

文章编号: 1005-5630(2024)02-0046-08

DOI: 10.3969/j.issn.1005-5630.202303130057

# 高分辨率旋转光栅光谱仪的设计

申佳琪<sup>1</sup>, 杨照清<sup>1</sup>, 傅伟<sup>1</sup>, 王兴宇<sup>1</sup>, 郭汉明<sup>1,2</sup>

(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:** 针对光栅光谱仪中高分辨率与宽光谱难以同时满足的问题, 设计了一款基于旋转光栅的 Czerny-Turner (C-T 型) 光路结构的高分辨率宽光谱拉曼光谱仪, 激发波长为 532 nm, 光谱范围为 80~3 000  $\text{cm}^{-1}$ , 分辨率为 1.2  $\text{cm}^{-1}$ 。将光谱范围分为低(80~1 450  $\text{cm}^{-1}$ )、中(855~2 225  $\text{cm}^{-1}$ )、高(1 630~3 000  $\text{cm}^{-1}$ ) 3 个波段, 以优化中波段为主, 对全波段进行了优化。通过微调光栅的旋转角度, 确保低、中、高波段均位于 CCD 的有效像面上。该光谱仪成像系统的点列图、均方根图和调制传递函数图均符合设计要求。

**关键词:** 光谱仪; 高分辨率; 旋转光栅

**中图分类号:** O 436 **文献标志码:** A

## Design of a high-resolution rotating grating spectrometer

SHEN Jiaqi<sup>1</sup>, YANG Zhaoqing<sup>1</sup>, FU Wei<sup>1</sup>, WANG Xingyu<sup>1</sup>, GUO Hanming<sup>1,2</sup>

(1. School of Optical-Electrical 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:** A high-resolution and wide-spectral Raman spectrometer based on a Czerny-Turner (C-T) optical configuration with a rotating grating was designed to address the trade-off between resolution and spectral coverage in grating spectrometers. The excitation wavelength was set at 532 nm, with a spectral range of 80~3 000  $\text{cm}^{-1}$  with a resolution of 1.2  $\text{cm}^{-1}$ . The spectral range was divided into three bands: low (80~1 450  $\text{cm}^{-1}$ ), medium (855~2 225  $\text{cm}^{-1}$ ), and high (1 630~3 000  $\text{cm}^{-1}$ ). Optimization was primarily focused on the medium band, while considering the entire frequency band. By fine-tuning the rotation angle of the grating, the low, medium, and high bands were all located on the effective image plane of the CCD detector. The point spread function, root-mean-square (RMS) wavefront error, and modulation transfer function (MTF) of the imaging system all met the design requirements.

收稿日期: 2023-03-13

基金项目: 上海市地方能力建设项目 (21010502900)

第一作者: 申佳琪 (1998—), 女, 硕士研究生, 研究方向为光学系统设计。E-mail: [sira\\_shenjq@163.com](mailto:sira_shenjq@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](mailto:hmguo@usst.edu.cn)

**Keywords:** spectrometer; high resolution; rotating grating

## 引言

光谱仪是目前进行物品无损检测的最优选择之一<sup>[1]</sup>, 它可以利用光谱技术反映物质分子的结构情况, 对物质进行定性定量分析。其中光栅光谱仪因为其材料检测的广泛性, 样本检测的便捷性和实验过程的快捷性<sup>[2]</sup>, 被广泛用于材料、生物化学、医疗以及考古等领域。随着技术发展和应用场景的拓展, 小型化、现场化、宽光谱、高分辨率成为了光栅光谱未来发展的重要方向。

宽光谱和高分辨率有利于完整的表征物质信息。大多数标准的光谱仪的分析范围是  $100 \sim 4000 \text{ cm}^{-1}$ <sup>[3]</sup>, 然而, 某些材料在  $100 \text{ cm}^{-1}$  以下会出现一些特征峰, 可应用于测量药物中的异构体、某些金属氧化物和盐类、半导体超晶格<sup>[4]</sup>等, 这些峰无法在标准光谱仪中被检测到。在光谱仪的实际应用中, 更高的分辨率可以获得更多的光谱信息。中低分辨率的光谱仪可用于不同物质之间的区别鉴定, 但是对于一些细微的峰位或峰型变化, 例如材料应力、同一物质的不同晶型区别等没有办法检出。由于 CCD 有效像元数有限, 目前市面上的小型手持光谱仪很难同时达到宽光谱和高分辨率的要求。如海光电的 EVA-500 系列光谱仪的光谱范围达到了  $200 \sim 3200 \text{ cm}^{-1}$ , 但分辨率仅为  $10 \text{ cm}^{-1}$  左右; 杨洁等<sup>[4]</sup>设计的光谱仪分辨率高达  $1.8 \text{ cm}^{-1}$ , 但光谱范围仅为  $10 \sim 1800 \text{ cm}^{-1}$ 。光谱范围过窄或者分辨率过低都会导致待测样本信息的丢失。

