

DOI:10.19651/j.cnki.emt.2005509

手持式拉曼光谱仪数据采集系统设计*

陈巧芹 封志伟 夏果 金施群 白黎昊 王江涛

(合肥工业大学 仪器科学与光电工程学院 合肥 230009)

摘要: 为满足目前公共场合中危险物品的在线实时检测需求,设计了一款手持式拉曼光谱仪数据采集系统。该系统由激光器模块、微型光谱仪模块、电源模块和 ARM 主控模块 4 大模块构成。经过多次测试与验证实验,结果表明样机长 18.7 cm,宽 9.2 cm,高 4.4 cm,体重约 0.42 kg,光学分辨率高达 1.5 nm;通过对实验样品—无水乙醇、甲醇、乙酸乙酯进行检测并分析其拉曼响应曲线,得出该仪器能够在 6 s 内使得输出的拉曼光谱特征峰与数据库匹配度达到 98.7%。该仪器体积小、重量轻、分辨率高,能够快速、准确地检测出被测物性质,具有极高的应用价值和广泛的市场前景。

关键词: 手持式;拉曼散射;半导体激光器;微型光谱仪;拉曼光谱

中图分类号: TH841 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 460.40

Design of data acquisition system of hand-held Raman spectrometer

Chen Qiaoqin Feng Zhiwei Xia Guo Jin Shiqun Bai Lihao Wang Jiangtao

(School of Instrument Science and Opto-electronics Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China)

Abstract: In order to meet the current demand for online real-time detection of dangerous goods in public places, a handheld Raman spectrometer data acquisition system is designed. The system consists of a laser module, a micro spectrometer module, a power supply module and an ARM main control module. After many tests and verification experiments, the results show that the prototype is 18.7 cm long, 9.2 cm wide, 4.4 cm high, weighs about 0.42 kg, and has an optical resolution of up to 1.5 nm. The test samples—absolute ethanol, methanol, and ethyl acetate are tested and their Raman response curves are analyzed. It is concluded that the instrument can make the output Raman spectrum characteristic peaks match 98.7% within 6 s. The instrument is small in size, light in weight, and high in resolution. It can quickly and accurately detect the properties of the object to be tested, which has extremely high application value and broad market prospects.

Keywords: handheld; Raman scattering; semiconductor laser; micro-spectrometer; Raman spectroscopy

0 引言

拉曼散射是一种散射光与入射光频率不同的光学现象,其散射光强度跟物质分子结构密切相关,因此其产生的拉曼光谱可用来表征分子结构信息,被称作“指纹光谱”^[1],广泛应用于防爆安防、毒品检测、水质监测、物质分析^[2-3]等方面。在当今竞争日趋激烈的光谱仪市场中,基于拉曼散射原理设计的光谱仪产品众多,根据其原理大致可分为傅里叶变换拉曼光谱仪和色散型拉曼光谱仪^[4]两类。前者采用迈克逊干涉仪调制分光技术^[5],通常情况下该光谱仪体积较大,不利于现场检测;后者大多采用交叉非对称型 C-T (Czerny-Turner) 光学结构作为光路,所研制的仪器具有光

路结构紧凑、检测速度快等一系列优点。

传统的拉曼光谱分析仪因其体积庞大、操作过程复杂,在一定程度上桎梏了拉曼光谱仪等相关设备的进一步应用与发展^[6]。随着社会需求的日益增长,集微型化、便携性、即时性为一体的拉曼光谱仪日渐成为主要发展趋势。

目前,国外生产手持式拉曼光谱仪的厂商主要有美国的必达泰克公司和海洋光学公司。由于研究时间较早且各方面技术较为先进,其推出的光谱仪具有优良的性能和丰富的数据库,价格昂贵;国内对此起步较晚,生产成品的公司不多,以上海如海光电和厦门奥谱天成为典型。但国内的光谱仪由于技术及数据库建设不足导致成品体积偏大、匹配度不高等问题。因此研制一款结构微型、性能稳定、成

