УДК 535.243

РАЗРАБОТКА ШИРОКОДИАПАЗОННОГО СЕНСОРА – МИНИ-СПЕКТРОМЕТРА С ВОЛОКОННЫМ ВВОДОМ – ДЛЯ СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА БИОЛОГИЧЕСКИХ СТРУКТУР И ЖИДКОСТЕЙ

© 2007 г. **Г. Л. Даниелян***, канд. техн. наук; **Ю. В. Бажанов****, доктор техн. наук; **С. В. Савосин***; **С. Н. Марков****

* Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва

E-mail: gldan@nsc.gpi.ru

** ФНПЦ ОАО "Красногорский завод им. С.А. Зверева", г. Красногорск, Московская обл.

E-mail: bazhanov@zenit.istra.ru

Исследованы вопросы технологии и разработки оптимальной конструкции экономичного широкодиапазонного сенсора – мини-спектрометра с волоконно-оптическим вводом – для спектрального анализа в области 0,2–1,08 мкм.

Коды OCIS: 120.4640.

Поступила в редакцию 17.05.2007.

Введение

Широкое применение многоканальных волоконно-оптических жгутов (МВОЖ) – зондов – для различных спектральных задач во многих случаях является практически единственным средством, обеспечивающим одновременно и передачу оптических сигналов от лазеров или других источников излучения, и прием и оптимизацию обработки спектральных оптических сигналов [1]. Основное преимущество оптимизированных для конкретной задачи структур волоконных зондов: возможность создания дистанционного гибкого оптического соединения спектрометров с анализируемыми веществами и возможность присоединения части волокон в зонде к источникам излучения. При этом технически осуществимым оказывается ряд задач по исследованию спектров в высокотемпературных, агрессивных или вакуумных средах [1, 2]. На основе сочетания обычных и новых специальных металлизированных многомодовых кварцевых волокон с диаметром сердцевины от 50 до 1000 мкм стало возможным проводить дистанционный спектральный контроль в диапазоне 0,2–2,2 мкм в жидких и газообразных средах с температурой до 600 °С. В работе предложены различные зонды к сенсору-мини-спектрометру, ориентированные на исследования в области биомедицины (флуоресцентная диагностика) и спектрохимического анализа различных растворов на расстояниях до кюветного отделения от 1 до 100 м.

Разработка широкодиапазонного спектрального прибора и его применение в промышленности и научных исследованиях являются одним из наиболее актуальных вопросов. Последние 5 лет практически большинство зарубежных фирм-производителей спектрометрического оборудования наладили серийный выпуск относительно недорогих мини-спектрометров для применения в различных экспериментальных и технологических системах автоматизированного контроля.

В данной статье приведены результаты разработки всей структуры мини-спектрометра FSD8-v.2.0[1] с волоконным вводом, ориентированного на широкое применение в прикладных областях в качестве встраиваемого модуля спектрального анализа либо в качестве недорогого средства для определения широкодиапазонного спектра [3]. Оптимизация оптической схемы волоконно-оптического зонда и FSD8-v.2.0 позволила при относительно простой схеме ввода излучения добиться сочетания высокого отношения сигнал/шум во всем спектральном диапазоне и достаточного для большинства прикладных задач разрешения по спектру. Программное обеспечение сенсора FSD-Soft-v.3.0 позволяет не только быстро адаптировать FSD8-v.2.0 к конкретной области применения, но имеет встроенные функции коррекции спектральной чувствительности и программу корреляционного анализа-идентификации спектров.

Постановка задачи и выбор конструктивных характеристик мини-спектрометра FSD8-v.2.0

Для реализации оптимальных структур сенсора FSD8-v.2.0 необходимо на основе анализа существующих и новых типов оптических многомодовых

[1] FSD8-v.2.0 – Fiber Spectrometer, D8 – служебное обозначение приемника излучения, v.2.0 – вторая версия.

волокон определить оптимальные структуры волоконно-оптических зондов и на их основе определить необходимость и тип методов коррекции спектра при наложении на него спектра волокон. Кроме того, существенным является потребность учета апертурных и других согласований схемы ввода оптического сигнала и оптической схемы построения самого спектрального сенсора. Основная задача увеличения отношения сигнал/шум для волоконных зондов, рассчитанных на регистрацию отраженных от поверхностей спектров, обеспечивается только при оптимизации конфигурации структуры расположения волокон на концах волоконно-оптического зонда. Для этого необходим метод определения передачи интенсивности излучения от группы излучающих волокон к группе приемных волокон при произвольно заданных количестве, положении в структуре жгута, расстоянии до отражающей поверхности.

