

Univerzita Palackého v Olomouci
Přírodovědecká fakulta

Optická spektroskopie

Antonín Černoš, Radek Machulka, Jan Soubusta

Olomouc 2012

Oponenti: Mgr. Karel Lemr, Ph.D.
RNDr. Dagmar Chvostová

Publikace byla připravena v rámci projektu Investice do rozvoje vzdělávání

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem
a státním rozpočtem České republiky

1. vydání

© Antonín Černoš, Radek Machulka, Jan Soubusta, 2012

© Univerzita Palackého v Olomouci, 2012

Neoprávněné užití tohoto díla je porušením autorských práv a může zakládat
občanskoprávní, správněprávní, popř. trestněprávní odpovědnost.

ISBN 978-80-244-3114-7

NEPRODEJNÉ

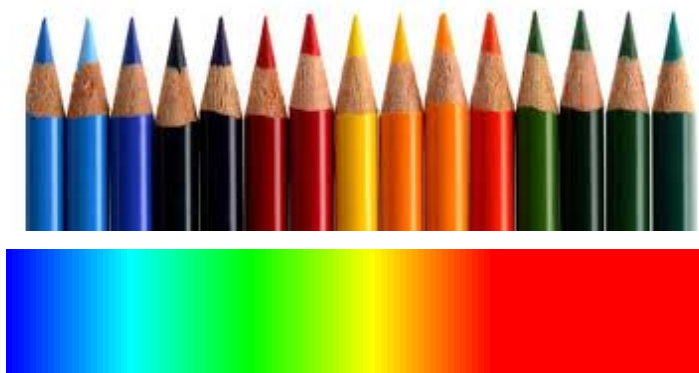
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

**Vzdělávání výzkumných pracovníků v Regionálním centru pokročilých
technologií a materiálů. CZ.1.07/2.3.00/09.0042¹**

Optická spektroskopie

Antonín Černocho, Radek Machulka, Jan Soubusta

Abstrakt. Od malička se děti učí třídít jednotlivé objekty kolem sebe podle barvy (obr. 1). Ve škole se pak žáci dozví, že barvy světla jsou ve fyzice označovány jako spektrum. Měření spektra je tedy v optice zcela fundamentální měření. Tento studijní text se věnuje výkladu konstrukce a základních parametrů obvykle používaných spektrálních přístrojů.



Obr. 1: Barvy pastelek jak se je učí děti (nahore) a spektrum viditelného světla (dole).

¹Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem ČR.

Obsah

1 Úvod	5
1.1 Spektrální oblasti	5
1.2 Informační okna	7
1.3 Rozdělení spektrálních přístrojů	8
2 Zobrazovací spektrometry	8
2.1 Disperzní hranol	8
2.2 Difrakční mřížka	10
3 Monochromátory	13
3.1 Fabryův-Perotův planární rezonátor	13
4 Fourierovská spektroskopie	16
5 Závěrečné porovnání	18
Literatura	20

1 Úvod

Spektroskopie označuje metody určení frekvence ν , resp. vlnové délky $\lambda = c/\nu$ elektromagnetického záření [1]. V nejjednodušším případě představuje takové měření rozklad zkoumaného světla podle vlnových délek do různých směrů a provedení rozboru získaného obrazce na stínítku. Zařízení, kterými je možné řešit tuto úlohu, označujeme jako spektrální přístroje.

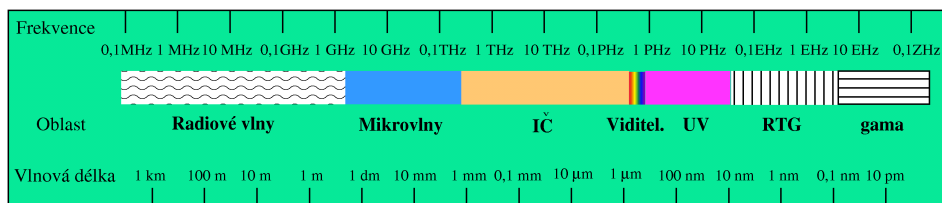
1.1 Spektrální oblasti

Zkoumání spektra ve viditelné oblasti se postupně rozšířilo na mnohem širší oblast. Celé elektromagnetické spektrum lze rozdělit do podoblastí (viz obr. 2):

Radiová oblast – vlnové délky od kilometrů po 0.1 m, záření se generuje a detekuje pomocí antén, které mají rezonanční délku ($\lambda/2$). Používá se pro komunikaci (TV, rádio, mobilní telefony), informace je zakódována do modulace amplitudy, frekvence nebo fáze.

Mikrovlnná oblast – vlnové délky od 100 mm po 1 mm, generuje se magnetronem nebo diodami, je absorbována molekulami s dipólovým momentem. Používá se k ohřívání (mikrovlnná trouba) nebo k přenosu informace (Wi-fi) a jako radar.

Infračervená oblast (IČ) – dělí se na vzdálenou (1000 až 10 μm), střední (10 až 2.5 μm) a blízkou (2.5 až 0.75 μm) IČ. Vzdálená IČ je absorbována rotačními módy molekul a fonony a je silně absorbována atmosférou. Střední IČ je vyzařována předměty kolem



Obr. 2: Elektromagnetické spektrum.

nás ve formě tepelného záření. Blízká IČ má podobné vlastnosti jako viditelné světlo.

