

文章编号: 1672-8785(2017)07-0006-09

高光谱分辨率宽刈幅温室气体探测光谱仪设计

赵 哲^{1,2,3} 丁 雷^{2,3}

(1. 中国科学院大学, 北京 100049;

2. 中国科学院上海技术物理研究所, 上海 200083;

3. 中国科学院红外探测与成像技术重点实验室, 上海 200083)

摘要: 为了探测地球大气中的温室气体含量, 设计了4种空间分辨率为2 km、地面刈幅宽度为500 km、轨道高度为690 km的气体探测仪光学系统。4个波段的中心波长分别为1.606 μm(弱CO₂)、1.660 μm(CH₄)、2.064 μm(强CO₂)和0.765 μm(O₂)；光谱分辨率分别为0.08 nm/20000、0.08 nm/20000、0.1032 nm/20000和0.045 nm/17000。整个光学系统由浸没式平面衍射光栅、利特罗式光学结构以及前置系统构成。该系统在奈奎斯特频率处的调制传递函数(Modulation Transfer Function, MTF)值接近80%，且单个像元尺寸内集中了接近90%的衍射能量，可以实现高光谱探测。

关键词: 光学设计；浸没式衍射光栅；温室气体探测；光谱仪；高光谱分辨率；宽刈幅

中图分类号: TH74; TP73 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1672-8785.2017.07.002

Design of High Spectral Resolution and Wide Swath Spectrometer for Greenhouse Gas Detection

ZHAO Zhe^{1,2,3}, DING Lei^{1,2}

(1. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

2. Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China;

3. CAS Key Laboratory of Infrared System Detection and Imaging Technology, Shanghai 200083, China)

Abstract: To detect the concentration of greenhouse gas in the atmosphere of the earth, four kinds of gas detection optical systems with the spatial resolution of 2 km, the ground swath of 500 km and the orbit altitude of 690 km are designed. The central wavelengths of the four wavebands are 1.606 μm (weak CO₂), 1.660 μm (CH₄), 2.064 μm (strong CO₂) and 0.765 μm (O₂) respectively. Their spectral resolutions are 0.08 nm/20000, 0.08 nm/20000, 0.1032 nm/20000 and 0.045 nm/17000 respectively. The whole system consists of an immersed plane diffraction grating, a Littrow optical structure and a front optical system. Its Modulation Transfer Function (MTF) at the Nyquist frequency is close to 80% and the diffraction energy in a single pixel size is close to 90%. So, the system can be used to implement hyper spectral detection.

Key words: optical design; immersed diffraction grating; greenhouse gas detection; spectroscopy; high spectral resolution; wide swath

收稿日期: 2017-03-14

作者简介: 赵哲(1990-)，男，河北邢台人，硕士研究生，主要从事光学设计方面的研究。

E-mail: alleria_zz@163.com

0 引言

大气中的部分成分(如 CO₂ 和 CH₄ 等)可以让来自太阳的短波辐射畅行无阻, 而来自地面的长波红外辐射则被强烈吸收, 从而造成近地层温度升高。因此, 这些气体被称为温室气体, 这种增温效应也就是温室效应^[1]。

2005 年 2 月 16 日, 旨在遏制全球气候变暖的《京都议定书》正式生效, 其中明确规定了发达国家对 CO₂ 等温室气体排放量的削减目标。自此温室气体排放量成为了国际外交谈判中的重要砝码。

目前, 星载温室气体探测光谱仪主要有大气制图扫描成像吸收光谱仪(SCanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartographY, SCIAMACHY)、温室气体观测卫星(Greenhouse gases Observing SATellite, GOSAT)、轨道碳观测卫星(Orbiting Carbon Observatory, OCO)以及碳观测卫星(CarbonSat)等。其中, GOSAT 是傅里叶变换光谱仪, 其余皆为光栅光谱仪。

SCIAMACHY^[2] 可探测的气体种类很多, 主要包括 CO₂、CH₄、O₂、CO、N₂O、NO₂ 和 H₂O 等。观测模式分为天底、临边、太阳/月亮掩星三种, 其中临边观测模式可以实现分层探测。该光谱仪带有扫描棱镜, 其空间分辨率较低, 轨道高度为 790 km, 覆盖宽度约为 1000 km。

OCO^[3-5] 可探测 CO₂ 和 O₂ 等气体(不包含 CH₄), 其观测模式分为天底、闪耀以及目标三种。它没有扫描棱镜, 依靠卫星姿态完成相应的探测模式; 其空间分辨率约为 3 km², 覆盖宽度为 10 km, 轨道高度约为 705 km。

CarbonSat^[6] 可探测 CO₂、CH₄ 和 O₂ 等气体, 其观测模式主要包括天底和闪耀, 探测波段与 OCO 类似, 空间分辨率为 2 km×2 km, 覆盖宽度约为 240 km 或 185 km, 轨道高度约为 794 km 或 594 km。为了提高色散能力, 采用硅浸没式反射光栅或者 PG+P 透射光栅; 使用狭缝匀质器以均匀 ALT 方向上的能量分布, 但保留 ACT 方向上的辐射强度的不均匀性。

