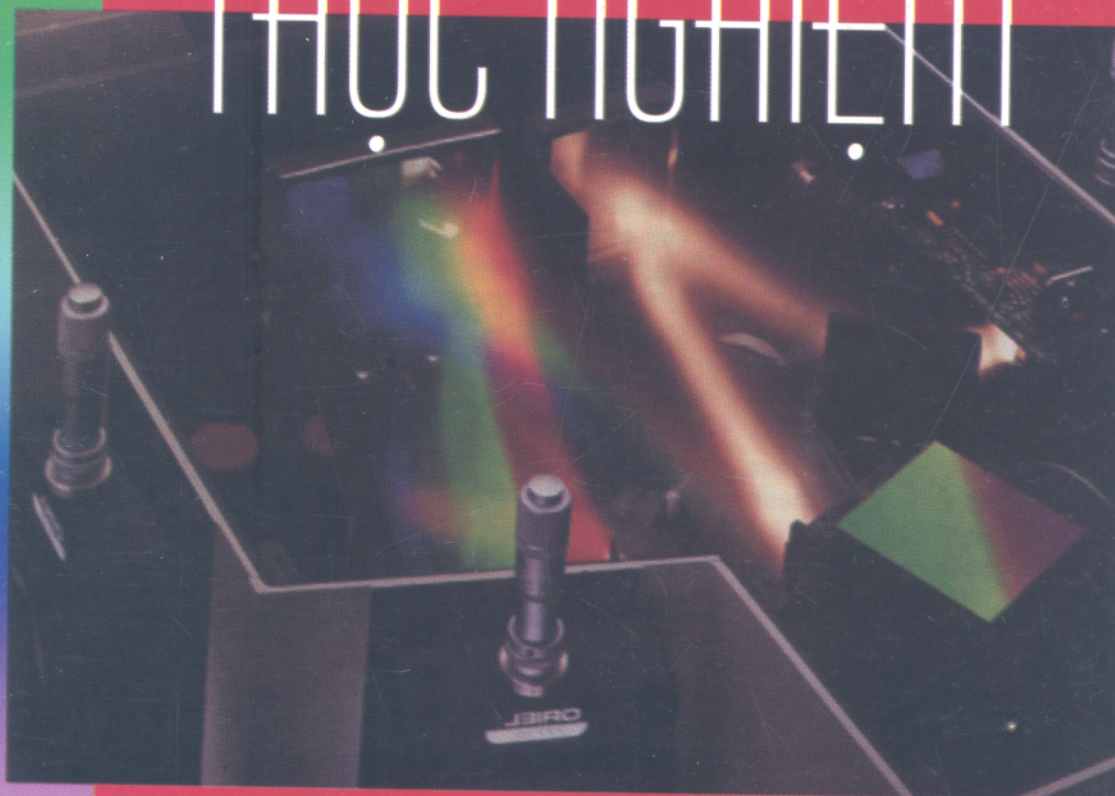


NGUYỄN THẾ BÌNH

QUANG PHỔ HỌC THỰC NGHIỆM



NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC

NGUYỄN THẾ BÌNH

QUANG PHỔ HỌC THỰC NGHIỆM

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC

MỤC LỤC

Trang

Lời nói đầu	5
Chương 1. VÀI NÉT VỀ CẤU TRÚC PHỔ PHÂN TỬ	7
1.1. Liên kết phân tử và năng lượng phân tử	7
1.2. Phân loại các phổ phân tử có 2 nguyên tử	11
1.3. Phổ dao động của phân tử nhiều nguyên tử	23
1.4. Các phương pháp khảo sát dao động phân tử	25
Chương 2. NGUỒN SÁNG	28
2.1. Nguồn sáng dùng trong quang phổ phát xạ	28
2.2. Nguồn sáng trong quang phổ hấp thụ, huỳnh quang và tán xạ Raman	38
2.3. Nguồn sáng Laser	56
Chương 3. CÁC LINH KIỆN QUANG HỌC	84
3.1. Lăng kính	84
3.2. Cách tử nhiễu xạ	89
3.4. Các bản bước sóng và máy bổ chính độ phân cực	97
3.5. Giao thoa kế Fabry – Perot	108
Chương 4. MÁY QUANG PHỔ	127
4.1. Máy quang phổ đo bức xạ	127
4.2. Máy quang phổ đo hấp thụ	134
4.3. Máy quang phổ hấp thụ hồng ngoại	136
Chương 5. HỆ THU BỨC XẠ TRONG QUANG PHỔ	142
5.1. Detector nhiệt	144
5.2. Detector photon	147
5.3. Detector đa kênh	155

Chương 6. MỘT SỐ KỸ THUẬT ĐO QUANG ĐIỆN	160
6.1. Kỹ thuật khuếch đại lock - in.....	160
6.2. Kỹ thuật Boxcar.....	169
6.3. Streak Cameras.....	176
6.4. Autocorrelator.....	181
TÀI LIỆU THAM KHẢO	187

Lời nói đầu

*Giáo trình **Quang phổ học thực nghiệm** được biên soạn nhằm trang bị cho sinh viên những kiến thức cơ bản về nguyên lý hoạt động của các thiết bị đo đạc, nghiên cứu thường gặp trong thí nghiệm quang học và quang phổ học. Đây là giáo trình chính thức viết theo khung chương trình giảng dạy của Khoa Vật Lý, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội. Ngoài ra, giáo trình cũng là tài liệu tham khảo cho cán bộ và sinh viên các ngành liên quan khác như hóa học, sinh học, môi trường... khi cần tìm hiểu để tiếp xúc với các thí nghiệm đo đạc quang học, quang phổ.*

Phương pháp quang phổ học là một phương tiện vừa truyền thống vừa hiện đại để nghiên cứu cấu trúc vật chất. Cho đến nay nó vẫn là phương pháp chủ yếu để phân tích định tính, định lượng các mẫu vật ở mọi trạng thái lỏng, rắn, khí, được ứng dụng rộng rãi trong các nghiên cứu vật lý, hóa học, sinh học, môi trường...

Từ khi nguồn sáng laser ra đời, phương pháp quang phổ học đã phát triển vượt bậc, các đối tượng và phạm vi ứng dụng được mở rộng hơn. Với sự phát triển của các laser điều hướng bước sóng, laser xung cực ngắn người ta đã có thể nghiên cứu các quá trình động học, phân tích phân giải thời gian của các quá trình và hiện tượng khác nhau. Những phương pháp quang phổ học laser hiện đại cho phép đo đạc các thuộc tính quang của các vật liệu bán dẫn, quang điện tử phục vụ các mục đích nghiên cứu vật liệu mới, ứng dụng trong thông tin quang, công nghệ nano v.v...

Giáo trình này trình bày những nguyên tắc chung của các thiết bị dùng trong quang phổ học thực nghiệm, là cơ sở để tiếp tục tìm hiểu sâu hơn các phương pháp nghiên cứu quang phổ học khác nhau.

Kiến thức cần có trước khi học giáo trình này là cấu trúc phổ nguyên tử và phân tử. Để tham khảo, chúng tôi trình bày tóm tắt một số kiến thức

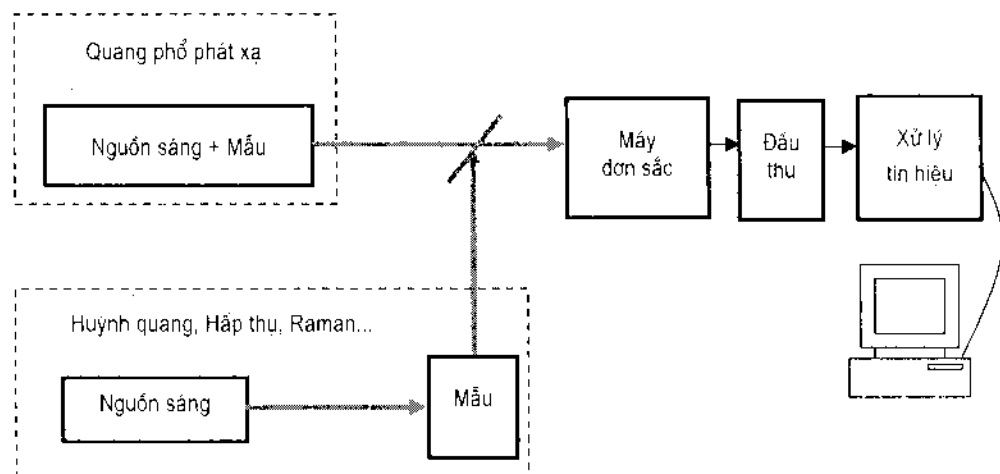
cơ bản về cấu trúc phổ phân tử trong chương đầu. Thành phần không thể thiếu được trong một phép đo quang học, quang phổ là nguồn sáng, máy quang phổ, máy đơn sắc và nguồn thu tín hiệu được trình bày trong các chương tiếp theo. Một số kiến thức quang học cơ bản liên quan đến các linh kiện quang học như lăng kính, cách tử, các bản bước sóng, giao thoa kế Fabry -- Perot... cũng được nhắc lại nhằm giúp sinh viên dễ dàng sử dụng các linh kiện quang học này.

Phần cuối giáo trình giới thiệu một số kỹ thuật đo đặc tín hiệu quang hay được sử dụng trong quang phổ học laser như kỹ thuật Lock-in, Boxcar, đặc biệt là kỹ thuật đo phân giải thời gian và đo xung cực ngắn.

Quang phổ học thực nghiệm rất phong phú và đa dạng. Với thời lượng có hạn của khung chương trình, tác giả chỉ có thể trình bày một số nội dung cơ bản.

