

Espectroscopía óptica por difracción

Gustavo Grinblat

Laboratorio 2 – Departamento de Física, FCEN, UBA

01 de Julio de 2024

Contextualización

Conocimiento previo dictado en la materia

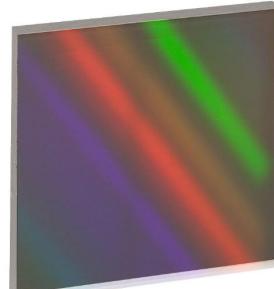
- Difracción de Fresnel y Fraunhofer
- Difracción por una rendija
- Lentes y sistemas formadores de imágenes

Marco teórico de difracción (Física 2)

- Fórmula de difracción de Kirchoff
- Aproximaciones de Fresnel y Fraunhofer
- Aberturas rectangulares y circulares
- Resolución de sistemas formadores de imágenes
- Difracción por N rendijas en una pantalla opaca
- Redes de difracción
- Aplicaciones espectrales

Esquema de la clase

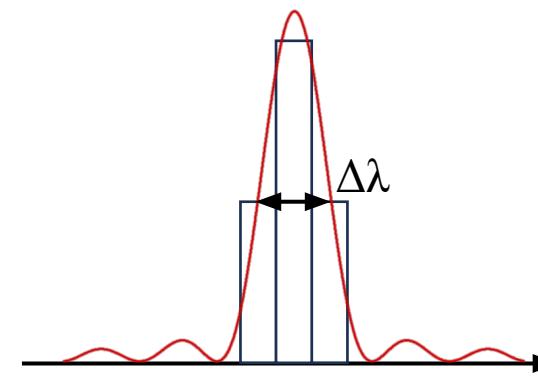
- Repaso y actividades demostrativas



- Redes de difracción



- Fuente monocromática y no monocromática



- Eficiencia de dispersión de una red



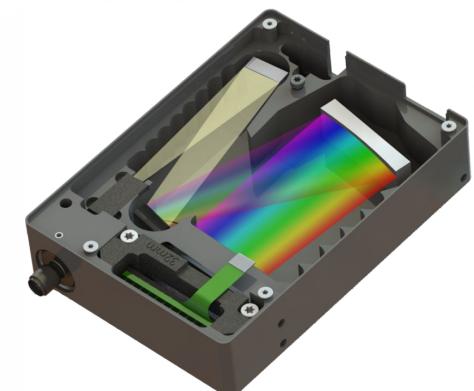
- Construcción de un espectrómetro

- Resolución y rendimiento del instrumento



- Espectroscopía de absorbancia

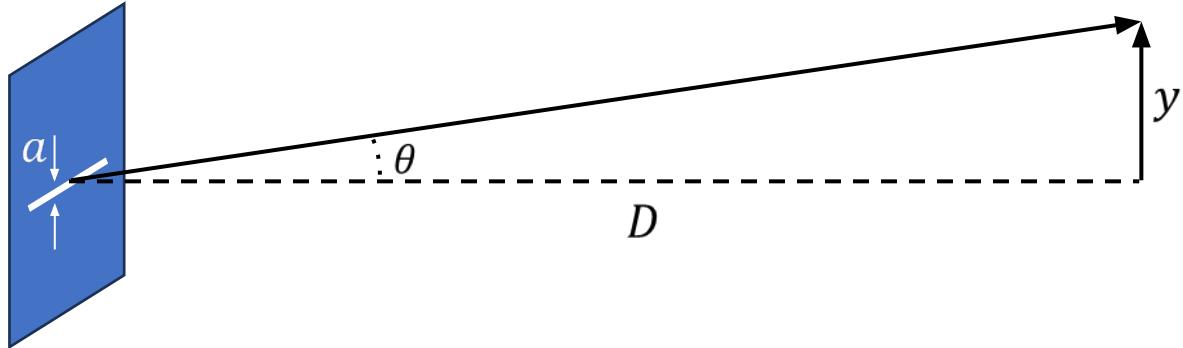
- Experimentos propuestos



Repaso

T=0'

Difracción por una rendija



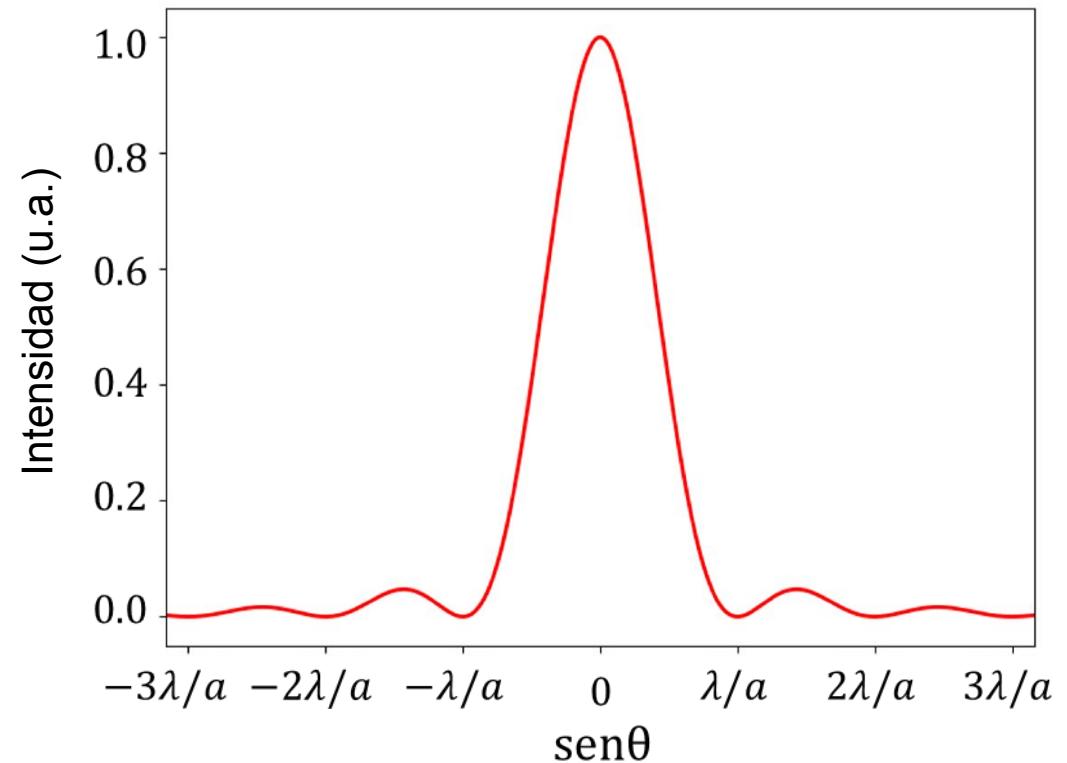
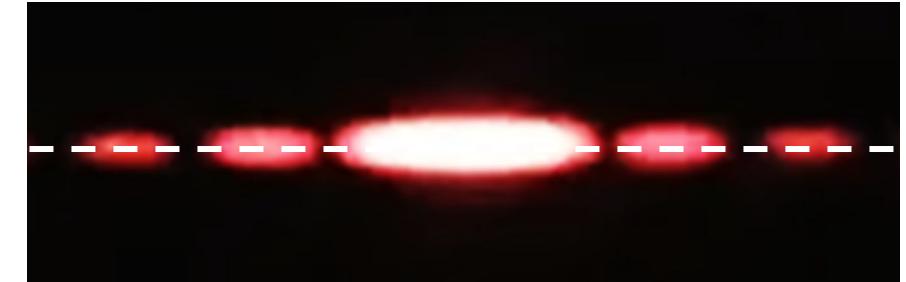
Mínimos de difracción

$$a \sin \theta_n = n\lambda, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Intensidad de luz difractada en un ángulo θ

