

文章编号: 1005-5630(2023)04-0032-08

DOI: 10.3969/j.issn.1005-5630.2023.004.005

紫外-可见光双通道拉曼光谱仪光学设计

倪心愿¹, 杨照清¹, 郭汉明^{1,2}

(1. 上海理工大学 光电信息与计算机工程学院, 上海 200093;
2. 上海理工大学 上海市现代光学系统重点实验室, 上海 200093)

摘要: 紫外拉曼光谱技术具有高强度拉曼散射、无荧光干扰的特点; 可见光拉曼光谱技术可实现低波数、高分辨率探测。为兼具两种激发波长的优势, 设计了一款对称分布的双 Czerny-Turner 光路聚焦于一个探测器的双通道拉曼光谱仪。通过元器件的选型和初始结构的计算, 在不增加多余元器件的情况下, 对弧矢方向像散进行补偿, 避免了像面上的能量损失。配合 Zemax 软件对双通道光谱分别进行建模优化, 最终实现了对 $400\sim 5\,000\text{ cm}^{-1}$ (266 nm 激发) 和 $50\sim 3\,500\text{ cm}^{-1}$ (633 nm 激发) 两段光谱的同时探测。均方根半径、点列图和调制传递函数等评价指标有效验证了设计的合理性和可行性。结果表明, 两套拉曼光谱仪分别可达 8 cm^{-1} 和 5 cm^{-1} 分辨率, 本设计具有高分辨率、低波数、多波长激发、集成化等优势。

关键词: Czerny-Turner; 双通道; 紫外拉曼光谱; 可见光拉曼光谱; 低波数; 高分辨率
中图分类号: TH 744; O 35 **文献标志码:** A

Optical design of UV-visible dual-channel Raman spectrometer

NI Xinyuan¹, YANG Zhaoqing¹, GUO Hanming^{1,2}

(1. School of Optical-Electronic and Computer Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China;
2. Shanghai Key Laboratory of Modern Optical System, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China)

Abstract: UV Raman spectroscopy has the characteristics of high intensity Raman scattering and no fluorescence interference; visible Raman spectroscopy has the advantages of low wave number and high resolution detection. In order to combine the advantages of two excitation wavelengths, two symmetrically distributed Czerny-Turner optical paths focusing on one detector are designed for a dual-channel Raman spectrometer. Through the selection of components and calculation of the initial structure, the energy loss on the image plane can be avoided by compensating for the astigmatism in the arc-vector direction without adding extra components. Using the software

收稿日期: 2022-05-24

基金项目: 上海市地方能力建设项目 (21010502900)

第一作者: 倪心愿 (1998—), 女, 硕士, 研究方向为光学设计。E-mail: Bestwishni@163.com

通信作者: 郭汉明 (1977—), 男, 教授, 研究方向为超分辨光学显微成像和光谱技术。E-mail: hmguo@usst.edu.cn

Zemax, the dual-channel spectra were modeled and optimized separately, and the simultaneous detection of the spectra of $400\sim 5000\text{ cm}^{-1}$ (266 nm excitation) and $50\sim 3500\text{ cm}^{-1}$ (633 nm excitation) was finally realized. The rationality and feasibility of the design were verified by the root mean square radius, spot diagram, and modulation transfer function. The results show that the resolution of the two sets of spectrometers can reach 8 cm^{-1} and 5 cm^{-1} , respectively. The design has the advantages of high resolution, low wave number, multi-wavelength excitation, and integration.

Keywords: Czerny-Turner; two-channel; UV Raman spectrum; visible Raman spectrum; low wave number; high resolution

引言

拉曼光谱检测技术原理是入射激光与待测非金属材料发生非弹性散射, 从而得到分子信息, 是一种物质分析的检测方法。不同物质通过拉曼检测后传递本身的专属信息, 因此拉曼光谱被称为物质检测的“指纹”^[1]。拉曼光谱检测具有快速、安全、无损伤等优点, 在材料催化^[2-3]、肿瘤疾病^[4]、食品检测^[5]、航空探测^[6]等领域有广泛的用途。

目前国内外多数拉曼产品的激光器波长均大于 500 nm。荧光往往出现在 300~700 nm 的区域。使用可见光波长激发拉曼散射时, 伴随荧光干扰, 导致光谱基线显著增大从而淹没弱拉曼信号。近红外 1064 nm 激光器^[7]激发虽然有效降低检测物的荧光激发, 但拉曼散射强度低。短波长 266 nm 紫外光激发的拉曼散射强度是近红外 1064 nm 激发的 256 倍。紫外拉曼光谱范围通常小于 350 nm, 其探测区几乎与荧光光谱剥离。近年来中国科学院李灿院士^[8]自主研发了深紫外拉曼光谱仪, 在催化剂研制中有重要应用。由于紫外拉曼光谱技术全波段具有荧光干扰小、拉曼本征效率高等优势, 因此研制具有实用价值的紫外拉曼光谱仪有重大意义。

