

文章编号: 1002-1582(2025)04-0468-06

多光纤阵列输入高分辨率微型拉曼光谱仪设计

谭莉莉¹, 杨照清¹, 傅伟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: 研究针对传统光谱仪采用单根光纤入射导致像面利用率不足、拉曼散射光探测能量弱的问题, 提出了一种基于多光纤阵列输入的高分辨率光谱仪设计。通过沿狭缝弧矢方向排列七根入射光纤作为入射光源, 并结合柱透镜与像散校正理论对光路进行优化。该系统采用785nm激发波长, 可在七个视场内实现170~3200cm⁻¹宽光谱覆盖, 全波段分辨率达到7cm⁻¹。实验结果表明, 相较于单根光纤入射时72%的像面利用率, 集束光纤结合柱透镜的设计将光谱仪像面利用率显著提升至97%, 且各光纤传输能量在像面上分布均匀。该方案为需要高能量探测效率和强度的应用场景提供了可行方案。

关 键 词: 微型拉曼光谱仪; 高分辨率; 像散校正; 集束光纤

中图分类号: TP394.1; TH691.9

文献标识码: A

Design of a High-resolution miniature raman spectrometer with Multi-fiber array input

TAN Lili¹, YANG Zhaoqing¹, FU Wei¹, GUO Hanming^{1,2*}

(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: In this study, a high-resolution spectrometer with a multi-fiber array input design is proposed to address the issue of weak Raman-scattered light detection energy caused by insufficient image plane utilization in conventional spectrometers that use a single optical fiber as the incident light source. The design optimizes the optical path by arranging seven incident optical fibers along the sagittal direction of the slit and incorporating a cylindrical lens for astigmatism correction. The system employs a 785 nm excitation wavelength and achieves a broad spectral coverage of 170~3200 cm⁻¹ across seven fields of view, achieving a full-band resolution of 7 cm⁻¹. Experimental results demonstrate that, compared to the 72% image plane utilization achieved with a single fiber configuration, the proposed design—featuring clustered fibers combined with a cylindrical lens significantly improves the image plane utilization to 97%, while maintaining uniform energy distribution across the image plane. This solution offers an effective approach for applications demanding high energy detection efficiency and intensity.

Keywords: miniature-Raman spectrometer; high resolution; astigmatism correction; multi-fiber array

收稿日期: 2024-12-09; 收到修改稿日期: 2025-01-12

基金项目: 上海市地方能力建设项目 (21010502900)

作者简介: 谭莉莉 (1997—), 女, 硕士研究生, 从事光学设计研究。tanlili1005@163.com

郭汉明 (1977—), 男, 教授, 从事超分辨光学显微成像和光谱技术方面的研究。

* 通讯作者: hmguo@usst.edu.cn

0 引言

传统拉曼光谱仪常采用单根光纤输入,限制了拉曼散射信号的收集效率与像面能量强度,尤其在低浓度样品或微弱信号检测场景中,其探测灵敏度显得尤为不足,影响了光谱仪的整体性能表现^[1-3]。

在现有市场产品中,多数微型拉曼光谱仪采用100 μm 光纤传输激光,200 μm 光纤收集拉曼散射信号。为提高拉曼散射信号的收集能力,Dochow等^[4]提出一种双模态拉曼探头设计,使用一根200 μm 光纤传输激光,七根300 μm 光纤收集拉曼散射光。Short等^[5]设计了由27根100 μm 的收集光纤围绕着一根200 μm 中心激发光纤的系统。国内卓立汉光的医用内窥拉曼光谱测试仪也采用了类似的设计:其激光端配置了一根300 μm 的光纤,光谱仪接收端使用六根单芯300 μm 的集束光纤。这一方案利用了集束光纤的优势,但由于其透射式光谱仪的光路设计相较于反射式而言结构较长,不能满足本文微型的应用要求。因此,本文提出一种多光纤阵列输入的反射式光谱仪设计方案。

考虑到线阵CCD探测器在单行采集过程中存在像素电荷存储容量有限的问题,本设计使用以矩阵形式进行能量存储的面阵CCD探测器,该探测器在保证高灵敏度的同时,能够充分利用像素存储能力,进而提升光谱采集的质量与效率。