收稿日期:2020-12-09

* 基金项目:安徽省重点研究与开发计划项目(1804d08020310)资助

本较低的手持式的拉曼光谱仪是当今亟待解决的问题之一。故基于改进的 C-T 光路结构进行了手持式拉曼光谱仪的设计与开发,以期满足高精度、快速、便携等实际检测需求。

1 系统设计方案

在整个系统设计中,采用三星的 4412 处理器作为主控芯片,主要负责激光器的驱动与控制、指令数据的生成和采集数据的实时显示。采用 Altera 公司的 MAX10 系列 FPGA 芯片作为辅助控制芯片,负责 CCD 的驱动控制、光谱数据的传输以及指令数据的反馈。其中,主控芯片与 FPGA 芯片通过 SPI 总线进行光谱数据与指令数据的传输^[7]。考虑到被测物质属性、拉曼散射强度和其他散射效应的干扰等一系列因素^[8],首先选取了一款中心波长为 785 nm 的激光器作为检测光源,并根据其原理设计了相应的外围电路。之后,采用了交叉非对称型 C-T 光学结构作为检测光路,并选用了 Sony 的 ILX511 线阵 CCD 作为光电探测器。此外,在 CCD 传感器前端引入了柱面镜结构,进一步提高了入射到 CCD 的光强^[9]。最后通过 SPI 总线传输至主控芯片,并引入基线校正、谱峰识别等光谱数据预处理方法,对 FPGA 硬件直出的光谱数据进行了降噪与优化,最终成功地输出了拉曼光谱数据。根据上述结构及其相应功能,将手持式拉曼光谱仪数据采集系统分为激光器模块、微型光谱仪模块、电源模块和 ARM 主控模块 4 个模块,整个系统结构如图 1 所示。

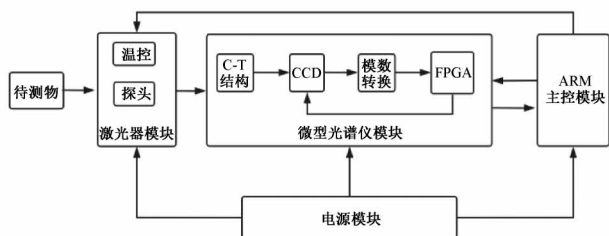


图 1 手持式拉曼光谱仪数据采集系统

1.1 激光器驱动及温控设计

早期的拉曼光谱仪一直使用汞弧灯作为光源^[10],由于其发光强度弱,半波宽比较大,导致拉曼效应不明显,故而很大程度上限制了拉曼光谱仪的发展。直至 20 世纪 60 年代,激光器的出现打破了这一僵局,以单色光能量高、光谱半宽窄、体积小等特点迅速取代了汞弧灯成为目前拉曼光谱仪器无可比拟的光源。

除了光源,激光波长的选择对拉曼光谱仪来说也至关重要。从紫外、可见到红外波段均可作为拉曼光谱仪的激光光源,但不同波段对应于不同的测量情况^[11]。意在毒品、酒精等有机物进行检测,且为了减少荧光干扰,最终选取中心波长为 785 nm、输出最大功率为 600 mW 的光纤耦合半导体激光器。

由于拉曼散射光的光强度与激发光波长的 4 次方成反

比,且与激发光功率成正比,因此保证激光光源输出功率的稳定性至关重要^[12]。为此根据激光器的选型设计了相应的激光器外围驱动电路和温控电路。图 2 所示为激光器控制流程。