本文基于对称式 Czerny-Turner 结构, 在传统固定 C-T 光路结构的基础上, 引入旋转光栅, 将设计波段分为低、中、高 3 个波段, 针对不同波段对于光栅旋转角进行再次优化, 在保证高分辨率的同时, 充分利用有效像元素, 扩展了检测光谱范围, 完成了一款激发波长为  $532 \text{ nm}$ , 光谱范围为  $80 \sim 3000 \text{ cm}^{-1}$ , CCD 像元素为 2048 个, 分辨率为  $1.2 \text{ cm}^{-1}$  的低波数宽波段高分辨率的拉曼光谱仪的光学设计。

## 1 光路结构设计

### 1.1 Czerny-Turner 结构

目前常见的平面光栅光谱仪多选用 Czerny-Turner 光路。该结构使用两片凹面反射镜作为准直镜和聚焦镜, 用平面光栅作为色散元件<sup>[5]</sup>。这种光路结构性能稳定, 便于消除杂散光, 且结构紧凑, 易于设计机械结构<sup>[6]</sup>。Czerny-Turner 光路分为 M 型和交叉型, 交叉型结构更为紧凑, 但是分辨率稳定性较差<sup>[7]</sup>, 因此本文选择 M 型结构的 Czerny-Turner 光路进行设计。

如图 1 所示, 入射光线经狭缝入射到准直镜 M1, 经准直后射入平面衍射光栅, 分光后不同波长的光线经由聚焦镜 M2 聚焦到 CCD 上, 得到展宽的衍射光谱, 再被探测器接收。图 1 中  $\alpha$  是准直镜上的离轴角,  $\beta$  是聚焦镜的离轴角,  $i$  是光线在光栅上的入射角,  $\theta$  是中心波长在光栅上的衍射角,  $f_1$  是准直镜的焦距,  $f_2$  是聚焦镜的焦距,  $H_1$  是准直镜到光栅中心水平方向的距离,  $H_2$  是聚焦镜到光栅中心水平方向的距离,  $\varphi$  是像面的倾斜角度,  $\delta$  是光栅的倾斜角度。

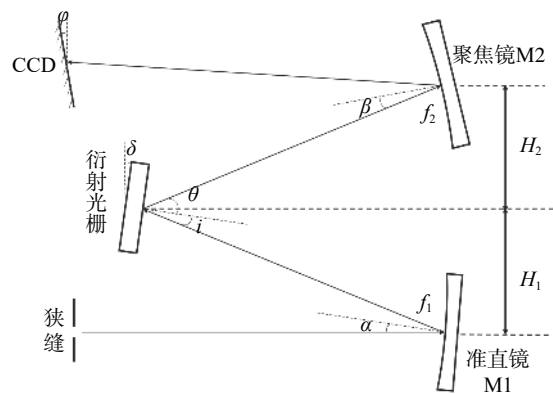


图 1 M 型 Czerny-Turner 光路

Fig. 1 M-type Czerny-Turner light path

### 1.2 指标要求和参数选择

目前市面上常用的狭缝从  $10 \mu\text{m}$  至  $100 \mu\text{m}$  不等。一般来说, 在其他参数不变的情况下, 狭

缝越窄,光栅常数越小,分辨率越高,但进光总量也越小<sup>[3]</sup>。此光学系统的狭缝宽度为 10 μm。

拉曼位移(即拉曼波数  $\omega_0$ )是入射激光波长  $\lambda_i$  和拉曼散射光波长  $\lambda_s$  之差,即

$$\omega_0 = \frac{10^7}{\lambda_i} - \frac{10^7}{\lambda_s} \quad (1)$$

式中:入射激光波长  $\lambda_i$  与拉曼散射光波长  $\lambda_s$  的单位为 nm;拉曼位移  $\omega_0$  的单位为  $\text{cm}^{-1}$ 。该光路系统的光谱范围为  $80 \sim 3000 \text{ cm}^{-1}$ ,入射激光波长为 532 nm。依据式(1),可计算出拉曼散射光波长范围为 534 ~ 633 nm。