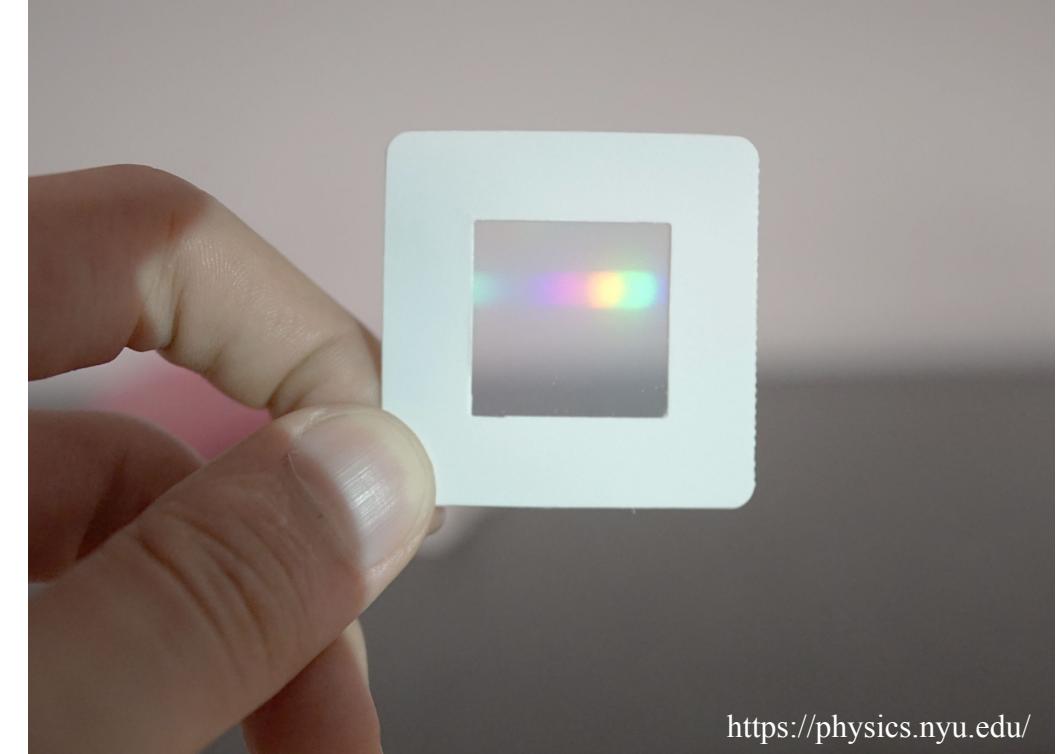
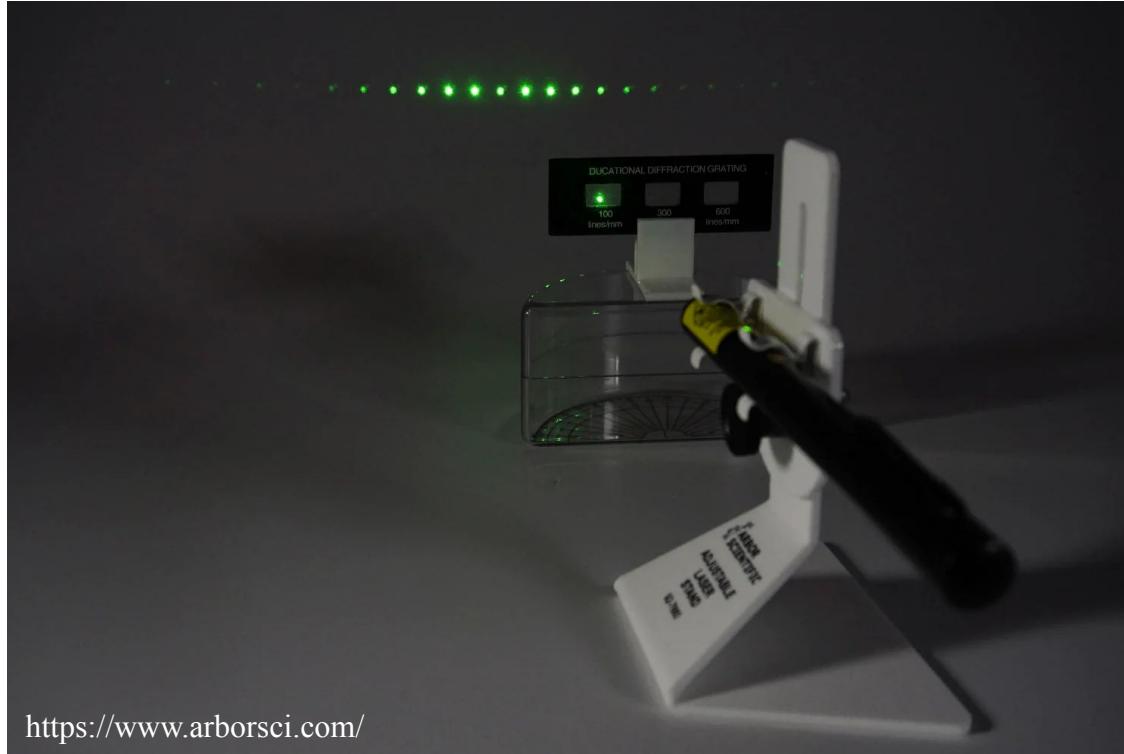
$$I(\theta) = I_0 \left(\frac{\sin(\beta)}{\beta} \right)^2$$

$\beta = \frac{\pi a}{\lambda} \sin \theta = \frac{\pi a y}{D \lambda}$



Actividades demostrativas

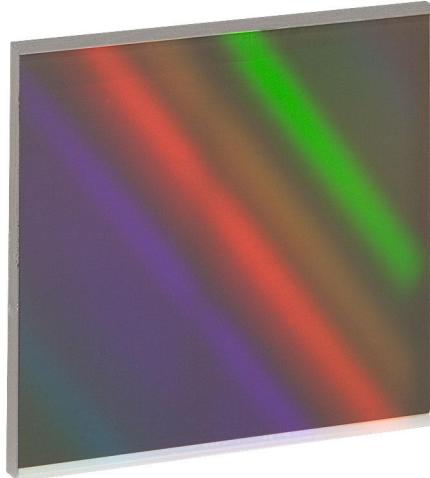
T=5'



Red de difracción – Fuente monocromática

T=15'

Una red de difracción es un arreglo periódico (por ejemplo, de rendijas/ranuras) estructurado en un tamaño comparable al de longitud de onda de la luz.