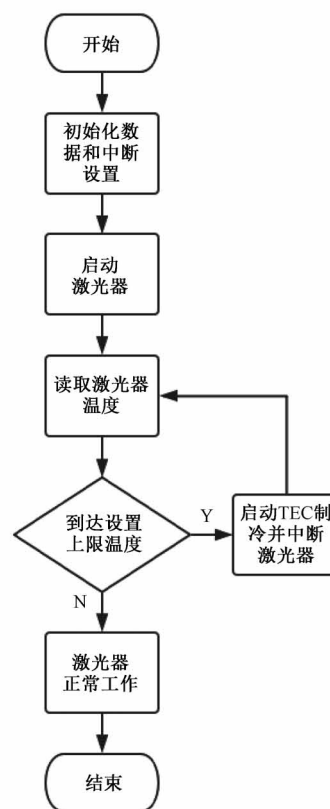


图 2 激光器控制流程

1) 激光器的驱动控制

本次设计采用恒流源控制的方式^[13],在保证电流大小不变的情况下,通过调整 PWM 波形的占空比来调整光功率。在该控制方式下,内置光电探测器接收一小部分激光功率并转化为监测电流,该监测电流经过电流/电压转换后,通过反馈网络与设定值比较,从而形成闭环负反馈控制。当激光输出功率受温度等因素影响发生变化时,该负反馈机制可控制光功率使其稳定不变。设计采用 ADI 公司的 LT3932 激光器驱动芯片,内部具有 36 V、2 A 电源开关和一个内部 PWM 发生器。由于该芯片内部集成的 PWM 发生器仅能提供最大 128 : 1 调光比,而本次设计需要 2 000 : 1 的调光比,因此将 LT3932 和一个外部 PWM 发生器联用。

对于 PWM 的生成控制,外部输入比内部产生的 PWM 更容易调控,其工作过程可描述为 LT3932 芯片根据激光器工作回路中的电流感测电阻,通过反馈网络保证流经激光器的电流稳定,同时主控芯片 ARM 产生一定占空比的 PWM 调制方波,通过 LT3932 内部的 PMOS 管控制激光器单位时间内的总功率,从而控制输出功率。值得注

意的是,激光二极管是一个相对脆弱的部件,其击穿电压 LD+相对较低,因此需要过滤掉任何可能到达 LD+的高压脉冲。本次设计中采用了一个双向 TVS 来过滤,其电压选择只要大于激光器输入电压 LD+即可。为减少电源电压和电流对后续电路的冲击,设计了多个电容缓冲,一个电源指示灯用于指示电源状态。

2)激光器的温控设计

由于激光器内部构造的原因,随着结温的升高,其输出功率将降低。当结温过高时,其输出功率将急剧减少,甚至损坏激光器。另外,随着结温的升高,其门限电流也将增大,噪声增加,波长发生变化。因此,控制结温是激光器稳定工作的前提。以免在给定的偏置电流下输出的光功率随环境温度而变化。

本次设计所选用的激光器模块中装有用于温度控制的半导体制冷器(TEC)和热敏电阻,便于后续的温度控制。具体实施方案是在激光器的控制系统中加入一个闭环温度反馈,恒温控制部分由 ADN8831 作为主控芯片。ADN8831 是一款单芯片 TEC 控制器,它集成了两个零漂移、轨到轨比较器和一个 PWM 驱动器。其中,独特的 PWM 驱动器采用模拟驱动器工作,在 H 桥模式下控制外部选择的 MOSFET^[14]。通过检测来自 TEC 的温度检测器反馈信号,ADN8831 可以驱动 TEC 以建立连接至 TEC 模块的激光二极管或无源组件的可编程温度。

