

凹面光栅成像的谱线线形以及杂散光的计算

刘 宁

(华南师范大学量电所, 广州510631)

摘要 提出了一种计算凹面光栅成像的谱线强度分布和计算凹面光栅三种随机误差造成的杂散光强度分布的方法。这种方法在采用光线追迹方法的同时,也考虑到了凹面光栅的衍射效率及光栅误差造成的衍射及散射作用。并以一 Seya-Namioka 型光谱仪为例说明结果。

关键词: 凹面光栅; 谱线强度分布; 衍射效率

1 前 言

目前对于凹面光栅成像的谱线强度分布,一般采用光线追迹的方法计算。在这种计算方法中,谱线的强度分布与计算的点列图中的密度分布成正比,并且还假定了每一点代表相同的单位强度。但实际情况并非如此。光栅上每一点对于入射狭缝上的各点,衍射效率并不相同。因此在计算中应该予以考虑。目前对于平面光栅的衍射效率已经有了各种各样的计算方法。但对凹面光栅还很少见到报导^[1]。

目前对于光栅本身缺陷所造成的杂散光,人们已经作了一些计算,但也只是对平面光栅进行的。对于凹面光栅,情况要复杂一些。因为凹面光栅除了起色散光的作用外,还要对衍射光起成像的作用。而为了计算凹面光栅本身缺陷所造成的杂散光,还必须考虑其缺陷所造成的衍射及散射作用。

2 计算方法

为了同时考虑凹面光栅的成像及衍射作用,我们把凹面光栅分成许多小块。而每一个小块光栅可近似看成是平面光栅。由光线追迹我们可以得到每一小光栅对一入射光点的几何成像,而由标量衍射理论,我们可以得到这一像点的光强分布以及杂散光分布。最后将所有像点的强度分布求和,就可以得到凹面光栅所成像的光谱线的强度分布以及杂散光的分布。

2.1 光线追迹

对于凹面光栅的光线追迹,我们采用 Namioka 等^[2]给出的计算方法。如图1所示,以光栅面的中心点 O 为原点,建立一直角坐标系。 x 轴沿原点的法线方向, y 轴垂直于刻槽方向, z 轴

平行于刻槽方向。光栅常数为 d ，曲率半径为 R 。沿 $P(\xi, \omega, l)$ 是光栅面上的一点， $A(x, y, z)$ 和 $B(x', y', z')$ 分别为光源和像面上的对应点。经过光线追迹，可以得到衍射光线的方向余弦 (L', M', N') 为：

$$\begin{aligned} L' &= (\xi - R)T - L \\ M' &= \omega T - (M - \Lambda) \\ N' &= lT - N \end{aligned} \quad (1)$$

其中， (L, M, N) 为入射光线的方向余弦。

$$L = -\frac{x - \xi}{\langle AP \rangle}, M = -\frac{y - \omega}{\langle AP \rangle}, N = -\frac{z - l}{\langle AP \rangle}$$

$$\langle AP \rangle = [(x - \xi)^2 + (y - \omega)^2 + (z - l)^2]^{1/2}$$

$$\Lambda = n\lambda_M/d$$

$$T = [p + (p^2 - qR^2)^{1/2}] / R^2$$

$$p = (\xi - R)L + \omega(M + \Lambda) + lN$$

$$q = 2M\Lambda + \Lambda^2$$

在图2中表示了，入射狭缝平面和出射狭缝平面。它们分别垂直于主光线 A_0O 和 B_0O 。其中 A_0 是入射狭缝的中点， B_0 为衍射主光线与出射狭缝平面的交点。

