

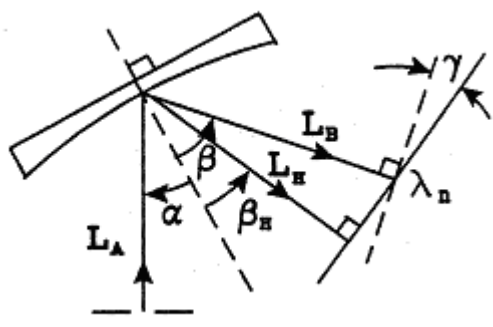
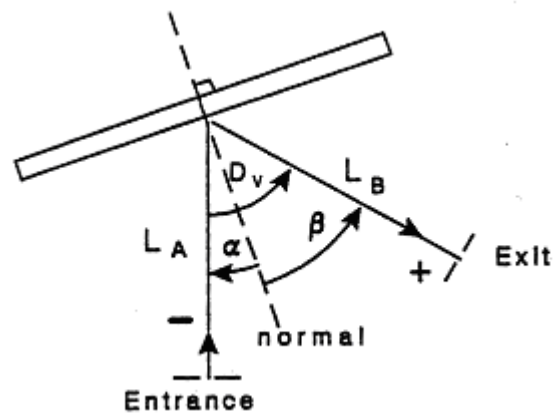
1-El perque d'algunes coses

Hi va haver una epoca, a principis d'aquest segle, en la que'l meu interes per les tecnologies fotografiques em va portar a l'estudi dels processos fotografics antics, que es practicaven abans del 1900, i aquest interes va crear-me la necessitat de disposar d'un equip que fos capaç no sols d'analitzar els components espectrals de les fonts de llum, si no tambe que em permetes mesurar els espectres d'absorcio d'aquelles antigues emulsions fotografiques. Així va neixer l'idea de dissenyar un Densitometre de Color per Reflexio i un Espectrometre d'UV i Visible utils per aplicacions fotografiques.

Despres de bastants hores d'estudi dels diferents tipus d'espectrometres i de valorar els avantatges d'uns respecte als altres... la decisió va ser molt simple doncs per ebay -per només 15€- vaig trobar i comprar una ret de difracció concava ACHG, amb la majoria d'aberracions optiques corregides, que simplificava al màxim els components òptics del meu disseny i, a la vegada, el podria fer inclús comparable a acreditats models actuals.

2-Una mica de teoria bàsica

Una ret de difracció pot treballar segons els següents esquemes teòrics:

	
<p style="text-align: center;">Espectrograf</p> <p>El diafragma d'entrada, L_A, l'angle α i la red son fixes. Gira el diafragma de sortida i β per captar l'espectre</p>	<p style="text-align: center;">Monocromador</p> <p>Els diaframes d'entrada i sortida son fixes i no es mouen $Dv = \text{constant}$ Gira la ret per captar l'espectre</p>

Equacio General Basica	Equacio Particular Monocromador
$\sin \alpha + \sin \beta = k \cdot n \cdot \lambda \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot \sin\left(\frac{\beta + \alpha}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{Dv}{2}\right) = k \cdot n \cdot \lambda \cdot 10^{-6}$ $Dv = \beta - \alpha$
<p>α = angle incidencia (°)</p> <p>β = angle difracció (°)</p> <p>λ = longitud d'ona (nm)</p> <p>n = densitat dels solcs (s/mm)</p> <p>L_A = braç d'entrada (mm)</p> <p>L_B = braç de sortida (mm)</p> <p>k = ordre difracció</p>	<p>α = angle incidencia (°)</p> <p>β = angle difracció (°)</p> <p>Dv = angle desviació (°)</p> <p>λ = longitud d'ona (nm)</p> <p>n = densitat dels solcs (s/mm)</p> <p>L_A = braç d'entrada (mm)</p> <p>L_B = braç de sortida (mm)</p>

3- Ret de difracció J532 00 130

La ret comprada a ebay va resultar ser una ret Horiba concava, amb les aberracions corregides i de les següents característiques com monocromador

3.1- Característiques de la Ret de Difracció

Marca: Horiba ACHCG Aberration Corrected Holographic Concave Grating
Model: J532 00 130
Y1794 HUCR 05 06
Grooves: 1200 g/mm
Range: 300-800 nm
Blaze: 450 nm
La= 100 mm Lb=94 mm
Dv=61.6 °
Dispersio=8 nm/mm
Size: 32x32 mm area util: 25x25 mm
Focal F/3

3.2- Eficiència de la ret Horiba 532 00 130

La eficiència d'aquesta ret, segons mostra el gràfic següent permet utilitzar-la per un espectre pràctic de freqüències entre 300 i 800 nm. Un petit estudi m'inclina, a primera vista, a elegir el muntatge d'espectrograf, donat que aquesta modalitat necessita un angle d'exploració més ampli que'l del monocromador. El muntatge del monocromador amb un simple angle de 21° cobreix tot l'espectre desde 300 fins a 800 nm i, en canvi, l'espectrograf, amb un angle $\alpha=0$ necessita un increment d'angle β de 105.28° pel mateix rang, lo que equival a un poder separador unes 5 vegades superior.

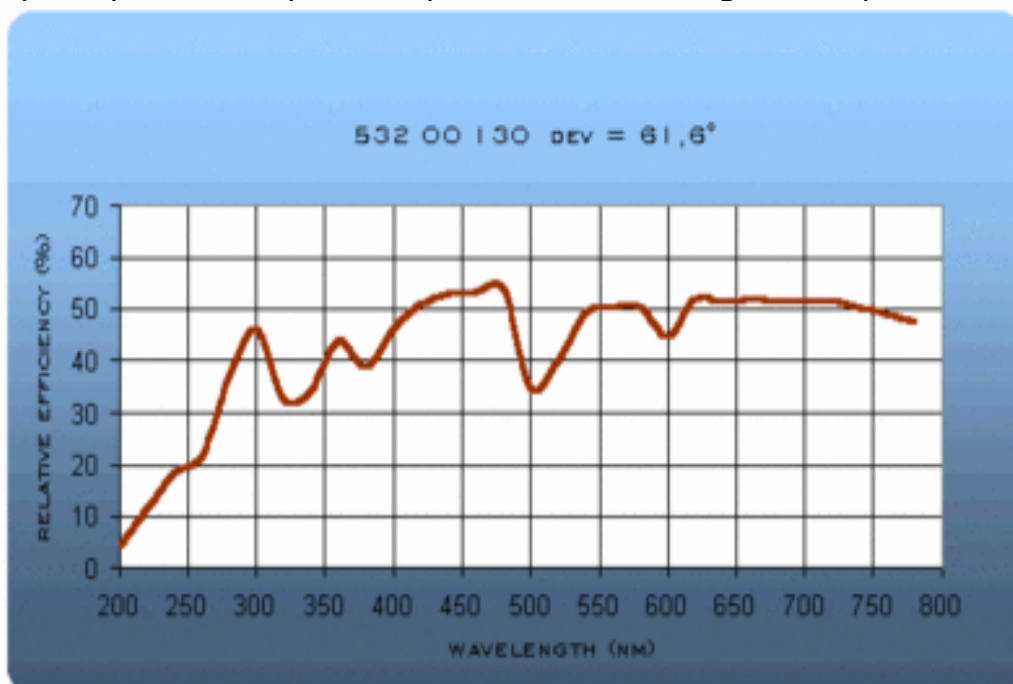


Figura 2

3.3.1- Esquema optic de l'espectrograf

La ret d'aquest espectrograf esta muntada segons el cercle de Rowland, en el que'l diafragma d'entrada, el de sortida i el centre de la ret estan situats sobre el mencionat cercle, que te un diamentre 2R que es pot calcular a traves de les dades de la ret i de les següents expressions:

$$L_a = R \cdot \cos \alpha$$

$$L_b = R \cdot \cos \beta$$

$$D_v = 61.6$$

substituint $L_a=100$, $L_b=94$ i $D_v=61.6$ i resolvent el sistema d'equacions resulta un **$R=113$** per **$\alpha=27.83$** i **$\beta=33.77$**

A continuacio es presenta un grafic d'aquest cercle amb els diferents angles per les freqüències compreses entre 200 i 800 nm , encara que a la practica aquest rang quedara reduït entre 300 i 800 nm ja que la ret es ineficient per sota dels 270 nm i que, a la vegada, aquestes radiacions d'UV son practicamente absorbides pel propi aire de l'ambient i ja no arribaran al detector.

El grafic mostra els angles ω del posicionat del goniometre per diferentes radiacions que van des de 42.2 fins a 147.48 ° dins del rang util de 300 a 800 nm El punt de rotacio del goniometre es el centre del cercle de Rowland. i es pot observar que l'angle ω es igual al doble del angle de dispersio β per simple deduccio de geometria basica i a la vegada el detector te que girar segons l'angle δ a mida que es va desplaçant a fi de conseguir la maxima eficiencia de deteccio.

