

# Simulationsberechnungen eines Spektrometers mit Rowlandkreis und Simulation einer Eintrittsöffnung mit großer NA

Katharina Strathmann, Oliver Lass, Sebastian Smarzyk, Matthias Haupt

Jade Hochschule, Friedrich-Paffrath-Str. 101, 26389 Wilhelmshaven

## Abstract

An der Jade Hochschule in Wilhelmshaven wird im Projekt „MiniSpectral“ ein integriertes, miniaturisiertes Spektrometer zur Herstellung in Kunststoffspritzguss entwickelt, welches sowohl kostengünstig als auch hochauflösend sein wird. Dadurch ist der Einsatz in der Medizin, nicht nur stationär in der Praxis oder im Krankenhaus, sondern auch mobil im Feldeinsatz denkbar. Die Grundlage des Spektrometers stellt eine Rowlandkreis-geometrie dar, in welche die zu untersuchende Strahlung mittels einer optischen Polymerfaser (POF) eingekoppelt wird. Neben der Variation von Gitterkonstanten und Rowlandkreisradien werden Einflüsse von Parametern wie Material oder Wellenlänge erfasst und optimiert. Darüber hinaus wird anhand von Experimenten das Temperaturverhalten und die Spritzbarkeit verwendeter Materialien untersucht. In der vorliegenden Veröffentlichung liegt der Fokus auf der Erstellung der Simulation.

## 1. Einleitung

Moderne, kommerziell verfügbare Spektrometer weisen in der Regel Nachteile in Bezug auf Größe, Gewicht und Justage sowie Preis und Auflösung auf. In der vorliegenden Veröffentlichung wird ein Spektrometer in kleiner Bauform betrachtet. Ziel ist es, ein integriertes, justagefreies Spektrometer mit hoher Auflösung zu entwickeln, das kostengünstig in nur einem Schritt spritzgegossen werden kann. Dieses Spektrometer wird auf einer Rowlandkreisgeometrie basieren. Die Lichteinkopplung erfolgt mittels einer optischen Polymerfaser (POF), welche mit einem UV-aushärtenden Polymer passender Brechzahl  $n$  direkt an die Rowlandkreisgeometrie angeklebt wird. Im Projekt wird eine Dichte von 1000 Linien/mm und eine zu erreichende Auflösung  $<1$  nm angestrebt.

Die möglichen Einsatzbereiche eines solchen Spektrometers sind breit gefächert: Aufgrund des kompakten Aufbaus und des günstigen Preises sind Einsätze in Laboratorien ebenso denkbar wie im Feld, wo insbesondere die Unempfindlichkeit gegenüber äußeren Einflüssen und somit auch die Justagefreiheit eine große Rolle spielen. Explizit wird der Einsatz eines solchen Spektrometers in den Bereichen Umweltanalytik (beispielsweise zur Analyse der Gewässerqualität oder von Gaszusammensetzungen), Lebensmittelkontrolle, Medizintechnik, oder auch in landwirtschaftlichen Betrieben (beispielsweise zur Analyse von Futtermitteln oder der Bodenqualität) gesehen.

## 2. Rowlandkreisgeometrie

Als Rowlandkreis wird eine Geometrie bezeichnet, die Henry A. Rowland 1883 beschrieb (Rowland, 1883). Das Funktionsprinzip basiert auf zwei Kreisen mit dem Radienverhältnis 1:2, wie Abbildung 1 zeigt. Der Kreis mit kleinerem Radius wird als Rowlandkreis bezeichnet. Der Kreis mit größerem Radius trägt ein entsprechend gekrümmtes Dispersionsgitter, entsprechend wird dieser Kreis als Gittergrundkreis bezeichnet. Bei Einkopplung von fokussierter polychromatischer Strahlung (hier aus einer POF austretend) auf dem Rowlandkreisradius wird diese Strahlung am Gitter gebrochen. Die enthaltenen Wellenlängen werden dann getrennt voneinander an anderer Stelle auf dem Rowlandkreisradius fokussiert. Je nach Anordnung von Quelle und Gitter können dabei verschiedene Beugungsordnungen beobachtet werden.