光谱仪中最核心的光学器件是光栅,其分光能力直接决定光谱仪的性能。光栅的闪耀波长和光谱范围满足等式<sup>[8]</sup>

$$\lambda_\phi = \lambda_1 + \frac{1}{4}(\lambda_2 - \lambda_1) \quad (2)$$

式中: $\lambda_\phi$  为闪耀波长; $\lambda_1$  和  $\lambda_2$  为初始波长和截止波长。由式(2)可计算出闪耀波长  $\lambda_\phi = 559.9748 \text{ nm}$ 。查询目前市面上已有的光栅,选择刻线密度  $n = 1800 \text{ line/mm}$ ,闪耀波长为 500 nm,全波段衍射效率大于 45% 的平面衍射光栅。考虑到后续机械装调,光栅工作面宽度大小选定为 25 mm×25 mm。

光栅的色散定义为

$$d(\sin i \pm \sin \theta) = m\lambda \quad (3)$$

式中: $d = 1/n$  为光栅常量; $n$  为光栅刻线密度; $\lambda$  为衍射波长; $m$  为衍射级次,一般取+1。

由于 M 型结构的 Czerny-Turner 光路是离轴系统,因此系统会产生一定的彗差,并导致谱线的单边扩散、分辨率和成像质量的降低。根据 Shafer 等<sup>[9]</sup> 提出的消彗差方法,光路参量须满足等式

$$\frac{Y_1}{Y_2} = \frac{\sin \frac{\alpha}{2}}{\sin \frac{\beta}{2}} = \left( \frac{\cos \theta}{\cos i} \right)^3 \quad (4)$$

光谱分辨率指的是光谱仪能够识别两条相邻谱线的能力。准直镜的焦距和孔径大小决定了光学系统的分辨率和球差。准直镜 M1 的焦距  $f_1$  和分辨率之间须满足等式

$$\Delta\lambda = \frac{a \cos i}{n f_1} \quad (5)$$

式中  $a$  为入射狭缝宽度。

聚焦镜 M2 的焦距  $f_2$  须满足等式

$$f_2 = \frac{l \cos \theta \cos \phi}{d(\lambda_2 - \lambda_1)} \quad (6)$$

式中  $l$  为 CCD 像面的有效长度。

本光路系统的 CCD 选择英国 Raptor Photonics 公司型号为 Toucan 261 的深度制冷型 CCD ( $-40 \sim -70 \text{ }^\circ\text{C}$ )。该款深度制冷 CCD 对于光谱仪工作时产生的暗电流、热电噪声以及温漂具有较强的抑制作用,信噪比高,检测灵敏度高。Toucan 261 的像素大小为  $15 \mu\text{m} \times 15 \mu\text{m}$ ,可用于  $30.7 \text{ mm} \times 4 \text{ mm}$  ( $2048 \text{ 像素} \times 264 \text{ 像素}$ ) 大小的图像区域,得出 CCD 像面的有效长度为  $l = 30.7 \text{ mm}$ 。

根据龙亚雪<sup>[10]</sup> 提出的分辨率  $\Delta\lambda$  与波长间隔为  $\Delta\lambda$  的两光波之间的间距  $d$  的关系,有

$$\begin{cases} d > \frac{D_3}{2} \\ d > D_4 \\ d(\lambda_2 - \lambda_1) / \Delta\lambda < n \cdot D_3 \end{cases} \quad (7)$$

式中: $D_3$  为 CCD 像元尺寸; $D_4$  为光学系统光斑直径; $n$  为有效像元数。由式(7)可得, $d > 15$  且  $d < 11$ ,该设计参数无法由传统固定光栅式的 Czerny-Turner 光谱仪实现。因此暂时对 CCD 大小不做限制,以完成所需要的波段和波段范围为计算目标,以狭缝面中心为全局坐标参考,以狭缝-聚焦镜所在水平面作为  $xoz$  面,建立坐标轴。在 Zemax 系统中使用坐标间断点来描述距离以及正负,计算出光谱仪系统初始光路结构的特征参数和初始坐标位置,详见表 1。