本文通过对 OCO 和 CarbonSat 等温室气体探测光谱仪的结构进行对比和分析, 设计了一

种比较合理的光谱仪光学系统。在保证高光谱分辨率以及较高空间分辨率的条件下, 该系统的地面刈幅宽度达到 500 km。限于篇幅, 下面以弱 CO₂ 波段为例进行简单介绍。

1 光学设计的基本参数与导出参数

1.1 公共参数

1.1.1 基本参数

7 个基本公共参数如下: 轨道高度 H 为 690 km; 刈幅宽度 L 为 500 km; 前置系统的 $F/\#$ 为 1.8; 狹缝长度 l 为 5 mm; 像元尺寸为 20 μm×20 μm; 光栅入射角 i 为 45°; 光栅衍射级 m 为 1。

1.1.2 导出参数

导出参数如下: 前置焦距 f 为 6.9 mm; 视场角(FOV)为 2×19.92°; 瞬时视场角(IFOV)为 0.166°; 空间分辨率为 2 km×2 km; 入瞳直径(EPDI)为 3.8 mm; 空间维度像元数目(NG)为 250。

1.2 弱 CO₂ 参数

1.2.1 基本参数

基本参数如下: 波段为 1.590~1.622 μm; 中心波长为 1.606 μm; 带宽为 32 nm; 光谱维度像元数为 1000(光谱维度像元总尺寸为 20 mm); 分辨本领为 0.08 nm(20000); 初始设定的光栅常数为 1250 lp/mm ($d = 8 \times 10^{-7}$ m); 光学材料为 SiO₂。

1.2.2 导出参数

导出参数如下: 取样间隔为 0.032 nm; 过采样率为 2.5; 狹缝宽度(SW)为 50 μm; 折射率 n 为 1.443。

1.2.3 折射率计算

在 ZEMAX-EE 05 版本的 Glass Catalog 中, SiO₂ 的相关参数如下:

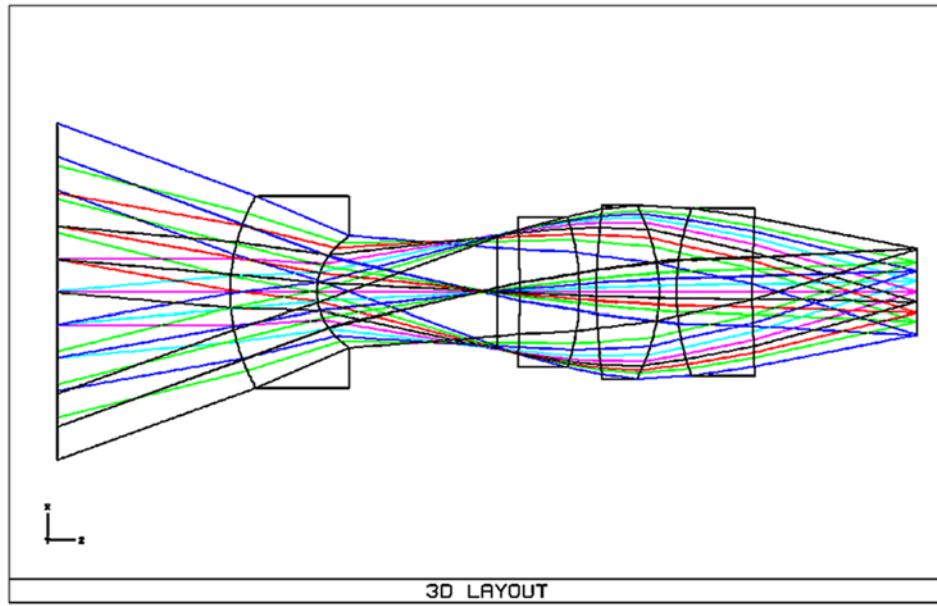
Catalog: MISC.AGF

Glass: SILICA

Formula: Sellmeier 1

计算公式如下:

$$n^2 - 1 = \frac{K_1 \lambda^2}{\lambda^2 - L_1} + \frac{K_2 \lambda^2}{\lambda^2 - L_2} + \frac{K_3 \lambda^2}{\lambda^2 - L_3} \quad (1)$$

图1 弱CO₂前置系统设计的效果图

式中, λ 的单位为 μm ; $K_1 = 6.961663 \times 10^{-1}$; $K_2 = 4.079426 \times 10^{-1}$; $K_3 = 8.974794 \times 10^{-1}$; $L_1 = 4.679148 \times 10^{-3}$; $L_2 = 1.351206 \times 10^{-2}$; $L_3 = 9.7934 \times 10^1$ 。

