

文章编号:1002-2082(2018)03-0332-07

空间外差拉曼光谱仪成像镜头光机热集成分析

张纪承^{1,2,3}, 罗海燕^{1,3}, 胡广骁^{1,2,3}, 李志伟^{1,3}, 方雪静^{1,2,3}, 熊伟^{1,3}

(1. 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 安徽 合肥 230031; 2. 中国科学技术大学, 安徽 合肥 230026;
3. 中国科学院通用光学定标与表征技术重点实验室, 安徽 合肥 230031)

摘要:便携式空间外差拉曼光谱仪集成了光学功能镜头、干涉仪组件, 以及探测器和激光器等热辐射器件, 因此仪器在使用过程中存在着较为复杂的热环境, 环境温度变化导致光学系统性能下降。采用光机热集成分析方法, 重点研究了环境温度及热辐射器件对关键器件成像镜头的性能影响。在便携式空间外差拉曼光谱仪光学和结构方案设计的基础上, 建立热-结构耦合模型; 仿真得到成像功能镜头内镜片的间距和面形的变化, 并利用 Zernike 多项式拟合其变化; 将拟合结果代入光学设计软件中进行成像质量评估和分析。结果表明, 在使用环境温度($-10^{\circ}\text{C} \sim 40^{\circ}\text{C}$)范围内, 调制传递函数在光谱仪截止频率 76.9 lp/mm 处对比度均优于 0.38, 满足便携式空间外差拉曼光谱仪的使用要求。

关键词:空间外差光谱技术; 拉曼光谱仪; 光机热集成分析; 成像镜头

中图分类号: TN216

文献标志码: A

DOI: 10.5768/JAO201839.0301006

Thermal/ structural/optical integrated analysis on spatial heterodyne Raman spectrometer imaging lens

Zhang Jicheng^{1,2,3}, Luo Haiyan^{1,3}, Hu Guangxiao^{1,2,3}, Li Zhiwei^{1,3}, Fang Xuejing^{1,2,3}, Xiong Wei^{1,3}

(1. Anhui Institute of Optics and Precision Mechanics, CAS, Hefei 230031, China;

2. University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China;

3. Key Laboratory of Optical Calibration and Characterization of Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

Abstract: The portable spatial heterodyne Raman spectrometer integrates optical lens, interferometer, and thermal radiation devices such as detector and laser. Therefore, the spectrometer has a complex thermal environment, and the change of the ambient temperature can lead to the decline of optical system performance. Aiming at this problem, the method of thermal/ structural/optical (TSO) integrated analysis was used to study the influence of ambient temperature and thermal radiation devices on the performance of imaging lens. Based on the design of the optical system and mechanical structure of the spectrometer, the thermal-structure coupling model of the lens was established, and the changes of the lens spacing and the surface shape were obtained by simulation surface change imaging lens, the Zernike polynomial was used to fit their changes. Finally, the results were coupled in the optical design software to evaluate and analyze the imaging quality. The analysis results show that, in the working ambient temperature($-10^{\circ}\text{C} \sim 40^{\circ}\text{C}$), the design value of the modulation transfer function (MTF) at 76.9 lp/mm is better than 0.38, which meets the requirement of the portable spatial heterodyne Raman spectrometer.

Key words: spatial heterodyne spectroscopy; Raman spectrometer; thermal/structural/optical (TSO) integrated analysis; imaging lens

收稿日期: 2018-01-08; 修回日期: 2018-03-19

作者简介: 张纪承(1992—), 男, 安徽宣城人, 硕士, 主要从事光学工程技术及应用方面的研究工作。

E-mail: zjc1010@mail.ustc.edu.cn

通信作者: 熊伟, E-mail: frank@aiofm.ac.cn

引言

拉曼光谱是一种弹性散射光谱,由印度科学家 C. V. Raman 于 1928 年首次发现。拉曼光谱能反映各种物质特有的分子结构,且对物质本身无破坏性;利用拉曼光谱强度和分子振动与转动强度的正比关系还可进行定量分析,因此,拉曼光谱仪被广泛应用于物质鉴别、化学研究、高分子材料、生物医学、药品检测等领域^[1-2],且随着人们对公共安全、实时检测等领域的日益关注,便携式拉曼光谱仪成为研究热点之一^[1-2]。

