

基于 MEMS 微镜技术的近红外光谱仪的研究^①

苏雷龙^② 蒋书波 程明霄 何野^a 徐波^b

(南京工业大学江浦校区自动化与电气工程学院 南京市浦口区浦珠南路 30 号 211816)

^a(南京工业大学高技术研究院 南京市新模范马路 5 号南京工业大学科技创新大楼 210009)

^b(江苏英特神斯科技有限公司 南京市新模范马路 5 号南京工业大学科技创新大楼 210009)

摘 要 针对传统近红外光谱仪的不足, 设计了基于 MEMS 微镜技术的近红外光路, 并对其电路和
处理软件做出简要描述, 最后用标准样品进行实验, 实验结果表明, 该光谱仪在重复性和稳定性得到保证
的前提下可以做到小型化、便携化。

关键词 微机电系统; 近红外光谱仪; 光路; 便携化

中图分类号: O657.33

文献标识码: A

文章编号: 1004-8138(2011)02-0494-05

1 引言

近红外光谱分析技术是一种基于近红外吸收的综合计算机科学和化学计量学等多学科的综合
分析技术。近红外光谱能很好的反映 C—H、N—H、H—O 等基团的信息, 并且近红外光在常规光纤
中具有良好的传输特性。伴随着微机电系统(Micro-Electro-Mechanical Systems, MEMS)技术的兴
起, 国内外开始了对基于 MEMS 光栅技术的近红外光谱仪研制的探索, 但截至目前为止还没有商
品化的基于 MEMS 技术的光谱仪。MEMS 技术在近红外光谱仪中的应用对于推动光谱仪的小型
化、便携化具有重要意义。

2 传统近红外光谱仪简介

为了得到一张连续的光谱, 传统的光谱仪采用各种手段对光路进行设计, 使得检测器可以对仪
器测量波段内的各点进行扫描。主要有以下几种: a: 滤光片型; b: 光栅色散型; c: 傅里叶变换型;
d: 声光可调滤光器型; e: 阵列检测器型等。以上几类仪器虽然可以获得全波段光谱, 但是由于使用
了机械移动部件或者是采用了昂贵的阵列检测器, 使得仪器在便携性、波长稳定性、测量重复性及
成本等方面都存在着不可避免的问题, 使得近红外光谱仪走出实验室用于工业现场存在着或多或
少的局限^[1]。随着 MEMS 技术的发展, 将 MEMS 技术应用到近红外光谱仪中, 可以有效地解决仪
器小型化、便携化及仪器成本等实际问题。

3 MEMS 微镜技术及近红外光谱仪的总体设计

3.1 闪耀光栅

光栅是光谱仪内最重要的分光元件。根据光学光栅是用于透射光还是反射光分为透射光栅和

^① 南京工业大学青年教师学术基金重点项目资助

^② 联系人, 手机: (0) 15195982561; E-mail: smartmouse_1984@163.com

作者简介: 苏雷龙(1984—), 男, 河南省南阳市人, 硕士研究生, 主要研究方向为光谱分析仪器。

收稿日期: 2010-06-28; 接受日期: 2010-07-22

反射光栅。透射光栅是在光学平板上刻划出等宽等间距的刻痕, 刻痕处不透光, 未刻处是透光的狭缝; 反射光栅是在反射镜上刻划一道道划痕组成, 在刻痕上发生漫反射, 未刻处在反射方向发生衍射, 反射光栅分为平面反射光栅和凹面反射光栅。根据光栅理论, 光谱的级次越高分辨本领和色散本领越大, 光强度的分布却是级次越低光强越大。对于透射光栅, 零级光谱占了总能量的很大一部分, 但是零级是没有色散的, 对后续的检测器来讲没有使用价值, 这对于光栅的应用是不利的^[2]。所以必须对