低波数拉曼探测是指拉曼位移在 100 cm^{-1} 以内, 该波段附近光谱携带丰富的信息。由于滤光片技术的限制, 紫外拉曼区的瑞利散射光线的滤除十分困难, 应用于 266 nm 激发的高通滤波片的起始波数仅为 372 cm^{-1} , 导致很多有用信息的丢失。532 nm、633 nm 等可见光激光器的滤

光片起始波数在 100 cm^{-1} 以内, 可弥补紫外拉曼光谱在低波数探测时的缺陷。

目前多波长拉曼探测仅是将不同激发波段的拉曼光谱仪叠加, 信息采集单独分开, 不具备集成化优势。国外 Bagusat 等^[9]提出利用交叉光栅的方法, 该光栅可在正交方向衍射出不同阶的衍射光, 从而产生二维交叉光谱, 拓宽了光谱波段的同时也提高了光谱分辨率。Belay 等^[10]采用一种不同闪耀波长拼接的三段衍射光栅, 探测波段覆盖了紫外、可见光和近红外波长, 且不同区域具有不同的分辨率。这两种方法都是基于特殊结构属性的光栅, 与普通的刻线光栅相比工艺复杂且价格昂贵, 所以本文考虑从光路结构中改进。国内周颖等^[11]设计了基于扫描光栅的双探测器光谱仪, 通过转动光栅角度, 实现 800~1600 nm、1600~2532 nm 两段光谱的探测。由于目前 CCD 等探测器较为昂贵, 这种内置双探测器的结构生产成本较高。北京理工大学郭磐等^[12]提出了一种基于共用探测器的双 M 型 Czerny-Turner (C-T) 光路来实现双波段荧光光谱探测。该方法不增加额外器件, 共用探测器达到了一体化的要求, 这种共用像面的双 M 型光路具有借鉴意义。

为了提高拉曼光谱物质分析的适用范围, 实现紫外和可见光拉曼的双光谱探测, 本文设计了一款基于两个对称分布的 M 型 Czerny-Turner 光路聚焦一个探测器的双通道拉曼光谱仪, 给出了发散照明校正像散的结构参数计算, 配合 Zemax 仿真优化, 最终在紫外 ($400\sim 5000\text{ cm}^{-1}$) 和可见光 ($50\sim 3500\text{ cm}^{-1}$) 两段拉曼位移内分别达到了

8 cm⁻¹ 和 5 cm⁻¹ 的分辨率。该设计结构简单，效果理想，同时具备双通道探测、高分辨率、低波数、高强度本征散射、消荧光等优点。

1 双通道光路系统

Czerny-Turner 光路是拉曼光谱仪研制中最常用的分光结构。其器件组成有狭缝、球面反射镜、光栅和探测器 CCD。C-T 光路按形状分两类：折叠型与 M 型。折叠型 C-T 结构紧凑但像差较大；M 型结构的彗差随波长变化较小，全波段成像质量均匀。因此本设计选择 M 型光路作为基础光路，通过同一探测器接收的思想来组合双 M 型 C-T 光谱仪，最终达到紫外拉曼与可见光拉曼光谱的联合。本设计的光路对称分布于 CCD 两侧，如图 1 所示。

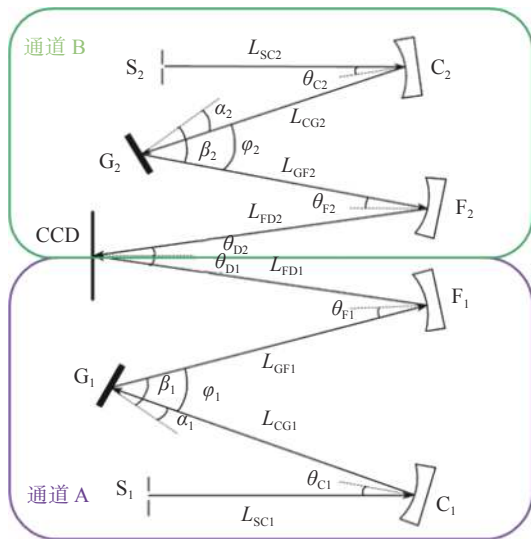


图 1 对称分布 M 型的双通道光路图

Fig. 1 Symmetrical M-shaped double-channel optical path

由紫外固态激光器和可见光激光器激发的拉曼本征光分别从狭缝 S₁、S₂ 双通道进入两个 C-T 光谱仪成像，最终在一个探测器上实现两段光谱的探测。为了方便描述，将紫外光路命名为通道 A，其中的参量下标用 1 表示；可见光光路命名为通道 B，参量下标用 2 表示。C-T 结构参量如下：*f_c* 为准直镜的焦距；*θ_c* 为准直镜的偏转角；*L_{SC}* 为入射狭缝到准直镜的距离；*α*、*β* 为光栅的入射角与衍射角；*L_{CG}* 为准直镜到光栅的距离；*L_{GF}* 为光栅到聚焦镜的距离；*f_F* 为聚焦镜的焦距；*θ_F* 为聚焦镜的偏转角，*L_{FD}* 为聚焦镜

