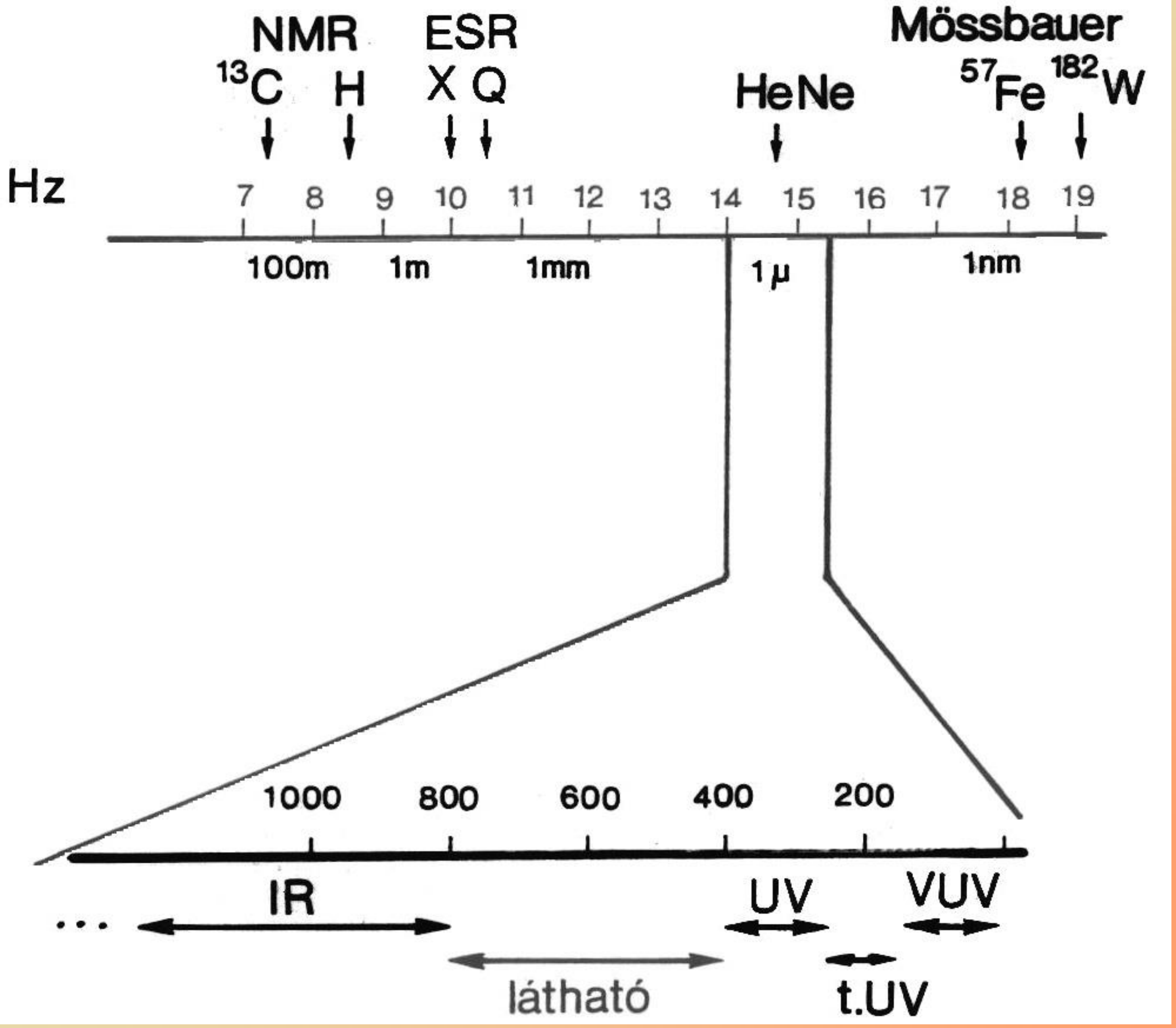
Spektroszkópia I.

Szabó Gábor, egyetemi tanár
SZTE Optikai Tanszék

A spektroszkópia tárgya

A spektroszkópia olyan vizsgálati módszerek összességét jelenti, melyek során elektromágneses térrel történő köl-csönhatás vizsgálatával próbálunk következtetni az anyag tulajdonságaira.

Jellemző spektroszkópiai tartományok



Optikai alapok

Paraxiális mátrix optika

Egy jó forrás: http://pendientedemigracion.ucm.es/info/euoptica/org/pagper/jalda/docs/libr/paraxial_eoe_03.pdf (Javier Alda), utolsó letöltés: 2017. 02. 06.

Paraxiális közelítés

Tekintsük a szögfüggvények hatványsorait!

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \dots$$

$$tgx = x + \frac{x^3}{3!} + \frac{2x^5}{5!} + \dots$$

Látható, hogy kis x esetén sinx ≈ tgx ≈ x, és cosx ≈1. Vizsgáljuk meg, hogy mit jelent a közelítés! A legnagyobb hibát a cos-nál követjük el. Ha x<0,14 (8°) akkor az elkövetett hiba kisebb, mint 1%.

Nézzük meg a sin-t.

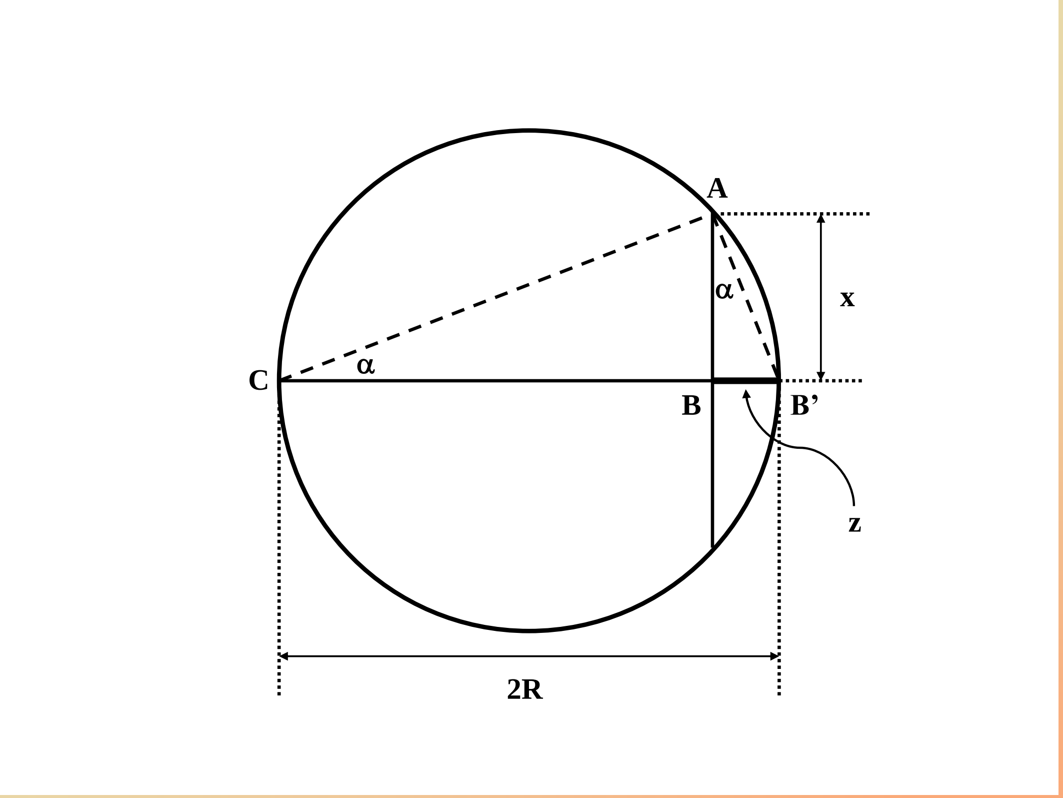
Paraxiális közelítés

1° = 0,01745329 rad sin (1°) = 0,017452406 $$\frac{\varphi - \sin(\varphi)}{\varphi} = 0{,}0051\%$$

5° = 0,087266 rad sin (5°) = 0,087155 $$\frac{\varphi - \sin(\varphi)}{\varphi} = 0{,}12\%$$

10° = 0,17435 rad sin (10°) = 0,173648 $$\frac{\varphi - \sin(\varphi)}{\varphi} = 0{,}51\%$$

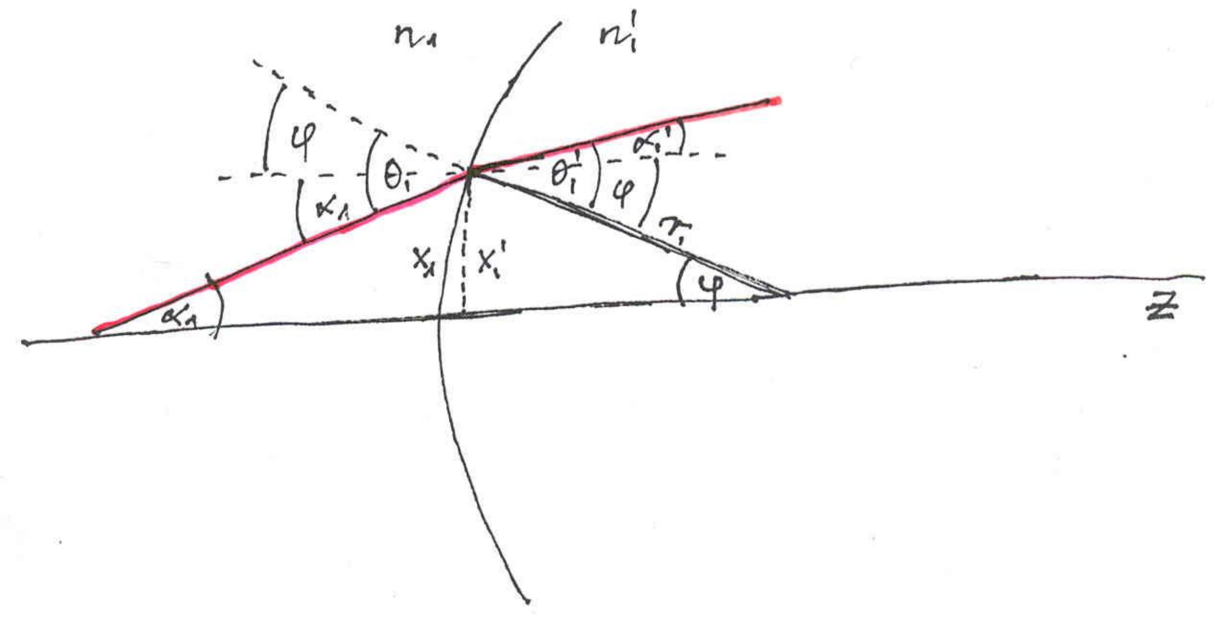
Egy további következmény



$$\frac{x}{2R-z}=\frac{z}{x} \qquad x^2=(2R-z)z \qquad \mathbf{2R>>x} \qquad \boxed{z \approx \frac{x^2}{2R} \Rightarrow z \approx 0}$$