AND8831 的温度设定是通过电阻分压器之间的模拟电压逼近来实现,根据所采购的激光管内置 TEC 的温度探测特性,即在 25 °C 时电阻值是 10 kΩ,将电阻网络设计为当电阻分压器两端的电压接近相等时,激光管内置 TEC 探测温度电阻为 10 kΩ。另外,为便于查看所设定温度,将设定温度值表现为电压输出,供控制单元查看。ADN8831 允许的最大 TEC 驱动电流为 4 A,然而电流并不是越大越好,根据官方建议和所购激光器的参数,选择正向电流 2 A,负向电流 1.5 A。该温控芯片的大致工作流程是热敏电阻检测到激光器的工作温度通过 TEC+ 端口输出,将其与 TEMPSET 端口输出的设定温度值的差值输入给 ADN8831,ADN8831 将利用自身芯片内部的 PID 算法、补偿网络等功能产生合适电流对 TEC 进行控制,从而控制该 TEC 是制冷还是加热,进而控制激光器的温度,使其稳定在一定范围内,由此构成一个闭环温控系统。图 3 所示为该激光器的 TEC 控制结构,图 4 所示为激光器的驱动控制和温度控制实际电路。

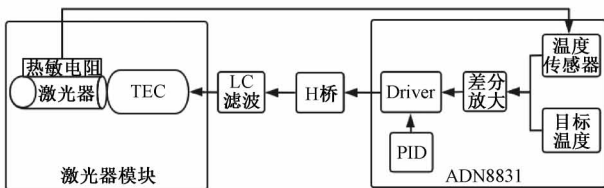


图 3 TEC 控制结构

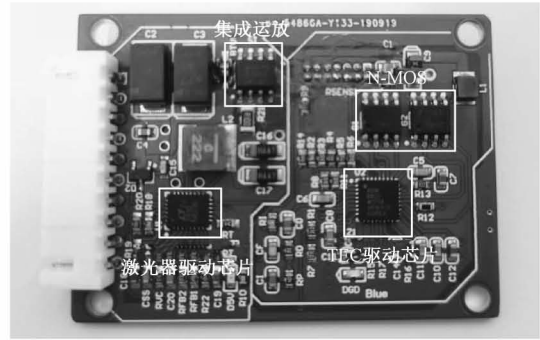


图 4 激光器控制实际电路

1.2 微型光谱仪数据采集及处理模块设计

1)微型光谱仪的光学结构

为了兼顾整机仪器的空间利用率、灵敏度和精确度,并在一定程度上增强拉曼光谱强度,本设计采用改进后的非对称交叉型 C-T 光学结构,该结构主要是由光纤接头、狭缝、光栅、柱面镜、CCD 以及多个反射镜构成,其结构原理如图 5 所示。该结构不仅能在宽波段范围极大抑制像散,提高系统能量,同时可以缩减系统体积,便于拉曼光谱仪的便携化设计^[15]。该部分的工作过程如下:包含被测物信息的拉曼散射光谱通过光纤传输至微型光谱仪模块的狭缝处,然后经过一系列的准直、分光 and 聚焦后按照波长大小排列入射到线阵 CCD 上,所以 CCD 上每个位置的像元与接收到的光的波长有一定的函数关系,确定其函数关系的过程称之为波长定标^[16]。只有进行波长定标后的光谱仪才可正常使用。

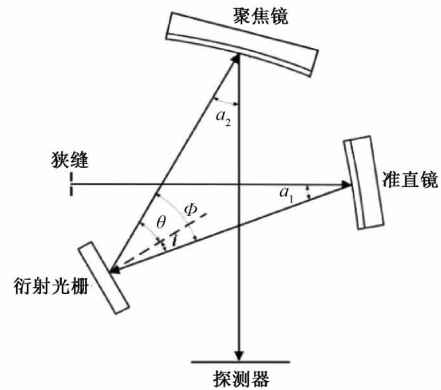


图 5 非对称交叉型 C-T 光路原理

2)微型光谱仪的电路设计

微型光谱采集电路是手持式拉曼光谱仪的核心部分之一,它实现了将带有拉曼信息的光信号转换成数字信号,并将数字信号传输至主控模块的功能。该电路由 CCD 模块、信号处理模块、AD 转换模块、数据缓存模块、数据传输模块以及 FPGA 模块等构成。

