

### 2.3.2.3 Monochromatoren

In der klassischen optischen Spektrometrie (NIR, VIS, UV) erhält man die Information über die Wellenlänge mit Hilfe der Brechung oder Beugung (**winkeldispersive Spektrometrie**).

- **Brechung** (Wellenlängenabhängigkeit des Brechungswinkels)
- **Beugung** (Wellenlängenabhängigkeit des Beugungswinkels)

#### Prismenmonochromator (Prismenspektrometer)

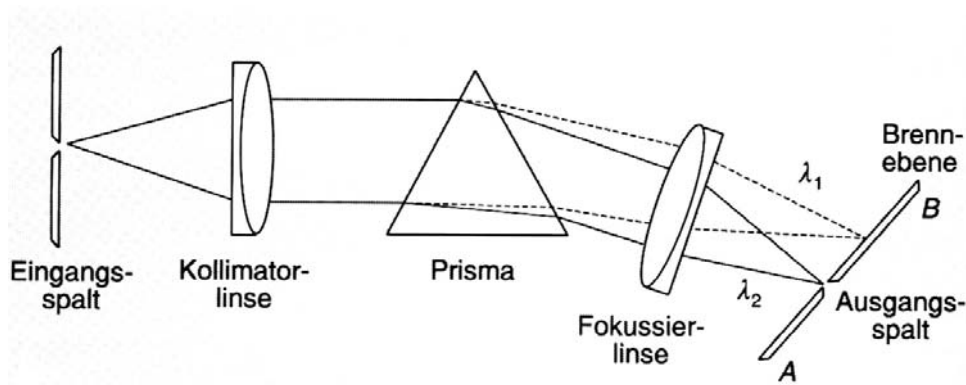


Abb.: Prinzip eines Prismenmonochromators ( $\lambda_1 > \lambda_2$ )

Richtungsabhängige (wellenlängenabhängige) Abbildung eines beleuchtetem Spaltes derart, dass die Richtungen der Spaltbilder wellenlängenabhängig sind.

#### Gittermonochromator (Gitterspektrometer)

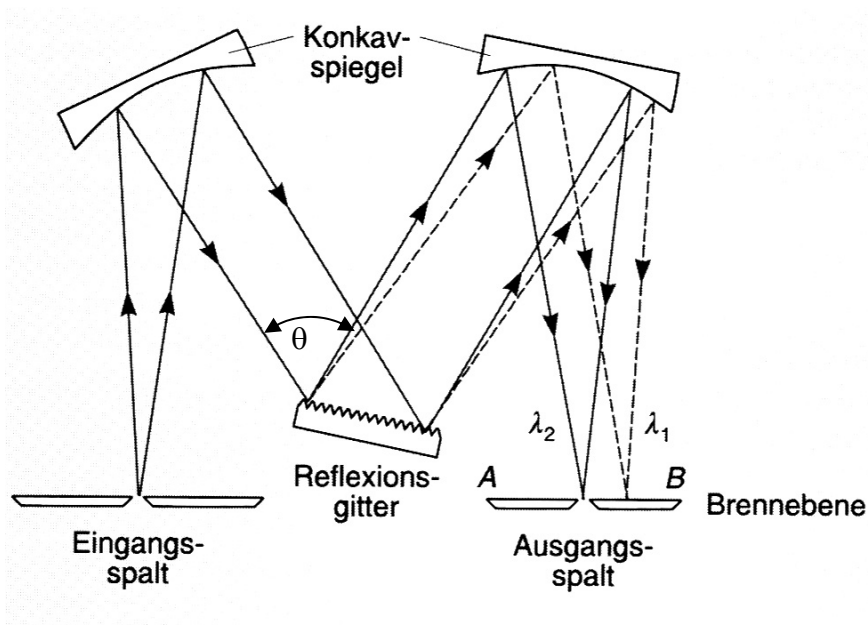


Abb.: Schema eines Czerny-Turner-Gittermonochromators ( $\lambda_1 > \lambda_2$ )

In modernen Monochromatoren (und Spektrometern) werden fast nur noch Reflexionsgitter als dispersive Elemente eingesetzt. Die früher im mittleren IR-Spektralbereich eingesetzten, empfindlichen Salzprismen sind fast vollständig von der **Fourier-Transform-Technologie** verdrängt worden.

**Brechung am Prisma:**

Ein optisches Prisma besteht aus einem durchsichtigen Stoff, der zwei ebene, nicht parallele Grenzflächen besitzt. Ein Lichtstrahl der Wellenlänge  $\lambda$  erfährt beim Durchgang durch ein Prisma eine zweimalige Brechung und wird um den Ablenkwinkel  $\delta$  abgelenkt.

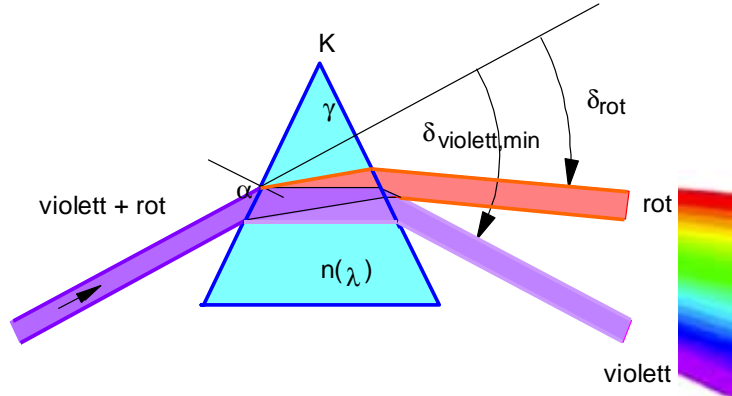
Der Ablenkwinkel  $\delta$  hängt von der Brechzahl  $n(\lambda)$ , vom brechenden Winkel  $\gamma$  und vom Einfallswinkel  $\alpha$  ab. Bei symmetrischem Durchgang wird der Ablenkwinkel minimal.

Mit dem Snelliusschen Brechungsgesetz

$$n_0 \sin \alpha_0 = n_1 \sin \alpha_1$$

ergibt sich für das Prisma:

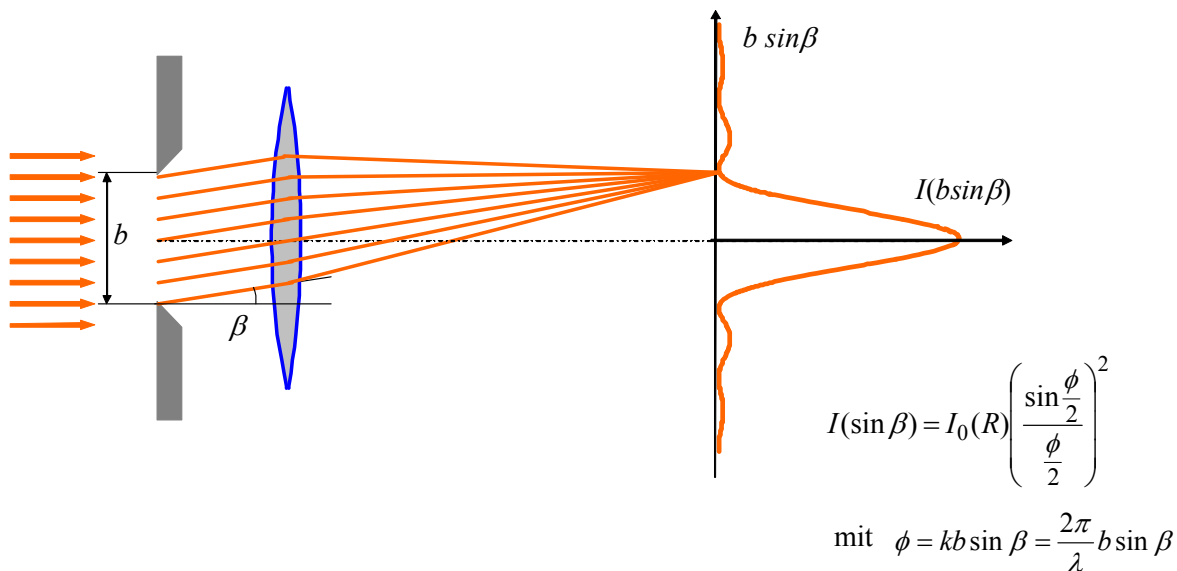
$$\frac{n_1}{n_0} = \frac{\sin\left(\frac{\delta_{\min} + \gamma}{2}\right)}{\sin\frac{\gamma}{2}}$$



Prismenspektrometer werden heute nur noch selten eingesetzt, z. B. bei der gekreuzten Dispersion in Echelle-Gitter-Spektrometern.

**Beugung am Spalt**

Nach dem Huygenschen Prinzip wird jeder Punkt der Spaltebene zum Ausgangspunkt von elementaren Kugelwellen. Die Elementarwellen werden sich in bestimmten Richtungen verstärken und in anderen abschwächen, so dass man Helligkeitsmaxima und Minima beobachtet.

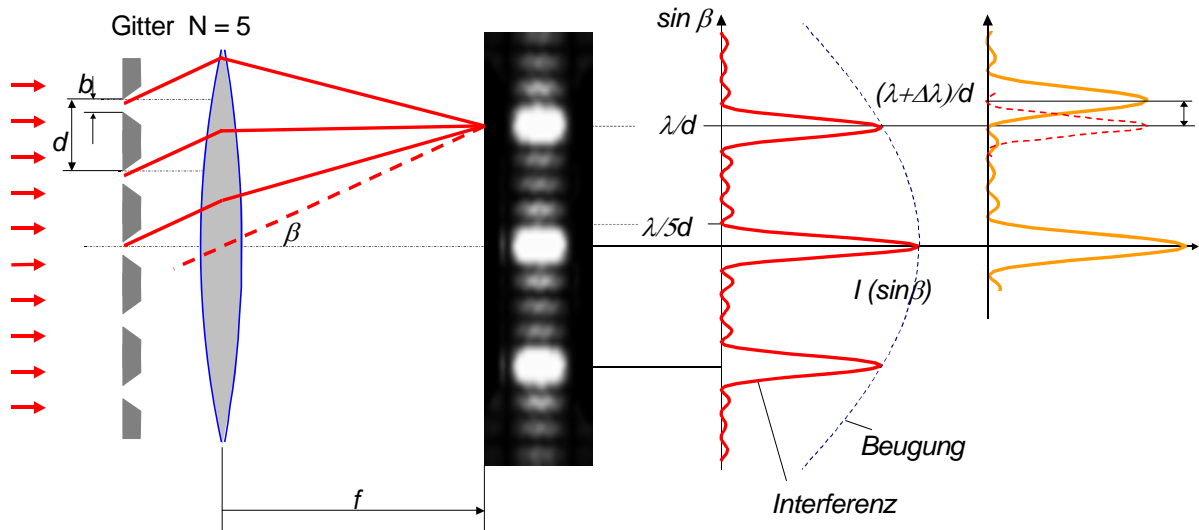


$$\sin \beta = \pm m \frac{\lambda}{b}$$

Richtung der Minima  
 $m$  heißt Ordnung der Beugung;  $m = \pm 1, 2, 3 \dots$

**Beugung am Gitter**

Ein **optisches Gitter** besteht aus  $N$  äquidistanten Einzelspalten der Breite  $b$  mit dem Abstand  $d$ . Der Abstand  $d$  heißt **Gitterkonstante**. Das Beugungsbild entsteht aus der Interferenz (Überlagerung) der einzelnen Elementarwellen aus den Spalten des Gitters.



$$I(\sin \beta) = I_0 \underbrace{\left( \frac{\sin(\frac{\pi b}{\lambda} \sin \beta)}{(\frac{\pi b}{\lambda} \sin \beta)} \right)^2}_{\text{Spaltfunktion}} \cdot \underbrace{\left( \frac{\sin(\frac{N\pi d}{\lambda} \sin \beta)}{\sin(\frac{\pi d}{\lambda} \sin \beta)} \right)^2}_{\text{Interferenzfunktion}}$$

**Spaltfunktion**

Beugung am Spalt der Breite  $b$

**Interferenzfunktion**

Interferenz von  $N$  Elementarsendern im Abstand  $d$

Richtung der **Hauptmaxima**:

$$\boxed{\sin \beta = m \frac{\lambda}{d}} \quad m = \pm 1, 2, 3$$

Für  $m \neq 0$  erfolgt so eine räumliche Zerlegung des einfallenden kollimierten Lichtbündels in seine spektralen Anteile.