到 CCD 的距离；*θ_D* 是光线与像面的夹角。

Czerny-Turner 光路因离轴结构会产生彗差。像面上的光束在子午方向上呈现彗星状的光斑，会严重影响光谱仪的分辨率，因此光路系统也需满足 Shafer 等^[13] 提出的消彗差条件

$$\frac{\sin \theta_F}{\sin \theta_C} = \frac{R_F^2}{R_C^2} \left(\frac{\cos \alpha}{\cos \beta} \right)^3 \left(\frac{\cos \theta_C}{\cos \theta_F} \right)^3 \quad (1)$$

2 设计指标及初始结构计算

2.1 目标参数

本文选取 266 nm 紫外激光器、633 nm 红光激光器，分别作为拉曼通道 A 和拉曼通道 B 的光源。目前便携式拉曼光谱仪的探测波数范围主要在 100~4000 cm⁻¹ 之间，而探测精度为 5~10 cm⁻¹^[14-15]。在有限像素数的探测器限制下，分辨率越高，光谱表征的信息量越大，光谱占据的像素数越多，也在一定程度上限制了光谱探测宽度。综合考虑分辨率和探测范围，设定本文的工作波段为紫外探测波数 400~5000 cm⁻¹ 和可见光探测波数 50~3500 cm⁻¹，分辨率分别为 8 cm⁻¹ 和 5 cm⁻¹。根据文献 [16] 波长与波数的转化，即在 268.861~306.805 nm、635~813.154 nm 两段波长内，分别在相距 0.06 nm 和 0.26 nm 的最小波长间隔上实现光谱的可分辨。

本文的共用探测器构成的双通道拉曼探测系统，要求 CCD 探测器在紫外到可见光波段均有较高的量子效率。日本滨松光子公司型号为高速型 S11851-1106 的一款背照式 CCD 面阵传感器，在小于 400 nm 和 600~800 nm 处量子效率高达 50%~78%。工作阵列尺寸为 2048 pixel×64 pixel，像元大小为 14 μm。双像元合并可提高 CCD 的灵敏度与信噪比，故本设计的探测器等效像元尺寸为 28 μm。

2.2 元器件选型及参数计算

衍射光栅是光谱仪分光的核心元件，刻线密度越高，分辨能力越强。当拉曼光谱仪的激发波长由可见光到紫外波长变化时，入射光能量增大，光谱分辨率逐渐降低。因此为了使紫外拉曼

光谱达到 8 cm^{-1} 的分辨率, 需使用比可见光激发刻线密度更高的光栅。通道 A 的中心工作波长在 287.833 nm , 是在紫外波段。通道 B 的中心工作波长在 724.077 nm 处, 属于可见光波段。为了使各通道的光栅工作在较高的衍射效率下, 选取爱特蒙特光学公司的一款闪耀波长在紫外波段附近, 刻线数 $n_1=2400 \text{ lines/mm}$ 的全息光栅 G_1 作为紫外通道 A 的分光器件。另选择一款闪耀波长在 750 nm 处, 刻线数 $n_2=1200 \text{ lines/mm}$ 的光栅 G_2 作为可见光通道 B 的分光器件。

综合考虑光学透镜技术及加工成本, 本设计采用凹球面反射镜作为物镜, 则球面准直镜焦距、系统分辨率以及狭缝宽度的关系为

$$f_C = \frac{S \cos \theta_C}{n \delta \lambda} \quad (2)$$

式中: S 为狭缝宽度; n 是光栅的刻线数; $\delta \lambda$ 为光谱分辨率。Thorlabs 公司的狭缝宽度有 $10 \sim 100 \mu\text{m}$ 不同规格。缝宽越窄, 系统分辨率越高, 但通光量越低。因此需要根据不同通道的光谱分辨率要求合理选择。紫外拉曼通道激发波长较短, 为实现 8 cm^{-1} 分辨率, 往往对波长的光谱分辨率要求更高。换算成波长单位则要求光谱仪的光谱分辨率 $\delta \lambda_1=0.06 \text{ nm}$; 而可见光拉曼通道只要区分 0.26 nm 波长间隔的光斑就可实现 5 cm^{-1} 高分辨率拉曼光谱探测。选取紫外拉曼通道 A 和可见光通道 B 的缝宽 $S_1=S_2=16 \mu\text{m}$ 。M 型光路是离轴三反结构, 选取的准直镜偏转角尽量小一点, 且为防止光栅与狭缝碰撞, 设紫外通道 A 的 $\theta_{C1}=7.2^\circ$, 可见光通道 B 的 $\theta_{C2}=6.7^\circ$, 代入式(2)计算可得双通道的准直镜焦距分别为 $f_{C1} \approx 110 \text{ mm}$, $f_{C2} \approx 51 \text{ mm}$ 。

