

光谱仪用平场凹面光栅的凸面母光栅的消像差设计思路

周 倩, 李立峰

清华大学精密仪器系, 精密测试技术与仪器国家重点实验室, 北京 100084

摘 要 平场全息凹面光栅是光谱仪中的核心元件之一, 其成像质量和衍射效率直接影响了光谱仪的分辨率和光能利用率。利用凸面母光栅复制制作凹面光栅, 便于在凸面基底上进行离子束刻蚀以获得高的衍射效率。为了保证复制的凹面光栅具有高的成像质量, 文章提出一种全息凸面光刻胶光栅的消像差设计方法, 优化中考虑了凸面基底对记录光束的折射效应以及由基底折射率所引入的附加光程。通过将“光程函数级数展开法”和 ZEMAX 光学设计软件相结合, 采用粗精两步优化的方法, 显著提高了优化的效率和成功率。ZEMAX 对比仿真结果显示, 复制得到的凹面光栅与传统直接采用全息法制作的凹面光栅的成像质量是相当的。

关键词 衍射光栅; 平场凹面光栅; 凸面光栅; 消像差设计

中图分类号: O433.4 **文献标识码**: A **DOI**: 10.3964/j.issn.1000-0593(2009)08-2281-05

引 言

平场全息凹面光栅(下文简称凹面光栅)是便携式光栅光谱仪器中的关键元件, 其性能直接影响了光谱的质量^[1-4]。评价其性能的两个关键指标是光谱成像质量和衍射效率。一般来说, 这两个指标是彼此独立的, 在设计和制作中可以分别考虑。光谱成像质量决定了光谱分辨能力, 进而影响光谱仪器的分辨率, 它主要取决于凹面基底的形状和光栅栅线在空间上的整体分布情况^[2]; 衍射效率决定了光能利用率, 进而影响光谱仪器的信噪比, 它主要取决于光栅槽型的微观结构^[5]。在弱光谱探测分析、真空紫外光谱分析中, 需要获得

高分辨率和高信噪比的光谱信息, 这就要求凹面光栅兼具高的成像质量和衍射效率。

对于凹面光栅的成像质量, 人们已经进行了大量的研究。给出了它的典型记录光路结构: 光刻胶旋涂在凹面上, 点光源 C 和 D 发出球面波, 形成明暗相间的干涉条纹, 光刻胶发生光化学反应, 记录下此干涉条纹, 经显影后, 得到所需的凹面光栅。通过优化 C 和 D , 以及光谱仪中入射狭缝和 CCD 探测器的位置, 可以有效校正像差, 得到较高的成像质量(图 1)。

Singh^[6]对衍射光栅的优化设计理论及应用进行了细致的评论, 光程函数理论可以针对不同面型的凹面光栅灵活的选取需要消除的像差项进行优化, 且易于利用电脑进行程序化处理, 是目前使用较多的方法^[7-10]。随着商用光学设计软件的出现, 采用 ZEMAX^[11]等进行优化设计^[12]也有了广泛的应用。

光栅的衍射效率主要取决于光栅的微观槽型。精确控制光栅微观槽型的主要方法是全息-离子束刻蚀法^[13-15]。然而, 对于凹面光栅来说, 由于凹面基底对离子束的遮挡作用, 进行刻蚀是十分困难的, 在大多数情况下甚至是不可能的^[16]。这导致人们一直都无法有效地控制它的槽型, 成为长期以来困扰国内外研究人员的一个难题, 也是目前凹面光栅的应用范围受到限制的原因之一。

针对上述问题, 我们提出了一种解决方法^[16], 首先利用全息法在凸面基底上直接曝光制作出光刻胶光栅掩模, 然后

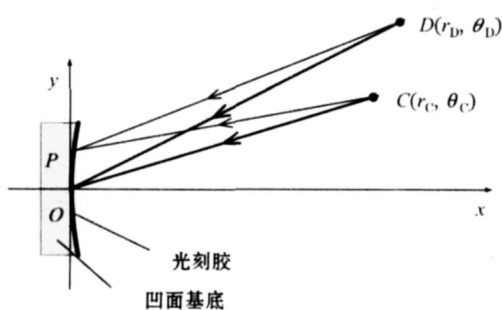


Fig 1 Geometry for directly recording flat-field concave gratings

收稿日期: 2008-06-08, 修订日期: 2008-09-12

基金项目: 国家科技部项目(2004BA210A06)资助

作者简介: 周 倩, 女, 1981 年生, 清华大学精仪系光学工程博士研究生 e-mail: qzhou03@mails.thu.edu.cn

便可以方便地对其进行离子束刻蚀,得到槽型满足要求的凸面母光栅,最后用此复制得到所需的凹面光栅。本方法中凹面光栅的成像质量直接决定于凸面母光栅栅线的空间整体分布情况。因此,如何得到合适的凸面母光栅,使最终复制得到的凹面光栅具有较高的成像质量,就成为了这一方法所需解决的关键问题。