Выбор оптической схемы спектрометра диктовался требованиями максимальной простоты при наличии входной апертуры, соответствующей выходной апертуре волокна и спектральному разрешению, которое не превосходит нескольких нанометров в рабочей спектральной области 300–850 нм. Всем этим требованиям удовлетворяет вертикальная автоколлимационная схема на основе единственной вогнутой решетки, которая к тому же имеет минимальную расстраиваемость вследствие механических и температурных нагрузок.

Существенное значение имеет также выбор метода обработки оптического сигнала, содержащего информацию о спектре. Для этого необходимо разработать не только систему считывания линейного разложения спектра, но и создать универсальное микропроцессорное устройство преобразования и обработки оптических сигналов с универсальным программным обеспечением, ориентированным на широкий класс практических задач.

Исследование и разработка структур волоконно-оптических зондов

В существующих типах различных оптических волокон наиболее эффективными для нашей задачи являются многомодовые оптические волокна со структурой высокочистый кварц–сердцевина и с оболочкой из допированного флюорином кварца. Такие волокна вносят наименьшее искажение в спектр и имеют высокое пропускание во всем спектральном диапазоне 0,2–1,3 мкм [3]. Однако при увеличении длины зондов спектральные потери могут существенно влиять на чувствительность FSD8 и составлять от 0,5–0,25 (для диапазона 0,18–0,2 мкм) до 0,2–0,3 дБ/км (для узких спектральных диапазонов, например, 0,8–0,86 мкм). Нами исследовались спектральные характеристики различных многомодовых волокон и на основе анализа спектральных потерь в диапазоне 0,18–1,1 мкм выбраны

оптические волокна типа UV50/125/128P, UV100/110/129P, 200/220/245P с полиимидным защитным покрытием и числовой апертурой NA1 = = 0,12–0,14 и NA2 = 0,22;

оптические волокна типа ОКМ с покрытием алюминием: UV 100/110/129Al, UV 200/220/295Al, UV300/330/390Al.

Выбранное оптическое волокно с относительно высоким содержанием OH-ионов (1200–1300 ppm) для спектрометров с УФ диапазоном обеспечивает минимум спектральных потерь и искажений спектров в диапазоне 180–350 нм. Волокна, покрытые алюминием, также обеспечивают полную защиту от проникновения посторонних оптических сигналов через боковую поверхность волокна, что существенно при анализе спектров флуоресценции. Однако при увеличении длины волоконного зонда потери, особенно в области 180–350 нм, могут увеличиваться и, следовательно, программа обработки спектров должна не только содержать коррекцию спектральной чувствительности оптической схемы сенсора, но и учитывать необходимость настройки на конкретный выбранный волоконный зонд.

Для наиболее применимых в практике зондов отражательного типа, содержащих приемные и передающие волокна, уровень интенсивности сигнала и его пространственное распределение при большом количестве волокон определяются в основном взаимным расположением приемных и передающих волокон. Экспериментальная проверка характеристик весьма трудоемка, и поэтому для моделирования передачи излучения в многоканальной структуре волоконного зонда разработана численная модель MFOB-Soft-v.02 расчета на персональном компьютере (ПК) основной передаточной характеристики. При этом считается, что отражающая поверхность представляет собой плоское зеркально-диффузное отражающее зеркало с постоянным заданным коэффициентом отражения. Модель допускает расчет характеристики интенсивности излучения от произвольно заданной торцевой структуры волоконного зонда с общим программируемым числом приемных и передающих каналов до 24 и гексагонально упакованными структурами волокон с общим числом до 64. На рис. 1 приведен пример вида основного окна программы расчета основных характеристик MFOB-Soft-v.02 для *Y*-зонда миниспектрометра отражательного типа, содержащего минимальное количество волокон (одно приемное волокно и 6 волокон, подключенных на другом торце к излучателю). Расчет оптической передачи для

