

УДК 535.853

ОПТИЧЕСКИЕ СХЕМЫ ДИФРАКЦИОННЫХ СПЕКТРАЛЬНЫХ ПРИБОРОВ: НОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ – НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ

Н.К.Павлычева

Казанский государственный технический университет (КАИ)

Казань

pavlych@oes.kstu-kai.ru

Рассмотрены аберрационные характеристики неклассических дифракционных решеток и основные оптические схемы спектральных приборов на их основе. Показана целесообразность установки неклассических дифракционных решеток в модернизируемых спектральных приборах. В качестве примера приведены результаты расчета двух оптических схем с дифракционными решетками различных типов.

Павлычева Надежда Константиновна – доктор технических наук, профессор кафедры оптико-электронных систем Казанского государственного технического университета им. А.Н.Туполева.

Область научных интересов: спектральное приборостроение.

Автор 80 опубликованных работ, в том числе монографии «Спектральные приборы с неклассическими дифракционными решетками».

В настоящее время остро стоит вопрос модернизации устаревшего спектрального оборудования, при которой взамен фотокассет и ФЭУ устанавливаются современные системы регистрации на основе многоэлементных твердотельных детекторов излучения ТДИ. Так, в ООО "ВМК-Оптоэлектроника" (Новосибирск) создан многоканальный анализатор атомно-эмиссионных спектров МАЭС и система компьютерной обработки получаемой спектральной информации "АТОМ", предназначенные для проведения элементного анализа веществ. При модернизации спектрометров с вогнутой дифракционной решеткой, построенных по оптической схеме Пашена-Рунге, часто возникает необходимость замены классических дифракционных решеток на неклассические. В первую очередь это связано с большим астigmatизмом классических дифракционных решеток, который приводит к увеличению высоты спектральной линии до десятков миллиметров при высоте входной щели спектрометра 1 мм. Регистрация такой спектральной линии с помощью ТДИ, имеющих малую высоту фоточувствительной области (1 мм в анализаторе МАЭС), приводит к снижению чувствительности анализа (повышению предела обнаружения). Покажем целесообразность установки в модернизируемых приборах неклассических дифракционных решеток.

К неклассическим дифракционным решеткам отнесем решетки с искривленными штрихами и (или) переменным расстоянием между ними и голограммные дифракционные решетки.

Характеристическая функция таких решеток имеет вид:

$$V(y,z) = -yF_0 + \frac{y^2}{2r}F_1 + \frac{z^2}{2r}F_2 + \frac{y^3}{2r^2}F_3 + \frac{yz^2}{2r^2}F_4 + \frac{y^4}{8r^3}F_5 + \frac{y^2z^2}{4r^3}F_6 + \frac{z^4}{8r^3}F_7. \quad (1)$$

Коэффициент F_1 характеризует фокусировку лучей в меридиональной плоскости, F_2 - в сагиттальной, F_3 характеризует меридиональную кому, F_4 - сагиттальную, коэффициенты F_5, F_6, F_7 характеризуют aberrации 3-го порядка. Равенство

$$F_i = 0 \quad (2)$$

является условием коррекции aberrации, характеризующей i -тым коэффициентом.

Коэффициенты F_i для вогнутой голограммной дифракционной решетки (ВГДР) имеют вид:

$$F_i = M_i - \frac{k\lambda}{\lambda_0} N_i, \quad (3)$$

где M_i содержат параметры схемы, N_i содержат параметры голографирования, λ_0 - длина волны записи, k - порядок спектра, λ - рабочая длина волны.

Для вогнутой нарезной неклассической дифракционной решетки (ВННДР) коэффициенты F_i выражаются следующим образом:

$$F_i = M_i - k\lambda N G_i, \quad (4)$$

где G_i - коэффициенты, содержащие параметры нарезки, N - число штрихов на 1 мм поверхности решетки.

Параметры записи решетки и параметры нарезки связаны между собой определенными соотношениями, поэтому, в принципе, для любой голограммной дифракционной решетки можно рассчитать нарезной аналог и наоборот. Однако полученные параметры не всегда реализуемы.