由于研制的拉曼光谱仪的中心波长是 785 nm,测量范围是近红外区域,且拉曼光谱信号非常微弱,通过对比各个

光电探测器的光谱响应曲线,索尼公司生产的 ILX511 传感器灵敏度较高,故此 CCD 作为此次设计的光电探测器。此款 CCD 有 2 048 个像元,波长响应范围是 200~1 100 nm,具有灵敏度高、暗电流小等优点。此外,该 CCD 有两种工作模式可供用户选择:采样保持模式和无采样保持模式,本文选用采样保持模式。由于不同物质散射的拉曼光谱的强度不一致,过强的光谱会导致过曝,过弱的光谱会淹没在噪声中,所以本次设计在 FPGA 中设置了有关积分时间的寄存器来控制 CCD 的积分时间,进而间接控制进入电路系统的进光量。在仪器工作过程中,ARM 主控模块可以直接修改 FPGA 中的寄存器,进而对 CCD 驱动波形进行重配置,默认积分时间大小是 10 ms。这种用户可自定义的工作模式和积分时间在一定程度上增加了该款 CCD 的普适性。

由于 CCD 输出的信号与后端数模转换器量程不匹配,因而在两者之间加入一个信号处理电路,该处理电路由 1 个电压跟随器和 1 个反相放大器构成。后端选用 16 bit 的 AD9826 作为本次数模转换的功能芯片,该数模转换芯片专为线阵 CCD 而设计,相较于传统的 12 bit 数模转换器,AD9826 具有转换精度高、速率大等优点。模拟信号在 AD9826 中以一定速率被转换成一个一个的 16 bit 数字信号,这就涉及到信号的跨时钟域传输问题。此外,为了节约 PCB 板面积,故而在 FPGA 内部例化了一个 FIFO 用于数据缓存,大小设置为 $8 \times 8\ 192$ bit。

微型光谱采集电路模块需要驱动 CCD、AD9826 等器件的工作,周围器件较多,所以选择配备 144 个引脚的 Altera 公司的 MAX10 系列芯片—10M04SAE144 作为其他器件的驱动芯片,该芯片内部具有丰富的逻辑资源,可满足该光谱仪模块的功能需求。

当系统上电后,ARM 主控模块发送的开始采集指令通过 SPI 总线传送给 FPGA,完成基本参数的配置。外界用户通过按下采集按键,触发外部触发信号,使能激光器与 CCD 工作。激光器点亮并使激光照射到样品上,并通过拉曼探头收集散射回来的拉曼光,随后光谱仪前端光路将拉曼光按照波长大小进行分光。接着 CCD 负责将接收到的光信号转换成电信号,输出的模拟信号由 AD9826 转换成数字信号之后,再使能 FIFO 的写使能端口,将数据存储至例化的 FIFO 中,再经由 SPI 上传至上位机,最后由上位机对数据进行分析处理形成拉曼光谱显示出来。如图 6 所示,即为该部分的实物电路图。

1.3 电源模块设计

该系统的电源模块不仅要给微型光谱仪模块供电,也要给激光器模块和 ARM 主控模块供电,且不同模块间的供电电压各不相同。激光器模块采用 5 V 供电电压,ARM 主控模块为 4 V 供电,微型光谱仪模块内部由于 FPGA 芯片采用 3.3 V 供电,AD 等器件采用 4 V 供电,其部分引脚需要 3.3 V 电压,ILX511 采用 5 V 电压供电,故在整个系