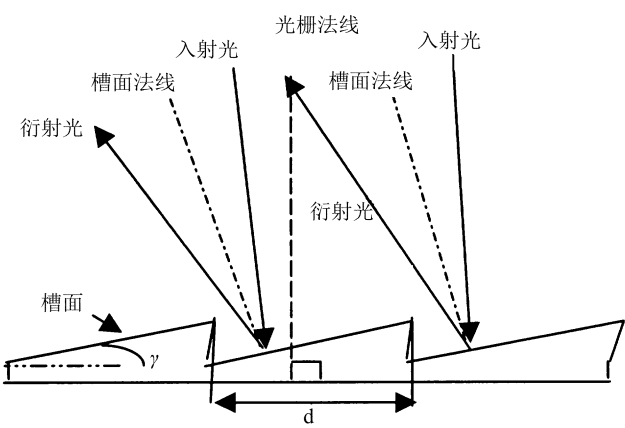


图 1 闪耀光栅示意图

传统的透射光栅改进以满足分光的要求。反射式的闪耀光栅可以有效的解决这一问题。图 1 为闪耀光栅的示意图。闪耀光栅属于平面反射光栅, 由闪耀光的相关理论可知, 光栅常数越小, 光栅的分光能力越强, 由此, 可根据光谱仪的精度要求来选择合适的光栅常数 d 。由于闪耀角的存在, 正好使单个槽面衍射的零级主极大值和诸槽面间干涉的零级主极大值分开, 从而使光能量从干涉零级主极大值转移并集中到某一级光谱上去。在现代光栅光谱仪中大量使用的是闪耀光栅^[3,4]。

3.2 MEMS 微镜

MEMS 是指采用集成微电子制备工艺技术批量生产的, 具有模拟地提供机械、电子功能的多器件系统。它的一个很重要的特点就是可以采用微机械加工技术在硅片上制作一些可以控制的、可动的微机械结构^[5,6]。随着 MEMS 技术的不断进步, 新近出现了 MEMS 微镜产品。本设计中使用的 MEMS 微镜如图 2 所示, 图中所示的平面镜被悬挂在整个 MEMS 芯片的中心, 图中以 N、S 标注的是 4 个磁体。

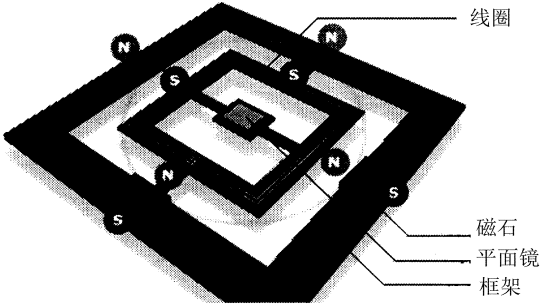


图 2 MEMS 微镜原理图

微镜加电后, 在磁场和控制信号作用下, 反射镜以悬挂它的金属线为轴往复振动, 根据外加控制信号的不同, 可以以横向或者是纵向为轴振动。这样, 入射光经过反射镜的反射后, 反射光就会在一个角度内反复扫描。这样的反射光再经过衍射光栅 就形成了一个能在一定区域内扫描的连续光谱, 只要合理的安置检测器的位置, 就可以检测到某个谱段范围内的全波谱。这正是基于 MEMS 微镜的光谱仪比使用转动部件分光的光谱仪的优势所在^[7]。

3.3 基于 MEMS 微镜的光路设计

基于 MEMS 微镜的光路避免了转动分光器件, 可以做到光路小型化、便携化, 同时也能够提高仪器的光路稳定性。光谱仪的光路如图 3 所示。光源采用英国 Scitec 公司的 IR-35 光源, 光源功率 4.2W, 光源波长范围完全覆盖近红外段, 满足使用需求。光源发出的光经过准直镜成为平行光, 平行光经过样品池后就携带了被测组分的基团信息, 然后入射到 MEMS 微镜上, MEMS 微镜在控制信号的作用下做往复振动, 这样, 从 MEMS 芯片出射的光就是一个在一定角度内扫描的光信号。这束平行光作为闪耀光栅的入射光, 从闪耀光栅出射的光就是要得到的谱段很窄的光。在单位时间

内,单点检测器检测的光是某个波长点的光,为了使检测器能够检测到更强的信号,在检测器前使用了汇聚透镜。

3.4 仪器总体设计

该仪器由两部分组成,下位机:光谱仪,负责光谱的采样;上位机:提供用户界面,通过 USB 接口和光谱仪通讯,对光谱仪进行校正、光谱及仪器信息的显示并对测得的光谱数据存储。系统的总体设计如