## 2 实验结果和分析

### 2.1 Zemax 仿真设计

基于上节中获得的光路结构,使用 Zemax 对该光学系统进行模拟仿真并对光学参数进行优化。具体参数为:激发波长 532 nm,波段范围为  $80 \sim 3000 \text{ cm}^{-1}$  (即  $534.273 \sim 633.08 \text{ nm}$ ), NA

表 1 原始光学系统结构参量及光学元件特征参量

Tab. 1 Original optical system structure parameters and optical component characteristics parameters

光学元件	Tilt about $X/(\circ)$	Decenter $Y/\text{mm}$	Thickness $Z/\text{mm}$	$f/\text{mm}$	$D/\text{mm}$
准直镜	5.378	0	110.534	363.870	15
衍射光栅	29.000	16.000	-92.000		
聚焦镜	10.6	60.000	130.000	307.000	40
CCD	0	200.000	-160.000		

值取 0.1。低、中、高波长分别选取 534.27 nm、579.4752 nm、633.0319 nm, 分别在低、中、高波长间隔  $1.2 \text{ cm}^{-1}$  处, 即分别间隔 0.035 nm、0.0403 nm、0.0481 nm 处设置一个波长, 用来检验所设计的光谱仪能否满足设计的  $1.2 \text{ cm}^{-1}$  分辨率。

按照狭缝、准直镜、光栅、狭缝、聚焦镜的顺序依次摆放好光学元件, 调整光学元件的高度、距离和倾斜角度。在搭建出初始结构后, 通过逐步手动调整和操作数对整体光学结构进行优化。在操作数优化中, 对于默认优化设置(Default Merit Function), 在 Optimization Function and Reference 栏中, 第一项和第三项选择 RMS 和 Centriod, 第二项针对不同优化目标可选 Spot Radius 和 Wavefront。因光谱仪系统是分光系统, 因此勾选 “Ignore lateral color”。默认优化设置中, 将整个光学系统按光路通过光栅前后分为两个部分进行优化, 即光栅的各项参数分别与准直镜或聚焦镜的各项参数设为变量进行优化。选择合适的操作数, 对于不同的变量设置不同的

权重, 进行操作数优化, 并辅以手动调整结构, 多次对于系统进行优化。多次优化后, 使得光学系统全波段 RMS 基本平稳, 接近衍射极限, 判断此时的系统结构达到了所需要的分辨率和成像质量要求。因不考虑 CCD 有效像面长度, 为达到设计指标, 光谱宽度大于 CCD 有效像面长度。

图 2 为优化好的模拟光路。表 2 为优化后的各项光学参数。

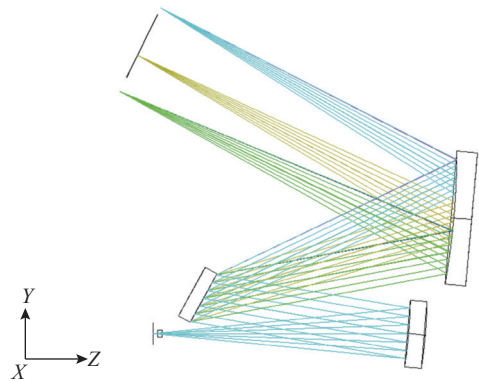


图 2 优化后的光路图

Fig. 2 The optimized optical path

表 2 优化后光学系统结构参量及光学元件特征参量

Tab. 2 Optimized optical system structure parameters and optical element characteristics parameters

光学元件	Tilt about $X/(\circ)$	Decenter $Y/\text{mm}$	Thickness $Z/\text{mm}$	$f/\text{mm}$	$D/\text{mm}$
准直镜	4.893	0	110.534	363.6784	15
衍射光栅	28.800	16.000	-92.000		
聚焦镜	5.090	50.000	120.000	307.2622	30
CCD	26.000	130.000	-135.200		

将全波段  $80 \sim 3000 \text{ cm}^{-1}$  分为  $80 \sim 1450 \text{ cm}^{-1}$ 、 $855 \sim 2225 \text{ cm}^{-1}$ 、 $1630 \sim 3000 \text{ cm}^{-1}$  3 个波段, 在目前优化的全波段光栅光谱仪结构上, 采用旋转光栅, 使得光栅以中心位置沿着子午方向为转