国外, B&W TEK(必达泰克)公司已经有集成度非常高的便携式拉曼光谱仪,在 $220 \times 100 \times 50 \text{ mm}^3$ 的体积内集成了光谱仪、激光器、探测器和微型电脑,与此同时, Ocean Optics(海洋光学)、Thermo Scientific(赛默飞)和 B&W TEK 等公司,也相继推出了高灵敏、高分辨便携式拉曼光谱仪^[3]。国内,大连化学物理研究所、浙江大学、长春光机所等单位也相继开展了拉曼光谱仪的研制工作^[4]。上述研究机构大部分采用了光栅光谱仪的技术原理,光通量受限于入射狭缝宽度,因此,该类型的光谱仪主要针对原位测量的应用条件,限制了其应用领域。

空间外差光谱技术是在 20 世纪 70 年代提出概念,到 90 年代因面阵探测器技术的进步而快速发展起来的一种新型光谱分析技术,由于具有集成度高、无运动部件、体积小、重量轻、功耗低等特点,较为适应遥感监测技术小型化、模块化、标准化发展的趋势^[5]。2011 年,英国 Surrey 大学空间中心与美国 South Carolina^[6] 大学化学与生物化学系的研究人员首次提出了将空间外差光谱技术与拉曼探测相结合的设想,并计划应用于化学领域的物质成分鉴别。与此同时,受到 NASA 重视,并论证了该技术应用于行星探测的方案。

在国内,中科院安徽光机所正积极开展基于该技术的大气温室气体遥感探测仪器的研究^[7],并成功研制了高光谱原理样机并开展了机载验证试验。并于 2015 年,开展了远程拉曼空间外差干涉光谱仪试验平台的搭建,获取了部分固态、液态物质的拉曼光谱,发展了相关的拉曼光谱复原算法。目前,正致力于便携式拉曼光谱仪的研制^[8]。

1 便携式空间外差拉曼光谱仪原理

空间外差拉曼光谱仪主要由激光器、准直镜头、干涉仪、成像镜头、探测器等组成,其整体布局如图 1 所示。激光器发出的激光通过光纤汇聚至被测物体上,被测物体上的拉曼散射光、瑞利散射光由拉曼探头收集并通过光纤汇聚至准直镜头,通过准直镜头的光经 50/50 分束器后分别到达光栅,经光栅衍射后重新至分束器形成干涉光,经成像镜头至探测器形成干涉条纹。假设拉曼探头收集的拉曼散射光信号为 $R(\sigma)$,则沿光栅衍射方向(即 x 方向)的干涉信号 $I(x)$ 可由(1)式得出,空间频率由(2)式得出^[8],对(1)式进行傅里叶变换后可得被测物质散射的拉曼光谱。

$$I(x) = \int_0^\infty R(\sigma)(1 + \cos[2\pi(4(\sigma - \sigma_0)x \tan\theta)])d\sigma \quad (1)$$