Wenn sich die Wellenlänge um  $\Delta\lambda$  ändert, verschiebt sich das Beugungsmuster in der Beobachtungsebene um den Winkel  $\Delta\beta$ , bzw. um die Strecke  $\Delta x$ . Damit die Wellenlängenänderung  $\Delta\lambda$  aufgelöst werden kann, muss die Verschiebung "ausreichend" groß sein  $\rightarrow$  Auflösungsvermögen.

$$\cos \beta \cdot d\beta = \frac{m}{d} d\lambda$$

$$d\beta = \frac{m}{d \cos \beta} d\lambda \quad \Rightarrow \quad \boxed{\frac{d\beta}{d\lambda} = \frac{m}{d \cos \beta}}$$

**Winkeldispersion**

$$dx = f \cdot d\beta = f \frac{m}{d \cos \beta} d\lambda \quad \Rightarrow \quad \boxed{\frac{dx}{d\lambda} = f \frac{m}{d \cos \beta}}$$

**Lineardispersion**

( $f$  = Brennweite des Kollektors)

**Transmissionsgitter** - Nachteile:

- Licht verteilt sich auf mehrere Beugungsordnungen
- wenig Intensität pro Beugungsordnung
- Transmissionsverluste

} ⇒ Verbesserung mit Reflexionsgitter

**Reflexionsgitter:**

- keine Reflexionsverluste
- Licht lässt sich auf eine Beugungsordnung lenken (Blaze-Gitter)
- einfache und billige Herstellung
- Abbildungseigenschaften mit konkaven Gittern

**Monochromatorspezifikationen**

Begriffe und Definitionen in der winkeldispersiven Spektrometrie

Begriff	Definition / Bedeutung	Bezeichnung
<b>Auflösungsvermögen</b>	Fähigkeit, nahe beieinander liegende Wellenlängen als getrennt zu unterscheiden: gemessen als kleinste Differenz $\Delta\lambda$ der Wellenlängen eines Spektrums, die unterscheidbar sind.	$R = \lambda / \Delta\lambda$ dimensionslos
<b>Winkeldispersion</b>	Aufspaltung eines Wellenlängenbereiches $\Delta\lambda$ in einen Winkelbereich $\Delta\beta$ . Winkelbereich $\Delta\beta$ , über den der Wellenlängenbereich $\Delta\lambda$ gespreizt wird.	$\Delta\beta/\Delta\lambda$ in rad/nm oder Grad/nm
<b>Lineardispersion</b>	Abstand $\Delta x$ , über den der Wellenlängenbereich $\Delta\lambda$ in der Brennebene $f$ des Monochromators gespreizt wird.	$L_D = \Delta x/\Delta\lambda$ in mm/nm $\Delta x/\Delta\lambda = f \cdot (\Delta\beta/\Delta\lambda)$ $f =$ Kollektor-Brennweite
<b>Reziproke Lineardispersion</b>	Wellenlängenbereich, der über einen Einheitsabstand in der Brennebene des Monochromators gespreizt wird.	$L_D^{-1} = \Delta\lambda/\Delta x$ in nm/mm
<b>Spektrale Spaltbreite oder Bandbreite (effektive Bandbreite)</b>	Wellenlängenbereich, der bei Bestrahlung des Monochromators mit einem Kontinuum am Austrittsspalt der Breite $s = b$ erscheint.	$\Delta\lambda = s \cdot (\Delta\lambda/\Delta x) = s \cdot L_D^{-1}$ in nm

**Winkeldispersion**

Die Winkeldispersion ist neben dem Auflösungsvermögen die wichtigste Eigenschaft eines dispersiv arbeitenden Monochromators. Die Winkeldispersion ist ein Maß für die wellenlängenabhängige Auffächerung des einfallenden polychromatischen Strahlenbündels.

### Spaltbreite und Auflösung (ohne Berücksichtigung der Beugung)

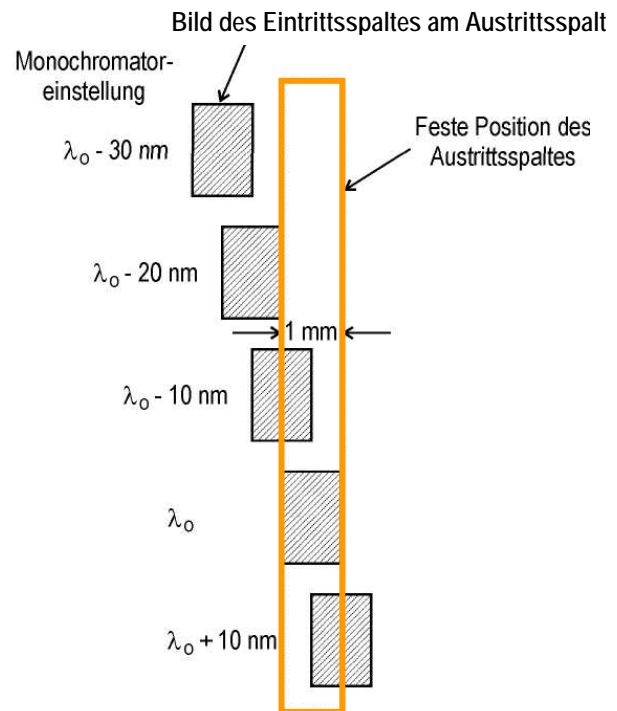
Fällt streng monochromatisches Licht der Wellenlänge  $\lambda_0$  auf den Eintrittsspalt, entsteht am Austrittsspalt bei gleicher Kollimator- und Kollektorbrennweite eine 1:1-Abbildung des Eintrittsspalt.

Position des Bildes des Eintrittspaltes relativ zum Austrittsspalt während eines Wellenlängen-Scans.

Bei der Wellenlängeneinstellung  $\lambda_0$  ist der Austrittsspalt gleichmäßig ausgeleuchtet.

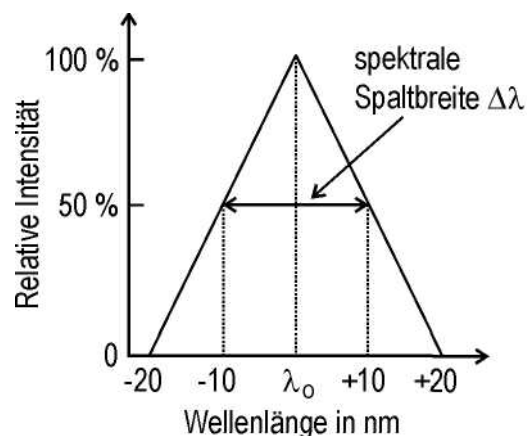
Lineardispersion:

$$L_D = \Delta x / \Delta \lambda = 1 \text{ mm} / 20 \text{ nm}$$



Mathematisch entspricht das Detektorsignal einer Faltung der Intensität im Eintrittsspalt mit dem Austrittsspalt. Bei gleicher Breite von Eintritts- und Austrittsspalt und homogener Ausleuchtung ergibt sich ein dreieckförmiges Detektorsignal.

Detektorsignal als Funktion der Monochromatoreinstellung, wenn monochromatisches Licht einfällt („Spaltfunktion“).  
Eintrittsspalt gleichmäßig ausgeleuchtet.

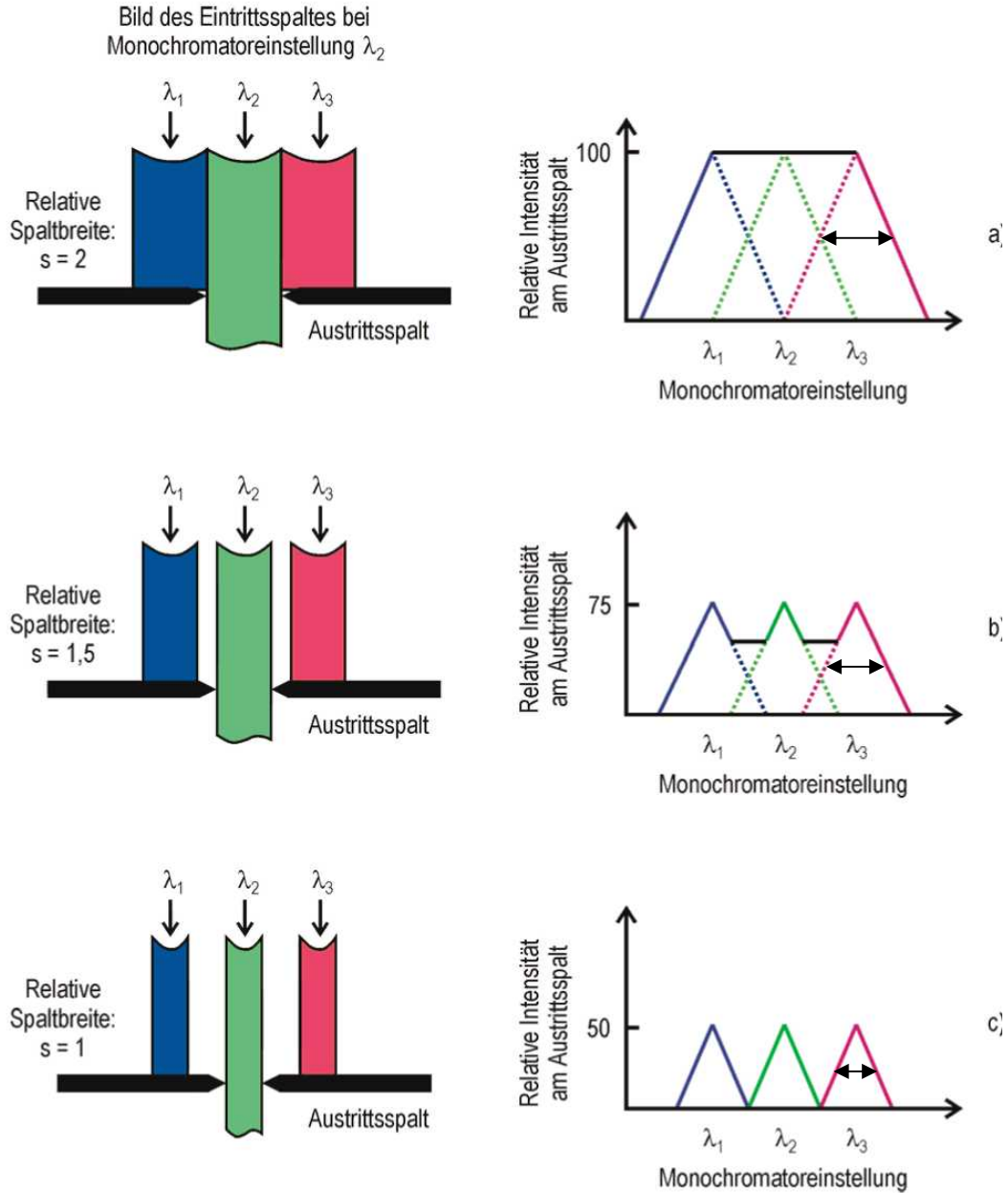


**Effektive Bandbreite  $\Delta\lambda_{eff}$  (spektrale Spaltbreite)**

Der Eintrittsspalt sei nun mit  $\lambda_1, \lambda_2$  und  $\lambda_3$  beleuchtet.

Ein- und Austrittsspaltbreiten seien identisch (1:1 - Abbildung).

Rechts sind die Auswirkungen einer Änderung der Spaltbreite auf das Detektorsignal gezeigt (durchgezogene Linien entsprechen dem messbaren Signalverlauf).



⇒ Die kleinste Differenz der unterscheidbaren Wellenlängen (effektive Bandbreite oder spektrale Spaltbreite) ist von der geometrischen Spaltbreite  $s$  oder  $b$  abhängig.