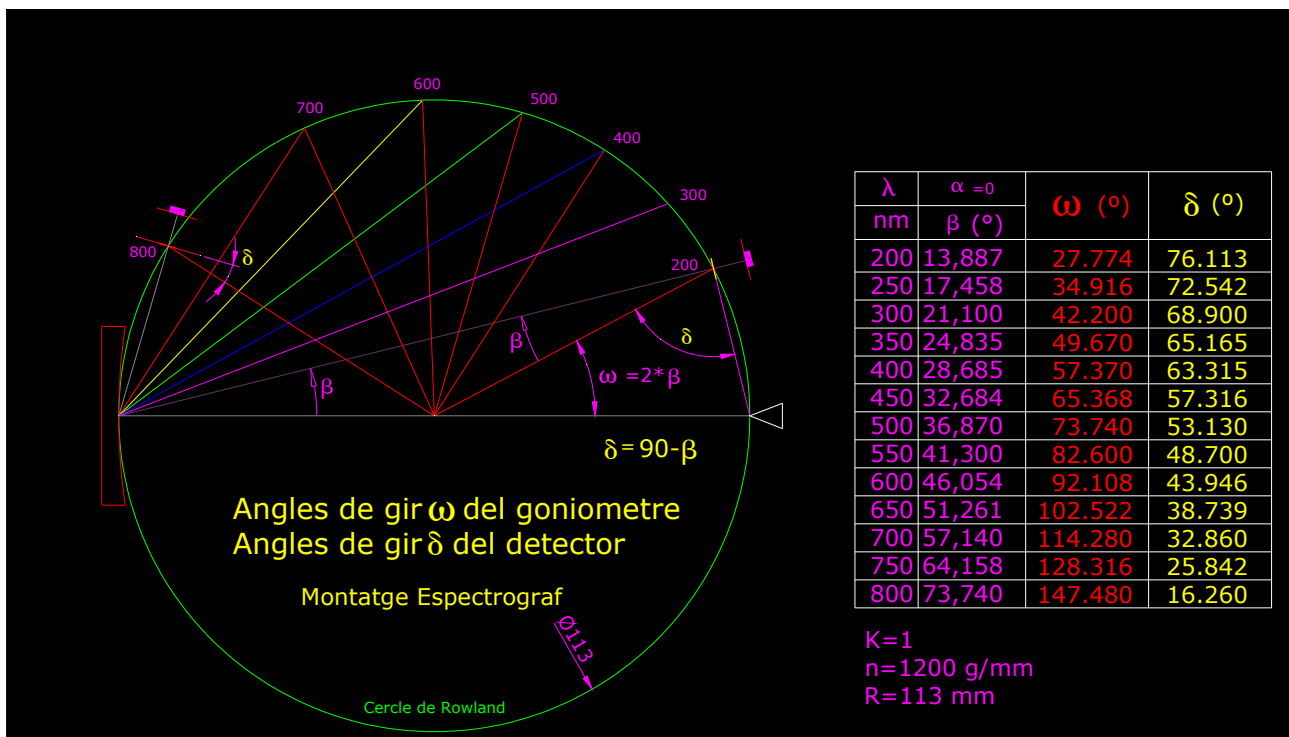


Figura 3

3.3.2- Esquema optic de l'espectrograf. Solapat espectral

Imaginem un ventall de raigs que parteixen desde un punt ideal, situat sobre el cercle de Rowland, i que incideix sobre la ret amb angle $\alpha=0$ i una apertura numerica $NA=\text{sen } \Omega$ que va desde 0 fins a 0.111 pels diferents raigs. Aquest ventall esta constituït per un raig principal i vuit mes equidistants pero cada vegada mes marginals de radiacio policromatica que cobreix 25x25 mm

Per cada angle β del raig principal li correspond una longitud d'ona que compleix l'equacio particular d'aquesta ret $\lambda=10^6 \text{ sen } \beta / k * n$ amb un punt ideal de focus situat sobre el cercle de Rowland. En el cas que β fos igual a β_i i tambe igual a β_s tendriam un cas ideal de difraccio en la que tots els raigs monocromatic marginals difractats anirien a parar a un sol punt del detector i amb coincidencia amb el focus del raig principal. Es a dir a cada punt del detector no mes arribaria radiacio monocromatica

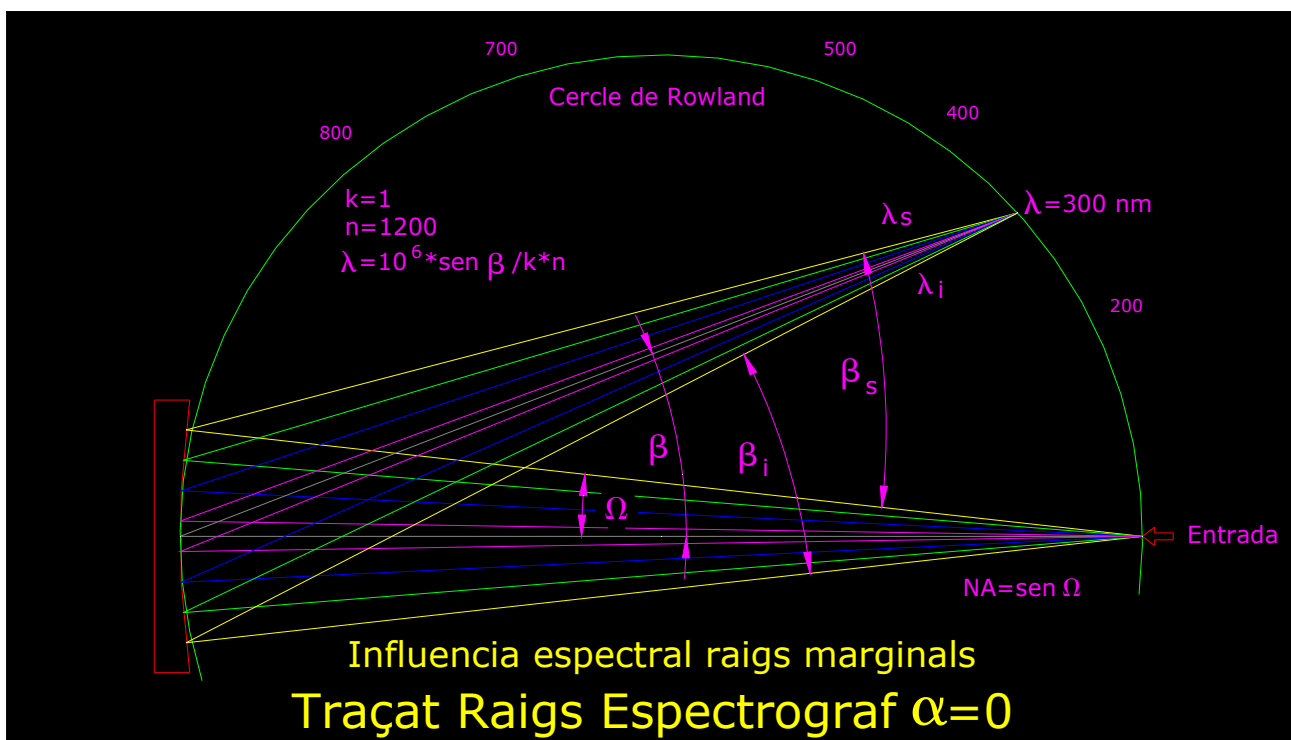


Figura 4

A la practica aquesta situacio ideal no es dona. Anem a veure d'estudiar la influencia de l'apertura d'entrada dels raigs marginals que fan que puguin arribar barrejades diferents freqüencies sobre el detector.

Amb un sistema de Cad calcularem per cada radiacio nominal entre 200 i 750 nm, per cada apertura numerica d'entrada, els corresponents angles β_i i β_s i despres aplicarem la formula $\lambda_i = 10^6 \text{ sen } \beta_i / k * n$ per cada angle β_i , i similarmet pels β_s , per calcular les corresponents longituds d'ona λ_i i λ_s .

A continuacio es presenta una taula de valors en la que amb funcio de les longituds d'ona nominals es donen els valors λ - λ_i i tambe els λ - λ_s per cada raig marginal amb les seves apertures numeriques NA

λ	NA=0.111 s	NA=0.111 i	NA=0.079 s	NA=0.079 i	NA=0.047 s	NA=0.047 i	NA=0.016 s	NA=0.016 i
200	1,26	1,19	0,64	0,62	0,23	0,22	0,02	0,03
300	1,92	1,76	0,97	0,91	0,34	0,33	0,04	0,04
400	2,61	2,31	1,31	1,20	0,46	0,44	0,05	0,05
500	3,35	2,83	1,66	1,48	0,58	0,55	0,06	0,06
600	4,17	3,31	2,05	1,74	0,71	0,65	0,08	0,07
700	5,22	3,69	2,5	1,96	0,85	0,74	0,09	0,09
750	6,06	3,78	2,82	2,03	0,94	0,77	0,1	0,09

A continuacio es presenten les dades de la taula anterior amb forma grafica on es pot apreciar molt facilment els següents punts:

- El solapat o barreja espectral es unes 5 vegades mes intens per les baixes freqüències que per les altes
- Les freqüències barrejades sempre estan per davall de la freqüència nominal
- Per atenuar aquest fenomen del solapat freqüencial hi ha que reduir l'entrada dels raigs marginals a través de l'apertura d'entrada

Solapat Espectral Raigs Marginals

$$\lambda = \lambda_n - \Delta Y$$

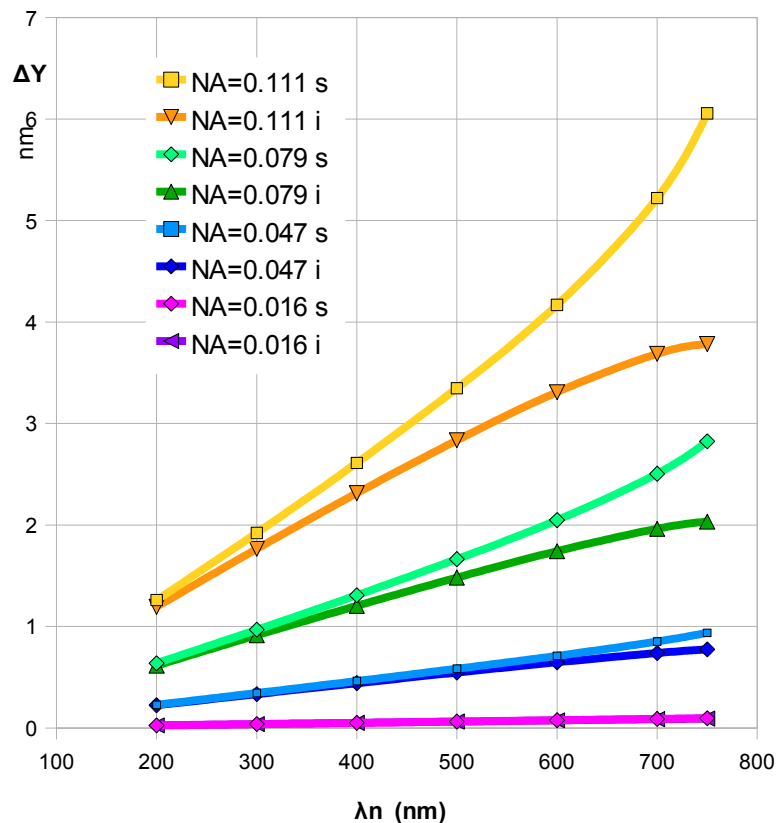


Figura 5

3.4 -Calcul del poder separador del espectrograf : $d\omega/d\lambda$

Partim de la equació general de la ret

$$\text{sen } \alpha + \text{sen } \beta = k \cdot n \cdot \lambda \cdot 10^{-6}$$