针对Czerny-Turner反射式光谱仪的入射光源配置,本文提出在狭缝弧矢方向排列七根入射光纤的设计,结合像散校正理论对光路进行优化,在不增加光路复杂性和成本的前提下,提升探测器接收能量强度,有效改善光谱仪在低浓度样品和微弱信号检测中的性能。

1 光路结构设计

1.1 多光纤阵列输入光谱仪光路结构

Czerny-Turner型光路主要由狭缝、准直反射镜、反射式衍射光栅、聚焦反射镜、柱透镜以及探测像面组成,这种设计不仅能够有效避免二次或多次衍射现象,还极大地便利了光学元件的安装调试过程^[6]。Czerny-Turner分为两种类型:交叉型和M型。交叉型光路结构更为紧凑,有利于设计出体积更小的光谱仪;而M型Czerny-Turner光

路则在抑制杂散光方面表现更优,这种结构设计能够在实现更高分辨率的同时保持更优的信噪比。鉴于上述分析,本文所设计的光路最终采用了M型Czerny-Turner结构,旨在光谱分析中达到更优的性能指标。

多光纤阵列输入的M型Czerny-Turner光路结构如图1所示。 R_1 、 R_2 分别代表准直反射镜和聚焦反射镜的曲率半径, α 为准直镜上光线出射角, i 为光线入射至光栅的角度, θ 为中心波长衍射角, φ 表示像面倾斜角度, H_1 是准直镜中心到光栅中心的垂直离轴距离, H_2 是聚焦镜中心到光栅中心的垂直离轴距离, X_1 是准直镜中心到狭缝中心的水平距离, X_2 是聚焦镜中心到光栅中心的水平距离^[7]。

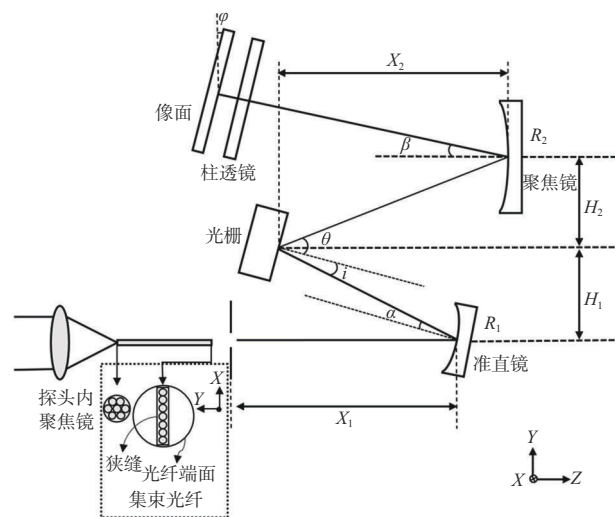


图1 多光纤输入的M型Czerny-Turner光路

1.2 集束光纤排列方案

图2(a)所示为传统光谱仪的单芯X型光纤结构,激光经由一根芯径100 μm 光纤传输至样品,拉曼散射光由一根芯径200 μm 光纤收集。这样的结构在对生物样品或粉末样品进行采集时,由于激光聚焦光斑尺寸较小,容易导致单位面积能量密度过高,灼烧样品表面,影响测量准确性和样品完整性。为解决上述问题,本文提出一种X型结构的7芯集束光纤方案,所采用的光纤为南京盛略公司生产的石英光纤,如图2(b)所示。该方案在探头端将7根直径为200 μm 的光纤呈圆形紧密排列,增大了信号接收面积,旨在配合激光在样品表面形成的较大聚焦光斑,避免因光斑尺寸与光纤口径不匹配造成的能量损耗。集束光纤在光谱仪接收端转为线性排列方式,便于光纤通过狭缝接入光谱系统。这样的设计在保证激发面积足够的情况