Viditelné světlo (VIS) – vlnová délka od 760 po 380 nm, v této oblasti vyzařují maximum energie hvězdy. Energie fotonů odpovídá vzdálenosti energetických hladin chemických prvků, absorpce fotonu způsobuje přeskok elektronu na vyšší hladiny. Proto může být viditelné světlo generované přeskokem elektronu na nižší hladiny.

Ultrafialová oblast (UV) – vlnová délka od 400 po 10 nm, je vyzařována Sluncem. Jde o ionizující záření, které je ale naštěstí z velké části absorbováno ozonovou vrstvou zemské atmosféry. Tato oblast záření se používá ke sterilizaci, usmrcení bakterií.

Rentgenová oblast (RTG nebo X) – vlnové délky od 10 nm po 0.1 nm, zdrojem jsou neutrinové hvězdy a akreční disky černých děr. Toto záření prochází předměty, ionizuje, sterilizuje, používá se v medicíně, např. ke snímkování kostí v těle.

Gama oblast (γ) – vlnová délka kratší než 0.1 nm, prochází předměty, sterilizuje.

Hranice mezi rentgenovým zářením a γ zářením není ostrá. Obecně se jako rentgenové záření označuje uměle připravované záření generované např. dopadem elektronového svazku na wolframový terčík. Jako γ záření se označuje světlo generované radioaktivním rozpadem. Rozdíl mezi RTG a γ je možné popsat také tak, že RTG vzniká interakcí elektronu v elektronovém obalu, zatímco γ záření vzniká v jádře atomu.

Spektra různých objektů dále dělíme na **emisní spektra**, tj. daný objekt vyzařuje elektromagnetickou energii na nějakých typických vlnových délkách, a na **absorpční spektra**, kdy těleso některé vlnové délky částečně nebo úplně pohltí a jiné vlnové délky projdou beze změny. Spektrum můžeme označovat jako **spojité**, **čárové** nebo **pásové** podle průběhu funkce popisující spektrální emisi, popř. absorpci. Typickým příkladem čárového spektra jsou absorpce a emise plynů, typickým spojitým spektrem je zase záření černého tělesa.

Spektroskopie je jednou z bezkontaktních metod, která umožňuje určit chemické složení a další vlastnosti zkoumané látky, která buď

sama vyzařuje, nebo jí světlo prochází. Informace o spektru je důležitá také při přenosu informace pomocí světla.

1.2 Informační okna

Informační okna značí spektrální oblasti, které lze použít pro přenos informace pomocí elektromagnetického záření. Moderní zdroje i detektory jsou optimalizovány tak, aby v těchto oblastech měli co nejlepší vlastnosti. Optická komunikace může probíhat volným prostorem nebo se svazek vede optickým vláknem. Oproti elektrickým signálům má optika výhodu maximální rychlosti šíření. Další výhodou je možnost multiplexace, tj. více barevných složek (kanálů) lze přenášet pomocí jedné komunikační linky současně, aniž by se tyto složky vzájemně nějak ovlivňovaly.

V historii se používala hlavně dlouhovlnná rádiová oblast elektromagnetického spektra, která se odráží od atmosféry, a lze ji tedy zachytit i v oblasti geometrického stínu anebo za horizontem. Nicméně tato oblast spektra je výrazně rušena atmosférickými jevy, jako jsou bouřky. V případě satelitní komunikace nebo při volném šíření mezi vzdálenými místy na povrchu Země je nutné brát v úvahu spektrální propustnost atmosféry. Viditelné světlo lze použít jen omezeně, jelikož je absorbováno oblačností. Zbývají tedy jen určité úzké oblasti infračervené části spektra.

Optická vlákna mohou přenášet signál na velké vzdálenosti bez značných ztrát, protože pracují na principu totálního odrazu. Momentálně nejrozšířenější křemíková vlákna lze použít ve třech oblastech blízké IČ - okolo 830 nm, 1.30 μm a 1.55 μm . Novější vlákna (fluoridová a chalkogenní skla) jsou navrhována tak, aby s minimálními ztrátami (0.01 dB/km) mohla vést co nejširší část spektra. Jedním optickým vláknem lze pak přenášet mnoho komunikačních kanálů na vlnových délkách, které jsou od sebe vzdálené pouze 20 nm. Tato masivní multiplexace výrazně zvyšuje přenosovou kapacitu optického vlákna, nicméně také klade značně vysoké nároky na generaci a zpracování těchto signálů. Zdroje záření musí být stabilní natolik, aby se centrální vlnová délka jednotlivých kanálů neposunula o více než 0.4 nm. Pro testování kvality musíme mít tedy možnost měřit spektrum co nejpřesněji.

1.3 Rozdělení spektrálních přístrojů

Spektrální přístroje můžeme rozdělit podle funkčních prvků a konstrukce na několik kategorií:

Zobrazovací spektrometry – provádí rozmítnutí spektra do různých prostorových módů. Funkčním prvkem je obvykle disperzní hranol nebo difrakční mřížka.

Monochromátory – slouží k prostorovému oddělení a posléze odfiltrování nechtěných složek z rozmítnutého spektra (např. clonou). Mohou fungovat také absorpčně nebo interferenčně.