因为出射狭缝所在平面的平面方程为：

$$x \cos \beta_0 - y \sin \beta_0 = r'_0 \quad (2)$$

所以，对于入射狭缝上的一点 $A(x, y, z)$ ，对应于出射狭缝上的点 $B(x', y', z')$ 为：

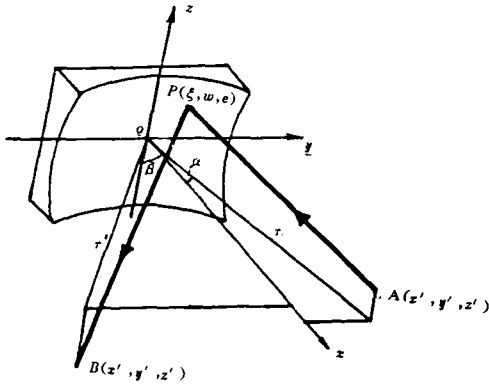


图1 光路图

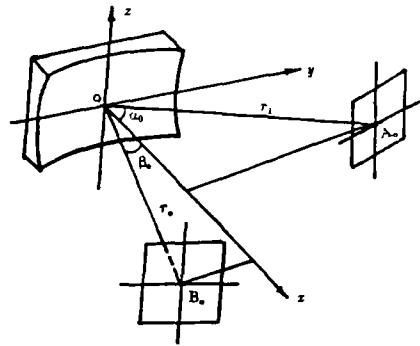


图2 光学系统分布图

$$\begin{aligned} x' &= \xi + CL' \\ y' &= \omega + CM' \\ z' &= l + CN' \end{aligned} \quad (3)$$

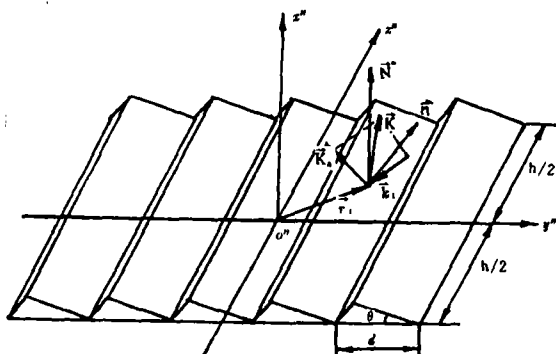


图3 小平面光栅的衍射

其中,

$$C = \frac{r'_0 - \xi \cos \beta_0 + \omega \sin \beta_0}{L' \cos \beta_0 - M' \sin \beta_0}$$

2.2 入射光和衍射光的波矢量

如图3所示选择小平面光栅上的直角坐标系 \$x''y''z''\$。其中, \$x''\$ 轴垂直于光栅平面, \$y''\$ 轴垂直于光栅刻槽方向, \$z''\$ 轴平行于光栅刻槽方向。根据立体几何的知识, 求入射光和衍射光的波矢量。

因为凹面光栅的表面满足方程

$$(x - R)^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0 \quad (4)$$

所以, 经过光栅上点 \$P(\xi, \omega, l)\$ 的法线 \$\vec{N}\$ (\$x''\$ 轴) 方程为

$$\frac{x - \xi}{\xi - R} = \frac{y - \omega}{\omega} = \frac{z - l}{l} \quad (5)$$

\$y''\$ 轴为经过 \$P(\xi, \omega, l)\$ 的切平面与平行 \$xy\$ 平面的平面交线, 即

$$\begin{cases} (\xi - R)(x - \xi) + \omega(y - \omega) + l(z - l) = 0 \\ z - l = 0 \end{cases} \quad (6)$$

\$z''\$ 轴为经过 \$P(\xi, \omega, l)\$ 的切平面与平行于 \$xz\$ 平面的平面交线, 即

$$\begin{cases} (\xi - R)(x - \xi) + \omega(y - \omega) + l(z - l) = 0 \\ y - \omega = 0 \end{cases} \quad (7)$$

入射狭缝上的一点 \$(x_0, y_0, z_0)\$ 入射到光栅上点 \$P(\xi, \omega, l)\$ 的光线方程为

$$\frac{x - x_0}{\xi - x_0} = \frac{y - y_0}{\omega - y_0} = \frac{z - z_0}{l - z_0} \quad (8)$$

与出射狭缝相对应的点 \$(x'_0, y'_0, z'_0)\$ 的衍射光线的方程为

$$\frac{x - x'_0}{\xi - x'_0} = \frac{y - y'_0}{\omega - y'_0} = \frac{z - z'_0}{l - z'_0} \quad (9)$$

