

ZADANIE 02

BUDOWA I KALIBRACJA SPEKTROMETRU

I. Cel ćwiczenia

Celem ćwiczenia jest zbudowanie najprostszego spektrometru i jego kalibracja z użyciem przykładowego źródła światła oraz wyznaczenie dokładności otrzymanego przyrządu w funkcji szerokości szczeliny wejściowej oraz gęstości siatki dyfrakcyjnej.

II. Podstawy teoretyczne

Spektrometr optyczny jest to przyrząd służący do pomiaru natężenia światła określonej części widma elektromagnetycznego w funkcji długości fali światła lub energii fotonu.

Podstawowym elementem każdego spektrometru jest element dyspersyjny – pryzmat lub siatka dyfrakcyjna, które rozszczepiają promieniowanie przestrzennie w zależności od jego długości fali. Siatka dyfrakcyjna to element optyczny składający się układu równych, równoległych i jednakowo rozmieszczonych szczelin. Pierwowzorem siatki dyfrakcyjnej był układ dwóch szczelin w doświadczeniu Tomasa Younga. Siatka jako układ wielu szczelin została wynaleziona w 1821 roku przez Fraunhofera i była pierwszym instrumentem pozwalającym wyznaczyć długość fal świetlnych. W zależności od konstrukcji wyróżnia się siatki odbiciowe – odbijające światło (siatką taką jest np. powierzchnia płyty CD) lub transmisyjne – przepuszczające światło (tworzone przez nacinanie rys oraz metody holograficzne i fotograficzne).

Siatka dyfrakcyjna jest charakteryzowana parametrem zwanym stałą siatki dyfrakcyjnej określającym odległość między środkami kolejnych szczelin. Typowa siatka dyfrakcyjna zawiera od kilkuset do kilku tysięcy szczelin na jeden milimetr. W przypadku siatki zawierającej na przykład 500 szczelin na milimetr stała siatki wynosi

$$D = \frac{1 \text{ mm}}{500} = 2 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-3} \text{ m} = 2 \text{ }\mu\text{m}.$$

Światło przechodząc przez siatkę dyfrakcyjną ulega ugięciu, przy czym kąt ugięcia spełnia warunek (patrz uzupełnienie):

$$D \sin \theta = n\lambda$$

gdzie:

λ – długość fali,

D – stała siatki,

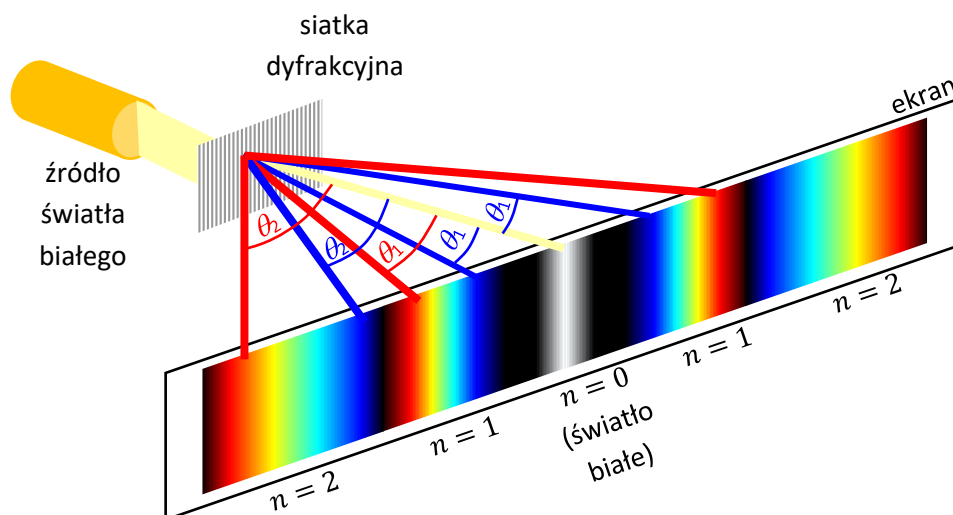
n – liczba naturalna zwana rzędem widma.

Ponieważ kąt ugięcia zależy od długości dali światła, światło białe po przejściu przez siatkę dyfrakcyjną zostanie rozszczepione (rys. 1). W wyniku tego za siatką obserwuje się serię tęczy po prawej i lewej stronie środka ekranu odpowiadające kolejnym rzędom widma, natomiast na środku ekranu nierozszczepione światło białe, które nie uległo ugięciu. W przypadku siatki dyfrakcyjnej scharakteryzowanej 500 szczelinami na milimetr granice widma widzialnego w pierwszym rzędzie będą ugięte pod kątami odpowiadającymi dla światła czerwonego $\sin \theta_{cz} = \frac{0,7 \text{ }\mu\text{m}}{2 \text{ }\mu\text{m}} = 0,35$, a dla

światła niebieskiego $\sin \theta_n = \frac{0,4 \text{ }\mu\text{m}}{2 \text{ }\mu\text{m}} = 0,2$. Więc odległość kątowa granic widma wynosi

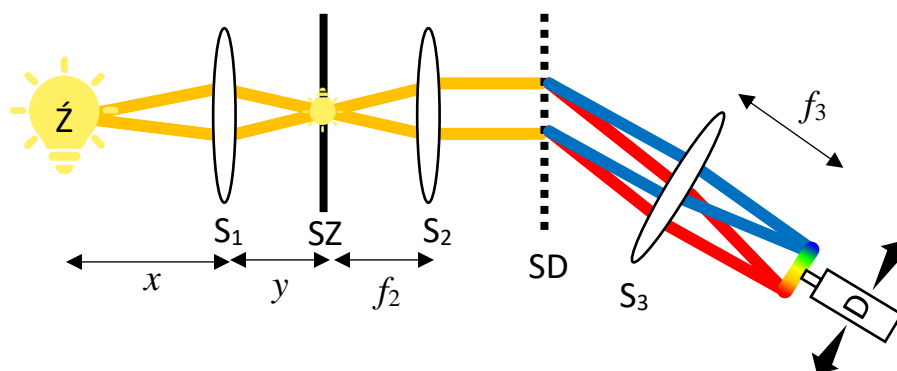
$$\Delta\theta = \theta_{cz} - \theta_n \approx 20,5^\circ - 11,5^\circ = 9,0^\circ$$

Warunkiem obserwacji kolejnych ugiętych prążków jest oczywiście $\theta \leq 90^\circ$, tzn. $\sin \theta = \frac{n\lambda}{D} \leq 1$, co oznacza, że dla siatek gęstszych (o mniejszej stałej siatki) obserwuje się mniej kolejnych rzędów widma lub mniejszy zakres widma.