Nepřímé metody – využívá se měření jiných vlastností se spektrem svázaných, např. Fourierovská spektroskopie používá vzájemnou korelaci světla.

2 Zobrazovací spektrometry

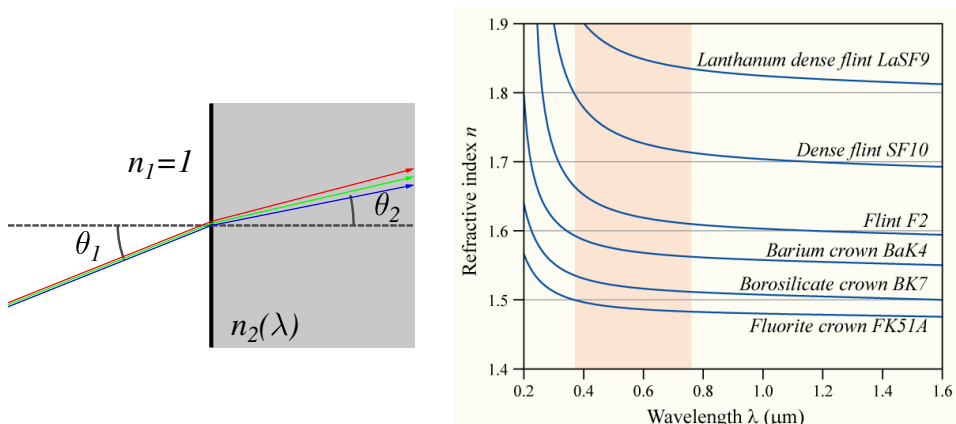
Zobrazovací spektrometry odklání vstupní měřený signál pod různými úhly, přičemž každému úhlu přísluší určitá vlnová délka. Nejrozšířenější jsou dvě metody, které využívají disperze a spektrálně závislé difrakce.

2.1 Disperzní hranol

V disperzním hranolu dochází k lomu světla na rozhraní prostředí s indexy lomu n_1 a n_2 podle Snellova zákona (viz obr. 3 vlevo)

$$n_1(\lambda) \sin \theta_1 = n_2(\lambda) \sin \theta_2, \quad (1)$$

kde θ_1 a θ_2 jsou úhly dopadu a odrazu. Vzhledem k tomu, že index lomu jakéhokoliv prostředí (mimo vakua) je závislý na vlnové délce λ , budou se různé složky spektra podle tohoto zákona lámat pod jiným úhlem. Nejznámějším příkladem směrového rozložení světla do spektrálních složek je duha, kdy se světlo ze slunce láme na kapkách vody. Pro dosažení co největšího úhlového rozlišení je potřeba vybrat materiál s co největší chromatickou disperzí. To jsou materiály, u nichž se index



Obr. 3: Vlevo: lom světla z prostředí opticky řidšího do prostředí opticky hustšího. Vpravo: disperzní závislost indexu lomu různých materiálů (převzato z http://en.wikipedia.org/wiki/Refractive_index).

lomu rychle mění s vlnovou délkou. Disperzní závislost indexu lomu několika často používaných materiálů je zakreslena v grafu na obr. 3 vpravo.

Snaha popsat chromatickou disperzi jedním číslem vedla k zavedení tzv. **Abbeho čísla**

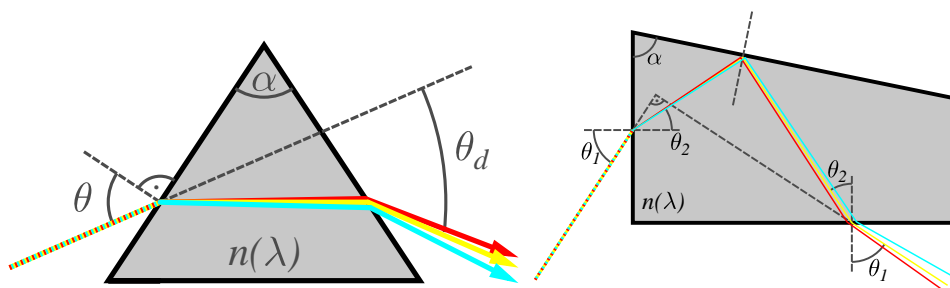
$$\nu_a = \frac{1}{\delta_r} = \frac{n_D - 1}{n_F - n_C}, \quad (2)$$

kde indexy lomu n_F , n_D a n_C přísluší Fraunhoferovým čarám s vlnovými délkami 486.1 nm, 589.2 nm a 656.3 nm. Parametr δ_r značí relativní disperzi jako alternativní popis disperze materiálu. Optická disperzní skla dělíme podle hodnoty Abbeho čísla na flintová skla ($\nu_a < 50$, velká disperze) a na korunová skla ($\nu_a > 55$, malá disperze).

Jako funkční prvek spektrometru může tedy sloužit materiál s velkou disperzí ve formě hranolu. Klasický trojboký hranol s vrcholovým úhlem α funguje nejlépe, pokud se v něm šíří svazek rovnoběžně se základnou (obr. 4 vlevo). Úhel odklonu různých barevných složek se podle indexů lomu jim příslušejících dá spočítat podle vztahu

$$\theta_d = \theta - \alpha + \arcsin \left[\sin \alpha \sqrt{n(\lambda)^2 - \sin^2 \theta} - \sin \theta \cos \alpha \right]. \quad (3)$$

Termínem **úhlová disperze** se označuje derivace výstupního úhlu



Obr. 4: Rozklad světla pomocí klasického trojbokého hranolu (vlevo) a pomocí Pellinova-Brocova hranolu (vpravo).