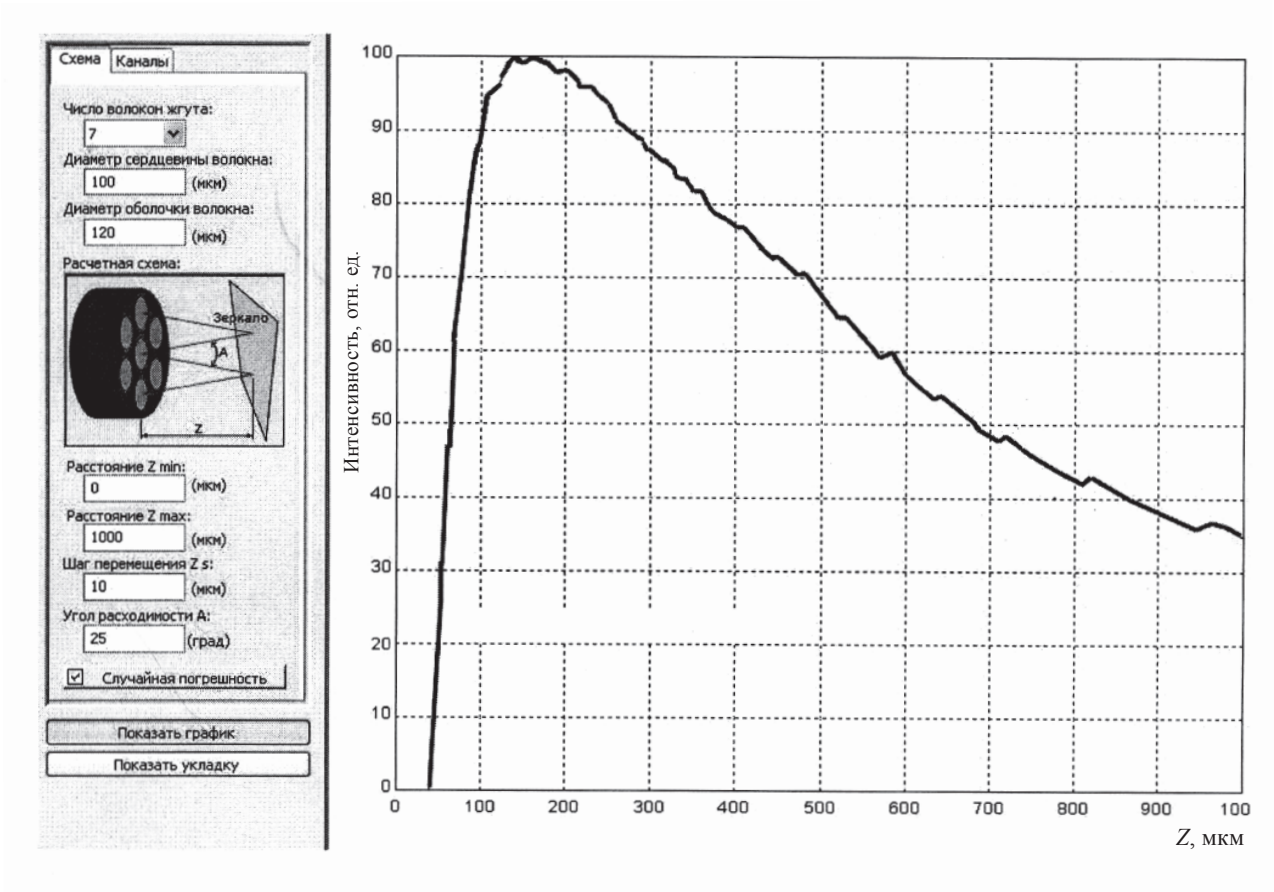

Рис. 1. Снимок с экрана ПК окна программы MFOB-Soft-v.02. Зависимость передачи интенсивности излучения для одного приемного волокна и 6 передающих волокон при отражении от плоского отражающего зеркала, установленного на расстоянии Z.

ансамбля лучей, аппроксимирующих апертуру NA = = 0,22 с погрешностью 3–5%, совпадает с экспериментальными характеристиками. Но отличие от эксперимента позволяет выявить влияние различных факторов. Например, при увеличении толщины кварцевой и защитной оболочек происходят уменьшение относительного максимума передачи и излучения и его расширение и сдвиг от $Z = 0{,}135$–$0{,}15$ мм в область $Z = 0{,}15$–$2{,}3$ мм. Следовательно, оптимальное расстояние торца зонда Y-типа, обеспечивающее максимум отношения сигнал/шум для спектрометра, обусловлено выбором типа укладки волокон, диаметрами волокон, числовой апертурой и другими факторами. В численное моделирование введен параметр вероятностного разброса положения центра волокон в структуре гексагональной укладки. Анализ показывает, что при его значении 3–5% влияние технологического разброса приводит к непренебрежимому изменению характеристик (рис. 1).

