

宽谱高分辨平场凹面全息光栅光谱仪设计

武建芬^{1,2} 赵 雷^{1,2} 陈永彦^{1,2} 周 超^{1,2} 王泰升³ 王 宇⁴

¹ 钢铁研究总院, 北京 100084; ² 北京纳克分析仪器有限公司, 北京 100084
³ 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 吉林 长春 130033
⁴ 中国科学院电子学研究所, 北京 100190

摘要 为了获得宽谱、高分辨的平场凹面全息光栅, 将全息凹面光栅理论、遗传算法、衍射级次空间共用和同时消像差思想融合在一起, 提出设计宽谱、高分辨平场凹面全息光栅的方法, 给出了实际设计步骤。通过 Zemax 软件光线追迹仿真具体实例, 给出了 200~800 nm 波段的点列图变化曲线[均方根(RMS)约为 11 μm], 以 10 $\mu\text{m} \times 1 \text{mm}$ 狭缝入射, 其光照度光谱图显示光谱分辨率在 200~400 nm 波段为 0.25 nm, 在 400~800 nm 波段为 0.5 nm。该方法可以用于设计小型化、实用化的宽谱和高分辨平场凹面全息光栅光谱仪光学系统。

关键词 光谱学; 平场全息光栅; 高分辨; 宽光谱

中图分类号 O433.4 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201232.0409002

Flat-Field Concave Holographic Grating with Broad Spectral Region and High Resolution

Wu Jianfen^{1,2} Zhao Lei^{1,2} Chen Yongyan^{1,2} Zhou Chao^{1,2} Wang Taisheng³ Wang Yu⁴

¹ Central Iron and Steel Research Institute, Beijing 100084, China
² Beijing NCS Analytical Instruments Co., Ltd., Beijing 100084, China
³ Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun, Jilin 130033, China
⁴ Institute of Electronics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

Abstract To realize flat-field concave holographic grating with high resolution and broad spectral region, Namioka concave grating theory, genetic algorithm, simultaneous free-aberration and common diffractive orders are combined to produce the ideas and method of designing flat-field concave holographic grating. A configuration simulation based on flat-field concave holographic grating is presented, whose root mean square (RMS) spot radius of spot diagrams is given. The RMS spot radius is around 11 μm in full spectral region 200~800 nm. While a 10 $\mu\text{m} \times 1 \text{mm}$ entrance slit is used, the illumination spectrum image show that the resolution is 0.25 nm and 0.5 nm in 200~400 nm and 400~800 nm spectral region, respectively. All prove that these ideas and methods are available in designing compact and utilitarian spectrometer.

Key words spectroscopy; flat-field holographic grating; high resolution; broad spectral region

OCIS codes 050.1950; 090.2890; 300.6320

1 引 言

光谱仪在现代钢铁、化工、冶金、材料和环保等领域的元素成分和含量分析测试中有着重要的应用。目前市场上的光谱仪器广泛采用基于

Rowland, Czerny-Turner 成像光谱仪的光学系统^[1~9], 为了获得高的光谱分辨率, 常采用长焦距, 同时增加光栅刻线数。但是长焦距, 将导致庞大的仪器体积, 而且光栅刻线数目增加也会限制光谱的