下降低了激光在样品表面的能量密度,提升拉曼散射信号总体强度,为生物样品及粉末固体的拉曼检测提供可行方案。

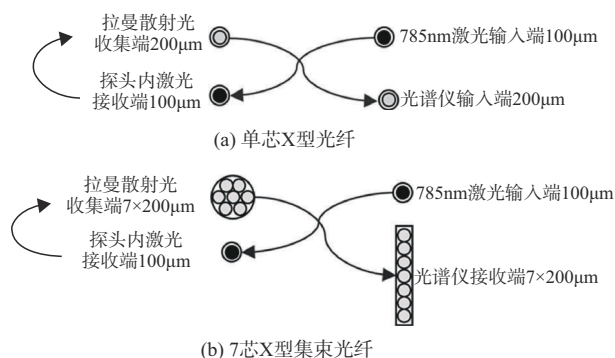


图2 X型光纤结构

1.3 柱透镜像散校正原理

在光谱系统中,像散是影响光谱仪灵敏度和分辨率的主要因素。因此,本设计考虑加入柱透镜消除像散。柱透镜对像散的补偿原理如式(1)~(3)所示,在子午方向上,柱透镜可被视为一个平行平板,光线经过柱透镜产生的位移量可以表示为

$$\Delta L_T = \frac{n-1}{n} t \quad (1)$$

式中, n 代表柱透镜的折射率; t 代表柱透镜的几何厚度。依据高斯公式,光线经过柱透镜后产生的偏移量为

$$\Delta L_S = \frac{f_c L_c}{f_c + L_c} - L_c = S'_S - S_S \quad (2)$$

式中, L_c 代表柱透镜与探测器之间的间隔距离; f_c 则为柱透镜的焦距值。因此,柱透镜产生的像散可以表示为

$$\Delta S' = \Delta L_T - \Delta L_S = \frac{n-1}{n} t + \frac{L_c^2}{f_c + L_c} \quad (3)$$

当 $\Delta S'$ 的值为零时,子午与弧矢方向的像点重合,像散得到校正^[8]。在使用Zemax软件进行优化时,将柱透镜的倾斜角设置为变量,调整弧矢和子午权重比例,经过多次调整就能对系统像散进行明显消除。

1.4 初始结构计算

光谱分辨率是光谱仪能够分辨的最小波长间隔,是衡量光谱仪探测效果的关键指标。光谱分辨率 $\delta\lambda$ 表示为

$$\delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1 \quad (4)$$

式中, λ_1 和 λ_2 分别代表达到分辨率要求时的两相邻波长。光栅的色散方程为

$$d(\sin i + \sin \theta) = m\lambda \quad (5)$$

式中, $d=1/n$ 是光栅常量, n 表示单位长度内刻线条数,本设计选用Optometrics公司生产的 $n=900$ lines/mm的平面反射衍射光栅,衍射级次以 m 表示,取正一级光谱,即 $m=1$, λ 代表中心波长。

由于Czerny-Turner型光路结构是离轴三反系统,不可避免地存在其他像差影响分辨率。因此,光路必须进行像差优化。针对彗差的优化,根据Shafer所提出的消彗差理论可知^[9]

$$\frac{H_1}{H_2} = \frac{\sin \frac{\alpha}{2}}{\sin \frac{\beta}{2}} = \left(\frac{\cos \theta}{\cos i} \right)^3 \quad (6)$$

此外,由于系统内准直镜、聚焦镜的孔径大小的影响,此系统还存在一定的球差,球差也会影响光谱仪最终的分辨率表现。其中准直镜的焦距与分辨率关系遵循公式

$$f_1 = \frac{a \cos i}{m n \delta \lambda} \quad (7)$$

式中, f_1 为准直镜的焦距; a 为狭缝宽度。由式(6)~(7)可知,光入射到光栅的入射角 i 越小,轴外像差越小,因此初始结构计算中, i 尽可能取小值。

聚焦镜的焦距 f_2 也是系统初始结构中重要的指标参数,聚焦镜焦距 f_2 可表示为

$$f_2 = \frac{l \cos \theta \cos \varphi}{n(\lambda_2 - \lambda_1)} \quad (8)$$

式中,CCD接收光谱的有效长度表示为 l ,它的具体数值由所选的CCD型号所决定。在进行初始结构的计算时,通常假设像面保持垂直,即倾斜角 $\varphi=0$,此时 $\cos \varphi=1$,可以理论上计算出聚焦镜焦距 f_2' 。在实际的仿真过程中,像面为了更好地接收光谱信息,会向光谱聚焦点产生一定程度的倾斜,即 $\cos \varphi < 1$,则优化后的聚焦镜焦距 f_2 小于理论计算值 $f_2'^{[10]}$ 。