Проведены экспериментальные исследования МВОЖ с большим числом волокон и с разбиением на 1–6 приемных каналов. По расчетным характеристикам выбраны оптимизированные структуры зондов, используемых для флуоресцентной широкополосной диагностики при возбуждении либо лазером, либо несколькими мощными излучающими светодиодами.

Для спектрального эндоскопического зонда предложена структура с применением внешнего металлического покрытия волокон. Структура такого зонда изображена на рис. 1.

Скошенные торцы оптических волокон находятся на торце иглы, вводимой в биологические ткани (например, в опухоль), и излучение лазера, переотражаясь от металлического покрытия волокна, вводится в ткань под заданным оптимальным углом. Флуоресцентный отклик в ткани принимается приемными волокнами, либо смещенными на торце на заданное расстояние, либо плотно упакованными вокруг центрального волокна, определяющего глубину проникновения (зону определения флуоресцентного отклика). Применение в этих случаях специальных многомодовых волокон со структурой кварц–кварц–металлизированное защитное покрытие является необходимым и имеет существенные преимущества: полная оптическая изоляция приемных и передающих волокон в плотно упакованном жгуте, отсутствие спектральных искажений за счет вытекания мод в пластиковые покрытия, возмож-

ность работы МВОЖ в условиях высоких температур и вибраций.

Проведены разработки по созданию оптических соединителей структур МВОЖ для вакуумных сред, разработаны спектральные оптические кюветы для жидких агрессивных или радиоактивных образцов на основе МВОЖ в спектральном диапазоне 0,2–2,2 мкм. Разработана простая проходная кювета для жидких образцов с волоконным входом и выходом для кювет с рабочей длиной 10 мм.

Разработка оптической схемы мини-спектрометра

Предложена и оптимизирована структура мини-спектрометра с волоконно-оптическим входом FSD8-v.2.0 как для широкого спектрального диапазона (0,19–1,08 мкм), так и для более узкого (300–850 нм) с более высоким спектральным разрешением [3]. Выбранная вертикальная автоколлимационная схема позволяет использовать вогнутую дифракционную решетку при достаточно высоком качестве спектрального изображения и обеспечивает высокую параметрическую надежность конструкции. Рассмотрены характеристики мини-спектрометра при различных типах волоконно-оптического ввода и в зависимости от различных типов оптического волокна. Показано влияние диаметра сердцевины волокна на светосилу сенсора и его спектральное разрешение. Благодаря оптоволоконному вводу излучения FSD8-v.2.0 может встраиваться в различные приборы и комплексы в качестве анализатора спектра.

В отличие от спектрометров ведущих западных фирм, в оптических схемах которых используется либо плоская решетка с коллимирующим и фокусирующим зеркалами, либо вогнутая решетка с искривленными неравноотстоящими штрихами, в настоящем приборе без потери качества спектрального изображения удалось ограничиться единственным простым в изготовлении оптическим элементом – вогнутой классической решеткой. Оптическая схема прибора представляет собой автоколлимационную вертикальную схему. Достоинством данной схемы является отсутствие меридиональной комы и составляющих аберраций 2-го порядка по высоте щели. Входной щелью (*1*) прибора (см. рис. 2) является полированный торец волокна волоконного световода диаметром 50, 100 или 200 мкм или ряд линейно расположенных торцов волокон диаметром 20–50 мкм. Диспергирующим элементом является нарезная сферическая решетка *2* с радиусом кривизны поверхности 50 мм и размерами заштрихованной площадки $Y \times Z = 16 \times 16$ мм, работающая в первом порядке при угле падения $\varphi = 10°$,

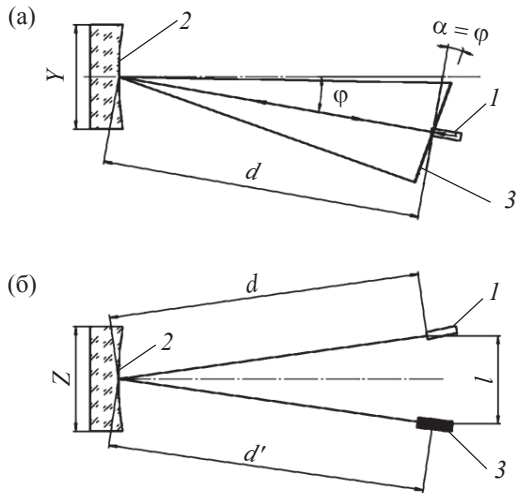

Рис. 2. Меридиональное (а) и саггитальное (б) сечения выбранной оптической схемы мини-спектрометра (пояснения см. в тексте).