Thorlabs.com

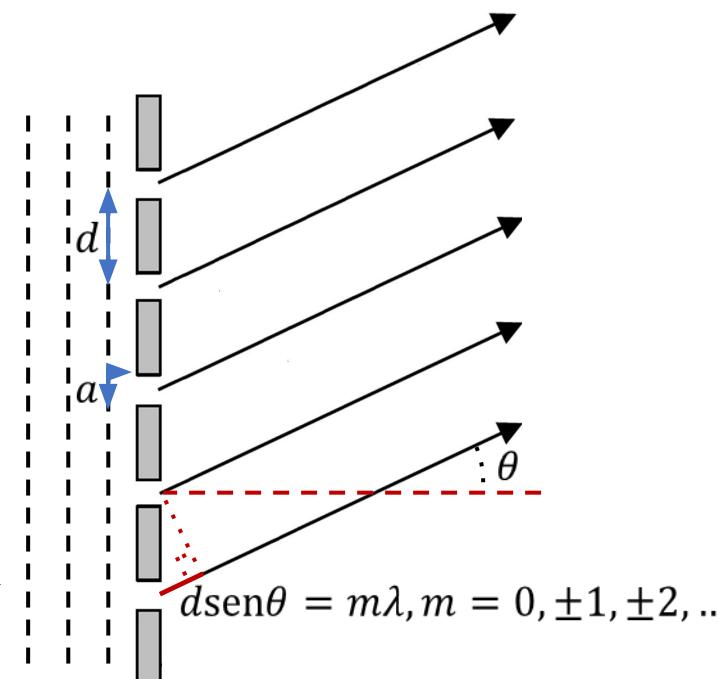
Ecuación general de la red

$$d(\operatorname{sen}\theta - \operatorname{sen}\theta_0) = m\lambda$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Intensidad de máximos primarios y secundarios

$$I_p = I_0 N^2 \left(\frac{\operatorname{sen}(\beta)}{\beta} \right)^2 ; \quad I_s = \frac{I_p}{1 + (N^2 - 1) \operatorname{sen}^2(\gamma)}$$

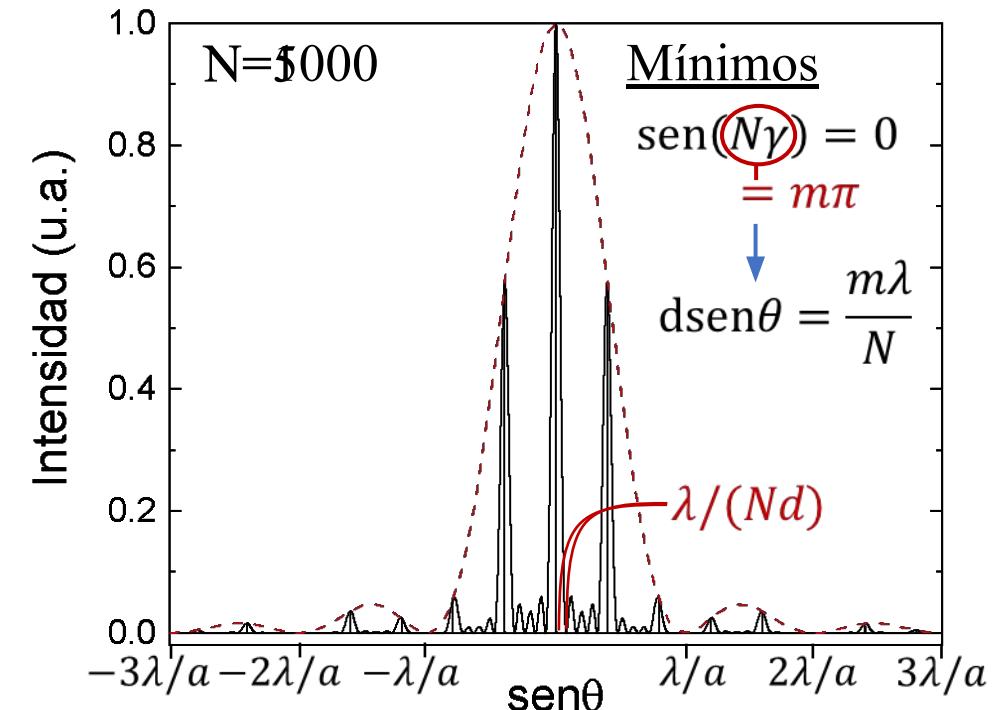


Intensidad de luz difractada en un ángulo θ

$$I(\theta) = I_0 \left(\frac{\operatorname{sen}(\beta)}{\beta} \right)^2 \times \left(\frac{\operatorname{sen}(N\gamma)}{\operatorname{sen}(\gamma)} \right)^2$$

Nº de ranuras

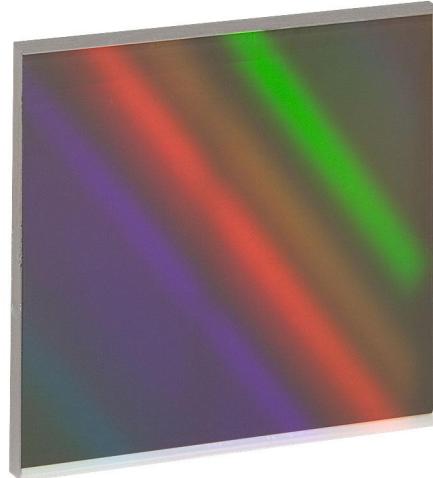
$$= (\pi a / \lambda) \operatorname{sen}\theta \quad = (\pi d / \lambda) \operatorname{sen}\theta$$



Red de difracción – Fuente no monocromática

T=25'

Si la luz es no monocromática, se dispersa en ángulos diferentes según la longitud de onda.