收稿日期: 2011-08-29; 收到修改稿日期: 2011-11-16

基金项目: 国家 863 计划 (2007AA120303) 和国家重大科学仪器设备开发专项 (2011YQ140147-06) 资助课题。

作者简介: 武建芬(1975—), 男, 博士, 工程师, 主要从事光谱仪器及光学加工等方面的研究。E-mail: wjf_85@163.com

测量范围^[1]。基于中阶梯光栅的光谱仪可获得更高的光谱分辨率^[10],但是系统需要多个光学元件。平场凹面光栅结构紧凑,光学架构系统简单,兼有色散和成像功能^[2~9],非常适合与线阵 CCD 探测器结合使用,构成只有一个光学元件的光谱仪器,可以实现仪器的小型化和轻型化。目前随着 CCD 探测器技术的迅猛发展,基于平场线阵 CCD 探测器的光谱仪逐渐受到科研工作者和仪器设计者的青睐。但是从线阵 CCD 制作工艺和光学系统像差校正的角度而言,线阵 CCD 成像长度总有一定的限制。日本滨松公司的 C10000-701 线阵 CCD 大小可达 49.16 mm × 1.536 mm,单像素 12 μm × 12 μm^[11]。在线阵 CCD 成像长度一定的情况下,测量光谱范围和光谱分辨率是相互矛盾的,常常是根据实际应用的需要设计宽谱、低分辨或窄谱、高分辨光谱仪光学系统。也有一些文献提出用多个光栅组合或光栅切换的方法^[12,13],但会导致系统的复杂或需机械切换装置,不利于系统的长期稳定。20 世纪 70 年代,Noda 等^[14,15]建立了较完善的凹面光栅理论,适用于各种全息和机刻凹面光栅。本文基于这一理论,利用不同级次空间共用的设计思想,设计了 200~800 nm 宽谱范围内的高分辨(0.25 nm)平场凹面全息光栅光学系统。该方法简单、实用且不需要复杂的额外装置是实现现代光谱仪器小型化,实用化的有效途径之一。

2 设计思想

图 1 给出了平场凹面全息光栅的光路示意图,并标注出光栅坐标系统。光栅的顶点 O 也即坐标原点,

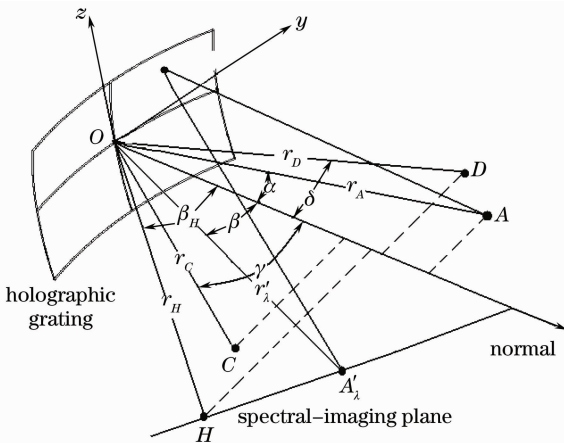


图 1 平场凹面全息光栅光路示意图

Fig. 1 Schematic of optical path of flat-field concave holographic grating

x 轴位于光栅法线方向, y 轴和 z 轴分别垂直和平行于光栅的刻线方向。入射狭缝长度方向平行于 z 轴。全息光栅的衍射特性由两个记录激光点光源 $C(r_C, z_C, \gamma)$ 、 $D(r_D, z_D, \delta)$, 激光波长 λ_0 , 及衍射级次 m 描述。 $A(r, z, \alpha)$ 表示入射狭缝上一点, $A'_\lambda(r'_\lambda, z', \beta_\lambda)$ 表示波长 λ 在衍射成像面上的一点。 $H(r_H, z_H, \beta_H)$ 是成像平面上的垂点, $P(\omega, l)$ 是光栅表面任一点坐标。

根据 Namioka 的理论,入射光和衍射光的光程函数可表示为^[14,15]

$$F = F_{000} + \omega F_{100} + l F_{011} + \frac{1}{2} \omega^2 F_{200} + \frac{1}{2} l^2 F_{020} + \frac{1}{2} \omega^3 F_{300} + \frac{1}{2} \omega l^2 F_{120} + \dots, \quad (1)$$

其中

$$F_{ijk} = M_{ijk} + \frac{m\lambda}{\lambda_0} H_{ijk}, \quad (2)$$

式中 M_{ijk} 为全息光栅架构参数,主要由入射光和衍射光的位置参数决定。 H_{ijk} 为全息光栅制造参数,主要由两个参考入射点的位置参数及激光波长决定,具体表达式可参考文献[14]。这里可以将所要求的光谱测量范围分成低波段 200~400 nm 和高波段 400~800 nm 两个部分,首先在低波段 200~400 nm 之内选择 +2 级衍射级次来设计窄波段高分辨平场凹面全息光栅的架构参数 M_{ijk} 和全息参数 H_{ijk} 。由 (2) 式可知,当其工作在高波段 400~800 nm 范围内,并选择 $m=1$ 时, F_{ijk} 表达式完全相同,表示为

$$F_{ijk} = M_{ijk} + \frac{2\lambda_{\text{low}}}{\lambda_0} H_{ijk} = M_{ijk} + \frac{\lambda_{\text{high}}}{\lambda_0} H_{ijk} (2\lambda_{\text{low}} = \lambda_{\text{high}}), \quad (3)$$

