

# Entwicklung eines miniaturisierten Spektrometers für den optischen Wellenlängenbereich

Sebastian Smarzyk, Katharina Strathmann, Oliver Lass, Matthias Haupt

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

## 1. Abstract

Diese Arbeit beschreibt die Entwicklung eines miniaturisierten Spektrometers, das in vielen Bereichen der analytischen Chemie zum Einsatz kommen kann. Sämtliche Funktionen der polymerbasierten Optik in Form eines Rowlandkreises werden mithilfe eines konkaven Beugungsgitters an der Oberfläche des Kreises bzw. der Kuppel erfüllt. Bisher übliche aufwendige Linsensysteme entfallen so komplett. Die Verwendung von modernster Spritzgusstechnik und der hierfür entwickelten innovativen Werkzeuge ermöglicht es, die Herstellung der Optik in nur einem Herstellungsschritt zu realisieren. Die dreidimensionale Kuppelstruktur der Optik bildet hierbei eine Besonderheit. Das Dispersionsgitter an der Oberfläche der Kuppel wird eine Dichte von 1000 Linien/mm aufweisen, was zu einem Auflösungsvermögen kleiner als 1 nm führen soll. Um dieses Vorhaben zu realisieren, werden wellenoptische Simulationen durchgeführt. Basierend auf durchgeführten Simulationen werden mit Hilfe von Hochpräzisionszerspannung Demonstratoren hergestellt. Diese Demonstratoren werden dann im Labor auf ihre optischen Eigenschaften untersucht und charakterisiert. In dieser Veröffentlichung sollen erste Grundformen des Spektrometers und die dazu benötigten Simulationen gezeigt werden.

## 1. Einleitung

Durch die Analyse des optischen Spektrums von Materie können Rückschlüsse auf dessen chemische und molekulare Zusammensetzung gezogen werden. Miniaturisierte Spektrometer können hier z.B. in der Untersuchung von Medikamenten, Blut oder Lebensmitteln eine schnelle, mobile und kostengünstige Alternative zu klassischen stationären Spektrometern in Laboren darstellen.

An der Jade Hochschule Wilhelmshaven wird im Rahmen des Projektes „MiniSpectral“ ein solches miniaturisiertes Spektrometer entwickelt. Ziel ist es, durch die Verwendung von modernster Spritzgusstechnik und der hierfür entwickelten, innovativen Werkzeuge die Herstellung einer polymerbasierten Optik in nur einem Herstellungsschritt zu realisieren. Diese Arbeit soll in den folgenden Kapiteln die grundlegende Funktion und den aktuellen Stand der Entwicklung des Spektrometers erläutern.

## 2. Funktionsweise

Das Spektrometer basiert auf der grundlegenden Idee eines sogenannten Rowlandkreises [Row83]. Eine Besonderheit ist hierbei die dreidimensionale Kuppelform der Optik. Diese ermöglicht es, das gesamte Licht zu führen und so ein wesentlich besseres Signal-Rausch-Verhältnis (S/N) zu erzielen [Höll 2013]. Mithilfe der Kuppel sowie eines konkaven Beugungsgitters auf der gegenüberliegenden Seite der Kuppel werden sämtliche

Funktionen eines Spektrometers erfüllt. Bisher notwendige Einzelkomponenten, wie Linsensysteme, entfallen komplett.

Abbildung 1 zeigt ein zweidimensionales Bild der Funktionsweise. Licht wird durch eine Eingangsfaser in die aus Polymer bestehende Kuppel mit dem Radius  $r$  eingeführt. Am Ende der Kuppel ist ein verspiegeltes Dispersionsgitter mit einem Radius von  $2r$  aufgebracht. Aluminium zeigt sich hier als vielversprechendes Material für die Verspiegelung des Gitters, da es die Reflektivität im sichtbaren Spektralbereich erhöht [HW61]. Am Gitter wird das Licht in seine einzelnen Wellenlängen zerlegt und in die Polymerkuppel zurückreflektiert. Durch das Radienverhältnis von Gitter zu Kuppel von zwei zu eins fokussieren sich die in einzelne Wellenlängen zerlegten Strahlen auf der Oberfläche der Kuppel. An der Oberfläche der Kuppel ist eine Detektorzeile angebracht, mit der das in Wellenlängen zerlegte Licht am Ende detektiert und anschließend weiter analysiert werden kann.