本文分析了凸面母光栅全息记录光路的消像差优化设计方法。通过将凸面基底的厚度及其对两个记录光束的折射作用考虑进来,优化两个记录点、入射狭缝及 CCD 探测器的位置,可以保证复制得到的凹面光栅具有与传统直接曝光得到的凹面光栅相当的成像质量。文中给出了优化设计实例以及用 ZEMAX 仿真得到的对比成像结果。

1 光路结构

图 2 给出了直接曝光制作凸面母光栅的全息记录光路结构图。设凸面基底折射率为 n , 厚度为 d 。记基底的凸面为后表面,与凸面相对的表面为前表面,图中所示的是前表面为平面的情况,光刻胶旋涂在后表面上。以凸面的顶点为原点,建立 $x-y-z$ 坐标系,三个坐标轴的方向如图所示。 $x-y$ 平面为主平面,也是系统的对称面。点 C 和 D 是相干记录点光源,均位于主平面内,其极坐标分别记为 $C(r_C, \theta_C)$ 和 $D(r_D, \theta_D)$,规定逆时针旋转方向为角度的正方向。 P 点在 $x-y-z$ 坐标系中的坐标为 (ε, ω, l) 。

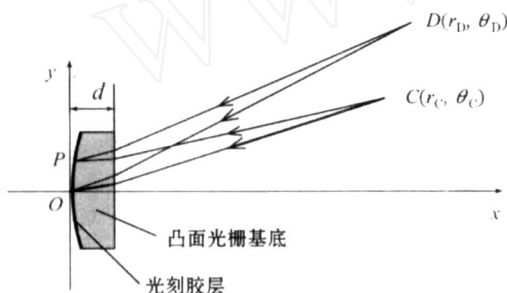


Fig 2 Recording geometry of aberration-corrected convex master gratings

图 3 给出了复制得到的凹面光栅的使用光路结构图。 A 点为入射狭缝中点,其坐标为 $A(r_A, \theta_A)$; $B_1 B_2$ 为光谱像所成的光谱面,也就是 CCD 探测器的位置; B_λ 点为波长为 λ

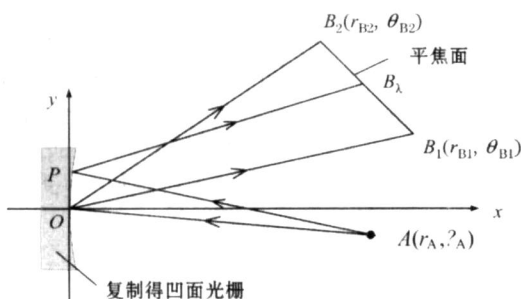


Fig 3 Spectrograph geometry of replicated flat-field concave gratings

的光线经光栅所成的 A 点的衍射像,其坐标为 $B_\lambda(r_{B\lambda}, \theta_{B\lambda})$ 。

2 消像差优化设计方法

对比图 2,不难发现图 2 中两束记录光束需要穿过基底材料,其折射率和厚度会对凸面上形成的干涉条纹空间分布产生影响,进而影响复制得到的凹面光栅的成像质量。因此,在优化时必须考虑这一因素。

若采用“光程函数级数展开法”进行优化,由于光线在前表面上发生折射,且该折线的转折点位于前表面上的某一未知位置,要求出其解析解十分困难,相应的光程函数的解析式也极为复杂,难以采用该方法进行像差函数的优化。

采用 ZEMAX 光学设计软件,可以对光学系统进行建模,将折射因素考虑进来,再采用纯数值计算的方法对成像质量进行优化,理论上可以获得所需的优化结果。然而,此优化问题是一个多变量优化问题,其优化结果对初值非常敏感,能否合理的设置初值直接关系到优化结果的好坏。在大多数情况下,由于无法找到合适的初值,采用 ZEMAX 优化往往得不到满足要求的优化结果。