Thorlabs.com

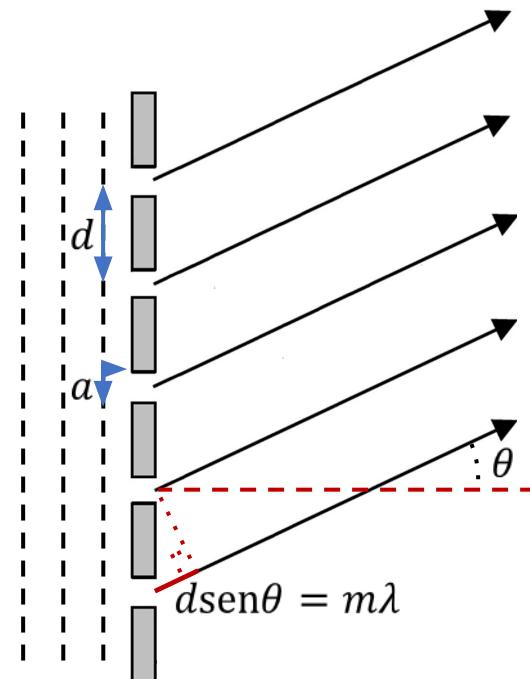
Ecuación general de la red

$$d(\sin\theta - \sin\theta_0) = m\lambda$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

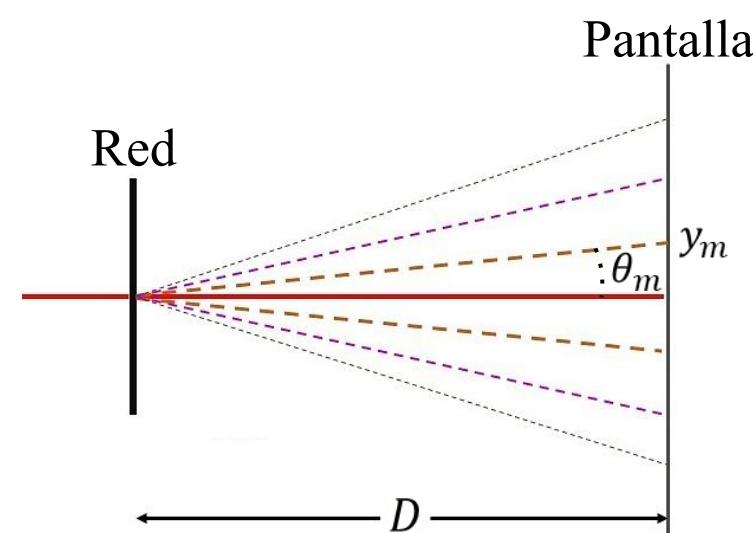
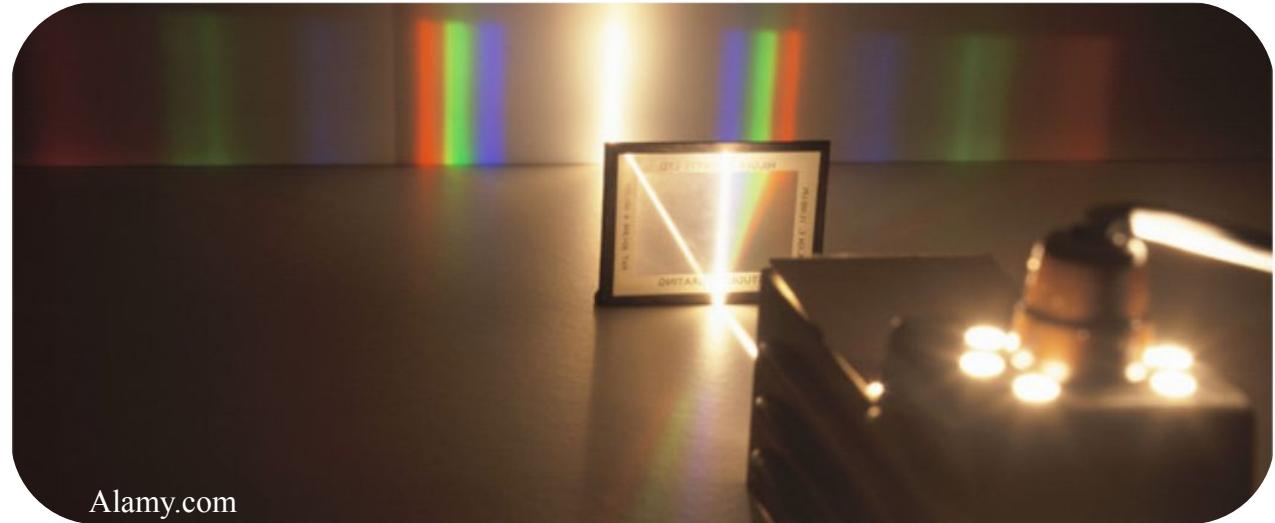
Dispersión angular

$$\frac{d\theta_m}{d\lambda} = \frac{m}{d \cos \theta_m} \quad \theta_m \sim y_m/D$$



Dispersión lineal

$$\frac{dy_m}{d\lambda} = \frac{mD}{d \cos \theta_m}$$



La dispersión aumenta con el número de orden, la densidad de líneas de la red, y la distancia a la pantalla.

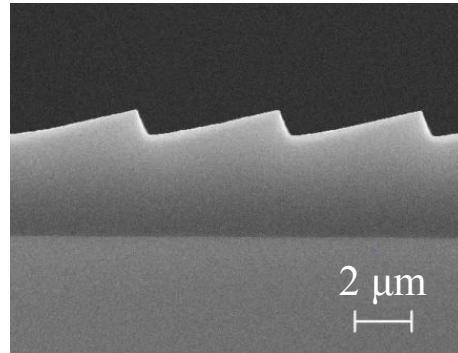
Red de difracción – Eficiencia de dispersión

T=35'

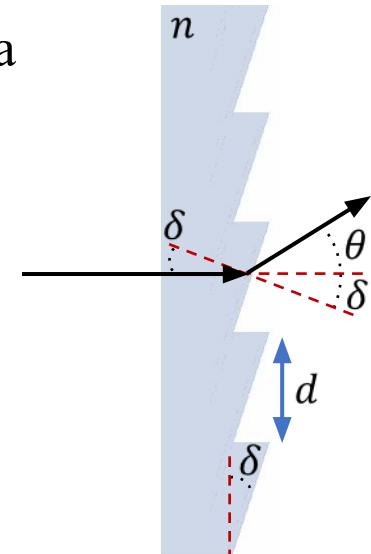
Una red de difracción puede optimizarse para tener máxima eficiencia de dispersión a una dada λ a cierto m
 De otra manera, solo el $\sim 10\%$ de la luz es dirigida, por ejemplo, al primer orden.