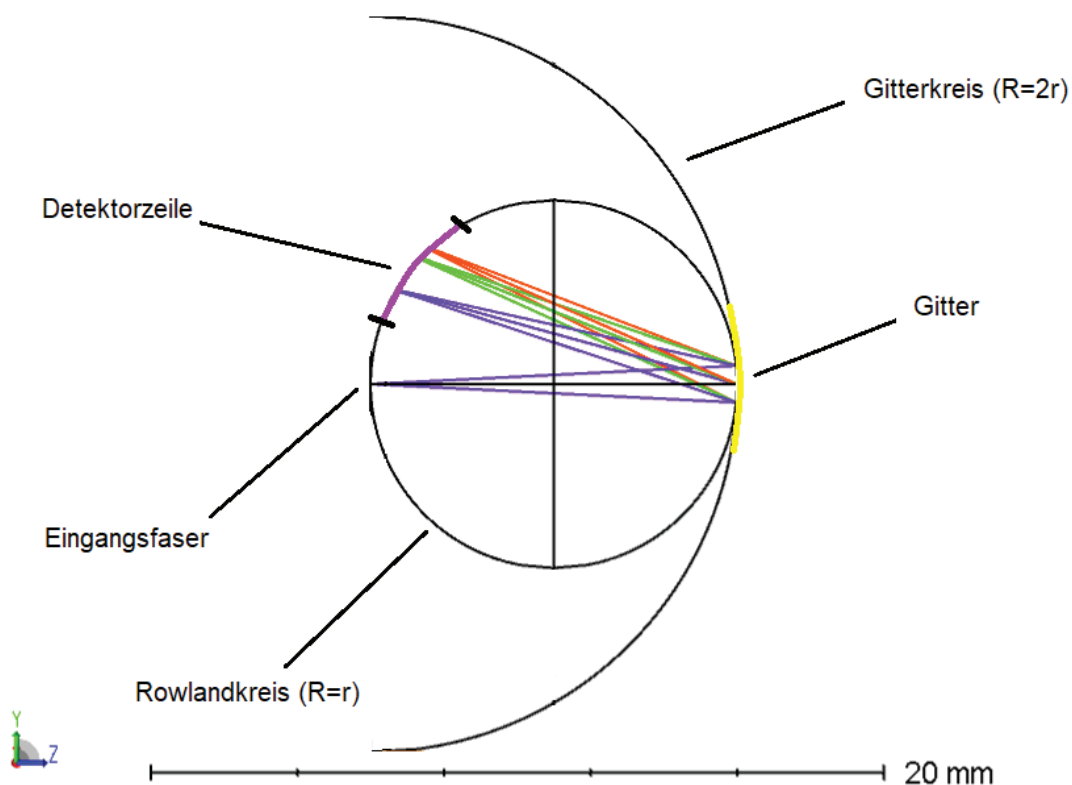


Abbildung 1: Konzept des Spektrometers. Die polymerbasierte Kuppel wird den Radius eines Rowlandkreises  $r$  haben. Das aufgeprägte und verspiegelte Gitter besitzt einen Krümmungsradius von  $2r$ . Das durch eine Eingangsfaser eingekoppelte Licht trifft auf das Gitter, von dem es in seine einzelnen Wellenlängen zerlegt und reflektiert wird. Aufgrund des Radienverhältnisses der beiden Kreise von zwei zu eins fokussieren sich die nach Wellenlängen getrennten Strahlen auf der Oberfläche der Kuppel und werden dann von einer Detektorzeile detektiert.