图 4 所示。光源产生的光经过样品池后就携带了被测组分的信息,经过光路可以实现对要求谱段内的全波扫描,由滤波和放大部分实现对微弱信号的调理,然后将该信号进行模数转换。由单片机负责对整个电路和 MEMS 微镜的控制以及与上位机的通讯,通讯部分由 USB 通讯实现。USB 驱动开发为 WDM 型设备驱动程序,开发环境为 Winxp DDK,具体实现限于篇幅不再给出。上位机实现对谱图数据的保存和预处理。并且能够根据用户要求和谱图数据绘制采样得到的谱图,上位机软件由 Visual C+ + 实现。

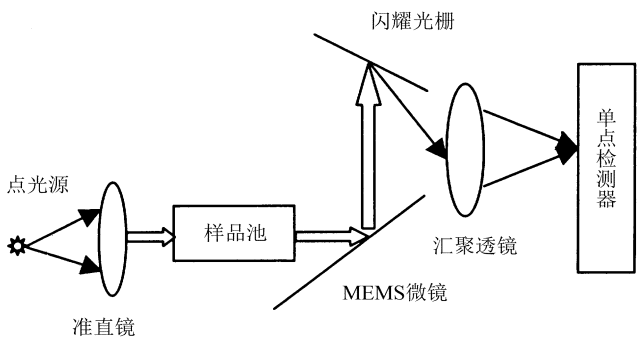


图 3 系统简略光路图

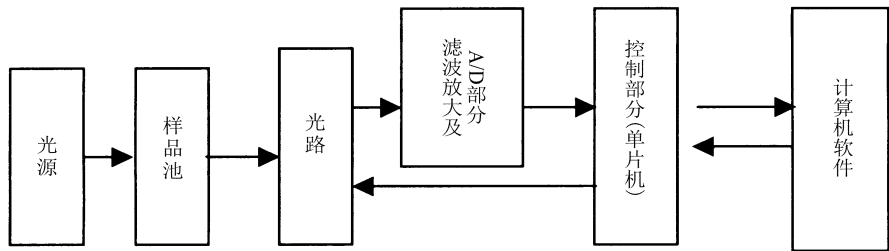


图 4 系统总体设计图

4 实验部分

实验的目的是为了验证仪器的重复性和对样品浓度的分辨率。实验所用的样品为乙腈和水的混合溶液,待测量是乙腈中水的含量,单位为 $\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$ 。无水乙腈(上海星可生化有限公司,含量>99.9%,水含量<0.004%)。实验用水为二次蒸馏水。为了验证仪器的重复性,在不同时段,不同日期多次重复进行该实验。部分样品数据如表 1 所示。

表 1 部分实验样品数据

序号	水分含量($\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$)	实验时环境温度($^{\circ}\text{C}$)
1	1993	33.6
2	1034	33.4
3	609	33.4
4	307	33.6
5	102	33.7
6	5065	33.8
7	3008	33.6
8	211	33.4

标准溶液用实验室方法滴定配制,精确度高。实验所用的全部样品水含量范围从 $102\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$

到 $10065\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$, 其浓度间隔每组相差大约 $200\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$, 总的样品数为 40 组, 表 1 为从中抽取的部分样品数据。测定这些样品的光谱数据时在常温下测定。为了避免温度、环境的干扰, 实验在封闭的房间进行, 由于乙腈的易挥发性, 实验室保持室内温度恒定, 无大的气流流动, 样品采取密封措施, 并且光谱仪远离有电磁干扰的设备。每次做完一组实验后, 均对样品池用大量清水冲洗, 冲洗后将样品池烘干, 避免前次实验对后次实验的影响以及由于清水冲洗造成对标准样品的污染。采样得到的光谱谱图数据由上位机软件存储。图 5 为乙腈的谱图, 纵坐标为吸光度, 横坐标为波长。如果没有样品时谱线为一条纵坐标值为 1 的横线, 也就是基线。由图 5 可以看出, 仪器的基线在 900nm 到 1800nm 左右基线比较平稳, 但是, 在 1800nm 以后的谱段, 基线下拉是很严重的。图 6、图 7 为从所有测试样品中抽取的几组数据绘制的谱图。其中图 6 为谱图前面部分的放大图, 图 7 为最大吸收峰处的放大图, 两幅图中自上至下第一条虚线对应浓度为 $102\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$ 的样品, 第二条粗实线对应 $307\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$ 的样品, 第三条点画线对应 $509\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$ 的样品, 第四条粗实线对应 $1034\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$ 的样品, 最下面一条虚线对应 $1997\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$ 的样品。从谱图中可以看出, 仪器在实验中的波长稳定性是比较好的, 吸收峰的位置在横坐标上保持一致; 在放大的谱图上可以看出仪器对于组分浓度间隔 $200\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$ 左右仍然能够使两条谱图无交叉。