A paraxiális mátrixoptika alapjai

Vizsgáljuk meg, hogy hogyan halad át egy fénysugár egy olyan gömbfelületen, amely két különböző törésmutatójú anyagot választ el.



(Jelölésünk logikája az, hogy a beérkező sugárra a sima, a továbbhaladó sugárra a vesszős mennyiségek vonatkoznak.)

Látható, hogy $\alpha_1 + \varphi = \Theta_1$ **és** $\alpha_1' + \varphi = \Theta_1'$

A paraxiális mátrixoptika alapjai

Θ_1 és Θ_1' a beesési és törési szög, amelyeket a Snellius-Descartes törvény köt össze. Az SD törvény paraxiális közelítésben:

$$n_1\Theta_1 = n_1'\Theta_1' \qquad \Rightarrow \qquad n_1(\alpha_1+\varphi) = n_1'(\alpha_1'+\varphi)$$

Az ábráról látható, hogy $\varphi = x_1/r_1$. Helyettesítsük ezt be:

$$n_1\left(\alpha_1+\frac{x_1}{r_1}\right) = n_1'\left(\alpha_1'+\frac{x_1}{r_1}\right)$$

Bennünket az érdekel, hogy milyen irányban halad tovább a megtört sugár, azaz α_1'. Fejezzük ezt ki az egyenletből:

$$n_1'\alpha_1' = \frac{n_1-n_1'}{r_1}x_1 + n_1\alpha_1$$

A paraxiális mátrixoptika alapjai

Vegyük észre, hogy ha *x* és *α* a *z* tengely bármely pontjában ismertek, az teljes mértékben leírja egy fénysugár terjedését. (A jelölésünk logikájából következik, hogy $x_1 = x_1'$.) Írjuk egymás alá a két egyenletet:

$$n_1'\alpha_1' = \frac{n_1 - n_1'}{r_1} x_1 + n_1\alpha_1$$

$$x_1' = x_1$$

A bekeretezett egyenleteket úgy is felfoghatjuk, mint egy lineáris transzformációt, amely a beérkező sugár *x* és *α* adataiból generálja a továbbhaladó sugár adatait. Ha *x*-et és *α*-t oszlopvektorba rendezzük, akkor feladatunk a megfelelő mátrix megtalálása. Azaz:

A paraxiális mátrixoptika alapjai

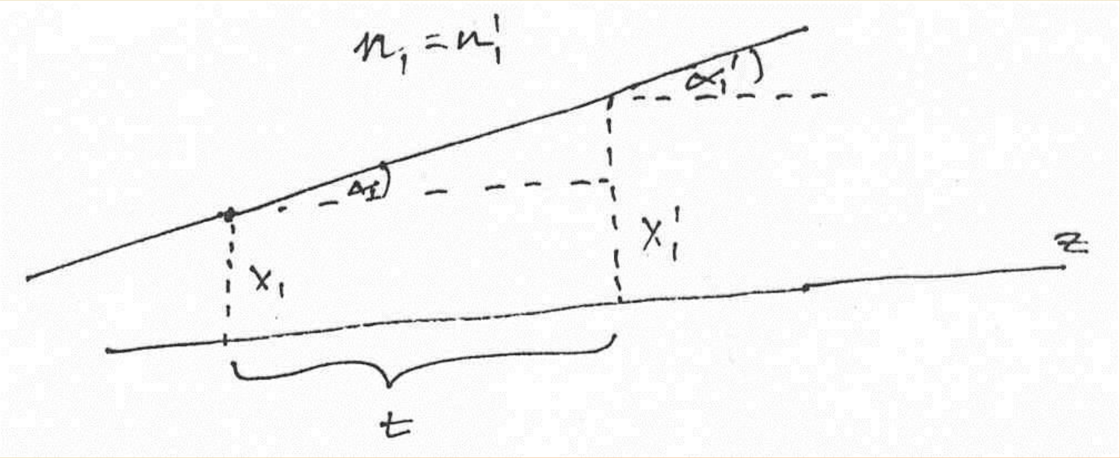
$$\begin{pmatrix} n_1'\alpha_1' \\ x_1' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ? \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1\alpha_1 \\ x_1 \end{pmatrix}$$

Nem nehéz belátni, hogy a keresett mátrix:

$$\begin{pmatrix} n_1'\alpha_1' \\ x_1' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \dfrac{n_1 - n_1'}{r_1} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1\alpha_1 \\ x_1 \end{pmatrix}$$

Hogyan lehetne hasonló módon azt leírni, hogy a sugár *t* távolságot tesz meg egy adott közegben?

A paraxiális mátrixoptika alapjai



Az ábráról azonnal leolvashatjuk, hogy:

$$n_1' \alpha_1' = n_1 \alpha_1$$

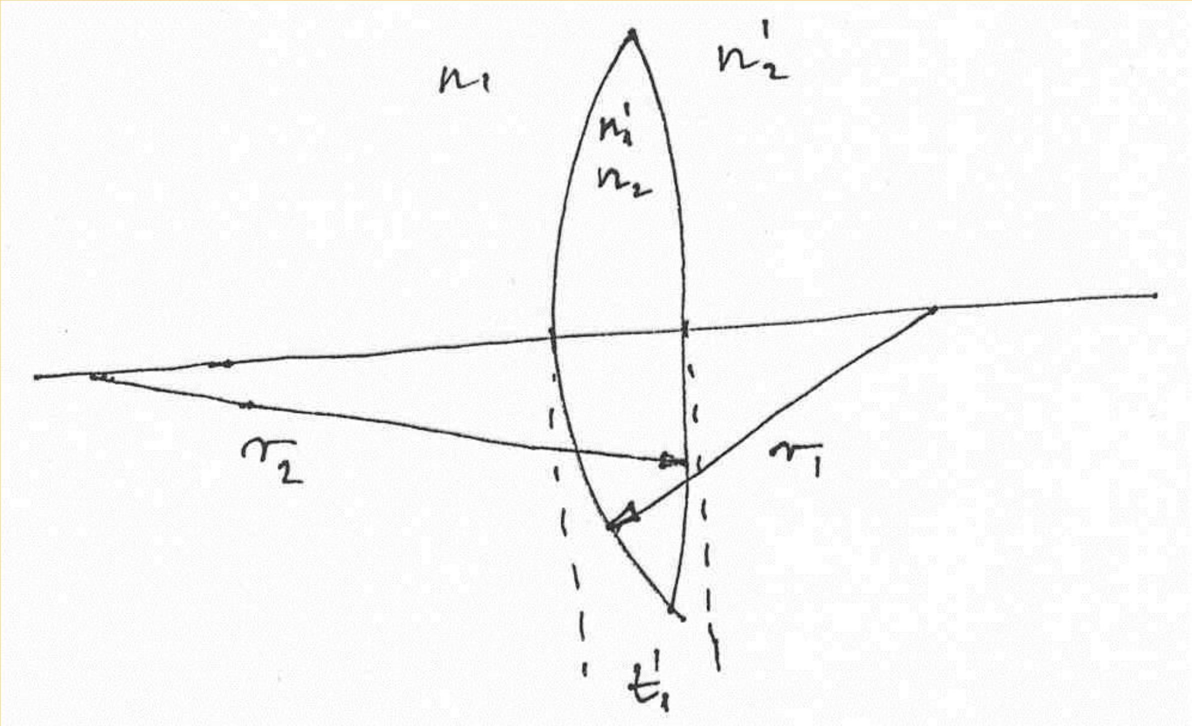
$$x_1' = x_1 + \alpha_1 t$$

Azaz a transzformációs mátrix:

A paraxiális mátrixoptika alapjai

$$\begin{pmatrix} n_1'\alpha_1' \\ x_1' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \dfrac{t}{n_1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1\alpha_1 \\ x_1 \end{pmatrix}$$

Tekintsünk egy lencsét!



A paraxiális mátrixoptika alapjai

A beeső sugár megtörik az *r_1* felületen, továbbhalad *t_1'* távolságra, majd az *r_2* felületen megtörve kilép. Tehát a lencse hatása három mátrix szorzatával ír-ható le.

$$\hat{S}_{21} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & -k_2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\hat{R}_2} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{t_1'}{n_1'} & 1 \end{pmatrix}}_{\hat{T}_{21}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & -k_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\hat{R}_1}$$

(Itt bevezettük a $k_i = \dfrac{n_i' - n_i}{r_i}$ **jelölést.)**

Szorozzuk össze a mátrixokat!