ВННДР имеют переменное расстояние между штрихами e ($1/N$) и криволинейные штрихи с радиусом ρ . Эти параметры изменяются по поверхности дифракционной решетки в соответствии со следующими соотношениями:

$$e = e_0(1 + \mu y + \nu y^2 + \xi y^3), \quad \rho = \rho_0 - \rho y,$$

где y - расстояние от вершины решетки в плоскости дисперсии, ρ_0 - радиус кривизны штриха в вершине решетки, ρ - коэффициент, характеризующий изменение радиуса кривизны штриха, μ, ν и ξ - коэффициенты, характеризующие изменение расстояния между штрихами.

ВГДР представляет собой зарегистрированную на светочувствительном материале интерференционную картину, образованную двумя когерентными пучками света (рис. 1). Когерентные пучки формируют, разделяя светоделятельными

зеркалами, излучение лазера. Для получения отражательной решетки на её поверхность наносят слой металла. Форма штрихов и расстояние между ними определяются положением источников излучения относительно заготовки и длиной волны излучения λ_0 . Параметрами голографирования или параметрами записи называют расстояния от источников O_1 и O_2 до вершины решетки O , обозначаемые d_1 и d_2 , и углы падения лучей из источников в вершину решетки - i_1 и i_2 .

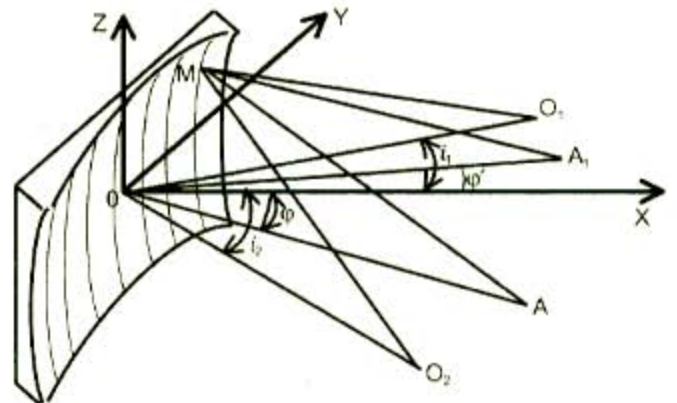


Рис. 1. Вогнутая голограммная дифракционная решетка

Для спектроскопистов наибольший интерес представляют характеристики дифракционных решеток: уровень рассеянного света, разрешение и эффективность. Уровень рассеянного ВГДР света более чем на порядок ниже, нежели у механически нарезанных решеток. Теоретическое разрешение решетки, используемой в первом порядке, определяется полным числом штрихов решетки. К настоящему времени получены ВГДР, имеющие 6000 штр./мм. Размер решеток лимитируется формирующей когерентные пучки оптикой и мощностью лазера. Уже изготовлены решетки диаметром до 600 мм, в то время как нарезные решетки с шагом 2400 штр./мм уже являются уникальными, а их стандартные размеры, в основном, ограничены 200x200 мм². Реальное разрешение ВГДР близко к дифракционному пределу. Эффективность голограммной дифракционной решетки определяется формой и глубиной штрихов. Как правило, ВГДР имеют симметричный профиль штрихов, поэтому их эффективность несколько ниже, чем у нарезных решеток, но более однородна по спектральному диапазону. Для получения более высокой концентрации энергии в заданном диапазоне необходимо получение штрихов ступенчатого профиля, что достигается применением ионного травления.

Если освещать заготовку решетки двумя параллельными пучками лучей, симметричных относительно нормали к заготовке, то получается решетка с эквидистантными прямыми штрихами (тип I по классификации фирмы Jobin-Yvon), по своим абберационным свойствам не отличающаяся от обычной сферической решетки.

Для получения фокусировки изображений щели на круге Роуланда при записи ВГДР оба источника также должны находиться на круге Роуланда:

$$d_1 = r \cos i_1, \quad d_2 = r \cos i_2 \quad (i_1 \neq i_2).$$

У такой решетки (тип II), как и у обычной, в установках на круге Роуланда отсутствует меридиональная кома. При удовлетворении соотношения

$$\sin \phi \operatorname{tg} \phi + \sin \phi' \operatorname{tg} \phi' = \frac{k\lambda}{\lambda} (\sin i_1 \operatorname{tg} i_1 - \sin i_2 \operatorname{tg} i_2), \quad (5)$$

для длины волны λ полностью исправляется астигматизм.

