

Wie konfiguriere ich ein Spektrometer?

Es ist nicht ganz einfach, für eine bestimmte Anwendung die optimale Konfiguration eines Spektrometers festzulegen. Mehrere Faktoren müssen berücksichtigt werden. Die Pixelzahl des eingebauten Detektors ist dabei nur eines von vielen Kriterien.

Ein häufig entscheidendes Kriterium bei der Konfiguration eines Spektrometers ist die optische Auflösung. Diese wird bestimmt durch eine Kombination von Pixelzahl des Detektors, Größe des Eingangsspalts und gewähltem Gitter (Grating). Häufig wird hier jedoch nur von der Pixeldispersion, also dem Quotienten aus spektraler Breite und Pixelzahl, gesprochen. Die Pixeldispersion ist aber nur ein rein rechnerischer Wert, der stets besser ausfällt, als der tatsächlich physikalisch messbare Wert bei voller Halbwertsbreite (3dB, FWHM, Bild 1). Doch nur durch Spezifizierung der tatsächlichen optischen Auflösung gemessen bei 3dB können verschiedene Spektrometerdesigns direkt verglichen werden. Nur dadurch können auch Stolpersteine erkannt werden, wie z.B. ein Gitter, das nicht alle verfügbaren Pixel nutzt, oder aber ein optisches Design, das keine scharfe Abbildung des Eingangsspalt auf die Detektorzeile projiziert, wie z.B. beim Cross Czerny-Turner Design.

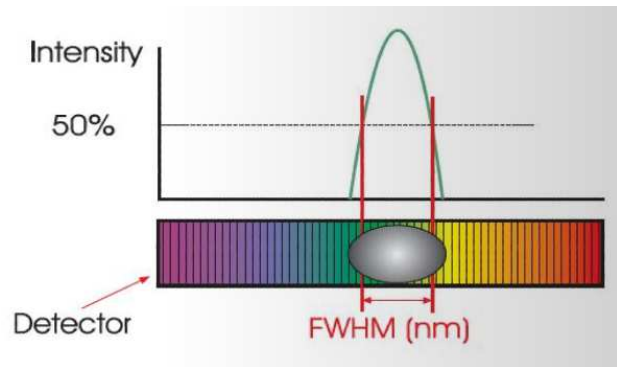


Bild 1: Full Width Half Maximum (Halbwertsbreite)

Ein weiterer wichtiger Faktor bei der Spezifizierung eines Spektrometers ist die Empfindlichkeit (Sensitivity) der Detektorzeile. Diese ist völlig unabhängig von der Anzahl der Pixel (Ausnahme: 2-D Detektorarray mit matrixartig angeordneten Pixeln). Wichtig ist hier ein vergleichender Blick auf die Empfindlichkeitskurven der verschiedenen Detektoren (siehe Bild 2). Für den sichtbaren Bereich stehen unabhängig von der Anzahl der Pixel CCDs verschiedener Hersteller zur Auswahl. Da im nahen Infrarot-Bereich die Empfindlichkeit der herkömmlichen CCDs jedoch deutlich nachlässt, empfiehlt sich hier die Wahl eines anderen Detektors.

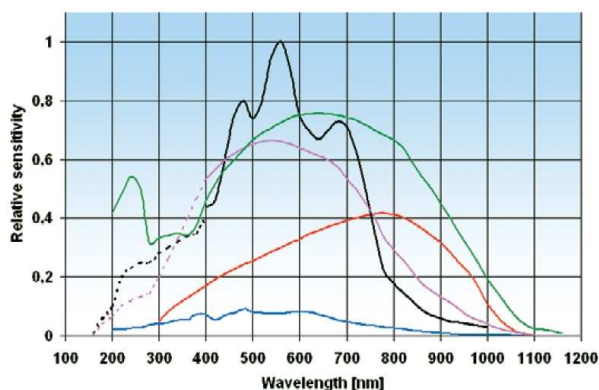


Bild 2: Empfindlichkeitskurven der Detektoren in nm

Das Signal/Rausch-Verhältnis des Detektors muss bei der Spektrometerwahl ebenso berücksichtigt werden. Bei

üblichen CCDs geht eine höhere Empfindlichkeit mit einem schlechteren Signal/Rausch-Verhältnis einher. Bis zu einem gewissen Maß kann dies durch Mittelung (Averaging) über mehrere Messungen des Spektrums kompensiert werden. Durch Mittelung verbessert sich

das Signal/Rausch-Verhältnis um die Quadratwurzel der Anzahl der gemittelten Messzyklen. D.h., eine Mittelung über 100 Messungen verbessert das Signal-Rausch Verhältnis um den Faktor 10. Dennoch gibt es Anwendungen, die hinsichtlich des Signal-Rausch Verhaltens höhere Anforderungen stellen. Hier sollte man sehr genau das spezifizierte Signal/Rausch-Verhältnis für jede Kombination von optischer Bank und Detektor in einem Spektrometer vergleichen. Dabei ist es wichtig darauf zu achten, dass die Signal/Rausch-Werte für das gesamte Spektrometer angegeben sind, denn was nützt das gute Signal/Rausch-Verhältnis eines Detektors wenn er in einem minderwertigen Aufbau integriert ist. Eine gute Methode zum Vergleich des Signal/Rausch-Verhaltens verschiedener Detektoren ist es, die mittlere absolute Abweichung und die mittlere quadratische Abweichung (Standardabweichung) pro Pixel über 100 Scans zu vergleichen. Das Signal/Rausch-Verhältnis ist dann der Quotient aus beiden Werten. Für diese Berechnung sollte der Detektor nahe an die Sättigung gebracht werden und, wenn nötig, ein adäquates Smoothing eingestellt werden.