### 3. Umsetzung

Der in Abbildung 1 gezeigte Strahlengang wurde mit der Simulationssoftware *Ansys Zemax OpticStudio* für verschiedene Wellenlängen- und Radienkombinationen simuliert. Exemplarisch sind in Abbildung 1 drei Wellenlängen (400 nm, 550 nm, 600 nm) sowie ein Rowlandkreisradius von 10 mm dargestellt. Das Gitter hat eine Liniendichte von 1000 Linien/mm. Die Eintrittsöffnung in das Spektrometer hat in diesem Fall den Durchmesser von 1 mm, was dem Durchmesser einer Standard-SI-Polymerfaser (POF) entspricht. Abbildung 2 zeigt mit einem Rasterkraftmikroskop (AFM) aufgenommene und visualisierte Daten eines ebenfalls gekrümmten, in Polymer (PMMA) geschliffenen Gitters eines Vorgängerprojektes [HOPE14]. Hier ist eine Gitterkonstante von 2,5  $\mu\text{m}$  abzulesen. Die Gitter der herzustellenden Demonstratoren werden von der Firma Innolite<sup>1</sup> hergestellt, die in Vortests in der Lage war Gitterstrukturen mit einer Dichte von 1600 Linien/mm zu erzeugen. Die von uns angestrebten 1000 Linien/mm stellen also ein realistisches Ziel dar.

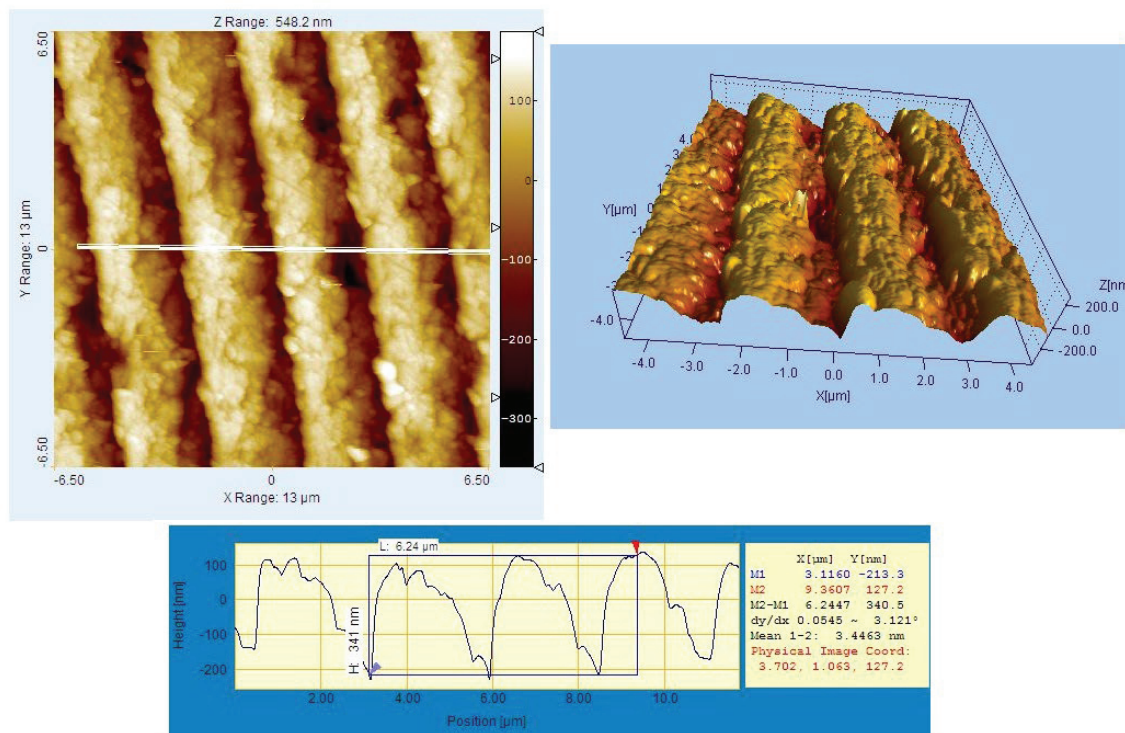


Abbildung 2: Mit einem Rasterkraftmikroskop (AFM) aufgenommene Daten eines, gekrümmten, in PMMA geschliffenen Gitters eines Vorgänger Projektes. Eine Gitterkonstante von ca. 2,5  $\mu\text{m}$ , eine Gittertiefe von ca. 341 nm sowie ein Blazewinkel des Gitters von ca. 12° konnten bestimmt werden.