Если один из источников голографирования находится в центре кривизны, а точки A и A' гармонически сопряжены, т.е. $OA \cdot OA' = r^2$, то такие ВГДР (тип III) дают стигматичное изображение входной щели при относительных отверстиях до 1:1. Лучи, идущие в сагиттальной плоскости, фокусируются на прямой OA'' , а меридиональные лучи - на сложной кривой.

Налагая определенные условия на коэффициенты характеристической функции (1), можно исправлять абберации решетки в определенных схемах. Наибольшее распространение получили схемы «спектрографа с плоским полем» и «монокроматора с простым вращением». При расчете спектрографа с плоским полем (рис. 2) параметры схемы и параметры записи решетки определяются таким образом, чтобы в плоскости регистрации спектра были минимизированы дефокусировка, астигматизм и меридиональная кома.

Монокроматорами с простым вращением называют монокроматоры с неподвижными щелями и сканированием спектра вращением решетки вокруг оси, проходящей через ее вершину. При их расчете соответствующим выбором параметров схемы и параметров записи минимизирует-

ся дефокусировка, возникающая при вращении решетки, астигматизм и меридиональная кома.

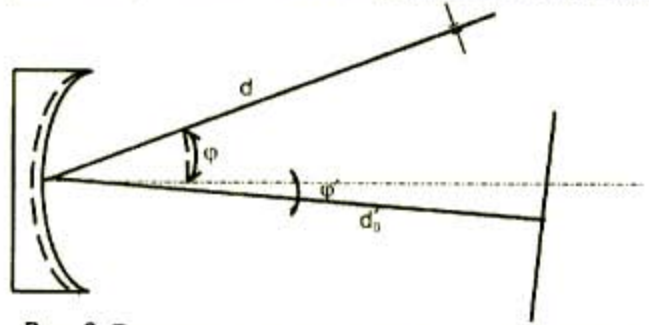


Рис. 2. Принципиальная оптическая схема спектрографа с плоским полем

Возможны и другие варианты коррекции аббераций. Так, проведенные нами расчеты показали, что определенным углом падения ϕ и расстоянию от вершины решетки до плоскости регистрации спектра d'_0 соответствуют расстояния от входной щели до вершины решетки d , при которых условия равенства нулю F_2 и F_3 выполняются одновременно для двух длин волн: $\lambda_{cp} \pm (\lambda_1 - \lambda_2)/4$, где λ_1 и λ_2 крайние значения длин волн спектрального диапазона. Эти длины волн расположены симметрично относительно центра спектрограммы на равном расстоянии от центра и краев, следовательно, коррекция астигматизма и меридиональной комы для этих точек обеспечивает малые значения этих аббераций в широком спектральном диапазоне.

Конструктивные параметры схемы и решетки для случая, когда входная щель расположена внутри круга Роуланда, могут быть записаны следующим образом:

$$\begin{aligned} d &= 0.8 r; \\ d'_0 &= 0.95 r; \\ \rho &= 1.56 r + 1.1 y; \\ e &= e_0 (1 - 2.2 \cdot 10^{-4} y + 0.8 \cdot 10^{-6} y^2 - 10^{-8} y^3). \end{aligned} \quad (6)$$

Положения входной щели, дифракционной решетки и регистрирующего устройства, при которых $d = d'_0$, наиболее выгодны в энергетическом отношении. Многочисленные расчеты различных вариантов таких схем позволили выявить следующие эмпирические соотношения между конструктивными параметрами этой установки:

$$\begin{aligned} d &= d'_0 = r [1.07229 - 0.30731 (k\lambda_{cp} N) + 0.56067 (k\lambda_{cp} N)^2 - 0.25773 (k\lambda_{cp} N)^3]; \\ \phi &= -0.13683 + 1.2578 (k\lambda_{cp} N) - 0.7767 (k\lambda_{cp} N)^2 + 0.4242 (k\lambda_{cp} N)^3; \\ \rho_0 &= r [-45.499 + 92.865 (k\lambda_{cp} N) - 72.588 (k\lambda_{cp} N)^2 + 20.81 (k\lambda_{cp} N)^3]; \\ \rho &= 2.921 - 3.309 (k\lambda_{cp} N) + 1.999 (k\lambda_{cp} N)^2 - 0.441 (k\lambda_{cp} N)^3; \\ \mu &= [0.04684 + 0.3268 (k\lambda_{cp} N) + 0.197 (k\lambda_{cp} N)^2 - 0.2327 (k\lambda_{cp} N)^3] / r; \\ \nu &= [-0.03 + 0.128 (k\lambda_{cp} N) - 0.4 (k\lambda_{cp} N)^2 + 0.13 (k\lambda_{cp} N)^3] / r^2; \\ \xi &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Совместив требования "плоского поля" с условиями коррекции в двух точках спектрограммы астигматизма и меридиональной комы, мы получили оптическую схему, обеспечивающую плоское поле в широком спектральном диапазоне. Параметры такой схемы находятся из эмпирических соотношений:

$$\begin{aligned} d &= r(1.01056 - 0.0393 k \lambda_{cp} N); \\ d'_0 &= r[1.0037 - 0.014 k \lambda_{cp} N + 0.058 (k \lambda_{cp} N)^2]; \\ \varphi &= -0.016 + 0.748 k \lambda_{cp} N; \\ \rho &= -3.34r / (k \lambda_{cp} N) - (0.93 + 0.72 k \lambda_{cp} N) y; \\ \mu &= (0.012 + 0.27 k \lambda_{cp} N) / r; \\ v &= (0.037 - 0.163 k \lambda_{cp} N) / r^2. \end{aligned} \quad (8)$$

Кварцевая плосковогнутая линза, установленная вблизи плоскости регистрации спектра, компенсирует остаточную дефокусировку. По такой схеме построен спектрограф ДФС-458, выпускаемый Казанским оптико-механическим заводом. При установке на прибор многоканального анализатора эмиссионных спектров МАЭС необходимость в такой полевой линзе отпадает, так как дефокусировку можно устранить соответствующей установкой диодных линеек.

С увеличением светосилы прибора возрастает роль неучтенных aberrаций, особенно сагиттальной комы. Исправить сагиттальную кому и сферическую aberrацию 3-го порядка позволяет запись решетки в негомоцентрических, астигматических пучках. Необходимый астигматизм может быть получен, например, использованием наклонного падения лучей на сферическое зеркало (рис. 3).

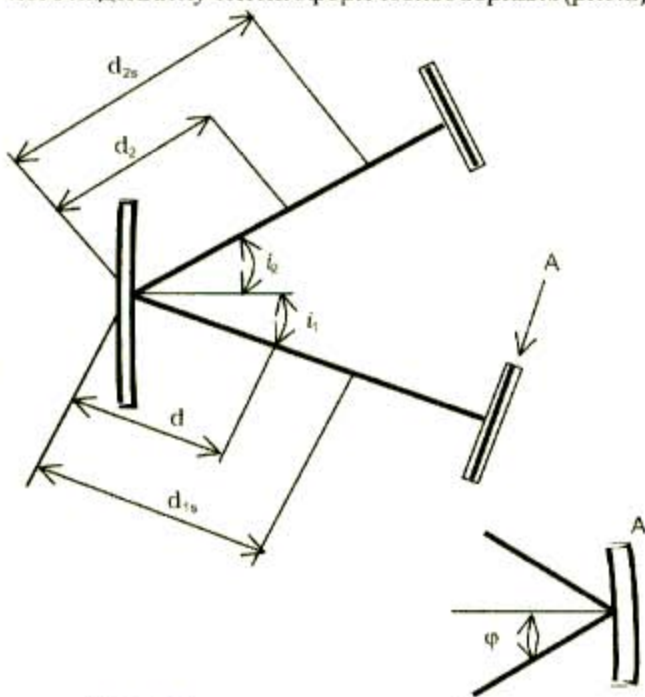


Рис. 3. Схема записи светосильной решетки

В этом случае четыре параметра определяют положение источников в меридиональной плоскости: расстояния от вершины подложки до источников записи d_1, d_2 и углы падения лучей от источников записи в вершину подложки i_1, i_2 . Два дополнительных параметра d_{1s} и d_{2s} определяют положение источников записи в сагиттальной плоскости. Параметры записи d_1, d_2, i_1, i_2 определяются из условий минимизации в плоскости спектра дефокусировки, меридиональной комы и сферической aberrации 3-го порядка, а параметры d_{1s} и d_{2s} – из условий минимизации в плоскости спектра астигматизма и сагиттальной комы. Для того, чтобы пучок обеспечивал получение требуемого светового размера решетки, его необходимо предварительно расширить с помощью коллиматора.