Rất mong nhận được sự góp ý của bạn đọc.

TÁC GIẢ



Nguyên tắc chung của phép đo quang phổ học

Chương 1

VÀI NÉT VỀ CẤU TRÚC PHỔ PHÂN TỬ

1.1. LIÊN KẾT PHÂN TỬ VÀ NĂNG LƯỢNG PHÂN TỬ

1.1.1. Liên kết phân tử

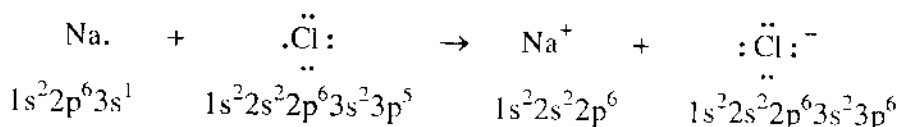
Một phân tử được hình thành nhờ sự liên kết của hai hay nhiều nguyên tử sao cho năng lượng toàn phần thấp hơn tổng năng lượng của các thành phần hợp thành. Độ hụt năng lượng chính bằng năng lượng liên kết phân tử.

Thông thường, bản chất của lực liên kết phân tử được giải thích dựa vào hai kiểu liên kết chủ yếu sau:

• Liên kết ion

Phân tử được tạo nên nhờ sự chuyển điện tử hoá trị từ nguyên tử này sang nguyên tử kia. Nguyên tử bị mất điện tử trở thành ion dương. Nguyên tử thu điện tử trở thành ion âm. Các ion trái dấu thì hút nhau. Nhưng khi chúng rất gần nhau thì giữa các ion xuất hiện lực đẩy sinh ra do tương tác giữa các lớp vỏ điện tử của ion. Khi lực hút và lực đẩy cân bằng thì phân tử hình thành với một khoảng cách xác định giữa các ion.

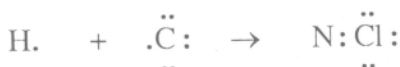
Ví dụ:



• Liên kết cộng hoá trị

Liên kết phân tử được tạo nên bằng cách nguyên tử đưa ra những điện tử hoá trị của mình để tạo thành 1 hoặc 2 hoặc 3 cặp điện tử chung giữa hai nguyên tử được gọi là liên kết cộng hóa trị.

Ví dụ: Liên kết tạo thành phân tử HCl hoặc phân tử Cl₂.



Trong cả hai kiểu liên kết trên, lực liên kết phân tử là lực tương tác giữa các điện tử vành ngoài (điện tử hoá trị). Các điện tử trong không tham gia vào liên kết. Hai kiểu liên kết này cho sự giải thích đơn giản về phân tử. Để có được thông tin chi tiết hơn về cấu tạo phân tử người ta dùng cơ học lượng tử. Tuy nhiên đối với hệ nhiều hạt, phương trình Schrodinger chỉ giải được một cách gần đúng. Từ cơ học lượng tử người ta đã xây dựng 2 lý thuyết gần đúng để giải thích liên kết phân tử. Đó là:

• **Thuyết liên kết hoá trị VB (Valence Bond)**

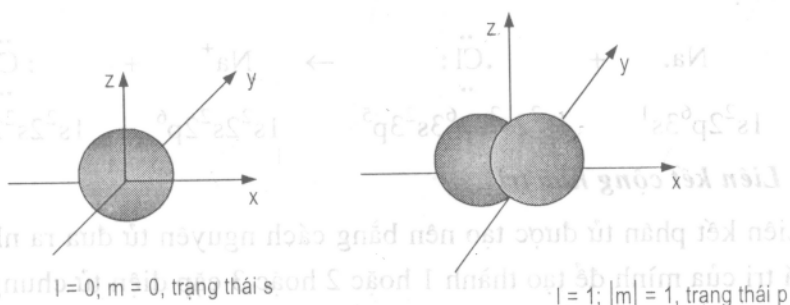
Thuyết này cho rằng, khi tạo thành phân tử các nguyên tử vẫn giữ nguyên cấu trúc điện tử của mình và liên kết được hình thành nhờ sự trao đổi điện tử hoá trị.

• **Thuyết Orbital phân tử MO (Molecular Orbital)**

Thuyết này xem phân tử là một hạt thống nhất, trong đó có các điện tử chuyển động giống như trong nguyên tử. Lõi phân tử gồm các hạt nhân và điện tử tồn tại như một đám mây bao bọc.

Vùng không gian ở đó xác suất tìm thấy điện tử là lớn nhất gọi là Orbital nguyên tử. Mỗi Orbital được đặc trưng bởi ba chữ số lượng tử: n , l , m_l . Sự phân bố xác suất tìm thấy điện tử và các mặt giới hạn của phân bố này chính là hình dáng của các Orbital nguyên tử.

Ví dụ:

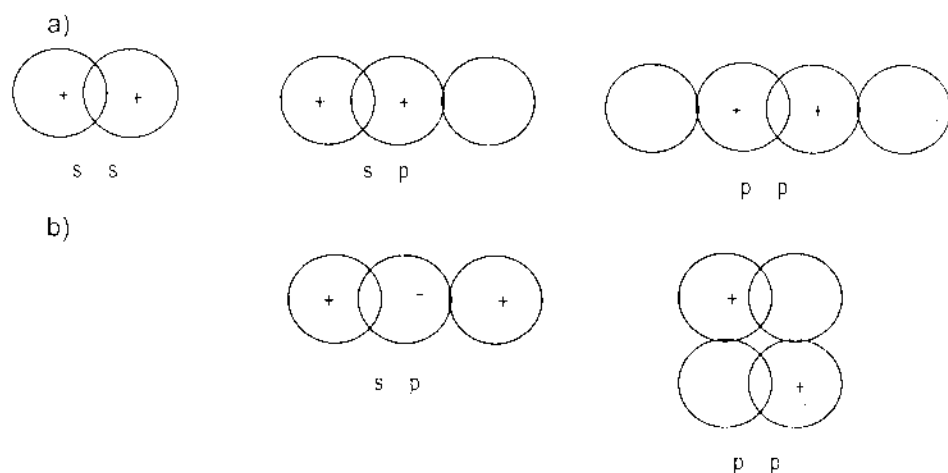


Hình 1.1. Ví dụ về Orbital nguyên tử

Tuỳ theo trạng thái điện tử, hàm sóng có thể âm hoặc dương và các Orbital tương ứng có thể âm hoặc dương. Sự liên kết giữa hai nguyên tử để tạo thành một phân tử được giải thích nhờ mức độ phủ lên nhau của các Orbital nguyên tử.

Nếu sự phủ lên nhau "dương" thì xác suất tìm thấy điện tử tăng ở vùng giữa hai hạt nhân dẫn đến sự hút nhau giữa hai nguyên tử và tạo nên liên kết (ví dụ trường hợp trên các hình 1.2a).

Nếu sự phủ lên nhau "âm" thì xác suất tìm thấy điện tử giữa hai hạt nhân giảm tương ứng với sự đẩy nhau và liên kết không hình thành (bình 1.2b).



Hình 1.2. a) Có liên kết

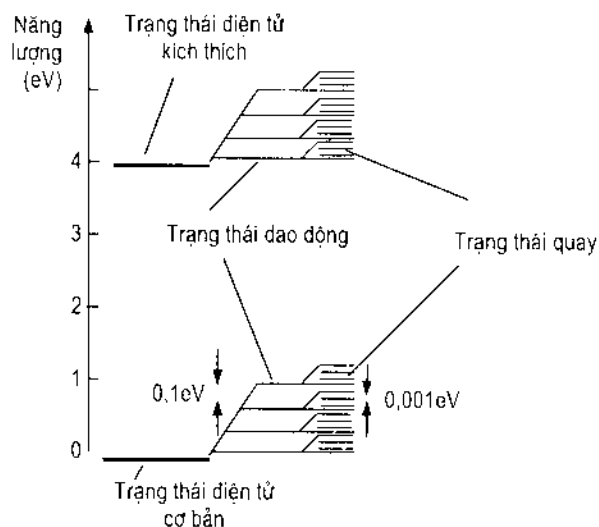
b) Không có liên kết (đẩy nhau)

Thuyết VB cho phép mô tả phân tử cụ thể bằng khái niệm hóa trị quen thuộc.

Thuyết MO nhất quán hơn, có thể mô tả liên kết phân tử ở trạng thái kích thích. Hai thuyết này bổ sung lẫn nhau, mặc dù đều là gần đúng. Cho đến nay chưa có một lý thuyết hoàn chỉnh về cấu tạo phân tử.

1.1.2. Năng lượng phân tử

Sơ đồ các mức năng lượng của phân tử phức tạp hơn nhiều so với nguyên tử bởi vì ngoài các mức năng lượng ứng với các cấu hình điện tử khác nhau còn có thêm những mức năng lượng ứng với các chuyển động dao động và quay của các hạt nhân nguyên tử trong phân tử này. Cấu trúc năng lượng của phân tử có thể trình bày sơ lược bằng giản đồ trên hình 1.3:



Hình 1.3. Sơ đồ các mức năng lượng phân tử

Có thể xem năng lượng phân tử gồm 3 thành phần:

- Năng lượng của điện tử E_{dt}
- Năng lượng dao động của hạt nhân nguyên tử E_{dd}
- Năng lượng quay của phân tử E_q

Năng lượng phân tử toàn phần là: $E = E_{dt} + E_{dd} + E_q$

Thực nghiệm cho thấy: $E_{dt} > E_{dd} > E_q$

Các dịch chuyển bức xạ hoặc hấp thụ sẽ tương ứng với tần số:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{\Delta E_{dt}}{h} + \frac{\Delta E_{dd}}{h} + \frac{\Delta E_q}{h} = \nu_{dt} + \nu_{dd} + \nu_q$$

Các nghiên cứu phổ phân tử bằng thực nghiệm (như là phổ hấp thụ, đôi khi là phổ bức xạ hay phổ huỳnh quang...) cho thấy phổ phân tử gồm rất nhiều vạch nằm sát nhau tạo thành những đám. Vì vậy, phổ phân tử còn gọi là phổ đám. Điều này phản ánh đúng các dịch chuyển tương ứng với các sơ đồ mức năng lượng phân tử ở trên.