下面以中心波长为例进行计算:

$$\lambda^2 = 2.579236$$

$$\frac{K_1 \lambda^2}{\lambda^2 - L_1} = 0.697432$$

$$\frac{K_2 \lambda^2}{\lambda^2 - L_2} = 0.410091$$

$$\frac{K_3 \lambda^2}{\lambda^2 - L_3} = -0.024276$$

$$n^2 - 1 = 1.083247$$

$$n = \sqrt{2.083247} = 1.443346$$

综合波长的计算结果, 折射率 n 取 1.443。

2 光学设计方案

2.1 前置系统

前置系统的视场角为 $2 \times 19.92^\circ$, $F/\#$ 为 1.8, 入瞳直径为 3.8 mm, 焦距为 6.9 mm。该系统由 4 片镜(均采用 SiO₂ 材料制成)和 1 个光阑组成^[7]。在每一片镜的后表面上添加圆锥系数变量。

图1为前置系统设计的效果图。其中视场设置如下: X 轴 -20° 、 -14° 、 -10° 、 -5° 、 0° 、 5° 、 10° 、 14° 、 20° , 共计 9 个视场。图中颜色按视场区分。

2.2 分光系统

2.2.1 浸没式光栅的角色散率计算

根据光栅方程和折射率公式推导浸没式光栅的角色散率。为了区分微分算子和光栅常数, 本文给光栅常数添加下标 1。

图2为浸没式光栅衍射的示意图。其中, i 为入射角, 相对于光栅面的法线; θ 为衍射角, 相对于光栅面的法线; γ 为衍射光线在浸没介质入射面上的入射角, 相对于入射面的法线; ε 为衍射光线在浸没介质入射面上的折射角, 相对于入射面的法线。

$$n \sin \gamma = \sin \varepsilon \quad (2)$$

$$\frac{d\varepsilon}{d\gamma} = \frac{n \cos \gamma}{\cos \varepsilon} \quad (3)$$

$$nd_1(\sin i + \sin \theta) = m\lambda \quad (4)$$

$$\frac{d\theta}{d\lambda} = \frac{m}{nd_1 \cos \theta} = \frac{d\gamma}{d\lambda} \quad (5)$$

$$\frac{d\varepsilon}{d\lambda} = \frac{n \cos \gamma}{\cos \varepsilon} \cdot \frac{m}{nd_1 \cos \theta} \quad (6)$$

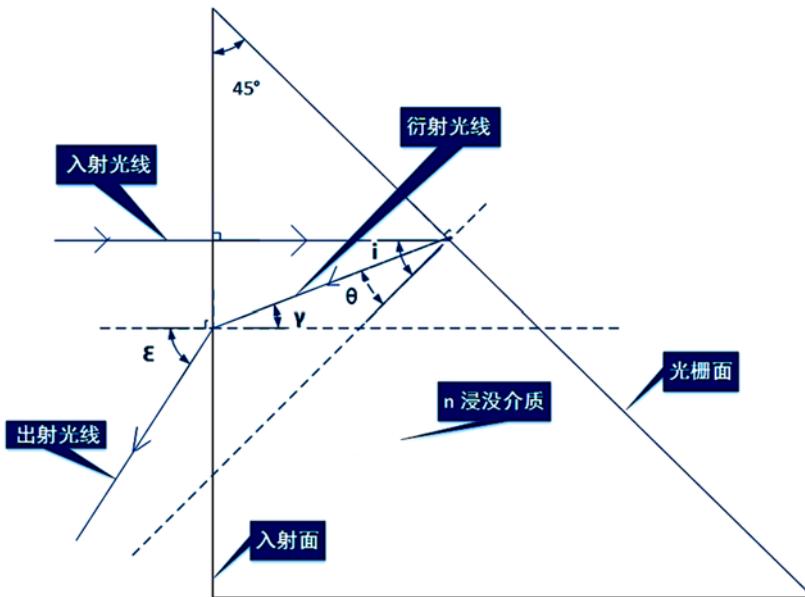


图2 浸没式光栅衍射的示意图

利用初始设定的光栅常数(1250 lp/mm, 即 $d_1 = 8 \times 10^{-7}$ m)、中心波长以及其他基本参数和导出参数进行计算:

$$\begin{aligned}\sin i + \sin \theta &= \frac{\lambda}{nd_1} = \frac{1.606 \times 10^{-6}}{1.443 \times 8 \times 10^{-7}} \\ \Rightarrow \theta &= 43.164240^\circ\end{aligned}$$

根据 $\theta + \gamma + i = 45^\circ$, 可以得到:

$$\frac{n \cos \gamma}{\cos \varepsilon} = 1.443803$$

又因为 $nd_1 \cos \theta = 8.420144 \times 10^{-7}$, 所以角色散率为

$$\frac{d\varepsilon}{d\lambda} = \frac{n \cos \gamma}{nd_1 \cos \theta}$$

$$= 0.171470 \times 10^7 \text{ rad/m} = 1.7147 \text{ mrad/nm}$$

2.2.2 会聚镜组焦距的计算

由光栅角色散率与线色散率的关系可得:

$$\frac{dL}{d\lambda} = f \cdot \frac{d\varepsilon}{d\lambda} \quad (7)$$

$$\Rightarrow f = \frac{\frac{dL}{d\lambda}}{\frac{d\varepsilon}{d\lambda}} = 0.367023 \text{ m} = 367.023 \text{ mm}$$