Rys. 1. Obraz uzyskiwany na ekranie po przepuszczeniu przez siatkę dyfrakcyjną światła białego. Na rysunku odpowiednimi kolorami zaznaczono kąty ugięcia pierwszego (θ_1) i drugiego rzędu (θ_2) dla światła czerwonego i niebieskiego.

W skrócie, spektrometr optyczny działa w następujący sposób. Źródło światła emituje promieniowanie elektromagnetyczne o różnych długościach fali. Źródło to zostaje zobrazowane na szczeliny spektrometru, która staje się w przybliżeniu punktowym źródłem światła. Układ optyczny w spektrometrze formuje promieniowanie w wiązkę skolimowaną (równoległą) i kieruje ją na element dyspersyjny. Rozszczepiona wiązka jest kierowana na kolejne elementy układu optycznego skupiające je na detektorze. Najprostsza konstrukcja spektrometru, która będzie realizowana w tym doświadczeniu, została przedstawiona na rys. 2.



Rys. 2. Schemat najprostszego spektrometru. Na rysunku oznaczono jako \dot{Z} – źródło światła, S_1 – soczewkę skupiającą źródło na szczeliny spektrometru (SZ). S_2 – soczewkę kolimującą, SD – transmisyjną siatkę dyfrakcyjną, S_3 – soczewkę skupiającą rozszczepione światło na osi przesuwu detektora (D).

W tym przypadku elementami optycznymi zapewniającymi kolimację wiązki oraz jej skupienie na detektorze są soczewki, a elementem dyspersyjnym transmisyjna siatka dyfrakcyjna. Światło o różnych długościach fali jest skupione w innym miejscu przestrzeni w związku z tym przesuwanie detektora pozwala na pomiar natężenia światła w funkcji długości fali. Ze względu na niezanedbywalne rozmiary elementu światłoczułego w detektorze, przed detektorem dodatkowo umieszcza się przesłonę, aby precyzyjnie wybierać długość fali mierzonego światła. Generalna zasada mówi, że w spektrometrze szerokość przesłony przed detektorem powinna być identyczna jak szczeliny wejściowej (za źródłem światła). W klasycznych monochromatorach element dyspersyjny

był obracany, co pozwalało zmieniać długość fali światła padającego na nieruchomą szczelinę wyjściową spektrometru. W nowoczesnych spektrometrach stosuje się liniowe układy detektorów, pozwalające na jednoczesny pomiar natężenia światła w różnych miejscach przestrzeni (dla różnych długości fali światła). Jako elementów optycznych najczęściej używa się zwierciadeł co niweluje problem aberracji chromatycznej (wynikającej z dyspersji szkła różnej odległości ogniskowania dla różnych długości fali światła). Dodatkowo zastosowanie jako elementu dyspersyjnego siatki odbiciowej pozwala na znaczące zmniejszenie rozmiarów spektrometru.

W zależności od konstrukcji i zastosowania spektrometru, można wykonywać różne rodzaje analiz, takie jak spektroskopia absorpcyjna, fluorescencyjna, emisyjna czy Ramana. Spektrometry optyczne są niezwykle ważnym narzędziem w badaniach naukowych, przemyśle farmaceutycznym, kontroli jakości i wielu innych dziedzinach, gdzie dokładna analiza składu chemicznego jest kluczowa.

III. Wykonanie pomiarów



III.1. Wyposażenie


Masz do dyspozycji

- blat optyczny z zestawem uchwytów;
- zestaw soczewek o znanych ogniskowych;
- siatki dyfrakcyjne 500 rys/mm i 1000 rys/mm;
- szczeliny o różnej szerokości (1: 0,2 mm, 2: 0,5 mm, 3: 1 mm, 4: 1,5 mm);
- czerwony laser półprzewodnikowy;
- kalibracyjną diodę LED RGB;
- lampę spektralną;
- skaner dyfrakcyjny PASCO OS-8441;
- oprogramowanie Capstone/SparkVue do odczytów sygnałów ze skanera;
- komercyjny spektrometr Flame-T OceanInsight wraz z oprogramowaniem SpectraSuite.

III.2. Budowa spektrometru

Przed przystąpieniem do konstrukcji spektrometru zgodnie z rysunkiem 2, zastanów się nad rozplanowaniem jego elementów, tak aby wszystkie elementy swobodnie się mieściły na dostępnej powierzchni płyty. W miejscu, gdzie zamierzasz umieścić źródło zostaw trochę więcej miejsca, aby móc swobodnie wymieniać źródła światła.

Skaner dyfrakcyjny PASCO OS-8441 łączy w sobie czujnik położenia z czujnikiem światła. Czujnik światła zamontowany jest na szynie, którą można przesuwając w bok w zakresie 15,5 cm poprzez obracanie korby z boku skanera. Położenie czujnika jest odczytywane z rozdzielczością 0,01 mm. Aby zmierzyć dokładnie położenie czujnika, należy obracać korbą z niewielką prędkością. Podczas podłączania czujnika do urządzenia z oprogramowaniem zwróć uwagę na numer czujnika którym dysponujesz, tak aby podczas pomiaru połączyć się z nim (a nie na przykład z czujnikiem kolegów czy koleżanek pracującymi na innych stanowiskach). Są to numery w formacie xxx-xxx widoczne z tyłu na każdym z czujników obok ikony . Jeśli czujnik sygnalizuje rozładowaną baterię podłącz go do ładowarki. **W panelu narzędzi, korzystając z opcji  (Hardware Setup) wybierz ikonę koła zębatego obok odpowiedniego czujnika. Spowoduje to otwarcie Menu Właściwości. Wyłącz w niej funkcję automatycznego zerowania położenia czujnika położenia przy rozpoczęciu pomiaru. Możesz tam również zmienić czułość czujnika światła na wysoką, średnią lub niską.** Przed czujnikiem światła, umieszczony jest uchwyt z sześcioma przesłonami o szerokości 0,1 mm, 0,2 mm, 0,3 mm, 0,5 mm, 1,0 mm i 1,5 mm, które można zmieniać obracając pokrętko "aperture width" umieszczone z tyłu skanera. Zmiana szerokości przesłony pozwala kontrolować rozdzielczość przestrzenną i ilość wpadającego światła do czujnika natężenia światła. Przed

