文章编号 1674-2915(2009)04-0322-07

高速便携式近红外光栅光谱仪光电系统设计

陈少杰^{1,2},唐玉国¹,巴音贺希格¹,李延超³,于宏柱¹,崔继承¹

(1. 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所,吉林长春130033;

2. 中国科学院研究生院,北京100039;3. 南京理工大学电子工程与光电技术学院,江苏南京210094)

摘要:设计制作了一种基于线阵 CCD 和 USB 2.0 数据采集系统的高速便携式近红外光栅光谱仪。给出了该光谱仪的光 学系统设计,分析了其测控系统的设计方案及特点,并给出了具体实现方法。分光系统采用平面光栅为分光元件,准直 球面反射镜为成像物镜,实现了平谱面和较小的谱线弯曲(<4.2%),利于 CCD 探测器接收。测控系统采用现场可编程 门阵列(FPGA)和 USB 2.0 接口技术,不仅优化了硬件电路结构,而且大大提高了数据采集速度,最快可达 2 MB/s。对 测量结果进行分析,并给出了波长标定结果。实验结果表明,该光谱仪高速便携,波长精度可达 1 nm。 关键 词:近红外光谱技术;线阵 CCD;现场可编程门阵列;USB 2.0;波长标定 中图分类号:TH744.1 文献标识码:A

Design of photometric system of portable high-speed near-infrared grating spectrometer

CHEN Shao-jie^{1,2}, TANG Yu-guo¹, Bayanheshig¹, LI Yan-chao³, YU Hong-zhu¹, CUI Ji-cheng¹

 Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China;
 Graduate University of Academy of Sciences, Beijing 100039, China;
 College of Electronics Engineering and Photoelectric Technology, Nanjing University of Technology and Engineering, Nanjing 210094, China)

Abstract: A portable high speed near-infrared grating spectrometer is designed based on a linear CCD and a USB 2.0 data acquisition system. The optical system of the spectrometer is introduced and the design scheme of the measurement and control system is analyzed, then the concrete implementation methods are given. By taking a plan grating as a beam splitter and a spherical mirror as an imaging objective, the splitting system realizes a spectral plane and a small spectral band(<4.2%), which is conductive to the signal receiving by a CCD detector. Moreover, a Field Programming Gate Array(FPGA) and the USB 2.0 technology are used in the measurement and control system to optimize the hardware structure, so the data acquisition speed has been

收稿日期:2009-04-20;修订日期:2009-06-13

基金项目:国家自然科学基金资助项目(No. 60478043);"十一五"国家科技支撑计划重大项目(No. 2006BAK03A02);国家创新方法工作专项项目(No. 2008IM040700);国家重大科研装备研制项目(No. ZBYZ2008-1);中国科学院重大科研装备研制项目(No. YZ200804);吉林省科技发展计划项目(No. 20070523,20086013)

improved to 2 Mb/s in the best. Finally, this paper analyzes measuring results, which shows that the portable spectrometer can offer the wavelength accuracy up to 1 nm.

Key words: near-infrared spectroscopy; linear array CCD; Field Programming Gate Array(FPGA); USB 2.0; wavelength calibration

1引言

由于近红外光谱技术具有分析速度快、效率 高、无损伤、样品制备简单(甚至不需预处理)、可 在线分析等独有的特点,使其在农业、化工、医学、 军事等众多领域具有重要地位。传统的近红外光 谱仪一般利用单通道光电倍增管实现光电转换, 采用波长扫描机构实现整个光谱范围内的波长扫 描,其测控系统多采用串口或并口进行数据传输。 因此,该类仪器一般体积庞大,测量速度较慢,应 用范围很受限制,故小型化、便携式、实时测量已 成为近红外光谱仪器发展的趋势[1~3]。20世纪 末,各种相关技术,如电子技术、多通道检测技术、 光栅制造技术和光纤技术的不断发展,使研制高 速便携式近红外光谱仪成为可能。本文通过合理 优化系统的光学结构,并采用较先进的电子技术 设计其测控系统,研制了一款高速便携式近红外 光栅光谱仪。系统采用了模块化的设计思路:光 学结构中,分光系统与光源模块可根据实际需要 通过光纤灵活对接;电子学系统中,CCD 探测模 块与后端数据处理模块采用排线连接,可根据光 谱特征洗用不同型号的探测器。实验结果表明, 该近红外光栅光谱仪轻巧便携、测量速度快、分辨 率高、性能稳定、使用方便。