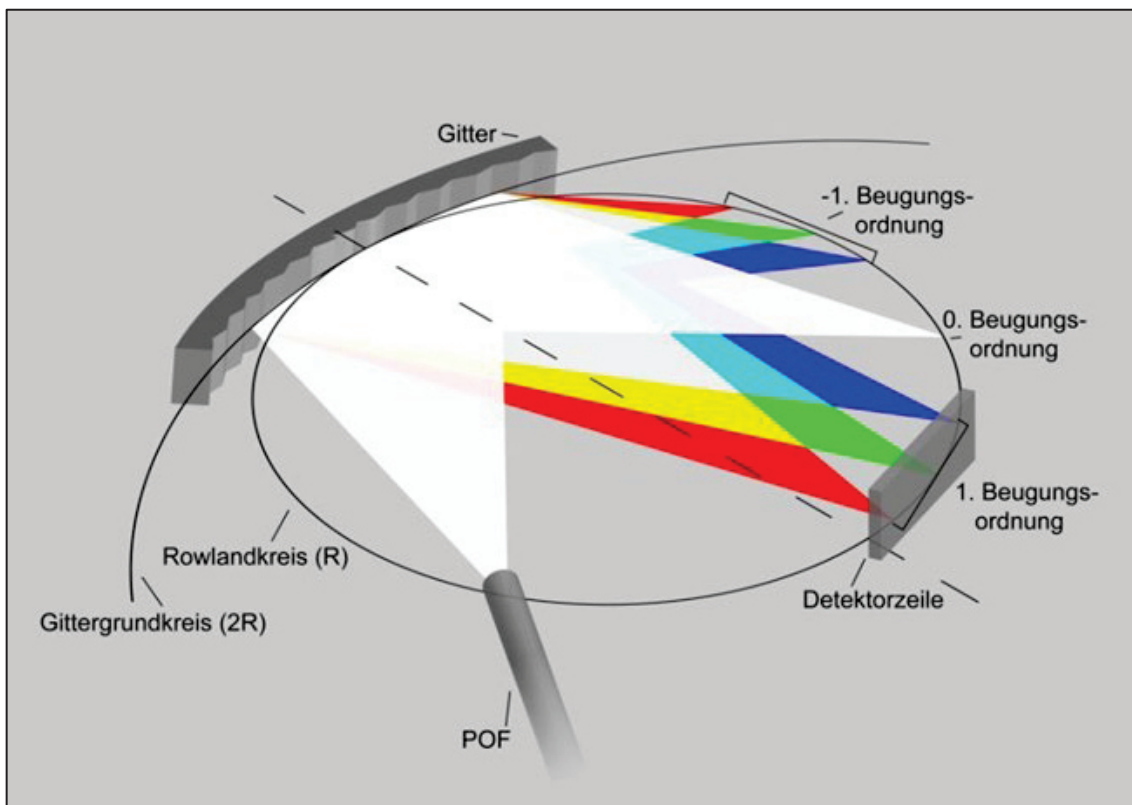


Abbildung 1: Schematische Darstellung einer Rowlandkreisgeometrie (Rowlandkreis und Gittergrundkreis), mit Einkopplung polychromatischer Strahlung aus einer POF und Auftrennung dieser Strahlung in drei Wellenlängen (verschiedene Beugungsordnungen) (Fischer & Haupt, 2010)

## 3. Erstellung einer ersten Simulation

Zunächst wird unter Verwendung der Software *Ansys Zemax OpticStudio* ein Grundaufbau des Spektrometers angefertigt. Als Eingangsfaser wird eine Standard-SI-POF angenommen, an die sich direkt die Rowlandkreisgeometrie anschließt. Als Material wird zunächst Polymethylmethacrylat (PMMA) eingesetzt. Simuliert wird mit vier Wellenlängen: 405 nm, 450 nm, 520 nm, 660 nm. Der Übersicht halber erfolgt die Darstellung dieses Grundaufbaus in Abbildung 2 lediglich zweidimensional. Der vollständige Kreis stellt den Rowlandkreis dar. Auf der linken Seite ist die Einkopplung, und auf der rechten Seite ist als Teilkreis der Gittergrundkreis erkennbar. Farblich entsprechend ihrer Wellenlänge sind die Strahlengänge der vier simulierten Wellenlängen dargestellt.