Si $\alpha = \text{constant}$, i $\omega = 2 \cdot \beta$, diferenciant aquestes equacions queda:

$$\text{cos } \beta \cdot d\beta = k \cdot n \cdot 10^{-6} \cdot d\lambda$$

$$d\omega = 2 \cdot d\beta$$

substituint i reagrupant termes

$$d\omega/d\lambda = 2 \cdot k \cdot n \cdot 10^{-6} / \text{cos } \beta = 0.0024 / \text{cos } \beta \quad (\text{rad/nm})$$

o també el seu equivalent de:

$$d\omega/d\lambda = 0.1375 / \text{cos } \beta \quad (^\circ/\text{nm})$$

Un altra forma de presentar aquesta equació es l'inversa de l'anterior amb funcio del desplaçament tangencial del detector. Si $R = 113 \text{ mm}$

$$d\lambda/dx = (1/0.0024 \cdot R) \cdot \text{cos } \beta = 7.37 \cdot \text{cos } \beta \quad (\text{nm/mm})$$

Amb aquestes expressions es pot veure que'l poder separador es variable i depend de l'angle de dispersio β de la ret i que per explorar des de 200 fins a 800 nm el goniometre te que girar des de 27.77 fins a 147.48 $^\circ$; es a dir un increment de 119.7 $^\circ$. També es pot apreciar directament a la figura següent que'l poder separador angular de la ret es mes del doble a 800 que a 200 nm

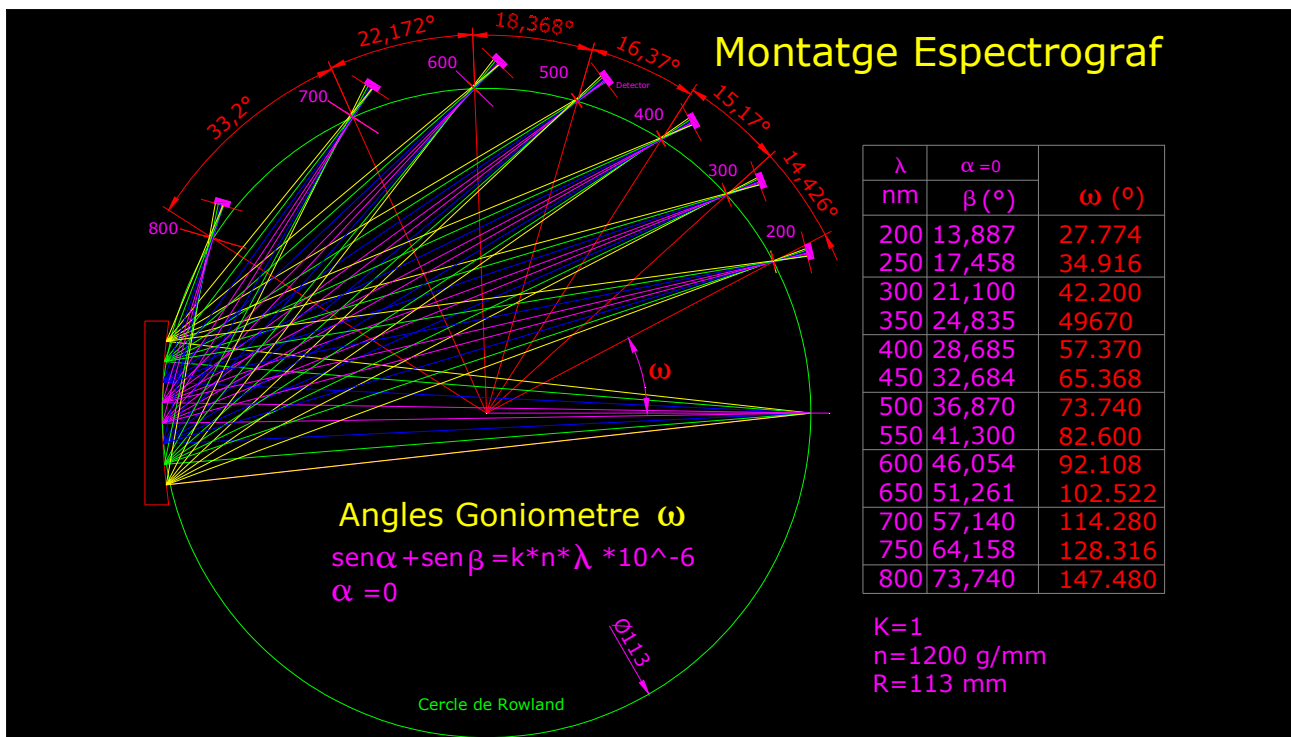


Figura 6

3-4.1 -Taula 1 Angles β de dispersio, Gir ω del goniometre, Poder de dispersio del espectrograf i Gir δ del detector

λ (nm)	sen α +sen $\beta=K*n*\lambda*10^{-6}$		$d\omega/d\lambda=2*n*k/\cos \beta$			
	n=1200 $n*\lambda*10^{-6}$	$\alpha=0^\circ$ β	$\omega=2*\beta$ ω	$\delta=90-\beta$ δ	$d\omega/d\lambda$ °/nm	$d\lambda/dx$ nm/mm
200	0,24	13,89	27,77	76,11	0,142	7,155
210	0,25	14,60	29,19	75,40	0,142	7,132
220	0,26	15,31	30,62	74,69	0,143	7,109
230	0,28	16,02	32,04	73,98	0,143	7,084
240	0,29	16,74	33,48	73,26	0,144	7,058
250	0,3	17,46	34,92	72,54	0,144	7,031
260	0,31	18,18	36,36	71,82	0,145	7,002
270	0,32	18,91	37,81	71,09	0,145	6,972
280	0,34	19,63	39,27	70,37	0,146	6,942
290	0,35	20,37	40,73	69,63	0,147	6,909
300	0,36	21,10	42,20	68,90	0,147	6,876
310	0,37	21,84	43,68	68,16	0,148	6,841
320	0,38	22,58	45,16	67,42	0,149	6,805
330	0,4	23,33	46,66	66,67	0,150	6,768
340	0,41	24,08	48,16	65,92	0,151	6,729
350	0,42	24,83	49,67	65,17	0,152	6,688
360	0,43	25,59	51,19	64,41	0,152	6,647
370	0,44	26,36	52,72	63,64	0,153	6,604
380	0,46	27,13	54,26	62,87	0,155	6,559
390	0,47	27,90	55,81	62,10	0,156	6,513
400	0,48	28,69	57,37	61,31	0,157	6,465
410	0,49	29,47	58,94	60,53	0,158	6,416
420	0,5	30,26	60,53	59,74	0,159	6,365
430	0,52	31,06	62,13	58,94	0,161	6,313
440	0,53	31,87	63,74	58,13	0,162	6,259
450	0,54	32,68	65,37	57,32	0,163	6,203
460	0,55	33,50	67,01	56,50	0,165	6,145
470	0,56	34,33	68,67	55,67	0,167	6,086
480	0,58	35,17	70,34	54,83	0,168	6,025
490	0,59	36,02	72,03	53,98	0,170	5,961
500	0,6	36,87	73,74	53,13	0,172	5,896
510	0,61	37,73	75,47	52,27	0,174	5,829
520	0,62	38,61	77,22	51,39	0,176	5,759
530	0,64	39,49	78,99	50,51	0,178	5,687
540	0,65	40,39	80,78	49,61	0,181	5,613
550	0,66	41,30	82,60	48,70	0,183	5,537
560	0,67	42,22	84,44	47,78	0,186	5,458
570	0,68	43,16	86,31	46,84	0,189	5,376
580	0,7	44,11	88,21	45,89	0,192	5,292
590	0,71	45,07	90,14	44,93	0,195	5,205
600	0,72	46,05	92,11	43,95	0,198	5,115
610	0,73	47,05	94,11	42,95	0,202	5,021
620	0,74	48,07	96,15	41,93	0,206	4,924
630	0,76	49,11	98,23	40,89	0,210	4,824
640	0,77	50,17	100,35	39,83	0,215	4,720
650	0,78	51,26	102,52	38,74	0,220	4,612
660	0,79	52,37	104,75	37,63	0,225	4,500
670	0,8	53,51	107,03	36,49	0,231	4,382
680	0,82	54,69	109,37	35,31	0,238	4,260
690	0,83	55,89	111,79	34,11	0,245	4,133
700	0,84	57,14	114,28	32,86	0,253	3,999
710	0,85	58,43	116,86	31,57	0,263	3,859
720	0,86	59,77	119,54	30,23	0,273	3,711
730	0,88	61,16	122,33	28,84	0,285	3,555
740	0,89	62,62	125,25	27,38	0,299	3,389
750	0,9	64,16	128,32	25,84	0,315	3,213
760	0,91	65,78	131,57	24,22	0,335	3,023
770	0,92	67,52	135,04	22,48	0,360	2,818
780	0,94	69,39	138,78	20,61	0,391	2,594
790	0,95	71,44	142,88	18,56	0,432	2,346
800	0,96	73,74	147,48	16,26	0,491	2,064

4 -Espectrograf o monocromador?

A continuacio passem a estudiar alguns aspectes d'aquestos dos tipus de muntatges i anem a veure si podem establir un criteri per la seva seleccio

La figura 5 presenta, pel muntatge espectrograf, la dispersio que produeix la ret a un ventall de raigs de radiacions policromaticques entre 200 i 800 nm. Aquest ventall de raigs cobreix un area d'iluminacio sobre la ret de 25x 25 mm amb una apertura numerica $NA = \sin 12.7^\circ/2 = 0.11$

La figura 6 presenta, a escala, un detall del traçat de raigs a nivell de l'apertura de sortida per una radiacio de 500 nm, utilitzant les dades especificques de la ret, i es pot apreciar que **un punt situat a l'apertura d'entrada es transforma a la sortida amb una linea $\delta w'$** . L'apertura de sortida tindria que tindre doncs un ample com a minim igual a **Am** per deixar passar tots els raigs marginals i que aquestos arribin al detector a fi de no perdre sensibilitat.