$$f_x = 4(\sigma - \sigma_0) \tan\theta \quad (2)$$

式中: σ_0 为 Littrow 波数; θ 为 Littrow 角。

空间外差拉曼光谱仪的分辨能力与光谱分辨率分别由(3)、(4)式给出

$$R = 2GW \quad (3)$$

$$\delta\sigma = \frac{\sigma_0}{R} \quad (4)$$

式中: G 为光栅刻线密度; W 为被照亮的光栅宽度。

光谱范围由(5)式给出

$$\Delta\sigma = \frac{N\delta\sigma}{2} \quad (5)$$

式中: N 为探测器光谱维的像元数。

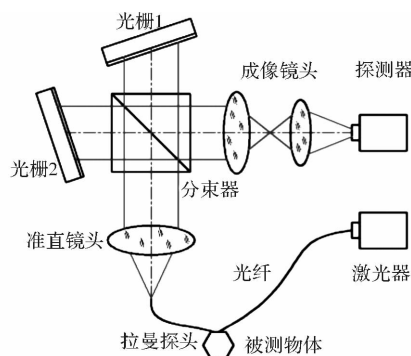


图 1 空间外差拉曼光谱仪结构布局图

Fig. 1 Layout of spatial heterodyne Raman spectrometer

便携式空间外差拉曼光谱仪在使用过程中,激光器和探测器会同时辐射较多热量,且 $-10^\circ\text{C} \sim 40^\circ\text{C}$ 使用环境温度变化也较为恶劣。环

境温度变化及热辐射导致玻璃材料的热折射率变化、材料热膨胀系数的不匹配导致零件产生的刚体位移及面形变化,最终恶化其探测性能,因此,仪器需要在光机设计时考虑其耐热性。

干涉仪组件为其核心部件,温度变化会导致其光谱分辨率和光谱范围变化,可通过复原光谱过程中利用已知光谱特征,对复原光谱进行拉伸和平移校正其影响^[9];同时,设计时尽量使其远离热载荷,并采取相应隔热措施。成像镜头对定域面干涉条纹进行比例缩放,由探测器焦面接收,故成像镜头与探测器相连接,需遮挡外部杂散光的同时完成精密调焦;温度变化会导致成像系统离焦,离焦使得不同空间频率的干涉条纹对比度产生不同程度的下降,而条纹对比度直接影响复原光谱强度。因此,需要着重针对便携式空间外差拉曼光谱仪成像系统进行光机热集成分析研究。

2 光机热集成分析技术

1981年 Jacob Miller 等人最早提出光机热(thermal structure optic, TSO)集成分析这一概念,是综合运用多学科知识分析光机系统性能的一项技术^[10]。目前,光机热集成分析技术在航天航空领域有着广泛的应用,而在商业产品上的应用却很少^[11]。

2.1 光机热集成分析流程

光机热集成分析综合了光学性能分析、机械结构分析、热分析,数据在不同软件间的传递是该技术的一个难点。光机热集成分析的一般流程:1)根据光学系统的设计要求,设计初步的光学方案;2)根据光学设计进行结构设计,建立结构的三

维模型;3)根据热边界条件,进行热分析;4)将热分析结果导入到结构分析软件中,得出光机元件的刚体位移与面形变化;5)拟合光学元件的刚体位移与面形变化;6)将拟合的数据导入光学设计软件中,分析出受热载荷与力载荷情况下的光学性能。