A paraxiális mátrixoptika alapjai

$$\hat{S}_{21} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{k_2 t_1'}{n_1'} & \frac{k_1 k_2 t_1'}{n_1'} - k_1 - k_2 \\ \frac{t_1'}{n_1'} & 1 - \frac{k_1 t_1'}{n_1'} \end{pmatrix}$$

Ezzel megkaptuk a lencsemátrixot.

Érdekes észrevenni, hogy:

$$\det \hat{R}_1 = \det \hat{T}_{21} = \det \hat{R}_2 = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \det \hat{S}_{21} = 1$$

ami alkalmas pl. a szorzás ellenőrzésére.

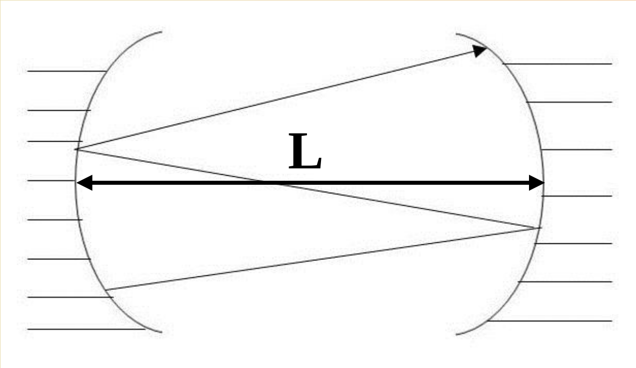
A törési mátrixba egyszerűen - *n* törésmutatót helyettesítve, megkapjuk az *r* sugarú gömbtükör visszaverődési mátrixát.

A paraxiális mátrixoptika alapjai

A mátrixoptika felhasználás területei:

A paraxiális közelítés elhagyásával kidolgozható egy olyan eszköztár, amely a megfelelő mátrixok segítségével tetszőleges optikai rendszerek leírására alkalmas. Ez a mai sugárkövető szoftverek alapja.

Optika rezonátorok stabilitásának vizsgálata



Tekintsünk két, egymással szembefordított gömbtükröt, melyek egymástól *L* távolságra vannak. Mi a feltétele annak, hogy egy fénysugár akárhány visszaverődés után is a tükrök között maradjon.

A probléma a mátrixoptika eszközeivel a következőképpen fogalmazható meg.

A paraxiális mátrixoptika alapjai

Alkossuk meg a körüljárási mátrixot. Ez nyilván a következő négy mátrix szorzatát jelenti. Egy *L* távolságra történő terjedés, egy visszaverődés az r_1 sugarú gömbtükörről, egy *L* távolságra történő terjedés, egy visszaverődés az r_2 sugarú gömbtükörről, azaz:

$$\widehat{K} = \widehat{L}\widehat{R}_1\widehat{L}\widehat{R}_2$$

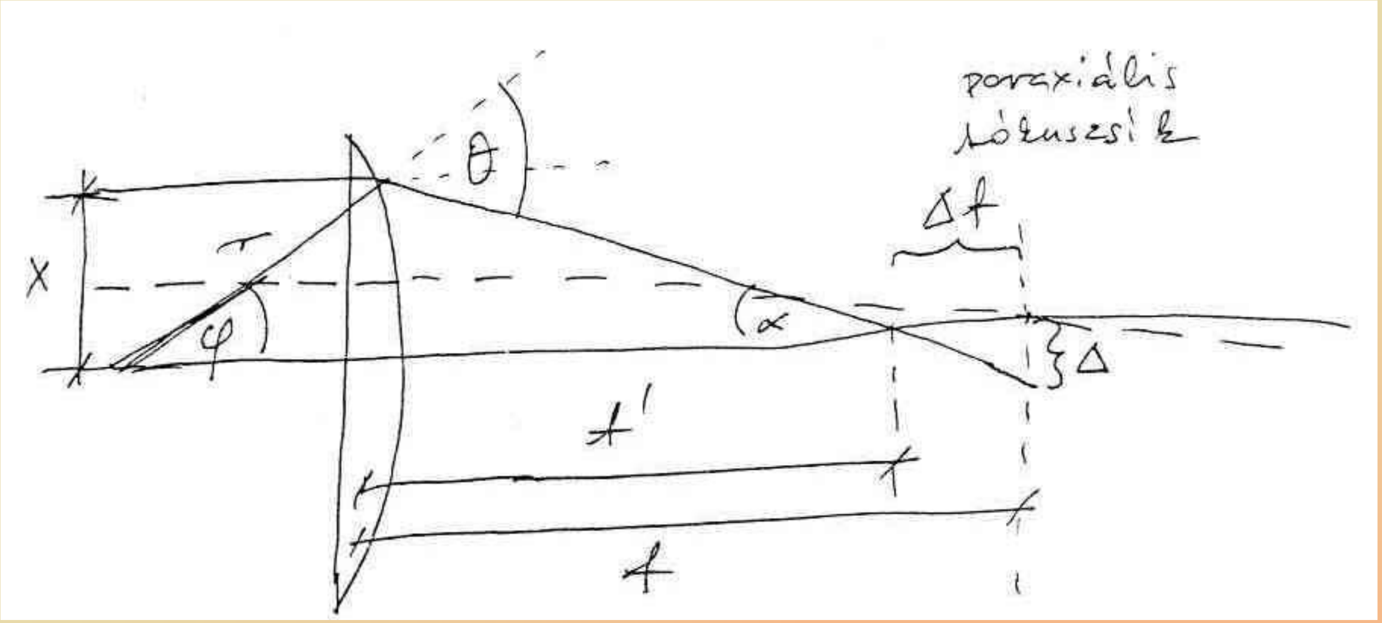
Azt, hogy a fénysugár *k*-szor járja körül a rendszert azzal tudjuk figyelembe venni, hogy $\widehat{K}$-t a *k*-adik hatványra emeljük. Ezzel a stabilitás a következő-képpen fogalmazható meg. A rendszer stabil, ha:

$$\begin{pmatrix} n\alpha_k' \\ x_k' \end{pmatrix} = \widehat{K}^k \begin{pmatrix} n\alpha_0 \\ x_0 \end{pmatrix}$$

esetén x_k' bármely *k*-ra korlátos.

Leképezési hibák

Kvalitatív bevezetés

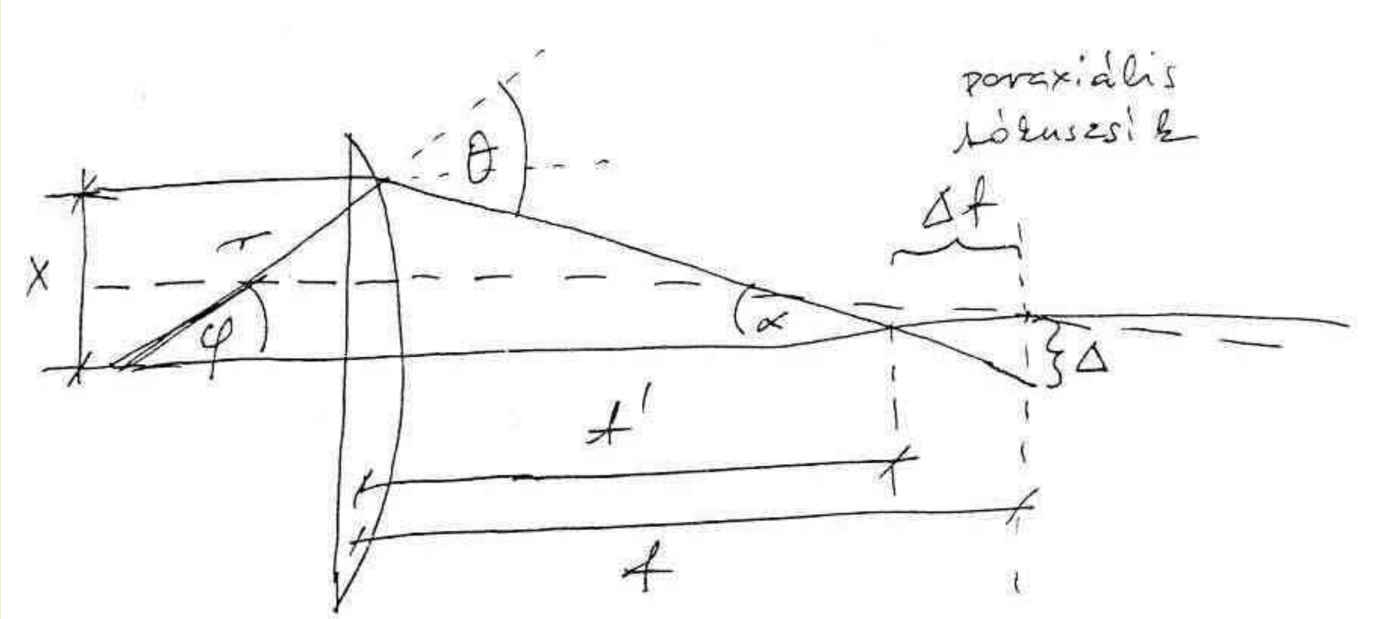


Paraxiális közelítésben:

$$\frac{x}{r} = \varphi \qquad \varphi \cdot n = \Theta n_{lev} = \Theta, \qquad \alpha = \Theta - \varphi, \qquad \alpha = \frac{x}{f} \qquad (n_{lev} = 1)$$

$$\frac{x}{f} = (n-1)\frac{x}{r} \Rightarrow \frac{1}{f} = \frac{(n-1)}{r}$$

Kvalitatív bevezetés



Ejtsük α-ra a paraxiális közelítést:

$$\frac{x}{f'} = tg\,\alpha$$

$$\Delta = \Delta f tg\,\alpha = (f - f')tg\,\alpha, \qquad f' = \frac{x}{tg\,\alpha}$$