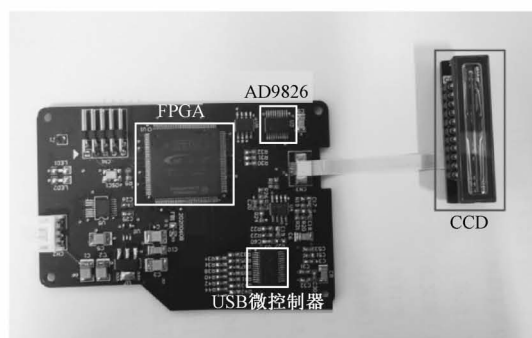


图 6 微型光谱仪实物图

统的电源设计中需要进行多种电压转换电路的设计。为了节约设计空间和成本,在保证电源输出稳定的基础上,设计采用可充电+5 V 锂电池作为供电电源,以 bq24296 作为电源管理芯片,它是一款高度集成开关模式电池充电管理和系统电源路径管理器件,支持用户自定义配置参数并有高达 90% 的电量转换效率,本设计采用 USB OTG 升压模式,使其输出电压为 5 V,充放电电路设计如图 7 所示。该电路可输出 5、4 和 3.3 V 三种电压等级的直流电压,并使用低压差线性稳压芯片 SPX3819 进行降压操作,可提供最大为 0.5 A 的电流,完全适用于该系统各功能模块与器件。选用容量为 2 500 mAh 的聚合物锂电池,在充满电的情况下可供手持式拉曼光谱仪连续工作约 5 h。

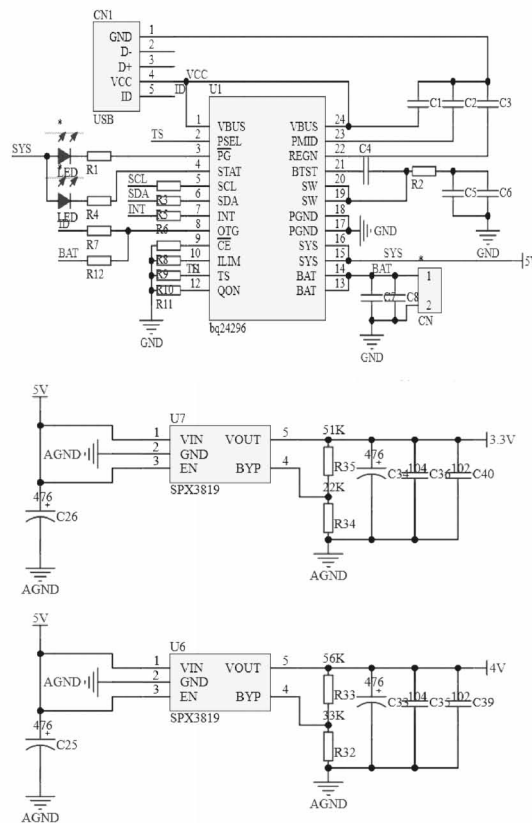


图 7 bq24296 充放电电路

1.4 ARM 主控模块设计

本系统采用一款以三星 Exynos4412 为核心处理器的 ARM 主控板,该主控板设计了丰富的外设接口和较大的内存空间,性能上也更加稳定和高效。除了对前文中各个模块的控制,该控制板可以与 Android 软件开发平台联合,开发了一套手持式拉曼光谱仪软件,其主要功能是接收来自底层硬件的光谱数据,对其进行去噪、寻峰、数据库匹配等操作,最后呈现出待测物的拉曼光谱以及其他的一些参数;同时该软件还添加了调节底层器件各配置参数的控件,例如 CCD 的积分时间、激光器输出功率等。图 8 所示为本次设计 ARM 控制流程。