考虑到通道 A 中准直镜焦距是通道 B 中准直镜焦距的 2 倍以上, 光栅 G_1 需具备更宽的尺寸才能完全接收来自准直镜 C_1 的反射光束。因此根据厂商的光栅尺寸型号, 最终选取紫外拉曼通道的光栅宽度 W_1 为 25 mm , 可见光拉曼通道的光栅宽度 W_2 为 12.7 mm 。

如图 1 所示, 当光栅的入射光与衍射光在法线同侧时, 光栅方程为

$$d(\sin \alpha + \sin \beta) = m \lambda \quad (3)$$

式中: d 是光栅常数; m 为光栅衍射级次, 一般

取 $+1$ 级次; λ 值分别选取双通道的中心工作波长 $\lambda_{C1}=287.833 \text{ nm}$, $\lambda_{C2}=724.07 \text{ nm}$; 代入式(3)可获得双通道的两套光栅的入射角 α 和衍射角 β 的方程。图 1 的几何结构中, 两个光栅的入射角 α 和衍射角 β 又满足

$$\alpha + \varphi = \beta \quad (4)$$

通常 φ 按经验取值为 $25^\circ \sim 30^\circ$, 则分别选取 $\varphi_1=26^\circ$ 、 $\varphi_2=30^\circ$ 。结合式(3)、(4)便可初步求得双通道的两个光栅的入射角 α 和衍射角 β 的值。

光栅的线色散是相隔一定波长的两条谱线在聚焦镜上分开的距离, 是衡量光谱仪性能的参数。聚焦镜的焦距可通过对光栅的线色散方程在波长范围内积分获得

$$f_F = \frac{l \cos \beta \cos \theta_D}{n(\lambda_{\max} - \lambda_{\min})} \quad (5)$$

式中: f_F 为聚焦镜焦距; θ_D 为光线与像面的夹角。由于 β 和 θ_D 角度较小, 故可作近似值运算, $\cos \beta \approx \cos \theta_D \approx 1$ 。 l 为 CCD 的有效长度, 将两段波长范围 $268.861 \sim 306.805 \text{ nm}$ 、 $635 \sim 813.154 \text{ nm}$ 分别代入式(5)可算出双通道的聚焦镜焦距范围 $f_{F1} < 315 \text{ mm}$, $f_{F2} < 134 \text{ mm}$ 。综合理论计算值, 可设紫外通道 A 光路中的准直镜和聚焦镜的焦距为 $f_{C1}=f_{F1}=110 \text{ mm}$, 曲率半径均为 220 mm ; 可见光通道 B 光路的准直镜和聚焦镜焦距为 $f_{C2}=f_{F2}=51 \text{ mm}$, 曲率半径均为 102 mm 。后期光路优化时将聚焦镜的曲率半径设为变量, 进行合理的优化以使光谱仪达到更好的成像质量。表 1 为系统初始结构的元器件参数。

表 1 系统初始结构的元器件参数

Tab. 1 Component parameters of the initial structure of the system

参数	取值	参数	取值
R_{C1}/mm	-220	R_{C2}/mm	-102
R_{F1}/mm	-220	R_{F2}/mm	-102
$S_1/\mu\text{m}$	16	$S_2/\mu\text{m}$	16
G_1/mm^{-1}	2400	G_2/mm^{-1}	1200
W_1/mm	25	W_2/mm	12.7

2.3 消像散结构设计

像散是 C-T 光路中影响最大的像差, 形成

原因是光束经过光学系统后子午像点与弧矢像点不重合。普通 C-T 光路的狭缝位于准直镜焦距处, 则反射光束平行地进入光栅, 光栅本身不产生像散。发散照明光栅结构^[17]不增加额外元器件, 通过缩短狭缝到准直镜的距离 L_{SC} , 使得 $L_{SC} < f_C$ 时, 经准直镜变换后发散光束进入光栅, 使得光栅本身产生一定像散来抵消系统像散。经过光学系统后的子午像距 S_t 和弧矢像距 S_s 表达式为

$$S_t = \frac{R_C R_F L_{SC}}{2L_{SC}(R_C \sec\theta_F + R_F \sec\theta_C) - R_C R_F \frac{\cos^2\alpha}{\cos^2\beta}} \quad (6)$$

$$S_s = \frac{R_C R_F L_{SC}}{2L_{SC}(R_C \cos\theta_F + R_F \cos\theta_C) - R_C R_F} \quad (7)$$

当满足 $S_t = S_s = L_{FD}$ 时, 可得狭缝到准直镜的距离 L_{SC} 公式为

$$L_{SC} = \frac{0.5R_C R_F \left(\frac{\cos^2\alpha}{\cos^2\beta} - 1\right)}{R_C(\sec\theta_F - \cos\theta_F) + R_F\left(\frac{\cos^2\alpha}{\cos^2\beta} \sec\theta_C - \cos\theta_C\right)} \quad (8)$$