Kvalitatív bevezetés

$$\Delta = f tg\alpha - x$$

Fejtsük *tgα*-t hatványsorba $(\alpha = \frac{x}{f})$ **:**

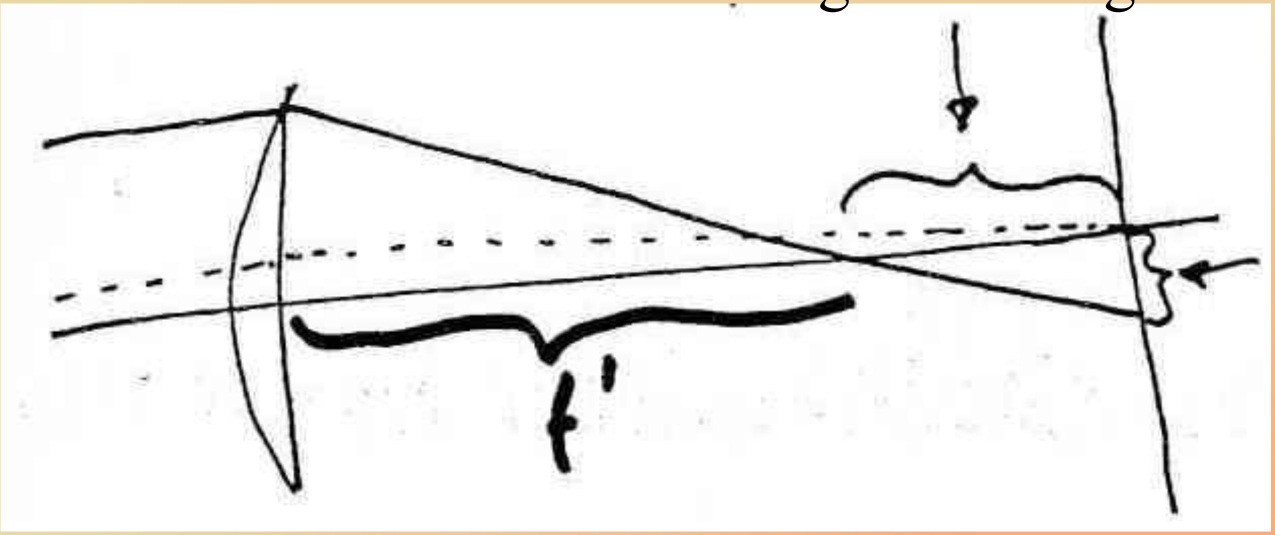
$$\Delta = f\left(\frac{x}{f} + \frac{1}{3}\left(\frac{x}{f}\right)^3 + \ldots\right) - x$$

$$\boxed{\Delta \approx f\,\frac{1}{3}\left(\frac{x}{f}\right)^3}$$

Seidel aberrációk

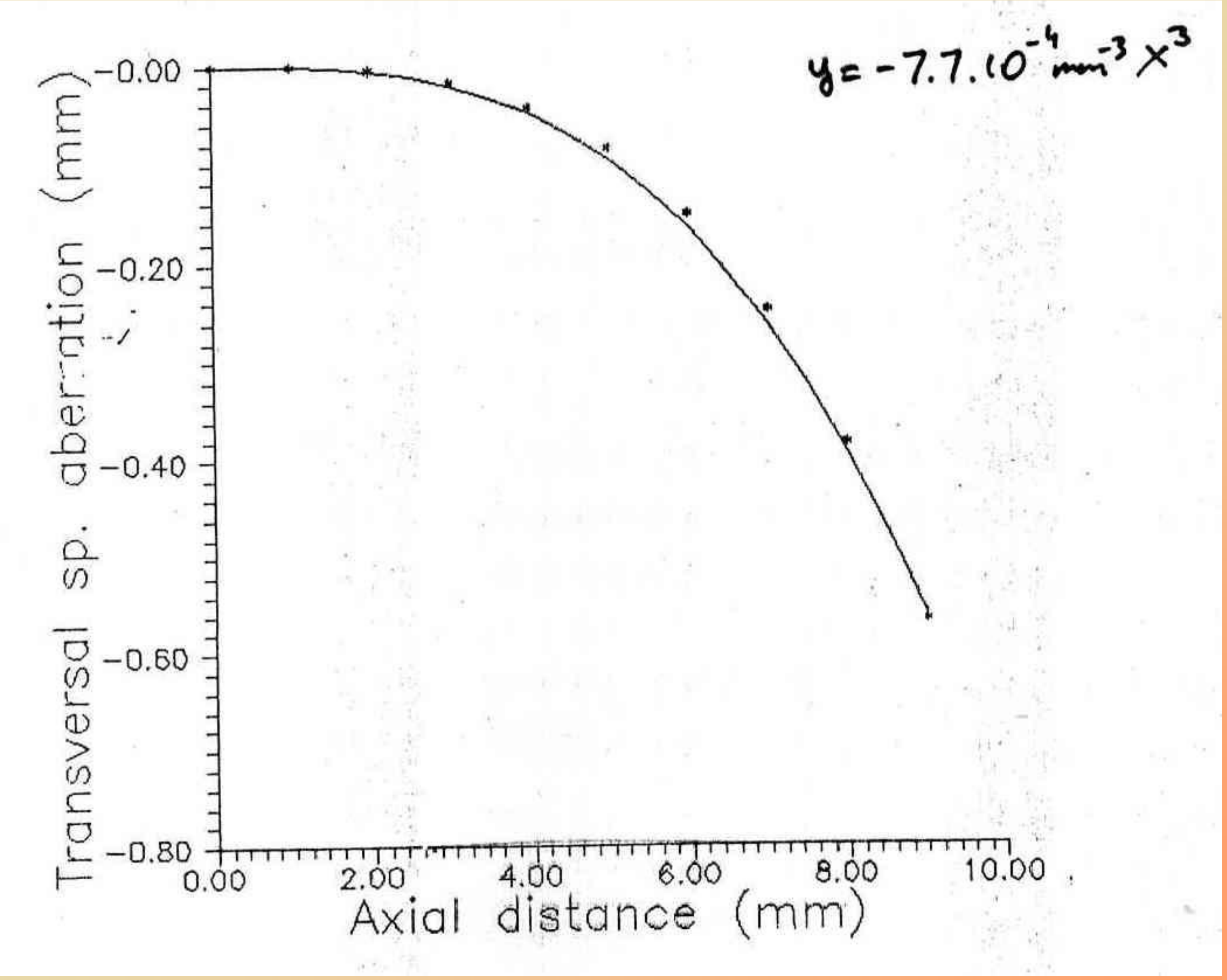
Gömbi hiba (szferikus aberráció)

Longitudinális g.h.

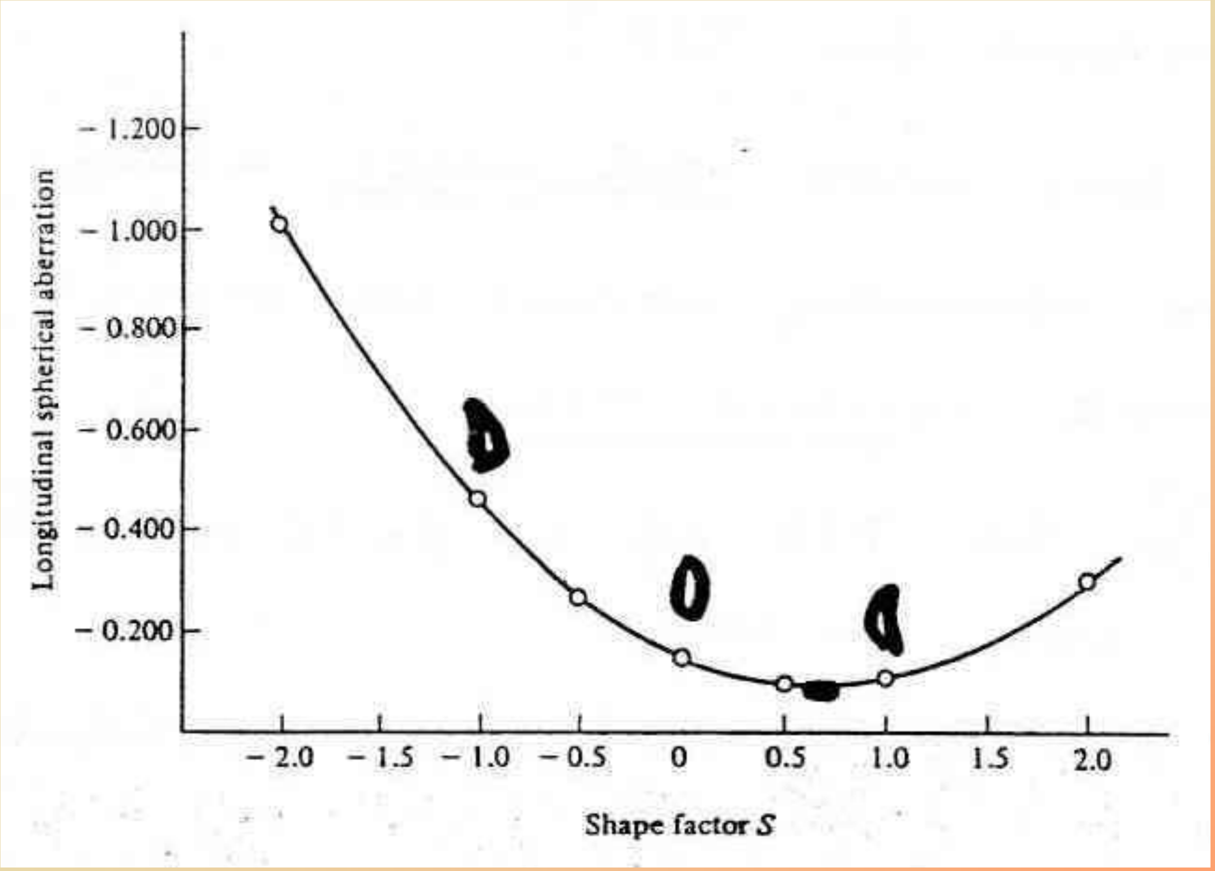


Transzver-
zális g.h.