针对便携式空间外差拉曼光谱仪成像镜头,其光机热集成分析流程如图2所示。

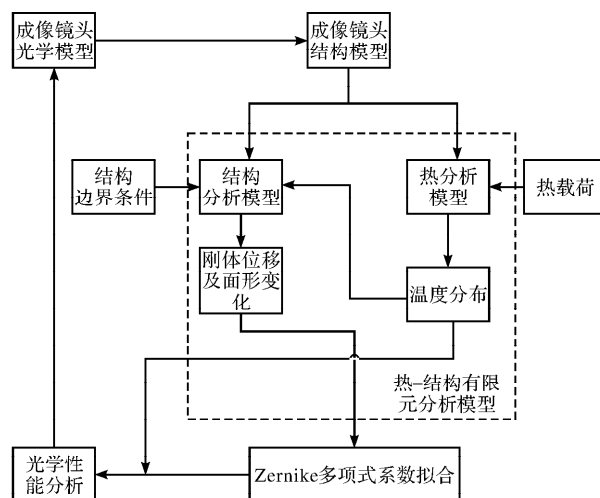


图2 成像镜头光机热集成分析流程图

Fig. 2 Flow chart of TSO integrated analysis of imaging lens

2.2 成像镜头光机模型简介

本文研究的便携式空间外差拉曼光谱仪成像镜头有前后2组透镜、中间光阑以及相应的结构件组成。前后2组均采用类3片式物镜结构,焦距分别为24.28 mm和41.26 mm、F/# 2.17,实现低畸变,对定域面干涉条纹放大成像的功能,缩放比为-1:1.7,其光路图如图3所示。该成像镜头适用波段范围532 nm~680 nm,满足仪器基频波长532 nm、光谱分辨率 4 cm^{-1} 时,可探测的拉曼频移范围为 $0\sim 4\,096\text{ cm}^{-1}$ 。

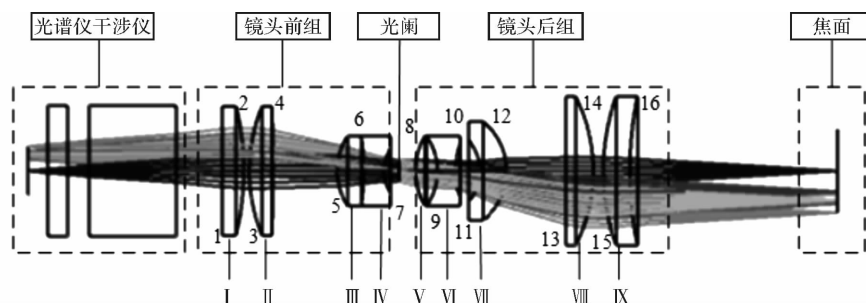


图3 空间外差拉曼成像镜头光路图

Fig. 3 Optical path of spatial heterodyne Raman imaging lens

光学系统公差分析可知,中间光阑两侧的双胶合透镜安装精度要求很高,中心偏±0.005 mm,元件表面倾斜±1',中心距±0.025 mm。考虑光阑附近光学元件较高的精度要求,安装结构采用子镜座形式,在装调过程中通过修切子镜座调整元件倾斜偏心,周边均匀布置螺纹孔调整元件离轴偏心,镜头结构设计如图4所示。

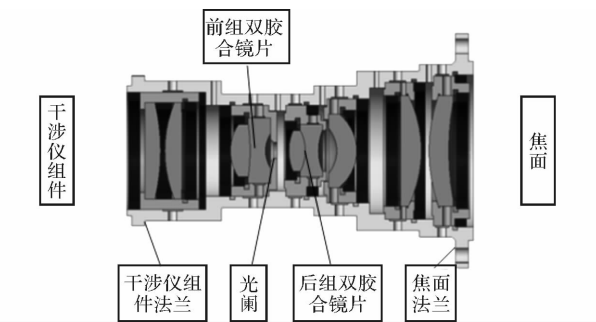


图4 空间外差拉曼成像镜头结构设计图
Fig.4 Design of spatial heterodyne Raman imaging lens structure

成像镜头主要性能参数要求如下:

- 1)物高±5.6 mm,物方数值孔径优于0.1;

- 2)成像镜头截止频率76.9 lp/mm处MTF值优于0.40;
3)所有视场RMS弥散斑直径均优于探测器1个像元宽度(6.5 μm);
4)畸变优于±0.1%;
5)所有视场波前PV值优于0.25λ,RMS值优于0.1λ。

2.3 成像镜头光机热集成分析边界条件

空间外差拉曼光谱仪的设计工作温度为-10℃~40℃,其中探测器的发热功率为1 W,激光器的发热功率为0.5 W,在空间外差拉曼光谱仪工作时探测仪与激光器需同时工作,当研究两者发热对成像镜头的影响时,两者的原理相似,并且本文研究这两者共同作用对成像镜头的影响,故不分别研究两者单独工作时对成像镜头的影响;所用光学材料及其性质如表1所示;镜筒及子镜座材料为铝合金2A12;镜筒与周围空气的热交换形式为自然对流,取值25 W/(m²·K);成像镜头的固定方式为成像镜头干涉仪组件法兰与干涉仪组件通过螺栓连接。