Lineardispersion im Fall c: 
$$L_D = \frac{\Delta x}{\Delta \lambda} = \frac{2s}{\lambda_2 - \lambda_1} \quad \text{mit } \Delta x = 2s \quad \text{und} \quad \Delta \lambda = \lambda_2 - \lambda_1$$

Effektive Bandbreite 
$$\Delta \lambda_{eff} = \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{2} = s \frac{\Delta \lambda}{\Delta x} = s \cdot L_D^{-1};$$

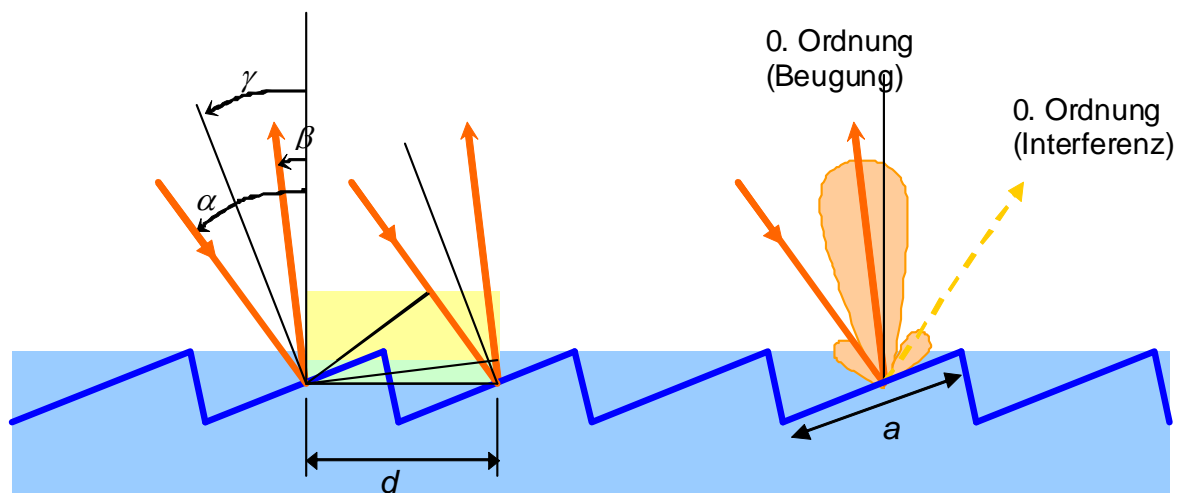
Beispiel:  $s = 100 \mu\text{m}; \lambda = 500 \text{ nm}; L_D = 1 \text{ mm/nm}$   
 ⇒  $\Delta \lambda_{eff} = s \cdot L_D^{-1} = 0,1 \text{ nm}; R = \lambda / \Delta \lambda_{eff} = 5000$

## Echelette-Gitter (Reflexionsgitter)

Bei der Beugung am Transmissionsgitter (oder an einem ebenen Reflexionsgitter) hat die Strahlung der 0-ten Beugungsordnung stets die größte Intensität, da das Maximum der Interferenzfunktion (0-te Ordnung) mit dem Maximum der Spaltfunktion zusammenfällt.

Durch Kippen der reflektierten Strahlen um den Winkel  $\gamma$  ( $\gamma = \text{Blazewinkel}$ ) verschiebt sich die Spaltfunktion gegenüber der Gitterinterferenz und fällt nicht mehr mit dem Hauptmaximum 0-ter Ordnung der Gitterinterferenz zusammen. Damit erreicht man eine hohe Effizienz des Gitters bei einer bestimmten Wellenlänge und Beugungsordnung.

- Prinzip:
- An den eingeritzten Furchen des Gitters wird das Licht geometrisch reflektiert. Da die Furchenbreite vergleichbar mit der Wellenlänge ist, tritt Beugung ein. Jede Furche wirkt wie ein Einzelspalt, der die Intensität entsprechend der Spaltbeugung in die geometrische Reflexionsrichtung lenkt (Spaltfunktion).
  - Die konstruktive Interferenz der homologen Strahlen der einzelnen Furchen (Gitterinterferenz) lenkt die Strahlung in die verschiedenen Richtungen bzw. Ordnungen der Hauptmaxima.
  - Fällt nun das Hauptmaximum  $m$ -ter Ordnung mit der Richtung der Spaltbeugung zusammen, wird die Intensität in der  $m$ -ten Ordnung maximal. Daraus folgt die Bedingung: Beugungswinkel  $m$ -te Ordnung = geometrische Reflexionsrichtung.



Gangunterschied: Bedingung für konstruktive Interferenz

$$\Delta_1 = d \sin \alpha$$

$$\Delta_2 = d \sin \beta$$

$$\Delta = \Delta_1 + \Delta_2 = d(\sin \alpha + \sin \beta) = m\lambda$$

$$m\lambda = d(\sin \alpha + \sin \beta)$$

Richtung der Spaltbeugung (= Richtung des reflektierten Strahles)

$$\gamma = \frac{\alpha + \beta}{2} \quad \text{Blazebedingung}$$

$$(\text{bzw. } \alpha - \gamma = \gamma - \beta)$$

Damit ist die Richtung der Spaltbeugung 0-ter Ordnung gegenüber der Interferenz 0-ter Ordnung um eine oder zwei Interferenzordnungen versetzt.

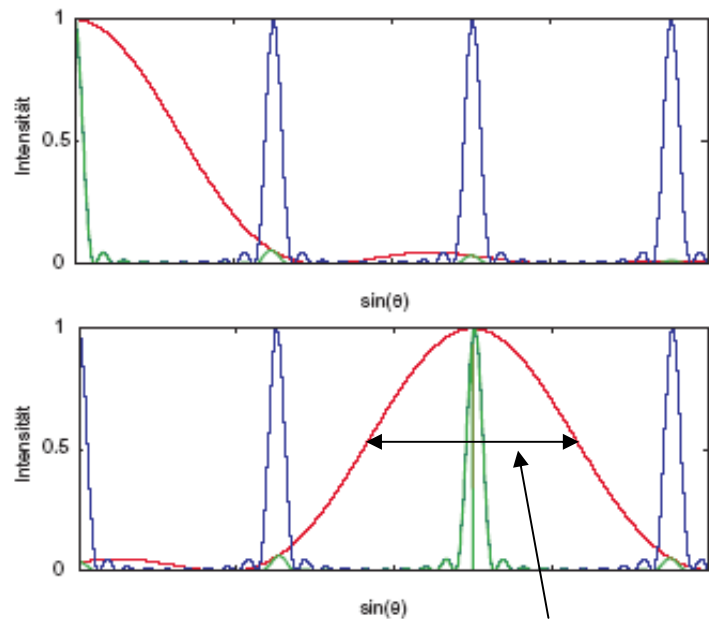
Das Maximum der Spaltfunktion und die 0-te Ordnung der Interferenzfunktion fallen bei einem "normalen Gitter" zusammen.

Beim diesem Echelette-Gitter wird die Beugung in die 2. Interferenzordnung "reflektiert".

Für den Fall  $d = a$  kann fast das ganze Licht einer Wellenlänge in diese (Interferenz)-Beugungsordnung gelenkt werden.

⇒ **Lichtstärkevorteil**

Die Breite der Beugungsfunktion grenzt aber den nutzbaren Spektralbereich ein.



nutzbarer Spektralbereich

### Winkeldispersion / Lineardispersion des Echelettegitters

$$m\lambda = d(\sin \alpha + \sin \beta)$$

$$m \cdot (d\lambda) = d \cos \beta (d\beta)$$

$$\left| \frac{d\beta}{d\lambda} \right| = \frac{m}{d \cos \beta}$$

Winkeldispersion

$$\left| \frac{dx}{d\lambda} \right| = f \left| \frac{d\beta}{d\lambda} \right| = f \frac{m}{d \cos \beta}$$

Lineardispersion ( $f$  = Brennweite des Kollektors))

### Berechnung des Blazewinkels

Die Wellenlänge bei der maximalen Gittereffizienz nennt man *Blazewellenlänge*, den zugehörigen Winkel  $\gamma$  der Gitterfurchen *Blazewinkel*.

Der Einfallswinkel  $\alpha$  ergibt sich aus der (festen) Stellung des Gitters zum einfallenden Strahl.

Der Spaltbeugungswinkel  $\beta$  (= Reflexionswinkel) wird von  $\gamma$  bestimmt ( $\beta = 2\gamma - \alpha$ ).

Damit  $\beta$  mit der Interferenzrichtung  $m$ -ter Ordnung zusammenfällt, muss dann gelten:

$$\gamma = \frac{\alpha + \beta}{2} = \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \arcsin\left(\frac{m\lambda}{d} - \sin \alpha\right)$$

Der Blazewinkel  $\gamma(\lambda)$  bestimmt zusammen mit der äquivalenten „spektralen Breite“ der Spaltbeugung in der  $m$ -ten Interferenzordnung den **nutzbaren Spektralbereich**.

Beispiel: Berechne für  $d = 5 \mu\text{m}$ ;  $\alpha = 20^\circ$ ;  $\lambda = 500 \text{ nm}$ ;  $m = 2$  den Blazewinkel  $\gamma$  und den gesamten Ablenkwinkel  $\theta$ .

$$\gamma = \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \arcsin\left(\frac{m\lambda}{d} - \sin \alpha\right)$$

$$\gamma = \frac{20^\circ}{2} + \frac{1}{2} \arcsin\left(\frac{2 \cdot 0,5 \mu\text{m}}{5 \mu\text{m}} - \sin 20^\circ\right) = 5,9^\circ \quad (\beta = 2\gamma - \alpha = 5,9^\circ \cdot 2 - 20^\circ = -8,2^\circ)$$

$$\theta = \alpha - \beta = 20^\circ - (-8,2^\circ) = 28,2^\circ$$



## Littrow-Anordnung

Echelette-Gitter werden im allgemeinen in der "Littrow-Anordnung" oder Autokollimationsanordnung betrieben, bei der Einfallswinkel und Ausfallswinkel etwa gleich groß sind.

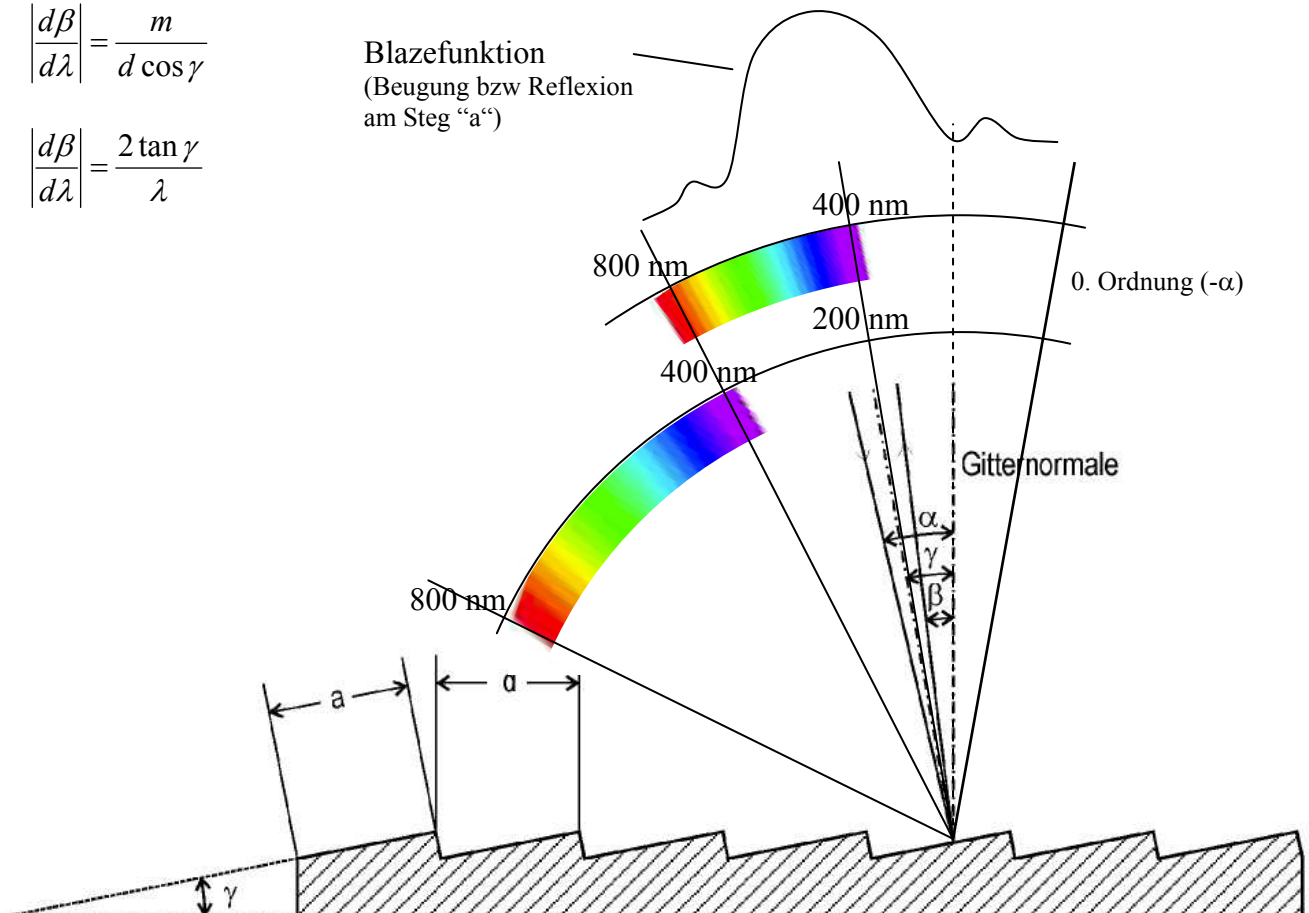
Konstruktiv sind deshalb Eintritts- und Austrittsspalt übereinander angeordnet.