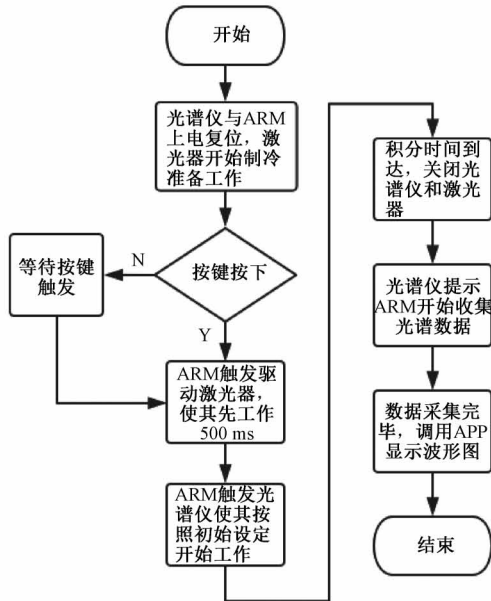


图 8 ARM 控制流程

2 手持式拉曼光谱仪性能指标分析

基于前文中对该数据采集系统的研究,设计出如图 9



图 9 手持式拉曼光谱仪实物

所示的硬件实物。为了检测该手持式拉曼光谱仪的各项性能,实验前对微型光谱仪模块进行波长定标,采用汞氙灯作为标准光源,得出的光谱图如图 10 所示,由 576.9 nm 和 579 nm 处的特征峰半波峰说明该部分的分辨率可达 1.5 nm 左右。

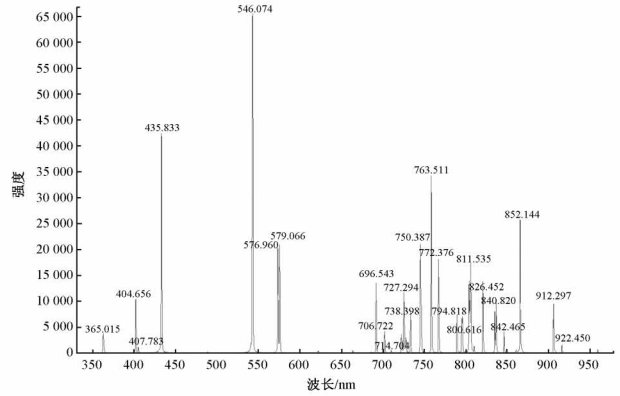


图 10 微型光谱仪模块的汞氙灯光谱图

选用拉曼光谱谱峰明显的待测物—无水乙醇、甲醇和乙酸乙酯进行实际测量实验,得出的测量结果如图 11~13 和表 1 所示。由各待测物的拉曼光谱图可得,各特征峰的偏移误差控制在 1.3% 以内,完全满足实际的测量需求。