由此可以求得入射光线与 x'' , y'' , z'' 轴方向余弦为

$$\begin{aligned} \cos \alpha_i &= \frac{(\xi - x_0)(R - \xi) - \omega(\omega - y_0) - l(l - z_0)}{\sqrt{[(\xi - x_0)^2 + (\omega - y_0)^2 + (l - z_0)^2][(\xi - R)^2 + \omega^2 + l^2]}} \\ \cos \beta_i &= \frac{\omega(\xi - x_0) + (R - \xi)(\omega - y_0)}{\sqrt{[(\xi - x_0)^2 + (\omega - y_0)^2 + (l - z_0)^2][\omega^2 + (\xi - R)^2]}} \\ \cos \gamma_i &= \frac{l(\xi - x_0) + (R - \xi)(l - z_0)}{\sqrt{[(\xi - x_0)^2 + (\omega - y_0)^2 + (l - z_0)^2][l^2 + (\xi - R)^2]}} \end{aligned} \quad (10)$$

入射光线的波矢量为

$$\vec{k}_i = k(\hat{x}'' \cos \alpha_i + \hat{y}'' \cos \beta_i + \hat{z}'' \cos \gamma_i) \quad (11)$$

其中, $k = \frac{2\pi}{\lambda_m}$, λ_m 是入射单色光的波长。

衍射光线与 x'' , y'' , z'' 轴的方向余弦为

$$\begin{aligned} \cos \alpha_d &= \frac{(x'_0 - \xi)(R - \xi) - \omega(y'_0 - \omega) - l(z'_0 - l)}{\sqrt{[(\xi - x'_0)^2 + (\omega - y'_0)^2 + (l - z'_0)^2][(\xi - R)^2 + \omega^2 + l^2]}} \\ \cos \beta_d &= \frac{\omega(x'_0 - \xi) + (R - \xi)(y'_0 - \omega)}{\sqrt{[(\xi - x'_0)^2 + (\omega - y'_0)^2 + (l - z'_0)^2][(\xi - R)^2 + \omega^2]}} \\ \cos \gamma_d &= \frac{l(x'_0 - \xi) + (R - \xi)(z'_0 - l)}{\sqrt{[(\xi - x'_0)^2 + (\omega - y'_0)^2 + (l - z'_0)^2][(\xi - R)^2 + l^2]}} \end{aligned} \quad (12)$$

衍射光线的波矢量为

$$\vec{k}_d = k(\hat{x}'' \cos \alpha_d + \hat{y}'' \cos \beta_d + \hat{z}'' \cos \gamma_d) \quad (13)$$

2.3 衍射效率及杂散光分布

如图3所示, 由 *Fresnel-Kirchhoff* 衍射理论可知, 在平面波近似下, 从光栅表面 S 反射的反射波可以写为

$$E = -\frac{i u \rho}{4\pi l} \exp(ikl) \iint_S \vec{k} \cdot \vec{n} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) dS \quad (14)$$

其中, E 是远离表面处的衍射波场, l 为起点到测量 E 处之间的距离, ρ 是光栅表面的反射系数 (反射率 = ρ^2), u 为 \vec{r} 处入射波振幅, \vec{n} 为光栅表面 \vec{r} 处的法线, $\vec{k} = \vec{k}_d - \vec{k}_i$, \vec{N} 为 $x''o''y''$ 平面的法线。

假设 \vec{k} 在 x'' , y'' , z'' 方向的分量为 (k_1, k_2, k_3) , 则

$$\begin{aligned} k_1 &= k(\cos \alpha_d - \cos \alpha_i) \\ k_2 &= k(\cos \beta_d - \cos \beta_i) \\ k_3 &= k(\cos \gamma_d - \cos \gamma_i) \end{aligned} \quad (15)$$

所以, 图3所示的坐标系中, (14) 式可以写为

$$E = -\frac{i u \rho}{4 \pi l} \exp(i k l) \iint \frac{\vec{k} \cdot \vec{n}}{\vec{N} \cdot \vec{n}} \exp[-i(k_1 x'' + k_2 y'' + k_3 z'')] d y'' d z'' \quad (16)$$

在 $x'' y'' z''$ 坐标系中, \vec{n} 的方向余弦为 $(\cos \theta, \sin \theta, 0)$, 所以

$$\vec{k} \cdot \vec{n} = k_1 \cos \theta + k_2 \sin \theta$$

因为 $\vec{N} \cdot \vec{n} = \cos \theta$, 所以倾斜因子

$$\frac{\vec{k} \cdot \vec{n}}{\vec{N} \cdot \vec{n}} = k_1 + k_2 \operatorname{tg} \theta \quad (17)$$