2 光学系统设计

便携式光谱仪系统结构如图1所示。系统的 应用波长为700~1100 nm的近红外光谱波段, 因此,光源系统选用钨灯作为光源。由于短波段 光谱对应用光谱波段存在光谱级次重叠的影响, 因此,在分光系统的入射狭缝处放置截止波长为 680 nm的高通滤波片,可以有效地控制光谱级次 重叠对系统精度的影响。同时,为了实现光谱仪 的轻小型化及测量的灵活性,采用光源系统与分 光系统分离式的结构设计,利用光纤将两部分有 效地连接起来^[4]。此结构可将被测样品置于系 统外部,光源系统出射的光经光纤照射到样品,经 样品漫反射后,由光纤引入分光系统。





分光系统是光谱仪的核心部分,其中以平面 光栅作为分光元件,线阵 CCD 作为接收器件的分 光系统如图 2 所示。由于系统选用 CCD 作为探 测器,使分光系统结构简单紧凑,无活动部件,从 而使波长精度和测量重复性得到了可靠保证^[5], 实现了轻小型化及较高的光谱分辨率。







2.1 光栅的选取

光栅作为分光系统的色散元件,其性能直接 影响仪器的性能,所以光栅参数的选取至关重要。 光栅主要参数的选取从以下几方面进行了考虑^[6]: 1) 光栅的色散性能: 光栅的角色散率 D_{θ} 为:

$$D_{\theta} = \frac{K}{d \times \cos\theta},\tag{1}$$

式中, θ 为光栅的衍射角,K为光谱级数,d为光栅 常数。线色散率为 $D_1 = D_a f_o$

2)分辨率:根据"瑞利判据",光栅可分辨的 最小波长差即分辨率:

$$\Delta \lambda = \frac{\Delta \theta}{D_{\theta}} = \frac{\lambda}{KN}, \qquad (2)$$

式中, $\Delta \theta = \frac{\lambda}{Nd \times \cos \theta}$ 为谱线的半角宽度。系统采用一级光谱闪耀的光栅,即 $K = 1, \lambda$ 取光谱范围最大波长1100 nm,光栅的分辨率应好于系统的分辨率,即 <4 nm(仪器设计目标值),则光栅的衍射单元总数 N > 275。

3)光谱能量:系统采用一级闪耀光栅,选择 合适的闪耀角α,使光能集中在仪器要求的近红 外光谱段,即满足:

$$2\sin\alpha\cos(i-\alpha) = \frac{\lambda}{d}$$
, (3)

根据仪器的工作范围(即 λ 的最大和最小值)和 分光系统的入射角i,即可确定闪耀光栅的参数 $(\alpha, d)_{\circ}$

4)效率:光栅的相对效率 > 0.4 的波长范围 为有用的工作区域:

$$t = \Delta \lambda \frac{K}{d\cos\theta} f \leq \frac{4 \times 10^{-6} \times 1 \times 600 \times 80}{\cos\theta} = \frac{0.192}{\cos\theta},$$

同时应尽可能使可用的狭缝高度增大,以增加系 统能量。本系统选取入射狭缝宽度为0.2 mm,高 度为6 mm。

图 3 系统光线追迹 Fig. 3 Ray-tracing of system

$$\frac{2}{2K+1}\lambda_{\rm b} < \lambda < (\frac{1}{2K-1})\lambda_{\rm b}, \qquad (4)$$

式中, $\lambda_{\rm b}$ = 2 $d\sin\alpha\cos\frac{\delta}{2}$ 为一级闪耀波长, δ 为入 射光与衍射光之间的夹角,K为光谱级数,K=1。