равном углу дифракции для средней длины волны. Параметры оптической схемы определяются из минимизации по рабочей спектральной области дефокусировки оптического изображения в схеме спектрографа с плоским произвольно расположенным полем приемной площадки [4]. Расстояния от вершины решетки до входного волокна $d = 48{,}82$ мм, а до середины площадки приемника (*3*) – $d' = 48{,}92$ мм. Приемником спектрометра служит CCD-линейка, плоскость которой с целью минимизации дефокусировки наклонена на угол, равный углу падения лучей на дифракционную решетку $\alpha = \varphi$. В сагиттальной плоскости входное волокно и CCD-линейка разнесены на расстояние $l = 10$ мм и развернуты таким образом, чтобы торец волокна и плоскости приемника были перпендикулярны главному лучу, проходящему через вершину решетки.

В табл. 1 приведены значения поперечных аберраций решетки размером $Y \times Z = 16 \times 16$ мм в спектральной области 300–850 нм при использовании решетки частотой 600 мм$^{-1}$.

Таблица 1. Поперечные аберрации δy дифракционной решетки частотой 600 мм$^{-1}$.

Y	*Z*	δy, мм				
		$\lambda = 300$ нм	$\lambda = 410$ нм	$\lambda = 575$ нм	$\lambda = 575$ нм	$\lambda = 850$ нм
–8	0	0,104	0,116	–0,131	–0,052	0,097
8	0	–0,11	–0,119	0,128	0,053	–0,085
–8	8	0,097	0,112	–0,131	–0,042	0,116
8	8	–0,113	–0,118	0,143	0,086	–0,039

Таблица 2. Значения длин волн, полуширины аппаратной функции спектрографа, обратной линейной дисперсии и спектрального разрешения при использовании решеток с различной частотой штрихов

λN	λ, нм				b_a, мм	$Nd\lambda/dl$, нм мм$^{-2}$	$N\Delta\lambda$, нм мм$^{-1}$
	N = 900 мм$^{-1}$	N = 600 мм$^{-1}$	N = 450 мм$^{-1}$	N = 300 мм$^{-1}$			
0,18	200	300	400	600	0,29	20625	5981,25
0,246	273	410	547	820	0,24	20625	4950
0,345	383	575	767	1150	0,26	20625	5362,5
0,444	493	740	987	1480	0,14	20625	2887,5
0,51	567	850	1133	1700	0,24	20625	4950

Не изменяя оптической схемы, путем замены дифракционной решетки другой частоты можем получить прибор с другой рабочей спектральной областью. В табл. 2 приведены спектральные диапазоны и расчетная полуширина аппаратной функции спектрографа b_a при использовании в предложенной схеме решеток различной частоты штрихов N. При расчете аппаратной функции ширина входной щели равнялась 100 мкм. Разрешающую способность прибора можно вычислить как произведение обратной линейной дисперсии $dl/d\lambda$ на полуширину аппаратной функции. В последнем столбце таблицы приведены значения спектрального разрешения, нормированные к частоте штрихов решетки. Как видим, с учетом нормировки разрешение в спектральной области 300–850 нм при использовании решетки частотой 600 мм$^{-1}$ колеблется от 5 нм для длины волны 740 нм до 10 нм для длины волны 300 нм. Однако при использовании входного волокна диаметром 50 мкм разрешение повысится почти в два раза. На практике ввиду гауссова распределения освещенности по поверхности дифракционной решетки спектральное разрешение не будет превышать 5–6 нм для волокна диаметром 100 мкм и 2–3 нм для волокна диаметром 50 мкм.

Электронная схема считывания сигнала и программное обеспечение мини-спектрометра

Проведены исследования по модификации стандартных CCD-линеек с целью расширения их спектрального диапазона до 0,18–1,08 мкм. Выбрана структура со специальным покрытием без защитного стеклянного окна либо с заменой на кварцевое окно с покрытием.