由于光栅在 y'' 方向是周期结构, 光栅常数为 d , 所以 (16) 式中的积分可以由只对一个刻槽积分, 然后对所有刻槽求和得到, 设每个小平面的光栅有 m 个刻槽, 并且为奇数。设 $m = 2j + 1$ 。如果光栅闪耀角很小, 则从刻槽较小一面的衍射可以忽略, 刻槽的槽形由 $x'' = (\frac{d}{2} - y'') \operatorname{tg} \theta$ 描述。在 Fraunhofer 衍射近似下, 入射角和衍射角都是常数。所以倾斜因子 $\frac{\vec{k} \cdot \vec{n}}{\vec{N} \cdot \vec{n}}$ 可以提到积分号外。所以 (16) 式可以写为 (假设每个小光栅的高为 h)

$$E = -\frac{i u \rho}{4 \pi l} e^{i k l} e^{-i k_1 \frac{d}{2} \operatorname{tg} \theta} \frac{\vec{k} \cdot \vec{n}}{\vec{N} \cdot \vec{n}} \sum_{j=-j}^j e^{-i k_2 j d} \int_{-h/2}^{h/2} e^{-i k_3 z''} d z'' \cdot \int_{-d/2}^{d/2} e^{-i k_2 y'' - k_1 \operatorname{tg} \theta y''} d y''$$

$$= -\frac{i u \rho}{4 \pi l} e^{i k l} e^{-i k_1 \frac{d}{2} \operatorname{tg} \theta} (k_1 + k_2 \operatorname{tg} \theta) h d \frac{\sin(m k_2 d / 2)}{\sin(k_2 d / 2)} \cdot \operatorname{sinc}(k_3 h / 2) \operatorname{sinc}[(k_2 - k_1 \operatorname{tg} \theta) d / 2] \quad (18)$$

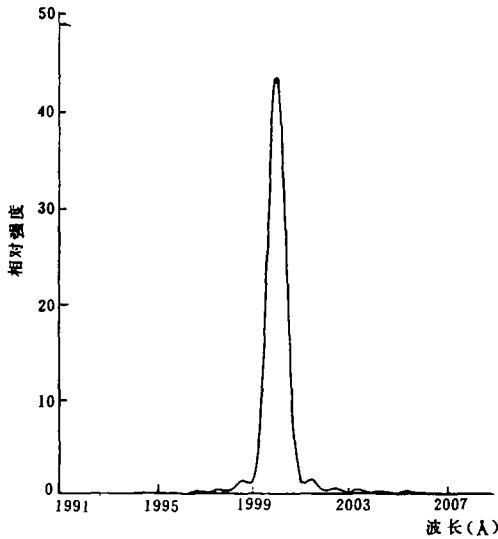


图4 光栅为理想光栅时, 光谱仪输出的强度分布

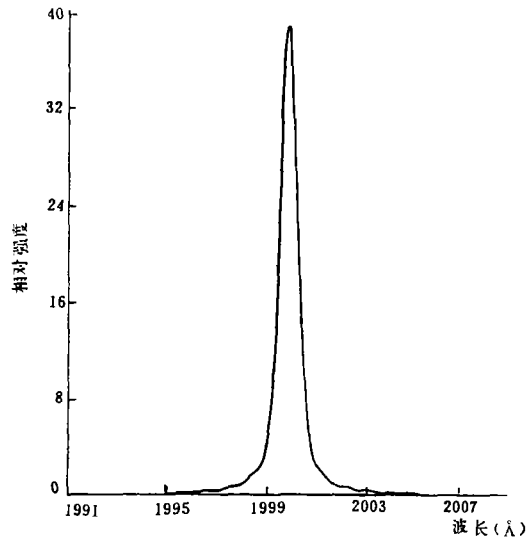


图5 光栅刻槽间距误差为5nm 时光谱仪输出的强度分布

如果入射狭缝作为面辐射强度为 v 的光源, 则由入射狭缝上面积为 S 的面元入射到光栅上的强度为 $u^2 = U S / \langle \Delta P \rangle^2$ 。因为我们已经求出在 l 距离处衍射振幅为 E , 所以在出射狭缝上

的光强为 $|E|^2 / \langle PB \rangle^2$.