因此只要设计出像差校正的 200~400 nm 波段内的 +2 级衍射平场凹面光栅光学系统,那么对同一光栅,在保持入射狭缝和成像谱面不变的情况下,可以使其在 400~800 nm 波段的像差得到同样校正。实际应用中,通过在入射狭缝处分别放置 200~400 nm 或 400~800 nm 的滤波片,对两波段分时成像来获得宽谱高分辨光谱图。这里的平场凹面光栅是在窄波段高分辨的情况下设计的,却可通过在入射狭缝处放置不同波段的滤波片,来实现整个光谱 200~800 nm 范围内的高分辨全谱图采集。实际应用中可以利用离子束刻蚀技术加工闪耀全息光栅,闪耀波长 0.3, 0.6 nm, 保证两级衍射级次波段内较高的衍射效率,从而获得全谱范围内高分辨,高衍射效率的实用型平场凹面光栅光学系统。

3 平场凹面全息光栅优化设计方法

为了简化过程,只考虑全息凹面光栅的架构和全息参数都在 x - y 平面内的情况,其坐标如图 1 所示。其中光栅基面可以是球面、非球面或自由曲面,用方程可表示为^[14]

$$x = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} a_{ij} y^i z^j, \quad a_{00} = a_{10} = 0, j = \text{even} \quad (4)$$

考虑用球面反射镜作为光栅基底,(4)式可表示为

$$x = a_{20} y^2 + a_{02} z^2. \quad a_{20} = a_{02} = 1/(2R) \quad (5)$$

如果只考虑主要的像差贡献项,包括离焦项 F_{200} 、像散项 F_{200} 、子午彗差项 F_{300} 、像散彗差项 F_{120} ,则 A 点到 B 点的光程可表示为

$$F = F_{000} + \omega F_{100} + l F_{011} + \frac{1}{2} \omega^2 F_{200} + \frac{1}{2} l^2 F_{020} + \frac{1}{2} \omega^3 F_{300} + \frac{1}{2} \omega l^2 F_{120}. \quad (6)$$

为实现平场凹面,光栅架构参数需满足子午聚焦条件($F_{100} = 0$)

$$m\lambda = \sigma(\sin \alpha - \sin \beta_\lambda). \quad (7)$$

像面平场特性可描述为

$$r'_\lambda = \frac{r_H}{\cos(\beta_H - \beta_\lambda)}. \quad (8)$$

在设计光栅前,首先根据光谱范围、分辨率要求、CCD 尺寸设定光栅常数 σ ,衍射级次,然后由(7)式求出不同波长下的衍射角 β_λ 。为保证光谱面平场特性可由(8)式确定衍射光的焦点长度 r'_λ 。根据

表 1 基于平场凹面全息光栅的光学系统性能参数

Table 1 Parameters of optical system based on flat field concave holographic grating

Parameters	Requirements
Spectral region	200~800 nm
Resolution	0.25 nm@200 nm, 0.25 nm@313 nm, 0.25 nm@400 nm (2nd diffraction) 0.5 nm@400 nm, 0.5 nm@626 nm, 0.5 nm@800 nm(1st diffraction)
Laser wavelength	0.4416mm
Entrance slit	10 $\mu\text{m} \times 1$ mm
Effective pixels	4096 pixel \times 128 pixel
Pixel size	12 $\mu\text{m} \times 12$ μm

表 2 遗传算法和 Zemax 软件分别优化的全息光栅参数

Table 2 Parameters of holographic grating optimized by GA and Zemax software

Parameters	Genetic algorithm(GA)	Zemax software
r, α	124.1848, -8.464°	124.2, -8.464°
r_H, β_H	126.7402, 9.8677°	121.4, -3.97°
r_c, z_c, γ	138.6566, 0.30.486°	128.566, 0, 13.144°
r_d, z_d, δ	174.496, 0, 49.77°	114.397, 0, 28.915°
$R = 1/(2a_{20})$	122.8095	122.8095

Namioka 的理论,平场凹面全息光栅的最优像差函数式可表示为

$$f[r, \alpha, r_H, \beta_H, a_{20}, r_c, z_c, \gamma, r_d, z_d, \delta] = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} (F_{200}^2 + F_{020}^2 + F_{300}^2 + F_{120}^2) d\lambda. \quad (9)$$