综合考虑上述要求,确定光栅参数 *d* = 1/600 mm、α = 13.9°、N = 6 000、K = 1、闪耀波长 为 800 nm、光栅大小为 10 mm×10 mm。

2.2 球面反射镜

(

准直球面反射镜的尺寸应保证入射光线全部 照射在其反射面上;聚焦球面反射镜为成像物镜, 其尺寸应保证各波长从光栅衍射分开的单色光全 部照射在其反射面上,同时还需考虑对其各种像 差的校正。本系统的准直球面反射镜尺寸为 18 mm×18 mm,焦距f=80 mm;聚焦球面反射镜 尺寸为 36 mm×36 mm,焦距f=80 mm。

2.3 入射狭缝

入射狭缝的宽度 t 应使出射光束所包含光谱 宽度尽可能接近光栅所能达到的理论光谱宽度, 以保证出射光束的单色性,即仪器的色散率以及 分辨率的要求:

$$t = \Delta \lambda \times D_1 = \Delta \lambda \times D_\theta \times f, \qquad (5)$$

将式(1)代入上式得:

图 4 像面处谱线分布 Fig. 4 Spectral distribution on image plane



(6)

1 100 nm的光线,像面处各波长光谱成像如图 4 所示。从图中可以看出,分光系统有效地将相邻 波长的谱线在像面处分开,同时可以根据谱线分 开的距离确定线阵 CCD 的像元尺寸。本系统中 相邻两谱线的中心距离为 50 μm,因此 CCD 两像 元中心距离取为 14 μm 就能使系统分辨率达到 2 nm。

经设计优化后,系统的光学参数如下:

光谱区:700~1100 nm;

系统焦距:80 mm;

物方数值孔径:0.1;

入射狭缝宽度:0.2 mm;

光谱分辨率:2 nm;

光谱弯曲: <4.2%;

色散范围:30 mm;

分光系统体积:110 mm×100 mm×60 mm。

由于该光谱仪选用 CCD 作为探测器,并且要 求具有较高的分辨率和测量精度,所以系统进行 实时测量时,数据量较大,这就要求后端测控系统 应具有较高的数据传输速度和转换精度,并且尽 量提高其信噪比。

3 测控系统设计

由于目前的光谱仪存在体积大、测量速度慢 等问题,所以本文设计的近红外光栅光谱仪采用 基于 CCD 和 USB 2.0 的数据采集系统作为其测 控系统。近几年,虽然此类数据采集系统有了一 定的发展,但其多用于成像系统。也有一些单位 购买商品化数据采集系统作为光谱仪的测控系 统,这样不仅成本高,而且也不利于仪器整体结构 设计。本文针对近红外光栅光谱仪光学性能要求 和数据处理需要,设计了充分满足系统要求的小 体积、高速度的测控系统。

3.1 测控系统框图

测控系统主要由线阵 CCD、A/D 转换模块、 FPGA 和 USB 控制器组成,其结构框图如图 5 所 示。系统上电后,USB 控制器根据 PC 主机命令 完成 FPGA 系统数据采集参数的初始化设置。 CCD 在驱动时序的控制下,输出的负极性信号经 过反向放大和 RC 滤波,进入差分运算放大器,再 经 ADC 采样转换成数字信号。转换后的数字信 号缓存在 FIFO 中,然后 USB 控制器根据 PC 主机 读取命令通过 GPIF 模式与 FPGA 通信,将数据从 FIFO 中读出,上传至 PC 主机,完成 CCD 数据的 采集。根据实际需要建立分析模型,在 Visual C++编译环境下,编写应用程序对读取的数据进 行分析,从而实现该光谱仪的信号测量分析。测 控系统电路板最终面积为 6.5 mm × 7.8 mm,便 于仪器整体结构优化。