Gömbi hiba (szferikus aberráció)

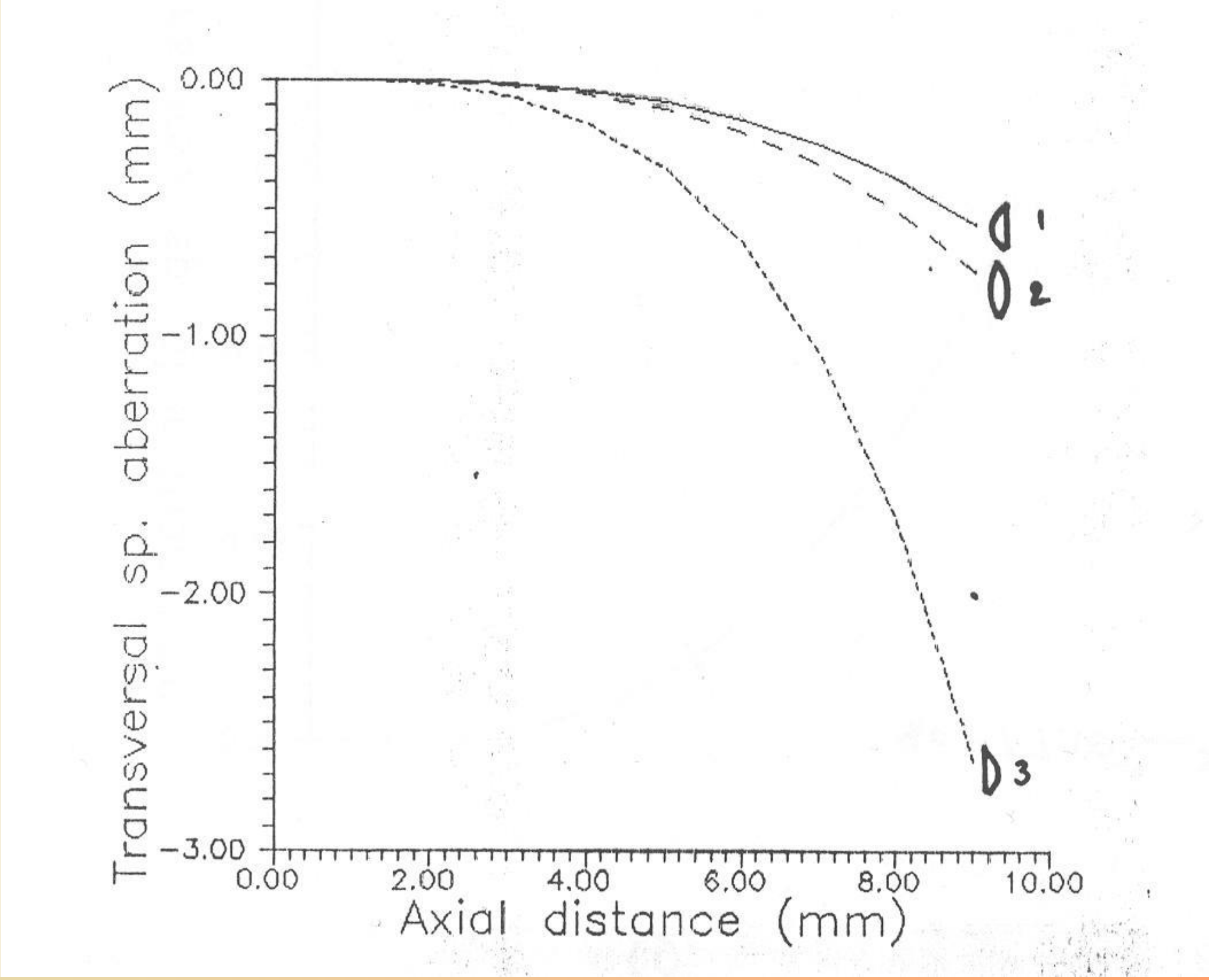


Gömbi hiba (szferikus aberráció)



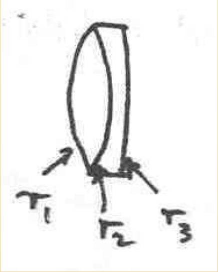
Alaktényező

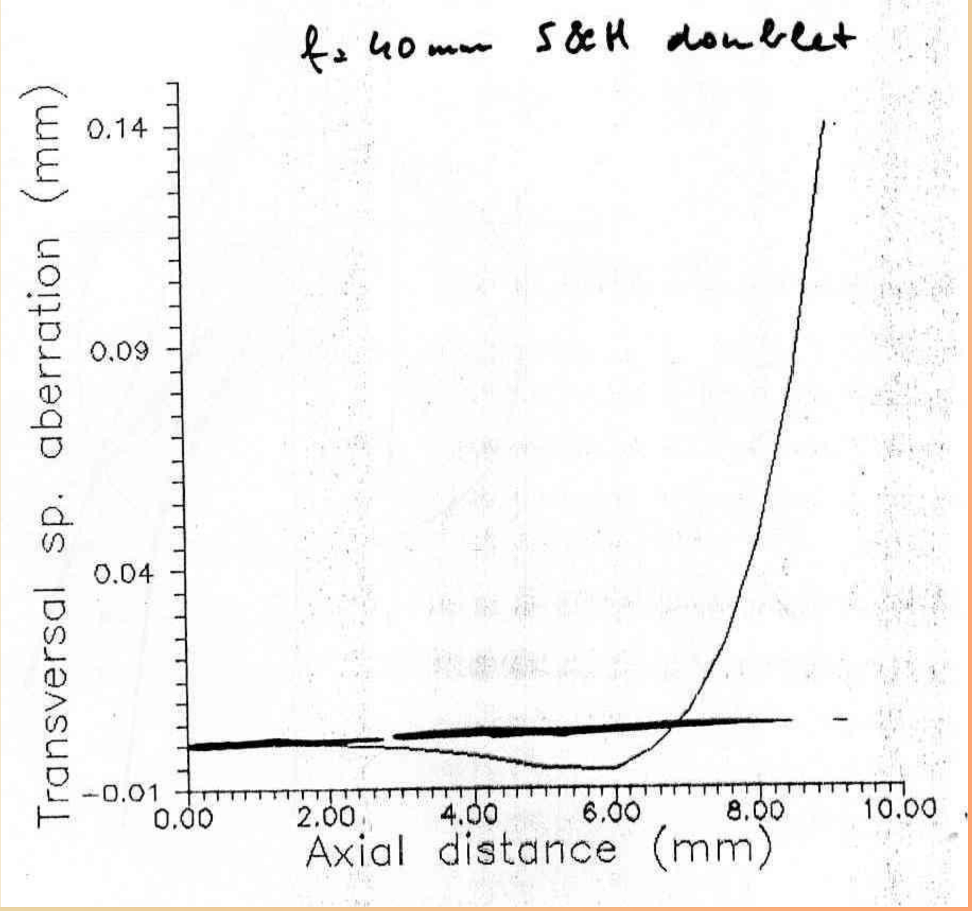
Gömbi hiba (szferikus aberráció)



Gömbi hiba (szferikus aberráció)