rozpoczęciem pomiarów sprawdź czy potrafisz swobodnie posługiwać się interfejsem programu, w tym uruchomić i zakończyć pomiar, wybrać odpowiednią częstotliwość próbkowania, poprawnie zapisać dane pomiarowe. Zwróć uwagę, że domyślna dokładność zapisu danych z czujnika może nie być niewystarczająca, aby móc przeprowadzić poprawną analizę danych. Należy to zmienić w panelu narzędzi korzystając z opcji  (Data Summary), a następnie kliknąć ikonę ustawień przy wybranym pomiarze, a następnie np. zmienić jednostki korzystając z kategorii Nazwy i symbole (Names and Symbols) czy liczbę cyfr znaczących korzystając z kategorii Format liczb (Numerical Format).

Podczas montażu elementów optycznych pamiętaj, aby najpierw przymocować sam uchwyt, a dopiero później umieszczać w nim odpowiednie elementy optyczne, tak aby przypadkowe przewrócenie się uchwytu nie skutkowało uszkodzeniem elementów optycznych. **Elementy optyczne ustawiaj na blacie, dbając aby po dodaniu kolejnego elementu na bieżąco optymalizować jego położenie w układzie.** Dodatkowo staraj się tak zbudować układ, aby straty światła na kolejnych elementach optycznych były jak najmniejsze. Precyzyjną pozycję soczewek w układzie możesz ustawić za pomocą przesuwów, na których zostały one umieszczone. Pilnuj, aby wszystkie elementy znajdowały się na wspólnej osi optycznej, a ich powierzchnie były prostopadłe do kierunku wiązki światła.

- Do płyty optycznej przykręć uchwyt i umieść w nim soczewkę S_1 o ogniskowej 5 cm.
- Bezpośrednio przed soczewką umieść laser czerwony, a po jej drugiej stronie, w jej ognisku, umieść najszerszą z dostępnych szczelin (3). Włącz laser. **Podczas pracy z włączonym laserem uważaj, aby przypadkowo nie skierować go w stronę swojej twarzy, czy do innego stanowiska pomiarowego!** Upewnij się, że laser jest ogniskowany na szczelinie. W razie konieczności dostosuj położenie soczewki za pomocą przesuwu na którym się znajduje.
- Za szczeliną umieść soczewkę S_2 o ogniskowej 10 cm, tak aby uzyskać za nią równoległą wiązkę światła. Upewnij się, że wiązka otrzymana za soczewką jest rzeczywiście wiązką równoległą, tzn. nie zmienia swojego rozmiaru w zależności od odległości od soczewki. W razie konieczności dostosuj położenie soczewki za pomocą przesuwu na którym się znajduje.
- W wiązce równoległej umieść siatkę dyfrakcyjną 1000 rys/mm.
- W wiązce promieni ugiętych umieść soczewkę S_3 o ogniskowej 10 cm. Płaszczyznę soczewki umieść tak, aby była prostopadła do wiązki ugiętej. Zwróć uwagę na fakt, że promienie o różnej długości fali będą rozszczepiane pod innym kątem i odległość przestrzenna między poszczególnymi barwami będzie wzrastać wraz z rosnącą odległością między soczewką a siatką dyfrakcyjną. Ustaw soczewkę na tyle blisko, aby skupiała całe widmo widzialne.
- Za soczewką umieść skaner optyczny, w odległości najostrzejszego obrazu, tak aby było możliwe swobodne przesuwanie detektora w obie strony od obserwowanego obrazu plamki laserowej, a ruch detektora odbywał się w płaszczyźnie prostopadłej do ugiętej wiązki. Upewnij się, że wiązka lasera jest ogniskowana na szczelinie detektora. W razie konieczności dostosuj położenie soczewki za pomocą przesuwu na którym się znajduje. **Ustaw pokrętło „aperture width” tak, aby szerokość przesłony detektora była taka sama jak szerokość szczeliny SZ.**

III.3. Wykonanie ćwiczenia

- Wyjmij wskaźnik laserowy i przed soczewką S_1 ustaw kalibracyjną diodę LED RGB, tak aby na szczelinie SZ otrzymać wyraźny obraz źródła światła. **Zwróć uwagę, że otrzymanie ostrego obrazu diody na szczelinie wymaga przestawienia soczewki S_1 , tak aby dla źródła (Z) umieszczonego w odległości x od soczewki uzyskać jej wyraźny obraz w odległości y odpowiadającej odległości między szczeliną (SZ) a soczewką (S_1) na szczelinie.**

- Sprawdź, czy ustawienie elementów optycznych jest optymalne, aby uzyskać widmo światła białego o maksymalnym natężeniu. W szczególności czy część wiązki nie pada na obudowy poszczególnych elementów optycznych oraz czy soczewka S_3 skupia całe widmo widzialne. Jeśli to konieczne wyreguluj położenie kolejnych elementów optycznych tak aby otrzymać jak najwyraźniejsze prążki widmowe na detektorze.
- Ustaw położenie detektora w odległości jednego-dwóch centymetrów od granicy obserwowanego widma.
- Uruchom pomiar natężenia światła rejestrowanego przez detektor i przesuając powoli detektor zmierz całe widoczne widmo. Następnie powtórz pomiar przesuując detektor w drugą stronę. **Zwróć uwagę, czy nie ma konieczności zmiany czułości detektora.**
- Korzystając ze spektrometru Flame-T i oprogramowania SpectraSuite zarejestruj widmo diody kalibracyjnej, zidentyfikuj linie które były mierzone w zbudowanym przez Ciebie spektrometrze.
- Zmień źródło światła na lampę spektralną i używając Twojego spektrometru zarejestruj jej widmo. Podczas skanowania zapisuj na karcie pomiarowej położenia kolejnych prążków widocznych gołym okiem wraz z określeniem ich koloru.
- Pomiar lampy spektralnej powtórz dla wszystkich dostępnych szerokości szczelin wejściowych (SZ) jednocześnie zmieniając ustawienie pokrętła „aperture width” aby szerokość przesłony przy spektrometrze była taka sama jak szczeliny wejściowej.
- Zarejestruj widmo lampy przy pomocy spektrometru komercyjnego.
- Całą procedurę powtórz zmieniając siatkę na 500 rys/mm.