2.2.3 准直光束直径的计算

在光学系统光谱分辨能力一定的情况下, 存在以下关系式^[8]:

$$\Phi D = d_0 \cdot \frac{d\varepsilon}{d\lambda} \cdot \Delta\lambda \quad (8)$$

$$\Phi = \frac{SW}{f} \quad (9)$$

式中, Φ 为狭缝角的宽度; SW 为狭缝宽度; f 为前置系统的焦距; D 为入瞳直径; d_0 为准直光束的直径(为区分微分算子和光栅常数, 加下标0); $\frac{d\varepsilon}{d\lambda}$ 为光栅的角色散率; $\Delta\lambda$ 为光谱分辨率。

由式(8)可得:

$$d_0 = \frac{\Phi D}{\frac{d\varepsilon}{d\lambda} \cdot \Delta\lambda} \quad (10)$$

通过代入各个基本参数和导出参数可得:

$$\Phi D = 2.753624 \times 10^{-5}$$

$$\frac{d\varepsilon}{d\lambda} \cdot \Delta\lambda = 1.362312 \times 10^{-4}$$

$$\Rightarrow d_0 = 202.129 \text{ mm}$$

2.2.4 光栅面尺寸的计算

由准直光束直径可以得出光栅面在YZ平面内的长度: $\sqrt{2}d_0 = 285.810 \text{ mm}$ 。XZ平面内的长度等于前面镜片的最大半高。

2.2.5 视场设置

由于狭缝长5 mm, 且关于X方向对称, 所

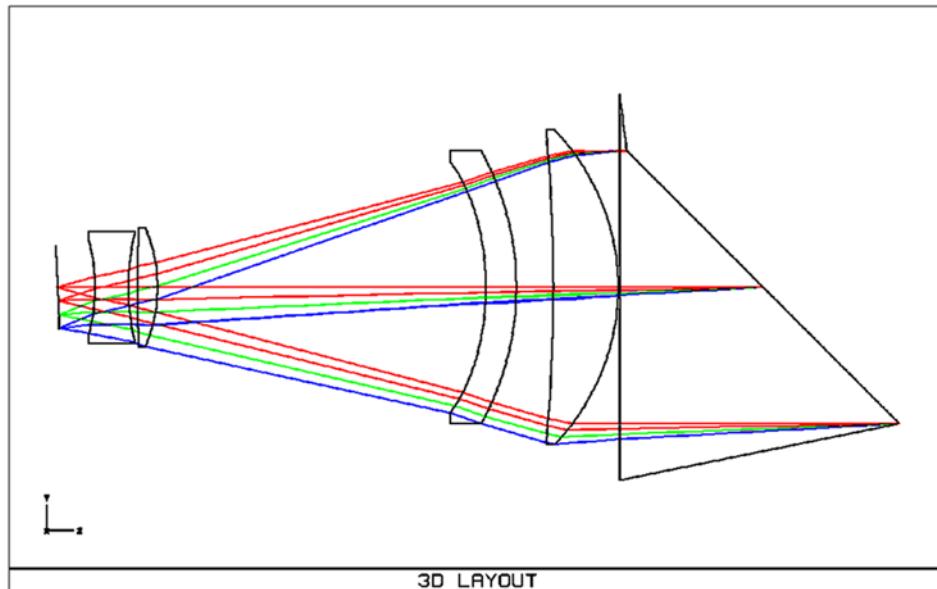


图3 分光系统的结构示意图

以根据 X 轴物高设置 5 个视场，即 0 mm、0.75 mm、1.25 mm、1.75 mm 和 2.5 mm。

2.2.6 基本光学结构

分光系统由狭缝、准直镜组、浸没式平面衍射光栅、会聚成像镜组以及像平面等五部分组成。本文光学系统采用利特罗式结构^[7]。该结构又称为自准直结构，其特点是准直镜组和会聚镜组为同一镜组，即经狭缝入射的准直光束和衍射后的会聚光束通过同一镜组。

图 3 为分光系统的结构示意图。其中，入射狭缝与光栅刻线平行，且垂直于纸面；中间 4 片镜子为准直结构（会聚成像结构），而且在第一、二、四片镜的前表面上增加 conic 变量，在第三片镜的前后两个表面上均增加 conic 变量；浸没光栅的光栅面与入射面的夹角为 45°。

分光过程如下：通过狭缝后的光束进入准直镜组并被准直，然后垂直经过浸没介质在光栅面上衍射；按波长分布出现不同的衍射角，接着返回浸没介质；进入会聚成像镜组，最后到达像平面。

3 光学设计结果与像质评价

3.1 设计效果

图 4 为 YZ 平面上的组装效果图。其中，蓝色（分光后的最下边位置）代表 1.590 μm，绿色

（分光后的中间位置）代表 1.606 μm，红色（分光后的最上边位置）代表 1.622 μm。

3.2 参数结果

参数结果如下：光栅常数为 1.246788 lp/μm，即 $d = 8.020610 \times 10^{-7}$ m；YZ 面光栅长度为 296.985 mm，入射面长度为 225 mm，其中光栅面与入射面的夹角为 45°；XZ 面光栅宽度为 240 mm；会聚/准直镜组的焦距为 370.753134 mm；准直光束的直径为 204 mm。