表1给出系统初始结构中元器件参数, λ_b 为光栅闪耀波长, W 为光栅的宽度, N 为CCD像素数, S 为CCD有效感光面积, a 为狭缝宽度。表2给出每个光学元件优化前初始坐标位置。后期优化时将准直镜、聚焦镜、柱透镜曲率半径及厚度设为变量,优化后使光谱仪达到更好的成像质量。

表 1 系统初始结构元器件参数

光学元件	参数/单位	数值
准直镜	f_1/mm	53.25
	D_1/mm	11.00
聚焦镜	f_2/mm	70.00
	D_2/mm	26.00
衍射光栅	λ_g/nm	500
	$n/(\text{line}\cdot\text{mm})$	900
	W/mm	13.50
柱透镜	f_3/mm	17.50
	D_3/mm	28.00
CCD	N/pixels	2048×250
	$S/(\text{mm}\times\text{mm})$	24.576×3
狭缝	$a/\mu\text{m}$	25

表 2 各元件初始位置坐标

光学元件	厚度 Z/mm	倾斜 Y/mm	偏心 $X/^\circ$
准直镜	47.50	0.00	7.56
光栅	-36.10	9.50	23.50
聚焦镜	46.50	26.30	0.60
柱透镜	-48.10	45.00	9.80
CCD	-13.70	51.00	15.40

2 光学系统仿真和结果分析

2.1 ZEMAX 软件仿真

本文使用 Zemax 光学仿真软件对系统进行建模分析。设定激发波长为 785nm，光谱范围覆盖 795.61~1048.34nm，中心波长取 904.66nm。系统光谱分辨率为 7cm^{-1} ，对应最小相邻波长间隔约为 0.45nm。在光谱仪前端的拉曼探头中，光纤数值孔径 NA 为 0.22，过大的 NA 值会导致光纤中更多背景光进入光谱仪，增加背景噪声，影响光谱最终的信噪比表现^[11]。为此，本系统在光谱仪狭缝后加入限光装置，将入射光束数值孔径降至 0.11。

根据光线追迹原理，结合表 1 所列出的各光学元器件的光学特性参数以及表 2 提供的初始位置坐标数据，在 Zemax 中依次放置光学元件并手动调整光路，便于后续机械装调，光路布局在设计中预留了合适的装配余量。在材料设置中将准直镜、衍射光栅、聚焦镜的材料设置为 MIRROR，柱透镜选用光学性能稳定且常用的 H-K9L 玻璃。完成光路初始结构设置后，使用评价函数对各光学元件关键参数进行优化，包括：曲率半径、厚度、X、Y 偏心、X、Y 倾斜进行优化。表 3 为优化后各元件位置坐标。

表 3 优化后各元件位置坐标

光学元件	厚度 Z/mm	倾斜 Y/mm	偏心 $X/^\circ$
准直镜	48.50	0.00	6.80
光栅	-36.30	9.60	23.89
聚焦镜	46.76	26.86	0.90
柱透镜	-48.55	45.00	9.80
CCD	-13.70	51.00	15.41

在光谱仪系统中，不同波长的光经过光栅在不同角度上发生分离，在序列评价函数设置中需要忽略垂轴色差。优化初期主要参考主光线 Spot Y 值进行局部优化，同时设定评价函数操作数并分配相应权重。通过手动调节元件位置并结合软件的自动优化功能，确保至少相隔 0.45nm 的两波长能够在像面上保持可分辨距离，使整个波段范围内系统满足分辨率要求及其他的评价标准。

2.2 像质分析

在阵列式输入的光谱仪系统的像质评价中采用多种评价方式，包括：点列图（Spot），均方根（RMS）半径图以及调制传递函数（MTF）曲线。点列图直观地反映两相邻波长光斑在像面上的分辨情况。均方根 RMS 半径图分为子午方向（Y 方向）、弧矢方向（X 方向）。光栅刻线方向决定了光谱主要沿着 CCD 的子午方向（Y 方向）分布。因此，子午方向上的相邻两波长必须满足分辨率要求。而弧矢方向（X 方向）上，光斑的尺寸需要控制在 CCD 的有效接收尺寸内，结合上文 CCD 弧矢尺寸可知，应不超过 3mm。MTF 曲线可以反应光学系统的整体轮廓、层次、细节。本拉曼光谱仪设计中使用的是日本滨松生产的 S10141-1108S-01 型号 CCD，根据 CCD 探测器的采样需求，要求子午方向的 MTF 在截止频率处高于 0.1，弧矢方向 MTF 则不做要求。根据采样定理，此系统的奈奎斯特采样频率为 41.667lp/mm。