问题转化为找出一系列优化参数使像差表达式(9)式的最小,包括架构参数: $r, \alpha; r_H, \beta_H$;构造参数: $r_c, z_c, \gamma; r_d, z_d, \delta$;球面光栅基面半径参数 $R = 1/(2a_{20})$ 。设计结果满足^[14,15]

$$\sigma = \frac{\lambda_0}{\frac{\sin \delta}{\sqrt{1 + (z_d/r_d)^2}} - \frac{\sin \gamma}{\sqrt{1 + (z_c/r_c)^2}}} \times \sin \delta > \frac{\sin \gamma \sqrt{1 + (z_d/r_d)^2}}{\sqrt{1 + (z_c/r_c)^2}}. \quad (10)$$

4 设计结果及分析

依据 3 节分析,设定光学系统的性能参数如表 1 所示。

为了利用遗传算法(GA)得到初始的光栅参数,使用 Matlab 中内置的遗传算法工具,可有利地保证优化结果的正确性。实际优化时需要编写目标适应函数(9)式和种群约束函数(10)式。将遗传算法得到初始的光栅参数输入到 Zemax 光学软件,并以最小点列图为评价函数进行二次优化,表 2 给出为两次优化过程的参数值。

对上述设计结果,通过光学软件 Zemax 对光谱仪总的光学系统进行光线追迹,并从点列图、点列图变化曲线和光照度模拟成像三个方面对该光学系统设计结果进行了分析评价。图 2 为最终平场凹面全息光栅光路图,图 3(a)为 200~400 nm 波段内,波长均匀间隔 20 nm 的各波长点列图,3(b)为 400~800 nm 波段内,波长均匀间隔 40 nm 的各波长点列图。图 4(a),(b)分别为光谱仪系统两个波段的点列图随波长的变化曲线,由图 4 可见该光学系统在各个谱线上的点列图基本保持在均方根值为 $11\ \mu\text{m}$ 左右,无较大起伏。图 4(a)和图 4(b)相同变化曲线也表明,两波段像差校正情况基本相同。图 5 为 200~400 nm 波段仿真的光谱仪光学系统在线阵 CCD 上的全谱光谱图,由图可见几条仿真谱线可以被分开,图中局部放大部分给出了在分辨率指标鉴别波长(200 nm, 200.25 nm; 313.03 nm, 313.28 nm; 399.75 nm, 400 nm)上得到的可分辨的光谱图。图 6 为 400~800 nm 波段仿真的光谱仪光学系统在线阵 CCD 上的全谱光谱图,由图可见几条仿真谱线可以被分开,图中局部放大部分给出了在分辨率指标鉴别波长(400 nm, 400.5 nm; 626.06 nm, 626.56 nm;

799.5 nm, 800 nm)上得到的可分辨的光谱图。综合上述设计结果,该光谱仪系统能在 200~800 nm 范围内全谱成像于有效探测面积为 $49.16\ \text{mm} \times 1.536\ \text{mm}$ 的宽条一维线阵 CCD 上(日本滨松公司的 C10000-701),且不存在光谱级次重叠,完全满足最初制定的光谱仪的性能指标。