根据理论消彗差式(1)计算出 θ_F , 再将初始计算的球面镜曲率半径 R_C 、 R_F 及光栅入射角 α 、衍射角 β 等参数代入式(8)计算, 即可得出发散照明条件下的 L_{SC} 值。由于准直镜离轴角度较小, 光栅和狭缝在 Y 轴方向容易发生碰撞, 合理选取 L_{CG} 可避免元器件干涉。 θ_D 为主光线与像面的夹角, L_{GF} 、 L_{FD} 分别为光栅到聚焦镜的距离和聚焦镜到像面的距离, 可先初步设置, 后通过软件优化取得。综合上述计算, 优化前的结构特征参数见表 2。

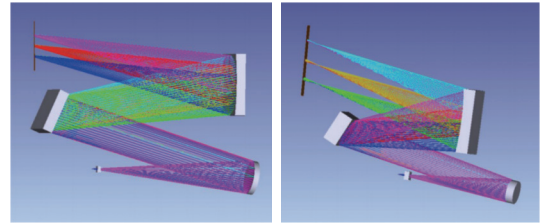
表 2 优化前的结构特征参数
Tab. 2 Structural characteristic parameters before optimization

参数	通道A	通道B
L_{SC}/mm	95.9	45.9
L_{CG}/mm	-120	-55
$\alpha/(\circ)$	7.7	11.6
$\beta/(\circ)$	33.8	41.6
$\theta_C/(\circ)$	7.2	6.7
$\theta_F/(\circ)$	11.8	14.1

3 Zemax 仿真优化与结果分析

3.1 系统建模

使用软件 Zemax 分别对紫外通道 A、可见光通道 B 的初始光路进行模拟仿真。将双通道光路的中心波长 287.833 nm 和 724.077 nm 分别设置为紫外光路和可见光光路的主波长。图 2 为 266 nm 激发的紫外通道 A 和 633 nm 激发的拉曼通道 B 的初始光路仿真图。



(a) 紫外通道 A (b) 可见光通道 B

图 2 初始光路仿真

Fig. 2 Initial optical path simulation

由于前期为初步估算, 像面并非最佳位置。为获得更高分辨率的光谱, 先将聚焦镜到探测器 CCD 的距离和像面偏转角设为变量, 初步优化使像面聚焦; 再增加结构参量、曲率半径等为变量, 配合操作数限定范围继续优化。优化函数选择 RMS 优化算法, 以 SpotX+Y 为目标。子午方向的分开距离直接影响拉曼光谱仪的系统分辨率, 因此在不影响系统分辨率的提前下, 适当增加子午方向的优化权重, 允许系统光斑在探测器 CCD 的纵向宽度范围内有一定的像散。优化好的球面镜曲率替换为长春加工厂的模板参数, 最终得到优化后的双通道光路参数(表 3)。

如图 1 系统光路所示, 双通道光谱仪关于探测器 CCD 对称分布。因此将优化好的双光路 C-T 光谱仪均设置像面为全局坐标参考面, 然后使两像面重合。为避免双通道光路系统的聚焦镜 1 和 2 发生结构碰撞和光路干涉, 还要约束两个聚焦镜的口径 D_{F1} 、 D_{F2} 以及两个聚焦镜到探测器的距离 L_{FD1} 、 L_{FD2} 的关系。根据图 1 的光路几何关系, 可得到双通道共用探测器的光路需满足

$$L_{FD1} \tan \theta_{D1} + L_{FD2} \tan \theta_{D2} > \frac{D_{F1} + D_{F2}}{2} \quad (9)$$

表3 Zemax 优化后的双通道光路参数
Tab. 3 Structural parameters of dual-channel optical path optimized by Zemax

参数	通道A	通道B
R_C /mm	-219.935	-102.69
R_F /mm	-225.19	-133.28
L_{SC} /mm	99.687	46.58
L_{CG} /mm	-120	-55
L_{GF} /mm	107.65	37
L_{FD} /mm	-125.6	-77.458
$\theta_C /(^{\circ})$	7.2	6.7

本文设计的紫外-可见光拉曼光谱仪满足上述要求, 元器件互相无干扰, 且距离宽裕, 为机械设计留足了空间。图3为双通道拉曼光谱仪的模拟示意图。

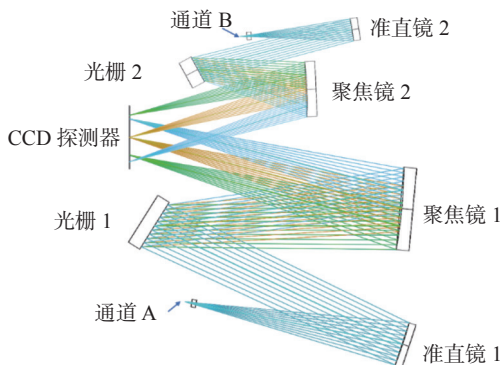


图3 双通道拉曼光谱仪模拟图

Fig. 3 Simulation of a two-channel Raman spectrometer

3.2 像质结果分析

分辨率是分辨很近的两个物点的像的能力。由瑞利判据给出的极限分辨条件可知, 当一个衍射光斑的中央最亮处与另一光斑的第一个最暗处重合时, 则两像点可分辨。分别对通道A(紫外波段)的268.861 nm、287.833 nm、306.805 nm和通道B(可见光波段)635 nm、724.077 nm、813.154 nm处光斑进行分析, 给出了分别相距 8 cm^{-1} 和 5 cm^{-1} 附近波长的点列图, 可最直观地表征成像情况, 如图4、图5所示。