3.3 前置系统

图 5 为弱 CO₂ 前置系统的点列图。该系统的艾里斑直径为 6.994 μm。在 9 个视场中，边缘部分的方均根半径最大，其值为 6.667 μm；中心视场的方均根半径最小，其值为 1.987 μm。狭缝在像面成像的边缘部分为 X 方向 2.481 mm，小于狭缝半宽，可以被狭缝完全接收。像元大小 s 为 20 μm；在 25 lp/mm 处，MTF 最低为 84.3%（见图 6）。

3.4 组装

图 7 为 1.590 μm 波长下 9 个视场的点列图。其中，方均根半径的最大值为 10.660 μm，最小值为 2.374 μm，艾里斑直径约为 6.833 μm。

从系统的全场点列图中也可以看出狭缝在像面上的成像情况。上下限波长分布恰好符合参数设定，占据 20 mm，即 1000 个像元；而且

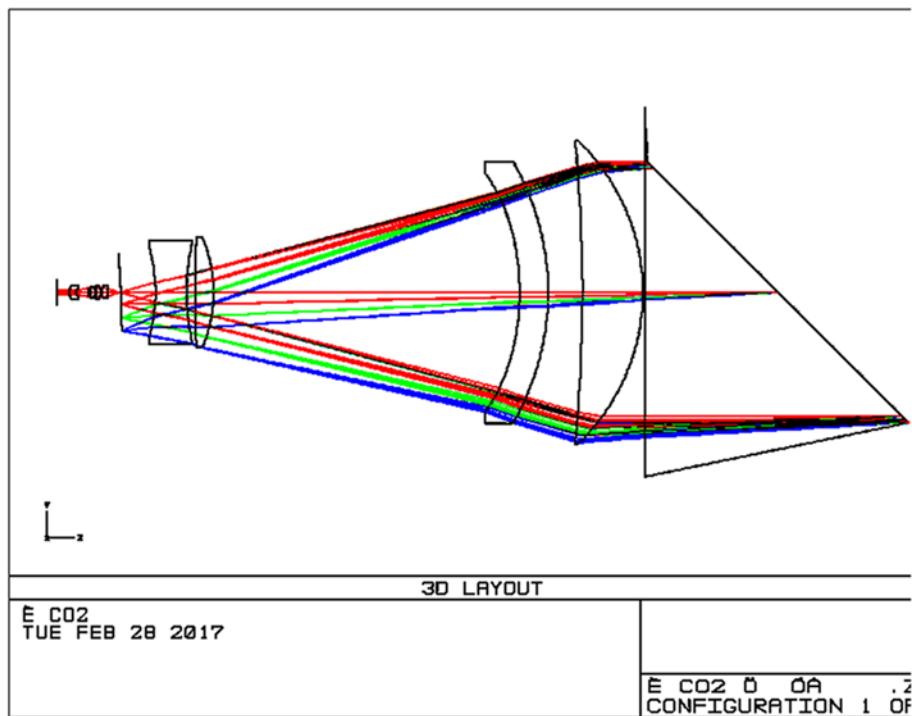
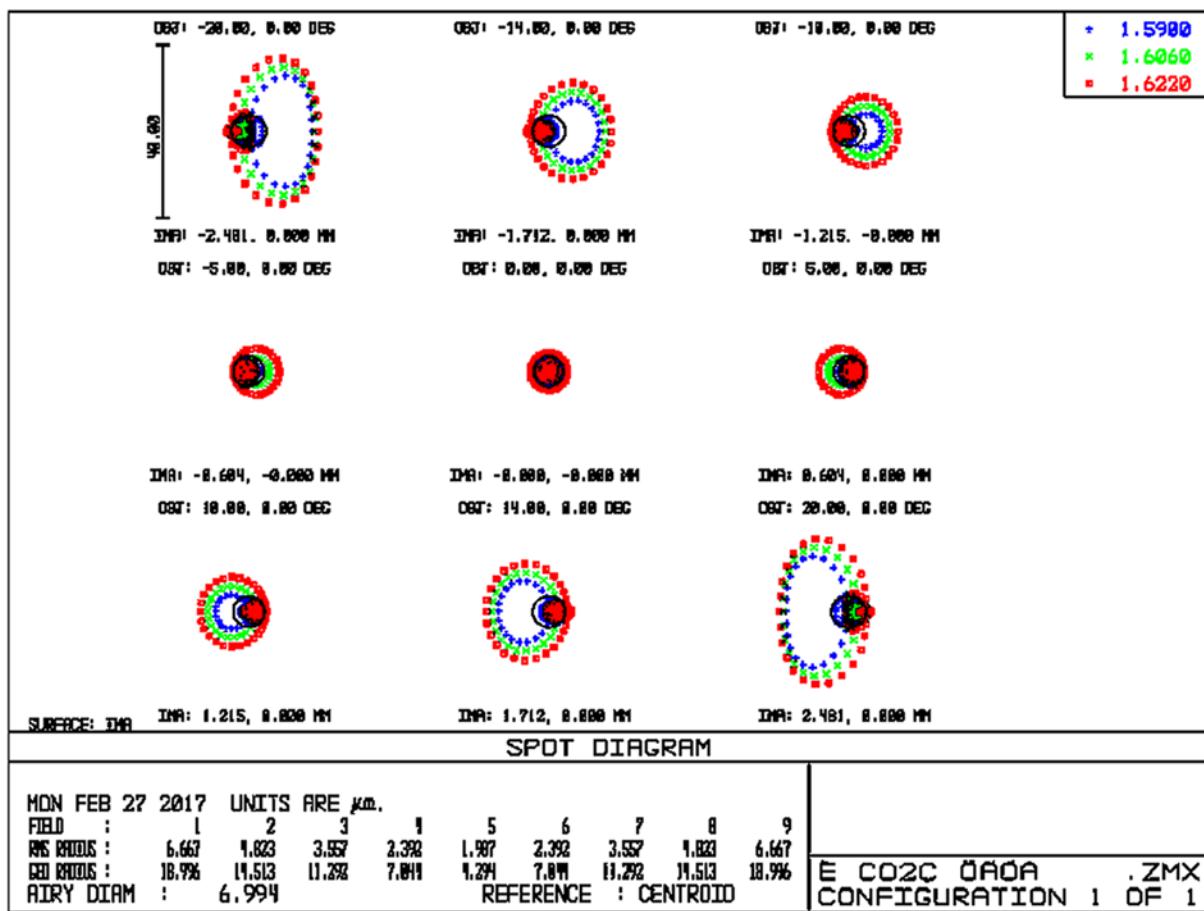