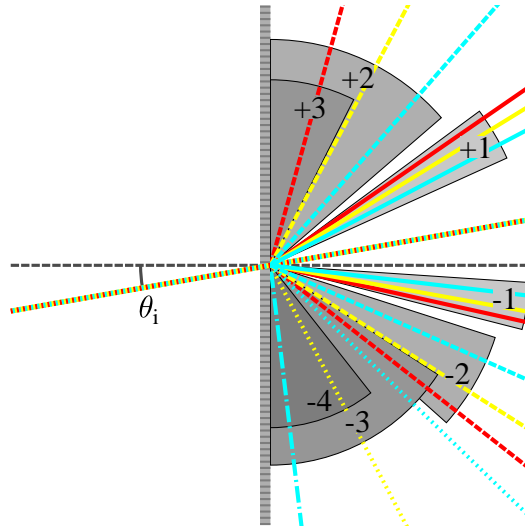
podle vlnové délky.

Další používaný disperzní prvek je Pellinův-Brocův hranol. Ten má tu výhodu, že zvolená spektrální složka vychází z hranolu kolmo vzhledem ke směru dopadajícího svazku. Výběr určité vlnové délky je dán úhlem α (na obr. 4 vpravo), nebo se dá zajistit malou rotací hranolu, která, pokud se provádí správně, neposouvá polohu výstupního svazku.

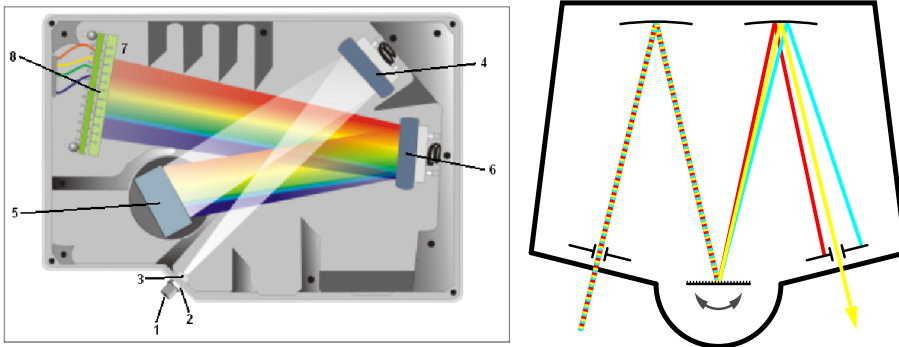
V současných komerčních měřicích přístrojích se hranoly pro měření spektra prakticky již nepoužívají. Disperzní hranoly se ale stále využívají pro selekci zvolené vlnové délky např. v rezonátoru Kryptonového laseru nebo k oddělení základní frekvence po generaci druhé harmonické. Využívá se toho, že úhlové rozložení spektrálních složek je u hranolu jednoznačné. Dvojice disperzních hranolů se používá i u femtosekundových laserových systémů ke kompenzaci časové disperze těchto krátkých pulzů (jednotlivé barevné složky optického pulzu se šíří materiálem různou rychlostí).

2.2 Difrakční mřížka

Difrakční mřížkou rozumíme optický prvek, u kterého se periodicky mění buď index lomu, nebo jeho tloušťka. Může fungovat na průchod nebo na odraz. Na difrakčních mřížkách dochází k ohybu světla pod různými úhly pro různé vlnové délky dopadajícího záření λ . Tato úhlová závislost je daná geometrií uspořádání a periodou použité mřížky Λ (obr. 5). V daném směru pozorujeme difrakční maximum, pokud do-



Obr. 5: Rozklad světla na difrakční mřížce s 600 vrypy na 1 mm ($\Lambda = 1.667 \mu\text{m}$).



Obr. 6: Schéma spektrometrů v konfiguraci monochromátorů: vlevo – Ocean Optics HR4000CG-UV-NIR (300 čar/mm, rozsah 200 - 1100 nm, štěrba 5 μm , rozlišení 0.025 nm); vpravo – Jobin Yvon Triax 320 (1200 čar/mm, rozsah 400 - 1500 nm, rozlišení 0.06 nm).

padající světlo splňuje difrakční podmínku

$$\sin \theta_q = \sin \theta_i + q \frac{\lambda}{\Lambda}, \quad q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4)$$

Světlo odražené od jednotlivých vrypů mřížky se musí sejít ve fázi posunuté o celočíselný násobek vlnové délky. Potom se příspěvky od jednotlivých vrypů sčítají. V paraxiálním přiblížení (v přiblížení rovinné vlny) a pro periodu mřížky mnohem větší, než je vlnová délka měřeného záření, platí zjednodušený vztah

$$\theta_q = \theta_i + q\lambda/\Lambda.$$

Hlavní výhoda difrakční mřížky oproti disperznímu hranolu je ta, že úhel odklonu je lineárně závislý na vlnové délce oproti nelineární závislosti indexu lomu. Nevýhodou je potom více difrakčních řádů (parametr q), které se mohou v některých směrech překrývat. Výstupní směr tedy není jednoznačně svázán s konkrétní vlnovou délkou. K měření spektra s mřížkou se proto používá jen jeden konkrétní, obvykle 1., popř. -1. difrakční řád. Měřený rozsah je omezený hodnotami, kdy se začínají rozmítnutá spektra různých řádů překrývat. Světelná energie, která se odráží do jiných difrakčních řádů není využitelná. Navíc může působit i nežádoucí šum při rozptylu ve spektrometru. Vyšší řády je tedy třeba geometricky odclonit.