Przed wyłączeniem programu upewnij się, że dane zostały zapisane z odpowiednią dokładnością.

IV. Analiza wyników pomiarów

Analiza danych winna zawierać następujące elementy:

- ustalenie realistycznych, dopuszczalnych błędów granicznych wielkości bezpośrednio mierzonych i wyznaczenie odpowiadających im niepewności standardowych – pamiętaj, że zdolność rozdzielcza przyrządu nie musi gwarantować sensownych błędów granicznych (oczywiście, możesz też od razu oszacować niepewności standardowe, bez przechodzenia przez etap błędów granicznych);
- prezentację widma kalibracyjnego diody LED RGB zmierzonego za pomocą zbudowanego spektrometru i porównanie z widmem zmierzonym spektrometrem komercyjnym z uwzględnieniem, że odpowiedź zastosowanej w budowanym przez Ciebie spektrometrze krzemowej fotodiody PIN może zależeć od długości fali padającego światła;
- na podstawie położenia maksimów widma kalibracyjnego zaproponowanie modelowej zależności położenia detektora od długości fali $y(\lambda)$, wyznaczenie parametrów tego modelu wraz z ich niepewnościami i kowariancjami;
- wyznaczenie zależności kalibracyjnej postaci $\lambda(y)$ wraz z niepewnością $u_\lambda(y)$ (patrz uzupełnienie);
- prezentację zmierzonych widm lampy spektralnej w funkcji długości fali wraz z dyskusją jej parametrów (intensywności sygnału, odległości poszczególnych linii widmowych, ich

szerokości linii widmowych w połowie wysokości) w zależności od szerokości szczeliny i stałej siatki dyfrakcyjnej;

- dla jednego wybranego widma lampy spektralnej dopasowanie obserwowanych linii profilem gaussowskim lub lorentzowskim (patrz uzupełnienie), wyznaczeniem intensywności linii, długości fali ich maksimum i szerokości połówkowej.

Jeśli na którymś z etapów analizy danych prowadzisz dopasowanie zależności modelowej metodą najmniejszych kwadratów, **obowiązkowo** podaj postać dopasowywanej funkcji oraz określ przyjęte niepewności. Podaj uzasadnienie wyboru zmiennej niezależnej, za wyjątkiem sytuacji, w których ona jest z góry narzucona. Przeprowadź walidację modelu uwzględniającą zasadność przyjętych niepewności pomiarowych. Jako wynik dopasowania podaj estymaty dopasowywanych parametrów wraz z ich niepewnościami. W uzasadnionych przypadkach przedyskutuj istotność dopasowywanych parametrów. Do dobrej praktyki należy również w przypadku dopasowania funkcji opisanej więcej niż jednym parametrem podanie kowariancji i współczynników korelacji parametrów a także wykresu reszt z tego dopasowania oraz jego dyskusja.

Pamiętaj też, że najczęściej używana metoda najmniejszych kwadratów wymaga wyników pomiarowych, z których każdy uzyskany jest w niezależnym akcie pomiarowym. **Nie mają takiego charakteru wielkości uzyskane np. w wyniku odejmowania jednej ustalonej wartości od wszystkich wyników pomiarów, jeśli wartość odejmowana pochodzi z pomiaru.**

V. Dodatkowe uwagi odnośnie do raportu

Nim przygotujesz raport, zaznajom się z uwagami zawartymi w [wymaganiach dotyczących raportu](#) zamieszczonymi na stronie pracowni. Absolutnie zalecane jest także świadome przyjrzenie się redakcji tekstu, a także tabel, rysunków i wzorów, sposobów ich numerowania, tytułowania i opisywania w dowolnym, ale wydanym przez uznane wydawnictwo, akademickim podręczniku do fizyki, jak również zajrzenie do kilku publikacji w różnych czasopismach naukowych, co może ułatwić podjęcie decyzji co do podziału Twego raportu na części.

W raporcie zamieść wszystkie surowe wyniki pomiarów tak, aby sięgając jedynie do raportu i bez potrzeby odwoływania się do protokołu z doświadczenia można było wykonać pełną i niezależną analizę Twych danych. Pamiętaj, że w niektórych przypadkach uzasadnione jest przeniesienie tych danych do Suplementu. W przypadku dużej liczby danych pomiarowych (np. zebranych komputerowo) dopuszczalne jest umieszczenie danych nie w formie tabel, ale w formie wykresów. Wówczas oryginalne dane należy dołączyć do raportu w formie cyfrowej (np. w wiadomości email do prowadzącego).

VI. Literatura uzupełniająca

- Sz. Szczeniowski, *Fizyka doświadczalna* Część IV – Optyka, Warszawa, 1983;
- D. Halliday, R. Resnick i J. Walker, *Podstawy fizyki*, t. 5, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2003;
- H. Szydłowski, *Pracownia fizyczna wspomagana komputerem*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, szereg wydań w latach 2003 - 2012;
- A. Zięba, *Analiza danych w naukach ścisłych i technice*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2013.

Pytania i zadania definiujące wymagania do ćwiczenia

Problem 1. Co oznacza termin *widmo liniowe*?

Problem 2. Na czym polega zjawisko dyspersji światła?

Problem 3. Na siatkę dyfrakcyjną mającą 1000 rys/mm pada światło monochromatyczne o długości fali $\lambda = 500$ nm. Jeden z promieni świetlnych ugina się na siatce pod kątem 30° . Oblicz rząd widma obserwowanego na ekranie dla tego promienia świetlnego.