Tambe es pot apreciar que com mes marginals son els raigs -per exemple els grocs- el seu focus es va desplaçant cada vegada mes cap a l'esquerra dins l'area de les radiacions de menys frequencia.

El conjunt detector i apertura de sortida tenen que estar situats amb un pla ortogonal al raig principal que correspond detectar

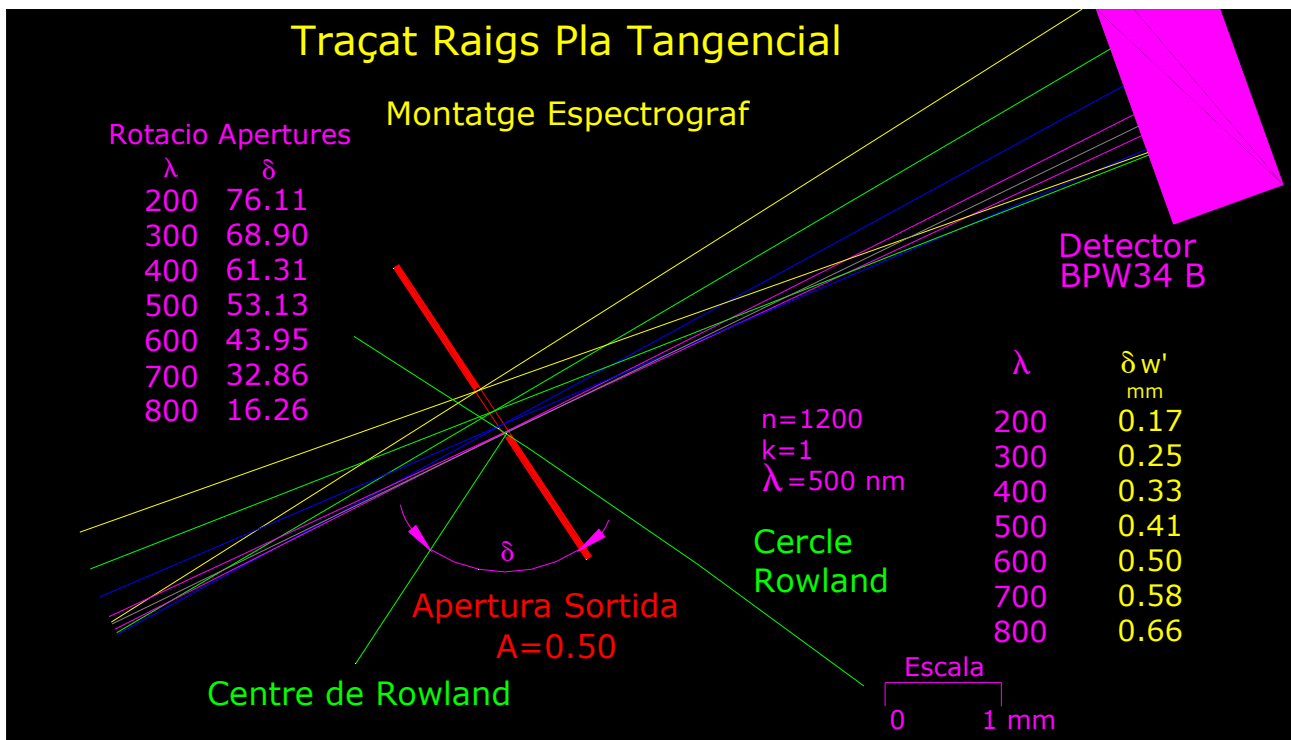


Figura 7

4-1 Muntatge Espectrograf $\alpha=0$

A continuació es presenten detalls de la transformada d'un punt, situat a l'apertura d'entrada, amb les seves imatges de sortida per les diferents radiacions entre 300 i 800 nm i per un angle fixe $\alpha=0$. Es pot veure com, al pla tangencial, un punt es transforma amb una línia $\delta w'$ i que'l seu tamany depend de la longitud d'ona de la radiació. Els gràfics també presenten la funció Z (mm) que dona l'astigmatisme o alçada dins del pla sagital d'aquest punt.

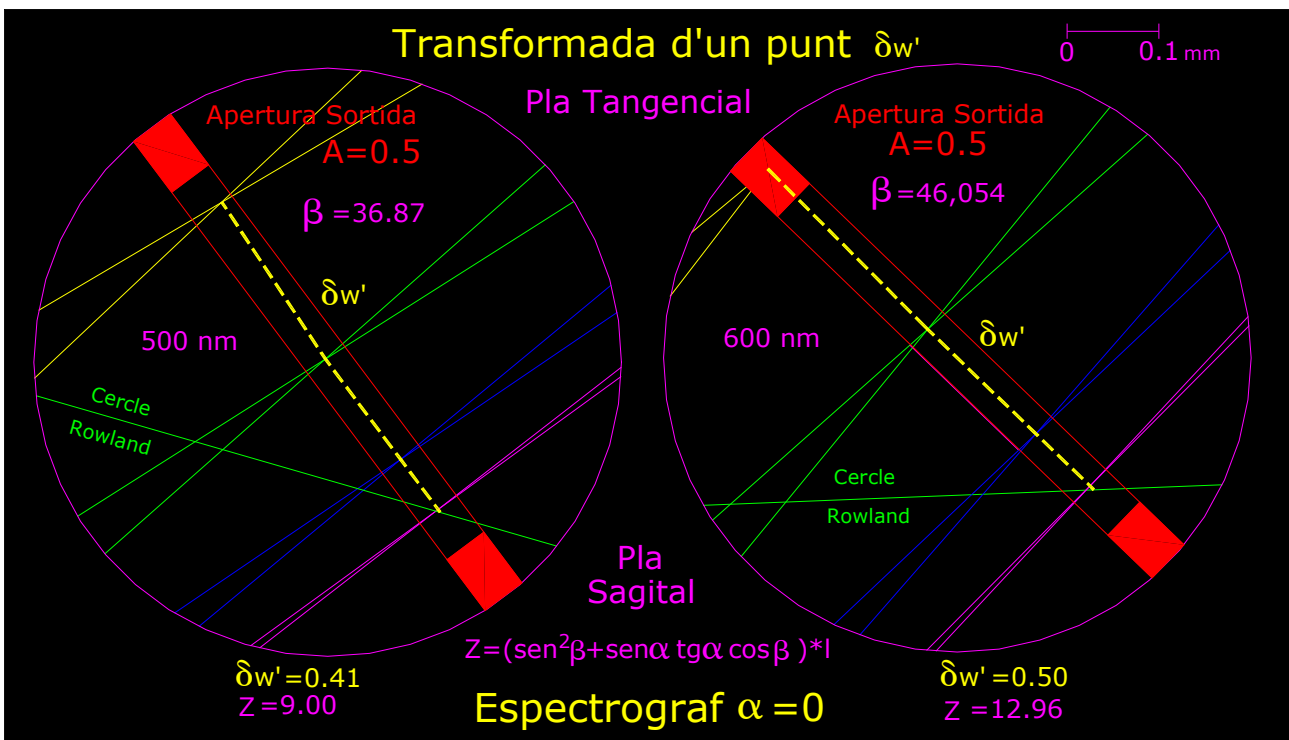
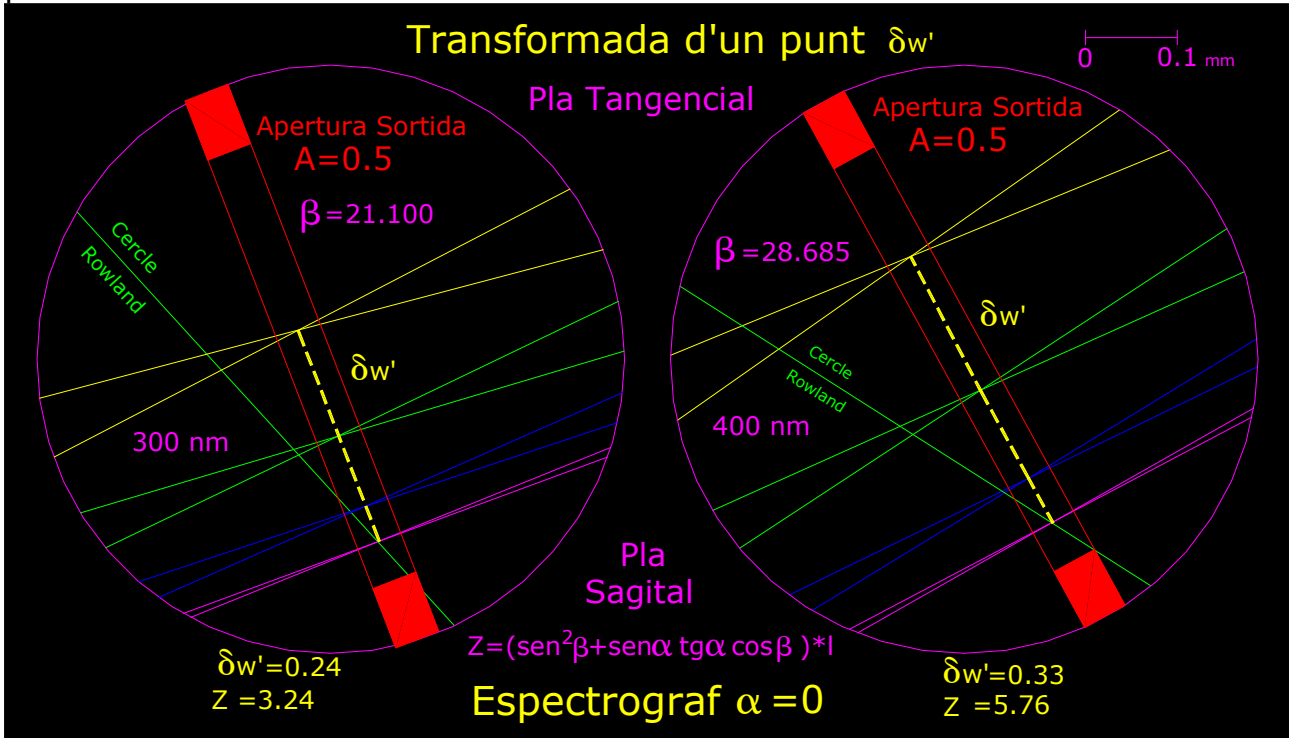