Полученный с оптического датчика видеосигнал усиливается и нормализуется по уровню (рис. 3). Нормализующий усилитель также демпфирует выходные цепи оптического датчика. Далее сигнал поступает на АЦП, управление которым осуществляется микропроцессором синхронно с управлением оптическим датчиком, т. е. оцифровка уровня видеосигнала происходит только в моменты последовательного выбора светочувствительной ячейки датчика и имеет программное управление по уровню. Передача и программная обработка оцифрованных данных осуществляется через шину контроллера USB непосредственно управляющей программой FSD-Soft-v.3.0 персонального компьютера. Спектральное разрешение прибора с решеткой радиусом кривизны 50 мм и частотой штрихов 600 штр/мм в области длин волн λ =300–850 нм составляет менее 2 нм, если ширина входной щели 50 мкм.

Приемником мини-спектрометра служит CCD-линейка TCD1304DJ-XX размером 0,008×0,2 мм

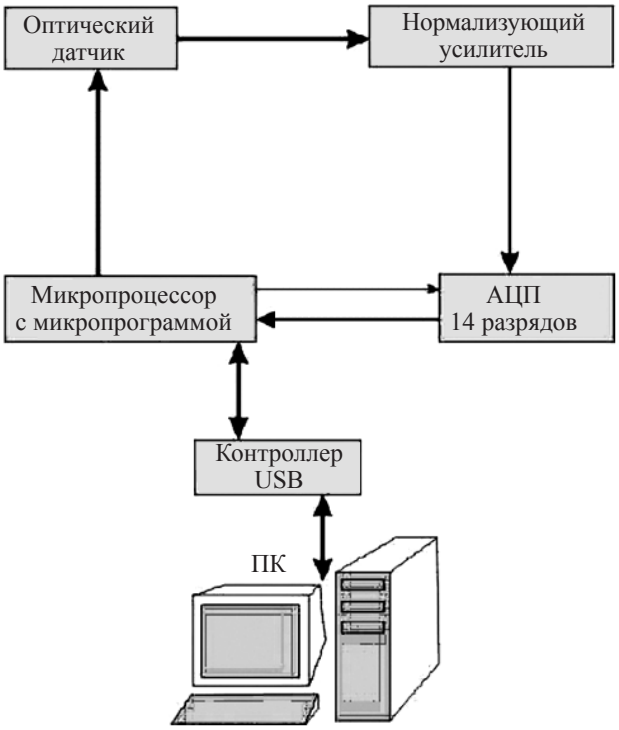

Рис. 3. Блок-схема электронной части мини-спектрометра (пояснения см. в тексте).

с числом пикселов 3648. Время экспозиции 100 мкс–10 с, время преобразования АЦП 5 мкс, время измерения одного полного спектра 25 мс. Потребляемый ток не более 40 мА. При работе с ПК используется универсальная программа обработки и анализа спектрального изображения FSD-Soft-v.3.0. Программное обеспечение отличается от аналогичных большим разнообразием опций, предлагаемых к выбору потребителем. Кроме простых функций обработки (накопление, осреднение по времени и по длине волны, интегральные оценки в динамике непрерывного сканирования спектров во времени в двух выбранных диапазонах спектра), в программу включен корреляционный анализ распознавания – идентификации текущего регистрируемого (измеряемого) спектра и спектров, заранее снятых и занесенных в память микропроцессора.

Внешний вид окна программы с подключенным прибором показан на рис. 4. Программа имеет два рабочих окна и окно-навигатор масштабирования основного окна. Первое – для отображения графиков спектра и второе – для вывода графиков интегральных составляющих спектральной характеристики в двух областях длин волн и их отношений.

Отличительной особенностью основного окна измерения является возможность отображения спектров с минусовыми величинами, что позволяет видеть на экране результаты обработки спектров вычитания. Для отражения информации в виде графиков пропускания или результатов обработки (операции нормализации спектра по λ с коррекцией чувствительности реальной ПЗС-линейки) используются различные алгоритмы осреднения, сканирования и накопления, причем выбранный пользователем режим запоминается в файле и может быть восстановлен в привязке к любому сохранному спектру. Второе окно позволяет проводить интегральные оценки временны́х изменений в спектральных зависимостях и может графически выдвигаться в основную область (перемещение мышью компьютера). Например, при флуоресцентной диагностике с возбуждением от лазера или светоизлучающего диода необходимо оценить флуоресцентный отклик в заданной области спектра относительной интегральной энергии возбуждения.