针对上述问题,本文采用了一种粗精两步优化的方法,首先用“光程函数级数展开法”粗优化,再将此优化结果作为优化初值,利用 ZEMAX 进行进一步地精优化,得到最终的优化结果。

考虑图 2 所示的凸面母光栅全息记录光路,由于 C 和 D 的极角均不大,一般小于 30° ,且凸面基底厚度 d 远小于记录点的极径,所以在粗优化中可以忽略光线在前表面上的折射,仅需考虑由凸面基底折射率 n 所引入的附加光程。此时光程函数的解析式就变得比较简单了,采用该方法进行优化的难度大大降低。

根据上述思路,首先写出优化目标函数

$$\Delta F = [(PA + PB) - (AO + BO)] + \frac{m\lambda}{\lambda_0} [(PC - PD) - (CO - DO)] \quad (1)$$

$$PA = [(x_A - \varepsilon)^2 + (y_A - \omega)^2 + (z_A - l)^2]^{\frac{1}{2}}$$

$$PB = [(x_B - \varepsilon)^2 + (y_B - \omega)^2 + (z_B - l)^2]^{\frac{1}{2}}$$

其中

$$PC = n[(x_A - \varepsilon)^2 + (y_C - \omega)^2 + l^2]^{\frac{1}{2}} + (1 - n)Q_C \quad (2)$$

$$PD = n[(x_D - \varepsilon)^2 + (y_D - \omega)^2 + l^2]^{\frac{1}{2}} + (1 - n)Q_D$$

$$AO = r_A, BO = r_B, CO = (n - 1) \frac{d}{\cos \theta_C} + r_C,$$

$$DO = (n - 1) \frac{d}{\cos \theta_D} + r_D$$

$$Q_C = \left\{ (x_C - d)^2 + \left[y_C - \frac{(x_C - d)(\omega - y_C)}{(x_C - \varepsilon)} \right]^2 + \left[\frac{l(x_C - d)}{(x_C - \varepsilon)} \right]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

$$Q_D = \left\{ (x_D - d)^2 + \left[y_D - \frac{(x_D - d)(\omega - y_D)}{(x_D - \varepsilon)} \right]^2 + \left[\frac{l(x_D - d)}{(x_D - \varepsilon)} \right]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{aligned}x_A &= r_A \cos \theta_A, y_A = r_A \sin \theta_A, \\x_B &= r_B \cos \theta_B, y_B = r_B \sin \theta_B \\x_C &= r_C \cos \theta_C, y_C = r_C \sin \theta_C, \\x_D &= r_D \cos \theta_D, y_D = r_D \sin \theta_D\end{aligned}$$

(4)

将光程函数 ΔF 展开成 P 点坐标 (ω, l) 的幂级数形式:

$$\begin{aligned}\Delta F = & F_{10}\omega + F_{01}l + F_{20}\omega^2 + F_{11}\omega l + F_{02}l^2 + F_{30}\omega^3 + F_{21}\omega^2 l \\& + F_{12}\omega l^2 + F_{03}l^3 + F_{40}\omega^4 + F_{31}\omega^3 l + F_{22}\omega^2 l^2 + F_{13}\omega l^3 \\& + F_{04}l^4 + \dots\end{aligned}$$

(5)

定义优化评价函数 $I_{ij} = \int_{\theta_B(\lambda_2)}^{\theta_B(\lambda_1)} F_{ij}^2 d\theta_B$, 优化的目标就是使 I_{ij} 取得最小值。针对 F_{20} , F_{30} 和 F_{02} 这三种主要像差进行优化, 即使 I_{20} , I_{30} 和 I_{02} 之和取得最小值。

至此, 采用“光程函数级数展开法”粗优化的过程结束, 优化结果为: C 和 D 的位置, 入射狭缝中心点 A 的位置, 表征 CCD 位置的 B_1 和 B_2 。以上数值作为优化初值输入 ZEMAX 中, 考虑折射效应, 进行第二步精优化, 优化步骤如下:

- (1) 选取优化函数。在工作谱段内等间距选取若干个离散波长, 在优化函数中加入各波长子午像点的均方根半径函数, 并令其各自最小。设定光谱面长度为所要求的值。
- (2) 设定优化变量。将 C 和 D 的坐标, 入射狭缝中心点 A 的坐标, 以及表征 CCD 位置的 B_1 和 B_2 的坐标均设为变量即可。
- (3) 利用 ZEMAX 进行优化。在优化过程中, 可根据当前结果情况来中断优化, 及时调整优化函数种类及其权重。