轴旋转, 即改变 Zemax 中的光栅项的 tilt about  $X$  项, 使得在不同的光栅旋转角度上, 不同波段的光线都能够落入 CCD 的有效探测区域内。首先优化中间波段, 将 Zemax 中的光栅项的 tilt

about  $X$  项设为唯一变量, 以奈奎斯特频率下像面各个波长的调制传递函数为优化目标, 优化得到光栅倾斜角度为  $28.8^\circ$ 。对于低波段和高波段以同样的方式进行优化, 得出相应的光栅倾斜角

度为  $27.5^\circ$  和  $29.5^\circ$ 。

## 2.2 仿真结果分析

优化后低、中、高波段的光路模拟图见图 3。

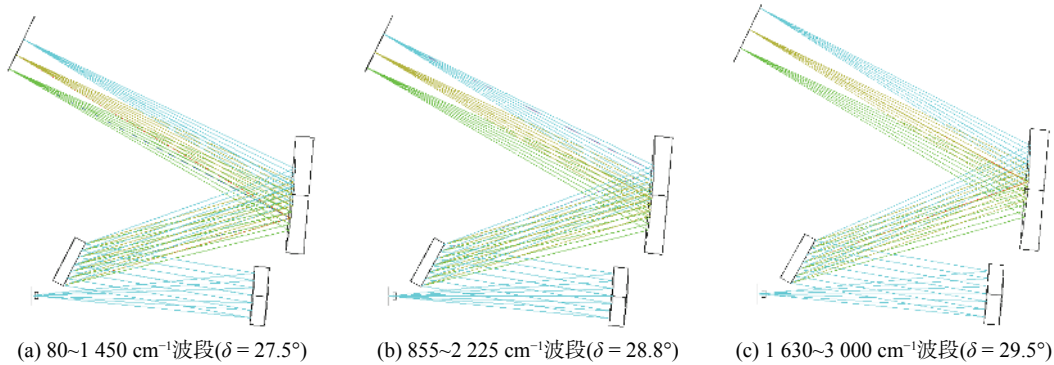


图 3 优化后的光路图

Fig. 3 The optimized optical path

为了让全波段的人射光都能够打在 CCD 的有效像面上, 从低波段到高波段, 光栅总共沿顺时针方向旋转了  $2^\circ$ , 恰好使得低、中、高波段的光线都能被有效探测。优化后整体结构较为合理, 器件之间无相互重叠, 光线未被遮挡, 且考虑到后续机械加工, 为夹具摆放留出了需要的空间。

光学系统的成像质量主要由点列图、均方根 (RMS) 半径图和调制传递函数 (MTF) 曲线等来评价。根据点列图可知点像的形状、弥散斑的大小以及光斑的能量分布等, 其分布直接反映出相邻两波长的光斑在像面上能否分开。均方根 (RMS) 半径图分为弧矢方向 (Spot  $X$ ) 和子午方向 (Spot  $Y$ ), 分别反映全波段在弧矢方向和子午方向的光斑的均方根半径<sup>[4]</sup>。MTF 图也包括弧矢方向 (Spot  $X$ ) 和子午方向 (Spot  $Y$ ) 两个方向的成像曲线, MTF 曲线反映出成像的亮度、轮廓以及细节等<sup>[11]</sup>, 一般两个曲线与坐标轴围的面积越多, 其成像质量越好。在实际的拉曼光谱仪设计中, 一般只要求子午方向的 MTF 曲线值在奈奎斯特频率下达到 30% 以上。奈奎斯特频率计算式为