Существует большой спектр задач, в которых необходимо по спектру измерения быстро обнаружить вид изделия или его качественные характеристики. Для решения данной задачи в программу введена опция идентификации текущих регистрируемых спектров с произвольно заданными или заложенными в программу “эталонными” спектрами. При этом алгоритм вычислений выбран достаточно простым, но эффективным для анализа разнообразных спектров, включающих наличие как характерных пиков поглощения, так и областей Рэлеевс-

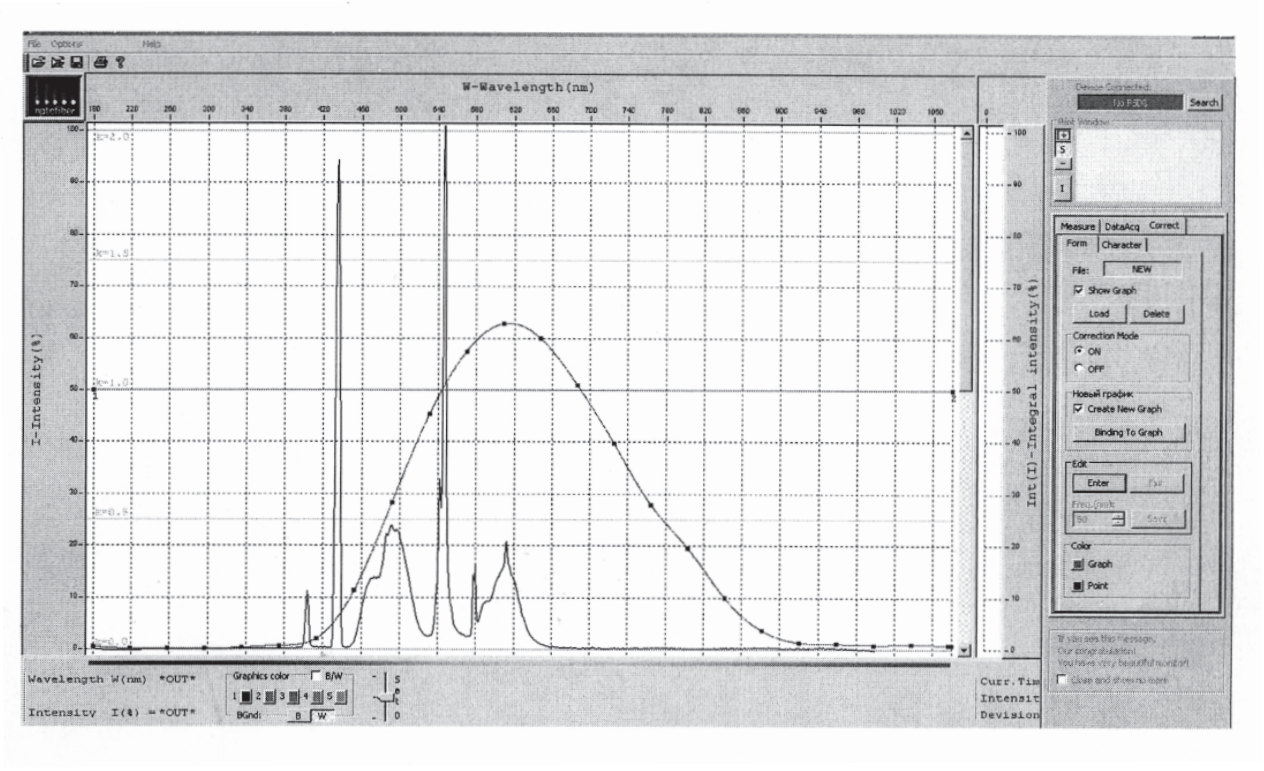

Рис. 4. Снимок с экрана ПК основного окна программы FSD-Soft. Спектр лампы дневного света и спектр обычной бытовой лампы накаливания.

