

А. А. Сырбаков^{1,2}, И. А. Зарубин^{1,2}*

Моделирование и экспериментальное исследование разрешающей способности спектрального прибора, построенного по схеме Пашена-Рунге

¹ Новосибирский государственный технический университет, г. Новосибирск, Российская Федерация

² Институт автоматики и электрометрии СО РАН, г. Новосибирск, Российская Федерация
* e-mail: aleksei.syrbakov@yandex.ru

Аннотация. Исследовано изменение разрешающей способности спектрометра с неклассической вогнутой дифракционной решеткой вне плоскости дисперсии и при отклонении геометрических параметров – переднего отрезка и угла поворота дифракционной решетки. Экспериментально проверена адекватность модели оптической схемы, построенной в ПО «Zemax», и на ее основе сделаны выводы, что разрешающая способность спектрометра ухудшается на 10% при отклонении переднего отрезка на 10 мм (при номинальном значении 895 мм) и угла поворота решетки на 1,6° (при номинальном значении 26,5°). При отклонении регистрирующей поверхности от плоскости дисперсии на 1,5 мм разрешающая способность в коротковолновой части спектрального диапазона ухудшается с 12 пм до 24 пм.

Ключевые слова: спектрометр, атомно-эмиссионный анализ, схема Пашена-Рунге, моделирование, МАЭС, разрешающая способность

А. А. Syrbakov^{1,2}, I. A. Zarubin^{1,2}*

Modeling and Experimental Research of the Resolution Capability of the Spectral Instrument Based on the Paschen-Runge Scheme

¹ Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russian Federation

² Institute of Automation and Electrometry SB RAS, Novosibirsk, Russian Federation
* e-mail: aleksei.syrbakov@yandex.ru

Abstract. We investigated the change in the resolution capability of the spectrometer with a non-classical concave diffraction grating, outside the dispersion plane, and at deviation of geometrical parameters – the distance from the slit to the grating and the angle of rotation of the diffraction grating. The adequacy of the model of the optical scheme built in the "Zemax" software was experimentally verified, and on its basis the conclusions were made that the resolution capability of the spectrometer deteriorates by 10% when the distance from the slit to the grating deviates by 10 mm (with the nominal value of 895 mm) and the angle of rotation of the grating by 1.6 degrees (with the nominal value of 26.5 degrees). At deviation of the recording surface from the dispersion plane by 1.5 mm the resolution capability in the short-wave part of the spectral range deteriorates from 12 pm to 24 pm.

Keywords: spectrometer, atomic emission analysis, Paschen-Rung scheme, modeling, MAES, resolution capability

Введение

Для прецизионного элементного анализа применяются спектрометры высокого разрешения, включающие спектральные приборы с дифракционной решеткой, используемой в качестве диспергирующего элемента [1]. Наиболее популярной оптической схемой с вогнутой решеткой является схема Пашена-Рунге [2]. В ней решетка является единственным оптическим элементом и сочетает диспергирующие и фокусирующие свойства. При этом спектральный прибор обладает наилучшими характеристиками в том случае, когда все элементы его схемы расположены на расчетных расстояниях. Характеристики ухудшаются, во-первых, при неточном выставлении геометрических параметров схемы, во-вторых, при использовании дифракционной решетки, имеющей ошибки изготовления. Знание допуска на ошибку позиционирования элементов позволяет определить, где необходимы юстировочные узлы с дорогостоящими микрометрическими подвижками, а где можно и вовсе не использовать юстировку, зафиксировав положение элемента спектрального прибора. Для учета допуска необходимо выделить, по какой из двух вышеназванных причин происходит ухудшение характеристик прибора. Это возможно сделать, зная влияние каждой по отдельности. Т.к. заведомо неизвестно, имеет ли решетка дефект изготовления, то определить допуски на разъюстировку возможно путем моделирования схемы в ПО.

Также следует отметить специфическую особенность спектральных приборов с линейными фотоприемниками – в них для регистрации спектра фотоприемники устанавливаются в шахматном порядке для исключения «слепых» зон регистрации [3]. Такая установка фотоприемников вне плоскости дисперсии (меридиональной плоскости) может привести к ухудшению разрешающей способности при значительном отклонении от этой плоскости. Таким образом, необходимо знание о характеристиках спектрального прибора вне плоскости дисперсии.

Целью данной работы является моделирование и экспериментальное исследование разрешающей способности спектрального прибора с неклассической вогнутой дифракционной решеткой при отклонении геометрических параметров, а также вне плоскости дисперсии.