Weitere Linien sind der Konstruktion des Grundgerüsts innerhalb der Software geschuldet.

Für die in dieser Veröffentlichung vorgestellten ersten Ergebnisse wurden folgende Annahmen getroffen:

1. Einkopplung aus einer Punktquelle mit Numerischer Apertur einer Standard-SI-POF. Die der Realität näherkommende Simulation von Strahlen bei Austritt aus einer Multimodefaserendfläche erfolgt zu einem späteren Zeitpunkt.
2. Einsatz eines sphärischen Gitters. Da die fokussierende Eigenschaft der Rowlandkreisgeometrie nur in der Ebene zutrifft, wird zur Verringerung von Bildfehlern in der Bildebene bzw. Detektorebene des Spektrometers ein asphärisches Gitter zum Einsatz kommen.

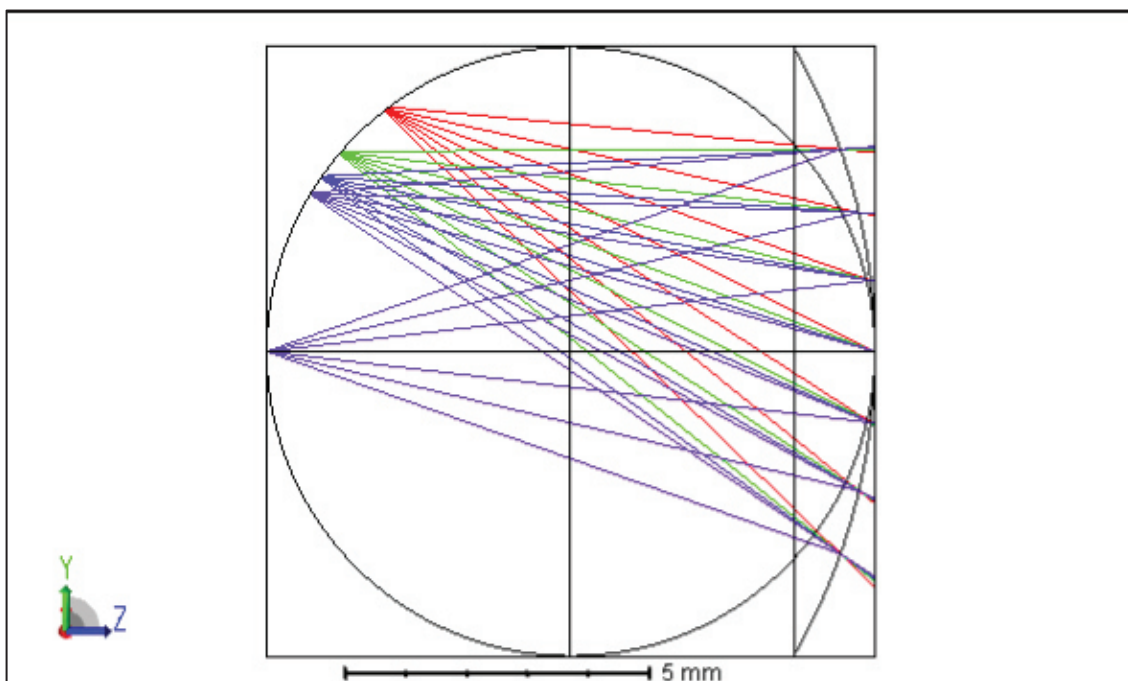


Abbildung 2: Simulation einer Rowlandkreisgeometrie mit Einkopplung von vier Wellenlängen aus einer Punktquelle (links) sowie Beugung dieser am Gitter (rechts), zweidimensionale Darstellung. Rowlandkreisradius 5 mm; 1000 Linien/mm; Wellenlängen 405 nm, 450 nm, 520 nm, 660 nm (entsprechend ihrer Lichtfarbe dargestellt); PMMA.