图4 组装效果图

图5 弱CO₂前置系统的点列图

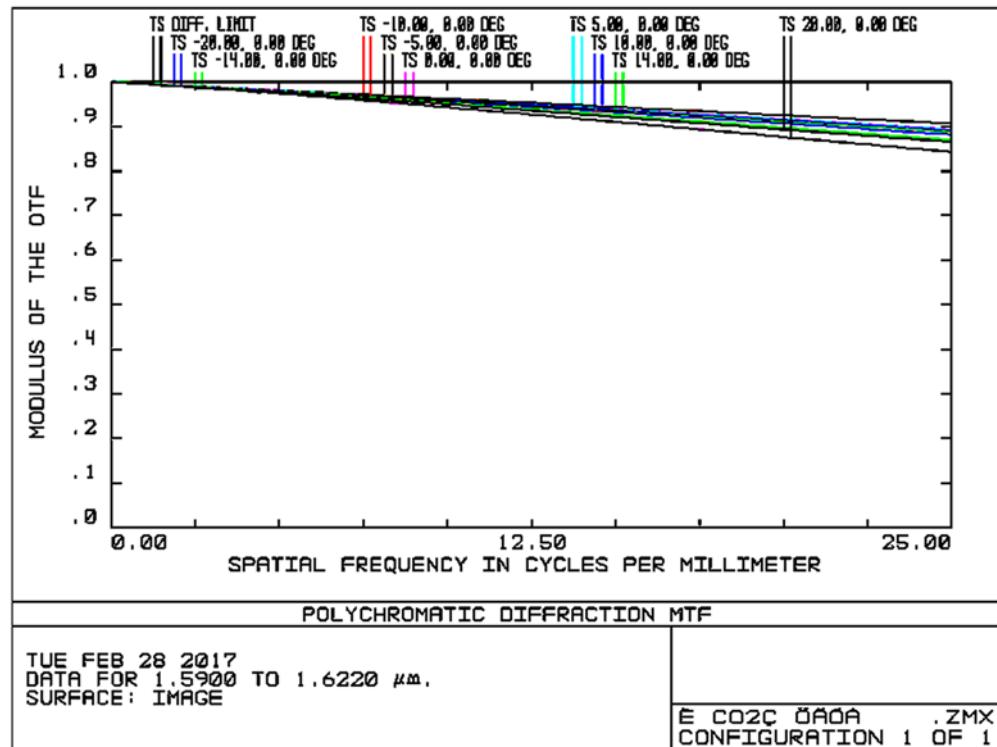


图 6 前置系统的 MTF 曲线

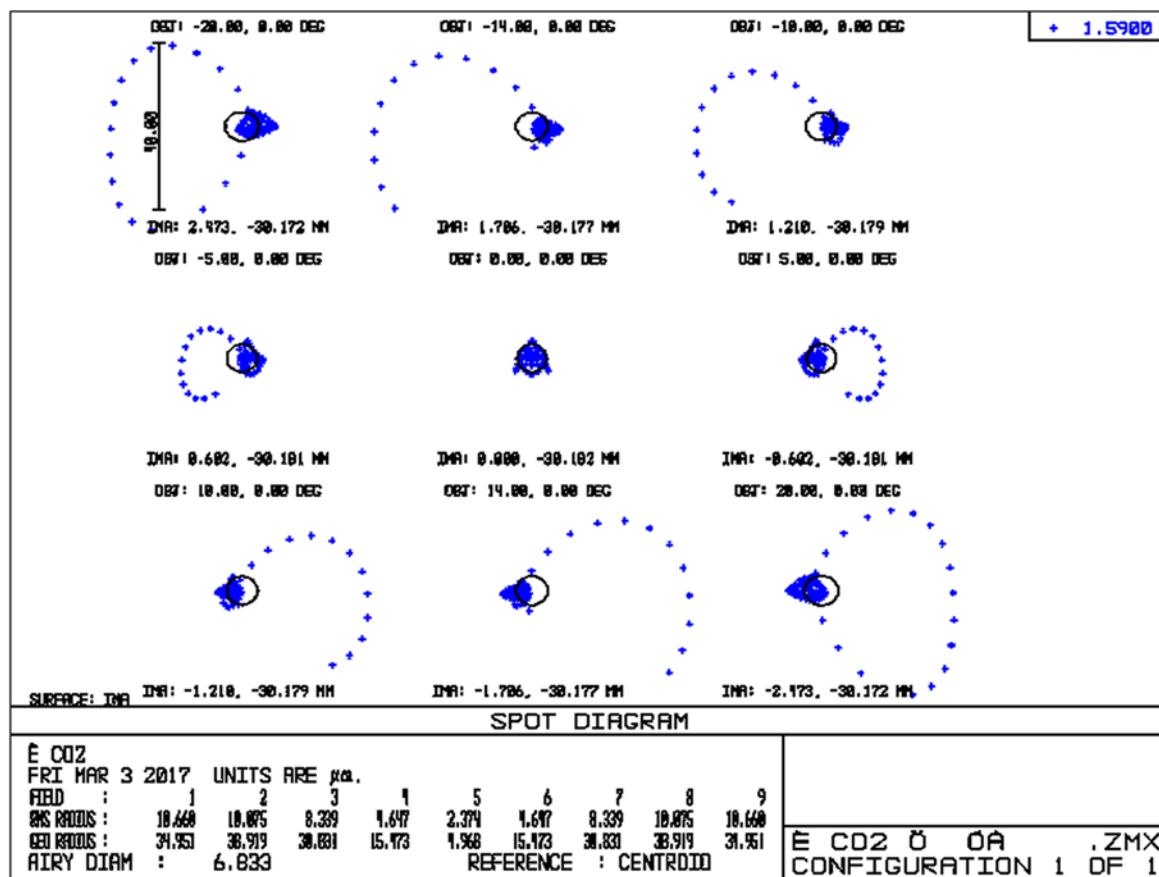


图 7 组装后的系统点列图

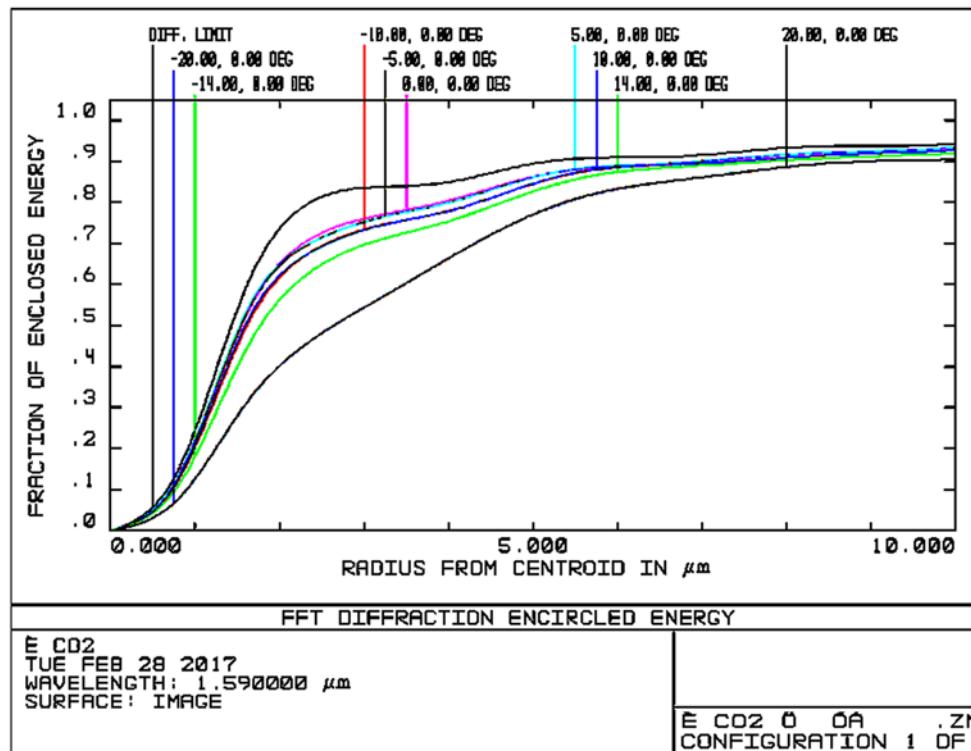


图 8 衍射能量集中度曲线

狭缝在空间维度中占据 5 mm，即 250 个像元，同样符合预期的参数设定。

图 8 所示为衍射能量集中度曲线。其中，横坐标表示到像元中心的距离，纵坐标表示单个像元内集中的衍射能量与总能量的比值。可以看出，在距离像元中心 10 μm 时，像元已经集中了 90% 以上的能量。