Ablenkwinkel  $\theta = \alpha - \beta$  ist sehr klein  $\Rightarrow \alpha \cong \beta = \gamma$

In Littrow-Anordnung wird die Gittergleichung zu:  $2d \sin \gamma = m\lambda$

$$\left| \frac{d\beta}{d\lambda} \right| = \frac{m}{d \cos \gamma}$$

$$\left| \frac{d\beta}{d\lambda} \right| = \frac{2 \tan \gamma}{\lambda}$$



Beispiel: Gitter mit 1200 Gitterlinien/mm, d.h.  $d = 833,33 \text{ nm}$ ; Abmessung  $110 \times 110 \text{ mm}^2$

1. Ordnung: Blaze-Wellenlänge  $400 \text{ nm}$  in Littrow-Anordnung, d.h.:  $\alpha = \beta = \gamma$

$$2d \sin \gamma = m\lambda \quad \text{daraus folgt: } \gamma = 13,88^\circ$$

Die Winkeldispersion ist  $\left| \frac{d\beta}{d\lambda} \right| = \frac{m}{d \cos \gamma} = 1,24 \cdot 10^{-3} \text{ nm}^{-1} = 0,0708 \text{ Grad/nm}$

$$\text{Auflösungsvermögen: } R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = mN = 1 \cdot \frac{110}{0,000833} = 1,32 \cdot 10^5$$

Diskussion: a) Unter dem gleichen Winkel ( $\beta = \gamma = 13,88^\circ$ ) erscheint auch  $200 \text{ nm}$  Strahlung in der 2. Ordnung.

b) 2. Ordnung für  $\lambda = 400 \text{ nm}$  (Einstrahlung unter  $\alpha = \gamma$ )

$$d(\sin \alpha + \sin \beta) = 2\lambda \Rightarrow \sin \beta = \frac{2\lambda}{d} - \sin \alpha; \quad \beta = 46,0^\circ \text{ für } \lambda = 400 \text{ nm}$$

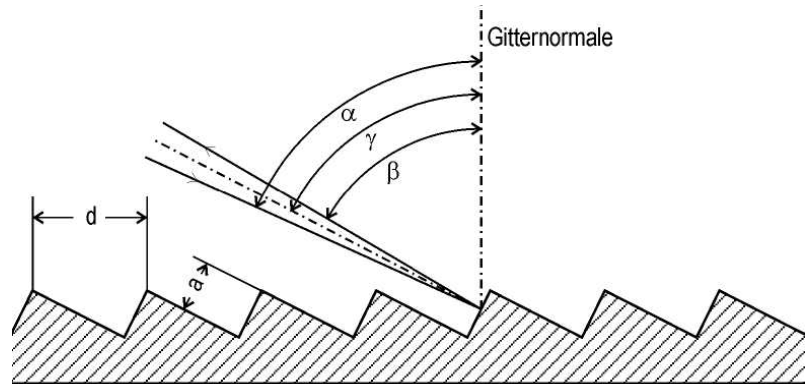
Unter dem gleichen Winkel ( $\beta = 46,0^\circ$ ) erscheint auch  $800 \text{ nm}$  Strahlung in der 1. Ordnung. Da das Gitter aber nicht für den Winkel geblazed ist, spielt diese Überlappung keine Rolle.

## Echelle-Gitter

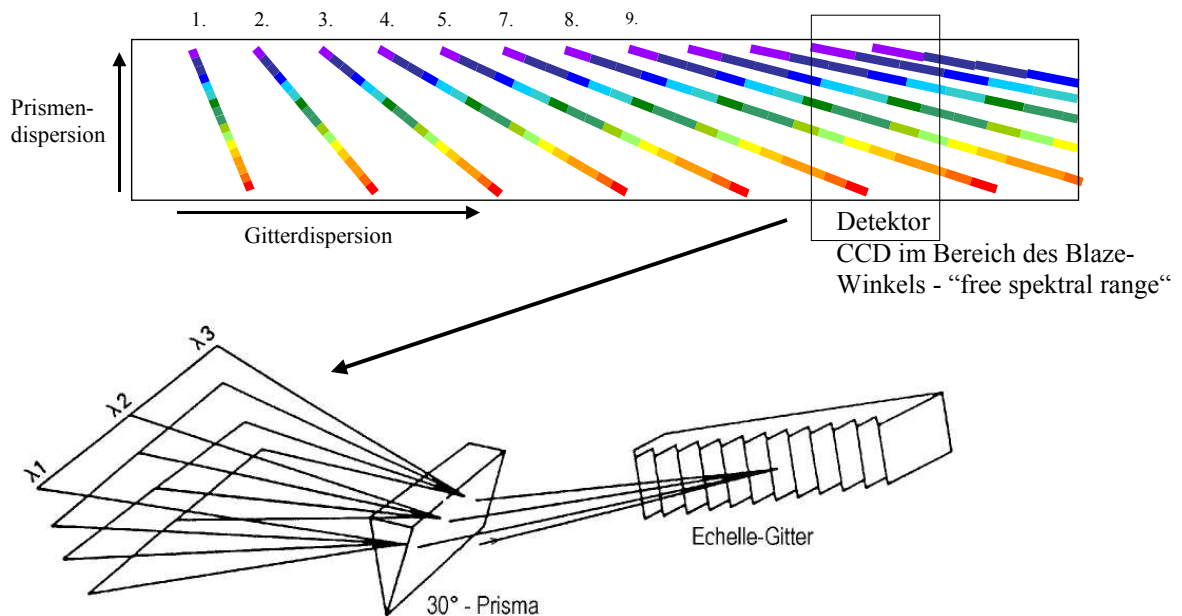
Beim Echelle-Gitter nutzt man die Tatsache, dass die Winkelauflösung mit der Ordnung  $m$  des Spektrums ansteigt. In der Echelle-Anordnung (umgekehrtes Echelette-Gitter) werden die Strahlen an den schmalen Flanken der Furchen reflektiert. Wegen des großen Blaze-Winkels  $\gamma$  ergeben sich große Gangunterschiede.

Der Gangunterschied  $\Delta = 2d \sin \gamma$  kann bis zu 100 Wellenlängen betragen.

Damit ergeben sich sehr viele Beugungsordnungen, die sich überlappen und ein nutzbarer Spektralbereich, der wegen der relativ kleinen "Spaltbreite"  $a$  groß ist.



Beim Echelle-Gitter müssen jedoch die überlappenden Spektren verschiedener Ordnungen mit Hilfe eines zusätzlichen dispersiven Elements getrennt werden. Die Trennung erfolgt mit einem Prisma, das senkrecht zur Beugungsrichtung des Gitters angebracht ist. Es entsteht eine zweidimensionale spektrale Trennung, bei der die einzelnen Beugungsordnungen und damit das komplette Spektrum wie Zeilen eines Buches gelesen werden können.



Typische Werte:

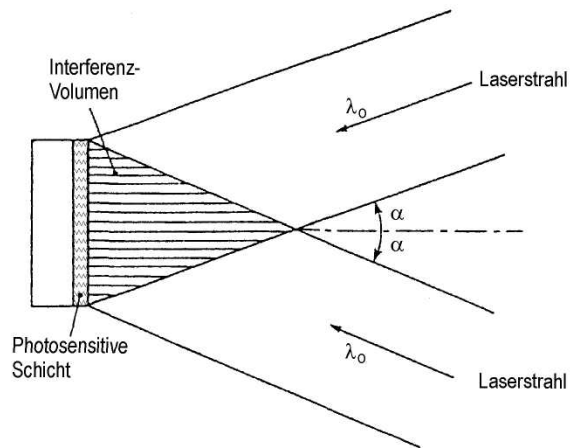
- 80 Gitterlinien/mm, d.h.  $d = 12,5 \mu\text{m}$  ; Blaze-Winkel sehr hoch ( $\gamma \approx 60^\circ$ ).
- Für den Einsatz im UV (200 nm ... 400 nm) liegt die Ordnung, in der diese Gitter betrieben werden, bei ca. 70 - 100.
- Die Winkeldispersion ist sehr hoch:  $\left| \frac{d\beta}{d\lambda} \right| = \frac{m}{d \cos \gamma} = 1,15 \cdot 10^{-2} \text{ nm}^{-1} = 0,66 \text{ Grad/nm} (\lambda=300 \text{ nm})$

Das Auflösungsvermögen eines  $100 \times 100 \text{ mm}^2$  großen Echelle-Gitters ist dann  $R = mN = 5,6 \cdot 10^5$  ! Allerdings tritt bei hohen Ordnungen eine starke Überlappung der Beugungsordnungen auf.

## Herstellung von Reflexionsgittern

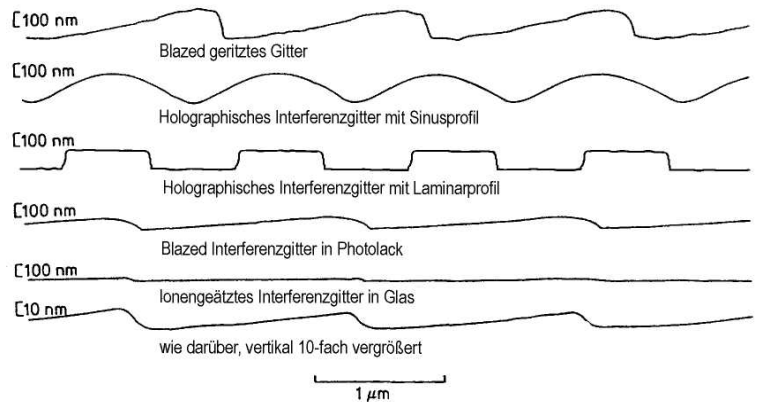
Herstellung eines holographischen Gitters mit geraden und äquidistanten Gitterlinien mittels Interferenzstreifen-system.

$$\text{Gitterkonstante: } d = \frac{\lambda / 2}{\sin \alpha}$$

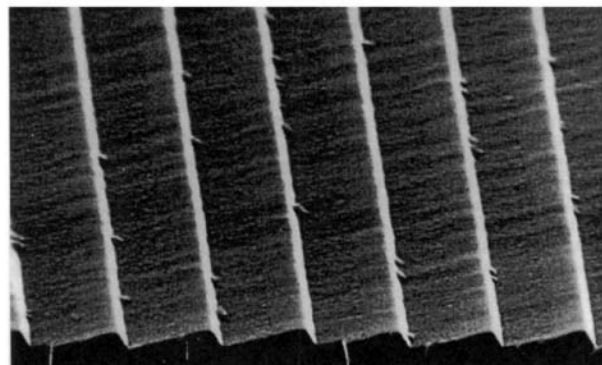


Verschiedene Typen holographisch erzeugter Interferenzgitter im Vergleich mit einem geritzten Gitter.