$$\varepsilon = \frac{1}{2 \times T} \quad (8)$$

式中:  $T$  为 CCD 单个像元尺寸。在本光学系统的设计中,  $T=15 \mu\text{m}$ 。可计算出此系统的奈奎斯

特频率为  $33.33 \text{ lp/mm}$ 。

图 4 为统优化后  $0 \sim 1450 \text{ cm}^{-1}$ 、 $855 \sim 2225 \text{ cm}^{-1}$ 、 $1630 \sim 3000 \text{ cm}^{-1}$  波段的子午和弧矢方向均方根 (RMS) 的半径图。图 4(a)、(c)、(e) 为光斑在弧矢方向的均方根 (RMS) 的半径图, 可以看出, 低、中、高波段的光斑半径大小分布均匀, 在  $\delta = 29.5^\circ$ ,  $\lambda = 3000 \text{ cm}^{-1}$  处, RMS 达到最大值  $1235 \mu\text{m}$ 。选用的 CCD 的弧矢方向像面宽度为  $4 \text{ mm}$ , 而优化后全波段的 RMS 小于  $2000 \mu\text{m}$ , 未超出探测器 CCD 的有效接收范围, 弧矢方向的光线能量能够被全部吸收, 满足设计要求。图 4(b)、(d)、(f) 为光斑在子午方向的均方根 (RMS) 的半径图, 在整个波段范围内, 光斑均方根半径在  $6 \sim 12 \mu\text{m}$  之间, 单个光斑尺寸较小, 光斑大小分布均匀, 成像性能稳定。

图 5(a)~(c) 分别为  $532 \text{ nm}$  光路系统  $80 \text{ cm}^{-1}$ 、 $1550 \text{ cm}^{-1}$  和  $3000 \text{ cm}^{-1}$  波长在低、中、高波段相应旋转角度时的点列图。可以看出, 点列图集中规则, 满足瑞利判据条件, 可以明显区别相隔  $1.2 \text{ cm}^{-1}$  的两个波长, 满足分辨率要求。全谱段成像质量良好, 3 个波段的光斑集中、分布均匀、边缘清晰; 在长波段处, 系统的彗差较大, 因为非对称的 C-T 光路结构没有办法完全消除彗差, 并且二次优化时旋转了光栅角度, 导致像质下降。3 个点列图中, 两光斑中