Tuy nhiên, các tần số hấp thụ hoặc bức xạ không phải lúc nào cũng là kết quả biến thiên đồng thời của 3 dạng năng lượng nói trên.

Trong trường hợp chỉ có sự biến thiên của năng lượng quay ta có phổ quay, hoặc do biến thiên của năng lượng dao động ta có phổ dao động, hoặc do có biến thiên của năng lượng dao động và quay ta có phổ dao động

– quay ứng với phổ trong vùng hồng ngoại. Nói chung, phổ phân tử có thể nằm trong vùng hồng ngoại, khả kiến và cả tử ngoại. Ở vùng hồng ngoại xa phổ phân tử có dạng đơn giản hơn cả.

1.2. PHÂN LOẠI CÁC PHỔ PHÂN TỬ CÓ 2 NGUYÊN TỬ

1.2.1. Phổ dao động của phân tử

a) Năng lượng dao động

Thế năng của phân tử lưỡng nguyên phụ thuộc vào khoảng cách r giữa hai hạt nhân nguyên tử. Gọi r_0 là vị trí hai hạt nhân ở vị trí cân bằng và xem rằng lực tương tác giữa hai hạt nhân có dạng một lực đàn hồi, ta có:

$$f = -k(r - r_0) \quad (1.1)$$

với k – hệ số giả đàn hồi.

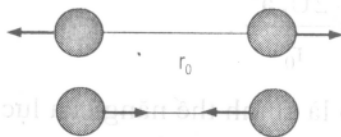
Nghĩa là khi hai hạt nhân lại gần nhau: $(r - r_0) < 0 \rightarrow f > 0$ và hai hạt nhân đẩy nhau còn khi hai hạt nhân cách xa nhau: $(r - r_0) > 0 \rightarrow f < 0$ và chúng sẽ hút nhau.

Lực đàn hồi (1.1) ứng với một thế năng là:

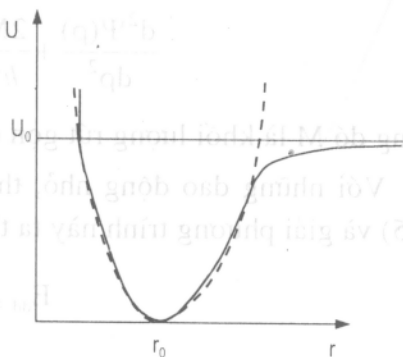
$$U = \frac{k(r - r_0)^2}{2} \quad (1.2)$$

Đường cong thế năng ứng với phương trình (1.2) là một đường Parabol được biểu diễn bằng một đường rời nét trên hình 1.5.

Tuy nhiên, công thức (1.2) chưa phản ánh đầy đủ tính chất của lực tương tác. Khi khoảng cách r lớn, lực hút phải dần tới 0 và thế năng phải tiến tới một giới hạn không đổi U_0 . Còn khi hai hạt nhân tiến khá gần nhau, tức là khi r tiến tới 0 thì lực đẩy phải tăng nhanh hơn và do đó thế năng tăng rất nhanh.



Hình 1.4. Phân tử lưỡng nguyên



Hình 1.5. Đường cong thế năng dao động phân tử

Dạng thực sự của thế năng phải có dạng như đường cong liên nét trên hình 1.5.

Đường này được biểu diễn khá chính xác bằng hàm số:

$$U(\rho) = U_0 \left(1 - e^{-a\rho} \right)^2 \quad (1.3)$$

với $\rho = \frac{r-r_0}{r_0}$; a là hằng số.

Công thức (1.3) được Morse đưa ra và đường cong thế năng tương ứng được gọi là đường cong thế Morse. Từ (1.3) ta thấy khi $\rho \rightarrow \infty$ thì $U \rightarrow U_0$. Như vậy, U_0 chính là năng lượng phân ly của phân tử. Còn khi giá trị ρ nhỏ, nghĩa là đối với các dao động biên độ nhỏ ta có $e^{-a\rho} \approx 1 - a\rho$ và $U(\rho) = U_0 a^2 \rho^2$

$$U(\rho) = U_0 a^2 \frac{(r-r_0)^2}{r_0^2} = \frac{k(r-r_0)^2}{r_0} \quad (1.4)$$

với $k = \frac{2U_0 a^2}{r_0}$.

Đó là chính thế năng của lực giả đàn hồi (1.2) đã nói ở trên.

Biết dạng thế năng dao động, giải phương trình Schrodinger ta có thể xác định được năng lượng dao động phân tử.

Đối với phân tử lưỡng nguyên, phương trình mô tả dao động có dạng:

$$\frac{d^2\Psi(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2M}{\hbar^2} [E_{\text{đl}} - U(\rho)] \Psi = 0 \quad (1.5)$$

trong đó M là khối lượng rút gọn của phân tử.

Với những dao động nhỏ, thay biểu thức thế năng đàn hồi (1.2) vào (1.5) và giải phương trình này ta thu được biểu thức năng lượng:

$$E_{\text{đl}} = \hbar\omega \left(v + \frac{1}{2} \right) \quad (1.6)$$

với: $\omega = \sqrt{\frac{k}{M}}$; $M = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ là khối lượng rút gọn của phân tử;

$v = 0, 1, 2, \dots$ là số lượng tử dao động.

Phương trình (1.6) còn có thể viết dưới dạng sau:

$$E_{\text{dd}} = E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) h\nu_0, \quad v = 0, 1, 2 \quad (1.6')$$

với $\nu_0 = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{M}}$ là tần số dao động riêng của phân tử.

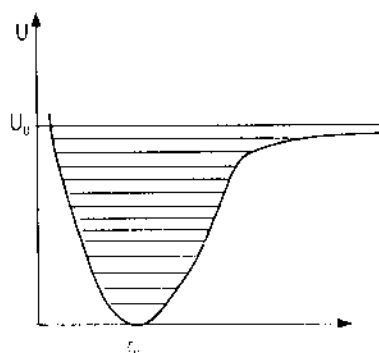
Như vậy khi biên độ dao động nhỏ, phân tử có thể xem như là một dao động tử điều hoà có các mức năng lượng cách đều nhau và mức thấp nhất ($v = 0$) có năng lượng $E_0 = \frac{1}{2} h\nu_0$.

Trong trường hợp tổng quát, thay biểu thức thế năng Morse vào phương trình Schrodinger (1.5) và giải phương trình ta sẽ thu được năng lượng dao động:

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) h\nu_0 - \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 X_c h\nu_0 \quad (1.7)$$

với: $X_c = \left(\frac{1}{4MC_0} \right)$ là hằng số. (1.7')

Từ (1.7) có thể thấy rằng khi dao động không điều hoà, các mức năng lượng không cách đều nhau mà ngày càng xít lại gần nhau khi v tăng nhưng không vượt quá giới hạn U_0 (khoảng cách các mức $\Delta E \approx 0,1 \text{ eV}$) (hình 1.6).



Hình 1.6. Đường cong thế năng và các mức năng lượng dao động phân tử

b) Phổ dao động

Trong vùng dao động điều hoà các dịch chuyển giữa các mức năng lượng dao động tuân theo quy tắc chọn lọc sau:

$$\Delta v = \pm 1 \quad (1.8)$$

Tần số bức xạ tương ứng là:

$$\nu = \frac{\Delta E_v}{h} = \nu_0 \cdot \Delta v = \nu_0 \quad (1.9)$$

với $\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{M}}$ là tần số dao động của phân tử.

Như vậy, ta chỉ thu được một vạch phổ với bước sóng cỡ 10 μ m trong vùng hồng ngoại. Nếu thế năng dịch chuyển sang vùng dao động không điều hoà thì xuất hiện thêm các dịch chuyển ứng với quy tắc chọn lọc:

$$\Delta v = \pm 2, \pm 3 \dots \quad (1.10)$$

Các dịch chuyển giữa các mức năng lượng được tính theo (1.7) và nếu $(v + 1/2)^2 X_e h\nu_0$ nhỏ thì các tần số bức xạ tương ứng sẽ là $v = 2\nu_0, 3\nu_0, \dots$

Như vậy phổ dao động của phân tử lưỡng nguyên sẽ gồm một tần số cơ bản ν_0 và những hoà âm $2\nu_0, 3\nu_0, \dots$ nằm trong vùng hồng ngoại.

Chú ý: Trong các phân tử 2 nguyên tử cùng loại (ví dụ O₂, N₂...) không có dịch chuyển lượng cực điện nhưng có thể có dịch chuyển tứ cực hoặc cảm ứng.

c) Tần số dao động của các liên kết phân tử

Trong trường hợp phân tử lưỡng nguyên, với gần đúng dao động điều hoà, độ dài liên kết phân tử dao động điều hoà như một lò xo có độ cứng $k = f_{12}$. Giá trị f_{12} được gọi là hằng số lực liên kết. Tần số dao động riêng phụ thuộc vào hằng số lực liên kết:

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{f_{12}}{M}} \text{ [Hz]} \text{ với } M = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Trong quang phổ học dao động người ta thường tính tần số theo đơn vị số sóng $\tilde{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda} \text{ [cm}^{-1}]$ (số bước sóng trên một đơn vị độ dài).