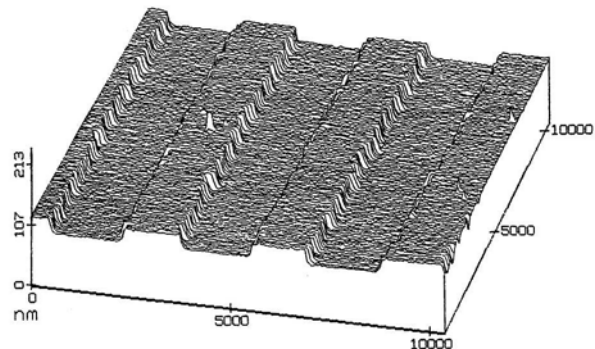
Durch Ionenätzen können aus einem Interferenzgitter mit Sinusprofil Gitter mit Rechteckstufenprofil und Blaze, Laminarprofil und andere hergestellt werden.

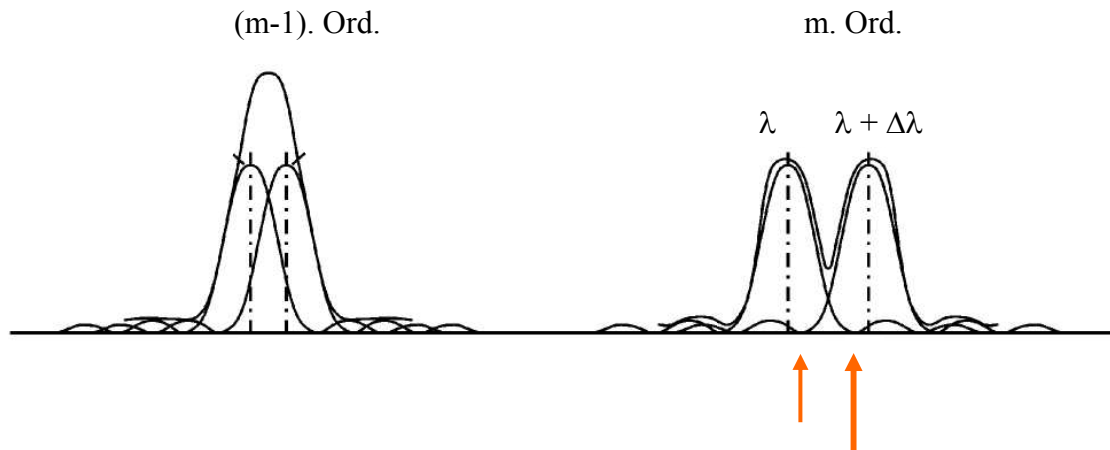


Aufnahme der Oberfläche eines mittels Lithographie und anschließendem Ionenstrahl-Ätzen hergestellten **Stufengitters** mit einem Raster-Elektronenmikroskop.



Aufnahme der Oberfläche eines holographischen **Laminargitters** (ebenes Reflexionsgitter) mit einem Raster-Tunnel-Mikroskop.



**Auflösungsvermögen des Gitters\*** (theoretisch)**Rayleigh-Kriterium**

Zwei Wellenlängen  $\lambda_1 = \lambda$  und  $\lambda_2 = \lambda + \Delta\lambda$  kann man unterscheiden, wenn das Maximum von  $\lambda_1$  auf das 1. Minimum von  $\lambda_2$  fällt oder umgekehrt.

Nebestehende Rechnung ergibt:

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

$N$  = Anzahl der ausgeleuchteten Gitterlinien

$$\begin{aligned} \text{Winkellage } m\text{-tes Maximum von } \lambda: & \frac{m\lambda}{d} \\ \text{Winkellage 1. Nebenminimum von } \lambda: & \frac{m\lambda}{d} + \frac{\lambda}{Nd} \\ \text{Winkellage } m\text{-tes Max. von } \lambda + \Delta\lambda: & \frac{m(\lambda + \Delta\lambda)}{d} \end{aligned}$$

$$\frac{m\lambda}{d} + \frac{\lambda}{Nd} = \frac{m(\lambda + \Delta\lambda)}{d} \Rightarrow \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = Nm$$

Zum Vergleich: **Auflösungsvermögen eines Prismas** (ohne Beweis)

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = B \frac{dn}{d\lambda}$$

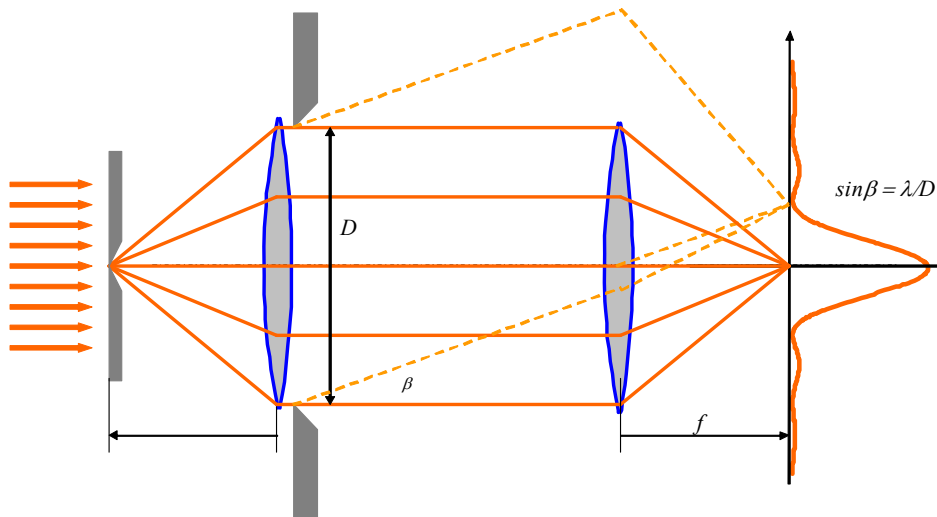
$B$  = Basisbreite des Prismas

Wegen der hohen Dispersion  $dn/d\lambda$  im UV haben Prismenspektrometer hier einen prinzipiellen Vorteil gegenüber Gitterspektrometern.

### Einfluss der Spaltbreite und Beugung auf das Auflösungsvermögen\*

Das Auflösungsvermögen  $R = \lambda / \Delta\lambda = Nm$  des Gitters stellt den theoretischen Maximalwert dar, der meist nur erreicht werden kann, wenn die Spaltbreite  $b$  gegen „Null“ geht.

Wegen der endlichen Breite  $b$  des Eintrittsspalts und durch Beugung an der Kollimatorlinse mit der Breite  $D$  wird dieser Wert i.A. nicht erreicht.



Ein Spalt der Breite „Null“ erzeugt eine einzige Elementarwelle, die vom Kollimator (Linse oder Spiegel) in ein Parallellichtbündel überführt wird. An der Begrenzung der Linse erfolgt jedoch Beugung, sodass die Kollektorlinse am Ort des Austrittsspalts kein punktförmiges Bild, sondern die Spaltfunktion abbildet. Bei der Brennweite  $f$  ist die Breite des Spaltbildes

$$\Delta x \approx f \frac{\lambda}{D}$$

Andererseits ergibt sich bei einem sehr breiten Eintrittsspalt nur das geometrische Bild in der Ebene des Austrittsspalts (siehe Diskussion spektrale Spaltbreite).

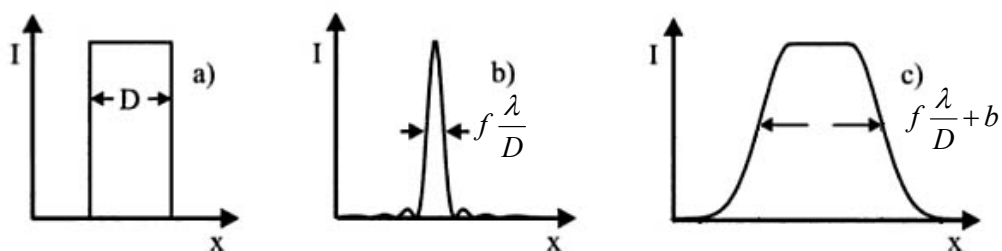


Abb.: Intensitätsprofil (Spaltbild) in der Ebene des Austrittsspalts

- a) bei endlicher Breite des Eintrittsspalts und Vernachlässigung der Beugung
- b) bei unendlich schmalen Eintrittsspalt
- c) bei Einbeziehung von Beugung und Spaltbild

In der Praxis hat der Eintrittsspalt eine endliche Breite.

Die Breite des Spaltbildes ist dann bei gleicher Brennweite der beiden Linsen/Spiegel:

$$\Delta x \approx f \frac{\lambda}{D} + b$$

Mit Hilfe der Definition der Lineardispersion  $\Delta x = f \cdot \frac{d\beta}{d\lambda} d\lambda$  erhält man für das Auflösungsvermögen

$$\lambda \Delta x = \lambda f \cdot \frac{d\beta}{d\lambda} d\lambda$$

$$\frac{\lambda}{d\lambda} = \frac{\lambda}{\left(f \frac{\lambda}{D} + b\right)} f \cdot \frac{d\beta}{d\lambda}$$

maximales Auflösungsvermögen für endliche Spaltbreite unter Berücksichtigung der Beugung

$$\frac{\lambda}{d\lambda} = D \cdot \frac{d\beta}{d\lambda}$$

maximales Auflösungsvermögen bei Spaltbreite „Null“ ( $b = 0$ ).  
(Obergrenze ist aber das theo. Auflösungsvermögen  $R = Nm$ ).

$$\frac{\lambda}{d\lambda} = \frac{\lambda}{b} f \cdot \frac{d\beta}{d\lambda}$$

maximales Auflösungsvermögen bei Vernachlässigung der Beugung ( $d\lambda$  entspricht dann der spektralen Spaltbreite  $\Delta\lambda_{\text{eff}}$ )

Die Breite des Eintrittsspalt  $b$  sollte jedoch eine untere Grenze nicht unterschreiten.

Diese Grenze ist dadurch gegeben, dass die Winkelbreite des Beugungsmaximums nullter Ordnung die Öffnung des Kollimators  $D/f$  nicht unterschreiten soll.

$$\beta = \frac{\lambda}{b} \Rightarrow = 2\beta = \frac{D}{f} = \frac{2\lambda}{b_{\min}} \text{ oder:}$$

$$b_{\min} = f \frac{2\lambda}{D}$$

Bei weiterer Verkleinerung des Spalts beginnt die Intensität der Strahlung in das Spektrometer noch stärker abzunehmen, da der Kollimatorspiegel überstrahlt wird.

**Aufgabe:** Ein Monochromator hat ein Gitter mit 1000 Linien/mm und die Abmessungen  $100 \times 100 \text{ cm}^2$ . Es soll in 2. Ordnung bei der Wellenlänge  $\lambda = 500 \text{ nm}$  in Littrow-Anordnung betrieben werden.

Die Brennweite von Kollektor- und Kollimatorspiegel beträgt  $f = 50 \text{ cm}$  und ihr Durchmesser  $D = 100 \text{ mm}$ .

- Wie groß ist das theoretische Auflösungsvermögen?
- Welches Auflösungsvermögen wäre für eine Spaltbreite  $b \rightarrow 0$  erreichbar?
- Welches Auflösungsvermögen erreicht man bei der Spaltbreite  $b_{\min}$  mit und ohne Berücksichtigung der Beugung?