Figura 8

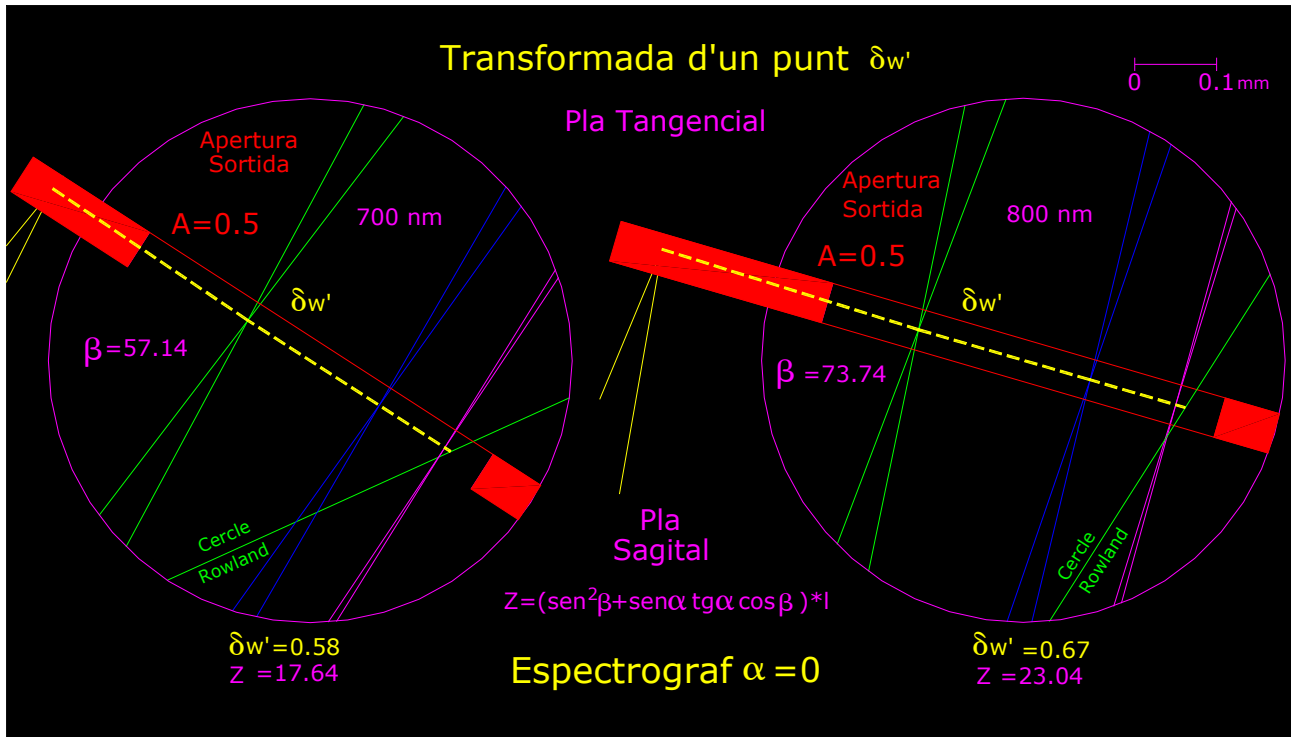


Figura 9

Es pot veure que per les longituds d'ona superiors a 600 nm els raigs marginals -els grocs- ja no entrarien per l'apertura de sortida de 0.5 mm, produint una perdua aparent de sensibilitat del sistema, encara que aquesta podria vindre compensada per l'eficiencia quantica mes alta del detector per aquestes radiacions. Tambe es pot comprovar que nomes el raig principal queda enfocat sobre el cercle de Rowland

Els grafics tambe presenten la funcio $Z = (\sin^2\beta + \sin\alpha \operatorname{tg}\alpha \cos\beta) * l$ que dona una idea de l'astigmatisme d'aquest muntatge al pla sagital, on l es la longitud del ratllat de la red i el seu valor es de 25 mm amb el nostre cas. Com es pot constatar el muntatge de Rowland esta ampliament afectat per aquesta aberracio ja que presenta uns valors compresos entre 3 i 23 mm. Hi haura que aplicar doncs algun dispositiu optic a l'apertura de sortida per lograr reenfocar aquesta dispersio de raigs, ja que'l detector BPW34 nomes te una superficie de 2.7x2.7 mm, si es vol que tota la radiacio difractada per la ret pugui arribar al detector.

Es pot veure com a mida que'l angle dels raigs marginals va augmentant tambe ho fa la distancia de pas per l'apertura de sortida Mes endavant estudiarem amb detall aquest fenomen.

4-2 Muntatge Espectrograf $\alpha=-10$

A continuació, com el cas anterior, es presenten detalls de la transformada d'un punt, situat a l'apertura d'entrada, amb les seves imatges de sortida per diferents radiacions entre 300 i 800 nm per un angle fixe $\alpha=-10$. Es pot veure que per aquest muntatge l'astigmatisme Z es molt més gran que pel cas anterior i que la transformada del punt ja no queda alineada a dins de l'apertura de sortida.