Nếu khối lượng được tính theo đơn vị khối lượng nguyên tử u và hằng số lực được tính theo N/cm (= mdyne/Å), tần số dao động phân tử có thể được tính theo công thức:

$$\tilde{\nu} = 1303 \sqrt{\frac{f_{12}}{M}} \text{ [cm}^{-1}]$$

Trên bảng 1 là một số ví dụ về tần số dao động đối với các liên kết khác nhau thông dụng trong hóa hữu cơ.

Các hằng số lực liên kết gần đúng tỷ lệ với bậc liên kết. Ví dụ, đối với liên kết carbon – carbon đơn, kép và bậc ba, hằng số lực tương ứng là 4,5; 9,6 và 15,6 N/cm. Tần số dao động còn thay đổi theo độ dài liên kết và khối lượng các nguyên tử (bảng 2).

Bảng 1.1. Tần số dao động cơ bản của một số liên kết phân tử

Liên kết	Hằng số lực (N/cm)	Tần số đặc trưng (cm^{-1})	Tần số tính toán (cm^{-1})
- C - H	4,79	2960	2966
= C - H	5,1	3020	3066
$\equiv$ C - H	5,85	3300	3277
- C - C - C	4,5	900	1127
- C = C -	9,6	1650	1644
- C $\equiv$ C -	15,6	2050	2099
- N - H	6,35	3350	3396
- C = O	12,1	1700	1730
- C $\equiv$ N	15,9	2100	2041

Bảng 1.2

Liên kết	Độ dài liên kết r (Å)	Hằng số lực liên kết f (mdyn/Å)
- C - H	1,10	4,9
= C - H	1,08	5,3
C $\equiv$ H	1,06	5,9

Thông thường người ta xem rằng lực liên kết không phụ thuộc vào các đồng vị liên quan mặc dù theo logic phải có một ảnh hưởng nhỏ. Trường hợp thay thế nguyên tử H bằng các đồng vị D, T là khá rõ. Nếu so sánh tần số dao động của - C - H, - C - D và - C - T (2916; 2108; 1738 cm^{-1}) đối với tần số dao động cơ giản đối xứng của metan ta thấy chúng có xu hướng tỷ lệ với khối lượng rút gọn: Tỷ lệ tần số là 1,36 đối với các dao động từ - C - H và - C - D, trong khi tỷ lệ khối lượng rút gọn tương ứng là 1,38. Tỷ lệ tần số là 1,61 đối với các dao động từ - C - H và - C - T, trong khi tỷ lệ khối lượng rút gọn tương ứng là 1,68.

1.2.2. Phổ quay của phân tử

a) Năng lượng quay

Xét chuyển động quay của phân tử 2 nguyên tử có khối lượng các nguyên tử lần lượt là m_1, m_2 và khoảng cách giữa chúng là r_1 . Các nguyên tử cách trọng tâm phân tử một khoảng r_1, r_2 (hình 1.7). Mômen quán tính của phân tử đối với trục quay đi qua trọng tâm là:

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$$

trong đó: $r_1 + r_2 = r$

$$m_1 r_1 = m_2 r_2$$

Từ hai phương trình trên suy ra mômen quán tính phân tử:

$$I = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} (r_1 + r_2) = M.r^2 \quad (1.11)$$

với $M = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ là khối lượng rút gọn.

Theo quan điểm cổ điển, mômen động lượng của chuyển động quay và năng lượng quay tương ứng là:

$$K = I.\omega$$

$$E = \frac{I.\omega^2}{2} \text{ nên } E = \frac{K^2}{2I} \text{ với } \omega \text{ là tần số quay.}$$

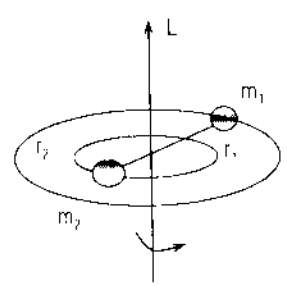
Theo quan điểm cơ học lượng tử, mômen động lượng bị lượng tử hoá theo các quý luật lượng tử và có dạng:

$$|\vec{K}| = h\sqrt{J(J+1)}, \quad J = 0, 1, 2, \dots \quad (1.12)$$

Theo nguyên lý tương ứng ta có năng lượng quay:

$$E_J = \frac{h^2}{2I} J(J+1) = B.J(J+1) \quad (1.13)$$

với $B = \frac{h^2}{2I}$ gọi là hằng số quay.



Hình 1.7. Chuyển động quay của phân tử lưỡng nguyên

Như vậy, các mức năng lượng quay với J càng lớn thì khoảng cách giữa các mức càng rộng ra. Khoảng cách giữa các mức năng lượng quay vào cỡ $\sim 10^{-3} \text{ eV}$.

b) Dịch chuyển quay và phổ quay

Phân tử lưỡng nguyên với hai nguyên tử khác nhau luôn tạo thành mômen lưỡng cực theo hướng trục đối xứng phân tử. Vì vậy, khi phân tử quay lưỡng cực này sẽ bức xạ. Quy tắc chọn lọc cho dịch chuyển bức xạ quay là:

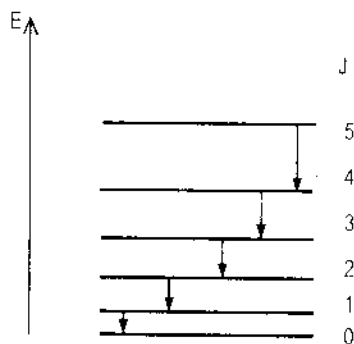
$$\Delta J = \pm 1 \quad (1.14)$$

Tần số của dịch chuyển bức xạ ứng với $\Delta J = +1$ từ $(J) \rightarrow (J+1)$ sẽ là:

$$\nu_{j \rightarrow j+1} = \frac{E_{j+1} - E_j}{h} = \frac{B}{h} [(j+1)(j+2) - j(j+1)] \quad (1.15)$$

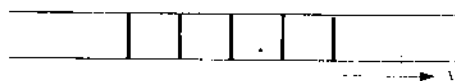
$$\nu_{j \rightarrow j+1} = \frac{2B}{h} (j+1) \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

Như vậy, phổ quay của các phân tử lưỡng nguyên gồm các vạch cách đều nhau. Số liệu thực nghiệm cho thấy bước sóng tương ứng của các dịch chuyển nằm trong vùng hồng ngoại xa ($\sim 100\mu\text{m}$). Nếu dùng năng lượng bé để kích thích phân tử ta có thể thu được phổ quay thuần túy.



1.2.3. Phổ dao động – quay

Khi kích thích phổ dao động phải dùng một năng lượng đủ lớn nên đồng thời với các trạng thái dao động, các trạng thái quay cũng được kích thích.



Hình 1.8. Dịch chuyển quay và phổ quay của phân tử

Dịch chuyển tương ứng với sự thay đổi đồng thời cả năng lượng dao động và năng lượng quay dẫn đến phổ dao động quay.

Nếu không có tương tác chuyển động quay và chuyển động dao động thì năng lượng dao động quay sẽ là tổng của hai dạng năng lượng tương ứng. Tuy nhiên, khi phân tử dao động, mômen quán tính $I = M.r^2$ sẽ thay đổi do khoảng cách giữa hai hạt nhân dao động dẫn tới sự thay đổi của hằng số quay $B = \frac{h^2}{2I}$. Do năng lượng dao động lớn hơn nhiều năng lượng

quay nên có thể lấy giá trị trung bình của r^2 dẫn tới giá trị hằng số quay hiệu dụng B' nhỏ hơn một chút so với giá trị B ở vị trí cân bằng. Khi đó ta có năng lượng dao động quay như sau:

$$E_{vj} = E_v + E_j = \left(v + \frac{1}{2} \right) h\nu_0 + B'(J+1)J \quad (1.16)$$

Các dịch chuyển dao động quay tương ứng với sự biến thiên năng lượng ΔE_{vj} tuân theo quy tắc chọn lọc: $\Delta v = \pm 1$; $\Delta J = \pm 1$.

Khi $\Delta v = 1$; $\Delta J = 1$ ($J \rightarrow J+1$) ta có:

$$\Delta E_{vj} = h\nu_0 + 2B'(J+1), J = 0, 1, 2, \dots \quad (1.17)$$

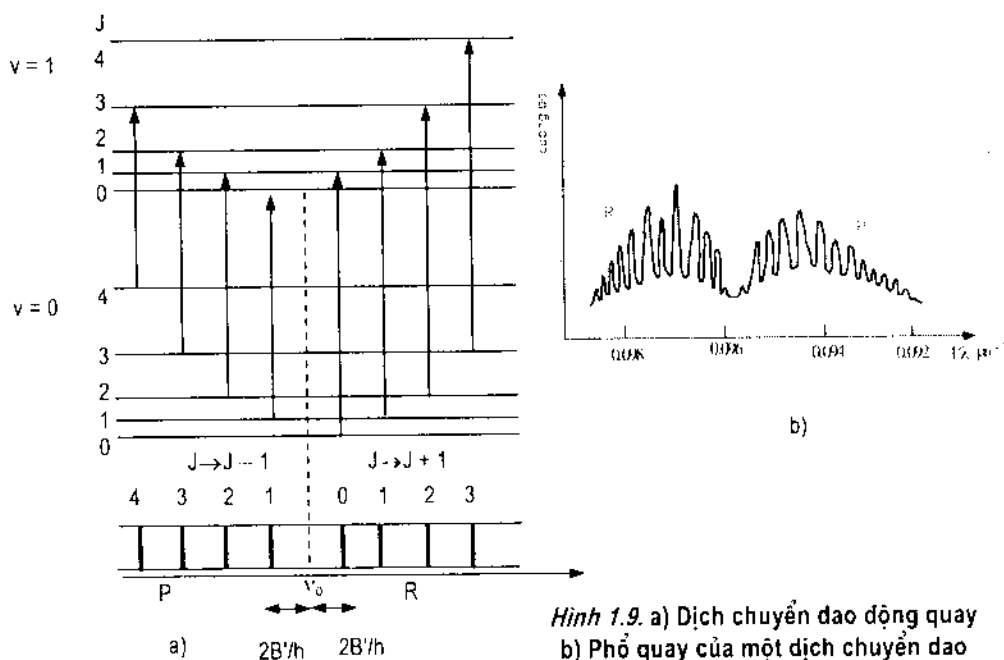
Các dịch chuyển bức xạ này dẫn tới một tập hợp các vạch gọi là nhánh R ($\Delta J = +1$). Khi $\Delta v = 1$; $\Delta J = -1$ ($J \rightarrow J-1$) ta có:

$$\Delta E = h\nu_0 + B'[(J-1)J - J(J+1)] = h\nu_0 - 2B'J$$

$$\Delta E_{v0} = h\nu_0 - 2B'J \quad (J \rightarrow J-1) \quad J = 1, 2, 3, \dots \quad (1.18)$$

Tập hợp các vạch ứng với dịch chuyển này gọi là nhánh P. ($\Delta J = -1$)

Trên hình 1.9 minh hoạ các dịch chuyển dao động quay tương ứng với nhánh R và P.



Hình 1.9. a) Dịch chuyển dao động quay
b) Phổ quay của một dịch chuyển dao động trong phân tử CO_2

Chú ý rằng dịch chuyển $\Delta J = 0$ bị cấm đối với các phân tử lưỡng nguyên nên không có dịch chuyển $\Delta E = h\nu_0$, nghĩa là không xuất hiện vạch ν_0 . Các vạch nhánh R nằm ở phía tần số lớn, bước sóng ngắn. Đối xứng qua ν_0 với nhánh R là các vạch của nhánh P có tần số nhỏ, bước sóng dài hơn. Các vạch trong mỗi nhánh nằm cách đều nhau một khoảng là $2B/h$. Trên hình 1.9 là một ví dụ phổ dao động quay của HCl. Tuy nhiên, nếu chú ý đến ảnh hưởng của dao động lên dao động – quay ta thấy hằng số quay B' đối với trạng thái dao động kích thích càng cao (v lớn) thì giá trị càng nhỏ. Nếu ký hiệu hằng số quay mức dao động trên là B' , mức dao động dưới là B'' : $B' < B''$, các dịch chuyển dao động quay phải có biến thiên năng lượng tương ứng như sau:

$$\Delta E_{vJ} = h\nu_0 + 2B' + (3B' - B'')J + (B' - B'')J^2, \quad J \rightarrow J+1, \quad J = 0, 1, 2, \dots$$

(Nhánh R)

$$\Delta E_{vJ} = h\nu_0 - 2B' + (B' + B'')J + (B' - B'')J^2, \quad J \rightarrow J-1, \quad J = 1, 2, 3, \dots$$

(Nhánh P)

Cả hai nhánh này có thể viết lại thành một công thức.

Đặt $m = J + 1 \rightarrow J = (m - 1)$ ta có

$$\Delta E_{vJ} = h\nu_0 + (B' - B'')J + (B' - B'')J^2 \quad (1.19)$$

với $m = 1, 2, 3, \dots$ đối với nhánh R

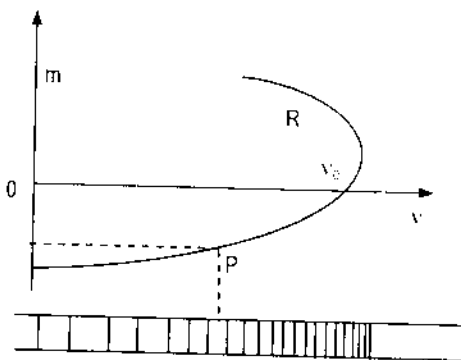
$m = -1, -2, -3, \dots$ đối với nhánh P.

Tần số dịch chuyển tương ứng: $\nu = \frac{\Delta E}{h}$.

$$\nu = \nu_0 + \frac{B' + B''}{h} \cdot m + \frac{B' - B''}{h} \cdot m^2 \quad (1.20)$$

biểu diễn ν theo m ta được một đường Parabol. Do đó các vạch dao động quay tương ứng sẽ xít lại dần khi m tăng. Điều này được minh hoạ trên hình 1.10.

Hình 1.10.
Đường biểu diễn sự phụ thuộc
của tần số ν theo m



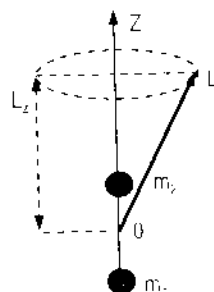
1.2.4. Phổ điện tử của phân tử

a) Năng lượng điện tử

Theo thuyết MO, phân tử là một hệ thống nhất trong đó có các điện tử chuyển động. Cũng như trong các nguyên tử, mỗi điện tử trong phân tử được mô tả bằng hàm sóng gọi là Orbital phân tử. Chỗ khác nhau chính là Orbital nguyên tử có một tâm là hạt nhân nguyên tử, còn Orbital phân tử có nhiều tâm (nhiều hạt nhân nguyên tử). Trong nguyên tử có thể xem mỗi điện tử chuyển động trong trường xuyên tâm tạo bởi các hạt nhân và các điện tử còn lại. Đối với phân tử không có đối xứng xuyên tâm, chẳng hạn đối với phân tử lưỡng nguyên tử có trục đối xứng là đường nối 2 hạt nhân nguyên tử. Mỗi một Orbital phân tử được xác định bằng số các lượng tử chỉ năng lượng và phương của nó trong không gian. Quy tắc sắp xếp điện tử và Orbital phân tử cũng giống trong nguyên tử, đó là:

- Tuân theo nguyên lý Pauli: Trong mỗi Orbital phân tử chỉ có thể có tối đa 2 điện tử có spin ngược nhau.

- Tuân theo nguyên lý năng lượng: Điện tử lần lượt lấp đầy các Orbital năng lượng thấp rồi mới đến năng lượng cao. Từ đó tạo nên cấu hình điện tử phân tử. Phép cộng các mômen vành ngoài sẽ cho số hạng phân tử. Tuy nhiên, mômen động lượng quỹ đạo toàn phần của điện tử trong phân tử không được bảo toàn như trong nguyên tử vì điện tử không chuyển động trong trường đối xứng xuyên tâm dẫn đến việc cộng các mômen cơ đối với điện tử trong phân tử sẽ khác. Xét phân tử lưỡng nguyên tử có trục đối xứng là đường nối 2 hạt nhân nguyên tử, khi đó chỉ có thành phần mômen quỹ đạo chiếu lên trục đối xứng Z mới bảo toàn



Hình 1.11. Mômen động lượng quỹ đạo toàn phần L

$$L_z = M_L \hbar$$

$$M_L = L, L - 1, \dots, -L$$

Tuy nhiên, do trường nội hạt nhân có bản chất điện mạnh hơn từ nên năng lượng không đổi khi đổi dấu M_L . Vì vậy, năng lượng của trạng thái phân tử được đặc trưng bởi số lượng tử Λ .

$$\Lambda = |M_L| = 0, 1, 2, 3, \dots, L$$

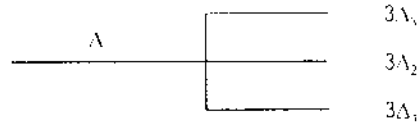
Từ đó các trạng thái điện tử tương ứng được ký hiệu là: $\Sigma, \Pi, \Lambda, \Phi, \dots$

Số lượng tử spin toàn phần S của các điện tử trong phân tử cũng cần thiết để đặc trưng cho trạng thái phân tử. Trong phân tử lưỡng nguyên $\Lambda > 0$ và spin chuyển động tiến động xung quanh trục Z nối hai hạt nhân và có thể nhận $2S + 1$ giá trị hình chiếu. Số lượng tử hình chiếu của S_z là Σ . Giống như trường hợp nguyên tử, $\Sigma = 2S + 1$ được gọi là độ bội và trong ký hiệu được đặt ở góc trên bên trái của Λ . Ví dụ: $^3\Pi, ^1\Delta, \dots$. Mômen cơ điện tử toàn phần chiếu lên trục Z được gọi là Ω và được xác định từ Λ và S

$$\Omega = \Lambda + S, \Lambda + S - 1, \dots, |\Lambda - S| \quad (1.21)$$

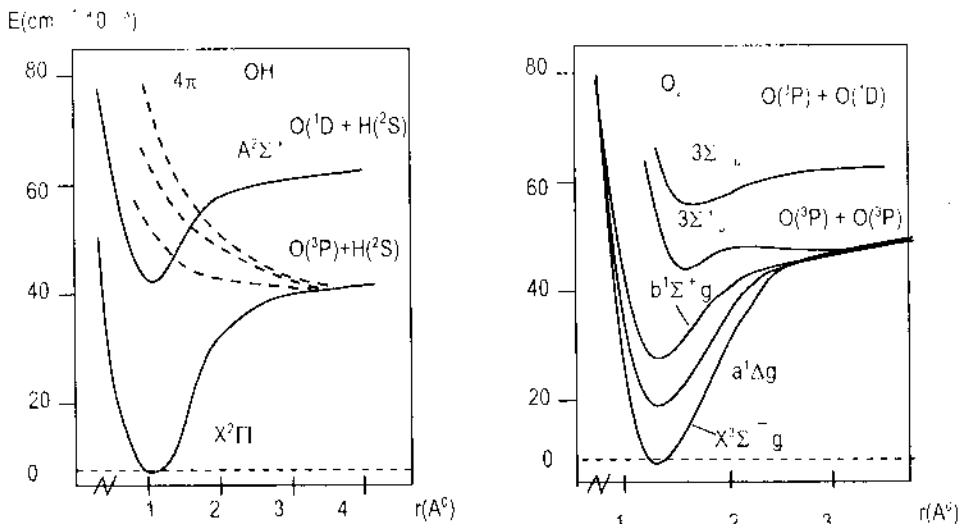
được ghi ở góc dưới bên phải của ký hiệu Λ . Ví dụ: $\Lambda = 2, S = 1, \Omega = 3, 2, 1, \Sigma = 3$.