表1 装配体光学材料属性
Table 1 Optical material properties of assembly

材料	密度/(g·cm ⁻³)	弹性模量/GPa	泊松比	热导率/(W·m ⁻¹ ·K ⁻¹)	热胀系数/(10 ⁻⁶ K ⁻¹)
H-LaF3B	4.39	97.8	0.294	1.2	8.6
H-ZK6	3.54	82.5	0.267	0.8	6.7
ZF7L	5.19	54.8	0.226	1.12	8.2

3 成像镜头光机热集成分析

3.1 热力学-静力学耦合分析

利用Pro/E建立成像镜头的三维模型,简化模型中的工艺倒角、清角、注胶孔等;利用ANSYS Workbench中的Steady-State Thermal与Static Structural模块建立热力学-静力学耦合模型,分别求解环境温度为-10℃与40℃工况下的成像镜头各元件的面形变化及位移。

在环境温度为-10℃时成像镜头的温度分布云图与变形云图如图5所示,在环境温度为40℃时成像镜头的温度分布云图与变形云图如图6所示。比较图5与图6可知,镜片面形变化和刚体位移较环境温度在环境温度为40℃时较大,因此后续分析均为环境温度40℃条件下的结果。从温度分布云图中可以看出距离探测器与

激光器的镜头部分温度高于远离部分;从形变云图中可以看出最后一片镜片的变形量最大,其变形主要为累积的刚体位移,可见分析结果与实际情况相符。

3.2 成像镜头变形拟合及光学性能分析

本文基于局部热源和整体环境温度变化给出的仿真结果,在各光机元件内表现为不同温度梯度的变化,Zernike系数便是表征由于温度梯度导致的光学元件面形的变化。利用Sigfit软件提取上节热力学-静力学耦合模型分析结果,并利用标准Zernike多项式拟合成像镜头各镜片的面形变化,表2中列出前组、后组双胶合镜片以及镜片Ⅷ、Ⅸ前9项Zernike系数及其物理意义^[12]。将各镜片拟合结果与上节各镜片温度导入至Zemax软件中进行成像镜头光学性能