图 3 表示了本系统在（X=0，Y=0.0125）处，针对低、中、高三个波段中相邻两波长（795.61nm 与 796.06nm，904.66nm 与 905.23nm，1048.34nm 与 1049.11nm）对应的点列图；图 4 则对应系统在边缘视场（X=0.66，Y=0.0125）处的点列图，用于综合评估系统在全视场范围内的分辨能力，从图中可以看出，无论在中心视场还是边缘视场位置，各相邻波长对应光斑在像面上的中心间距均明显大于两个像素宽度，满足本系统所设定的最小分辨间隔要求。

图 5 展示了系统在不同视场位置下的 Spot Y 均方根半径随波长变化趋势。由图可见，系统在

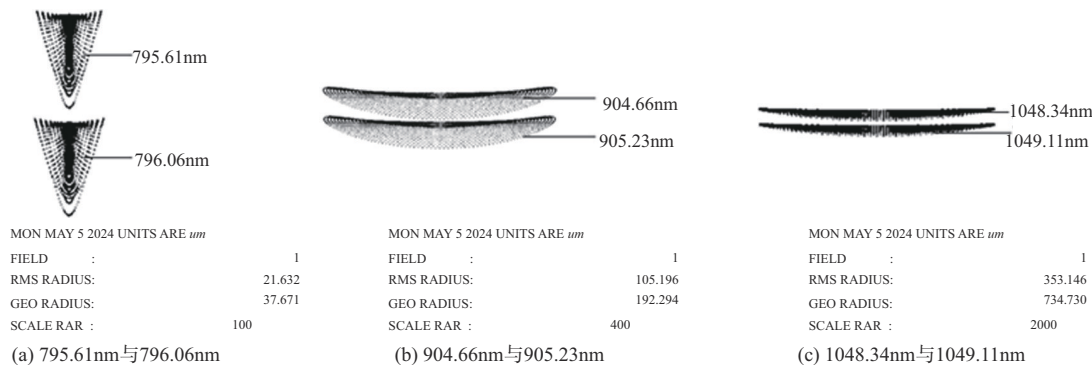


图 3 $X=0mm, Y=0.0125mm$ 视场下相邻波段点列图

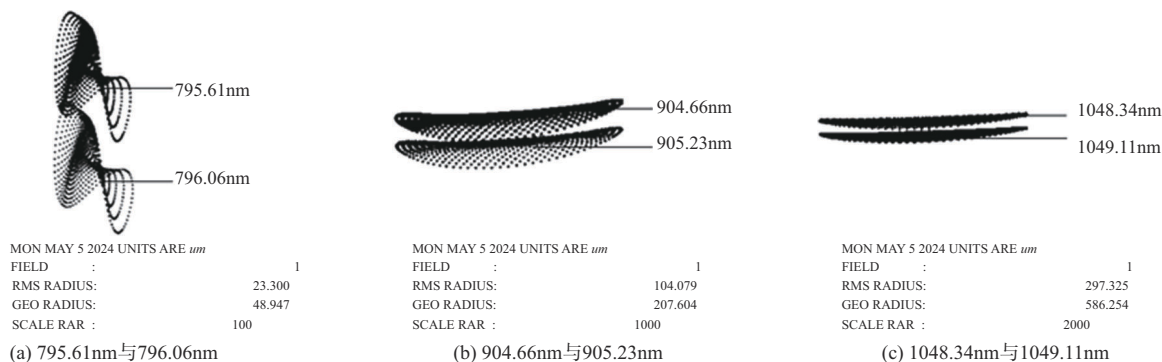


图 4 $X=0.66mm, Y=0.0125mm$ 视场下相邻波段点列图

全视场范围内的光斑尺寸控制在 $9\sim 18\mu m$ 之间, 随着波长从 $795nm$ 增加至 $1050nm$, 光斑半径虽略有上升, 但变化趋势平缓, 未出现剧烈波动或离焦现象, 反映出系统在宽波段内具有良好的像面聚焦能力。进一步地, Zemax 仿真结果显示系统的整体尺寸为 $70mm\times 70mm\times 20mm$, 结构紧凑合理, 符合微型拉曼光谱仪在便携化方面的设计要求。