Mỗi một trạng thái điện tử có một mức năng lượng xác định, tuy nhiên nếu chú ý đến chuyển động của các hạt nhân thì ứng với các khoảng cách hạt nhân khác nhau sẽ có một thế năng dạng Morse.



Sự biến thiên năng lượng điện tử theo khoảng cách r giữa 2 hạt nhân được biểu diễn bởi đường cong (hình 1.12) cho phân tử OH và O_2 .

Đường cong với năng lượng thấp nhất ứng với trạng thái cơ bản ký hiệu là X . Các đường cong khác biểu diễn các trạng thái điện tử khác nhau được ký hiệu: $A, B, C, \dots$



Hình 1.12. Sơ đồ mức năng lượng của phân tử OH và O_2

Kết hợp các đường cong năng lượng điện tử này với các mức năng lượng dao động quay ta có năng lượng toàn phần của phân tử.

Sự biến thiên đồng thời của ba dạng năng lượng điện tử – dao động – quay sẽ cho ta phổ điện tử – dao động – quay của phân tử.

b) Dịch chuyển điện tử dao động. Nguyên lý Frank – Condon

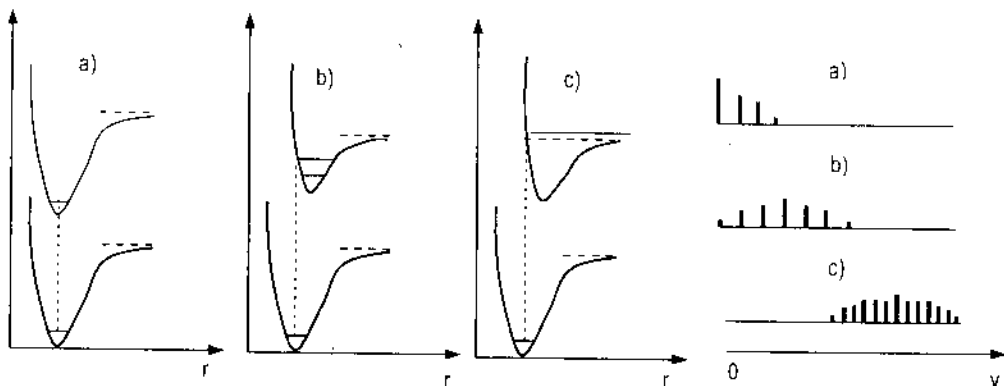
Phổ dao động quay phát sinh từ chuyển động của hạt nhân trong phân tử (năng lượng cỡ 0,1eV). Các dịch chuyển giữa các mức điện tử ứng với biến thiên năng lượng lớn hơn nhiều (~eV) và dẫn tới bức xạ trong vùng khả kiến và tử ngoại. Thông thường, dịch chuyển điện tử có kèm theo dịch chuyển giữa các mức dao động và quay của phân tử. Điều này dẫn đến hình thành phổ đám trong vùng khả kiến của phổ phân tử. Cường độ của các vạch trong cấu trúc phổ điện tử dao động của phân tử được giải thích bởi nguyên lý Frank – Condon. Các dịch chuyển điện tử xảy ra nhanh đến nỗi hạt nhân chưa kịp thay đổi vị trí tương đối trong chuyển động dao động của chúng. Điều này được minh họa trong các hình (1.13a,b,c). Trong trường hợp 1.13a, khoảng cách cân bằng của hai đường cong thế năng là như nhau. Do đó ta sẽ nhận được chủ yếu dịch chuyển hấp thụ từ $v = 0 \rightarrow v = 0$ bởi vì vị trí tương đối và vận tốc của các hạt nhân không đổi.

Trong trường hợp 1.13b, các dịch chuyển chủ yếu từ mức $v = 0$ lên mức có v cao hơn bởi vì hàm sóng ở trạng thái kích thích có cực đại ở điểm quay cổ điển.

Trường hợp 1.13c xảy ra sự phân ly phân tử, dẫn tới một vùng liên tục trong phổ hấp thụ. Phổ đặc trưng cho từng trường hợp được chỉ ra bên cạnh sơ đồ mức năng lượng.

Dịch chuyển về trạng thái cơ bản từ trạng thái điện tử kích thích có thể xảy ra bằng nhiều cách. Dịch chuyển có thể xảy ra bằng bức xạ trực tiếp một photon hoặc sau nhiều dịch chuyển dao động liên tiếp giữa các mức dao động ở trạng thái điện tử kích thích rồi mới chuyển về trạng thái cơ bản. Trường hợp sau, bức xạ sẽ chuyển dịch về phía sóng dài (đỏ) so với bức xạ kích thích (dịch chuyển Stock). Ta có thể quan sát được điều này ở các phân tử chất màu.

Dịch chuyển $\Delta J = 0$ bị cấm đối với phổ dao động – quay thuần túy lại là cho phép trong dịch chuyển điện tử dao động – quay (trừ dịch chuyển $^1\Sigma - ^1\Sigma$). Quy tắc dịch chuyển mới này làm xuất hiện thêm nhánh Q bên cạnh các nhánh P và R.



Hình 1.13. Dịch chuyển theo nguyên lý Frank – Condon

1.3. PHỔ DAO ĐỘNG CỦA PHÂN TỬ NHIỀU NGUYÊN TỬ

Trường hợp phân tử được cấu tạo bởi nhiều nguyên tử cấu trúc phổ phân tử sẽ phức tạp hơn. Xét một phân tử gồm n nguyên tử, cấu hình của phân tử có thể được xác định trung bình bởi $3n$ tọa độ Đề – các tương ứng với các dịch chuyển của các nguyên tử so với vị trí cân bằng của chúng trong phân tử. Có thể thấy đối với phân tử không thẳng $3n$ tọa độ này ứng với 3 chuyển động tịnh tiến của toàn bộ phân tử, 3 chuyển động quay và $3n - 6$ chuyển động biến dạng của phân tử.

Các lực liên kết trong một phân tử có thể biểu diễn bằng một hàm thế năng trung bình V . Với giả thiết các dịch chuyển là nhỏ, hàm số V có thể khai triển thành chuỗi Taylor:

$$\begin{aligned}
 V &= V_0 + \sum \left(\frac{\partial V}{\partial r_i} \right) r_i + \frac{1}{2} \sum \left(\frac{\partial^2 V}{\partial r_i \partial r_j} \right) r_i r_j + \frac{1}{6} \sum \left(\frac{\partial^3 V}{\partial r_i \partial r_j \partial r_k} \right) r_i r_j r_k + \dots \\
 &= V_0 + \sum f_i r_i + \frac{1}{2} \sum f_{ij} r_i r_j + \frac{1}{6} \sum f_{ijk} r_i r_j r_k + \dots
 \end{aligned}
 \quad (1.22)$$

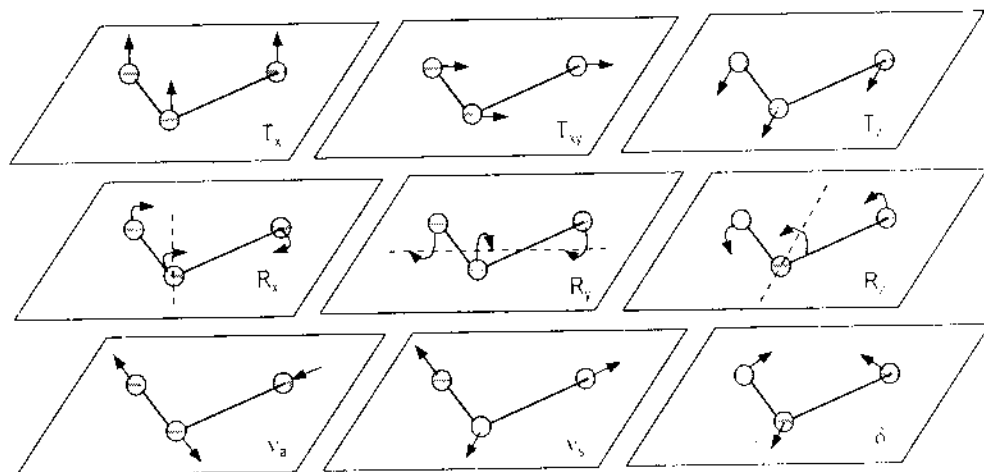
Trong đó r_i là các tọa độ dịch chuyển của nguyên tử đối với vị trí cân bằng của chúng trong phân tử. Nếu lấy gốc của thế năng là vị trí cân bằng ta có $V_0 = 0$. Tương tự, do lấy điểm gốc là vị trí cân bằng nên có thể chứng minh rằng các hệ số $f_i = \frac{\partial V}{\partial r_i} = 0$ (với r_i là các tọa độ độc lập). Trong gần

đúng bậc hai, ta có thể bỏ qua các số hạng bậc ba và cao hơn, và có biểu thức thế năng rút gọn như sau:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(-\frac{\partial^2 V}{\partial r_i \partial r_j} \right)_0 r_i r_j = \frac{1}{2} \sum_{ij} f_{ij} r_i r_j \quad (1.23)$$

Phép gần đúng trên còn gọi là phép gần đúng điều hòa, trong đó các hệ số f_{ij} đóng vai trò tương tự như các hằng số lực. Hằng số lực chéo f_{ij} với $i = j$ mô tả tính đàn hồi của liên kết tuân theo định luật Hooke. Các hằng số với $i \neq j$ là các hằng số lực tương tác, mô tả sự thay đổi các thuộc tính đàn hồi của một liên kết khi liên kết khác bị biến dạng. Như vậy, các hằng số lực của các liên kết, khối lượng các nguyên tử và cấu hình phân tử sẽ xác định các tần số và chuyển động tương đối của nguyên tử.