Описание экспериментальной установки и моделирование

Особенность схемы Пашена-Рунге, в отличие от остальных схем с вогнутыми решетками, состоит в том, что все оптические компоненты закреплены, вследствие чего можно регистрировать широкую область спектра с высоким разрешением. Особенностью неклассических вогнутых решеток является равенство их сагиттального и меридионального фокусных расстояний, вследствие чего компенсируется астигматизм для определенных длин волн. В решетке, используемой в работе, астигматизм скомпенсирован для длины волны 200 нм за счет нанесения на ее поверхность криволинейных штрихов [4, 5]. На рис. 1 изображена оптическая схема стенда. Входная щель 3 освещалась излучением от лампы с полым катодом 1, которое фокусировалось конденсором 2. Свет падал на не-

классическую дифракционную решетку, используемую в спектрометрах «Гранд» [6], под углом $\beta = 26,5^\circ$. Расстояние переднего отрезка (от щели до дифракционной решетки) $L = 895$ мм. Спектр регистрировался многоканальным анализатором атомно-эмиссионных спектров (МАЭС) 5, включающим 14 линеек фотодиодов БЛПП-4000 [7]. Для отклонения фотоприемника от плоскости дисперсии на величину Δh использовалась микрометрическая подвижка 6.

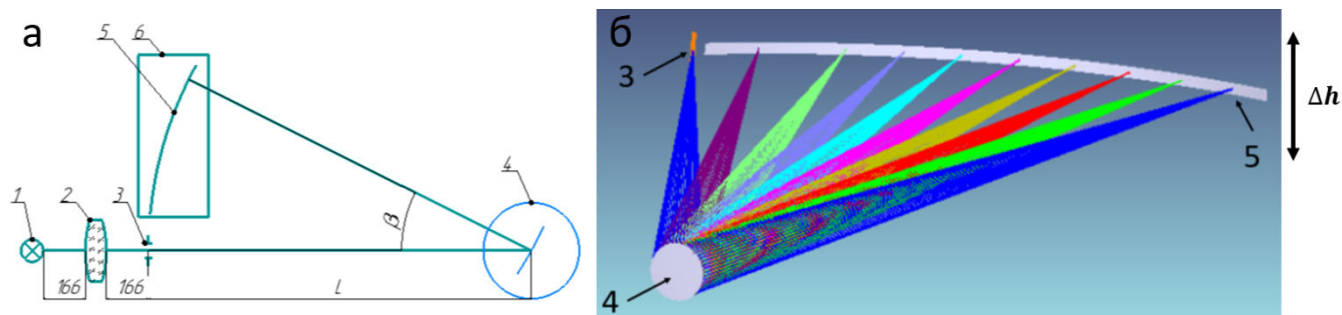


Рис. 1. Измерительный стенд: а – оптическая схема стенда, б – трехмерное представление оптической схемы спектрометра

Для моделирования оптической схемы использовалось ПО «Zemax», в котором неклассические решетки задаются бинарной поверхностью первого типа [8, 9]. Коэффициенты бинарной поверхности связаны с коэффициентами ряда функции оптического пути (ФОП) вогнутой решетки соотношениями [10, 11]:

$$C_{ZEMAX} = 2\pi C_n, \quad C_1 = G_{010} = 0, \quad C_2 = G_{100}, \quad C_3 = \frac{G_{020}}{2}, \quad C_4 = G_{110},$$

$$C_5 = \frac{G_{200}}{2}, \quad C_6 = G_{030} = 0, \quad C_7 = \frac{-G_{120}}{2}, \quad C_8 = G_{210} = 0, \quad C_9 = \frac{-G_{300}}{6}.$$

Коэффициенты ряда ФОП вогнутой решетки вычисляются по следующим формулам:

$$G_{ijk} = \frac{\partial^{ij} n(y, z)}{\partial y^i \partial z^j}, \quad G_{010} = 0, \quad G_{100} = \frac{1}{d_0}, \quad G_{020} = \frac{\tan \gamma}{d_0 R}, \quad G_{110} = 0,$$

$$G_{200} = \frac{\tan \gamma - \mu R}{d_0 R}, \quad G_{300} = 0, \quad G_{120} = \frac{-\mu \tan \gamma}{d_0 R}, \quad G_{210} = 0,$$

$$G_{300} = \frac{2R(\mu^2 - \nu) - 3\mu \tan \gamma}{d_0 R},$$

где d_0 – расстояние между штрихами, γ – угол наклона оси качания резца, R – радиус кривизны решетки, μ – коэффициент неравномерности.