Difrakční mřížka může fungovat buď na průchod (obr. 5), nebo na odraz. Konstrukce spektrometru s odraznou difrakční mřížkou může být různá, stavební prvky jsou však vždy víceméně stejné. Uspořádání Czerny-Turner (obr. 6) používá dvě parabolická zrcadla pro transformaci svazku. Vstupní světelný signál prochází štěrbinou, která je v ohnisku kolimačního zrcadla. Toto zrcadlo vytváří rovnoběžný svazek, který dopadá na mřížku. Rozmítnuté spektrum za mřížkou je potom fokusačním zrcadlem zobrazeno na stínítko nebo na lineární CCD čip. O rozsahu a rozlišení spektrometru rozhoduje geometrie uspořádání, perioda mřížky (čím menší Λ , tím větší úhlová disperze) a šířka vstupní štěrbin. Čím užší je vstupní štěrbin, tím větší je rozlišení, ale tím nižší je signál.

3 Monochromátory

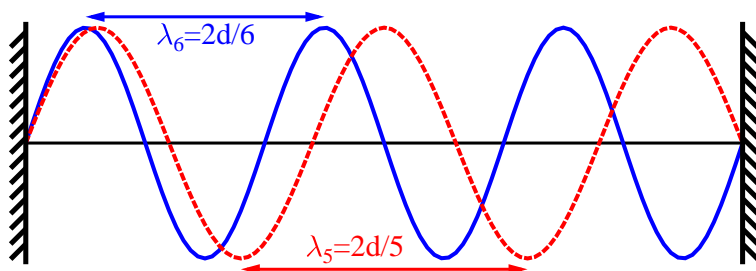
Monochromátory jsou přístroje, které vybírají ze vstupního signálního svazku jen určitou složku spektra. Pracují tedy jako spektrální filtry, přičemž můžeme měnit zvolenou vlnovou délku procházejícího záření i šířku spektrální čáry. Monochromátorem může být i upravený zobrazovací spektrometr, u něhož výstupní clonou projde jen požadovaná vlnová délka. Například jako monochromátor může pracovat spektrometr Jobin Yvon s výstupní clonou na obr. 6 vpravo. Výběr výstupní vlnové délky se provádí natačením difrakční mřížky.

Pokud není potřeba měnit zvolenou vlnovou délku, potom můžeme použít „pevný“ spektrální filtr. Takovým filtrem může být barevné sklo, které absorbuje nežádoucí složky spektra, nebo soustava tenkých vrstev zvolená tak, aby se nežádoucí vlnové délky díky interferenci odrazily a prošla jen požadovaná část spektra. I u těchto nominálně fixních filtrů je možnost v malém rozsahu spektrum propustné oblasti posouvat. Dá se toho docílit přiměřeným náklonem interferenčního filtru tak, aby filtrovaný svazek nedopadal na filtr kolmo. U standardních interferenčních filtrů tímto způsobem obvykle posuneme oblast propustnosti pouze o jednotky až desítky nanometrů.

Interference však můžeme využít i v případě, kdy chceme dosáhnout větší variability ve volbě vlnové délky. Příkladem takového interferometrického spektrálního filtru je Fabryův-Perotův rezonátor (etalon).

3.1 Fabryův-Perotův planární rezonátor

Fabryův-Perotův rezonátor (FP) je rezonátor se dvěma rovinnými zrcadly s vysokou odrazivostí. Díky vysoké odrazivosti se světlo z rezonátoru dostává ven postupně, počet odrazů uvnitř rezonátoru bývá řádově kolem sta. FP rezonátor je propustný pouze pro takové záření, pro které bude světlo prošlé na první průchod a světlo zpožděné desítkami odrazů uvnitř rezonátoru spolu ve fázi a bude se interferenčně sčítat. To nastane tehdy, pokud je délka rezonátoru d rovna celočíselnému násobku půlvlny. To je ekvivalentní tomu, že elektromagnetická vlna je v rezonátoru rozložena tak, aby na zrcadlech byly uzly stojaté vlny. Rezonátorem se vzdáleností zrcadel d tedy projde záření splňující podmí-