图 5 测控系统结构框图

Fig. 5 Schematic diagram of measurement and control system

3.2 线阵 CCD 模块

根据光学系统性能要求,选用了东芝公司生产的型号为TCD2100的CCD。该CCD动态范围大、暗电流小、噪声低、光谱范围适当,具有2160个像元,像敏单元尺寸为14μm×14μm,两相邻像元的中心距离亦为14μm,这样不仅可以保证系统具有较高的分辨率,而且对于像面谱线能量的接收也较为合适。该CCD的光谱响应范围为400~1100 nm,最高工作频率为2MHz,满足该系统性能要求。同时,此芯片内部电路包含采样保持与输出预放大电路,输出信号易于后端处理。

3.3 A/D 转换模块

本系统采用了 AD 公司的 AD9220,它是一款 具有 4 级流水结构的 CMOS、单电源、高性能的 12 位 AD 转换芯片,其最高采样速率为 10 Mb/s,带 宽为 60 MHz,功率为 56 mW。模拟输入电路和采 样保持器采用了差动结构,因此模拟输入可以方 便地接成单端方式或双端差动方式,并具有低噪 声、低失真等优良性能。参考源可以使用片内的, 也可以使用片外的,参考电压的大小根据模拟输入电压范围可以灵活选择。在弱光谱信号探测中,这些性能对于保证转换精度,提高系统信噪比是非常有利的。

AD9220 的转换过程在 CLK 控制下完成,在 设计中要严格控制时钟信号的质量。孔径抖动会 引起信噪比下降,所以对待时钟输入信号应像对 待模拟信号一样进行处理。时钟驱动器的电源应 与数字输出驱动电源分开,避免时钟信号被数字 信号噪声调制。此外,该芯片还有一个溢出位 (ORT),用它可以确定最高有效位是正溢出还是 负溢出,据此可有效控制光信号的强度。

3.4 FPGA 模块

系统中采用 Altera 公司的 CycloneII 系列 EP2C8T144C8 FPGA,其时间延迟为 8 ns,具有 8 256个逻辑单元,内嵌 20 KB 存储器,可以配置 成各种模式的 ROM、RAM 以及 FIFO,在响应速 度、容量上满足系统设计要求^[7]。

本系统利用其内部存储器生成的 FIFO 对 AD 转换后的线阵 CCD 数据进行缓存。同时, CCD 驱动时序的产生、A/D 转换控制、数据传输 以及系统控制均由 FPGA 完成。与 CPLD 配合外 接 FIFO 芯片的电路比较,此电路不仅优化了硬 件结构,减小了仪器体积,而且使系统更加容易实 现同步控制。此外,主要外围芯片均直接与FPGA 连接,这样使硬件电路连接更为灵活,可以通过软 件的设计实现系统要求,减少硬件电路改动的麻 烦。

3.5 USB 2.0 控制器

本系统采用 USB 2.0 总线与主机通信,高速 模式下理论可达到 480 Mb/s,相对串行通信来 说,其数据传输率要高几个量级,在很大程度上改 善了外设和接口之间的矛盾,完全满足大容量图 像高速传输的需要,为实现实时测量分析提供保 障。同时,USB 总线还可以提供稳定的 +5 V,最 大 500 mA 电流的电源,无特殊情况,不必再为设 备加载外部电源。相对其它接口,USB 接口不仅 速度快,即插即用,而且在机械电气特性方面具有 体积小,导线外加屏蔽层,抗干扰性强等优势^[8]。

系统选用了 Cypress 公司的 EZ-USB FX2 系列 CY7C68013 芯片。该芯片是一款高性能的

USB2.0 接口控制芯片,增强型8051 内核,CPU 最高工作频率达48 MHz,内部提供了3个64 byte的缓冲器,并且还有4 Kb的缓冲器空间可以根据具体需要进行配置。CY7C68013 具有两种工作模式:Slave FIFO 式和通用可编程接口(GPIF)模式。GPIF 是 CY7C68013 端点 FIFO 的内部主控制器,它支持所有通用的总线标准,可以与外部ASIC、DSP等直接连接,且 FX2将 USB 端点 FIFO 与外设 FIFO 进行逻辑连接,合二为一,实现与外设的"胶连接",如图6所示。运行过程中不需要微处理器的干预,借助这种处理结构实现了外设与 USB 控制器的高速数据传输。本系统采用了GPIF 传输模式,实验测量 USB2.0 接口速率可达到 30 Mb/s,充分保证了系统的数据传输速度。