Бинарные коэффициенты используемой вогнутой решетки следующие: $C_2=15080$, $C_3=3,516$, $C_5=0$, $C_7=1,639 \cdot 10^{-3}$, $C_9=5,456 \cdot 10^{-4}$.

Адекватность модели оценивалась по параметру средней ошибки аппроксимации [12].

Экспериментальные результаты и их обсуждение

В геометрические параметры схемы входят: передний отрезок, угол поворота дифракционной решетки. Изменение переднего отрезка L эквивалентно изменению угла поворота решетки β , что позволяет провести эксперимент только при отклонении одного параметра L . Для исследования спектрального разрешения вне плоскости дисперсии фотоприемник отклонялся на высоту Δh . Для оценки разрешающей способности использовался параметр H – полная ширина изображения входной щели на уровне, соответствующем половине амплитуды регистрируемой спектральной линии (ПШПВ) [13].

В первом эксперименте исследовалось изменение разрешающей способности при отклонении переднего отрезка на величину ΔL .

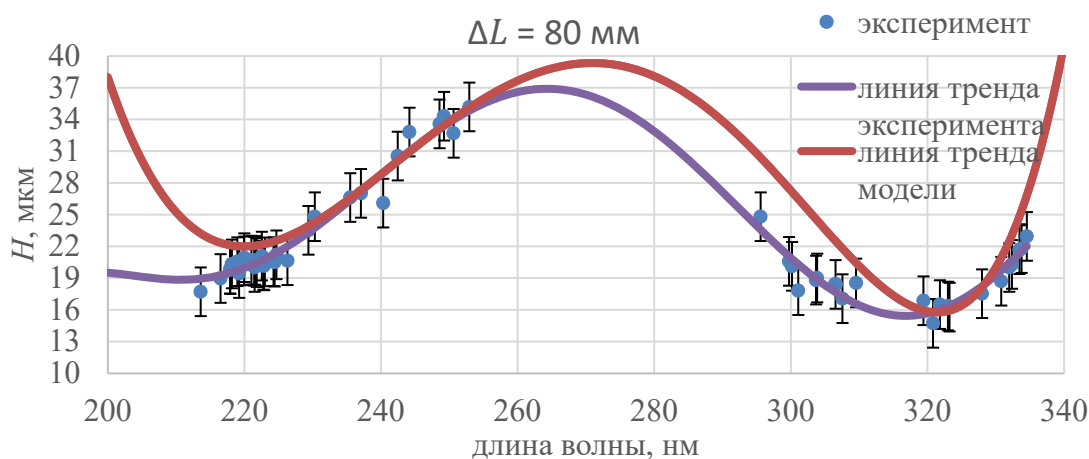


Рис. 2. Экспериментальная зависимость ПШПВ от длины волны при $\Delta L = 80$ мм и ее модель

Из рис. 2 видно, что сфокусировать спектр возможно только в двух точках, что связано с изменением кривизны поля при изменении переднего отрезка. Средняя ошибка аппроксимации для данного эксперимента лежит в диапазоне от 4% до 12%. На основе модели можно определить максимальное допустимое отклонение, при котором разрешающая способность не изменяется более чем на 10%. Для переднего отрезка это значение 10 мм (при номинальной величине 895 мм), для угла поворота решетки – $1,6^\circ$ (при номинальной величине $26,5^\circ$).

При проведении второго эксперимента исследовалось изменение разрешающей способности при отклонении регистрирующей поверхности на величину Δh .

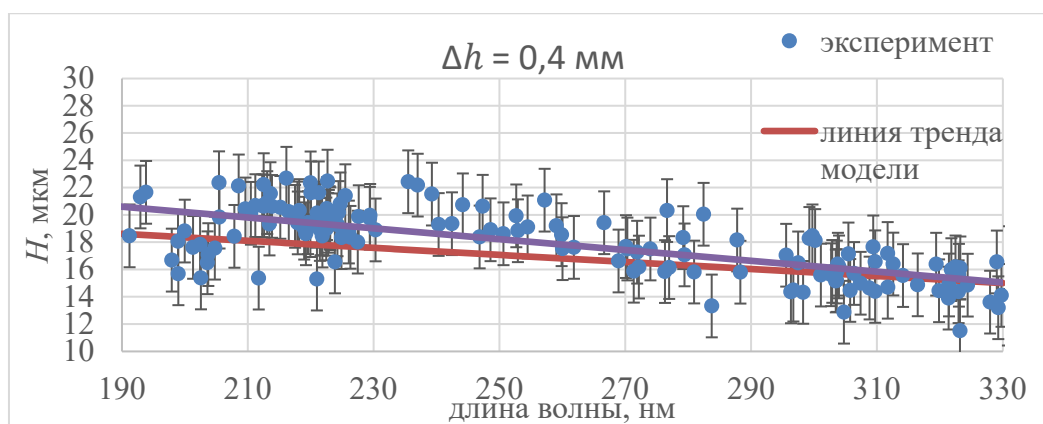


Рис. 3. Экспериментальная зависимость ПШПВ от длины волны при $\Delta h = 0,4$ мм и ее модель