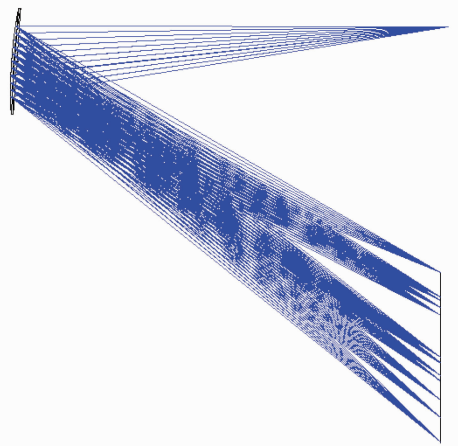


图 2 平场凹面光栅光路图

Fig. 2 Optical configuration based on flat-field concave holographic grating

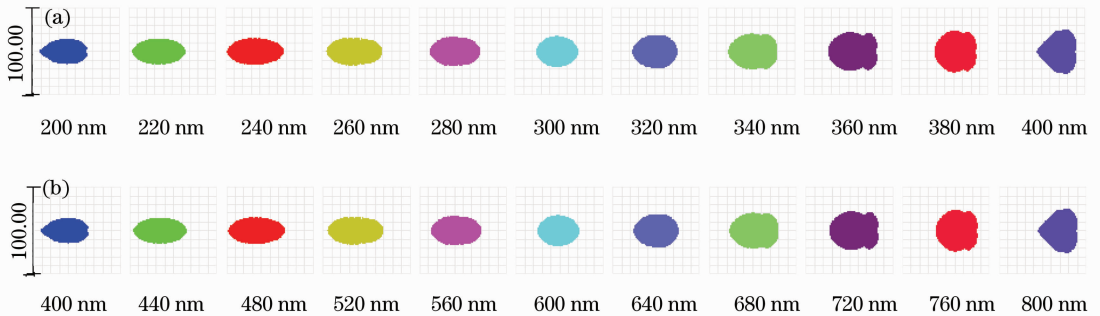


图 3 200~400 nm (a), 400~800 nm (b)波段的点列图

Fig. 3 Spot diagram in 200~400 nm (a) and 400~800 nm (b) region

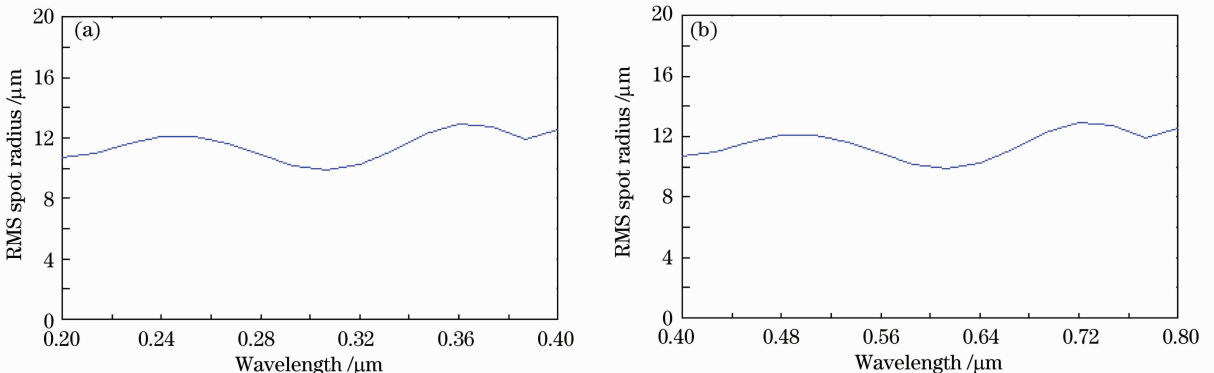


图 4 点列图在 200~400 nm (a), 400~800 nm (b)波段的 RMS 变化曲线

Fig. 4 RMS spot radius spot diagram in 200~400 nm (a) and 400~800 nm (b) region

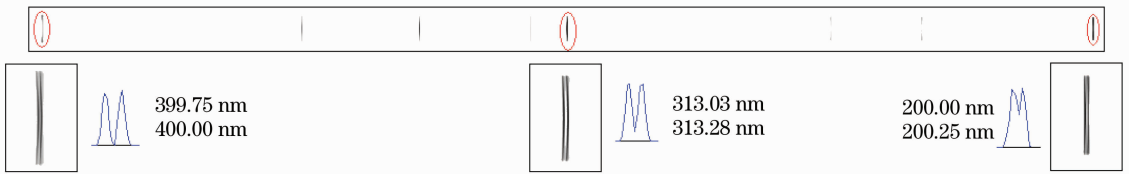


图 5 线阵 CCD 上的 200~400 nm 光谱图

Fig. 5 Spectrogram imaged on line array CCD in 200~400 nm

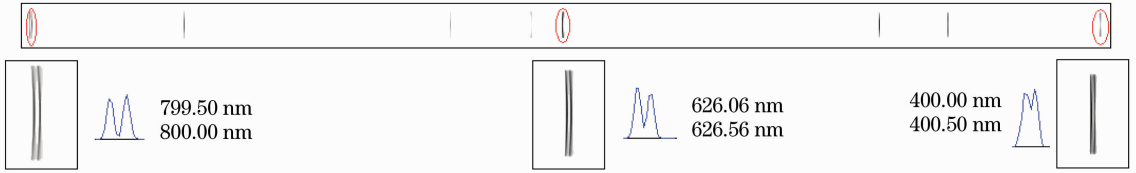


图 6 线阵 CCD 上的 400~800 nm 光谱图

Fig. 6 Spectrogram imaged on linear array CCD in 400~800 nm

5 结 论

以凹面光栅的几何理论为基础,从光程函数的幂级数展开出发,利用遗传算法求出窄波段、高分辨平场凹面光栅的架构参数和全息制造参数,并通过光学软件进行二次优化,给出了 200~400 nm 光谱范围内的平场凹面光栅光学系统参数。通过利用不同衍射级次空间共用的设计思想,在保持架构参数不变的情况下,将同一光栅用于 400~800 nm 光谱范围,从而获得宽谱范围 200~800 nm 内的高分辨平场凹面全息光栅光学系统。实际应用中可以利用离子束刻蚀技术加工闪耀全息光栅,使其与线阵 CCD 的量子效率相互补偿,从而获得全谱范围内高分辨,高衍射效率的实用型平场凹面光栅光学系统,本文提出的方法对设计小型化、实用化平场高分辨光谱仪器有一定的指导意义。

参 考 文 献

- 1 Wu Guoan. Design of Spectroscopic Instruments [M]. Beijing: Science Press, 1978
吴国安. 光谱仪器设计[M]. 北京:科学出版社,1978
- 2 Webster C. Cash, Jr. Aspheric concave grating spectrographs [J]. *Appl. Opt.*, 1984, **23**(24): 4518~4522
- 3 Robert Grange. Aberration-reduced holographic spherical gratings for Rowland circle spectrographs [J]. *Appl. Opt.*, 1992, **31**(19): 3744~3749
- 4 Michael P. Chrisp. Aberrations of holographic toroidal grating systems [J]. *Appl. Opt.*, 1983, **22**(10): 1508~1518
- 5 Kong Peng, Tang Yuguo, Bayanheshig *et al.*. Compensation effects between parameter errors of flat-field holographic concave gratings [J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(7): 0705001

- 孔 鹏,唐玉国,巴音贺希格等. 平场全息凹面光栅结构参量误差之间的补偿作用[J]. *光学学报*, 2011, **31**(7): 0705001