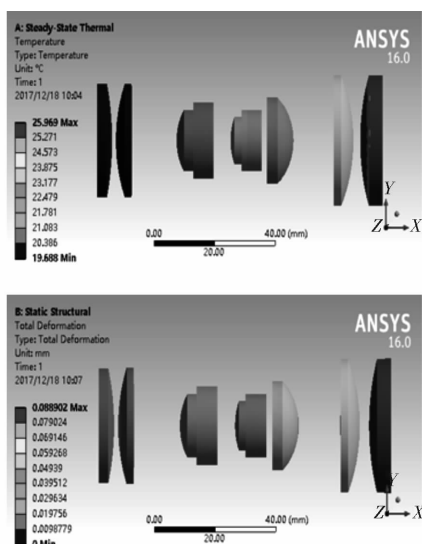


图 5 成像镜头镜片在环境温度为一10℃温度分布云图及变形云图

Fig. 5 Displacement and temperature of imaging lens at -10°C

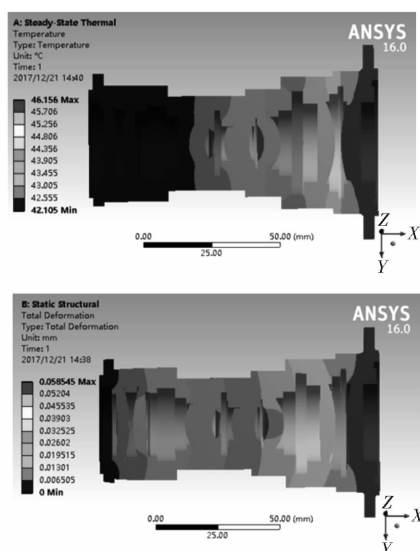


图 7 成像镜头整体在环境温度为40℃温度分布云及变形云图

Fig. 7 Displacement and temperature of imaging lens at 40°C

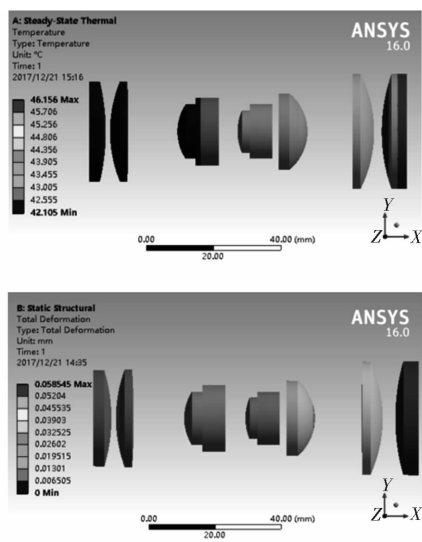


图 6 成像镜头镜片在环境温度为40℃温度分布云图及变形云图

Fig. 6 Displacement and temperature of imaging lens at 40°C

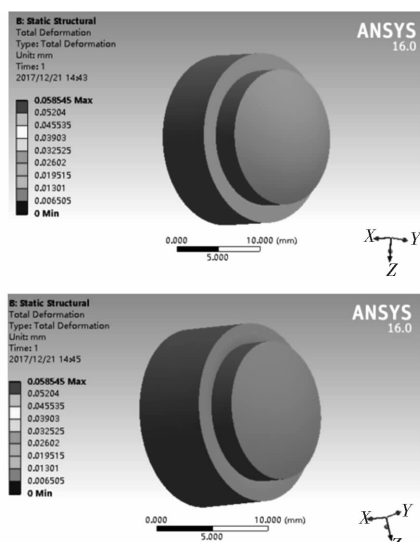


图 8 成像镜头前、后组双胶合镜片变形云图

Fig. 8 Displacement of double glued lens of front /post imaging lens group

分析,其 MTF 结果如图 9(a)所示,环境温度在 40°C 时截止频率 76.9 lp/mm 处 MTF 优于 0.38,RMS 弥散斑直径优于 1 个像元宽度;PV 波前差优于 0.22λ ;RMS 波前差均优于 0.09λ 。而未导入 Zernike 系数时的 MTF 如图 9(b)所示,其值在 76.9 lp/mm 处 MTF 优于 0.42,RMS 弥散斑直径优于 1 个像元宽度;PV 波前差优于 0.25λ ;RMS 波前差均优于 0.1λ 。从对

比结果可以看出,导入 Zernike 系数后的分析结果均稍劣于未导入系数时的情况,出现此种结果是因为光学软件 Zemax 未能考虑面形变化给光学系统带来的变化,因此光机热集成分析比仅用光学软件分析能得到更接近真实的分析结果。通过对比可知,直接采用 Zemax 对成像镜头进行热分析简单易操作,而采用光机热集成分析方法分析成像镜头可以得到更为接近实际工况的结果,同时其分析过程较为复杂。

表 2 Zernike 系数及物理意义

Table 2 Zernike coefficients and physical meanings

项	面 5	面 7	面 8	面 10	面 13	面 14	面 15	面 16	物理意义
1	0.668 3	-0.044 2	0.316 6	-0.239 5	-0.083 2	0.217 6	0.435 1	-0.328 4	偏移
2	0.075 8	0.066 1	0.040 4	0.006 9	0.005 2	0.087 5	0.017 8	0.008 2	倾斜
3	-3.126 7	-0.073 8	-1.902 8	1.164 5	0.832 5	-0.541 8	0.563 2	0.883 2	离焦
4	0.020 3	0.004 1	0.030 9	0.002 7	0.020 7	0.015 9	0.016 7	0.058 2	一阶像散
5	0.021 3	0.007 8	0.001 7	0.000 5	0.005 2	0.004 5	0.009 8	0.012 1	一阶彗差
6	0.015 4	0.009 1	0.019 6	0.003 6	0.005 6	0.008 7	0.015 3	0.091 1	一阶三叶草像差
7	-1.003 4	0.224 5	-0.688 6	0.510 5	0.325 4	-0.764 3	0.783 6	-1.005 2	一阶球差
8	0.013 0	0.004 8	0.002 0	0.000 9	0.003 0	0.007 6	0.016 7	0.017 3	二阶像散
9	0.018 1	0.014 4	0.016 6	0.003 2	0.015 6	0.012 5	0.025 1	0.017 6	一阶四叶草像差