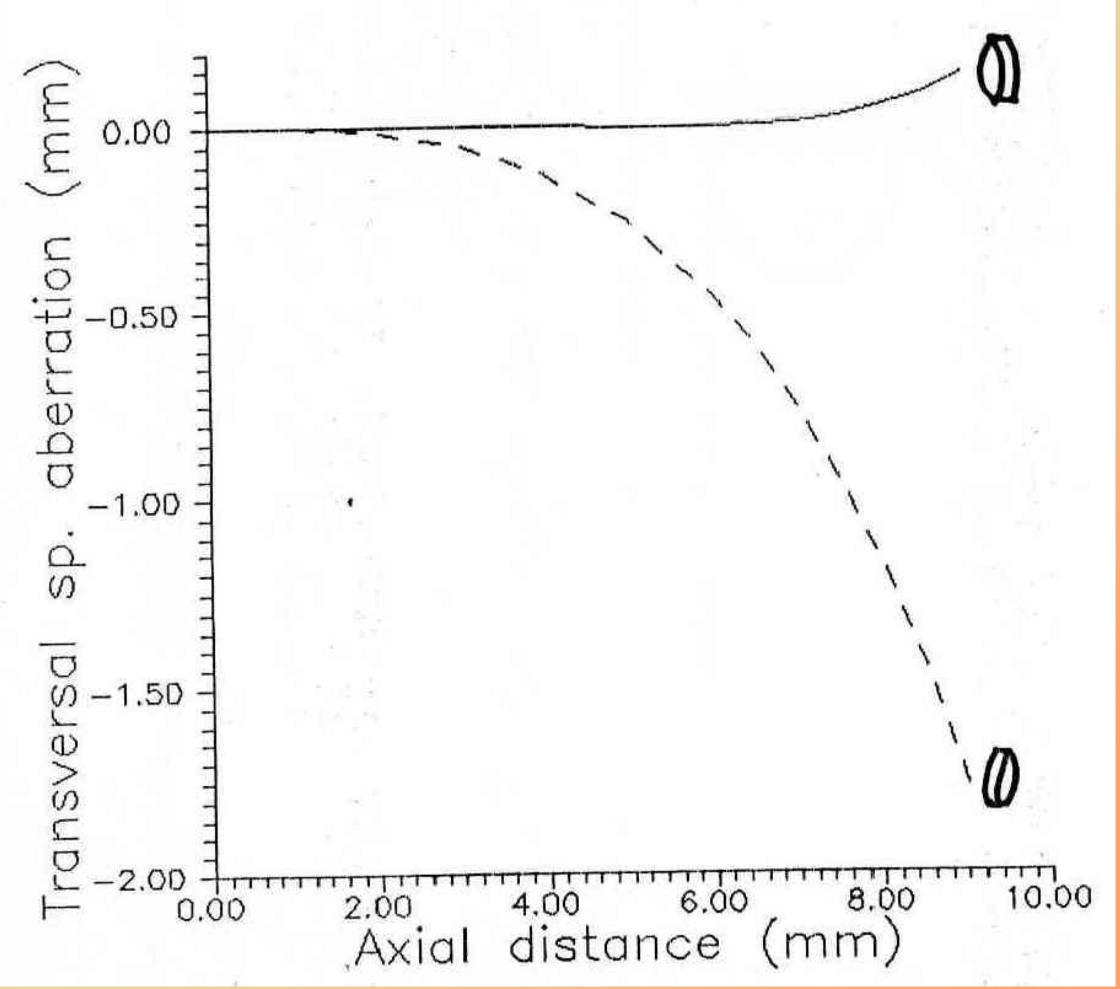
Kompenzálás akromáttal





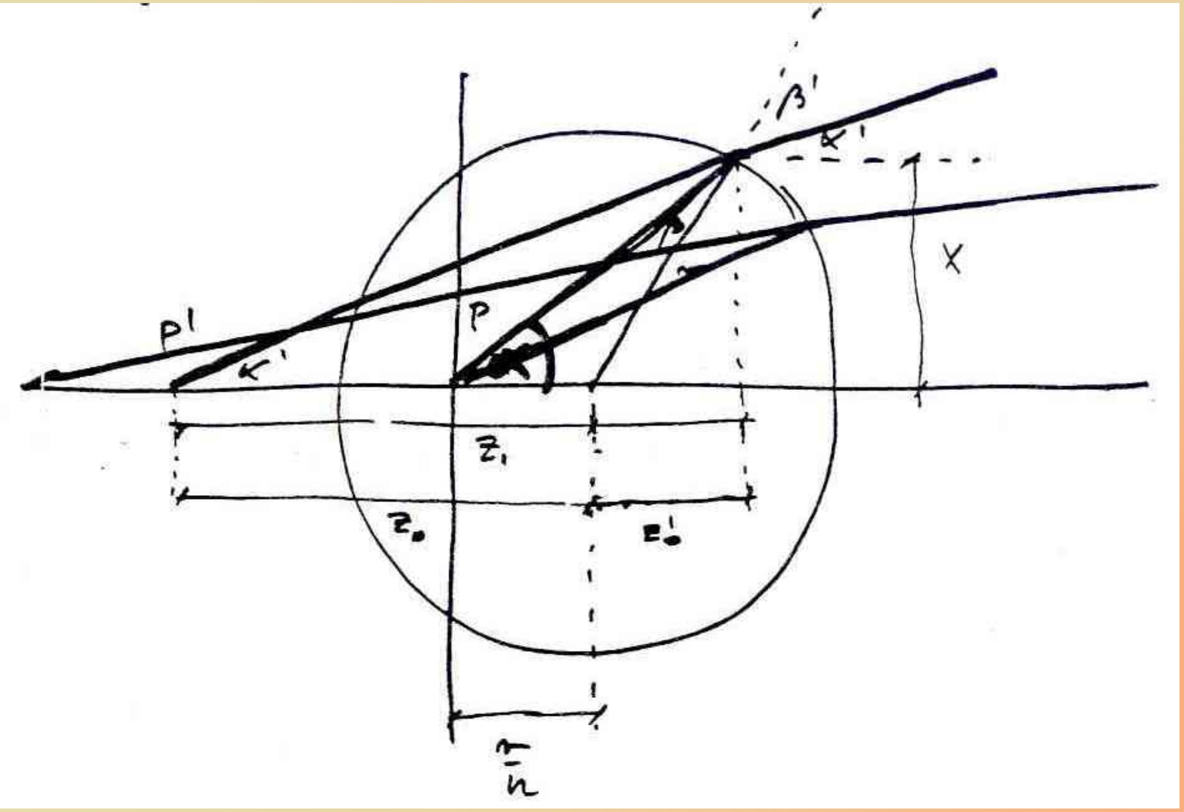
Gömbi hiba (szferikus aberráció)

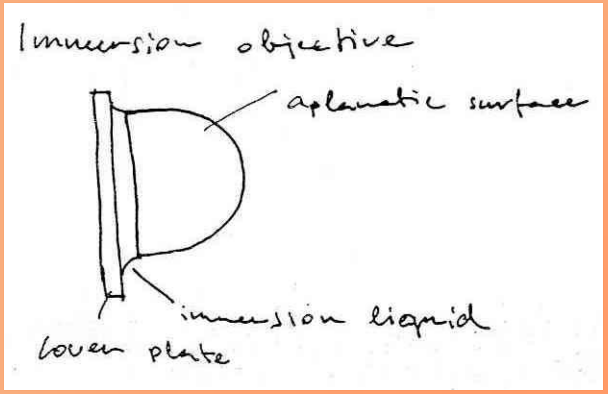
Kompenzálás akromáttal



Gömbi hiba (szferikus aberráció)