$$I = \frac{u \rho^2 S h^2 d^2}{16 \pi^2 \langle AP \rangle^2 \langle PB \rangle^2} (k_1 + k_2 \operatorname{tg} \theta)^2 \frac{\sin^2(m k_2 d / 2)}{\sin^2(k_2 d / 2)} \sin^2 C^2(k_3 h / 2) \cdot \sin^2 C^2[(k_2 - k_1 \operatorname{tg} \theta) d / 2] \quad (19)$$

(19) 式是光栅没有缺陷时, 对于入射狭缝上的点 (x_0, y_0, z_0) , 由光线追迹得到的对应于出射狭缝上的点 (x'_0, y'_0, z'_0) 处的光强。

由 (19) 式知, 光强取极大值的条件为

$$k_2 d / 2 = n \pi, (n \text{ 为整数})$$

即,

$$\cos \beta_i - \cos \beta_r = \frac{n \lambda_m}{d} \quad (20)$$

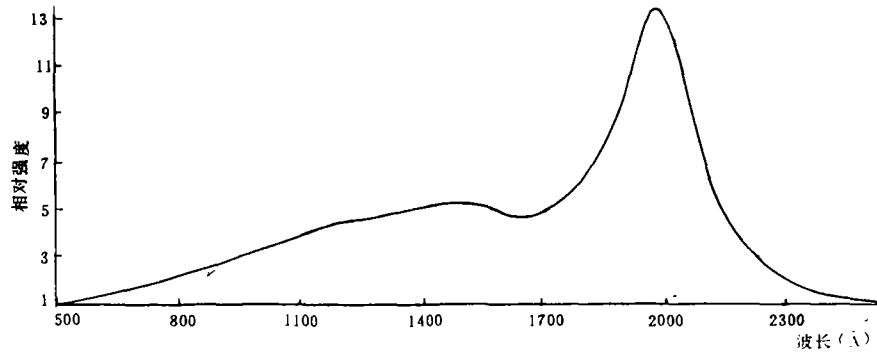


图6 刻槽深度误差为10nm, 波长为2000Å的入射光在不同波长位置产生的杂散辐射

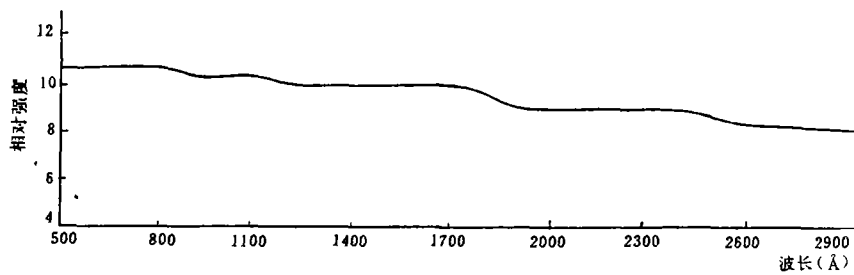


图7 $\sqrt{\sigma_r a} = \ln n_1$, 波长为2000Å的入射光在不同波长位置产生的杂散辐射

当我们取入射到光栅上的点为光栅的中点 $O(0, 0, 0)$ 时, 这样由 (19) 式可以得到光栅方程

$$\left(1 + \frac{z_0^2}{r^2}\right)^{-1/2} \sin \alpha + \left(1 + \frac{z_0'^2}{r'^2}\right)^{-1/2} \sin \beta = \frac{n \lambda_M}{d} \quad (21)$$

此式与 T. Namioka^[3]所得到的结果相同。

当光栅存在缺陷时, M. R. Sharpe 和 D. Irish^[4]给出了对于平面光栅, 三种随机误差所产生

的杂散光分布,我们将 M. R. Sharpe 给出的结果应用于每个小平光栅,由此得出三种随机误差在凹面光栅的情况下,所产生的杂散光分布。

下面我们给出 M. R. Sharpe 给出的计算结果。

(i) 光栅刻槽间距有随机误差时

$$I = \frac{u\rho^2Sh^2d^2}{16\pi^2\langle AP \rangle^2\langle PB \rangle^2}(k_1 + k_2\text{tg}\theta)^2C(x)\sin^2(k_3h/2) \cdot \sin^2[(k_2 - k_1\text{tg}\theta)d/2] \quad (22)$$