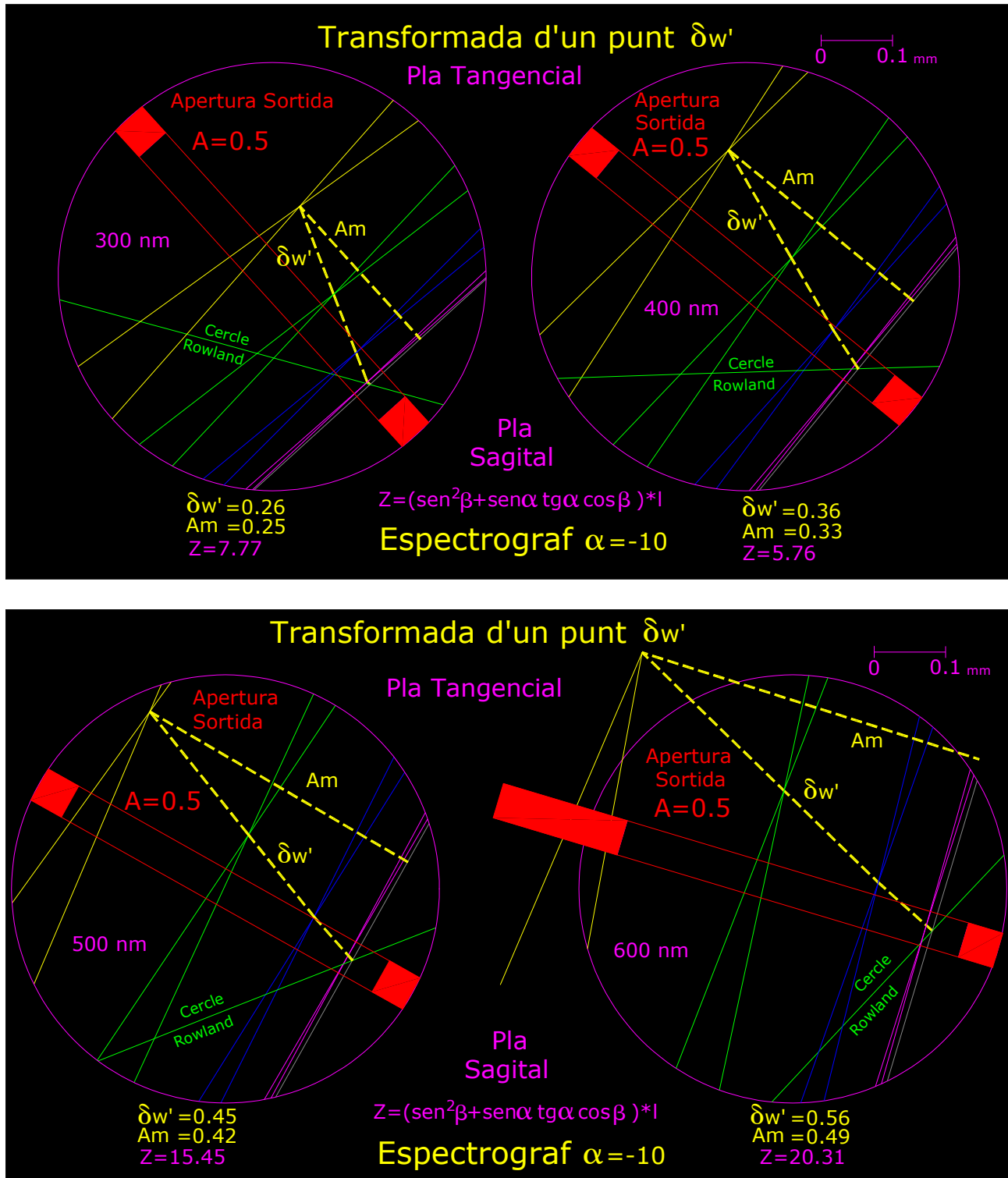
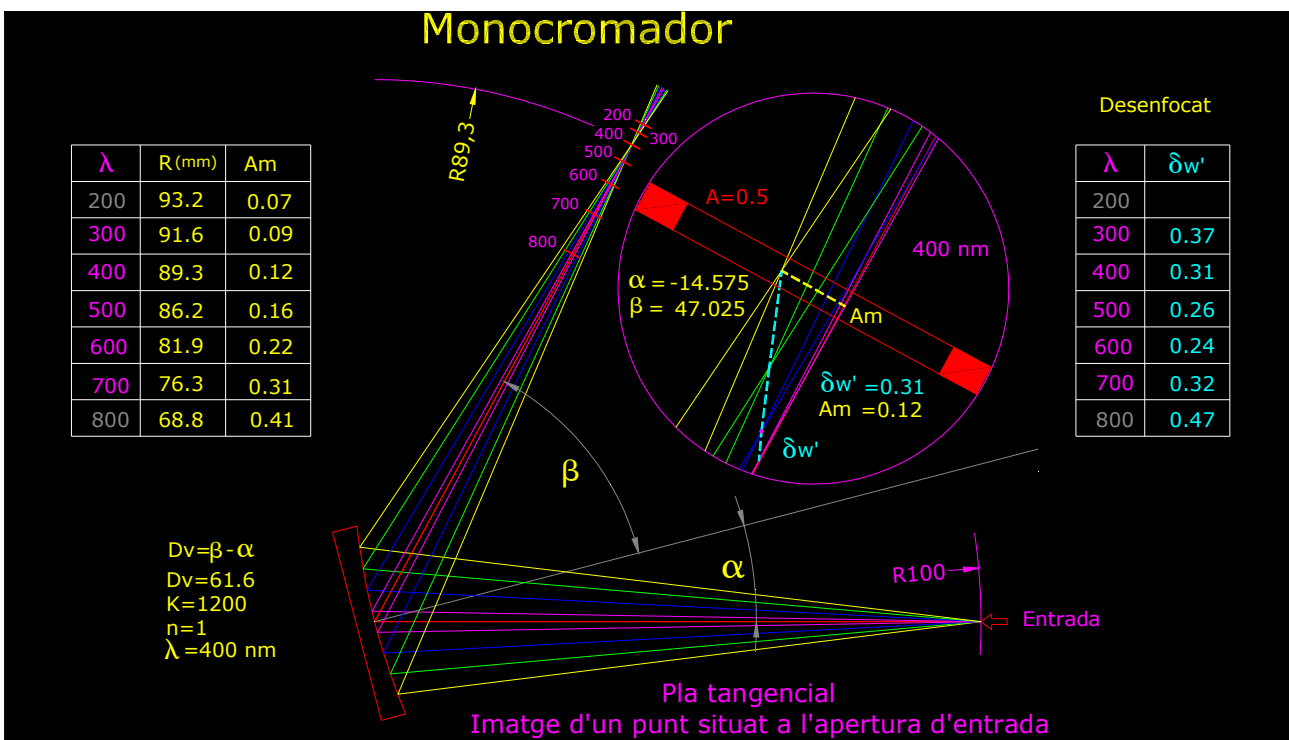
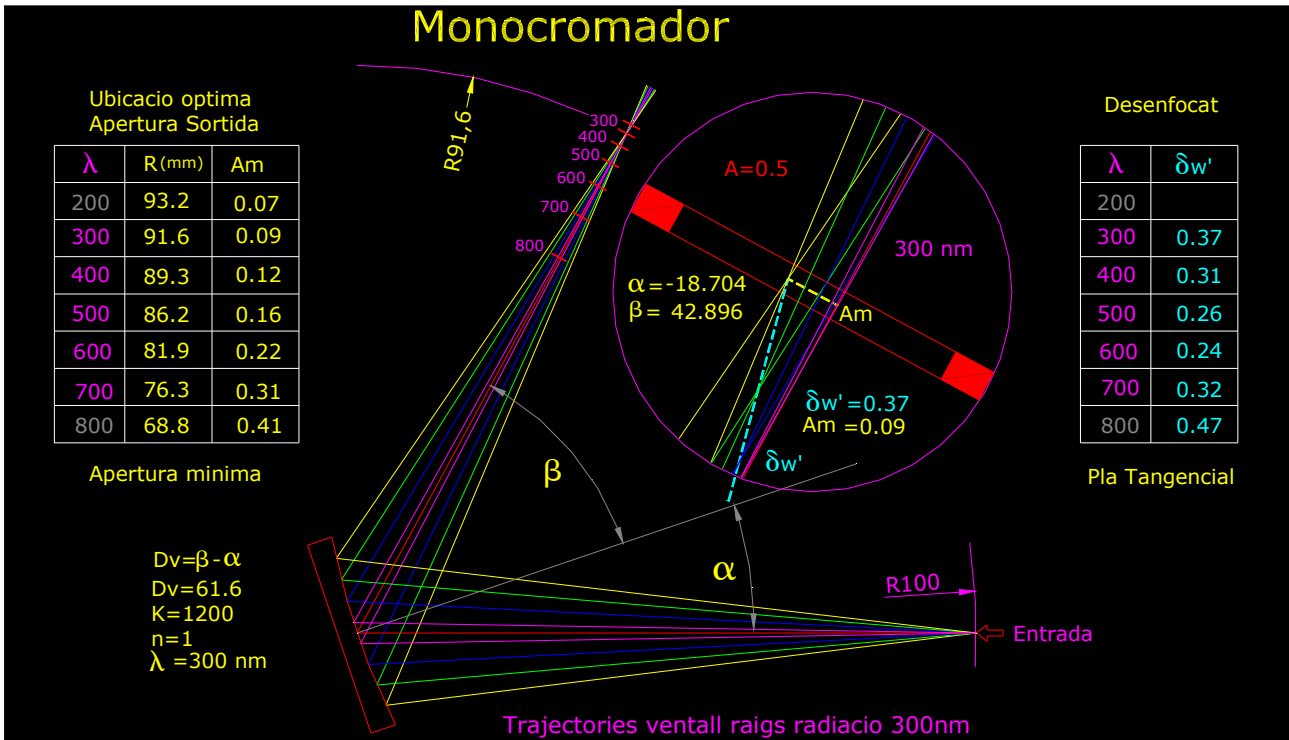


Figura 10

4-3.1 Muntatge Monocromador

A continuació es presenten les trajectories d'un ventall de 9 raigs amb funció de les diferents longituds d'ona i on es pot veure la transformada d'un punt d'entrada $\delta w'$, l'apertura mínima de sortida A_m i l'ubicació i radi R del braç òptic del monocromador per l'apertura de sortida. Cal destacar que aquesta apertura de sortida té que desplaçar-se cap al centre de rotació de la ret a mida que'l goniometre va girant la ret, per aconseguir les apertures mínimes A_m que aquí es mencionen. Aquest desplaçament aproximat total és de $68.8-91.6=22.8$ mm



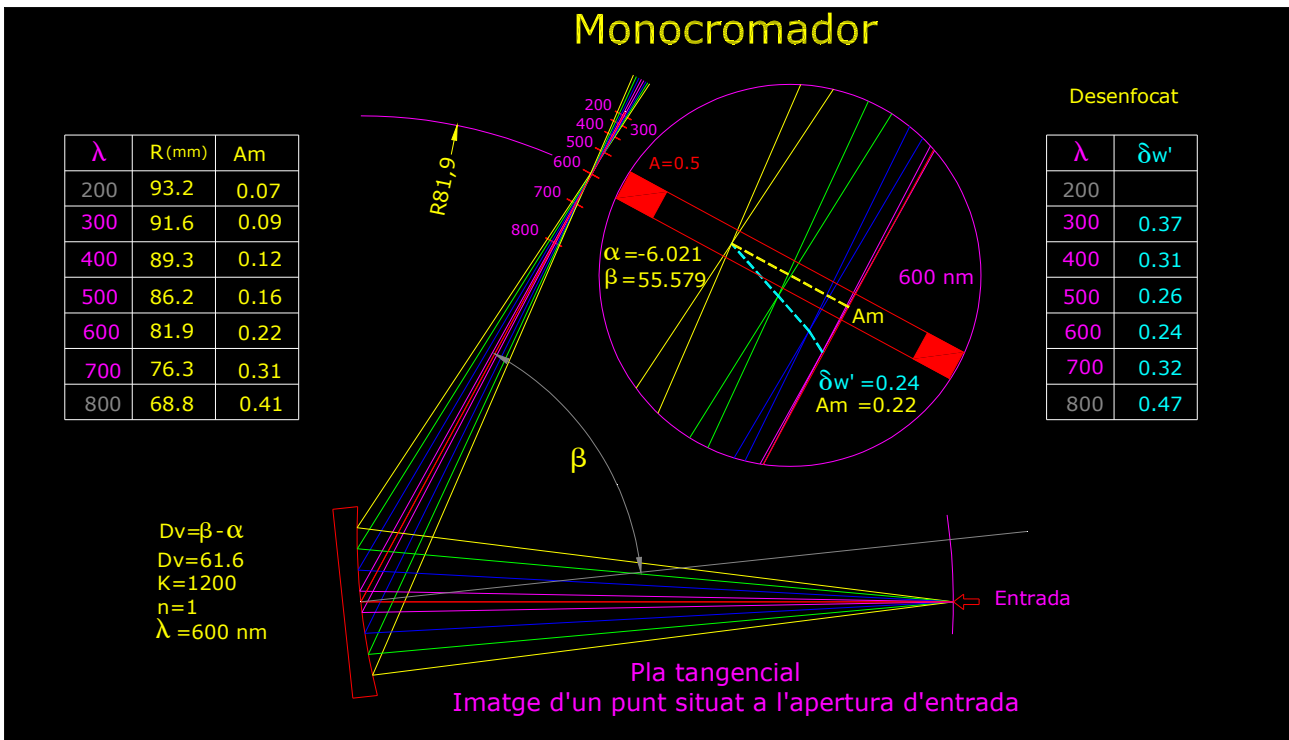
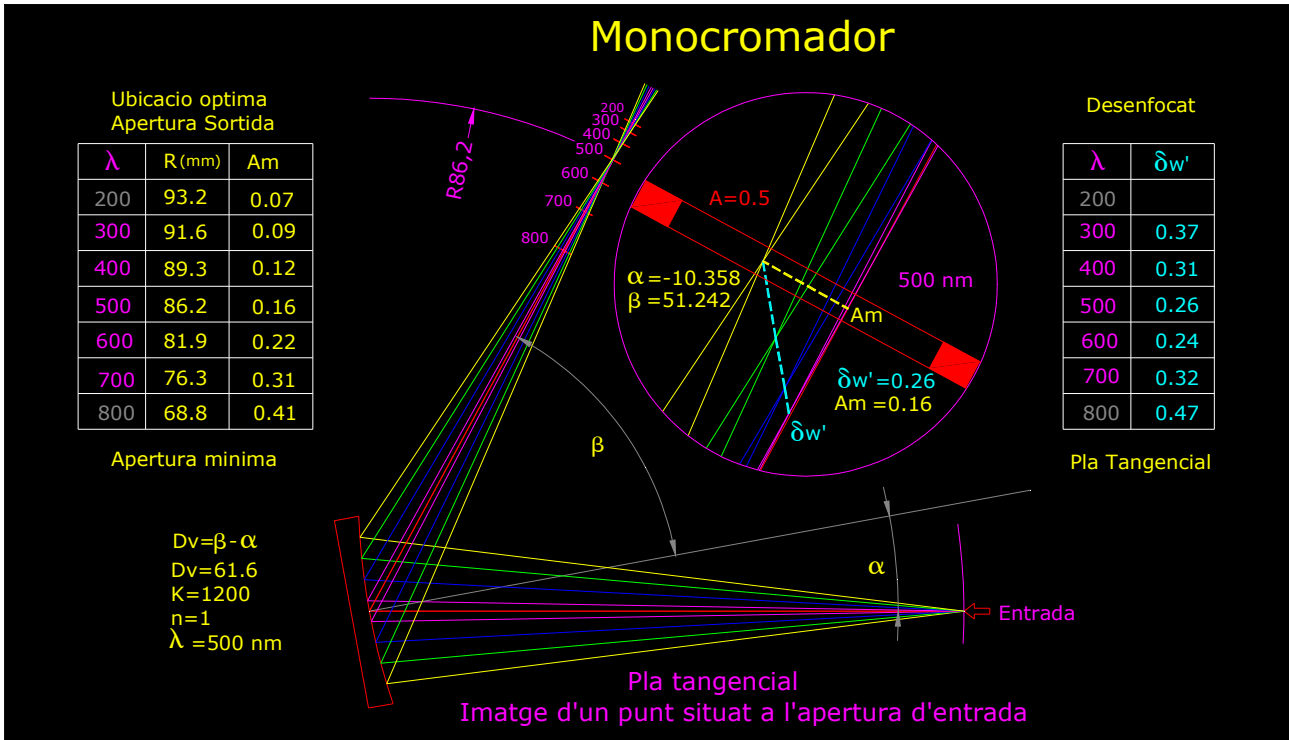