→ Se hace coincidir el ángulo de refracción a la salida de la red con el ángulo de máximo de difracción

Imagen de microscopía electrónica de una red



<https://raith.com/>



Ecuación de la red: $d \operatorname{sen} \theta = m \lambda, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Ley de Snell: $n \operatorname{sen} \delta = \operatorname{sen}(\delta + \theta) \rightarrow \operatorname{tan} \delta = \frac{\operatorname{sen} \theta_B}{n - \operatorname{cos} \theta_B}$

Ángulos pequeños → $\operatorname{sen} \delta (n - 1) = \operatorname{sen} \theta_B$

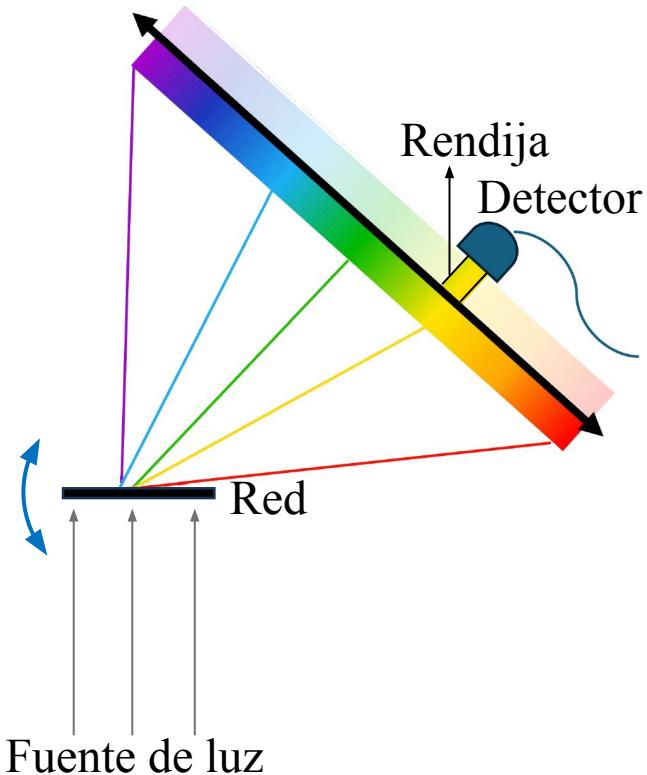
Máxima eficiencia de dispersión ($m = 1$): $\lambda_B = (n - 1) d \operatorname{sen} \delta$

Con esta técnica $>70\%$ de la luz puede ser dirigida al orden deseado

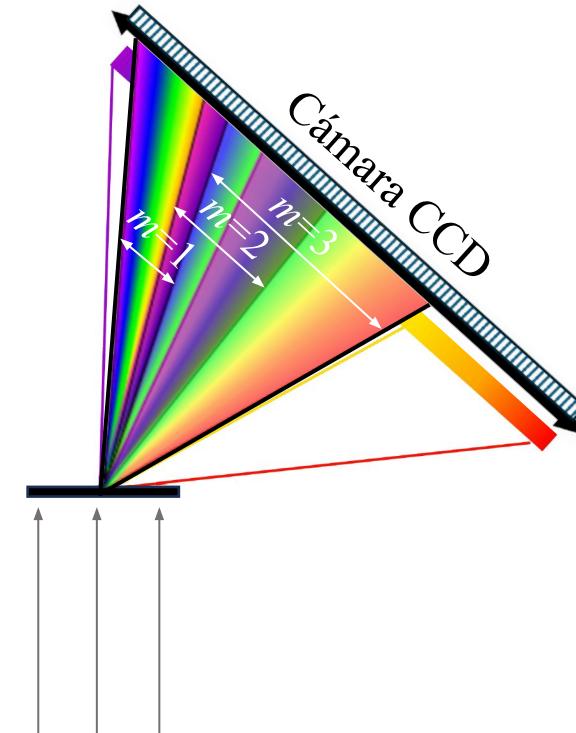
Espectrómetro – Construcción

T=45°

Se puede medir un espectro de luz estudiando la longitud de onda e intensidad en función de la posición, para un dado orden de difracción.



Se rota la red de difracción desplazando el espectro sobre una rendija frente al detector



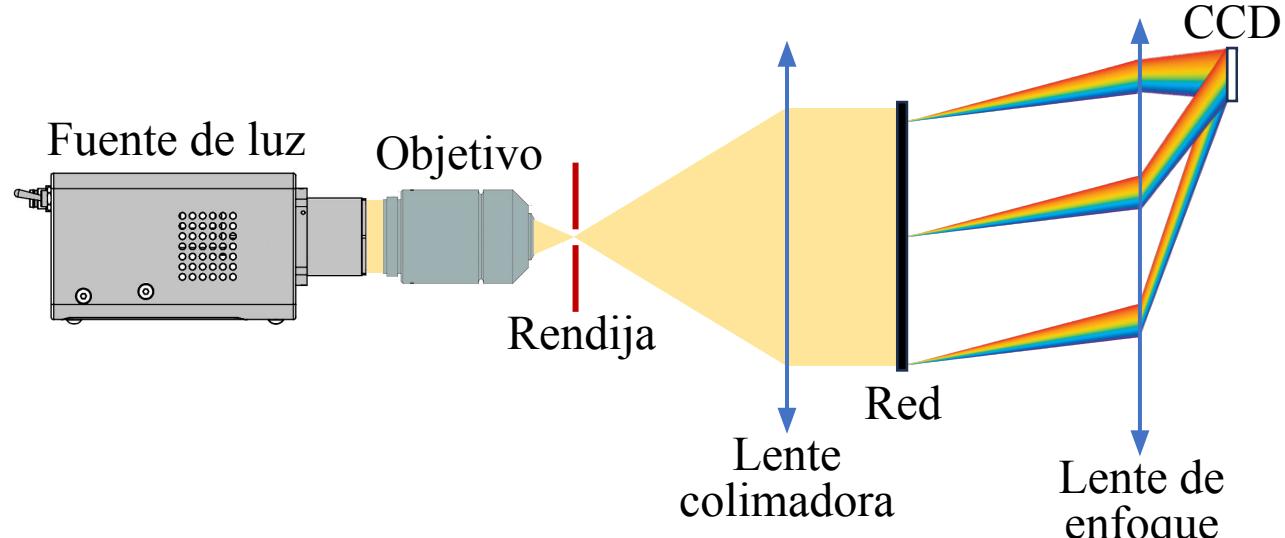
Se mide el espectro con un arreglo de píxeles con la red de difracción fija

Espectrómetro – Construcción

T=50'

Se puede medir un espectro de luz estudiando la longitud de onda e intensidad en función de la posición, para un dado orden de difracción.