Рассмотрим в качестве первого примера спектрограф на круге Роуанда, имеющий следующие характеристики: радиус кривизны дифракционной решетки 500 мм, частота штрихов 3600 штр./мм, угол падения лучей на решетку - $50,5^\circ$, рабочий спектральный диапазон 170- 420 нм, размер заштрихованной поверхности 50×40 мм². Классическая дифракционная решетка с прямолинейными эквидистантными штрихами имеет в этой схеме следующие aberrации:

- для 295 нм
 - максимальная aberrация в меридиональной плоскости $\delta y'_m = 0,036$ мм,
 - в сагиттальной плоскости $\delta y'_s = 0,585$ мм, астигматическое удлинение изображения входной щели $\delta z' = 19,563$ мм;
- для 170 нм: $\delta y'_m = 0,02$ мм, $\delta y'_s = 0,818$ мм, $\delta z' = 18,955$ мм;
- для 420 нм: $\delta y'_m = 0,041$, $\delta y'_s = -0,307$ мм, $\delta z' = 23,553$ мм.

Для уменьшения aberrаций заштрихованная поверхность вогнутых классических решеток обычно диафрагируется по высоте штриха, что приводит к значительным энергетическим потерям. Коррекция астигматизма особенно актуальна при установке вместо ФЭУ систем регистрации на основе диодных линеек из-за небольшой высоты их приемных площадок.

При записи решетки в гомоцентрических пучках (точечными источниками) спектрограф имеет следующие aberrации:

- для 295 нм: $\delta y'_m = 0,006$ мм, $\delta y'_s = -1,052$ мм, $\delta z' = 0,02$ мм;
- для 170 нм: $\delta y'_m = 0,006$ мм, $\delta y'_s = -0,147$ мм, $\delta z' = 7,36$ мм,
- для 420 нм: $\delta y'_m = 0,01$ мм, $\delta y'_s = -1,083$ мм, $\delta z' = 3,867$ мм.

В этом случае параметры записи определены из соотношения (5). Для центра спектрального диапазона астигматизм исправлен практически полностью, на краях диапазона он значительно меньше, чем у классической дифракционной решетки. Однако сагиттальная кома является совершенно недопустимой.

Использование метода записи решеток в негомоцентрических пучках позволяет существенно улучшить абберационные характеристики спектрографа. Степень коррекции астигматизма в этом случае такая же, как у голограммной решетки, записанной точечными источниками, а значение сагиттальной комы на порядок меньше. В табл. 1 приведены aberrации спектрографа. Они рассчитаны по программе, позволяющей рассчитывать aberrации оптических систем, содержащих голограммные дифракционные решетки с учетом их схем записи. В таблице использованы следующие обозначения: y , z – координаты луча на поверхности дифракционной решетки, $\delta y'$, $\delta z'$ – aberrации в плоскости фокусировки спектра.

Таблица 1

Аберрации спектрографа на круге Роуланда с решеткой, записанной в негомоцентрических пучках (радиус кривизны 500 мм)

y	z	295 нм		170 нм		420 нм	
		$\delta y'$	$\delta z'$	$\delta y'$	$\delta z'$	$\delta y'$	$\delta z'$
25	0	-0,004	-0,086	0,007	-0,053	0,004	-0,083
17,5	0	0	-0,043	0,003	-0,026	0,003	-0,042
-17,5	0	-0,004	-0,033	-0,004	-0,019	-0,005	-0,034
-25	0	-0,009	-0,064	-0,010	-0,037	-0,013	-0,066
0	14	-0,031	-0,260	0,090	4,979	-0,057	2,497
0	20	0,075	-0,532	0,178	7,013	-0,124	3,402

Как видно из табл. 1, применение голограммной дифракционной решетки, записанной в негомоцентрических пучках, позволяет существенно улучшить энергетические характеристики спектрографа без ухудшения его разрешающей способности.

В качестве второго примера рассмотрим спектрограф на круге Роуланда, имеющий следующие характеристики: радиус кривизны дифракционной решетки 750 мм, частота штрихов 2400 штр./мм, угол падения лучей на решетку - $50^{\circ}36'17''$, рабочий спектральный диапазон 208,8 - 350 нм, размер заштрихованной поверхности 50×40 мм². По такой схеме построен, в частности, спектрометр Spectrolab. Рассмотрим возможность увеличения заштрихованной поверхности решетки до светового диаметра 66 мм.