### Abbildende Konkavgitter, Rowlandkreis\*

Abbildungseigenschaften eines Konkavspiegels

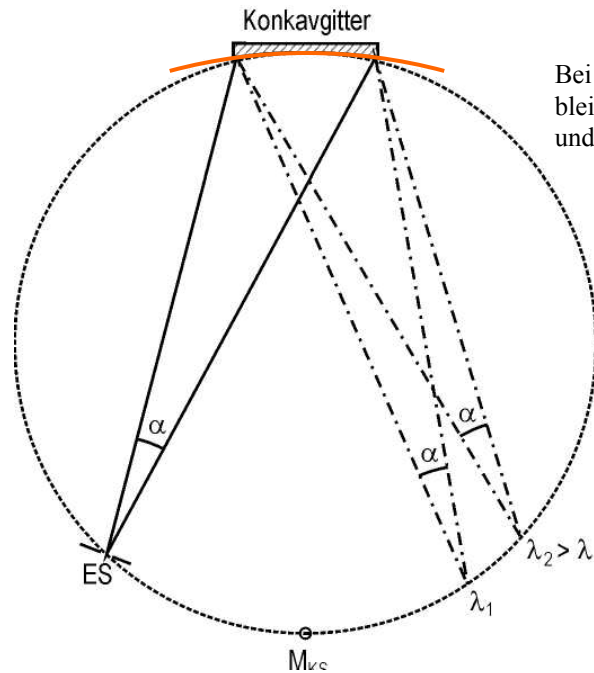
Vom Mittelpunkt  $M_{KS}$  des Krümmungskreises der Spiegeloberfläche ausgehende Strahlen (Strahlenbündel mit dem Öffnungswinkel  $\alpha$ ) werden wieder im Mittelpunkt fokussiert.

Strahlenbündel mit dem Öffnungswinkel  $\alpha$  aus anderen Richtungen werden ebenfalls mit dem Konvergenzwinkel  $\alpha$  fokussiert.

$$R_{Gitter} = D_{Row}$$

Die Brennweite der Gittersphäre ist dann gleich

$$f = \frac{D_{Row}}{2}$$



Bei der Messung bleiben Eintrittspalt und Gitter fest.

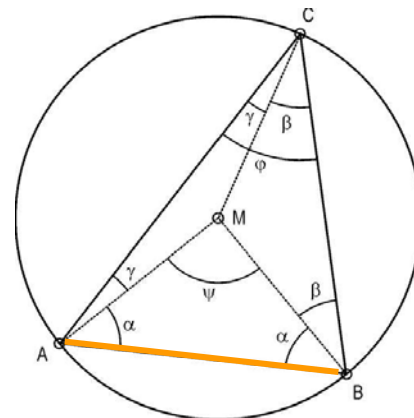
Der Austrittspalt wird mit dem Detektor am Rowlandkreis entlangefahren.

Ein Konkavgitter wirkt beugend wie ein ebenes Reflexionsgitter und gleichzeitig abbildend wie ein Konkavspiegel. Der geometrische Ort aller Abbildungen des Eintrittspaltes ES für verschiedene Wellenlängen ist deshalb ein Kreis (Rowland-Kreis), dessen Durchmesser gleich dem Krümmungsradius der Gitteroberfläche ist. Der geometrische Grund dafür ist, dass der Winkel, unter dem die Sehne eines Kreises von allen Punkten des Kreises aus erscheint, konstant ist.

$$\begin{aligned} \beta + \gamma &= \varphi \\ \gamma + \alpha + \alpha + \beta + \varphi &= 180^\circ \\ 2\alpha + \Psi &= 180^\circ \end{aligned}$$

$$2\varphi + 180^\circ - \Psi = 180^\circ$$

$$\varphi = \frac{\Psi}{2} = const.$$



Berechnung der Lineardispersion

$$\frac{dx}{d\lambda} = R_{Gitt} \cdot \left| \frac{d\beta}{d\lambda} \right| = R_{Gitt} \frac{m}{d \cos \beta}$$

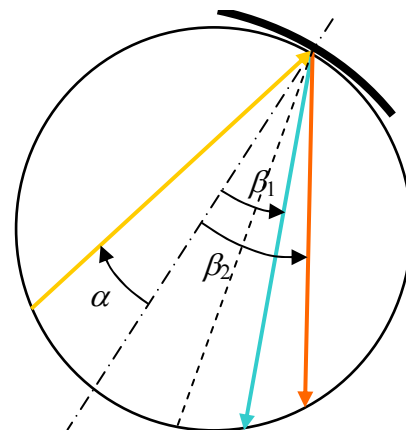
Berechnung von  $\Delta x$  für zwei diskrete Wellenlängen  $\lambda_1, \lambda_2$ .

$$d(\sin \alpha + \sin \beta_1) = m\lambda_1$$

$$d(\sin \alpha + \sin \beta_2) = m\lambda_2$$

$$\Delta x = R_G (\beta_2 - \beta_1)$$

$$\Delta x = R_G \left[ \arcsin\left(\frac{\lambda_2}{d} - \sin \alpha\right) - \arcsin\left(\frac{\lambda_1}{d} - \sin \alpha\right) \right]$$



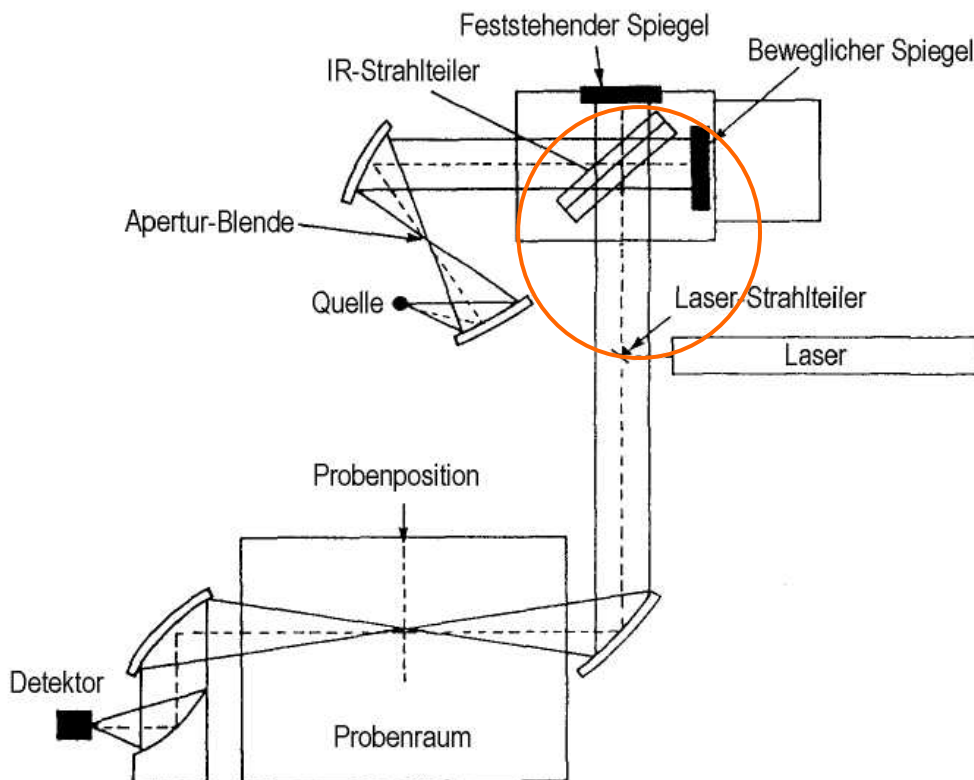
### 2.3.2.4 Fourier-Transform-IR-Spektrometer (FTIR-Spektrometer)

Fourier-Transform-IR-Spektrometer besitzen an Stelle des Monochromators ein Interferometer, im allgemeinen ein Michelson-Interferometer.

Alle modernen IR-Spektrometer arbeiten nach der Fourier-Transform-Methode.

Dabei werden nicht mehr die einzelnen IR-Wellenlängen mithilfe eines dispersiven Elementes nacheinander auf die Probe eingestrahlt, sondern alle gleichzeitig. Dadurch ist der Zeitbedarf für eine Messung deutlich verkürzt.

Das eigentliche Spektrum muss jedoch aus dem Detektorsignal durch ein mathematisches Verfahren (Fourier-Transformation) errechnet werden. Erst durch die Verfügbarkeit leistungsfähiger Computer konnte sich das Verfahren allgemein durchsetzen.

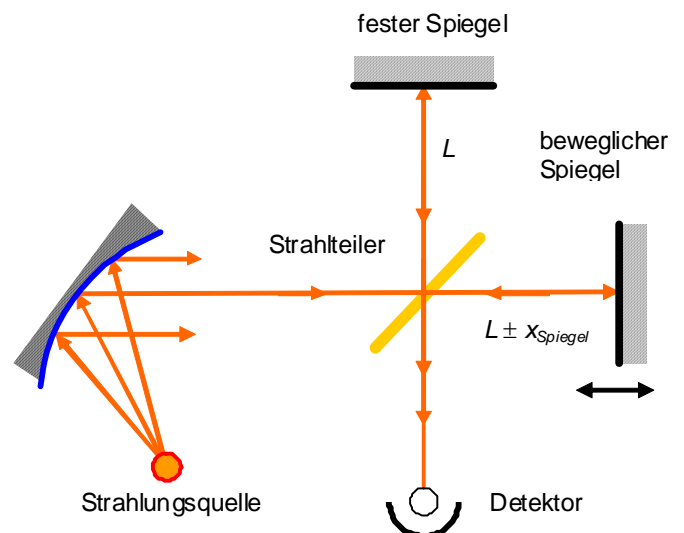


#### Das Michelson-Interferometer

Das Licht aus der Strahlungsquelle ( $\rightarrow$  *Nernst-Stift* oder  $\rightarrow$  *Globar*) wird an einem Strahlteiler in 2 Teilstrahlen aufgeteilt. Ein Teil wird von einem fest installierten Spiegel zum Strahlteiler reflektiert, der andere von einem beweglichen Spiegel, der sich um die Strecke  $x_{Sp}$  hin- und herbewegen lässt.

Dadurch ergibt sich am Strahlteiler, wo die zwei Teilstrahlen wieder vereinigt werden, ein Wegunterschied  $\delta$ , genannt "**Gangunterschied**" oder "Optical Path Difference" OPD.

Je nach Gangunterschied der beiden Teilstrahlen kann es dabei zu einer Verstärkung (konstruktive Interferenz) oder einer Abschwächung (destruktive Interferenz) kommen.





### Entstehung des Interferogramms (1)

Für den einfachen Fall einer monochromatischen Lichtquelle ergibt sich konstruktive Interferenz für  $OPD = m\lambda$  und destruktive Interferenz für  $OPD = (2m+1)\lambda/2$ .

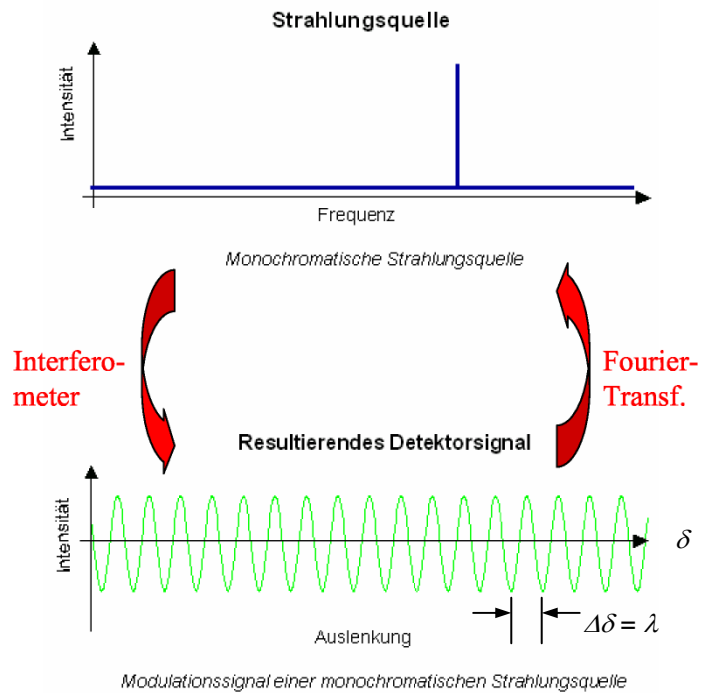
Wird der bewegliche Spiegel kontinuierlich verfahren, erhält man am Detektor (bei Abzug des Gleichanteils) ein cos-förmiges Signal.

$$I(\delta) = I(OPD)$$

$I(\delta)$  heißt **Interferogramm**

$$\delta = 2x_{Sp} \text{ (Gangunterschied)}$$

Durch Fourier-Transformation kann aus dem Interferogramm das zugehörige Spektrum der Strahlung berechnet werden.



