

Design und Simulation eines konkaven polymerbasierten diffraktiven optischen Elementes

zum Einsatz in der Spektroskopie

S. Smarzyk*, K. Strathmann*, M. Haupt*

*Jade Hochschule, Fachbereich Ingenieurwissenschaften, Wilhelmshaven

sebastian.smarzyk@jade-hs.de

An der Jade Hochschule wird im Projekt „Minispectral“ ein miniaturisiertes, polymerbasiertes Spektrometer entwickelt. Eine durch Spritzgusstechnik gefertigte Polymerkuppel mit konkavem Beugungsgitter erzeugt einen Linseneffekt zur Analyse von Wellenlängen. Zemax Raytracing und RCWA-Simulationen werden zur Optimierung verwendet.

1 Einführung

An der Jade Hochschule Wilhelmshaven wird ein miniaturisiertes, polymerbasiertes Spektrometer entwickelt, das eine präzise Analyse des optischen Spektrums von Materie ermöglichen soll. Mit diesem innovativen Gerät sollen sich chemische und molekulare Zusammensetzungen effizient bestimmen lassen. Besonders bei der Untersuchung von Lebensmitteln, Blut oder Medikamenten kann ein mobiles, miniaturisiertes Spektrometer eine zeitsparende, kostengünstige und flexible Alternative zu herkömmlichen, stationären Laborspektrometern sein. Das Grundkonzept und erste Entwicklungsschritte des Spektrometers wurden bereits auf verschiedenen Konferenzen präsentiert [1][2][3]. In dieser Veröffentlichung werden diese Arbeiten fortgeführt und der Fokus auf die detaillierte Simulation des polymerbasierten optischen Elements gelegt, insbesondere durch eine Kombination von Zemax Raytracing Simulationen und der Verwendung der Rigorous-Coupled-Wave Analysis (RCWA) zur Optimierung der optischen Parameter. Zudem werden erste Versuche beschrieben, das diffraktive optische Element (DOE) in Polymer abzuformen.

2 Grundkonzept

Die Optik des Spektrometers basiert auf dem Grundkonzept eines Rowland-Kreises [4]. Dieses innovative Spektrometer-Design wurde auf der SPIE Photonics Europe 2024 Konferenz in Straßburg vorgestellt [2]. Die dreidimensionale Kuppelform der Optik ermöglicht eine effiziente Lichtführung, wodurch das Signal-Rausch-Verhältnis (S/N) signifikant verbessert wird [5]. Die spezifische Geometrie der Kuppel, in Kombination mit einem konkaven Beugungsgitter, erlaubt es, alle Funktionen eines Spektrometers zu erfüllen und dabei auf aufwendige Linsensysteme zu verzichten. Das Grundkonzept ist in Abbildung 1 als 3D-CAD-Modell dargestellt.

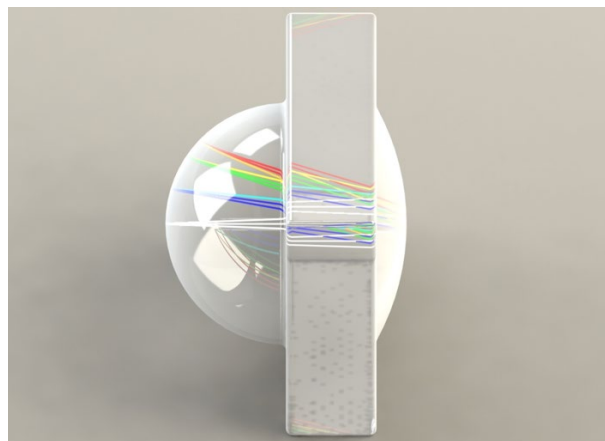


Abb. 1 Visualisierung der Simulation erstellt mit dem CAD-Programm SolidWorks: Zu sehen sind links die Polymerkuppel mit einem Radius von 5 mm und rechts die Gitterkuppel mit einem Radius von 10 mm sowie der Strahlengang von drei Wellenlängen. Die rechteckige Verdickung in der Mitte könnte als zukünftige Montagehalterung für die Integration in ein System dienen.

3 Simulation

Raytracing-Simulationen mit der Zemax-Software werden genutzt, um die optimalen Dimensionen des Beugungsgitters sowie des Kuppelradius zu ermitteln, insbesondere bei Anwendungen mit hoher numerischer Apertur (NA), wie sie in optischen Polymerfasern (POF) vorkommen. Dabei wird angestrebt, dass der Durchmesser der Polymerkuppel 10 mm nicht überschreitet. Allerdings stößt Raytracing an seine Grenzen, wenn es um die präzise Modellierung DOE geht, da es die Beugungsphänomene nicht adäquat darstellen kann. DOE manipulieren Licht durch Interferenzmuster und nicht nur durch einfache Strahlenfortpflanzung, weshalb wellenoptische Berechnungsmethoden erforderlich sind.