表 3 成像镜头镜片间距变化量

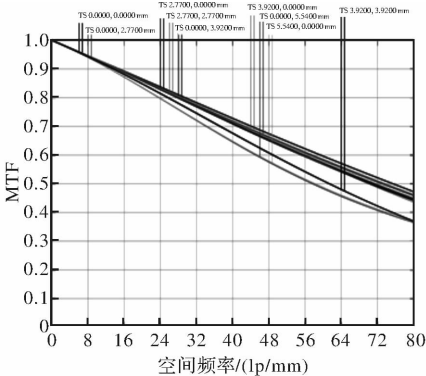
Table 3 Changes of spacing for imaging lens

环境温度/℃	镜片 I、II 间距 变化/mm	镜片 II、III 间距 变化/mm	镜片 IV、V 间距 变化/mm	镜片 VI、VII 间距 变化/mm	镜片 VII、VIII 间距 变化/mm	镜片 VIII、IX 间距 变化/mm
40	0.011 3	0.012 2	0.014 3	0.016 2	0.017 8	0.184

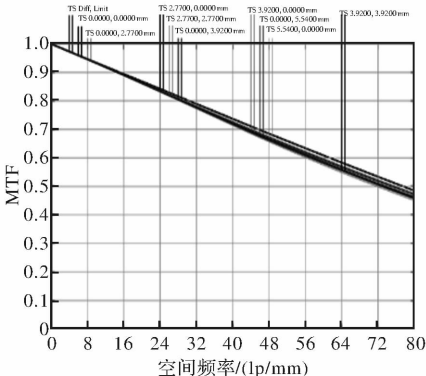
表 4 成像镜头镜片中心厚变化量

Table 4 Change of center thickness of imaging lens

环境温度/℃	镜片 I /mm	镜片 II /mm	镜片 III /mm	镜片 IV /mm	镜片 V /mm	镜片 VI /mm	镜片 VII /mm	镜片 VIII /mm	镜片 IX /mm
40	0.000 8	0.001 0	0.000 9	0.000 9	0.001 1	0.000 8	0.016 2	0.001 3	0.001 2



(a) 未导入拟合系数时的传递函数



(b) 导入拟合系数时的传递函数

图 9 成像镜头在环境温度为 40℃ 导入 (a)、未导入 (b) 拟合系数时的传递函数

Fig. 9 MTF of imaging lens when imported/not imported Zernike coefficients at 40℃

4 结论

对于设计精度较高的空间外差拉曼光谱仪成像镜头,使用环境温度是影响其性能的重要因素。在-10℃~40℃的环境温度中,分析结果显示,空间外差拉曼光谱仪成像镜头低温工况适应性优于高温工况,在环境温度为 40℃ 时,成像镜头的 MTF 有所下降,其值优于 0.38。运用光机热集成分析技术能够较为真实地反映热载荷对镜头成像质量的影响,空间外差拉曼光谱仪整机亦可采取类似的方法进行分析,当整机分析结果不满足光学要求时,需要加入相关的热控设计,比如增加风扇使自然对流变为强制对流以增大其对流换热系数。因此,成像镜头的光机热集成分析为空间外差拉曼光谱仪整机的散热设计提供依据,同时为光机热集成分析在有热源的环境下使用提供参考。

参考文献:

[1] SUN Zhenhua, HUANG Meizhen, SHE Zhengang, et al. Status and development of portable spectrometer[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2014, 51 (7):070001-1-7.