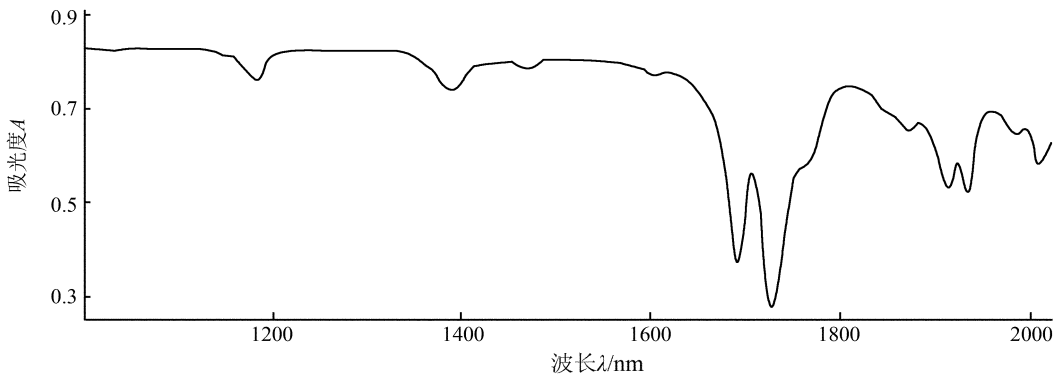


图 5 乙腈近红外光谱谱图

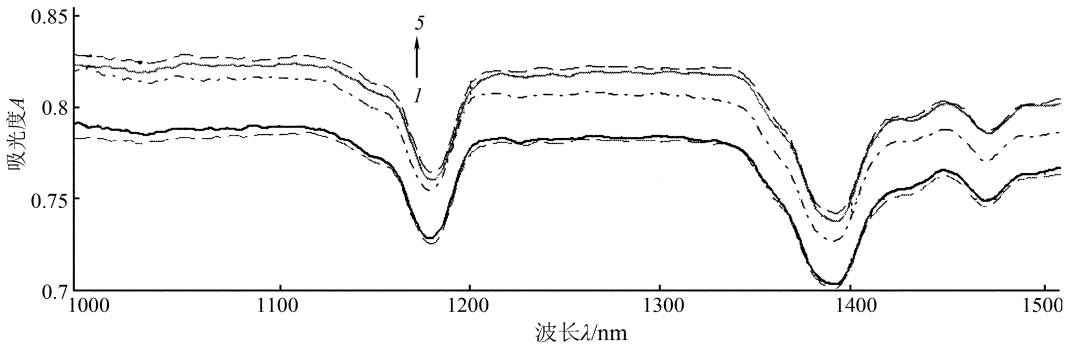


图 6 部分数据谱图

1—— $1997\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$; 2—— $1034\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$; 3—— $509\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$; 4—— $307\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$; 5—— $102\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$ 。

绘制上述谱图使用的数据是样品的原始数据, 没有经过数据的预处理, 也没有做基线校正。从原始数据的谱图来看, 该光谱仪对于乙腈样品能够做到 $200\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$ 的分辨率。在实验中, 当两组组

分的含水量间隔接近 $100\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$ 时, 仪器就已经无法分辨出来, 有时还会产生谱图的交叉。综合仪器的各种原因考虑, 可能是因为温度漂移和光源能量波动引起仪器测得光谱数据的波动, 从而使得含量相近的样品光谱差别被波动湮灭。针对这种情况, 在后期的仪器改进中会考虑使用更高精度的光源电源, 提高对检测器的温控精度, 使用更加灵敏的检测器以及提高信噪比和适当增大放大倍数等措施来提高仪器对样品浓度的分辨率。从不同日期不同时间的多组数据对比可以看到, 光谱谱峰的偏移控制在几个纳米之内, 重复性是可以接受的。虽然该光谱仪还有待完善, 但是根据实测的数据, 表明 MEMS 微镜用于近红外光谱仪是可行的。