Montaje en el laboratorio



Limitantes de resolución espectral



Red de difracción



Sensor CCD



Rendija



Lentes

Espectrómetro – Resolución

T=60'

Resolución espectral: Mínima separación entre longitudes de onda que se puede resolver ($\Delta\lambda$)

Poder resolvente de una red de difracción (Criterio de Rayleigh)

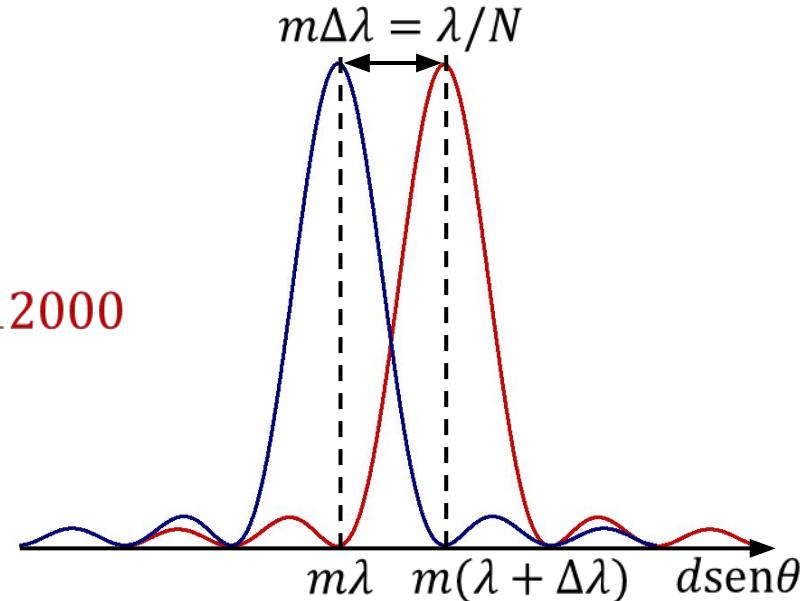
Máximos de intensidad: $d\sin\theta = m\lambda, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Distancia al mínimo de intensidad adyacente: λ/N

Poder resolvente: $R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = mN = 1 \times (600 \text{ líneas/mm} \times 20 \text{ mm}) = 12000$

$$\lambda = 600 \text{ nm} \rightarrow \Delta\lambda_{\text{difracción}} = 0.05 \text{ nm}$$

La situación óptima es iluminar la totalidad de la red de difracción (ni por exceso ni por en defecto), igualando la apertura numérica del dispositivo.



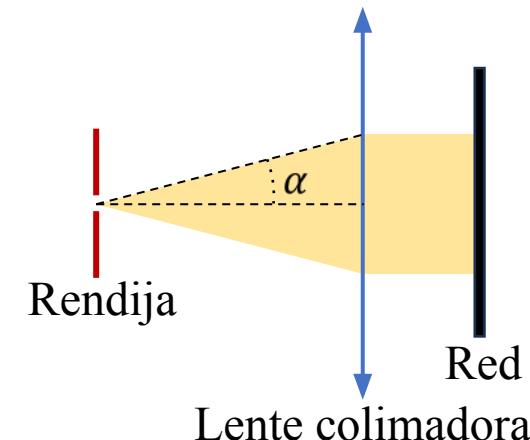
Intensidad de máximos primarios

$$I_p = I_0 N^2 \left(\frac{\sin(\beta)}{\beta} \right)^2$$

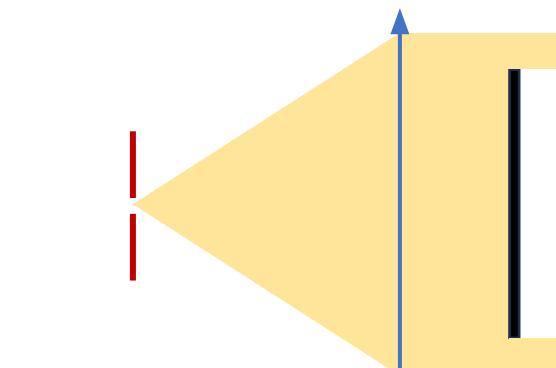
Apertura numérica

$$AN = n \sin \alpha$$

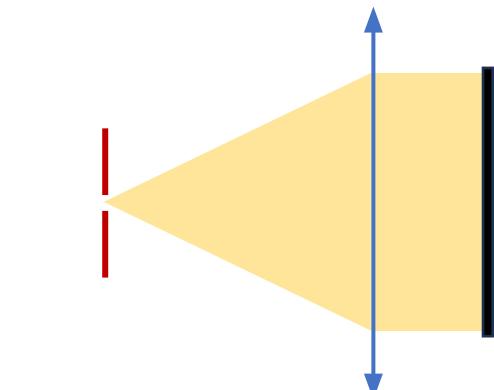
Subiluminado



Sobreiluminado



Situación óptima

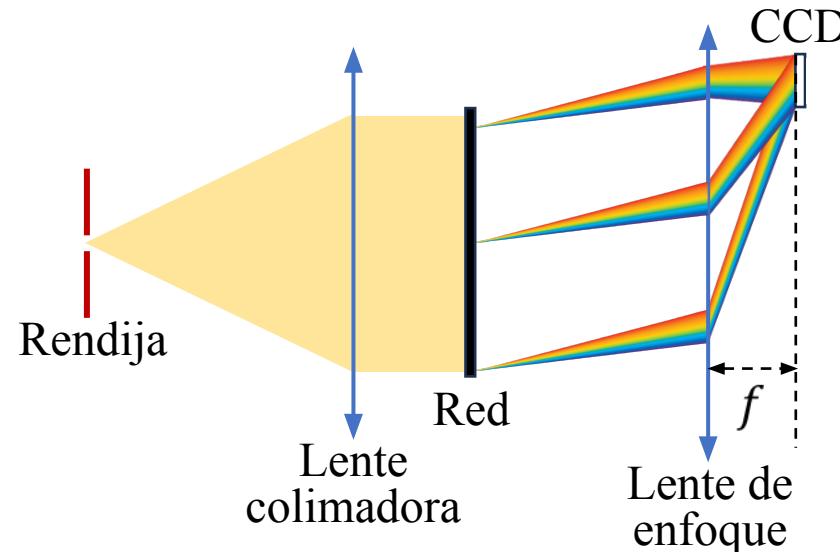


Espectrómetro – Resolución

T=70°

Resoluciónpectral: Mínima separación entre longitudes de onda que se puede resolver ($\Delta\lambda$)

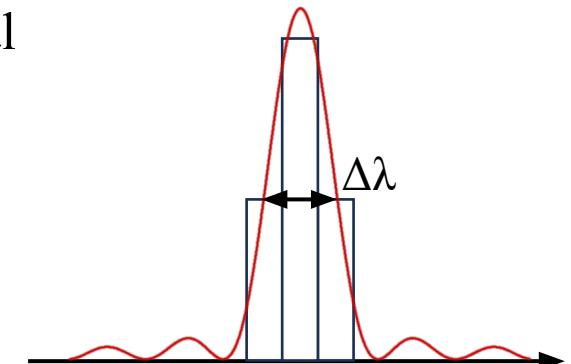
Resolución impuesta por el detector



Criterio de Nyquist: La frecuencia de muestreo debe ser al menos el doble de la máxima contenida en la señal