图 6 EZ-USB FX2 高速数据传输模式

Fig. 6 High-speed data transfer mode of EZ-USB FX2

4 实验结果

通过与线性拟合的结果比较,本系统采用最 小二乘法的二阶拟合对波长进行标定。把测得的 光强 *I* 与 CCD 像元序数 *n* 对应的光谱图转化为 光强 *I* 波长 λ 对应的光谱图。

4.1 最小二乘法原理

设有 m 个点 (x_i, y_i) ($i = 1, 2, 3 \dots m$), $\varphi(x)$ 为其拟合曲线。定义 $\delta_i = \varphi(x_i) - y_i$ 为 $\varphi(x)$ 与 $y_i \alpha x_i$ 点处的偏差。使用最小二乘原则,则使 $\varphi(x)$ 在 x_i 处偏差的平方和最小,即

$$\sum_{i=1}^{m} d_i^2 = \sum_{i=1}^{m} [\varphi(x_i) - y_i]^2 = min, \quad (7)$$

采用 q 次代数多项式作为最小二乘的拟合函数, 将 $\varphi(x)$ 表示为:

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_a x^a_{\circ} \quad (8)$$

 \Rightarrow

$$s(a_{0}, a_{1}, \cdots, a_{q}) = \sum_{i=1}^{m} \delta_{i}^{2} = \sum_{i=1}^{m} [\varphi(x_{i}) - y_{i}]^{2}, \qquad (9)$$

则多元函数取极值的必要条件为:

$$\frac{\partial s}{\partial a_k} = 0 \quad (k = 0, 1, \dots, q), \qquad (10)$$

解此方程,即可求出 $\varphi(x)$ 中的待定参数 a_0, a_1, a_2 …… $a_{q,0}$

4.2 标定步骤及结果

系统采用低压汞灯的二级光谱进行波长标 定。实验测得如图 7 所示的 *I_r-n* 的光谱图。横坐 标表示 CCD 的像元序数 *n*,纵坐标表示量化后的 相对光强 *I_r*。表 1 列出汞灯光谱中的 4 条谱线与 其相对应的像元序数。



图7 标定前汞灯图谱



表1 汞灯谱线与对应 CCD 像元序数

Tab. 1Several lines in spectrogram of mercurylamp with corresponding pixels of CCD

谱线标准波长(λ)/nm	像元序数 n
809.4 (404.7×2)	855
871.6 (435.8×2)	1 006
1 092.2 (546.1×2)	1 692
1 154 (577 × 2)	1 941

采用最小二乘法的曲线拟合方法, 拟合指数 取 q = 1、2,得到波长 λ 和像元序数 n 的函数关系 如下:

$$q = 1(线性拟合) 时:$$

 $\lambda = 545.589 + 0.318n,$ (11)
 $q = 2(二次拟合) 时:$
 $\lambda = 3.943 + 0.561n -$
 $8.744 \times 10^{-5}n^{2},$ (12)

标定后,I-A 形式的光谱图,如图8所示。



图 8 标定后汞灯图谱 Fig. 8 Spectrogram of mercury lamp after calibration

表2给出了汞灯标定的拟合结果。从表中可 看出,线性拟合的波长最高误差为8.8 nm,二次 拟合波长的最高误差为1.0 nm。证明采用最小 二乘法的二阶拟合对波长进行标定,可有效提高 测量结果精确度,波长误差 <1 nm,采用二次拟合 已经满足系统精度要求。

表 2 标定后实测汞灯谱线波长与标准波长比较

Tab. 2 Comparison of measured wavelengths after calibration with standard wavelengths for mercury lamp