5 结论

对近红外分析结果影响显著的条件主要有两个, 一是光谱仪, 二是对实验数据进行分析预测的化学计量学模型。通过实验数据验证了在采用了 MEMS 技术使仪器做到小型化、便携化的同时, 光谱仪的硬件是可以满足高精度测量要求的, 为建立合适的预测模型, 得到高精度预测结果提供了硬件支持。但是从仪器长时间运行的数据来看, 基线稳定性仍然有待改进, 需要更好的控温措施降低仪器的温度敏感性、提高信噪比、优化光路结构等等。

参考文献

- [1] 陆婉珍. 现代近红外光谱技术[M]. 第2版. 北京: 中国石化出版社, 2007.
- [2] 梁铨廷. 物理光学[M]. 第3版. 北京: 电子工业出版社, 2008.
- [3] 李全臣, 蒋月娟. 光谱仪器原理[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1999.
- [4] 张发国, 喻洪麟. 闪耀光栅原理及其应用[J]. 重庆文理学院学报(自然科学版), 2008, 27(1): 48—51.
- [5] 安飞. MEMS 可编程光栅及其在气体监测中的应用研究[D]. 西安: 西北工业大学, 2007.
- [6] 褚小立, 陆婉珍. 近红外光谱仪新进展[J]. 分析仪器, 2008, (1): 3—6.
- [7] Kraft M, Kenda A, Frank A *et al*. Single-Detector Micro-Electro-Mechanical Scanning Grating Spectrometer[J]. *Anal. Bioanal. Chem.*, 2006, 386(5): 1259—1266.

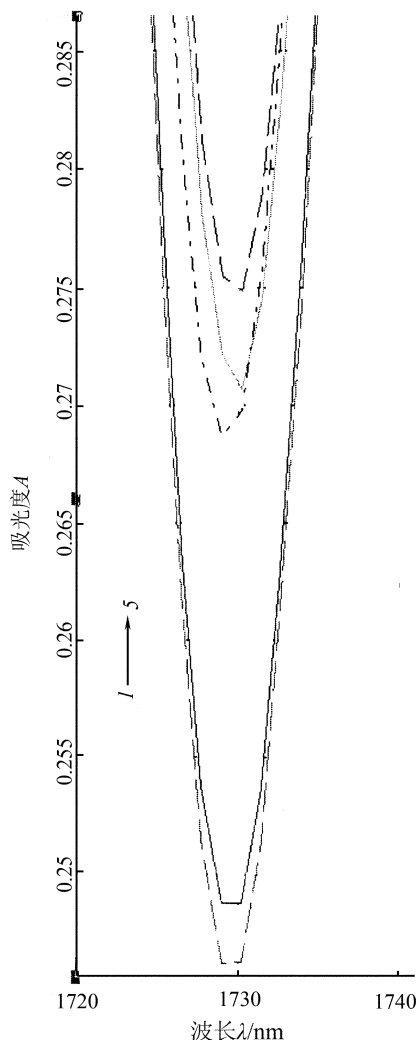


图 7 吸收峰处谱图

1—— $1997\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$; 2—— $1034\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$;
3—— $509\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$; 4—— $307\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$;
5—— $102\mu\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$ 。

Research on the Application of NIR Spectrometer Based on MEMS Technology

SU Lei-Long JIANG Shu-Bo CHENG Ming-Xiao HE Ye^a XU Bo^b
(Institute of Automation and Electrical Engineering, Jiangpu Campus of Nanjing University of Technology,
Nanjing 211816, P. R. China)

^a(Hi-Tech Research Institute of NJUT, Nanjing, 210009, P. R. China)

^b(Jiangsu Intellisense Technology Co. Ltd., Nanjing 210009, P. R. China)

Abstract To avoid the deficiency of traditional NIR spectrometer, a NIR light path based on the MEMS mirror technology was designed. The processing circuit and software were briefly described. The experiment with standard samples showed that the instrument can be small and portable as well as stable and repetitive.

Key words MEMS; NIR Spectrometer; Light Path; Portable