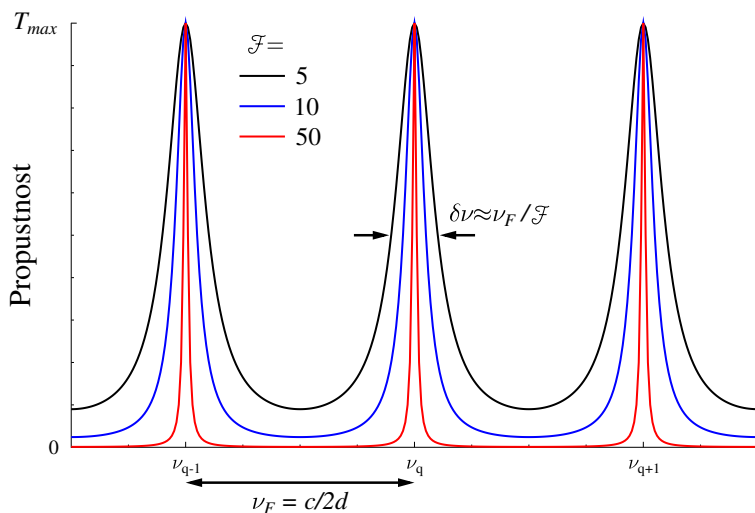
Obr. 7: Rezonanční podmínka pro vlnové délky v rezonátoru délky d .

nku $d = q\lambda/2 = qc/2\nu$, kde $q = 1, 2, 3 \dots$ (viz obr. 7). Vzhledem k tomu, že tato podmínka je splněna pro různé vlnové délky, zavádí se pro FP rezonátor pojem volný frekvenční interval ν_F , tedy frekvenční vzdálenost dvou vedlejších vlnových délek splňující rezonanční podmínku,

$$\lambda_q = \frac{2d}{q}, \quad \nu_F = \frac{c}{2d}. \quad (5)$$

Ideální FP rezonátor je jako spektrální filtr bezztrátový, tedy spektrum, které neprojde, je odraženo zpět. Spektrální propustnost FP interferometru je periodickou funkcí s délkou periody rovnou volnému spektrálnímu intervalu. Frekvence splňující podmínku pro udržení v rezonátoru – podélné módy – mají ztráty minimální. Velkou propustnost mají ale i frekvence v těsné blízkosti podélných módů. To, jak široké spektrum je FP rezonátorem propuštěno bez výraznějších ztrát, závisí na vlastnostech rezonátoru.

Ztráty mohou u tohoto zařízení nastat buď v prostředí, které je mezi zrcadly rezonátoru, nebo mohou vznikat přímo na zrcadlech. Tato zrcadla bývají částečně propustná, aby se optické pole mohlo dostat do rezonátoru a zase ven. Pokud je optické pole příliš prostorově široké, vznikají ztráty také tím, že energie uniká na stranu v důsledku konečných rozměrů nebo nedokonalé rovnoběžnosti zrcadel. Pro poměření ztrát FP rezonátoru (předpokládejme ztráty pouze na zrcadlech) definujeme **maximální propustnost** $T_{\max} = t^2/(1-r)^2$, kde t a r jsou součiny amplitudových propustností, resp. odrazivostí obou zrcadel. Dalším parametrem je **jemnost** \mathcal{F} (*Finesse*), která se vypočítá podle vztahu



Obr. 8: Spektrální propustnost FP rezonátoru pro tři hodnoty jemnosti \mathcal{F} .

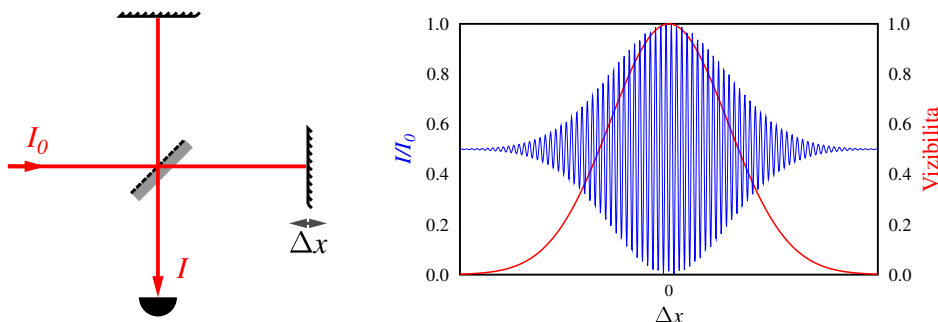
$\mathcal{F} = \pi \sqrt{r/1-r}$ a představuje typický počet interferujících svazků na výstupu z rezonátoru. Parametr jemnost lze chápat také jako počet odrazů uvnitř rezonátoru. Spektrální průběh propustnosti má potom tvar zakreslený na obr. 8,

$$T(\nu) = \frac{T_{max}}{1 + \left(\frac{2\mathcal{F}}{\pi}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\pi\nu}{\nu_F}\right)}. \quad (6)$$

Poměr šířky čáry propustnosti a volného spektrálního intervalu ve frekvencích je roven právě jemnosti rezonátoru.

Centrální vlnovou délku propustnosti FP rezonátoru můžeme ladit změnou délky rezonátoru. To se obvykle provádí jemným piezoposuvem jednoho ze zrcadel. Nevýhodou tohoto spektrálního filtru je ale nejednoznačnost. Propustnost je periodická. Proto je pro vstupní záření s šířkou spektra větší, než je volný spektrální interval, potřeba použít ještě jiný dodatečný spektrální filtr. FP rezonátor se tak dá použít např. pro zvýšení spektrálního rozlišení. V tab. 1 je několik hodnot volného spektrálního intervalu pro různé šířky FP etalonu SA-800-NIR+ (Burleigh).

4 Fourierovská spektroskopie



Obr. 9: Schéma Michelsonova interferometru (vlevo), průběh intenzity (modře) a vizibility (červeně) v závislosti na dráhovém rozposunutí ramen interferometru (vpravo).