- 6 Kong Peng, Bayanheshig, Li Wenhao *et al.*. Optimization of Rowland circle mounts for broad-band spectrographs [J]. *Chinese J. Lasers*, 2011, **38**(4): 0409003
- 孔 鹏,巴音贺希格,李文昊等. 宽波段全息罗兰光栅的优化 [J]. *中国激光*, 2011, **38**(4): 0409003
- 7 Kou Jieting, Bayanheshig, Tang Yuguo *et al.*. Testing process and result revising on instrument for plane grating diffraction efficiency[J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(7): 0705002
- 寇婕婷,巴音贺希格,唐玉国等. 平面光栅效率仪测量过程分析与结果修正[J]. *光学学报*, 2011, **31**(7): 0705002
- 8 W. R. McKinney, C. Palmer. Numerical design method for aberration-reduced concave grating spectrometers [J]. *Appl. Opt.*, 1987, **26**(15): 3108~3118
- 9 Dane R. Austin, Tobias Witting, Ian A. Walmsley. Broadband astigmatism-free Czerny-Turner imaging spectrometer using spherical mirrors[J]. *Appl. Opt.*, 2009, **48**(19): 3846~3853
- 10 R. Tousey, J. D. Purcell, D. L. Garrett. An echelle spectrograph for middle ultraviolet solar spectroscopy from rockets [J]. *Appl. Opt.*, 1967, **6**(3): 365~372
- 11 Hamamatsu. Image Measurement Cameras [OL]. http://jp.hamamatsu.com/en/product_info, 2012
- 12 M. R. Torr, D. G. Torr. Compact imaging spectrograph for broadband spectral simultaneity [J]. *Appl. Opt.*, 1995, **34**(34): 7888~7898
- 13 Kong Peng, Ba Yin, Li Wenhao. Optimization of double-grating flat-field holographic concave grating spectrograph [J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(2): 0205001
- 孔 鹏,巴音贺希格,李文昊. 双光栅平场全息凹面光栅光谱仪的优化设计[J]. *光学学报*, 2011, **31**(2): 0205001
- 14 H. Noda, T. Namioka, M. J. Seya. Geometric theory of the grating[J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1974, **64**(8): 1031~1036
- 15 T. Namioka, M. Seya, H. Noda. Design and performance of holographic concave gratings[J]. *J. Appl. Phys.*, 1976, **15**(7): 1181~1197

栏目编辑:何卓铭