Figura 12

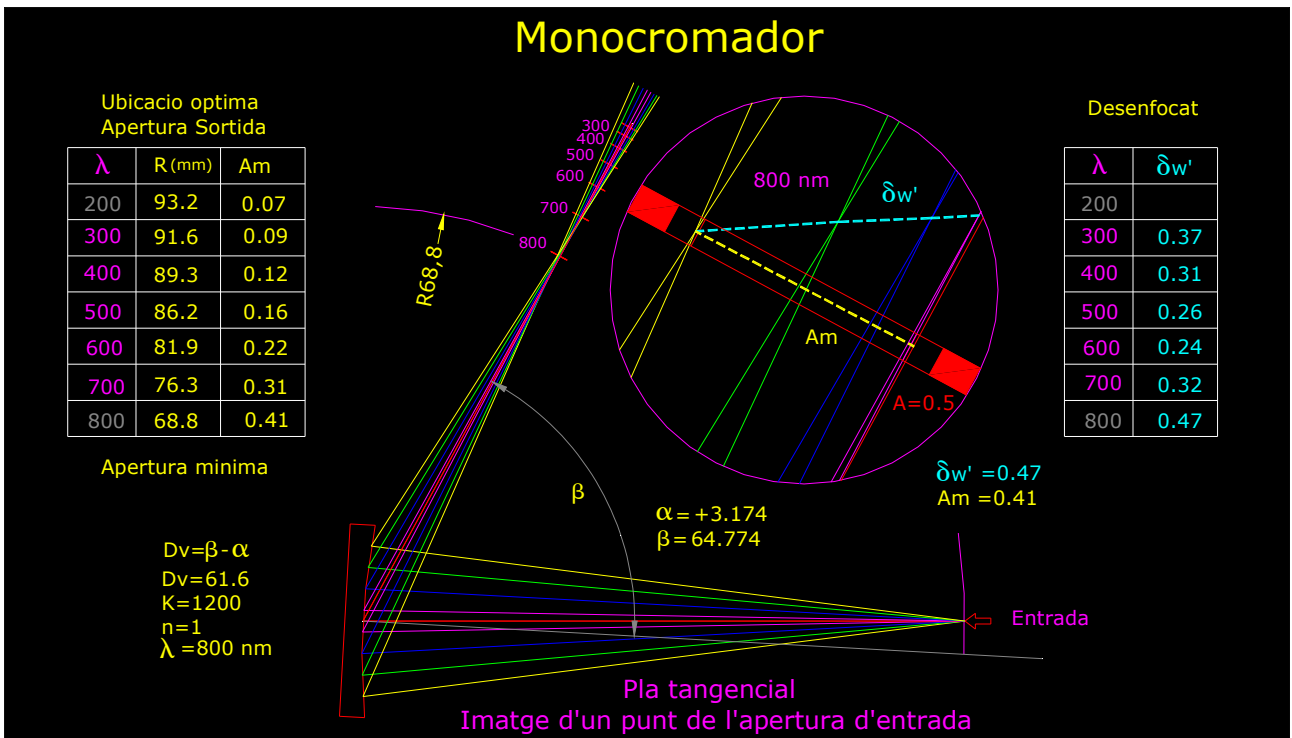
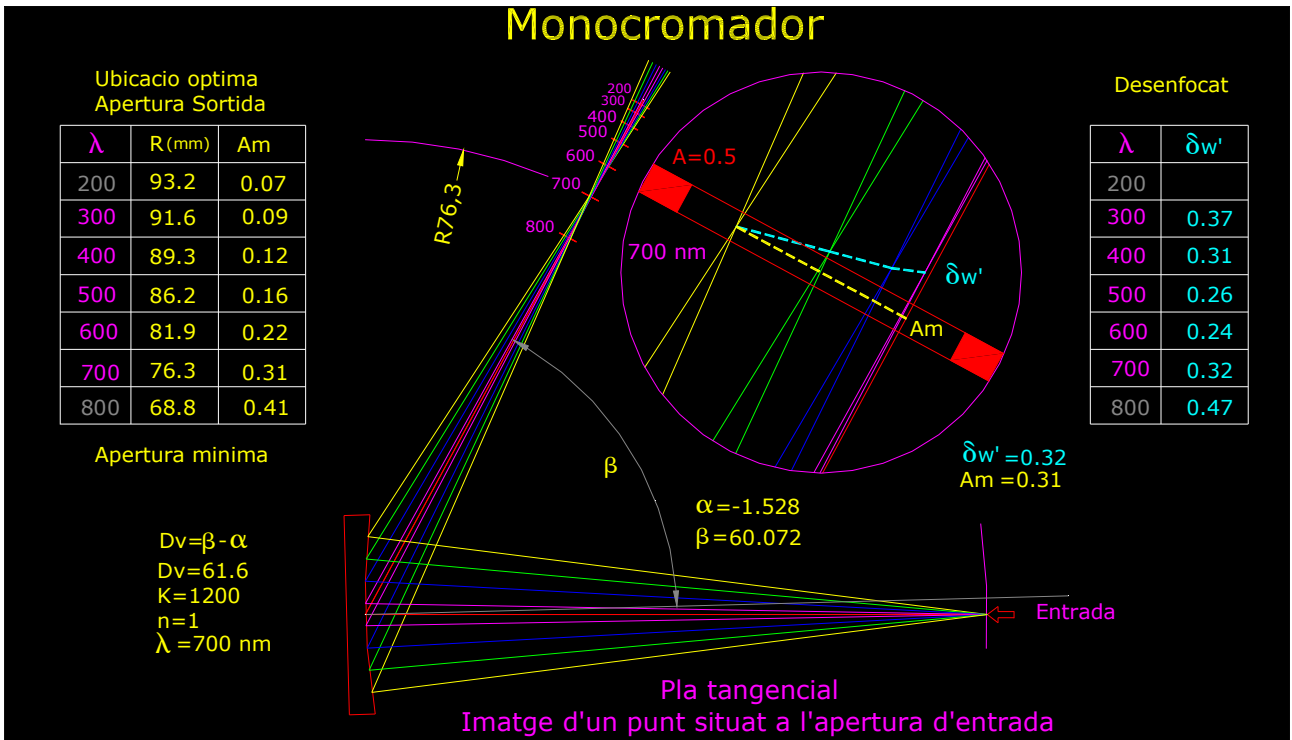


Figura 13

4-3.2 Astigmatisme Z i transformada $\delta w'$ del Monocromador

A continuació es presenta un detall de la transformada d'un punt d'entrada $\delta w'$ i també de la funció Z d'astigmatisme. Per aquest muntatge de monocromador l'astigmatisme va des de 13 fins a 20 mm al pla sagital.