Besonders trickreich kann die Auswahl des optimalen Gitters (Grating) sein. Hier müssen gewünschter Wellenlängenbereich und benötigte optische Auflösung berücksichtigt werden. Der Wellenlängenbereich kann sowohl durch den Detektor also auch durch das Gitter

begrenzt werden. Die Auflösung wird durch das gewählte Gitter, die Größe des Eingangsspalts und durch die Anzahl und Größe der Pixel des Detektors festgelegt. Außerdem beeinflusst das Gitter auch die Empfindlichkeit des Spektrometers, da die einzelnen Gitter an verschiedenen Wellenlängenpunkten ihre jeweils höchste Effizienz (Blaze) haben. Daher ist es ratsam zur Systemoptimierung

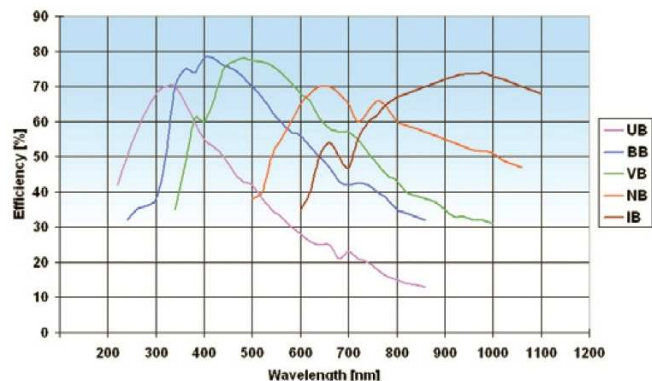


Bild 3: Effizienzkurven des 600 Linien/mm Gratings

auch einen Blick auf die Effizienzkurven (siehe Bild 3, Gitterbezeichnungen rechts stehend) der einzelnen Gitter zu

nehmen. Für sehr diffizile Anwendungen kann eine Zwei- oder Mehrkanal-Lösung mit verschiedenen Wellenlängenbereichen, Gittern und Eingangsspalten erforderlich sein.

Faseroptische Spektrometer verfügen üblicherweise über einen Eingangsspalt am faseroptischen Eingang. Dieser Spalt (siehe Bild 4) kann in verschiedenen Größen ausgeführt sein. Generell gilt: je schmaler der Spalt, desto besser die Auflösung; je breiter der Spalt, desto mehr Licht trifft auf den Detektor. Letztlich läuft es auf einen Kompromiss zwischen Auflösung und Empfindlichkeit bzw. Signalstärke hinaus.

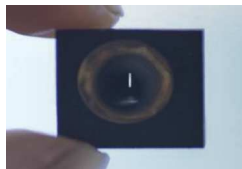


Bild 4: Eingangsspalt

Die Festlegung aller weiteren Optionen eines Spektrometers ist relativ einfach. Zum Beispiel muss für den UV-Bereich unterhalb von 360nm eine spezielle Beschichtung auf den Standard-CCD Detektor aufgebracht werden. Bestimmte Detektoren benötigen diese Option jedoch nicht. Um störende Effekte durch die 2. harmonische Brechung am Gitter zu vermeiden, können speziell beschichtete Optiken oder Langpassfilter eingebaut werden.

Weitere Optionen, wie z.B. die Nichtlinearitäts-Kalibrierung oder die Irradiance-Kalibrierung für radiometrische Messungen, sind besonderen Anwendungen vorbehalten.

Beispiel-Konfiguration:

Benötigt wird ein System zur Fluoreszenzmessung von einer Flüssigkeit in einer Standardküvette. Als erstes muss der Wellenlängenbereich und die benötigte optische Auflösung bedacht werden. Viele Fluoreszenzen werden im UV-Bereich angeregt und antworten im Sichtbaren. Soll beides im Spektrum sichtbar sein, muss ein breiter Spektralbereich von 200 ... 1100 nm gewählt werden. Soll die Anregungswellenlänge ausgeblendet werden und nur die Antwort sichtbar sein, kann ein weniger breiter Spektralbereich, z.B. von 360 ... 1100 nm oder von 500 ... 1100 nm gewählt werden. Alle diese Bereiche können mit einem Gitter von 300 oder 600 Linien pro Millimeter realisiert werden.

Aus Erfahrung wissen wir, dass die Fluoreszenzantwort ein relativ schwaches Signal mit einem breiten Peak (FWHM-Wert) ist. Deshalb muss ein empfindlicher Detektor, meist eine CCD-Zeile, und ein relativ breiter Eingangsspalt (üblich sind 200 μm) gewählt werden. Durch den großen Spalt gelangt mehr Licht in das Spektrometer, aber natürlich leidet darunter die Auflösung, was bei Fluoreszenzspektroskopie aber nicht kritisch ist. Bei einem Gitter von 300 Linien/mm, einem Eingangsspalt von 200 μm und einem CCD-Detektor liegt die Auflösung bei 8 nm, mit einem Gitter von 600 Linien/mm bei 4 nm.

Natürlich gibt es neben dem Spektrometer noch weiteres Zubehör zu bestimmen, z.B. Lichtquellen, Software für verschiedenste Anwendungen, faseroptische Komponenten und vieles mehr. Michael Rotschädl und Gabriele Walling aus dem Mountain Photonics Team helfen Ihnen gerne bei der richtigen Auswahl.