Problem 4. Ile prążków interferencyjnych zobaczymy, gdy oświetlimy siatkę dyfrakcyjną o odległości między szczelinami $2 \mu\text{m}$ laserem o długości fali 650 nm? Ile prążków będzie widzianych w przypadku, gdy zmienimy siatkę dyfrakcyjną o dwa razy większej ilości rys na milimetr?

Problem 5. Na siatkę dyfrakcyjną pada prostopadle fioletowy promień świetlny. Jego szósty prążek interferencyjny powstaje w tym samym miejscu, co trzeci prążek interferencyjny promienia czerwonego o długości fali $\lambda = 780$ nm. Oblicz długość fali fioletowego promienia świetlnego.

Problem 6. Jakie są warunki obrazowania przy pomocy soczewki? Jakie są warunki potrzebne, aby otrzymać obraz rzeczywisty pomniejszony/powiększony? Gdzie należy ustawić soczewkę, aby z punktowego źródła otrzymać wiązkę promieni równoległych?

Problem 7. Izotropowe źródło światła promieniu $r = 1$ cm i mocy $P = 60$ W zostaje za pomocą soczewki o promieniu $R = 5$ cm i ogniskowej $f = 5$ cm zobrazowane na detektorze o średnicy $d = 4$ mm. W jakiej odległości należy ustawić źródło względem soczewki, aby sygnał rejestrowany na detektorze był maksymalny.

Wskazówka 1: Określ jaka musiałaby być odległość źródła od soczewki, aby jego obraz był mniejszy niż wymiary detektora. Czy to jest realne do osiągnięcia?

Wskazówka 2: Jaka część światła zostanie skupiona przez soczewkę w zależności od odległości źródła od soczewki?

Opracowała: Aneta Drabińska, sierpień 2023 r.

UZUPEŁNIENIE KALIBRACJA SPEKTROMETRU

W wyniku zebranych danych w tym ćwiczeniu otrzymujemy zależność sygnału rejestrowanego na detektorze od jego położenia, spektrometr zaś powinien użytkownikowi wykreślać zależność zmierzonej intensywności od długości fali światła. Dlatego też konieczna jest kalibracja spektrometru, tj. ustalenie zależności łączącej położenie detektora z długością fali światła jakiej to położenie odpowiada. Zagadnienie kalibracji, sprowadza się, w istocie, do następujących kroków:

- a) pomiaru zależności znanego sygnału od położenia detektora w celu wyznaczenia funkcji $y = y(\lambda, a_0, a_1, \dots, a_n)$, gdzie y jest zmierzonym położeniem detektora, λ jest znaną dokładnie długością fali, a parametry a_1, \dots, a_n są parametrami opisującymi funkcję. Ponieważ każdy z pomiarów jest obarczony niepewnością pomiarową, również oceny parametrów a_0, a_1, a_2 są obarczone niepewnościami u_k , oraz kowariancjami c_{kl} , gdzie $k, l = 0, \dots, n$ oraz $k \neq l$.
- b) odwróceniu owej formuły, do zależności $\lambda = \lambda(y, A_1, A_2, \dots, A_m)$, gdzie parametry A_i są pewnymi funkcjami parametrów zależności pierwotnej $A_i(a_0, a_1, \dots, a_n)$. Niepewności parametrów A_i wyrażają się jako $u_{A_i}^2 = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial A_i}{\partial a_k}\right)^2 u_k^2 + \sum_{k=1, l \neq i}^n \frac{\partial A_i}{\partial a_k} \frac{\partial A_i}{\partial a_l} c_{kl}$, a ocena kowariancji między tymi parametrami przyjmuje postać $c_{A_i A_j} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial A_i}{\partial a_k} \frac{\partial A_j}{\partial a_l} u_k^2 + \sum_{k=1, k \neq l}^n \frac{\partial A_i}{\partial a_k} \frac{\partial A_j}{\partial a_l} c_{kl}$.
- c) wyznaczeniu niepewności długości fali na podstawie pomiaru położenia detektora dla dowolnego sygnału ze wzoru $u_\lambda^2 = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial \lambda}{\partial A_i}\right)^2 u_{A_i}^2 + \left(\frac{\partial \lambda}{\partial y}\right)^2 u_y^2 + \sum_{i=1, j \neq i}^m \frac{\partial \lambda}{\partial A_i} \frac{\partial \lambda}{\partial A_j} c_{A_i A_j}$.

Założmy, że w wyniku procedury a) ustalono, że odpowiedź przyrządu wyraża się funkcją $y = a_0 + a_1 \lambda$, tzn. położenie detektora zależy liniowo od długości fali, której to położenie odpowiada. Niepewności parametrów a_0 i a_1 wynoszą odpowiednio u_0 i u_1 , natomiast ich kowariancja c_{01} . Zależność odwrotna, tzn. zależność długości fali mierzona przez detektor od jego położenia będzie wówczas funkcją $\lambda = A_0 + A_1 y$, gdzie $A_0 = -\frac{a_0}{a_1}$ oraz $A_1 = \frac{1}{a_1}$.

Niepewności parametrów A_i wyrażają się jako

$$u_{A_i}^2 = \left(\frac{\partial A_i}{\partial a_0}\right)^2 u_0^2 + \left(\frac{\partial A_i}{\partial a_1}\right)^2 u_1^2 + \frac{\partial A_i}{\partial a_0} \frac{\partial A_i}{\partial a_1} c_{01}$$

a ich kowariancja $c_{A_0 A_1} = \frac{\partial A_0}{\partial a_0} \frac{\partial A_1}{\partial a_0} u_0^2 + \frac{\partial A_1}{\partial a_1} \frac{\partial A_0}{\partial a_1} u_1^2 + \frac{\partial A_0}{\partial a_0} \frac{\partial A_1}{\partial a_1} c_{01} + \frac{\partial A_1}{\partial a_0} \frac{\partial A_0}{\partial a_1} c_{01}$.

Podczas niezależnego pomiaru nieznanego widma, użytkownik, za pomocą spektrometru mierzy położenie linii widmowej dla położenia spektrometru równego y (z niepewnością u_y).