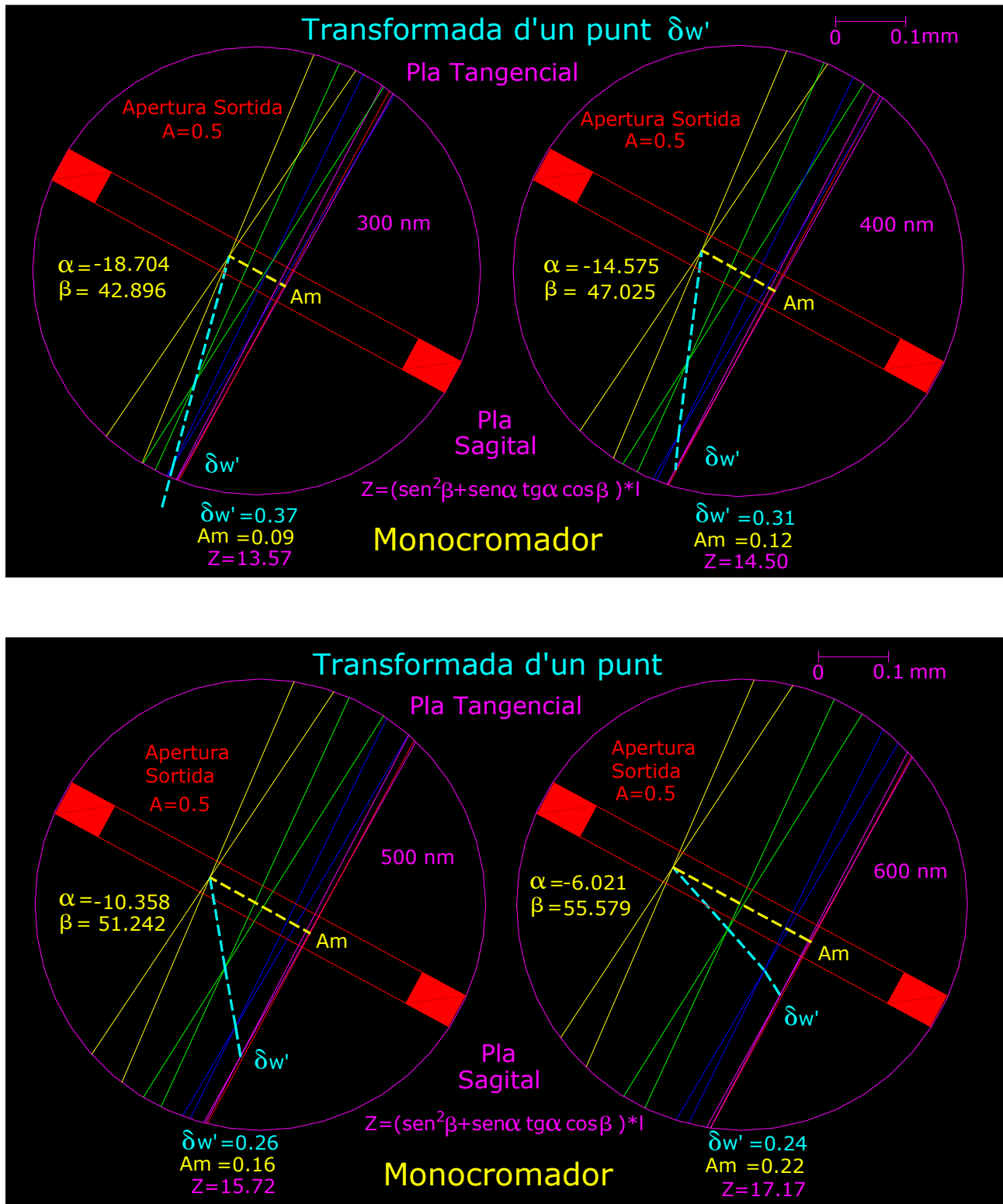


Figura 14

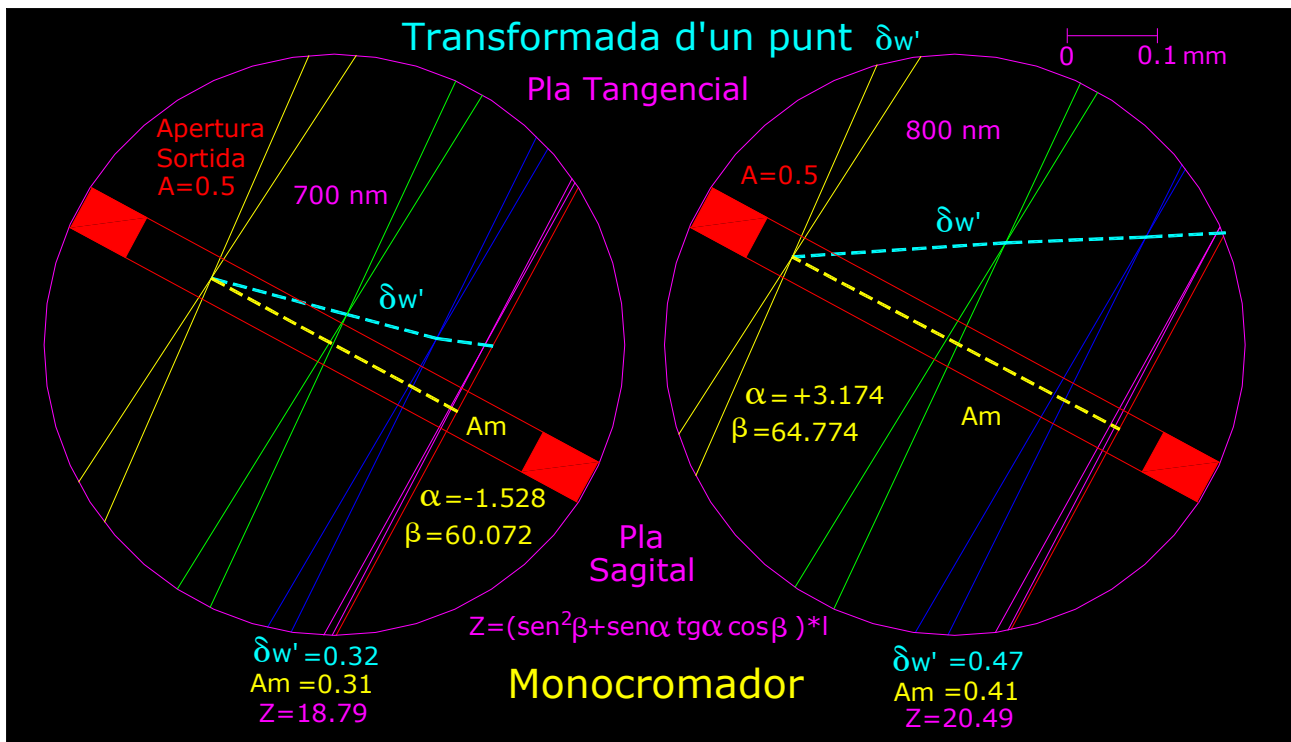
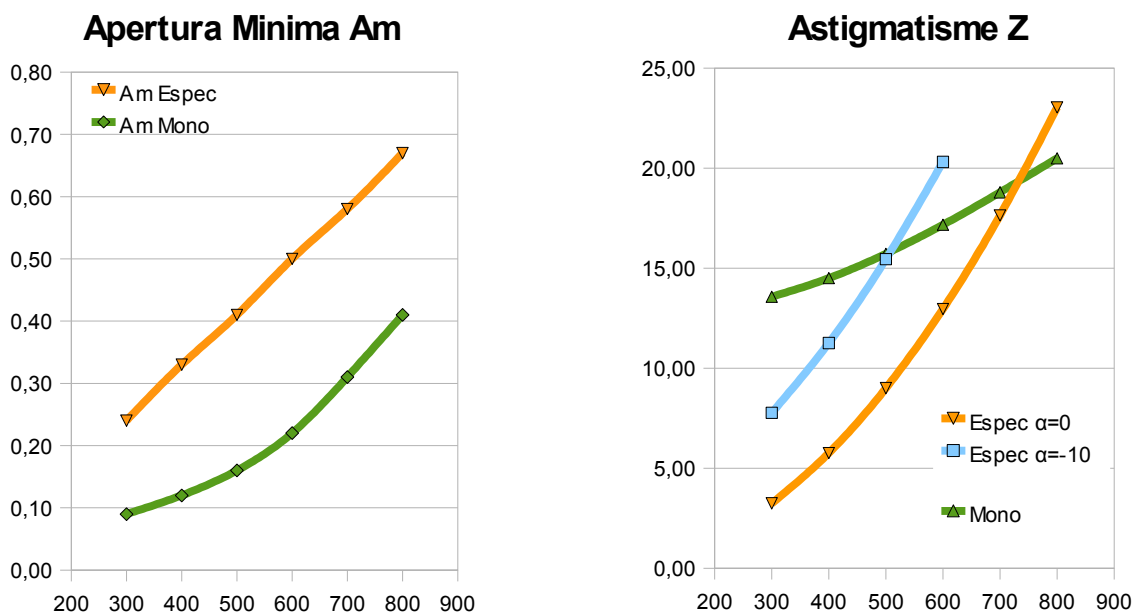


Figura 15

A continuació fem un petit resum de valoració dels dos tipus de muntatge comparant els valors **Am** i els d'astigmatisme **Z**. El muntatge espectrograf amb angle $\alpha=0$ es descarta ja que'l seu astigmatisme es un 50% mes alt que amb angle $\alpha=0$, encara que els valors **Am** siguin practicamente iguals. El muntatge monocromador necessita una apertura minima Am que es 1.7 vegades inferior a les del espectrograf amb $\alpha=0$, pero el seu astigmatisme es bastant superior fins a 700 nm que es on convergeixen aquestos valors. Veure les corbes següents



5- Desenfocat del raigs marginals sobre l'apertura de sortida

Sobre les figures anteriors dels traçats de raigs es pot calcular la dispersió o desenfocat que produeix cada parell de raigs marginals. Anem a fer aquestes mesures sobre els muntatges Espectrograf amb $\alpha=0$ i amb el Monocromador i calcularem les distàncies A_m per cada cas i després dibuixarem les seves gràfiques. Aquestes gràfiques, de més avall d'aquesta pàgina, poden ser útils per elegir les apertures de sortida més adients per cada experiment tenint present les longituds d'ona utilitzades.

Espectrograf $\alpha=0$

angles	$\lambda=300$	$\lambda=500$	$\lambda=700$	$\lambda=800$	NA
12,693	0,240	0,410	0,580	0,670	0,111
9,071	0,120	0,210	0,290	0,340	0,079
5,443	0,040	0,070	0,100	0,120	0,047
1,814	0,004	0,003	0,008	0,010	0,016
0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Monocromador

angles	$\lambda=300$	$\lambda=500$	$\lambda=700$	$\lambda=800$	NA
12,693	0,090	0,160	0,310	0,410	0,111
9,071	0,050	0,083	0,160	0,210	0,079
5,443	0,020	0,030	0,060	0,075	0,047
1,814	0,000	0,000	0,008	0,009	0,016
0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