其中:

$$C(x) = \frac{mSh(bx^2)}{Ch(bx^2) - \cos(x)} + \frac{[1 - Ch(bx^2)\cos(x)][1 - e^{-mbx^2}\cos(mx)] - e^{-mbx^2}\sin(mx)\sin x \sin(bx^2)}{[Ch(bx^2) - \cos(x)]^2}$$

$x = k_2d$, $b = \sigma^2/2d^2$, σ 即为刻槽间距误差的方差。

(ii) 光栅槽形有误差时

这时光强可以分成两部分

$$I = I_1 + I_2$$

其中, I_1 为理想光栅时的光强分布、 I_2 为光栅槽形误差造成的杂散光分布。

(a) 光栅刻槽深度有随机误差时

$$I_2 = \frac{u\rho^2Sh^2d^2}{16\pi^2\langle AP \rangle^2\langle PB \rangle^2}(k_1 + k_2\text{tg}\theta)^2mk_1^2\sigma_d^2\sin^2(k_3h/2) \cdot \sin^2[(k_2 - k_1\text{tg}\theta)d/2] \quad (23)$$

其中, σ_d 为刻槽深度误差的方差。

(b) 光栅表面粗糙度造成的杂散光

$$I_2 = \frac{u\rho^2Shd}{16\pi^2\langle AP \rangle^2\langle PB \rangle^2}(k_1 + k_2\text{tg}\theta)^2mk_1^2\pi\sigma_r^2a^2 \quad (24)$$

其中, σ_r 为表面粗糙度, a 为表面自相关长度。

通过上面的计算,我们就可以得到在出射狭缝像面上所有由光线追迹得到的像点附近的光强分布,将所有这些强度分布求和,然后经过出射狭缝卷积后,即可得到由出射狭缝射出的光强分布。

3 结果说明

根据以上的分析,我们对 Seya-Namioka 型单色器进行了计算,并定性说明了凹面光栅的三种随机误差所产生的杂散光的强度分布。

单色器的参数为:光栅面积为 20mm (宽) × 30mm (高),光栅曲率半径为 998.8mm,光栅刻线 1200 条线/毫米,入射臂长 817.12mm,出射臂长 816.62mm,两臂之间的夹角为 70.25°,出射狭缝和入射狭缝的宽度为 0.05mm,高为 8mm。图 4 表示入射波长为 2000 Å,光栅没有缺陷时,单色器输出的光强分布。我们可以看到,由于衍射作用,在谱线两端所产生的波状起伏。图 5 表示入射波长为 2000 Å,光栅刻槽间距误差为 5nm 时,单色器输出的光强分布。我们可以看到,由于刻槽间距误差,而导致谱线加宽。并且误差越大,谱线加宽越大。

图 6 表示入射波长 2000 Å,光栅刻槽深度误差为 10μm 时,由于光散射,而造成的杂散光

分布。

图7表示入射波长为 2000 \AA ，光栅表面粗糙度 $\sqrt{\sigma_r a} = 1\text{ nm}$ 时，由于光散射，而造成的杂散光分布。

以上是我们考虑到凹面光栅的衍射效率的情况下，对凹面光栅成像的谱线强度分布公式进行了推导，并且还计算了凹面光栅三种随机误差所造成的杂散光强度分布。从计算结果可以看出衍射作用以及光栅缺陷对于凹面光栅成像所产生的谱线增宽和杂散光不可忽视。

参 考 文 献

- [1] Toshiaki KITA et al., J. Spectrosc. Soc. Japan, 1980, 29, 31
- [2] T. Namioka et al., J. Opt. Soc. Am., 1974, 64, 1037
- [3] T. Namioka, J. Opt. Soc. Am., 1959, 49, 446
- [4] M. R. Sharpe et al., Optica. Acta, 1978, 25, 861

Calculation of the Line Profiles and Stray Light Distributions Formed by Concave Gratings

Liu Ning

(South China Normal University, Guangzhou 510631)

Abstract

A method for computing the line profiles of spectral images formed by concave gratings and for computing the stray light distributions caused by three kinds of imperfections of the concave gratings. This method takes account of the diffraction efficiency of the concave gratings and the effects of diffraction and scattering caused by concave gratings' imperfections, while calculating the line intensities from spot diagram. An example is given for a Seya-Namioka monochromator.

Key words: Concave grating, Line profile, Diffraction efficiency