由点列图可看出双通道成像的光斑在色散方向均完全分开, 光斑能量集中, 全波段的像散得

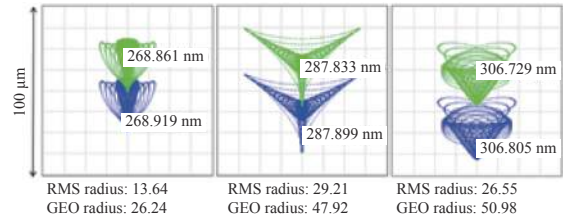


图4 紫外通道A的特征波段点列图

Fig. 4 Spot diagram of the characteristic band of UV channel A

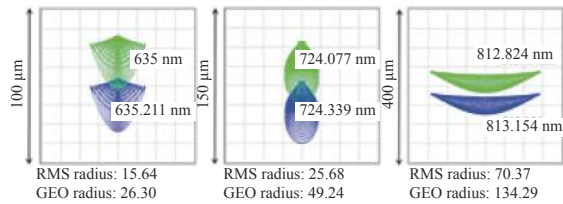


图5 可见光通道B的特征波段点列图

Fig. 5 Spot diagram of the characteristic band of visible channel B

到了有效控制。紫外光通道A的成像光斑大小均匀, 半径在13~27 μm 区间。可见光通道B的低、中波段像散校正良好; 高波长处光谱分辨率较高, 光斑明显分开。虽然其弧矢方向略有像散, 但光斑半径在70.37 μm , 在CCD纵向接收面宽度896 μm 内, 无能量损失。

优化过程需平衡全波段的分辨率, 而均方根(RMS)半径可很好地反映光斑半径与波长变化的关系。子午均方根半径如图6所示。子午RMS半径均在14 μm 以下, 全波段光斑大小较为均匀, 无明显跳动, 成像质量稳定。

本文使用的CCD的等效像元尺寸为28 μm , 则双通道拉曼光谱仪在奈奎斯特频率为17.857 lp/mm下的光学调制传递函数(MTF)如图7所示, 紫外通道A的子午和弧矢传递函数效率在60%~90%之间, 在低波段的传递效率接近1, 说明光学系统可传递的信息量很大。可见光通道B的子午传递函数均在30%~70%之间, 然而高波段的弧矢调制函数略低, 这是由于此波长下的光斑略有弧矢像散, 但其像散程度在本设计容许范围内, 故不影响光学系统的成像质量。综合上述点列图、RMS半径及MTF等像质评价指标, 双通道拉曼光谱仪系统在紫外到可见光波段的光斑能量集中, 光谱分辨率良好, 系统像差较小, 光路结构合理, 达到了本设计的目标参数。