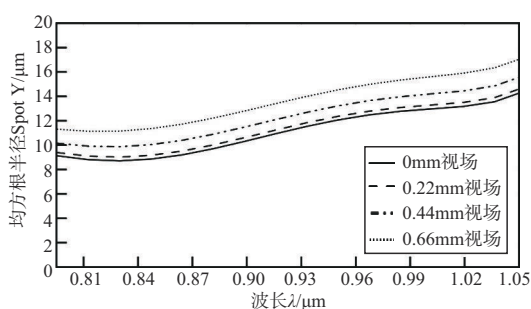


图 5 优化后的 SpotY 曲线图

3 多光纤光谱仪设计方法及能量分析

在实际应用中, 拉曼散射信号强度通常仅为入射光强度的 $10^{-6}\sim 10^{-12}$ 倍, 不易被探测器有效接收。本文提出多光纤阵列输入的方法, 通过在狭缝端增加入射光源数量, 提高像面信号探测强度。为评估不同光学配置下的能量传输效率, 在非序列模式中模拟了光谱仪的光路结构, 并基于光线

追迹的方法开展了三组实验, 在关键光学指标保持一致的前提下, 对像面能量接收效率进行分析。结果表明, 三组实验在 $41.667lp/mm$ 空间频率处 MTF 均高于 0.1 , 符合探测器探测要求。

在实验一中, 系统采用单根光纤作为入射光源传输介质, 设置入射光功率为 $1W$, 仿真结果显示像面上的正常路径能量占比为 77% 。在此基础上, 实验二引入了柱透镜压缩弧矢方向上的光斑尺寸, 入射光功率仍保持为 $1W$, 由于柱透镜引入了额外的光损, 导致像面探测到的正常路径能量占比降低至 70% 。实验三作为本系列的核心实验, 在实验二的基础上在狭缝弧矢方向引入了七根线性排列输入的光纤。在光谱仪指标优化过程中, 为充分利用探测器的像素存储能力, 应避免过度压缩弧矢方向光斑在像面上的几何尺寸。

实验三中, 单根光纤输入光功率为 $1W$, 总输入光功率为 $7W$, 经过光路传输后, 像面接收到的正常路径能量为 $4.872W$, 像面整体能量接收效率为 69.6% 。如图 6 所示, 实验三在保证系统结构紧凑性的前提下, 七根光纤在探测器上产生的正常路径有效光通量占比分别为 10.07% 、 10.04% 、 9.99% 、 9.96% 、 9.93% 、 9.84% 和 9.76% , 各视场在像面上能量分布均匀, 有助于后续光谱信号的稳定采集与分析。

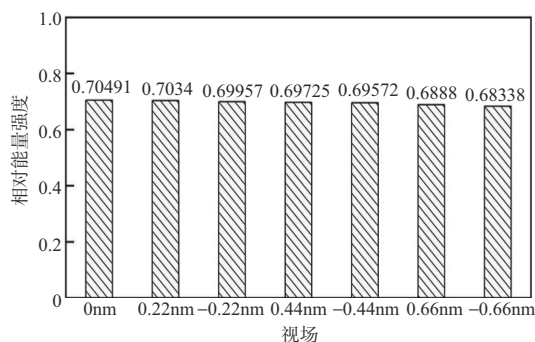


图6 实验三中不同视场在像面上的相对能量强度分析

图7展示了三组实验优化后光路图,通过操作数REAX、DIFF抓取了三组实验中像面弧矢方向的利用率。实验一弧矢方向上的像面使用宽度为2.16mm,利用率为72%;实验二中X方向光斑被柱透镜压缩至1.14mm,利用率下降至38%;实验三因为七根光纤集束入射的配置,使弧矢方向上的像面使用宽度接近CCD的全宽,达到了2.9mm,利用率高达97%。

