang X, Cheng Z, Xu K, et al. High-responsivity graphene/silicon-heterostructure waveguide photodetectors [J]. Nature Photonics, 2013, 7(11):888-891.

(上接第169页)