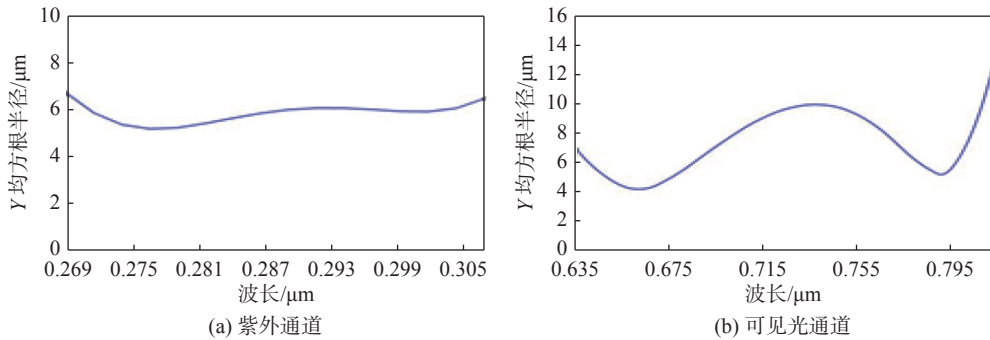


图 6 子午 RMS 半径

Fig. 6 Meridian RMS radius

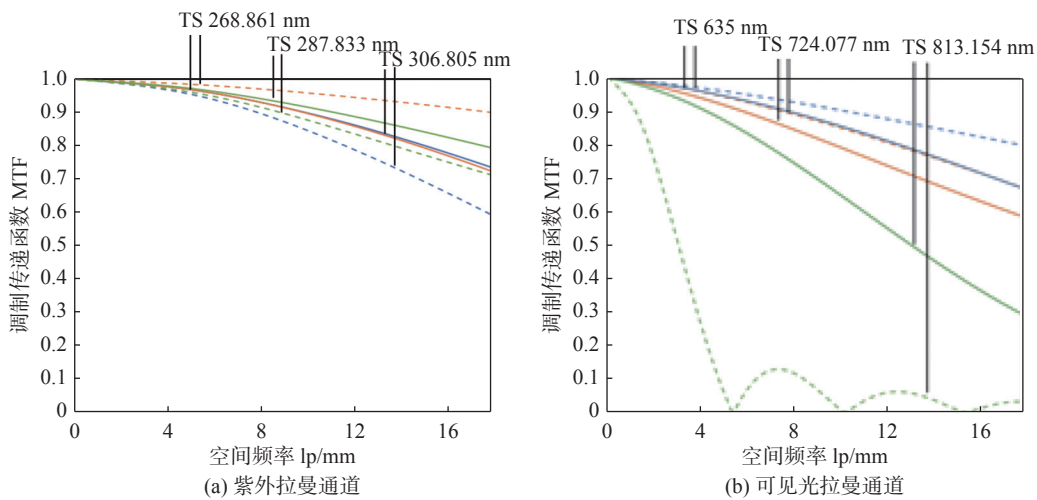


图 7 双通道拉曼光谱仪的 MTF 图

Fig. 7 MTF diagram of two-channel Raman spectrometer

3.3 与未消像散结果对比

普通光谱仪结构中，光栅平行接收准直镜的反射光。则狭缝到准直镜的距离 $L_{sc} \approx f_c$ 时，再结合已计算的初始结构优化两通道的局部距离参数，光斑点列图如图 8(a)、图 8(c)所示。由点列图可看出通道 A、通道 B 在参考波长(低波段、中波段、高波段)下光斑呈线条状并可清晰分辨。然而由图 8(b)、图 8(d)的 X 均方根半径 (Spot X) 可见通道 A (紫外波段) 弧矢方向的光斑半径在 $309.9 \sim 469.91 \mu\text{m}$ 之间；通道 B (可见光波段) 中高波段的弧矢半径接近 $650 \mu\text{m}$ 。两通道的成像光斑均在非色散方向有较大的像散。部分波长的光斑直径将在 $800 \sim 1200 \mu\text{m}$ 之间，远超出本文设计所用探测器的纵向接收面宽度 $896 \mu\text{m}$ 。拉曼光谱信号本就十分微弱。光斑能量损耗越大，探测器对拉曼信号的捕捉能力就越低，最终

导致光谱仪的灵敏度下降。本文设计中将光栅置于发散光路中，利用光栅自身像差弥补了像面的光斑弧矢像散，如图 4、图 5 所示，光斑能量集中，半径仅有几十微米，无光通量损失，具有一定的优势。

4 结 论

为结合 266 nm 激发的紫外拉曼散射强度高、荧光干扰小与 633 nm 激发的可见光拉曼信号低波数、高分辨率的优势，本设计采用两个 M 型 Czerny-Turner 光路组合对称分布于同一个探测器的方案，详细给出了元器件选型及光路参数的算法。结合零阶消像散条件，配合 Zemax 光学软件对双通道工作波段 $268.861 \sim 306.805 \text{ nm}$ 、 $635 \sim 813.154 \text{ nm}$ 分别建模优化，并与未消像散的优化结果(光斑点列图、Spot X)进行比较，前