采用上述两步优化的方法进行凸面母光栅的消色差优化设计, 可以大大降低每一步的优化难度, 提高优化的效率和成功率。

3 设计实例

为了便于比较采用本文所述方法与采用传统方法制作出的凹面光栅的成像质量, 我们针对同一设计实例分别进行了优化设计, 设计要求如表 1 所示。

Table 1 Design specifications

波长范围/ nm	190 ~ 700
记录波长/ nm	441. 6
谱线级次	+ 1
狭缝宽度/ μm	5
光栅基底尺寸/ mm	20 × 20 × 8
CCD 长度/ mm	25. 4
凹面曲率半径/ mm	83. 684
凸面基底材料	BK7 玻璃

优化设计结果分别如表 2 和表 3 所示。

根据表 2 和表 3 分别绘制出两种方法的记录光路和使用光路结构图, 如图 4 和图 5 所示。

可以看出二者优化得到的光路结构均合理, 不存在元件的空间干涉现象, 具备实用性。

Table 2 System parameters for convex master grating and replicated concave grating

记录光路参数	$r_C = 125. 7 \text{ mm}, \theta_C = 23. 6^\circ$ $r_D = 146. 1 \text{ mm}, \theta_D = 28. 9^\circ$
使用光路参数	$r_A = 80. 3 \text{ mm}, \theta_A = - 4. 2^\circ$ $r_{B1} = 92. 8 \text{ mm}, \theta_{B1} = 7. 4^\circ$ $r_{B2} = 113. 4 \text{ mm}, \theta_{B2} = 16. 1^\circ$

Table 3 System parameters for directly recorded concave grating

记录光路参数	$r_C = 121. 5 \text{ mm}, \theta_C = 22. 0^\circ$ $r_D = 157. 4 \text{ mm}, \theta_D = 32. 0^\circ$
使用光路参数	$r_A = 78. 1 \text{ mm}, \theta_A = - 4. 5^\circ$ $r_{B1} = 94. 9 \text{ mm}, \theta_{B1} = 8. 3^\circ$ $r_{B2} = 111. 9 \text{ mm}, \theta_{B2} = 18. 9^\circ$

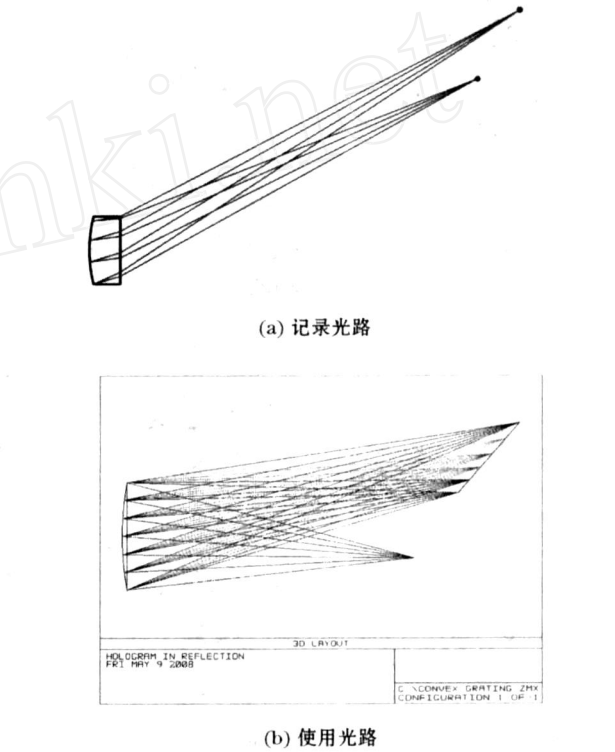
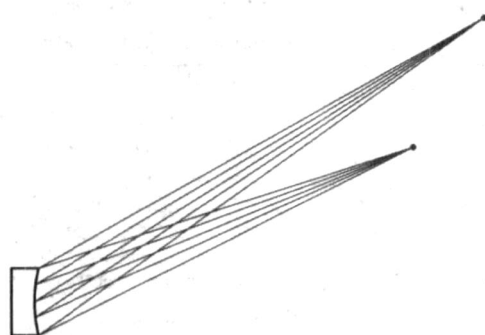