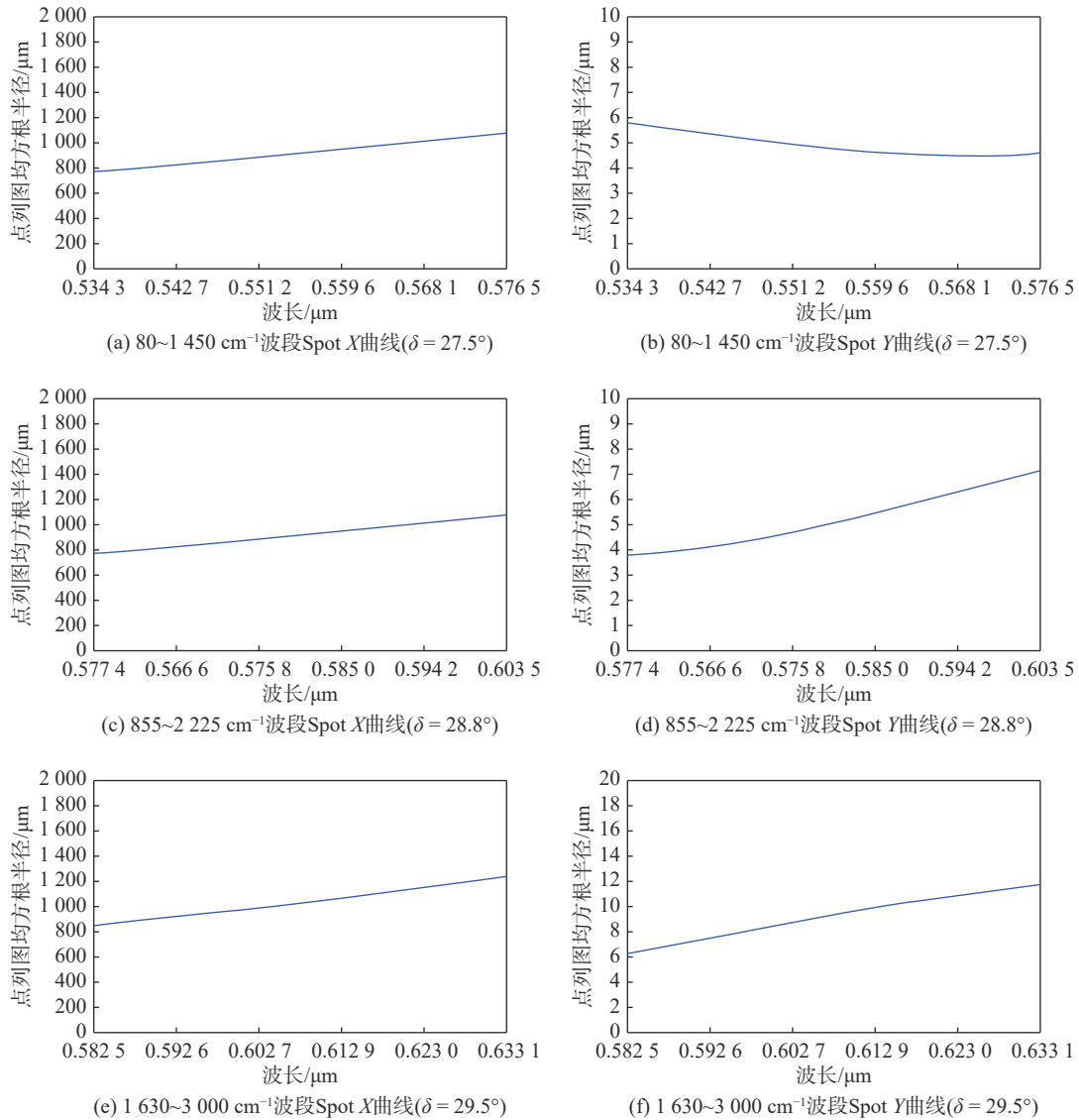


图 4 优化后均方根(RMS)曲线

Fig. 4 Optimized RMS curve

心距离微分为  $14\ \mu\text{m}$ 、 $17\ \mu\text{m}$ 、 $22\ \mu\text{m}$ ，而 CCD 单个像元尺寸为  $15\ \mu\text{m} \times 15\ \mu\text{m}$ ，说明间隔  $1.2\ \text{cm}^{-1}$  的两个波长可以落在两个像面上，系统可以明显区分相邻的两个波长，满足分辨率要求。

图 6 为系统优化后的波长为  $80\ \text{cm}^{-1}$ 、 $1540\ \text{cm}^{-1}$ 、 $3000\ \text{cm}^{-1}$  的波长在低、中、高波段相应旋转角度时，空间频率为  $33.33\ \text{lp/mm}$  处的 MTF 曲线图。中波段的 MTF 曲线弧矢方向的值接近 30%，低波段和高波段因光栅旋转导致像质受到影响，MTF 只有 10%，但是整体下降平缓，也可判断为像质较好，整体不存在细节大部分丢失的情况，满足设计要求。

### 3 结 论

本文采用 M 型 Czerny-Turner 结构的平面衍射光栅光谱结构，根据参数要求，计算出一个理想的初始结构，将计算数据通过 Zemax 设计软件进行仿真，通过多次手动及操作数自动优化光学元件的位置和旋转角，使得最终系统符合我们的分辨率和光学质量要求。在此基础上，对光栅旋转角进行再次优化，使得光谱仪在低、中、高 3 个波长时，在不同旋转角度下可以刚好打在 CCD 像面上，充分利用有效像面，实现了光