Fourierovská spektroskopie je příkladem nepřímé metody určení spektra záření [2]. Teoretickou podstatou metody je **Wienerův-Chinčinův** teorém, který říká, že spektrum záření je svázáno Fourierovou transformací s autokorelační funkcí. Autokorelační funkce poměřuje schopnost interference různě zpožděných složek zkoumaného záření. Tato schopnost interference pro dráhové zpoždění složek Δx v interferometru se určuje hodnotou vizibility (kontrastu) interferenčních proužků,

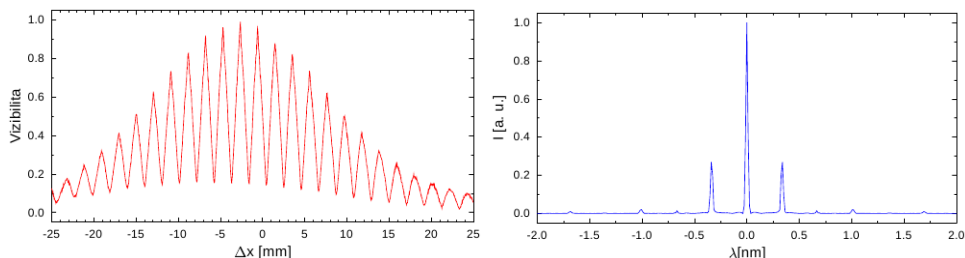
Tab. 1: Parametry FP etalonu pro $\mathcal{F} = 150$ a $\lambda = 830$ nm.

d	ν_F	λ_F	1 nm/ ν_F	$\delta\nu$	$\delta\lambda$
mm	GHz	nm		GHz	nm
10	15	0.035	29	0.1	0.00023
5	30	0.069	14.5	0.2	0.00046
2	75	0.173	5.8	0.5	0.00125
1	150	0.35	2.9	1	0.0023
0.5	300	0.69	1.45	2	0.0046
0.2	750	1.73	0.58	5	0.0115
0.1	1500	3.5	0.29	10	0.023

$$V(\Delta x) = \frac{I_{max} - I_{min}}{I_{max} + I_{min}}, \quad V \in [0, 1], \quad (7)$$

kde I_{max} značí maximální a I_{min} minimální hodnotu intenzity interferenčního proužku při změně dráhového rozdílu o jednu vlnovou délku (viz obr. 9).

Měření autokorelační funkce pro dostatečný rozsah dráhových rozdílů a samotný výpočet Fourierovy transformace jsou zdlouhavé procedury. Během tohoto měření se může spektrum zdroje změnit. Proto se provádí určitá zjednodušení, která mohou měření urychlit. Měření vizibility se provádí jen po určitých krocích a počítá se tak diskrétní rychlá Fourierova transformace (FFT). Za předpokladu symetrického spektra se provádí pouze cosinová transformace. Příklad autokorelační funkce a z ní spočítaného spektra je na obr. 10.



Obr. 10: Autokorelační funkce laserové diody s centrální vlnovou délkou 816 nm (vlevo), vypočtené spektrum pomocí diskrétní FFT (vpravo).

Stejně jako u dříve zmíněných spektrometrů jsou důležité vlastnosti získaného spektra – rozsah a rozlišení. Rozsah spektra je dán hustotou kroků při měření vizibility. Platí, že čím menší je vzdálenost jednotlivých měření (krok), tím větší rozsah spektra lze změřit. Maximum v rozposunutí ramen interferometru při měření je zase úměrné rozlišení měřeného spektra. Například pro vlnovou délku 800 nm získáme při rozsahu rozposunutí ramen interferometru 25 mm a kroku 1 μm spektrogram široký 172 nm s rozlišením 0.007 nm.

5 Závěrečné porovnání

Pro spektroskopická měření existují celé řady přístrojů lišících se jak přístupem k vlastnímu měření, tak i výslednými parametry. Pro volbu nejvhodnějšího postupu a měřicího zařízení je potřeba nejprve definovat požadavky na výsledný spektrogram, tj. zejména požadovaný interval vlnových délek a jeho rozlišení. Mezi dalšími vlastnostmi, které je potřeba při výběru zohlednit, mohou být intenzita měřeného signálu, popř. požadované časové rozlišení pro měření spekter časově proměnného signálu. Různá experimentální zařízení se kromě fyzikálních parametrů liší i komfortem hardwarové a softwarové obsluhy a také pořizovacími náklady.

V následující části budou zde zmíněná měřicí zařízení porovnána s ohledem na reálné použití v praxi. Je potřeba si ovšem uvědomit, že některé parametry nejsou obecně platné, ale závisí na konkrétní konstrukci jednotlivých přístrojů.

Zobrazovací spektrometry

Jedná se o třídu zařízení, která najde uplatnění zejména v méně náročných aplikacích. Mezi hlavní výhody je možné zařadit zejména kompaktní konstrukce bez pohyblivých dílů, která umožňuje měření i mimo laboratoř. Tato zařízení pracují zpravidla v oblasti viditelného záření s přesahem jak do UV, tak i do blízké IČ, měření pak probíhají v reálném čase a vyžadují dostatečně silný signál. Rozlišení těchto přístrojů je otázkou konstrukce. Závisí zejména na ohniskové vzdálenosti zobrazovacích prvků, rozlišení snímacího elementu (zpravidla lineární CCD čip), šířky vstupní štěrbinou (definuje přístrojovou funkci) a disperzi použitého prvku (vyšší rozlišení současně vede k nižšímu rozsahu). Typické hodnoty se pak pohybují v řádu jednotek nm.