图 9 所示为 1.590 μm 波长下的衍射 MTF 曲线。在 25 lp/mm 处，MTF 值不低于 80%；在 1.606 μm 和 1.622 μm 下同样不低于 80%。

4 公差分析

4.1 设置公差补偿

设置以下 4 个公差补偿：(1) 前置系统最后一片镜的后表面到狭缝的距离；(2) 狹缝到分光系统第一片镜的前表面的距离；(3) 会聚镜组最后一片镜到像面的距离；(4) 像面沿 X 轴方向的倾斜。

4.2 添加公差

除了默认的公差设置以外，还需添加以下公差：(1) 狹缝沿 Z 轴的倾斜；(2) 光栅面沿 Z 轴

的倾斜；(3) 光栅常数；(4) 各个镜片的 conic 值。

4.3 分析方案

分析方案如下：采用灵敏度分析和蒙特卡洛分析；采样数取 4；以 RMS Spot Radius 为标准^[9]，限制其尺寸小于 10 μm ；视场设置为用户自定义；蒙特卡洛分析采用正态分布，运行 20 次。

4.4 分析结果

表 1 列出了公差分析结果。

4.5 灵敏度分析

名义 RMS Spot Radius 为 7.973082；预估变化为 0.925598；变化后的 RMS Spot Radius 为 8.898680。

4.6 蒙特卡洛分析

名义值如下：

7.973082470；

90% <= 8.952847909；

50% <= 8.555611829；

10% <= 8.040612298。

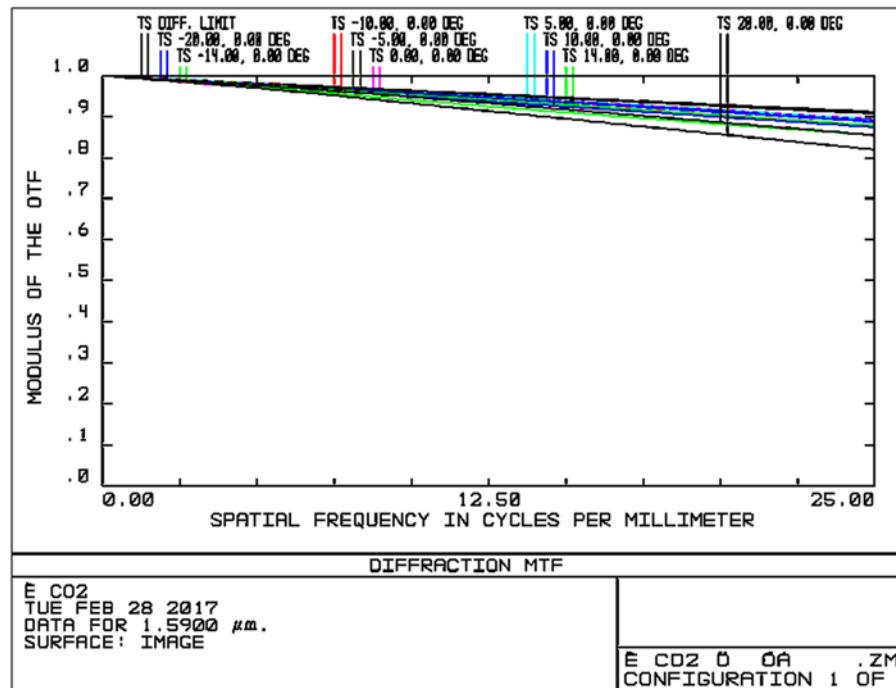


图 9 MTF 曲线

表 1 弱 CO₂ 公差分析结果简表

元件或表面	公差类型	名义值	最小值	最大值
狭缝	沿 Z 轴倾斜	—	-5	5
光栅	沿 Z 轴倾斜	—	-5	5
光栅	刻线数	1.246788	-0.0125	0.05
3	圆锥系数	-0.404087	-0.2	0.2
6	圆锥系数	-0.627888	-0.5	0.5
8	圆锥系数	-1.284155	-0.5	0.5
10	圆锥系数	34.843933	-5	5
13	圆锥系数	0.801506	-0.5	0.5
15	圆锥系数	2744.345636	-100	100
17	圆锥系数	1.924495	-0.5	0.5
18	圆锥系数	-0.239175	-0.2	0.2
19	圆锥系数	32.389035	-2	2
—	折射率	—	-0.001	0.001
—	阿贝数	67.821443	-0.678214	0.678214
其余	其余	—	-0.2	0.2

5 杂散光分析

(1) 在前置系统的前面加上遮光罩，挡住不需要的杂光；

(2) 分光系统前面的狭缝可以挡住一部分杂光；

(3) 在整个光谱仪系统中安装挡光环以抑制杂光；

(4) 光栅的 0 级衍射遵循镜面反射，在浸没光栅的下边放置 0 级光陷阱。

(下转第 30 页)