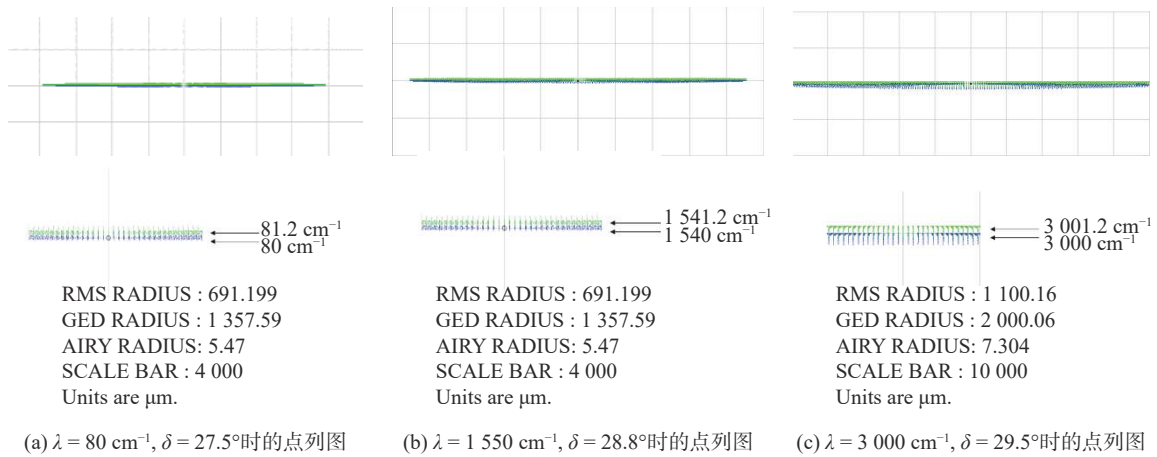


图 5 像面光斑点列图

Fig. 5 Light spot sequence diagram of image plane

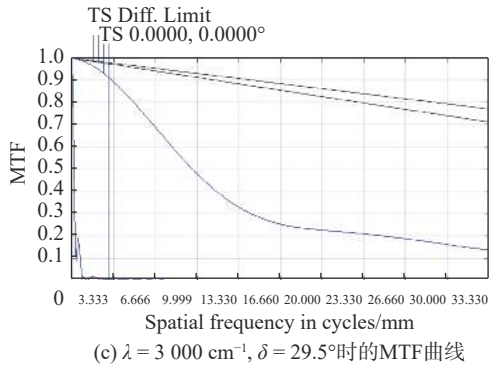
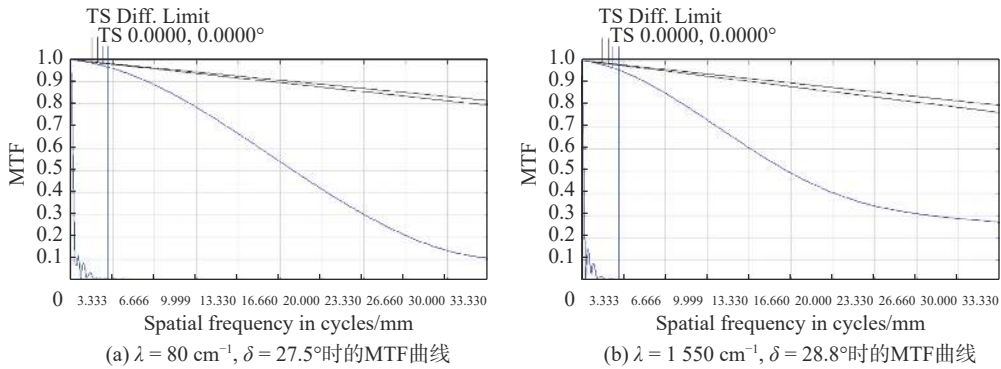


图 6 优化后系统 MTF 曲线

Fig. 6 MTF curve of the optimized system

栅光谱仪高分辨率和宽波段同时满足的设计要求，为便携式光谱仪进行宽波段、高精度、低成本的测量提出了一个可行的方案，具有一定参考价值。

参考文献:

[ 1 ] ORLANDO A, FRANCESCHINI F, MUSCASC C. et al.

A comprehensive review on raman spectroscopy applications[J]. *Chemosensors*, 2021, 9(9): 262.  
 [ 2 ] 孙振华, 黄梅珍, 余镇岗, 等. 便携式拉曼光谱仪现状及进展 [J]. *激光与光电子学进展*, 2014, 51(7): 070001.  
 [ 3 ] 彭雪峰, 魏凯华, 刘艳萍, 等. 高分辨率 Czerny-Turner 光谱仪光学系统设计 [J]. *光子学报*, 2014, 43(10): 162 – 166.  
 [ 4 ] 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.
- [5] 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.
- [6] 刘康. 微型光谱仪关键技术及其应用研究 [D]. 杭州: 浙江大学, 2013.
- [7] 谈哈芝, 杨照清, 杨洁, 等. 低波数高分辨率微型光栅光谱仪的设计 [J]. 光学仪器, 2021, 43(5): 68 – 74.
- [8] 林中, 范世福. 光谱仪器学 [M]. 北京: 机械工业出版社, 1989.
- [9] Shafer A B, Megill L R, Droppelman L. Optimization of the Czerny-Turner spectrometer [J]. *Journal of the Optical Society of America*, 1964, 54(7): 879 – 887.
- [10] 龙亚雪. 高分辨率微型光栅光谱仪光机结构的设计研究 [D]. 上海: 上海理工大学, 2019.
- [11] 杨照清, 杨洁, 方晨霆, 等. 多波长激发高分辨率微型拉曼光谱仪设计 [J]. 光学仪器, 2020, 42(3): 36 – 44.

(编辑: 张 磊)