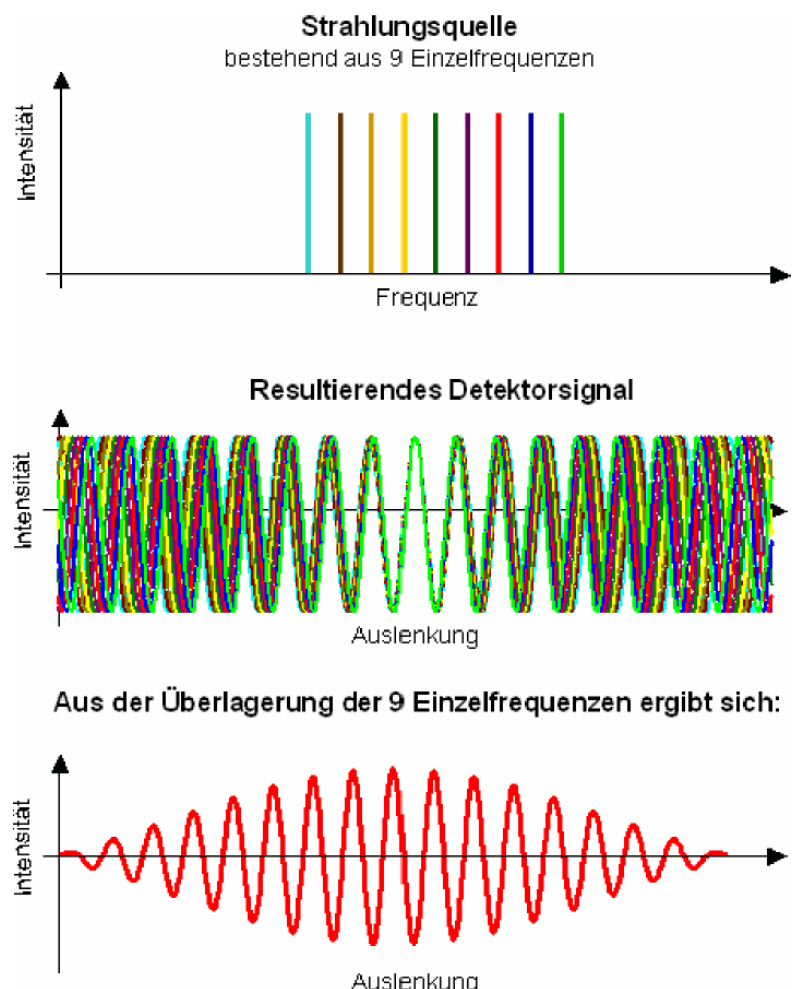
### Entstehung des Interferogramms (2)

Besteht die Strahlung aus mehreren Frequenzkomponenten, wird jede Frequenz in ein cos-förmiges Signal moduliert.  $\Rightarrow$  Das Interferogramm dieser Strahlung setzt sich dann additiv aus den Interferogrammen der einzelnen Frequenzen (Wellenlängen) zusammen.

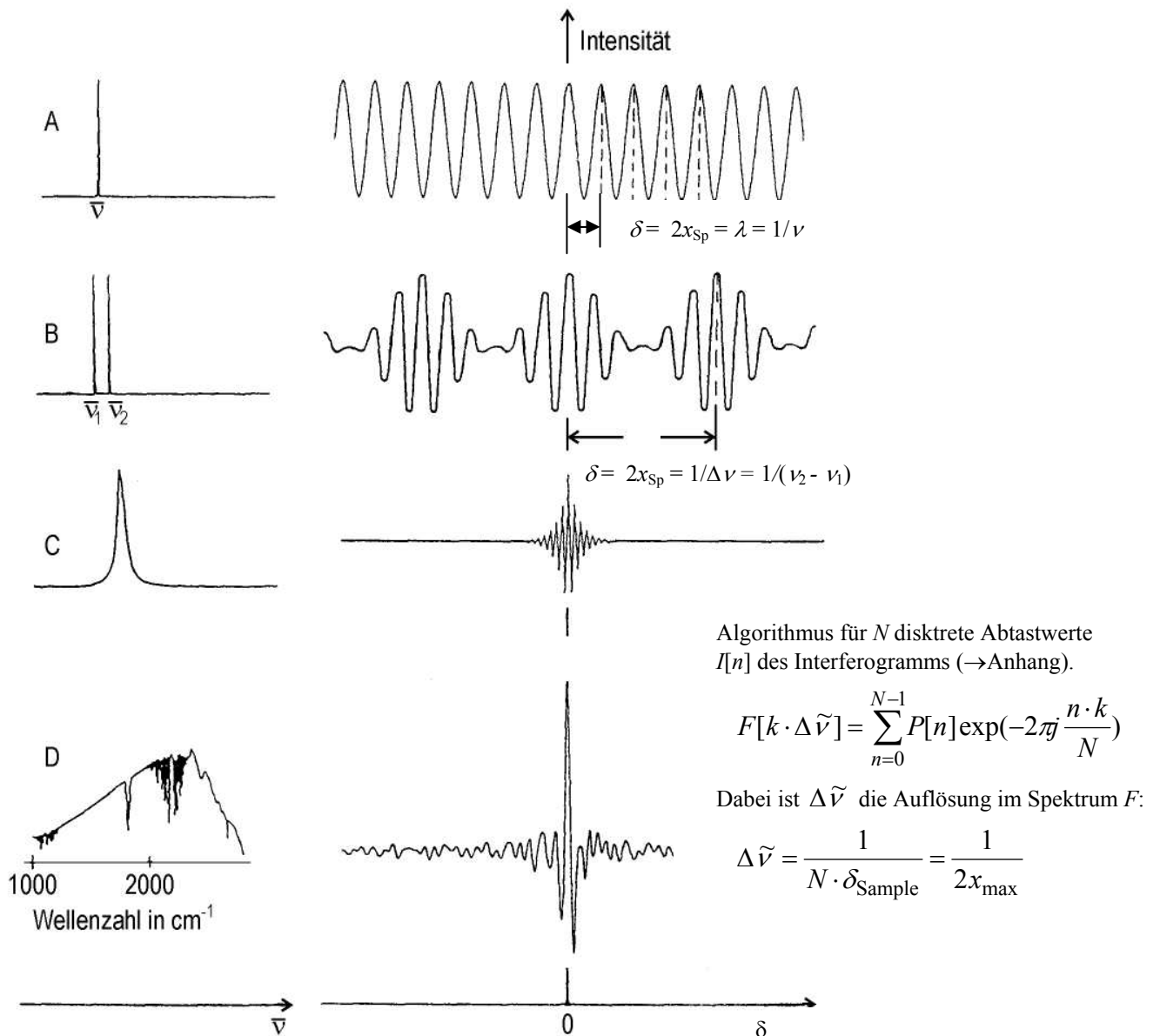
Die Abbildung zeigt das Spektrum und das Interferogramm für ein Gemisch aus mehreren Wellenlängen.

Auch aus diesem komplexeren Interferogramm kann durch Fourier-Transformation das Spektrum der zusammengesetzten Strahlung berechnet werden.

Wird aus dem Spektrum eine Komponente herausgenommen (absorbiert), fehlt sie im Interferogramm. Die anschließende FT enthält diese Komponente dann nicht mehr.



## Entstehung des Interferogramms (3)



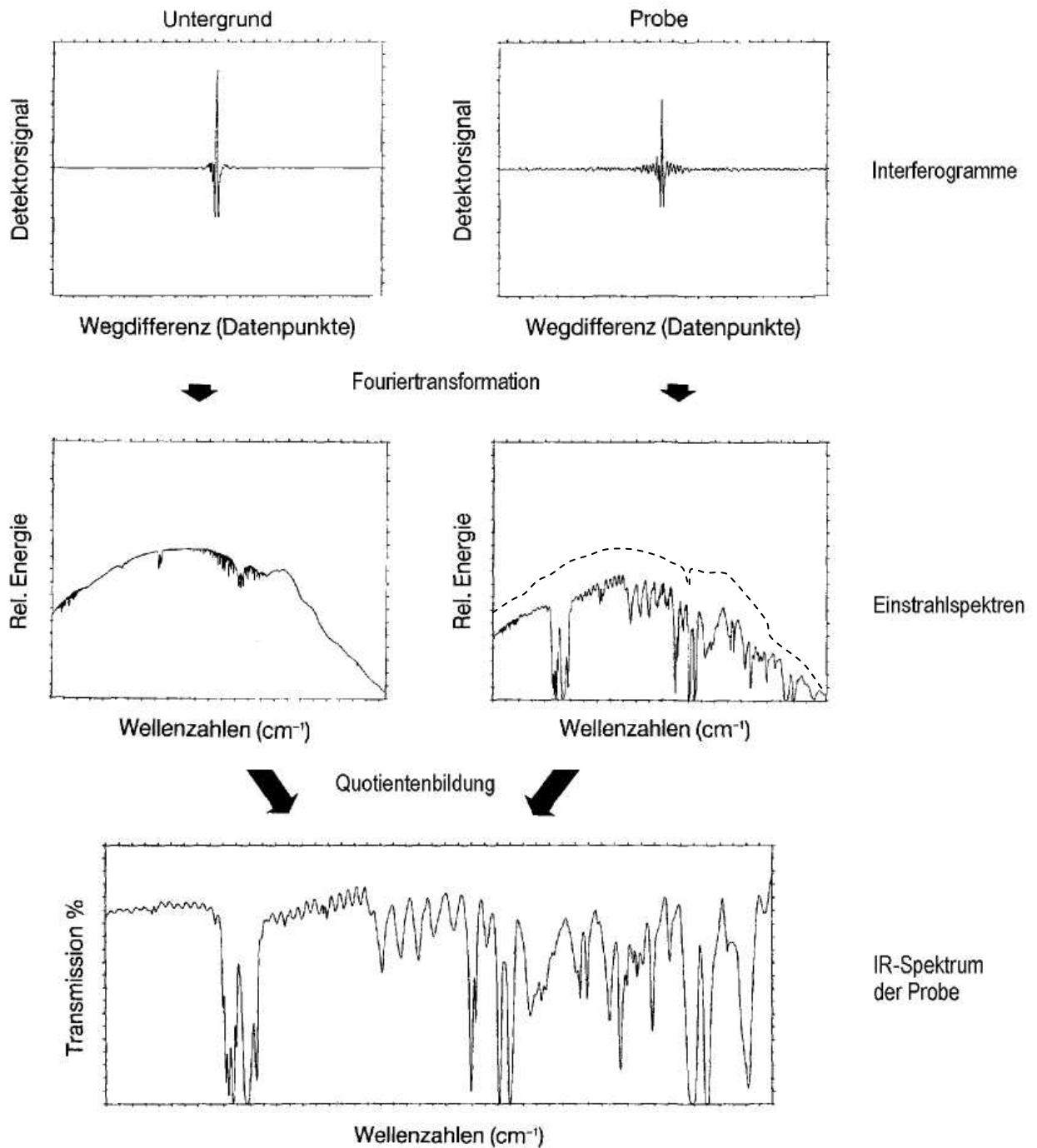
Theoretisch ist das Interferogramm symmetrisch zur Spiegelstellung "0".

Die Abweichungen kommen wegen apparativer Unterschiede in den beiden Interferometerarmen.

## Vorteile der FTIR-Spektrometer

- Das gesamte Strahlungsspektrum erreicht den Detektor gleichzeitig. Alle Frequenzanteile werden simultan erfasst.
- Hohes SNR, da die gesamte Strahlung auf den Detektor fällt.
- Hohe Wellenlängengenauigkeit durch Verwendung eines Lasers zu Referenzmessungen.
- Entkoppelung der reziproken Abhängigkeit von Empfindlichkeit und Auflösungsvermögen beim Gitterspektrometer.
- Keine Spalte oder Spiegel, die das Auflösungsvermögen begrenzen.
- Keine Empfindlichkeit gegenüber Untergrundstrahlung. Das Untergrundsignal (Streustrahlung plus Eigenstrahlung der Probe) wird nicht moduliert, da die Probe hinter dem Interferometer angeordnet ist.