Аберрации классической дифракционной решетки в этой схеме приведены в табл. 2.

Таблица 2

Аберрации спектрографа на круге Роуланда с классической решеткой (радиус кривизны 750 мм)

y	z	279,4 нм		208,8 нм		350 нм	
		$\delta y'$	$\delta z'$	$\delta y'$	$\delta z'$	$\delta y'$	$\delta z'$
33	0	0,032		0,033		0,030	
16,5	0	0,004		0,004		0,003	
-16,5	0	-0,003		-0,003		-0,003	
-33	0	-0,028		-0,029		-0,026	
0	16,5	0,194	15,608	0,277	16,150	0,098	15,556
0	33	0,774	31,162	1,104	32,243	0,390	31,060

Как видно из приведенных результатов, попытка увеличить светосилу прибора приводит к недопустимо большим значениям астигматизма и сагиттальной комы. Используя запись в негомоцентрических пучках, можно несколько улучшить абберационные характеристики этой схемы (табл. 3), однако сагиттальная кома и астигматизм все еще велики.

Таблица 3

Аберрации спектрографа на круге Роуланда с решеткой, записанной в негомоцентрических пучках (радиус кривизны 750 мм)

y	z	279,4 нм		208,8 нм		350 нм	
		$\delta y'$	$\delta z'$	$\delta y'$	$\delta z'$	$\delta y'$	$\delta z'$
33	0	-0,008		0,004		-0,017	
16,5	0	-0,001		0		-0,002	
-16,5	0	0,001		0		0,001	
-33	0	0,004		-0,006		0,011	
0	16,5	0,029	-2,199	-0,050	2,849	0,069	-6,820
0	33	0,114	-4,391	-0,202	5,699	0,277	-13,639

Значительного улучшения качества спектра при увеличении светосилы прибора можно добиться, если заменить оптическую схему на круге Роуланда схемой с расширенным спектральным диапазоном, параметры которой рассчитаны из соотношений (8). При радиусе кривизны решетки 750 мм, частоте штрихов 2400 штр./мм для средней длины волны 279,4 нм имеем: угол падения лучей $\varphi = 27^{\circ}49'18''$, расстояние от входной щели до решетки 738,155 мм. В табл. 4 приведены aberrации спектрографа, рассчитанные в плоскостях, перпендикулярных лучам, дифрагированным в вершине решетки. Дифракционная решетка для этой схемы записана точечными источниками. Качество изображения находится практически на дифракционном пределе, который составляет 0,003 мм для длины волны 279,4 нм.

Таблица 4

Аберрации спектрографа с расширенным спектральным диапазоном

y	z	279,4 нм		208,8 нм		350 нм	
		$\delta y'$	$\delta z'$	$\delta y'$	$\delta z'$	$\delta y'$	$\delta z'$
33	0	0,009		-0,003		0,011	
16,5	0	0,002		-0,001		0,003	
-16,5	0	0,002		-0,001		0,003	
-33	0	0,009		-0,003		0,010	
0	16,5	-0,002	0,353	0,001	-0,122	0,003	0,373
0	33	-0,006	0,707	0,003	-0,244	0,013	0,747

Итак, замена классических дифракционных решеток на неклассические с коррекцией астигматизма приводит к увеличению интенсивностей спектральных линий, зарегистрированных многоэлементными ТДИ, и, следовательно, к снижению предела обнаружения элементов атомно-эмиссионным методом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пейсахсон И.В. Оптика спектральных приборов. Л.: Машиностроение, 1975. 312 с.
2. Павлычева Н.К. Спектральные приборы с неклассическими дифракционными решетками. Казань: Изд-во Казан. гос. техн. ун-та, 2003. 197 с.

* * * * *

OPTICAL SCHEMES OF DIFFRACTION SPECTRAL INSTRUMENTS: NEW TECHNOLOGIES ARE NEW OPPORTUNITIES

N.K. Pavlycheva

The aberration characteristics of the nonclassical diffraction gratings and the optical schemes of spectral instruments on their basis are considered. The expediency of installation nonclassical diffraction gratings in modernized spectral instruments is shown. As an example the results of account of two optical schemes with the diffraction gratings of various types are given.