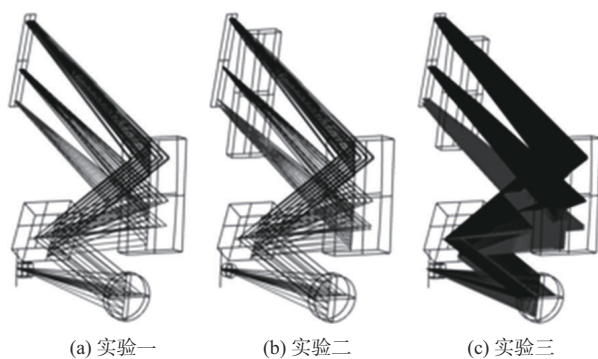


图7 三组实验光路对比图

图8至图10分别展示了系统在795.6nm、904.7nm、1048.3nm处的子午MTF曲线图。涵盖0mm视场、0.22mm视场、0.44mm视场、0.66mm视场。由于负视场MTF曲线与正视场曲线重合,图中仅展示正视场结果。在空间频率41.667lp/mm处,各视场的MTF值均大于0.1,曲线下降平缓,表明系统有良好的光能量传递效率,保证了光学系统整体的轮廓、层次、细节不存在丢失的情况,满足设计要求。

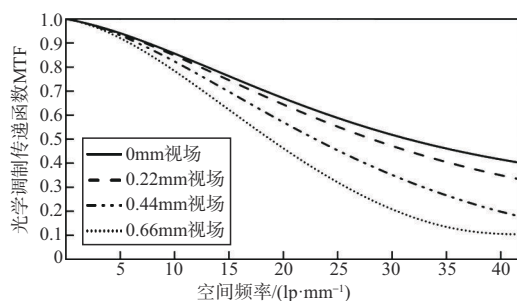


图8 795.61nm处MTF曲线图

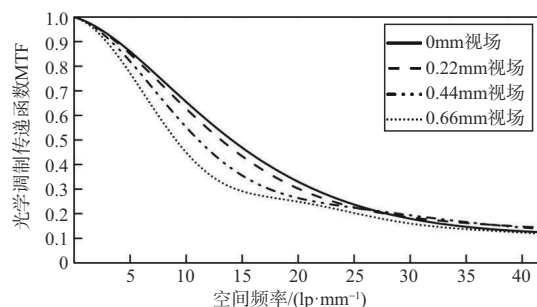


图9 904.7nm处MTF曲线图

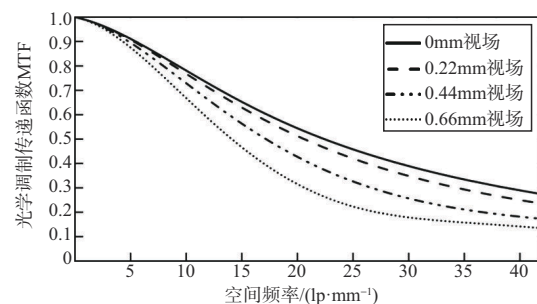


图10 1048.3nm处MTF曲线图

实验结果表明,增加入射光纤的数量可有效提高像面利用率。相较于单根光纤,七根光纤同时入射显著提高了像面探测能量。为解决拉曼散射光信号微弱以及在进行生物样品采集过程中因激光功率过高导致样品灼烧的问题提供了解决方案。尽管多光纤阵列系统在实际应用中可能面临光纤耦合效率和光源非均匀性等挑战。但通过持续优化,有望进一步提升光谱仪的性能和实用性。

4 结论和展望

本研究针对拉曼散射光强度微弱不易被探测器有效接收的问题,提出了一种基于多光纤阵列输入的高分辨率光谱仪设计方案,通过沿弧矢方向排列七根入射光纤增强入射光强度,并结合柱透镜有效校正像散,提高了像面利用率和能量探测强度。该系统采用785nm激发波长,能在七个视场范围内实现170~3200 cm^{-1} 宽光谱覆盖,全波段分辨率达到7 cm^{-1} ,空间频率为41.667lp/mm时系统的子午MTF均高于0.1,满足探测器探测要求。通过非序列模式下的光线追迹路径分析,验证了阵列式光纤在不同位置下像面能量的均匀分布。像面利用率从单根光源配置的72%大幅提升至集束光纤入射后的97%,像面整体探测强度得到显著提升。综上所述,采用多光纤阵列输入的方法,有效提升了拉曼光谱信号探测强度,为解决拉曼散射光微弱问题提供了新思路。在未来的实验中,将进一步优化集束光纤及柱透镜的设计,以减少其对光能传输的影响。

(下转第478页)