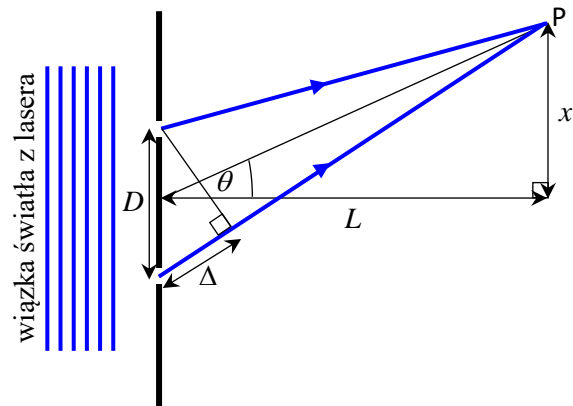
Wówczas wyznaczona na podstawie kalibracji długość fali zmierzonej linii będzie się wyrażała jako

$$\lambda = A_0 + A_1 y$$

zaś jej niepewność $u_\lambda^2 = \left(\frac{\partial \lambda}{\partial A_0}\right)^2 u_{A_0}^2 + \left(\frac{\partial \lambda}{\partial A_1}\right)^2 u_{A_1}^2 + \left(\frac{\partial \lambda}{\partial y}\right)^2 u_y^2 + \frac{\partial \lambda}{\partial A_0} \frac{\partial \lambda}{\partial A_1} c_{A_0 A_1} + \frac{\partial \lambda}{\partial A_1} \frac{\partial \lambda}{\partial A_0} c_{A_1 A_0} = \left(\frac{\partial \lambda}{\partial A_0}\right)^2 u_{A_0}^2 + \left(\frac{\partial \lambda}{\partial A_1}\right)^2 u_{A_1}^2 + \left(\frac{\partial \lambda}{\partial y}\right)^2 u_y^2 + 2 \frac{\partial \lambda}{\partial A_0} \frac{\partial \lambda}{\partial A_1} c_{A_0 A_1}$

SIATKA DYFRAKCYJNA

Aby zrozumieć zasadę działania elementu dyspersyjnego jakim jest siatka dyfrakcyjna rozpatrzmy najpierw zachowanie monochromatycznej (o jednej długości fali) wiązki skolimowanej (np. wiązki laserowej) po skierowaniu jej na przesłonę, w której wycięte są dwie równoległe szczeliny, o środkach odległych od siebie o D . Zgodnie z zasadą Huygensa, każdy punkt ośrodka, do którego dociera fala, staje się źródłem fali kulistej. Jeśli szczeliny są znacząco węższe niż długość fali, długość zaś szczelin jest znacząco większa od długości fali, to fale kuliste wytwarzane przez punkty szczelin interferują w taki sposób, że po drugiej stronie przesłony za każdą ze szczelin powstaje fala, którą z dobrym przybliżeniem można opisać jako cylindryczną. Taka symetria pozwala rozważać zagadnienie w płaszczyźnie prostopadłej do osi szczelin, a jego istotę ukazują Rysunek 3.



Rys. 3. Dyfrakcja światła na dwóch szczelinach.

Przyjmijmy, że na szczeliny w przysłonie światło z lasera pada prostopadle, a fala emitowana przez laser ma długość λ i okres T . Wtedy w punkcie P spotykają się dwie, spolaryzowane w tym samym kierunku, fale elektromagnetyczne o natężeniach pola elektrycznego:

$$E_1 = E_0 \sin(kr_1 - \omega t), \quad E_2 = E_0 \sin(kr_2 - \omega t), \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = \frac{2\pi}{T}$$

i składają się do wypadkowego natężenia pola:

$$E = E_1 + E_2 = E_0(\sin(kr_1 - \omega t) + \sin(kr_2 - \omega t)) = 2E_0 \sin\left(k \frac{r_1+r_2}{2} - \omega t\right) \cos\left(k \frac{r_2-r_1}{2}\right).$$

Wielkości $kr_1 - \omega t$ oraz $kr_2 - \omega t$ nazywamy *fazami fal*. Natężenie I światła, jakie odbiera nasze oko, jest proporcjonalne do wartości kwadratu natężenia pola elektrycznego uśrednionego względem czasu. Ponieważ zmienność czasowa natężenia E jest okresowa, więc wystarczy wykonać uśrednienie względem jednego okresu:

$$\frac{1}{T} \int_0^T \sin^2\left(k \frac{r_1+r_2}{2} - \omega t\right) dt = \frac{1}{2},$$

co daje stałą, którą włączymy do definicji natężenia oświetlenia, otrzymując w wyniku:

$$I = 4I_0 \cos^2\left(k \frac{r_2-r_1}{2}\right) = 2I_0(1 + \cos(k(r_2 - r_1))) = 2I_0(1 + \cos \delta), \tag{1}$$

gdzie

$$\delta = \frac{2\pi\Delta}{\lambda}, \quad \Delta = r_2 - r_1 \tag{2}$$

jest różnicą faz obu fal, a Δ jest różnicą dróg, jakie pokonały obie fale.

Niech obserwacja prowadzona będzie pod kątem θ do wiązki światła z lasera, jak to przedstawia Rysunek 1, wtedy:

$$\Delta = r_2 - r_1 = \sqrt{\left(x + \frac{D}{2}\right)^2 + L^2} - \sqrt{\left(x - \frac{D}{2}\right)^2 + L^2}.$$

Ponieważ odległość D między szczelinami jest znacząco mniejsza niż odległość obserwacji L od szczelin, możemy więc rozwinąć różnicę dróg wokół punktu $D = 0$ i zachować jedynie wyraz najniższego rzędu:

$$\Delta \approx \frac{Dx}{\sqrt{x^2 + L^2}} = D \sin \theta,$$

co prowadzi do różnicy faz:

$$\delta = \frac{2\pi D \sin \theta}{\lambda}.$$

Warto zwrócić uwagę na fakt, że ten ostatni wzór przedstawia ściśle różnicę faz, jaką znajdziemy

w przypadku, gdy promienie są równoległe. W praktycznych doświadczeniach, na drodze promieni ustawiamy soczewkę i otrzymujemy obraz na ekranie w płaszczyźnie jej ogniskowej.