При отклонении фотоприемника от плоскости дисперсии ширина спектральных линий увеличивается в коротковолновой части диапазона (рис. 3), что связано с комой вогнутой решетки. Средняя ошибка аппроксимации для второго эксперимента лежит в диапазоне от 6% до 11%, что позволяет использовать модель для оценки изменяющей способности при использовании фотоприемников с разнесенными от плоскости дисперсии, линейками фотодиодов. В МАЭС [3] линейки разнесены на 3 мм относительно друг друга в сагиттальной плоскости. Путем моделирования получено, что разрешающая способность такого прибора ухудшается в два раза (с 12 пм до 24 пм) в коротковолновой части спектрального диапазона.

Заключение

В ходе данной работы была проверена адекватность модели оптической схемы Пашена-Рунге. Средняя ошибка аппроксимации не превышает 12%, что является хорошим показателем уровня адекватности. На основе модели определены допустимые отклонения геометрических параметров, при которых спектральное разрешение не изменяется более чем на 10%. Для переднего отрезка это значение 10 мм (при номинальной величине 895 мм), для угла поворота решетки – $1,6^\circ$ (при номинальной величине $26,5^\circ$). При использовании линеек фотодиодов, разнесенных на 3 мм, разрешающая способность в коротковолновой части спектрального диапазона ухудшится с 12 пм до 24 пм.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Лабусов В. А. Приборы и комплексы компании «ВМК-Оптоэлектроника» для атомно-эмиссионного спектрального анализа. Современное состояние // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2015. – Т. 81, № 1/2. – С. 12–21.
2. Пейсахсон, И. В. Оптика спектральных приборов / И. В. Пейсахсон. – Спб : Машиностроение, 1975. – 312 с.
3. Лабусов В. А. и др. Многоканальные анализаторы эмиссионных спектров МАЭС средство измерения для атомно-эмиссионного спектрального анализа //Интерэкспо Гео-Сибирь. – 2011. – Т. 5. – №. 1. – С. 151–162.

4. Бажанов, Ю. В. Новые возможности получения неклассических нарезных дифракционных решеток большой апертуры / Ю. В. Бажанов, А. В. Лукин, А. Н. Мельников // Оптический журнал. – 2021. – Т. 88, № 9. – С. 44–51.
5. Вишняков Е. А. и др. Изображающий спектрограф нормального падения на основе аперриодической сферической решетки для вакуумной области спектра // Оптика и спектроскопия. – 2018. – Т. 125. – №. 5. – С. 687–698.
6. Пелипасов О. В. и др. Аналитические возможности спектрометра «Гранд» при анализе растворов с использованием индуктивно-связанной плазмы // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2019. – Т. 85. – №. 1 (II). – С. 82–85.
7. Бабин С. А., Селюнин Д. О., Лабусов В. А. Быстродействующие анализаторы МАЭС на основе линеек фотодетекторов БЛПП-2000 и БЛПП-4000 // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2019. – Т. 85. – №. 1 (II). – С. 96–102.
8. Chen X., Zeng L. Aberration-reduced spherical concave grating holographically recorded by a spherical wave and a toroidal wave for Rowland circle mounting // Optics Express. – 2019. – Т. 27. – №. 3. – С. 3294–3304.
9. Sokolova E. Simulation of mechanically ruled concave diffraction gratings by use of an original geometric theory // Applied optics. – 2004. – Т. 43. – №. 1. – С. 20–28.
10. ZEMAX Optical Design Program, User's Guide, Version 13.0 (Focus Software, Inc., Tucson, Ariz., 2014).
11. Namioka T. Theory of the concave grating. I // Josa. – 1959. – Т. 49. – №. 5. – С. 446–460.
12. Дорофеева Л. И. Моделирование и оптимизация разделительных процессов // Томск: Изд-во Томского политехнического университета. – 2008.
13. Лебедева В. В. Техника оптической спектроскопии. – 1986.

© А. А. Сырбаков, И. А. Зарубин, 2024