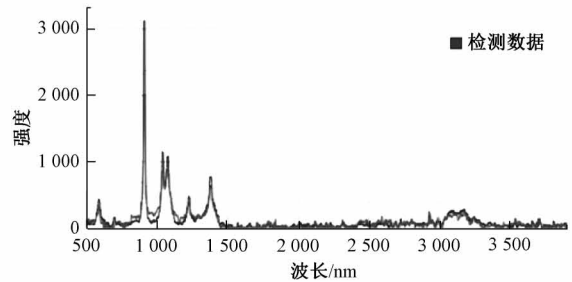


图 11 无水乙醇的拉曼光谱

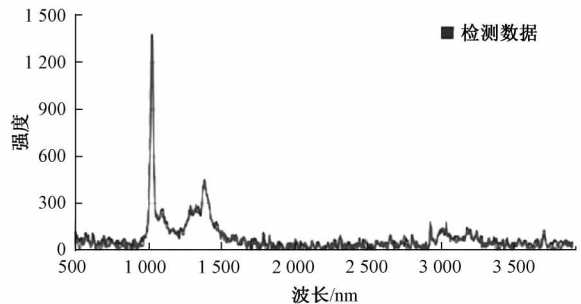


图 12 甲醇的拉曼光谱

表 1 3 种测试物的检测时间和相似度

物质名称	检测时间/s	特征峰相似度/%
无水乙醇	5.31	98.71
甲醇	5.56	98.33
乙酸乙酯	5.59	97.97

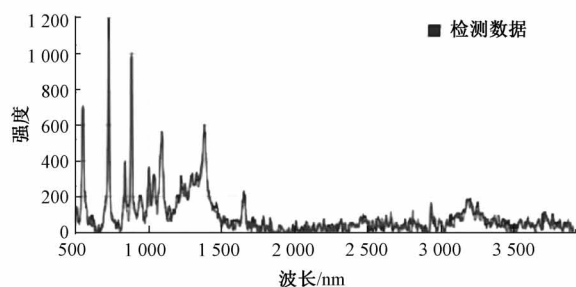


图13 乙酸乙酯的拉曼光谱

3 结 论

本文设计了一种手持式拉曼光谱仪数据采集系统,完成了其三大组成模块的电路设计和研究,高度集成了电路系统,使得该数据采集系统在很大程度上节约了手持式拉曼光谱仪的空间体积,最后成品长 18.7 cm,宽 9.2 cm,高 4.4 cm,体重约 0.42 kg,适用于户外操作和随身携带。此外,经过实验对比与分析,该系统可稳定运行并拥有高达 1.5 nm 的分辨率,且在 6 s 内即可得到与标准库匹配度高达 98.7% 的检测结果,能够满足毒品、酒精等待测物的现场测量,具有良好的市场前景,后期需进一步完善拉曼光谱数据库和上位机软件的功能模块。

参考文献

- [1] 张涛,孙丹,闻健明,等.基于拉曼光谱的易制毒化学品轨迹综合查缉装备[J].警察技术,2016(4):8-10.
- [2] 陈朝方,林国生,陈剑峰,等.便携式拉曼光谱仪技术进展及在海关现场查验中的应用[J].广州化学,2019,44(6):56-65.
- [3] 胡阳,董明利,于明鑫,等.基于高波数拉曼光谱的口腔癌检测方法研究[J].仪器仪表学报,2019,40(12):113-120.
- [4] 郝凤龙,张涛,于海辉,等.手持式拉曼光谱危爆品检测仪的研究与设计[J].分析仪器,2018(5):11-15.

- [5] 洪光烈,梁新栋,雷武虎,等.基于马赫-曾德干涉仪的傅里叶变换光谱仪[J].红外,2018,39(1):1-7.
- [6] 吕前辉,王小华,沈爱国,等.拉曼光谱技术在现场快检分析领域中的应用[J].分析测试学报,2019,38(5):612-617.
- [7] 陈旭,夏果,马艳,等.基于FPGA的光谱数据采集系统设计[J].电子测量技术,2019(14):157-162.
- [8] 李素文,韦民红,戴海峰,等.基于QE65000光谱仪和DOAS的大气痕量气体浓度测量[J].光电子·激光,2014(5):920-924.
- [9] 孙振华,余镇岗,黄梅珍,等.小型化拉曼光谱仪的优化设计及应用[J].光电子·激光,2015(6):1132-1137.
- [10] 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):1-7.
- [11] 何蔚,孙贤君.拉曼光谱应用技术研究[J].标准科学,2018(3):70-75.
- [12] 魏科宇.基于面阵CCD的便携式拉曼光谱仪控制系统研究[D].杭州:浙江大学,2015.
- [13] 缪存孝,邢国柱,刘建丰,等.高精度激光器电流驱动与交流温控系统设计[J].红外与激光工程,2019,48(9):1-8.
- [14] 周星光,李玥峰,詹世湘,等.基于半导体制冷技术的自动温控箱的研究与设计[J].国外电子测量技术,2019,38(9):55-59.
- [15] 夏果,吴骥,黄禅,等.交叉非对称型 Czerny-Turner 光谱仪光学系统设计[J].光子学报,2017,46(4):21-28.
- [16] 谢印忠,庄松林,张保洲.基于线阵CCD的光谱仪定标研究[J].仪器仪表学报,2011,32(3):546-550.

作者简介

陈巧芹,硕士研究生,主要研究方向为光谱仪电子学。

E-mail:qqchen@mail.hfut.edu.cn

夏果(通信作者),助理研究员,硕士研究生导师,主要研究方向为光谱仪设计与应用。

E-mail:xiaguo@hfut.edu.cn