Das spektrale Auflösungsvermögen des Spektrometers hängt hauptsächlich von der Liniendichte des Gitters ab. Es kann mit Hilfe des Rayleigh-Kriteriums

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = nN$$

bestimmt werden [Zinth 2011]. Mit  $\lambda$  der Wellenlänge,  $n$  der Beugungsordnung,  $N$  der Anzahl der beleuchteten Linien und  $\Delta\lambda$  der Spektralauflösung.

<sup>1</sup> Innolite Aachen, Liebigstraße 20, 52070 Aachen; <https://innolite.de/>

Bei einer Wellenlänge von 550 nm, erster Beugungsordnung ( $n = 1$ ) und 1000 bestrahlten Linien würde das zu einem Auflösungsvermögen von 0,55 nm führen. Sollte es technisch möglich sein die Liniendichte sogar auf 1600 Linien/mm zu erhöhen, könnte dies sogar zu einem Auflösungsvermögen von 0,34 nm führen. Das angestrebte Ziel, ein Auflösungsvermögen von unter 1 nm zu erreichen kann also als realistisch angesehen werden.

Neben der Simulationsarbeit werden außerdem Materialtests wie z.B. Absorptions- und Transmissionsmessungen sowie Temperaturtests durchgeführt, um zu evaluieren, welcher Kunststoff sich am besten für die Herstellung der Kuppel und des Gitters des Spektrometers eignet.

#### **4. Ausblick**

Nach Abschluss der vielversprechenden Simulationen und Laborvortests wird ein erster Demonstrator hergestellt. Die Kuppel soll mithilfe modernster Spritzgusstechnik in einem Arbeitsschritt hergestellt werden. Eine detaillierte Beschreibung der Herstellung des Gitters wird in einer folgenden Veröffentlichung dargelegt. An den ersten Demonstratoren werden weitere Laboruntersuchungen durchgeführt und deren Ergebnisse mit den Simulationen verglichen. Diese Erkenntnisse werden helfen, die Parameter und Produktionsabläufe zu optimieren, um die folgenden Generationen von Spektrometern zu verbessern. Somit sollte es in Kürze möglich sein, ein erstes voll funktionsfähiges, polymerbasiertes, miniaturisiertes Spektrometer herzustellen.

#### **Quellen**

[HOPE14] U. H. P. Fischer-Hirchert, M. Haupt, M. Jončić, S. Höll, and A. Zufelde, final report of a BMBF project VIP HOPE - Research and Development of Key Components for High-Speed Communication via Polymer Optical Fibers (Forschung und Entwicklung von Schlüsselkomponenten für Hochgeschwindigkeits-Netze über optische Polymerfasern), 2014.

[HW61] G. Hass and J. E. Waylonis. Optical constants and reflectance and transmittance of evaporated Aluminium in the Visible and Ultraviolet. *Journal of the Optical Society of America*, 51(7):719, 1961.

[Row83] Henry a. Rowland. XXIX. „On concave gratings for optical purposes“. *Philosophical Magazine Series 5*, 16(99):197\_210, sep 1883.

[Zinth 2011] Zinth, Wolfgang and Zinth, Ursula. "4.5 Anwendungen von Beugung und Interferenz". *Optik: Lichtstrahlen - Wellen - Photonen*, München: Oldenbourg Wissenschaftsverlag, 2011, pp. 197-223. <https://doi.org/10.1524/9783486705737.197>

[Höll 2013] 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) <https://opg.optica.org/ao/abstract.cfm?URI=ao-52-18-4103>