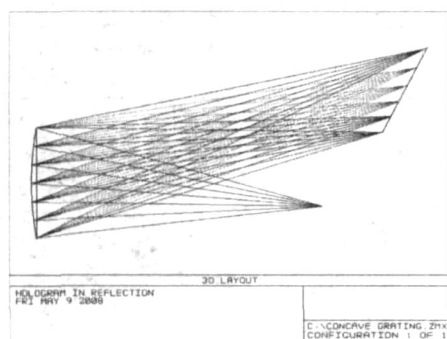
Fig 4 Recording geometry of convex master grating and spectrograph geometry of replicated concave grating

4 ZEMAX 仿真结果

根据表 2 和表 3 的设计结果, 分别用 ZEMAX 建模, 仿真其各自的成像情况。图 6 给出了用两种方法制得的凹面光栅各自的成像谱线宽度随谱线波长的变化关系曲线。其中实线表示采用本文所述方法复制得到的凹面光栅, 虚线表示采用传统直接曝光法得到的凹面光栅。计算出前者的平均谱线宽度为 $22. 1 \mu\text{m}$, 后者的平均谱线宽度为 $19. 8 \mu\text{m}$, 两者的成像质量基本相当。



(a) 记录光路



(b) 使用光路

Fig. 5 Recording geometry and spectrograph geometry of directly fabricated concave grating

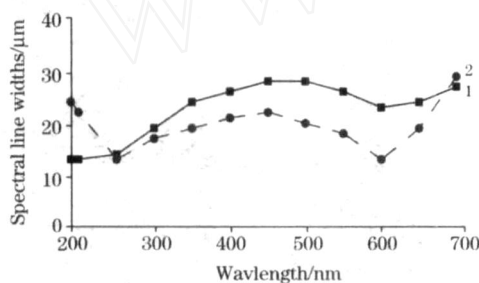
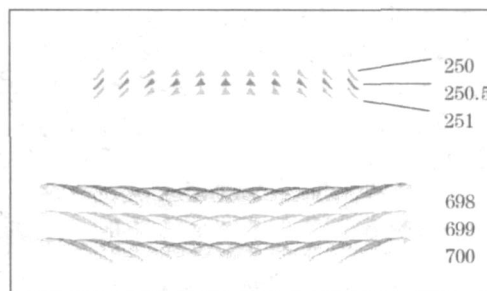


Fig. 6 Spectral line widths versus wavelength

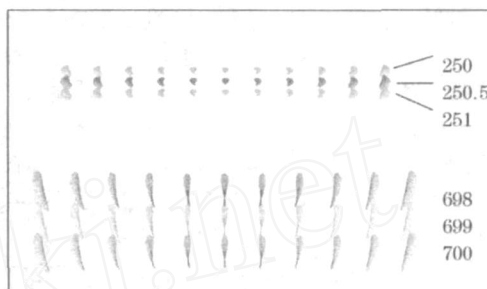
1: 凸面光栅复制; 2: 直接曝光

从图 6 中还可以看出, 两种方法得到的凹面光栅的谱线宽度在工作波长范围内均有一定起伏变化, 其中, 在 250 nm 附近的谱线宽度最窄, 说明此处成像质量较好; 而在 700 nm 附近谱线最宽, 说明此处成像质量相对较差。图 7 给出了两种方法分别在 250 和 700 nm 附近的成像谱线点列图, 仿真时所用的狭缝宽度为零, 高度为 0.5 mm, 沿高度方向等间隔地取了 11 个采样点, 分别计算其所成的像。可以看到, 在 250 nm 附近, 两种方法得到的凹面光栅的分辨率均小于 0.5

nm, 而在 700 nm 附近的分辨率则均小于 1 nm。这进一步说明了采用本文所述方法得到的凹面光栅与采用传统直接曝光法得到的凹面光栅具有相当的成像质量(光谱分辨率)。



(a) 凸面光栅复制得到的凹面光栅



(b) 传统直接曝光得到的凹面光栅

Fig. 7 Comparison of spectral line widths

5 结 论

平场全息凹面光栅是便携式光栅光谱仪器中的关键元件, 直接决定了光谱仪器的最终质量。利用凸面光栅复制制作凹面光栅, 便于在凸面基底上进行离子束刻蚀, 精确控制其光栅槽形, 从而复制得到高衍射效率的平场凹面光栅, 有助于提高光谱仪器的光能利用率。