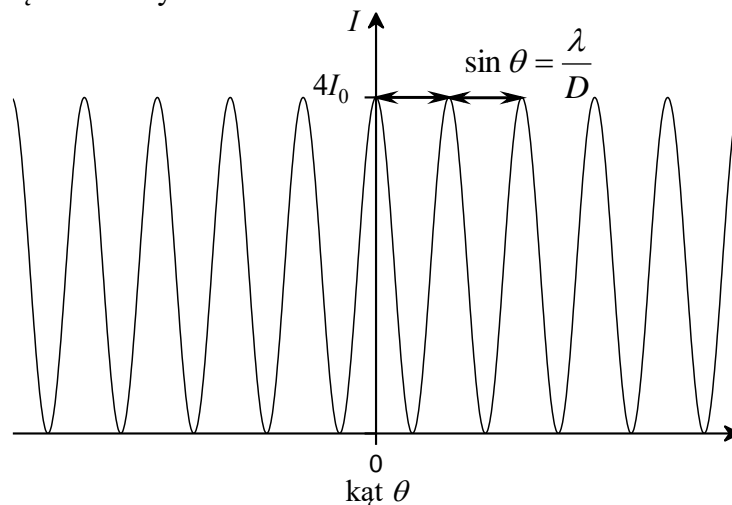
Wróćmy do wyrażenia (1), z którego widzimy, że jeśli obserwacje prowadzimy pod takim kątem θ , że różnica δ faz w punkcie P wynosi $0, \pm 2\pi, \pm 4\pi, \dots$, czyli gdy

$$\sin\theta_n = \frac{\lambda}{D}n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

to obserwujemy wzmocnienie (tzw. interferencję konstruktywną) natężenia światła do maksymalnej wartości $4I_0$, a jeśli kąt jest taki, że różnica δ faz wynosi $\pm\pi, \pm 3\pi, \pm 5\pi, \dots$, czyli:

$$\sin\theta_n = \frac{\lambda}{2D}(2n + 1), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

to mamy wygaszenie oświetlenia do zera (dochodzi do tzw. interferencji destruktywnej). Przy pośrednich wartościach fazy mamy pośrednie wartości intensywności oświetlenia. Mówimy, że wiązki światła interferują ze sobą – na ekranie widzimy prążki jasne i ciemne, jak ukazuje to przykładowy wykres natężenia na Rysunku 4.



Rys. 3. Zależność natężenia światła (I) od kąta (θ) po przejściu światła o długości fali λ przez dwie nieskończone cienkie szczeliny odległe od siebie o D .

Jeśli skonfrontujemy te wyniki z relacją ukazaną w związku (2) i wiążącą różnicę faz z różnicą dróg, to zobaczymy, że wzmocnienie interferencyjne znajdujemy w punktach, dla których różnica długości dróg promieni jest wielokrotnością długości fali:

$$\delta = \frac{2\pi\Delta}{\lambda} = 2\pi n \quad \Rightarrow \quad \Delta = n\lambda.$$

Jasny prążek odpowiadający wartości $n = 0$ zwany jest prążkiem zerowego rzędu, a następne prążki zwiemy odpowiednio prążkami pierwszego, drugiego, ... rzędu. Ciemne prążki, czyli obszary, gdzie następuje wygaszenie pojawiają się tam, gdzie różnica długości dróg jest równa nieparzystej wielokrotności połówki długości fali:

$$\delta = \frac{2\pi\Delta}{\lambda} = (2n + 1)\pi \quad \Rightarrow \quad \Delta = (2n + 1)\frac{\lambda}{2}.$$

W przypadku gdy interesuje nas obraz interferencyjny z większej liczby szczelin, musimy rozważyć interferencję światła z wielu źródeł. Załóżmy, że mamy do czynienia z $N = 4$ punktowymi źródłami światła umieszczonymi w odległości D od siebie. Na ekranie spotykają się cztery, spolaryzowane w tym samym kierunku, fale elektromagnetyczne o natężeniach pola elektrycznego:

$$\begin{aligned} E_1 &= E_0 \sin(kr_1 - \omega t), \\ E_2 &= E_0 \sin(kr_2 - \omega t), \\ E_3 &= E_0 \sin(kr_3 - \omega t), \\ E_4 &= E_0 \sin(kr_4 - \omega t). \end{aligned}$$

Przy czym przesunięcie fazowe każdego z promieni względem sąsiedniego wynosi

$$\delta = \frac{2\pi D \sin \theta}{\lambda}$$

Czyli

$$\begin{aligned} E_1 &= E_0 \sin(kr_1 - \omega t), \\ E_2 &= E_0 \sin(kr_1 + \delta - \omega t), \\ E_3 &= E_0 \sin(kr_1 + 2\delta - \omega t), \\ E_4 &= E_0 \sin(kr_1 + 3\delta - \omega t). \end{aligned}$$

Te cztery fale elektromagnetyczne składają się do wypadkowego natężenie pola:

$$E = E_1 + E_2 + E_3 + E_4$$

Zauważmy, że

$$E_1 + E_4 = 2E_0 \sin\left(kr_1 + \frac{3}{2}\delta - \omega t\right) \cos\frac{3\delta}{2}$$

oraz

$$E_2 + E_3 = 2E_0 \sin\left(kr_1 + \frac{3}{2}\delta - \omega t\right) \cos\frac{\delta}{2}.$$