谱线标准	线形拟合	线性拟合	二次拟合	二次拟合
波长/λ	波长(λ)	波长误差	波长/λ	波长误差
809.4	817.5	-8.1	810.4	-1.0
871.6	865.5	6.1	870.6	1.0
1 092.2	1 083.6	8.6	1 093.2	-1.0
1 154	1 162.8	-8.8	1 153.5	0.5

图 9 为装上截止波长为 680 nm 的滤波片后, 用钨灯作光源所测的图谱。测量曲线较为平滑, 噪声较小,初步实验结果理想。经进一步标定、建 模后,该仪器可用于多种不同物质的测量分析。





5 结 论

通过合理设计并优化其光路结构,设计出了 分辨率可达2 nm 且体积较小的近红外光栅光谱 仪。在本设计中,将较先进的图像数字处理技术 应用于光谱仪器设计中,优化了传统光谱仪结构 设计,较大地提高了光谱测量分析速度。目前该 仪器已通过装调测试,实验结果表明,该仪器轻巧 便携、精度高、速率快、性能稳定、成本低,各项性 能指标均已达到设计要求。该类型光谱仪充分发 挥了近红外光谱技术的优势,符合光谱仪器发展 趋势,将有着广阔的应用前景。

参考文献:

- [1] 徐广通,袁洪福,陆婉珍.现代近红外光谱技术及应用进展[J].光谱学与光谱分析,2000,20(2):134-142.
 XU G T, YUAN H F, LU W ZH. Development of mode near infrared spectroscopic techniques and its applications[J].
 Spectroscopy and Spectral Anal., 2000,20(2):134-142. (in Chinese)
- [2] 张军,陈星旦,朴仁管,等. 用于食品成分分析的双探测器近红外光谱仪[J]. 光学 精密工程,2008,16(6):986-992.
 ZHANG J,CHEN X D,PIAO R G, et al. Near infrared spectrometer with double detectors for food component analysis
 [J]. Opt. Precision Eng., 2008,16 (6):986-992. (in Chinese)
- [3] SIESLER H W, OZAKI Y, KAWATA S, et al. . Near-infrared Spectroscopy: Principles, Instruments, Applications [M]. Wiley-Vch Verlag Gmb H, 2002.
- [4] 万峰,孙宏伟,范世福.便携式紫外-可见分光光度计的设计[J].光谱学与光谱分析,2006,26(4):779-783.
 WAN F,SUN H W,FAN SH F. Design of a portable UV-Vis spectrophotometer[J]. Spectroscopy and Spectral Anal., 2006,26(4):779-783. (in Chinese)
- [5] 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.
 HUO J W, MA H T, WANG L Q. Spectrophotometer for full-auto-biochemical analyzer[J]. Opt. Precision Eng.,2003,11 (5):457-460. (in Chinese)
- [6] 吴国安.光谱仪器设计[M].北京:科学出版社,1978.
 WUGA. Spectrometer Design[M]. Beijing:Science Press,1978.(in Chinese)
- [7] 潘松,黄继业. EDA 技术实用教程[M]. 北京:科学出版社,2008.
 PAN S,HUANG J Y. EDA Technical and Practical Tutorial[M]. Beijing: Science Press,2008. (in Chinese)
- [8] 王成儒,李英伟. USB 2.0 原理与工程开发[M]. 北京:国防工业出版社,2004.
 WANG CH R,LI Y W. USB 2.0 Principle and Project Development[M]. Beijing: National Defense Industry Press,2004. (in Chinese)

作者简介:陈少杰(1985—),女,黑龙江宁安人,硕士研究生,主要从事光谱仪器研发及光谱标定技术研究。 E-mail:shaojie.cs@gmail.com 唐玉国(1967—),男,吉林蛟河人,研究员,博士生导师,主要从事生物光谱技术研究。 巴音贺希格(1962—),男,内蒙古鄂尔多斯人,研究员,博士生导师,主要从事光栅理论、光栅制作技术及光谱 技术研究。E-mail:bayin888@sina.com