Monochromátory

Přestože existuje celá škála různých monochromátorů, jedná se zpravidla o zařízení určená do laboratoří. V principu existují dvě možné varianty. V prvním případě jsou to monochromátory s výstupní štěrbinou,

kteřé jsou provozovány v režimu spektrálního filtru. Měření vlastního spektra probíhá postupným přeladováním monochromátoru a následně detekci konkrétní spektrální složky intenzitním detektorem umístěným za výstupní štěrbinou. Tento postup ovšem vyžaduje kalibrovanou rotaci difrakčního prvku, což se mimo jiné projevuje na časové konstantě měření. Dále je pak třeba znát spektrální odezvu zvoleného detektoru, jehož vhodnou volbou se však můžeme přizpůsobit konkrétní intenzitní úrovni měřeného signálu.

Ve druhém případě je místo výstupní štěrbinu a detektoru použito pole detektorů (CCD čip). V tomto uspořádání jsou monochromátory prakticky identické se zobrazovacími spektrometry, avšak možnost volby vlastního detektoru dovoluje reflektovat určité specifické potřeby experimentu. Například volbou iCCD² kamery je možné získat časové rozlišení v řádu ns spolu s jednofotonovou citlivostí. Je tedy možné sledovat spektrální charakteristiky extrémně rychlých dějů. Co se týče rozsahu a rozlišení, ty závisí opět na ohniskové délce (kteřá je ovšem oproti předchozím zařazením zpravidla mnohem delší), rozlišení snímacího elementu, popř. motoru rotujícího mřížkou a velikosti vstupní štěrbinu (jejíž šířku je zpravidla možné nastavit).

Některé komfortní mřížkové monochromátory dnes obsahují karusel s více mřížkami lišícími se počtem vrypů, tedy rozlišením a rozsahem. Tyto mřížky je pak možné během měření zaměňovat a měnit tak poměr mezi rozsahem měřených vlnových délek a jejich rozlišením. Typické rozsahy, resp. rozlišení pro průměrný monochromátor se pohybuje řádově okolo 150 – 1500 nm resp. 0.1 až 0.01 nm.

Fabryův-Perotův spektrální analyzátor

Přestože se jedná o vysoce přesné zařazení, ve spektroskopických aplikacích se příliš nepoužívá. Jako hlavní důvody lze jmenovat zejména vysoké pořizovací náklady (jedná se o mechanicky i opticky velmi precizní zařazení). Další nevýhodou je také úzký pracovní rozsah daný malým volným spektrálním intervalem. Přesto však existují obory, kde je tento přístroj vzhledem ke své vysoké rozlišovací schopnosti a odezvě

²Jedná se o speciální typ CCD čipu s předřazeným intenzifikátorem (zesilovačem) obrazu.

v reálném čase neocenitelným pomocníkem. Typickým případem použití je například monitorování módů v rezonátorech laserů, kde se široké spektrální profily nevyskytují. Na závěr podotkněme, že i zde se jedná v principu o laditelný spektrální filtr a pro měření spektra je třeba jej doplnit detektorem, který je vhodný pro měřený výkon záření.

Fourierovský spektrometr

Poslední zde zmíněný spektrální přístroj je možné chápat jako protipól ke kompaktním a snadno použitelným zobrazovacím spektrometrům. Jedná se o velmi sofistikované zařízení určené pro ta nejpřesnější měření. Výhodami oproti předchozím zařízením jsou vysoká rozlišovací schopnost a široký spektrální rozsah měření, který je možné v širokých mezích volit (záleží na konkrétní konstrukci zařízení). K nevýhodám těchto přístrojů se řadí vysoké pořizovací náklady, dlouhá doba měření, kdy je potřeba udržovat měřený spektrální profil dostatečně stabilní (v opačném případě získáme pouze jakousi časovou střední hodnotu) a poměrně vysoké nároky na výpočetní techniku v důsledku použití Fourierovy transformace při zpracování naměřených autokorelačních funkcí.

Literatura

- [1] Jaromír Brož a kolektiv: *Základy fyzikálních měření*, Státní pedagogické nakladatelství, Praha 1983.
- [2] Radek Machulka: *Konstrukce vláknového interferometru s použitím nových moderních komponent*, diplomová práce, PřF UP, Olomouc 2008.

Mgr. Antonín Černoch, Ph.D.
Mgr. Radek Machulka
doc. Mgr. Jan Soubusta, Ph.D.

Optická spektroskopie

Výkonný redaktor: prof. RNDr. Tomáš Opatrný, Dr.
Odpovědná redaktorka: Vendula Drozdová
Návrh a grafické zpracování obálky: Jiří K. Jurečka

Vydala a vytiskla Univerzita Palackého v Olomouci
Křížkovského 8, 771 47 Olomouc
www.upol.cz/vup

Olomouc 2012

1. vydání

ISBN 978-80-244-3114-7

Neprodejné