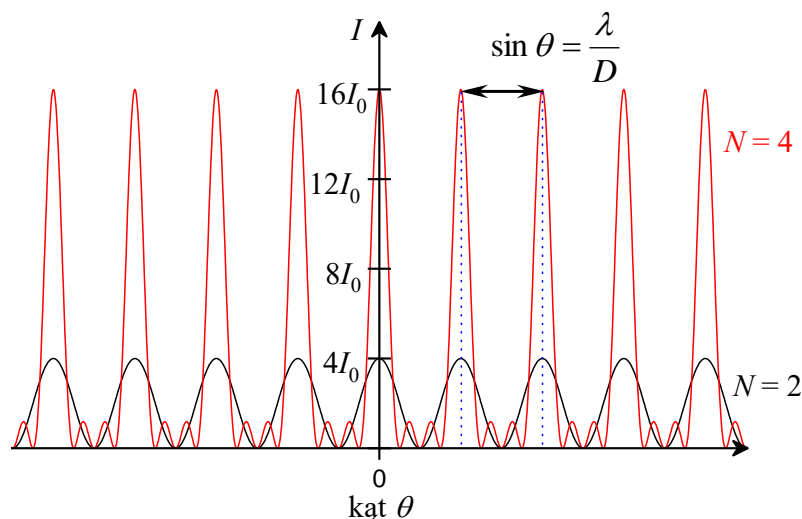
Stąd

$$\begin{aligned} E &= E_1 + E_2 + E_3 + E_4 = 2E_0 \sin\left(kr_1 + \frac{3}{2}\delta - \omega t\right) \left(\cos\frac{3\delta}{2} + \cos\frac{\delta}{2}\right) \\ &= 2E_0 \sin\left(kr_1 + \frac{3}{2}\delta - \omega t\right) \cdot 2 \cos \delta \cos\frac{\delta}{2}. \end{aligned}$$

Podobnie jak w przypadku dwóch szczelin część zależna od czasu się uśrednia w wyniku czego otrzymujemy natężenie światła postaci:

$$I = 16I_0 \cos^2 \delta \cos^2 \frac{\delta}{2} \quad (7)$$

Jak możemy zauważyć na Rysunku 5 obraz powstały przy oświetleniu czterech szczelin składa się z serii prążków interferencyjnych podobnie jak dla dwóch szczelin. Odległości pomiędzy głównymi maksimum się nie zmieniają (przy zachowaniu odległości między szczelinami d i długości fali λ). Położenia maksimum głównych nie zależą więc od liczby szczelin N . Nastąpił natomiast bardzo wyraźny *wzrost natężenia maksimum głównych*, ich zwężenie oraz pojawiły się wtórne maksima pomiędzy nimi. W miarę wzrostu liczby szczelin siatki maksima główne stają się coraz węższe, a maksima wtórne zanikają. Natężenie maksimum głównych ma wartość $I = I_0 N^2$, czyli N^2 razy większe niż dla pojedynczego źródła.



Rys. 5. Wykres natężenia światła (I) od kąta (θ) po przejściu światła o długości fali λ przez dwie i cztery nieskończenie cienkie szczeliny odległe od siebie o D .

ANALIZA LINII WIDMOWYCH

Widmo lampy spektralnej składa się z serii kilku linii widmowych odpowiadającym przejściom emisyjnym w gazie. Podstawowym parametrem charakteryzującym linie spektralne jest ich położenie, odpowiadające długości fali (energii) emitowanego fotonu. W związku z niezerowym czasem życia pobudzonego stanu kwantowego z którego zachodzi przejście, a w konsekwencji nieoznaczoności czasu i energii w mechanice kwantowej również z brakiem możliwości określenia dokładnej energii stanu kwantowego linie widmowe mają pewną szerokość spektralną.

W kontekście analizy linii widmowych, często stosowanym profilem opisującym kształt linii o charakterze rezonansowym jest profil Lorentza (rys. 6) wyrażony równaniem:

$$I(x) = \frac{2A}{\pi} \frac{w}{(x - x_c)^2 + w^2}$$

gdzie poszczególne parametry mają następujące znaczenie:

A – pole pod wykresem

x_c – położenie środka linii

w – szerokość linii równa jej szerokości połówkowej (tzw. FWHM – *Full Width at Half Maximum*)

natomiast maksymalna wysokość linii jest równa

$$I_0(x_c) = \frac{2A}{\pi w}$$

W opisie zjawisk, gdzie cząsteczki lub atomy reagują z promieniowaniem w wyniku ruchów termicznych, co prowadzi do poszerzenia linii często spotykanym modelem w analizie linii widmowych jest profil Gaussa (rys. 7) opisany równaniem:

$$I(x) = \frac{A}{w\sqrt{\pi/2}} \exp\left(-2 \left(\frac{x - x_c}{w}\right)^2\right)$$

gdzie poszczególne parametry mają następujące znaczenie:

A – pole pod wykresem

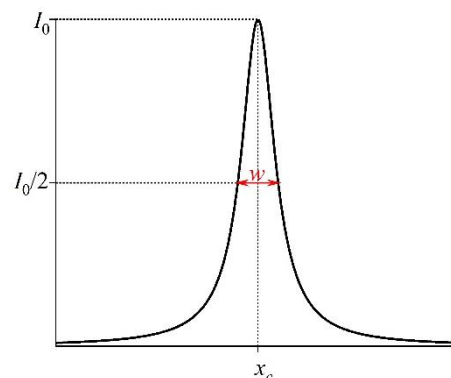
x_c – położenie środka linii

w – szerokość linii

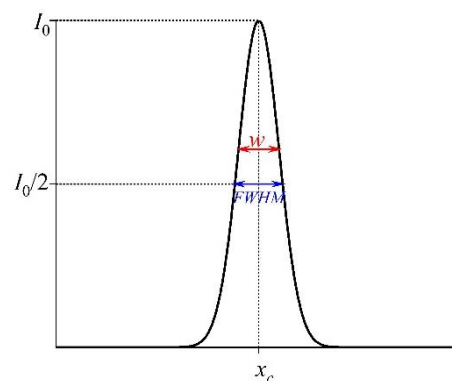
W tym przypadku szerokość połówkowa $FWHM = w\sqrt{2 \ln 2}$, natomiast jej maksymalna wysokość jest równa $I_0(x_c) = \frac{A}{w\sqrt{\pi/2}}$.

Zarówno profil Lorentza jak i Gaussa charakteryzuje się symetrycznym, dzwonowatym kształtem, odzwierciedlającym statystyczne rozkłady energii w systemie. W praktyce często stosuje się także profile kombinowane, uwzględniające różne aspekty oddziaływania cząsteczek z promieniowaniem.

Uzupełnienie: Aneta Drabińska na podstawie instrukcji autorstwa Romana J. Nowaka oraz Wojciecha Wasilewskiego.



Rys. 6. Linia widmowa o profilu Lorentza.



Rys. 7. Linia widmowa o profilu Gaussa.