→ 2 píxeles para resolver $\Delta\lambda$

$$\text{Dispersión lineal: } \frac{dy_m}{d\lambda} = \frac{mf}{d\cos\theta_m}$$



$$\text{Tomando } m = 1, \ 1/d = 600 \text{ l/mm} \xrightarrow{\frac{d\sin\theta_1 = \lambda}{\lambda = 600 \text{ nm}}} \theta_1 \sim 20^\circ \xrightarrow{f = 60 \text{ mm}} \frac{dy_1}{d\lambda} = \frac{f}{d\cos\theta_1} \sim 0.04 \frac{\text{mm}}{\text{nm}}$$

$$\text{CCD de 2048 píxeles con tamaño de píxel } W_p = 10 \text{ } \mu\text{m} \xrightarrow{\frac{2 \text{ píxeles} = 20 \text{ } \mu\text{m}}{\text{Ancho de la CCD} \sim 2 \text{ cm}}} \Delta\lambda_{\text{CCD}} = \frac{d\lambda}{dy_1} (2W_p) \sim 0.5 \text{ nm}$$

$$\text{Rango de } \lambda \text{ en CCD} \rightarrow \lambda_{\text{máx}} - \lambda_{\text{mín}} = \frac{d\lambda}{dy_1} W_p \times (\text{Nº de píxeles}) \sim 500 \text{ nm} \rightarrow \text{Por ej. de 400 a 900 nm}$$

Espectrómetro – Resolución

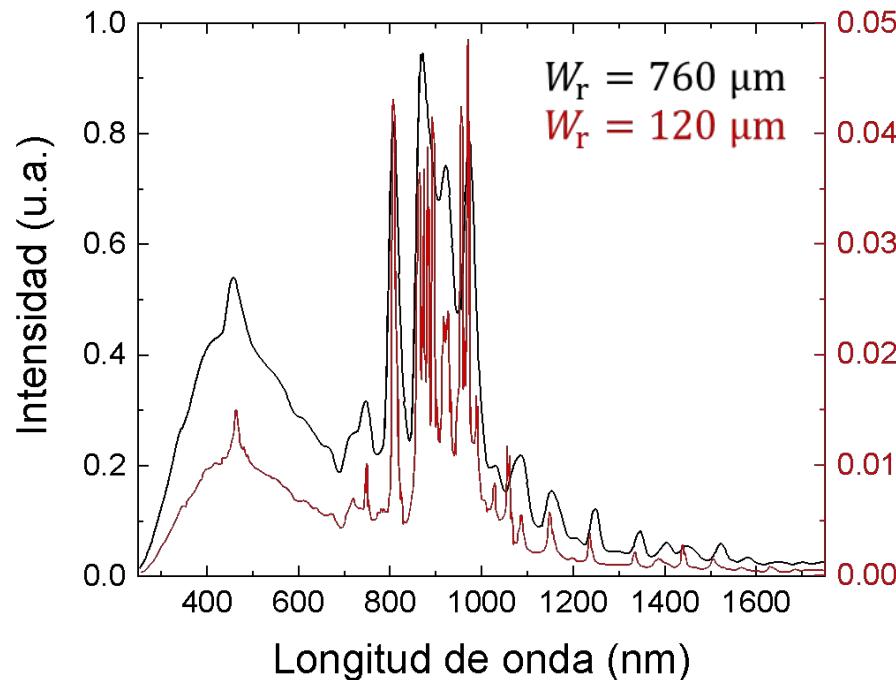
T=80'

Resoluciónpectral: Mínima separación entre longitudes de onda que se puede resolver ($\Delta\lambda$)

Resolución impuesta por la rendija y aberraciones ópticas

Ancho de la imagen de la rendija en el plano de detección

Espectro de lámpara de Xe (datos de *Newport*)

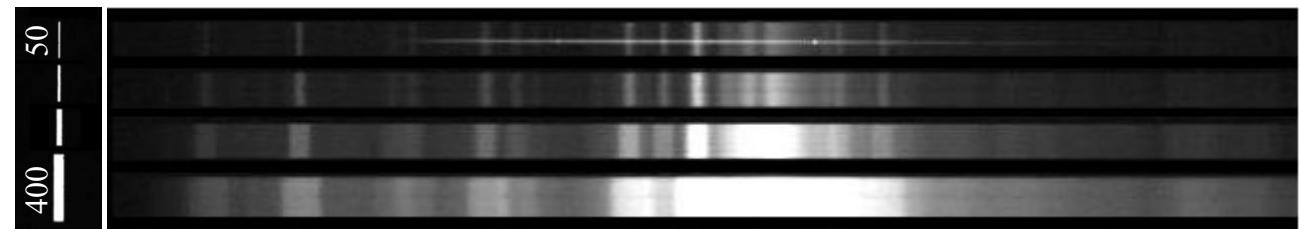


$$W_i = (M^2 W_r^2 + W_a^2)^{1/2}$$

↑ **Ensanchamiento por aberraciones**
↓ **Ancho de la rendija**
↓ **Demagnificación del sistema óptico**

Si $W_i \downarrow$ la resolución \uparrow , hasta alcanzar $W_i \sim W_p$

Espectro del cielo nocturno tomado con W_r de 50 a 400 μm



Universidad de Sheffield, Reino Unido

Disminuir el tamaño de rendija mejora la resolución, pero disminuye la intensidad

En última instancia, la señal medida resulta de la convolución entre la respuesta del espectrómetro y lo que se quiere medir