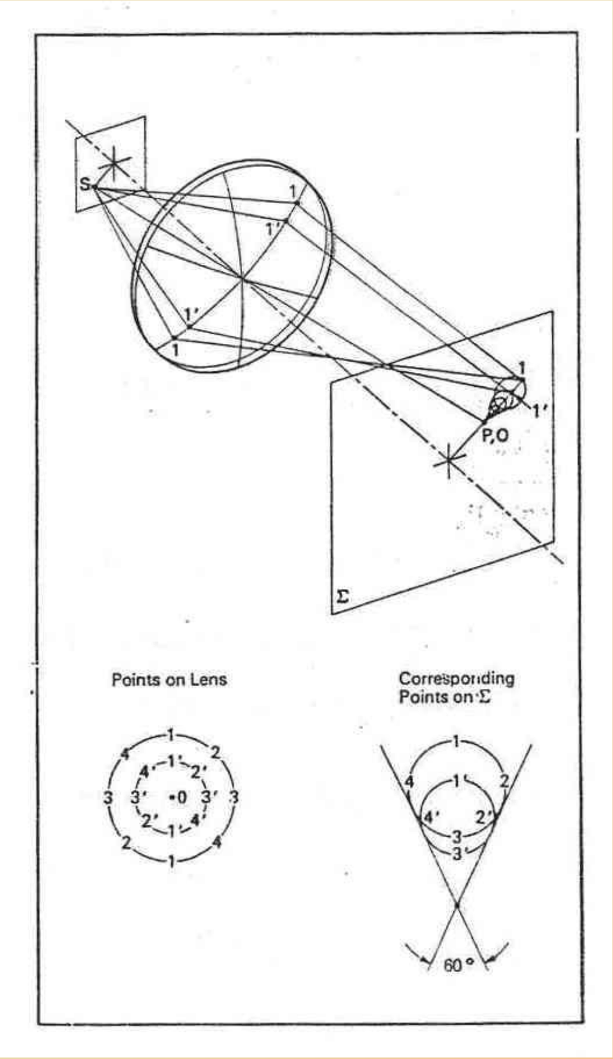
Kompenzálás virtuális kép esetén

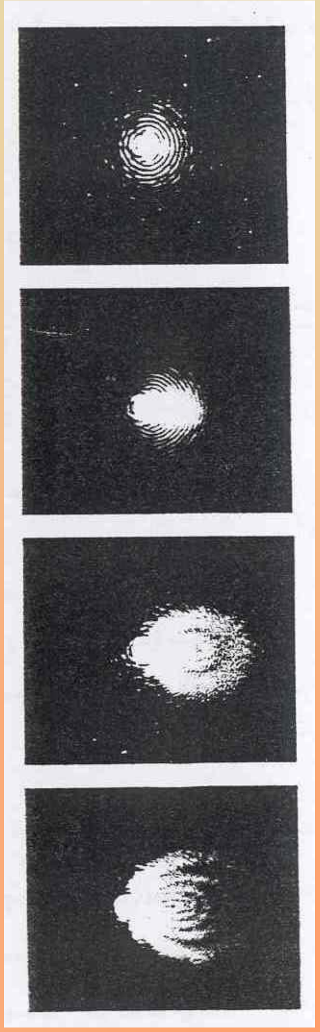




Leképezési hibák tengelyen kívüli pontokra

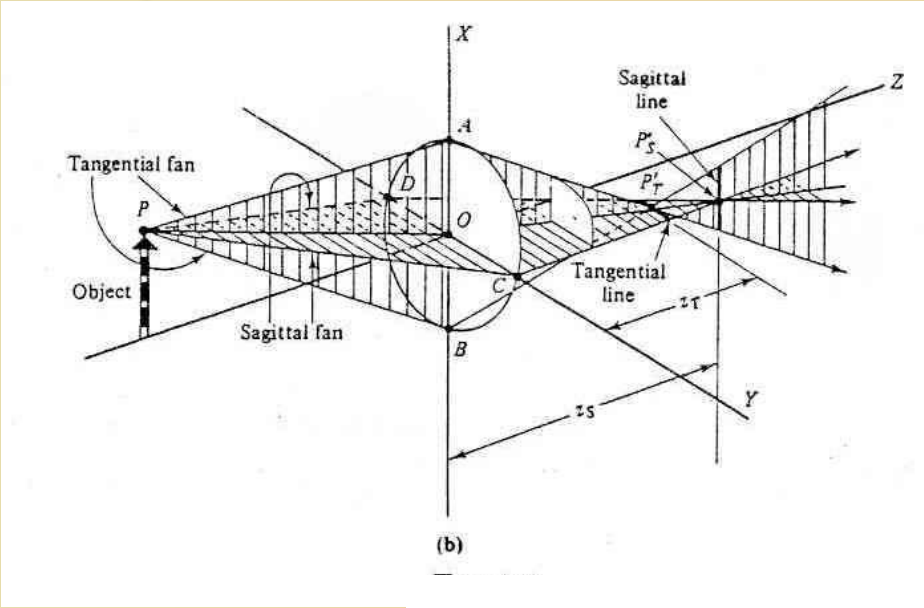
Kóma

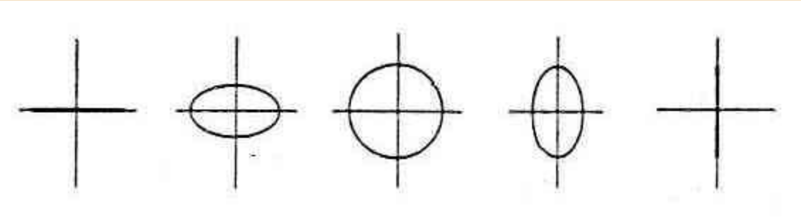


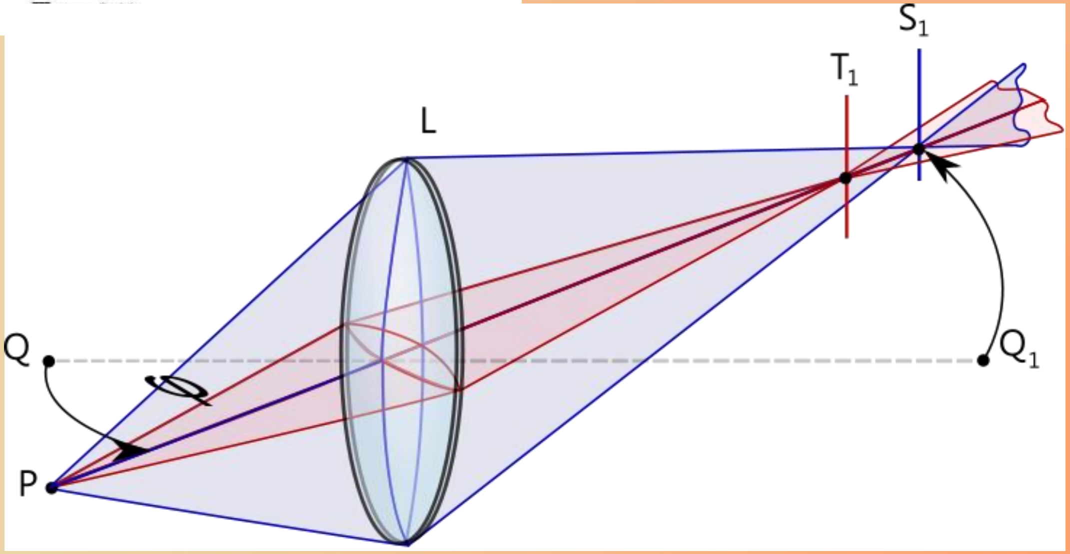


Leképezési hibák tengelyen kívüli pontokra

Asztigmatizmus

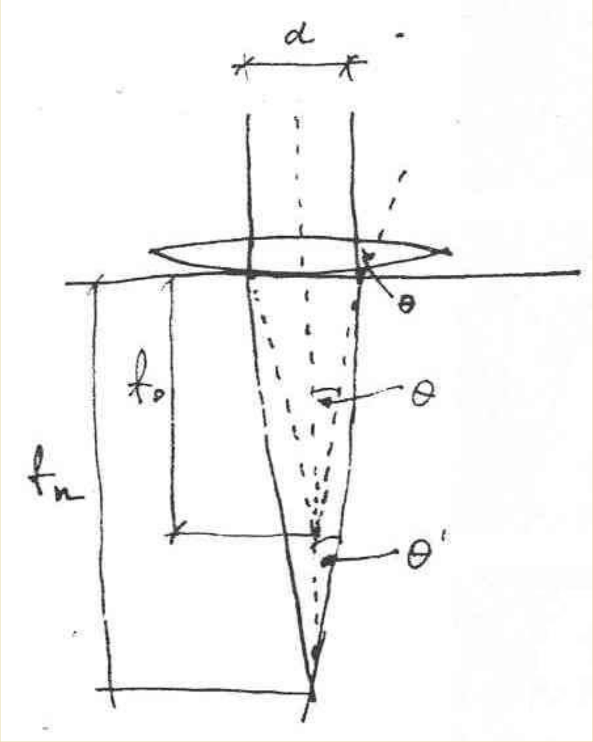






Leképezési hibák tengelyen kívüli pontokra

Asztigmatizmus



$$\frac{d}{2} = \Theta f_0$$

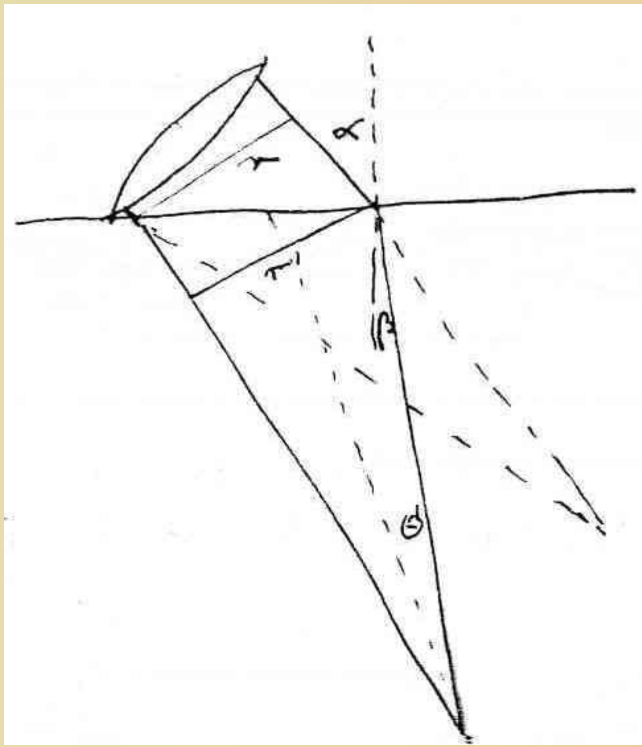
$$\Theta' = \frac{\Theta}{n}$$

$$f_n = \frac{r}{\Theta'} = n\frac{r}{\Theta}$$

$$f_n = nf_0$$

Leképezési hibák tengelyen kívüli pontokra

Asztigmatizmus



Ejtsük a parax. közelítést α-ra

$$\Theta' \neq \frac{\Theta}{n} \qquad r \neq r'$$

Törési törvény

$$\sin(\alpha + \Delta\alpha) = n \sin(\beta + \Delta\beta)$$

$$\sin\alpha \underbrace{\cos\Delta\alpha}_{\approx 1} + \cos\alpha \underbrace{\sin\Delta\alpha}_{\approx \Delta\alpha} =$$

$$n(\sin\beta \underbrace{\cos\Delta\beta}_{\approx 1} + \cos\beta \underbrace{\sin\Delta\beta}_{\approx \Delta\beta}$$

Leképezési hibák tengelyen kívüli pontokra

Asztigmatizmus

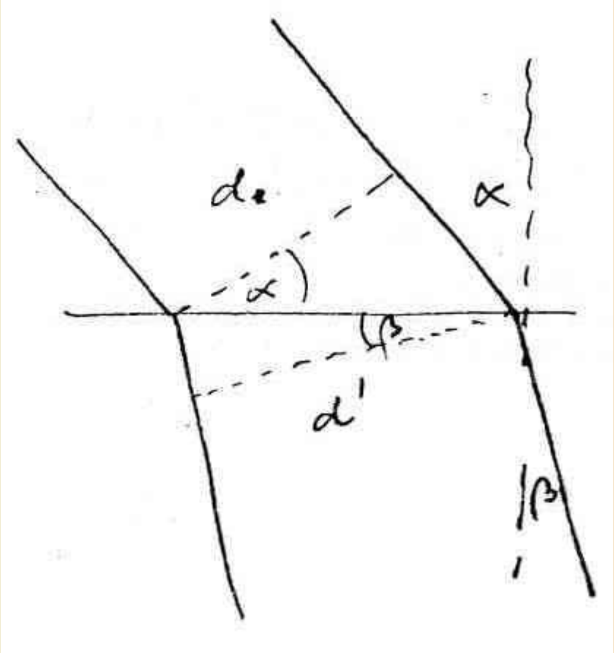
$$\sin\alpha + \Delta\alpha\cos\alpha = n\sin\beta + n\cos\beta\Delta\beta$$
$$= \sin\alpha$$

$$\Delta\beta = \Delta\alpha\frac{\cos\alpha}{n\cos\beta}$$

$$\Theta' = \Theta\frac{\cos\alpha}{n\cos\beta}$$

Leképezési hibák tengelyen kívüli pontokra

Asztigmatizmus



Másik jelenség: nyaláb szélesedés

$$\frac{d_0}{\cos\alpha} = \frac{d'}{\cos\beta}$$

$$d' = d_0 \frac{\cos\beta}{\cos\alpha}$$

Leképezési hibák tengelyen kívüli pontokra

Asztigmatizmus

Az új fókusz *z* irányban

$$f_{nz} = \frac{d'}{2}\frac{1}{\Theta'} = \frac{d_0}{2}\frac{\cos\beta}{\cos\alpha}\frac{n\cos\beta}{\cos\alpha}\frac{1}{\Theta_0} \qquad \Theta_0 = \frac{d_0}{2f_0}$$

$$f_{nz} = f_0 n \frac{\cos^2\beta}{\cos^2\alpha}$$

$$\mathrm{f}_{\mathrm{ny}} = \mathrm{f}_0\mathrm{n}$$ **tehát:** $$f_{nz} \neq f_{ny}$$