Wesentliche Parameter wie die Anzahl der Linien/mm, die Radien der Rowlandkreisgeometrie oder die Wellenlänge werden im Folgenden variiert. Als Ausgangsgrößen wurden neben oben genannten Wellenlängen und Material eine Linienzahl von 1000 Linien/mm sowie ein Rowlandkreisradius von 5 mm gewählt. Die Abstände der Fokuspunkte der Einzelwellenlängen auf der Detektorebene des Spektrometers können innerhalb der Software ausgemessen werden. Die Spotdurchmesser selbst können aufgrund des Einsatzes eines sphärischen Gitters lediglich abgeschätzt werden, da aufgrund des Einsatzes des sphärischen Gitters die Spots entlang der x-Achse deutlich verbreitert sind, wie das Spot-Diagramm in Abbildung 3 zeigt. Daher wird im nächsten Schritt die Implementierung eines torischen Gitters angestrebt.

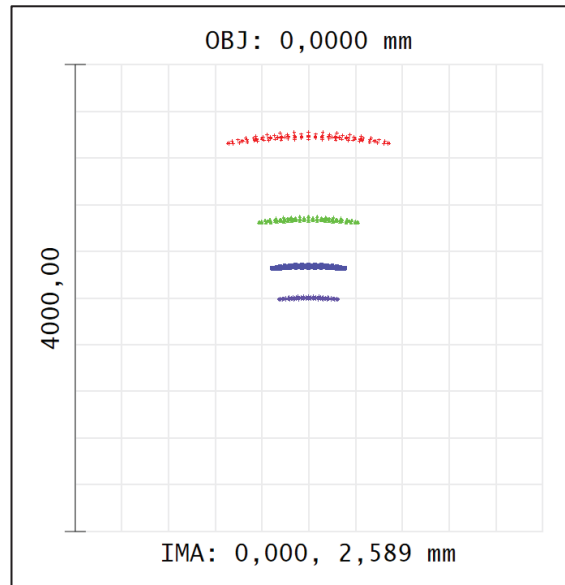


Abbildung 3: Spot-Diagramm zur Veranschaulichung von Bildfehlern (Verbreiterung der Spots entlang der x-Achse) beim Einsatz eines sphärischen Gitters (Einheiten sind  $\mu\text{m}$ ). Rowlandkreisradius 5 mm; 1000 Linien/mm; Wellenlängen 405 nm, 450 nm, 520 nm, 660 nm (entsprechend ihrer Lichtfarbe dargestellt); PMMA.

#### 4. Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit beschreibt erste Schritte der Entwicklung der Simulation eines miniaturisierten hochauflösenden Spektrometers auf Polymerbasis, dessen Grundlage eine Rowlandkreisgeometrie ist. Neben der erfolgreichen Trennung der vier eingesetzten Wellenlängen ist bereits erkennbar, dass ein asphärisches Gitter essentiell ist, um in der Bildebene des Spektrometers möglichst kleine und aberrationsfreie Spots zu erreichen. Weiterhin ist zu prüfen, welchem Abstand auf dem Rowlandkreis eine Wellenlängendifferenz von 1 nm entspricht und ob dieser Abstand mit gängigen Detektorzeilen korreliert. Um hier die angestrebte Kongruenz zu erhalten, kommt die Variation der Parameter Kreisradien, Material und Gitterkonstante zum Tragen. Dies wird in einer nachfolgenden Veröffentlichung untersucht.

#### Quellen

- Rowland, H. A. (1883). XXIX. On concave gratings for optical purposes. *The London, Edinburgh and Dublin philosophical magazine and journal of science*. <https://doi.org/10.1080/14786448308627419>
- Fischer, U. & Haupt, M. (2010). Integrated WDM System for POF Communication with Low Cost Injection Moulded Key Components. *Advanced Photonics & Renewable Energy*. <https://doi.org/10.1364/anic.2010.awb2>