кого рассеяния. В программе предусмотрено вычисление корреляционного оценочного коэффициента r для каждой точки спектра

$$r = \frac{1}{n}\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i\text{изм}} - \tilde{x}_{\text{изм}}\right)\left(x_{i\text{эт}} - \tilde{x}_{\text{эт}}\right)}{\sigma_{\text{эт}}\sigma_{\text{изм}}} \text{ при } r \geq r_{\text{кор. уров.}},$$

где n – количество осредняемых спектров измерения, $r_{\text{кор. уров.}} = 0{,}1–10$ – уровень оценки степени корреляции (задается пользователем), $x_{i\,\text{изм}}$, $\tilde{x}_{i\,\text{изм}}$ – интенсивность, зарегистрированная на i-й длине волны спектра для текущего спектра, и ее среднее значение за накопленные сканы; $x_{i\,\text{эт}}$, $\tilde{x}_{i\,\text{эт}}$ – интенсивность, зарегистрированная на i-й длине волны спектра для эталонного значения спектра, и ее среднее значение за накопленные сканы; $\sigma_{\text{эт}}$ и $\sigma_{\text{изм}}$ – значения эталонной и измеренной дисперсии.

При выполнении условия $r \geq r_{\text{кор. уров.}}$ для всех точек спектра внутри заданного диапазона оценки корреляции спектр идентифицируется как соответствующий и на экране появляется окно с названием заданного эталонного спектра. Очевидно, что для реальных измеряемых спектров в большинстве случаев характерной для идентификации является только некоторая часть участка спектральной зависимости и поэтому для каждого из них предусмотрена возможность задать спектральное окно характерной идентификации выбором минимальной и максимальной длин волн идентификации.

Одним из существенных недостатков большинства CCD-линеек является модуляционное искажение спектров. Для коррекции этого явления в программу введен алгоритм коррекции чувствительности для заданного диапазона спектра. В этом режиме программа FSD-Soft способна внести коррекцию чувствительности, используя аппроксимирующую функцию (сплайн) с заданным количеством корректирующих значений. Это особенно необходимо при использовании галогенных ламп накаливания. На рис. 5 показаны спектры лампы накаливания без коррекции и после ее применения.

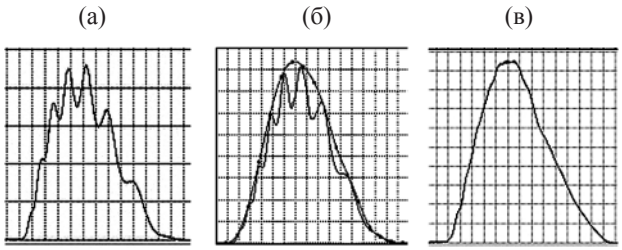

Рис. 5. Снимок фрагментов экранных графиков в процессе автоматической коррекции программой FSD-Soft спектра лампы накаливания. а – спектр лампы без коррекции, б – спектр в процессе коррекции с заданным числом точек сплайна 18, в – спектр той же лампы после ведения коррекции.

Выводы и заключение

• Разработаны оригинальные структуры волоконных зондов для различных прикладных задач лазерной спектрометрии и для применения в агрессивных и вакуумных средах.

• Предложена численная модель оценки определения интенсивности передачи мощности от излучающих торцов передающих каналов к приемным для произвольно заданных структур укладки многоканальных волоконно-оптических спектральных зондов.

• Разработано универсальное программное обеспечение FSD-Soft-v.3.0 с многооконным интерфейсом для системы WINDOWS 2000/XP ПК, обеспечивающая процесс быстрой обработки и идентификации спектров.

• Разработанный широкодиапазонный сенсор – мини-спектрометр успешно применен для различных прикладных задач спектрометрии и показал высокую параметрическую надежность.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Danielyan G.L.* Multi Channel Fiber Optic Bundles and Sensors for Biomedical Applications // Proc. SPIE. 2005. V. 5566. P. 198–203.

2. *Даниелян Г.Л.* Применение многоканальных волоконно-оптических жгутов в преобразователях линейных и угловых перемещений // Труды Института проблем управления. 2002. Т. 16. С. 21–29.

3. *Бажанов Ю.В., Даниелян Г.Л., Марков С.Н.* Разработка малогабаритного модульного спектрометра // Сборник трудов VII Междунар. конф. “Прикладная оптика-2006”. Т. 3. С. 139–143.

4. *Бажанов Ю.В., Тимергазеева Л.К.* Минимизация дефокусировки вогнутой дифракционной решетки в произвольно заданной схеме спектрального прибора // Оптический журнал. 1996. № 11. С. 42–46.