Um gekrümmte optische Gitter zu simulieren, können verschiedene mathematische Modelle in Betracht gezogen werden, darunter die Finite-Differenzen-Zeitbereichsmethode (FDTD) und die Finite-Elemente-Methode (FEM). In diesem Kontext stellt jedoch die Rigorous Coupled-Wave Analysis (RCWA) eine vielversprechende Wahl dar. RCWA ermöglicht präzise Lösungen für die Maxwells Gleichungen und bietet dabei eine hohe Rechenleistung sowie Anpassungsfähigkeit an unterschiedliche Geometrien und Materialien. Im Vergleich zu Methoden wie FDTD und FEM zeichnet sich RCWA durch ihre Genauigkeit, Rechengeschwindigkeit und einfache Parameterexploration aus. Diese Merkmale machen RCWA zu einer attraktiven Option für die effektive Modellierung gekrümmter Gittersysteme.

Innerhalb von Zemax wird das Beugungsgitter mithilfe von Dynamic Link Libraries (DLLs) und unter Einsatz von RCWA simuliert. Diese Methode erlaubt die dynamische Anpassung und Simulation entscheidender Parameter wie des Krümmungsradius und des Blaze-Winkels des Gitters. Das Ziel ist es, eine Liniendichte von bis zu 1000 Linien/mm zu erreichen und so eine Auflösung von weniger als 1 nm zu gewährleisten.

4 Abformung der Mikrostruktur

Ein erster Stempel mit mehreren Gitterstrukturen wurde in Nickel-Phosphor gefertigt. Diese Strukturen weisen Gitterkonstanten von 1 μm , 1,5 μm und 2 μm auf, jeweils mit einem 60° Blaze-Winkel. Für eine detaillierte Beschreibung des Herstellungsprozesses, der mittels Ultrapräzisionsbearbeitung (UPM) unter Verwendung einer monokristallinen Diamantspitze erfolgte, sowie für die AFM- und REM-Aufnahmen dieses Masters zur Abformung, wird auf die OPAL Conference '24 in der dies durch eine Präsentation und im Proceeding beschrieben wurde verwiesen [3]. Der Stempel wird als erster Master verwendet, um diese Gitterstrukturen präzise abzuformen. Abbildung 2 zeigt die drei mit dem Stempel abgeformten Gitterstrukturen in Silikon. Diese Gitterstrukturen werden zurzeit eingehend untersucht.



Abb. 2 Zu sehen sind drei in Silikon abgeformte optische Gitter, die alle in einem optischen Halter angebracht sind, um die Gitter im Strahlengang zu positionieren.

Eine zukünftige Abformung des Gitters in Polymethylmethacrylat (PMMA) ist in Planung und soll mittels einer hydraulischen Multilayer-Pressen realisiert werden.

5 Zusammenfassung Ausblick

In dieser Veröffentlichung wurde die Entwicklung und Simulation eines konkaven, polymerbasierten diffraktiven optischen Elements (DOE) für ein miniaturisiertes Spektrometer vorgestellt. Zur Optimierung des Designs kamen Zemax Raytracing und Rigorous-Coupled-Wave Analysis (RCWA) zum Einsatz. Zudem wurde eine erste erfolgreiche Abformung eines Nickel-Phosphor-Masters in Silikon präsentiert.

Als nächste Schritte sind die Abformung des Gitters in PMMA und die Integration der Optik des Spektrometers in ein portables System zur effizienten Analyse chemischer und molekularer Zusammensetzungen in verschiedenen Proben geplant.

6 Danksagung

Dieses Projekt wird vom Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz (BMWK) aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.

Literatur

- [1] Smarzyk, Strathmann, Lass, Haupt. "Entwicklung eines miniaturisierten Spektrometers für den optischen Wellenlängenbereich". In: DGaO Proceeding (2023), P5. url: https://www.dgao-proceedings.de/download/124/124_p5.pdf
- [2] S. Smarzyk, K. Strathmann und M. Haupt. "Development of a polymer-based miniaturized spectrometer for the optical wavelength range". In: Optical Sensing and Detection VIII. Hrsg. von Francis Berghmans und Ioanna Zergioti. Bd. 12999. International Society for Optics and Photonics. SPIE, 2024, S. 129992L. doi: 10.1117/12.3021969. url: <https://doi.org/10.1117/12.3021969>.
- [3] M. Haupt, S. Smarzyk and K. Strathmann. "Design and Development of a Miniature Spectrometer for the Visible Wavelength Region" Proceedings of the 7th International Conference on Optics, Photonics and Lasers (OPAL' 2024), 58-61 (2024). ISBN: 978-84-09-61372-4
- [4] Henry a. Rowland. XXIX. „On concave gratings for optical purposes“. Philosophical Magazine Series 5, 16(99):197_210, sep 1883.
- [5] S. Höll, M. Haupt, and U. H. P. Fischer, "Design and development of an injection-molded demultiplexer for optical communication systems in the visible range," Appl. Opt. 52, 4103-4110 (2013)