Để minh họa ta lấy phân tử nước làm ví dụ. Thay cho tọa độ Đề-các, các biến dạng bên trong phân tử nước có thể xác định bằng ba tọa độ nội, đó là hai tọa độ độ dài liên kết O – H (r) và góc giữa hai liên kết này (Φ). Sau khi giải các phương trình chuyển động, người ta thấy là các chuyển động không phải trực tiếp theo các tọa độ nội mà là tổ hợp của chúng. Trên hình 1.14 chỉ ra ba dao động chuẩn của phân tử nước: dao động giãn đối xứng và phản xứng của liên kết OH với tần số ν_s và ν_a và dao động biến dạng δ .



Hình 1.14. Các bậc chuyển động tự do của phân tử nước. T_i là chuyển động tịnh tiến, R_i là chuyển động quay của toàn bộ phân tử, $i = x, y, z$; ν_s và ν_a là các dao động giãn đối xứng và phản xứng, δ là dao động biến dạng.

1.4. CÁC PHƯƠNG PHÁP KHẢO SÁT DAO ĐỘNG PHÂN TỬ

Theo cơ học lượng tử, phân tử có thể nhận một năng lượng $h\nu_S$ để chuyển sang trạng thái kích thích đầu tiên. Lượng tử ánh sáng trong vùng hồng ngoại với bước sóng từ $2,5\mu\text{m} - 1000\mu\text{m}$ có năng lượng là $h\nu = hc\tilde{\nu}$ với $\tilde{\nu} = 4000\text{cm}^{-1}$ đến 10cm^{-1} . Một phân tử khi được chiếu sáng bởi bức xạ hồng ngoại có phổ liên tục có thể hấp thụ lượng tử ánh sáng có năng lượng này. Phổ của bức xạ còn lại sẽ là một dải hấp thụ ở tần số ν_S . Hình 1.15a minh họa quá trình này. Trong sơ đồ này, dao động của một phân tử lưỡng nguyên hoặc một bậc dao động tự do của phân tử đa nguyên được kích thích nhờ dịch chuyển từ mức năng lượng $v = 0$ đến $v = 1$ của trạng thái điện tử cơ bản S_0 .

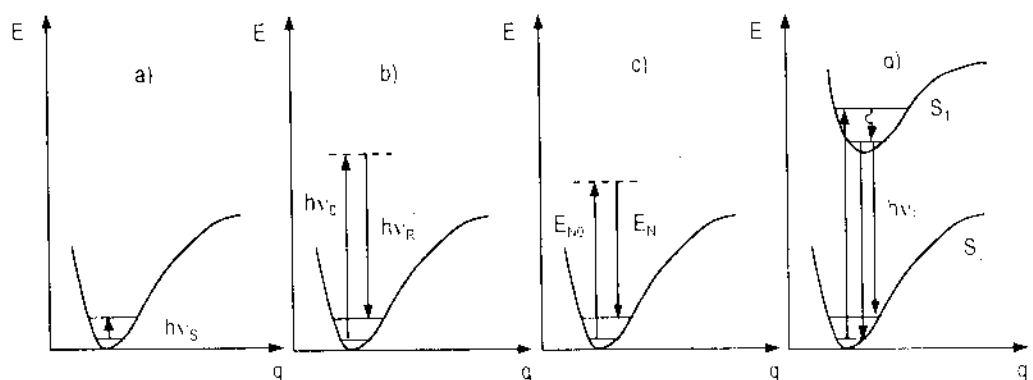
Dao động tương tự có thể được kích thích bởi một cơ chế hoàn toàn khác, chẳng hạn bởi tán xạ không đàn hồi của một lượng tử ánh sáng năng lượng cao hơn như minh họa trên hình 1.15b (hiệu ứng tán xạ Raman). Các phân tử này được chiếu sáng bởi bức xạ đơn sắc trong vùng tử ngoại, khả kiến hoặc hồng ngoại gần có lượng tử năng lượng $h\nu_0$. Trong một va chạm không đàn hồi của lượng tử ánh sáng với một phân tử, năng lượng dao động $h\nu_S$ có thể bị thay đổi. Như vậy, lượng tử ánh sáng tán xạ có một năng lượng thấp hơn hoặc cao hơn:

$$h\nu_R = h\nu_0 \pm h\nu_S \quad (1.24)$$

trong đó $h\nu_S$ là năng lượng dao động.

Các lượng tử năng lượng $h\nu_R$ dẫn đến phổ Raman. Đồng thời các lượng tử năng lượng kích thích cũng bị tán xạ đàn hồi, hiện tượng này được gọi là tán xạ Rayleigh. Trong trường hợp này lượng tử tán xạ có cùng năng lượng $h\nu_0$ như lượng tử kích thích. Hình 1.15c mô tả một quá trình tương tự – tán xạ không đàn hồi của neutron. Việc chiếu sáng các phân tử bằng các neutron đơn năng lượng làm sinh ra các neutron tán xạ tuân theo quy tắc tương tự phương trình (1.24). Trong khi tán xạ Raman cũng như hấp thụ hồng ngoại trên các phân tử đối xứng tuân theo chặt chẽ các quy tắc chọn lọc cho phép hoặc cấm một số dao động trong các phổ này thì tán xạ không đàn hồi của neutron không phải tuân theo các quy tắc này. Tán xạ neutron ít dùng trong hóa phân tích nhưng thường được sử dụng để nghiên cứu dao động mạng của tinh thể trong vật lý chất rắn và động học chất lỏng.

Cuối cùng, phổ huỳnh quang (đặc biệt là các chất khí) cũng có thể phát hiện các trạng thái dao động của phân tử trong trạng thái điện tử cơ bản (hình 1.15d). Các phân tử được chiếu sáng bởi các lượng tử có năng lượng đủ lớn cho phép kích thích các điện tử hóa trị lên trạng thái kích thích, có thể trở về trạng thái cơ bản bằng cách phát ra lượng tử năng lượng thấp hơn. Một phổ huỳnh quang như vậy có thể cho ta các đám phát sinh từ các dịch chuyển từ trạng thái điện tử kích thích về các trạng thái dao động khác nhau của trạng thái điện tử cơ bản. Quang phổ học huỳnh quang là một công cụ có giá trị để phân tích vết do có hiệu suất lượng tử cao (tỷ số giữa các lượng tử bức xạ và hấp thụ là cao). Tuy nhiên, phương pháp này thường không được dùng trong hóa phân tích để nghiên cứu các trạng thái dao động. Đối với các phân tử ở cùng một trạng thái trong cùng một điều kiện, các phương pháp nêu trên đều có giá trị như nhau để xác định tần số dao động của phân tử ở trạng thái cơ bản. Tuy nhiên phương pháp phổ biến nhất hay được dùng là quang phổ học hồng ngoại và Raman.



Hình 1.15. a) Hấp thụ hồng ngoại; b) Tán xạ Raman;
c) Tán xạ nơtron không đàn hồi; d) Huỳnh quang

Quang phổ học hồng ngoại và Raman cung cấp thông tin bổ trợ lẫn nhau về dao động phân tử, bởi vì trong các kỹ thuật quang phổ học này cơ chế tương tác của lượng tử ánh sáng với phân tử là hoàn toàn khác nhau.

Tương tác của bức xạ hồng ngoại với một phân tử dao động chỉ có nếu vector điện của trường bức xạ dao động với cùng tần số như mômen lưỡng cực phân tử. Một dao động được kích hoạt hồng ngoại chỉ khi mômen lưỡng cực phân tử được điều biến bởi dao động chuẩn.