为了保证复制得到的凹面光栅具有良好的成像质量, 本文给出了一种全息凸面光刻胶光栅掩膜的消色差优化设计方法, 在优化中考虑了凸面基底材料对记录光束的折射效应以及由基底折射率所引入的附加光程。通过将“光程函数级数展开法”与 ZEMAX 光学设计软件相结合, 采用粗精两步优化的方法, 大大提高了优化的效率和成功率。用 ZEMAX 仿真并对比采用此凸面光栅复制制作出的凹面光栅和采用传统的全息记录法制出的凹面光栅的成像质量, 证明二者具有相当的光谱分辨率水平, 且优化得到的光路结构均合理, 不存在元件的空间干涉现象。

本方法对研制出兼具高成像质量和高衍射效率的平场全息凹面光栅具有重要意义, 有助于提高光栅光谱仪的整体性能。

参 考 文 献

- [1] WU Guo-an(吴国安). Design of Spectroscopic Instruments(光谱仪器设计). Beijing: Science Press(北京: 北京科学出版社), 1978.
- [2] Pavlycheva N K. Sov. J. Opt. Technol., 1979, 46(7): 394.
- [3] Hutley M C. Diffraction Gratings. Academic Press, 1980.

- [4] ZHOU Qian, ZENG Li-jiang, LI Li-feng(周 倩, 曾理江, 李立峰). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2008, 28(7): 1673.
- [5] LI Li-feng, Chandezon J, Granet G, et al. Appl. Opt., 1999, 38(2): 304.
- [6] Singh S. Optics and Laser Technology, 1999, 31: 195.
- [7] Namioka T. J. Opt. Soc. Am., 1959, 49(5): 446.
- [8] Namioka T. J. Opt. Soc. Am., 1959, 49(5): 460.
- [9] Namioka T. J. Opt. Soc. Am., 1959, 49(10): 951.
- [10] Noda H, Namioka T, Seya M. J. Opt. Soc. Am., 1974, 64(8): 1031.
- [11] ZEMAX Reference Manual. ZEMAX Development Corp., 2003.
- [12] LI Chao-ming, WU Jian-hong, TANG Min-xue(李朝明, 吴建宏, 唐敏学). Laser Journal(激光杂志), 2005, 26(2): 57.
- [13] LIN Hui, ZHANG Li-chao, LI Li-feng, et al. Opt. Lett., 2008, 33(5): 485.
- [14] ZHAO Jin-song, LI Li-feng, WU Zhen-hua(赵劲松, 李立峰, 吴振华). Acta Optica Sinica(光学学报), 2004, 24(9): 1285.
- [15] LIN Hua, LI Li-feng, ZENG Li-jiang. Chin. Opt. Lett., 2005, 3(2): 63.
- [16] ZHOU Qian, LI Li-feng, ZENG Li-jiang. Proc. SPIE, 2007, 6832: 68320W.

Design Method of Convex Master Gratings for Replicating Flat-Field Concave Gratings

ZHOU Qian, LI Li-feng

State Key Laboratory of Precision Measurement Technology and Instruments, Tsinghua University, Beijing 100084, China

Abstract Flat-field concave diffraction grating is the key device of a portable grating spectrometer with the advantage of integrating dispersion, focusing and flat-field in a single device. It directly determines the quality of a spectrometer. The most important two performances determining the quality of the spectrometer are spectral image quality and diffraction efficiency. The diffraction efficiency of a grating depends mainly on its groove shape. But it has long been a problem to get a uniform predetermined groove shape across the whole concave grating area, because the incident angle of the ion beam is restricted by the curvature of the concave substrate, and this severely limits the diffraction efficiency and restricts the application of concave gratings. The authors present a two-step method for designing convex gratings, which are made holographically with two exposure point sources placed behind a plano-convex transparent glass substrate, to solve this problem. The convex gratings are intended to be used as the master gratings for making aberration-corrected flat-field concave gratings. To achieve high spectral image quality for the replicated concave gratings, the refraction effect at the planar back surface and the extra optical path lengths through the substrate thickness experienced by the two divergent recording beams are considered during optimization. This two-step method combines the optical-path-length function method and the ZEMAX software to complete the optimization with a high success rate and high efficiency. In the first step, the optical-path-length function method is used without considering the refraction effect to get an approximate optimization result. In the second step, the approximate result of the first step is used as the initial value for ZEMAX to complete the optimization including the refraction effect. An example of design problem was considered. The simulation results of ZEMAX proved that the spectral image quality of a replicated concave grating is comparable with that of a directly recorded concave grating.

Keywords Diffraction grating; Flat-field concave grating; Convex grating; Optical design

(Received Jun. 8, 2008; accepted Sep. 12, 2008)