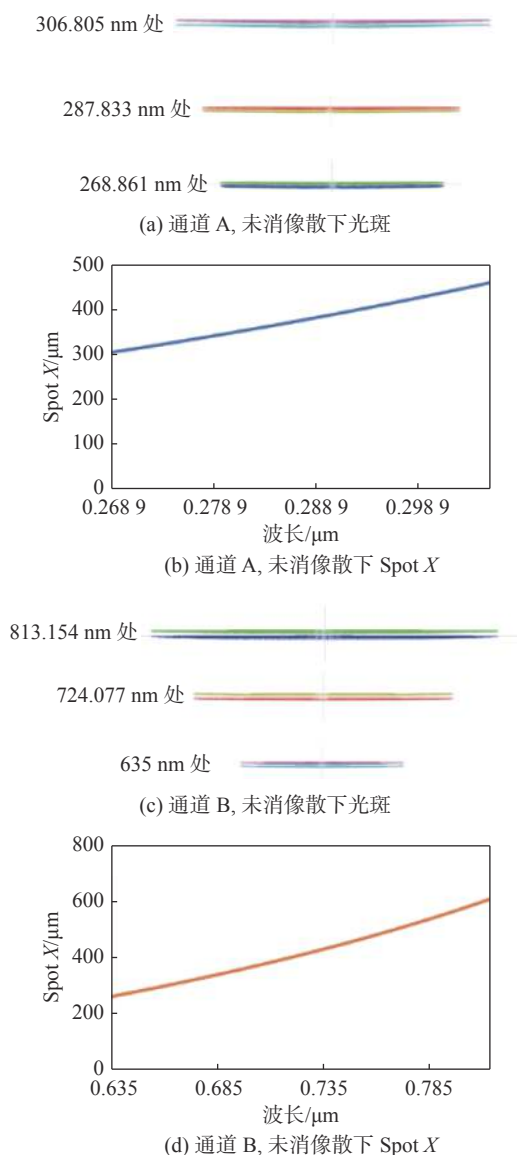


图8 未消像散下的优化结果

Fig. 8 Optimization results without astigmatism elimination

者有效校正了系统的弧矢像散, 避免了像面光能量的损失。紫外拉曼通道系统的子午与弧矢 MTF 高达 60% 以上, 可见光拉曼通道系统的子午 MTF 达 30%~70%, 表明双通道系统均有良好的光学传递效率。又通过光斑点列图、均方根等评价指标, 验证了紫外拉曼通道 8 cm^{-1} 和可见光拉曼通道 5 cm^{-1} 的光谱分辨率。最后通过统一像面为参考面, 将两套系统合并, 实现了低波数、高分辨率、多波长探测的紫外-可见光双通道拉曼光谱仪的系统设计。该系统检测范围广, 荧光干扰小, 可灵活切换波长检测, 具有一定开发应用价值。

参考文献:

- [1] 孙振华, 余镇岗, 黄梅珍, 等. 小型化拉曼光谱仪的优化设计及应用 [J]. 光电子·激光, 2015, 26(6): 1132 – 1137.
- [2] 宋薇. 表面增强拉曼光谱在纳米材料催化体系中的应用 [J]. 光谱学与光谱分析, 2020, 40(10): 119 – 120.
- [3] 翟文磊, 韦迪哲, 王蒙. 光催化自清洁表面增强拉曼光谱基底用于食品污染物可循环检测的研究进展 [J]. 食品科学, 2022, 43(13): 327 – 335.
- [4] 刘凤翔, 张礼豪, 黄霞. 拉曼光谱技术在肿瘤诊断中的应用 [J]. 激光与光电子学进展, 2022, 59(6): 0617016.
- [5] 韩爱云, 张振冉, 解立斌, 等. 拉曼光谱技术在肉类掺假检测方面的应用研究进展 [J]. 肉类研究, 2021, 35(7): 50 – 54.
- [6] 张振荣, 李国华, 叶景峰, 等. 利用拉曼散射法在线测量航空发动机燃烧场主要组分 [J]. 现代应用物理, 2016, 7(4): 040303.
- [7] 赵迎, 李晓鹏, 崔飞鹏, 等. 多波长荧光拉曼光谱仪的研制及应用研究 [J]. 光谱学与光谱分析, 2022, 42(1): 86 – 92.
- [8] 李灿, 冯兆池, 曹凝. 深紫外激光拉曼光谱仪研制 [J]. 中国科学院院刊, 2011, 26(5): 589 – 592.
- [9] BAGUSAT V, KRAUS M, FÖRSTER E, et al. Concept and optical design of a compact cross-grating spectrometer [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2019, 36(3): 345 – 352.
- [10] BELAY G Y, HOVING W, VAN DER PUT A, et al. Miniaturized broadband spectrometer based on a three-segment diffraction grating for spectral tissue sensing [J]. *Optics and Lasers in Engineering*, 2020, 134: 106157.
- [11] 周颖, 黄云彪, 李东玲, 等. 一种改进型非交叉非对称 C-T 结构近红外微型光谱仪设计 [J]. 仪器仪表学报, 2021, 42(5): 25 – 33.
- [12] 郭磐, 邓延宝, 王立福, 等. 一种共用线阵探测器的双 M 型 C-T 光谱仪 [J]. 光子学报, 2022, 51(6): 0622002.
- [13] SHAFER A B, MEGILL L R, DROPPLEMAN L. Optimization of the Czerny-Turner spectrometer [J]. *Journal of the Optical Society of America*, 1964, 54(7): 879 – 887.
- [14] 钟卉. 高分辨率宽光谱范围微型光谱仪的设计与分析 [J]. 激光与光电子学进展, 2020, 57(15): 153004.
- [15] 范贤光, 汤明, 王昕, 等. 高光通量交叉非对称 Czerny-Turner 拉曼光谱仪光学系统 [J]. 光学学报, 2016, 36(4): 0422001.
- [16] 杨洁, 杨照清, 方晨霆, 等. 低波数高分辨率宽光谱拉曼光谱仪的集成化设计 [J]. 光学技术, 2021, 47(6): 647 – 653.
- [17] BATES B, MCDOWELL M, NEWTON A C. Correction of astigmatism in a Czerny-Turner spectrograph using a plane grating in divergent illumination [J]. *Journal of Physics E: Scientific Instruments*, 1970, 3(3): 206 – 210.

(编辑: 张 磊)