- 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): 070001-1-7.
- [2] SHAO Shengyu, ZHANG Lin, CAO Bingqing, et al. Present situation and prospect of application research on portable raman spectroscopy scanner [J]. Modern Scientific Instruments, 2013(1):28-32.
- 邵晟宇,张琳,曹丙庆,等. 便携式拉曼光谱仪的应用研究现状及展望[J]. 现代仪器科学, 2013(1): 28-32.
- [3] AN Yan, LIU Ying, SUN Qiang, et al. Design and development of optical system for portable Raman spectrometer [J]. Acta Optica Sinica, 2013, 33(3): 307-313.
- 安岩,刘英,孙强,等. 便携式拉曼光谱仪的光学系统设计与研制[J]. 光学学报, 2013, 33(3):307-313.
- [4] AN Yan. Research on technology of opto-mechanical system of handhelded raman spectrometer [D]. Changchun: Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics Chinese Academy Sciences, 2014.
- 安岩. 手持式拉曼光谱仪光计系统技术研究[D]. 长春: 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 2014.
- [5] YE Song, FANG Yonghua, HONG Jin, et al. Experimental study on spatial heterodyne spectroscopy [J]. 2007, 34(5): 84-88.
- 叶松,方勇华,洪津,等. 空间外差光谱技术实验研究[J]. 光电工程, 2007, 34(5): 84-88.
- [6] GOMER N R, GORDEN C M, LUCEY P, et al. Raman spectroscopy using a spatial heterodyne spectrometer: proof of concept[J]. Applied Spectroscopy, 2011, 65(8):849.
- [7] SHI Hailiang, FANG Yonghua, XIONG Wei, et al. Spatial heterodyne spectroscopy and application in atmospheric remote sensing [J]. Journal of Atmospheric and Environmental Optics, 2010, 5(6): 464-468.
- 施海亮,方勇华,熊伟,等. 空间外差光谱技术及其在大气遥感探测中的应用[J]. 大气与环境光学学报, 2010, 5(6): 464-468.
- [8] HU Guangxiao, XIONG Wei, LUO Haiyan, et al. The research of spatial heterodyne Raman spectroscopy with standoff detection [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016, 37(2):3951-3957.
- 胡广骁,熊伟,罗海燕,等. 用于远程探测的空间外差拉曼光谱技术研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 37(2):3951-3957.
- [9] SHI Hailiang, XIONG Wei, LI Zhiwei, et al. Phase error correction of spatial heterodyne spectrometer [J]. Acta Optica Sinica, 2013, 33(3):313-318.
- 施海亮,熊伟,李志伟,等. 空间外差光谱仪相位误差修正[J]. 光学学报, 2013, 33(3):313-318.
- [10] WU Yao, XU Mingming, CHEN Sujuan, et al. Application of thermal/structural/optical integrated analysis to ultraviolet lens of imaging spectrometer [J]. Journal of Applied Optics, 2016, 37(2):262-266.
- 武耀,徐明明,陈素娟,等. 光机热集成分析在高光谱成像仪紫外镜头中的应用[J]. 应用光学, 2016, 37(2):262-266.
- [11] FAN Yue, LIANG Wei, MA Wenli, et al. Thermal design of the optical system in an aerial camera [J]. Opto-Electronic Engineering, 2013, 40(1):52-59.
- 樊越,梁伟,马文礼. 航空相机光学系统热控设计[J], 光电工程, 2013, 40(1):52-59.
- [12] KEITH B. doyle, VICTOR L. Genberg. Integrated optomechanical analysis [M]. 2nd edition. Beijing: National Defense Industry Press, 2015:52-62.
- 凯斯·B·道尔, 维克托·L·基恩伯格. 光机集成分析 [M]. 2版. 格雷戈里·J·迈克尔斯, 连华东, 王小勇, 徐鹏, 译. 北京: 国防工业出版社, 2015: 52-62.