$$S_M(\lambda) = S_o(\lambda) * R_T(\lambda)$$

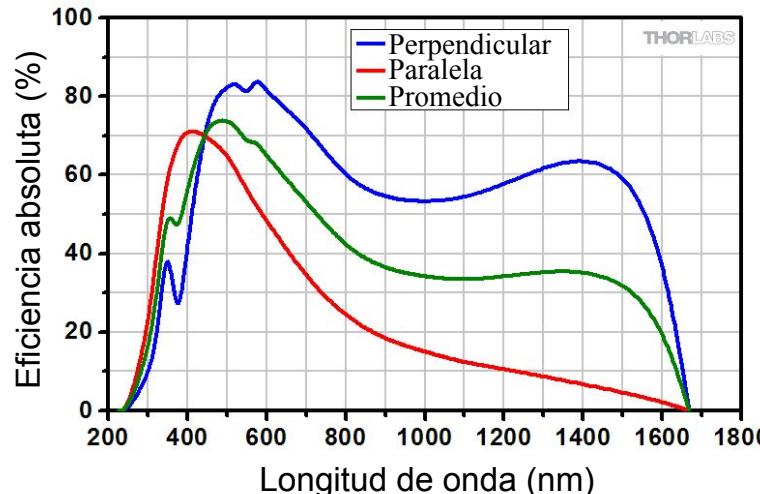
Espectrómetro – Rendimiento

T=90°

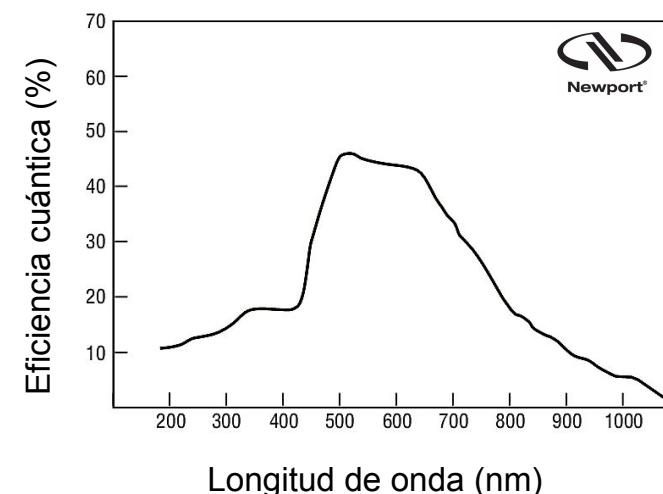
En síntesis, los factores que limitan el rendimiento de un espectrómetro son:

- La red de difracción: afecta a la resoluciónpectral e intensidad de luz que llega al detector
- El detector: afecta a la resoluciónpectral y sensibilidad en la intensidad
- La rendija de entrada: afecta a la resoluciónpectral e intensidad de luz de entrada
- Magnificación y aberraciones: afecta a la resoluciónpor tamaño y calidad de imagen en el detector

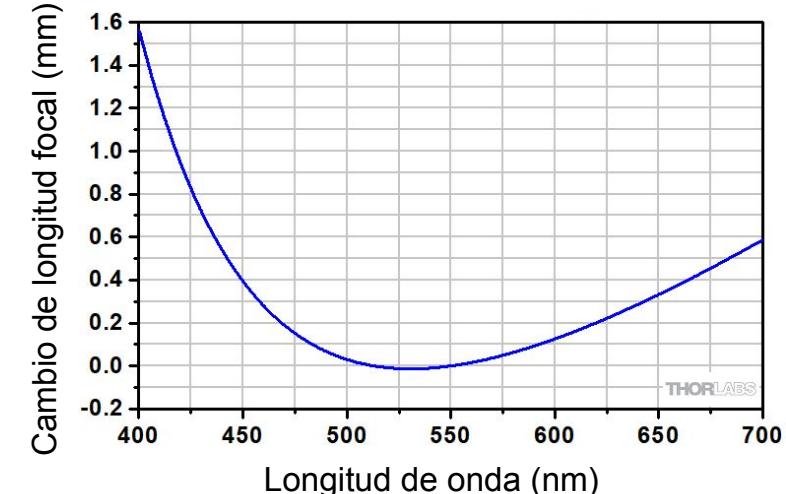
Respuesta espectral de red de difracción



Respuesta espectral de CCD de Si



Aberración cromática de una lente



Espectroscopía de absorbancia

T=100'

La absorbancia de una sustancia mide la atenuación de la luz que la atraviesa

El campo E , luego de atravesar una distancia l , resulta

$$E = E_0 e^{i(kl - \omega t)} \\ = k_0 \tilde{n}(\lambda) = \frac{2\pi}{\lambda} (n(\lambda) + i\kappa(\lambda))$$

$$E = E_0 e^{i(k_0 \tilde{n}(\lambda)l - \omega t)} = E_0 e^{i(k_0 n(\lambda)l - \omega t)} e^{-\kappa(\lambda)l}$$

$$I(\lambda) = |E|^2 = I_0(\lambda) e^{-\kappa(\lambda)l} \rightarrow T(\lambda) = \frac{I(\lambda)}{I_0(\lambda)} = e^{-\kappa(\lambda)l}$$

Absorbancia: $A = \kappa(\lambda)l = -\ln\left(\frac{I(\lambda)}{I_0(\lambda)}\right)$

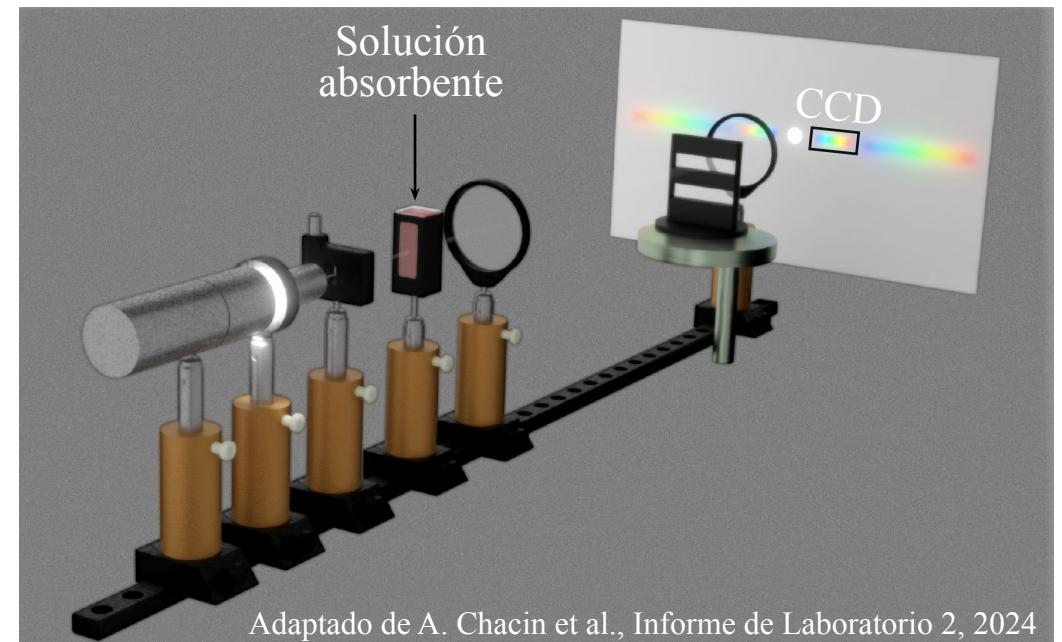
Ley de Beer-Lambert

$$A = C\epsilon(\lambda)l$$

Coeficiente de absorción molar
Concentración



Thorlabs.com



Adaptado de A. Chacin et al., Informe de Laboratorio 2, 2024

Experimentos propuestos

T=110°

- Caracterizar redes de difracción (600 y 1200 líneas/mm): Determinar a y d
- Estudiar la respuesta en intensidad del sensor de luz (cámara CCD) por ley de Malus y según tiempo de exposición
- Diseñar y construir un espectrómetro con los elementos que considere adecuados
- Evaluar la función respuesta del dispositivo para diferentes aperturas de rendija
- Calibrar el dispositivo midiendo el espectro de una fuente de luz y comparando con el espectrómetro comercial de Thorlabs
- Realizar mediciones de absorbancia y/o espectros de emisión