Leképezési hibák tengelyen kívüli pontokra

Asztigmatizmus

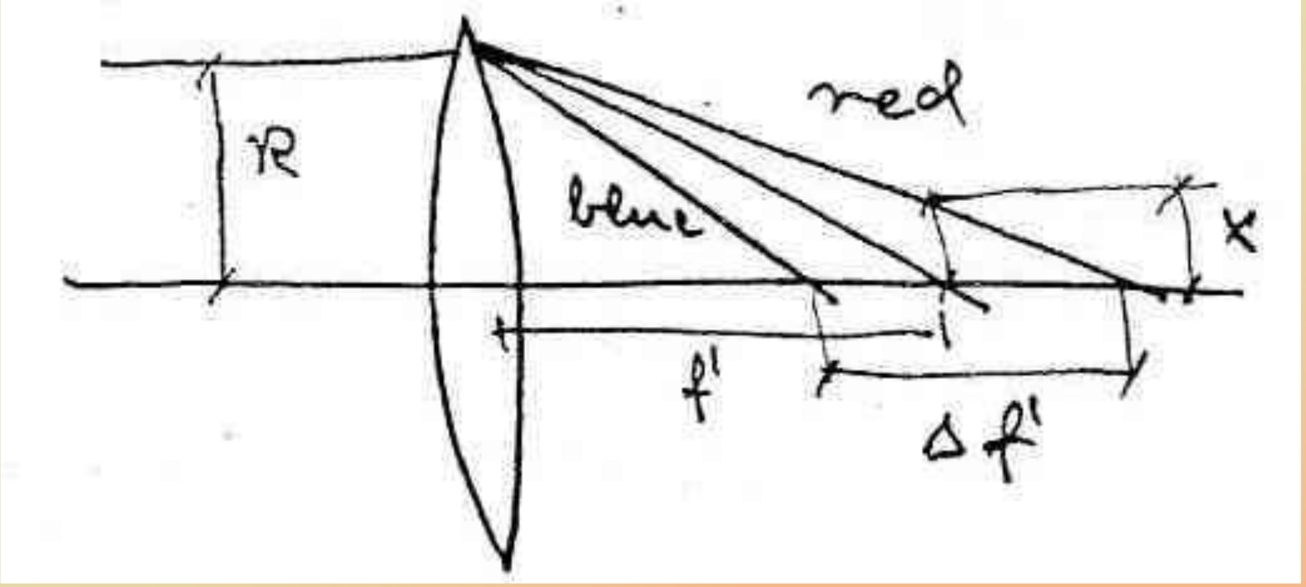
Egy példa: $f_0 = 80mm$ $\alpha = 45^0$ $n = 1{,}5$

$f_{ny} = 120mm$ $f_{nz} = 187mm$

Sugárkövetéssel a pontos eredmény:

$f_{ny} = 124{,}6mm$ $f_{nz} = 188mm$

Színi hiba



A diszperziót a V Abbe-számmal jellemezzük

$$V = \frac{n_B - n_R}{n_Y - 1}$$

Ahol: $\lambda_B = 486.13\,\text{nm}$ $\lambda_Y = 589.59\,\text{nm}$ $\lambda_R = 656.28\,\text{nm}$

Színi hiba

Nézzük meg mi az Abbe-szám fizikai tartalma!

Az előző ábráról látható, hogy:

$$\frac{R}{f'} = \frac{x}{\Delta f'/2} \qquad \textbf{azaz} \qquad x = \frac{R}{2}\frac{\Delta f'}{f'}$$

Tudjuk másrészt, hogy (lencsekészítők egyenlete):

$$\frac{1}{f} = (n-1)\left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2}\right)$$

Deriváljuk az egyenletet hullámhossz szerint

$$\frac{df}{d\lambda}(-\frac{1}{f^2}) = \frac{dn}{d\lambda}\left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2}\right)$$

Színi hiba

Fejezzük ki *(1/r_1-1/r_2)*-t a lencsekészítők egyenletéből, és helyettesítsük a deriváltba

$$\frac{1}{r_1}-\frac{1}{r_2}=\frac{1}{f(n-1)} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{df}{d\lambda}\left(-\frac{1}{f^2}\right)=\frac{dn}{d\lambda}\frac{1}{f(n-1)}$$

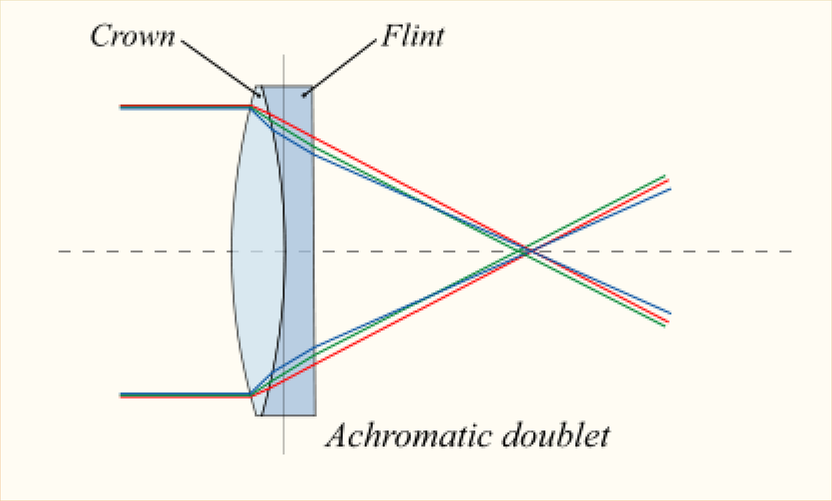
$$-\frac{df}{f}=d\lambda\frac{dn}{d\lambda}\frac{1}{(n-1)}\Rightarrow-\frac{\Delta f}{f}=\frac{\Delta n}{n-1}=V$$

Vagy a kromatikus hibával kifejezve:

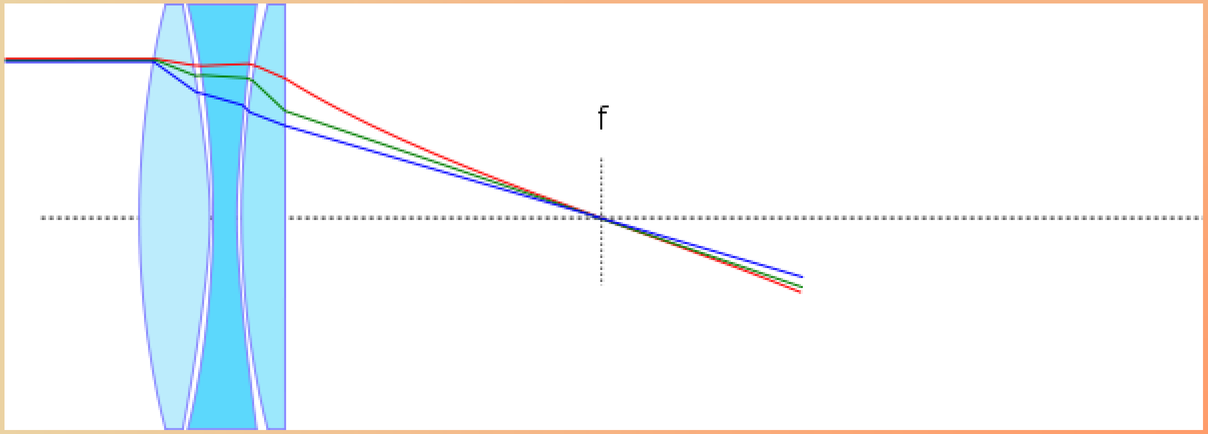
$$x=-\frac{R}{2}V$$

Színi hiba javítása

Akromáttal



Apokromát



Színi hiba javítása

Korrigálás két lencsével.
Tekintsünk két vékony lencsét, amelyek egymástól *t* távolságra vannak.
Ennek a lencserendszernek a fókusztávolsága felírható, mint

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{f_1} + \frac{1}{f_2} - \frac{t}{f_1 f_2}$$

Nézzük meg, hogy mi *1/f* megváltozása, ha *f* egy kicsiny *Δf*-el megváltozik!

$$\Delta\left(\frac{1}{f}\right) = \frac{1}{(f + \Delta f)} - \frac{1}{f} = \frac{f - f - \Delta f}{(f + \Delta f) f} = -\frac{\Delta f}{f^2} = \frac{V}{f}$$

Képezzük a lencserendszer *1/f* –ének a variációját!

Színi hiba javítása

$$\Delta\left(\frac{1}{f}\right)=\frac{V_1}{f_1}+\frac{V_2}{f_2}-t\left(\frac{V_1}{f_1 f_2}+\frac{V_2}{f_1 f_2}\right)$$

Annak a feltétele, hogy a lencserendszer akromatikus legyen *Δ=0* azaz:

$$t\frac{V_1+V_2}{f_1 f_2}=\frac{f_2 V_1+f_1 V_2}{f_1 f_2} \quad \Rightarrow \quad t=\frac{f_2 V_1+f_1 V_2}{V_1+V_2}$$

A legegyszerűbb esetben azonos anyagú lencséket alkalmazunk azaz $V_1=V_2$. Ekkor:

$$t=(f_1+f_2)/2$$

Tehát ha a lencserendszer tagjait ilyen távolságra helyezzük el akkor akromatikus rendszert kapunk. Ez jól kihasználható pl. az UV tartományban, ahol nehéz különböző diszperzójú anyagokat találni.