## Entstehung des Probenspektrums



### Auflösungsvermögen beim FTIR

Das Auflösungsvermögen ist nur von der "Länge" des Interferogramms abhängig. Da Interferogramm und Spektrum ein FT-Paar bilden, gilt die Unschärferelation

$$\Delta x \Delta k \approx 2\pi \quad \text{oder} \quad \Delta x \Delta(2\pi/\lambda) \approx 2\pi \quad \Rightarrow \quad \Delta x \Delta \tilde{\nu} \approx 1 \quad \text{oder} \quad \Delta \tilde{\nu} \approx 1/\Delta x$$

Da der Spiegelhub  $x_{\text{Sp,max}}$  den doppelten Gangunterschied der Teilwellen verursacht  $\delta = 2x_{\text{max}}$ , gilt:

$$\Delta \tilde{\nu} \approx \frac{1}{2x_{\text{max}}}$$

Die Auflösung ist damit wesentlich durch den maximalen Spiegelhub  $x_{\text{max}}$  im MIF begrenzt.

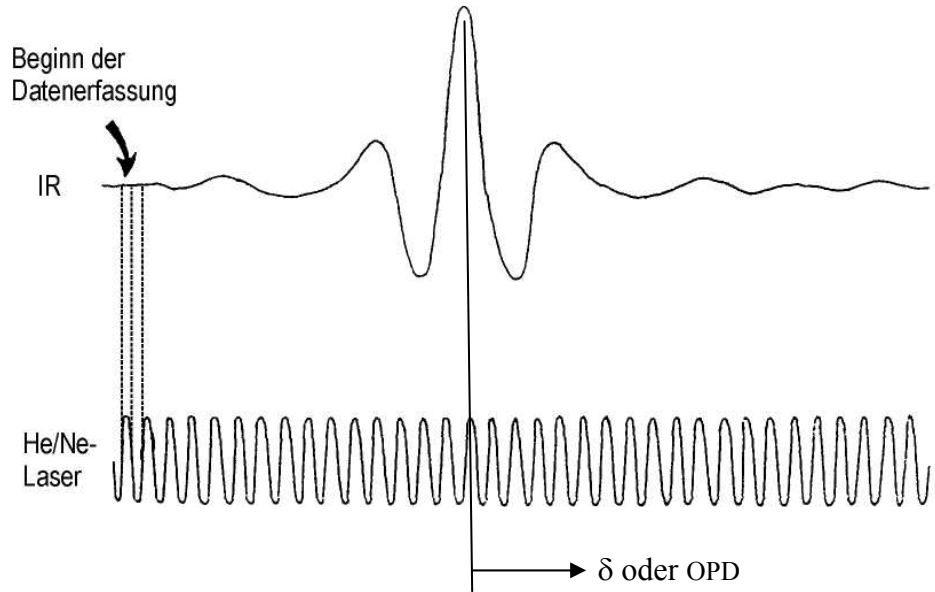
**Apparative Details**

**1) Kalibrierung:**

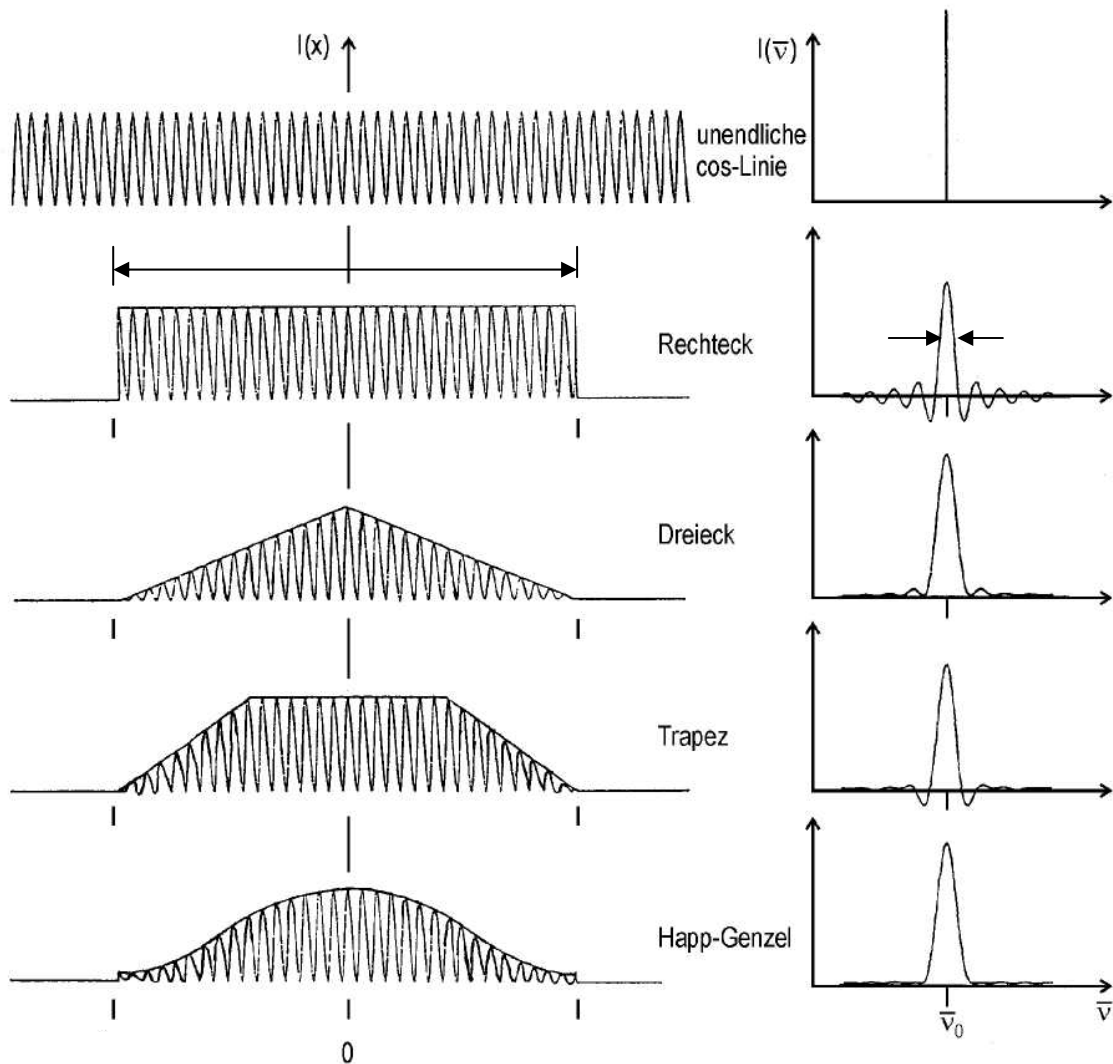
Abtastung des IR-Interferogramms bei jedem Nulldurchgang eines Referenz-Interferogramms (HeNe-Laser).

⇒ keine Wegmessung erforderlich

⇒ keine konstante Geschwindigkeit notwendig



**2) Apodisation**

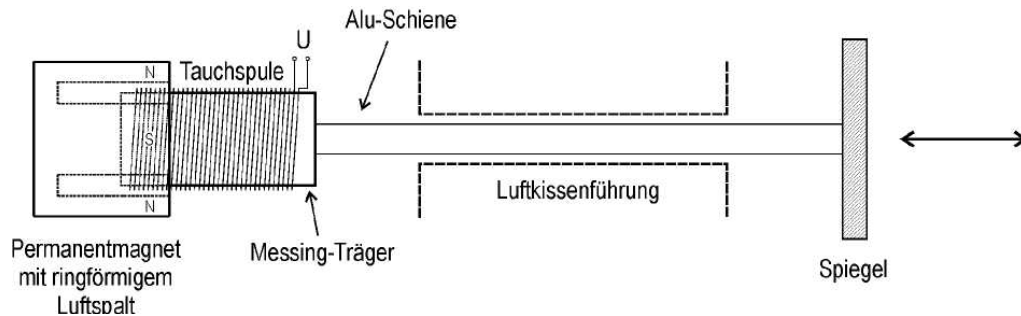


Fensterfunktionen (Apodisationsfunktionen)

Die Spektrallinie einer monochromatischen Lichtquelle erscheint im Profil, der zum Fenster gehörenden Apparatfunktion (= Spektrum des Fensters).

## Spiegelantriebe

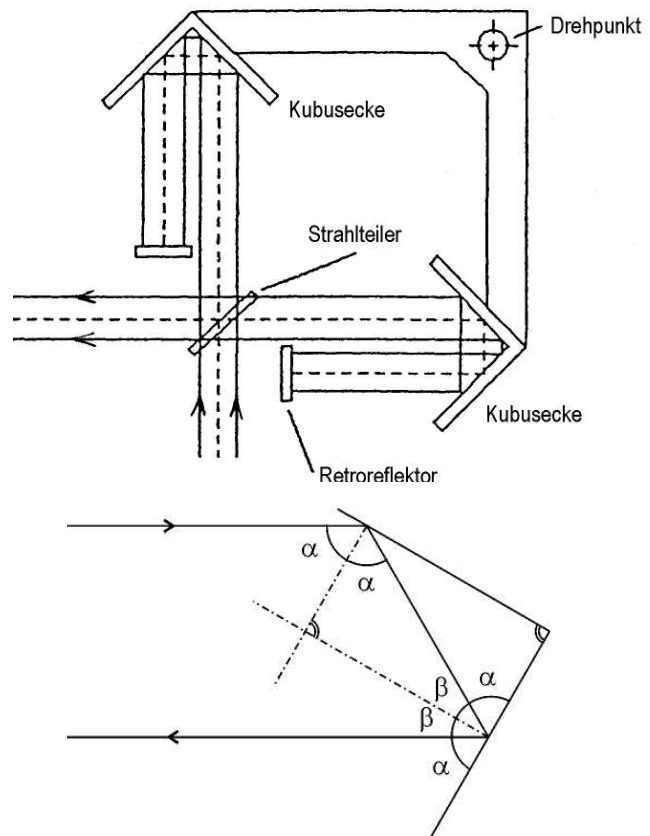
### 1) Lautsprecherprinzip



Schema eines Linearantriebs (Lautsprecherprinzip) zur Spiegelbewegung in einem FTIR-Spektrometer - einziges bewegliches Bauteil.

### 2) Pendelarm-Interferometer

Die Veränderung der Lichtwege erfolgt in den Interferometerarmen durch zwei „Kubusecken“, die auf einem starren Rahmen um einen gemeinsamen Drehpunkt drehbar sind.



Eine Kubusecke besteht aus zwei senkrecht aufeinander stehenden Spiegeln. Der gesamte Winkel der Strahlumlenkung beträgt unabhängig von der Winkelstellung der Kubusecke.

$$2(\alpha + \beta) = 180^\circ$$

### Typische Daten:

spektrale Auflösung (unapodisiert)	0,006 $\text{cm}^{-1}$ (1 sec Messdauer)
	2,4 $\text{cm}^{-1}$ (2,5 ms Messdauer)
SNR	bis 10 000 (abhängig von der Messdauer)
Abstand zwischen 2 Messungen	50 ms - 150 ms
Durchmesser des kollimierten Strahls	bis 60 mm
Referenz	632,8 nm (Single Mode HeNe-Laser)
Spektralbereich	0,8 $\mu\text{m}$ - 35 $\mu\text{m}$ (285 $\text{cm}^{-1}$ - 12500 $\text{cm}^{-1}$ )

**Aufgabe:**

Das Spektrum eines Gittermonochromators in Littrow-Anordnung wird in 1. Ordnung unter einem Winkel  $\beta = \gamma = 60^\circ$  beobachtet. Die Lineardispersion des Gittermonochromators beträgt  $L_D = dx/d\lambda = 1 \text{ mm/nm}$ . und die Brennweite des Kollektorspiegels ist  $f = 0,50 \text{ m}$ .

- a) Berechnen Sie die Winkeldispersion  $d\beta/d\lambda$ .
- b) Wie groß ist die Gitterkonstante  $d$  ?
- c) Wie groß ist die effektive Bandbreite (spektrale Spaltbreite), wenn die Breite des Austrittsspalt  $s = 0,5 \text{ mm}$  beträgt ?