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial q} \right)_0 \neq 0 \quad (1.25)$$

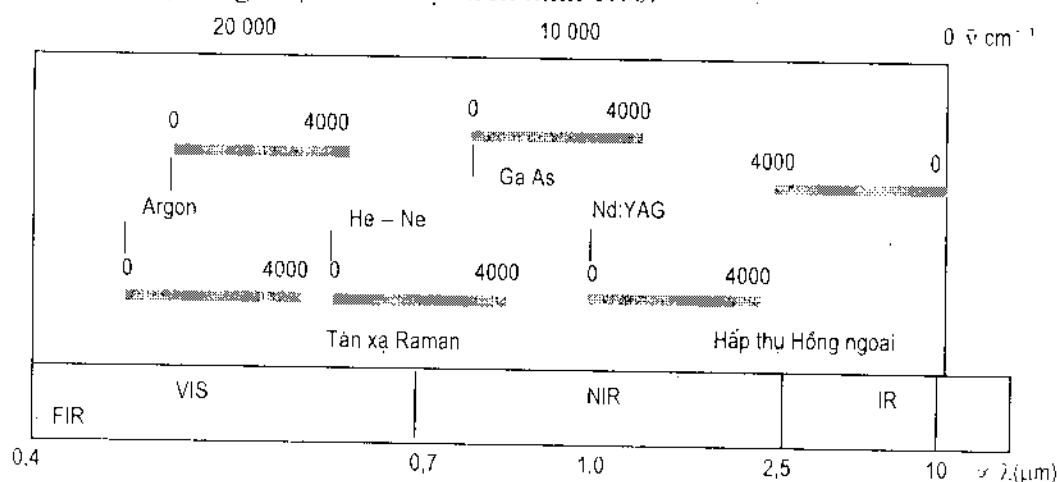
ở đây: μ là mômen lưỡng cực phân tử và q là tọa độ chuẩn mô tả chuyển động của các nguyên tử trong dao động chuẩn.

Một điều kiện tương tự cũng cần phải thỏa mãn để cho một dao động được quan sát trong phổ Raman. Khi một phân tử được đặt trong điện trường, điện tử và hạt nhân chuyển động cưỡng bức theo hướng ngược nhau. Một mômen lưỡng cực cảm ứng sinh ra tỷ lệ với cường độ điện trường và độ phân cực của phân tử, α . Một dao động phân tử chỉ có thể được quan sát trong phổ Raman nếu độ phân cực phân tử được điều biến bởi dao động này:

$$\left(\frac{\partial \alpha}{\partial q} \right)_0 \neq 0. \quad (1.26)$$

Nếu các điều kiện (1.25) và (1.26) được thỏa mãn thì các dao động được gọi là cho phép hoặc hoạt động (active) trong phổ hồng ngoại và Raman tương ứng. Nếu các điều kiện này không được thỏa mãn, chúng được gọi là bị cấm hoặc không hoạt động.

Trên hình 1.16 mô tả vùng phổ hồng ngoại và phổ Raman kích thích bằng các vạch phổ khác nhau. Phổ hấp thụ nằm giữa 4000 và 10 cm^{-1} phủ lên miền hồng ngoại (IR) với bước sóng $2,5 - 100 \mu\text{m}$ và hồng ngoại xa (FIR) bước sóng $100 - 1000 \mu\text{m}$. Miền phổ Raman bức xạ trải rộng từ tần số bức xạ kích thích $\tilde{\nu}_0$ đến $\tilde{\nu}_0 - \Delta\tilde{\nu}$ với $\Delta\tilde{\nu} = 0 \dots 4000 \text{ cm}^{-1}$. Các vùng phổ Raman kích thích bởi các loại laser phổ biến như Laser Argon (488; 515nm), laser He - Ne (633nm), laser GaAs (780nm) và Nd:YAG (1064nm) cũng được minh họa trên hình 1.16.



Hình 1.16. Các vùng phổ hồng ngoại và Raman trong thang số sóng (cm^{-1})

Chương 2

NGUỒN SÁNG

Nguồn sáng là một bộ phận quan trọng không thể thiếu trong một phòng thí nghiệm quang phổ. Nguồn sáng cung cấp điều kiện để kích thích nguyên tử, phân tử các chất bức xạ hoặc hấp thụ, tán xạ, huỳnh quang... Thông tin về các nguyên tử, phân tử của mẫu nghiên cứu sẽ thu được từ phổ của các tín hiệu ánh sáng phát ra.

Có rất nhiều loại nguồn sáng khác nhau để đáp ứng các yêu cầu khác nhau trong nghiên cứu. Chúng khác nhau về cường độ phát sáng, phổ ánh sáng phát ra, chế độ phát sáng liên tục hoặc xung. Trong giáo trình này, các nguồn sáng được phân loại để giới thiệu theo mục đích sử dụng của chúng.

2.1. NGUỒN SÁNG DÙNG TRONG QUANG PHỔ PHÁT XẠ

Trong quang phổ phát xạ, các nguyên tử vật chất của mẫu nghiên cứu được kích thích phát sáng ngay trong nguồn sáng. Các mẫu có thể ở trạng thái rắn, lỏng, khí phải được chuyển thành các nguyên tử tự do và sau đó được kích thích bức xạ bởi nhiệt độ cao của nguồn.

Yêu cầu đối với nguồn sáng trong quang phổ phát xạ là:

- Có khả năng chuyển toàn bộ mẫu thành nguyên tử tự do.
- Có thể điều chỉnh được năng lượng kích thích.
- Có đủ năng lượng để kích thích toàn bộ các nguyên tố trong bảng tuần hoàn.
- Không có phóng liên tục.
- Có độ lặp lại cao.
- Ổn định khi chuyển mẫu thành nguyên tử tự do và kích thích.
- Cho kết quả tin cậy và độ chính xác cao.

Chưa có một nguồn sáng nào thỏa mãn đồng thời tất cả các tiêu chuẩn trên. Những nguồn sáng thường gặp là ngọn lửa, plasma cao tần, hồ quang, tia điện, laser...

2.1.1. Ngọn lửa

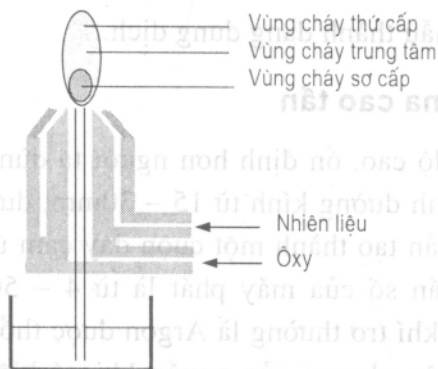
Ngọn lửa là nguồn sáng không chỉ dùng trong quang phổ phát xạ mà còn dùng trong quang phổ hấp thụ nguyên tử.

Mẫu cần nghiên cứu trước hết phải được chuyển thành dạng dung dịch. Dung dịch mẫu được phun vào ngọn lửa nhờ một bộ phun sương. Sơ đồ cấu tạo của bộ phận phun sương kết hợp với ngọn lửa được mô tả trên hình 2.1.

Một ống mao dẫn được nhúng vào bình đựng dung dịch mẫu. Trên đầu ống mao dẫn một luồng khí mạnh được thổi vào làm dung dịch theo ống mao dẫn đi lên và phun ra dưới dạng các hạt sương. Luồng khí thổi qua đầu ống mao dẫn chính là luồng khí nhiên liệu và oxy. Khi ta châm ngọn lửa cháy thành ba vùng (hình 2.1). Trong vùng cháy sơ cấp ngay đầu ống mao dẫn phản ứng cháy vừa mới xảy ra nên chưa có cân bằng nhiệt. Trong vùng cháy trung gian, ở giữa sự cân bằng nhiệt đã đạt được, ngọn lửa cháy ổn định, nhiệt độ cũng cao nhất.

Tốc độ của luồng nhiên liệu và luồng oxy là các thông số quan trọng để ngọn lửa cháy ổn định. Tốc độ tối ưu này phụ thuộc vào nhiên liệu được dùng. Nhiệt độ của ngọn lửa tùy thuộc vào nhiên liệu sử dụng và hàm lượng oxy tham gia.

Trong bảng 2.1 là thông số của ngọn lửa với một vài thành phần nhiên liệu.



Hình 2.1. Ngọn lửa

Bảng 2.1. Thông số của ngọn lửa với một vài thành phần nhiên liệu

<i>Thành phần nhiên liệu</i>	<i>Nhiệt độ (K)</i>
Propan (C_3H_8) + không khí	2267
Propan + ôxy	3094
Hydro + không khí	2380
Hydro + ôxy	3080
Acetylen (C_2H_2) + không khí	3150
Acetylen + ôxy	3342

Ngọn lửa dễ sử dụng, có tính lặp lại cao, giá thành thấp. Tuy nhiên, nó có một số nhược điểm sau:

- Nhiệt độ không cao, không đủ khả năng để kích thích nhiều nguyên tố trong bảng tuần hoàn Mendeleev. Trong thực tế chỉ thích hợp kích thích các nguyên tố kim loại kiềm.

- Không thể kiểm tra và điều chỉnh năng lượng của ngọn lửa mặc dù thay đổi tốc độ luồng nhiên liệu và ôxy có thể thay đổi năng lượng ngọn lửa nhưng rất hạn chế.

- Ngọn lửa có thể tạo ra những sản phẩm trung gian khiến tỷ lệ nguyên tử tự do của nguyên tố cần nghiên cứu giảm. Điều này hạn chế việc xác định hàm lượng nguyên tố trong mẫu với độ chính xác cao.

- Phải chuyển mẫu thành dạng dung dịch.

2.1.2. Nguồn plasma cao tần

Để tạo ra nhiệt độ cao, ổn định hơn người ta dùng nguồn plasma cao tần. Một ống thạch anh đường kính từ 15 – 30mm, được quấn xung quanh bởi nhiều vòng dây dẫn tạo thành một cuộn dây cảm ứng nối với một máy phát điện cao tần. Tần số của máy phát là từ 4 – 50MHz, công suất từ 1 – 5kW. Một luồng khí trơ thường là Argon được thổi qua ống thạch anh. Luồng khí này tạo nên plasma của nguồn khí có hiệu ứng dòng cao tần xuất hiện và cũng là để làm nguội ống thạch anh. Sau khi được môi bằng hồ quang, khí plasma sẽ hình thành và ổn định với nhiệt độ cao tới

9000 – 10.000K. Mẫu nghiên cứu chuyển thành dạng sương và được đưa thẳng vào trong ống thạch anh.

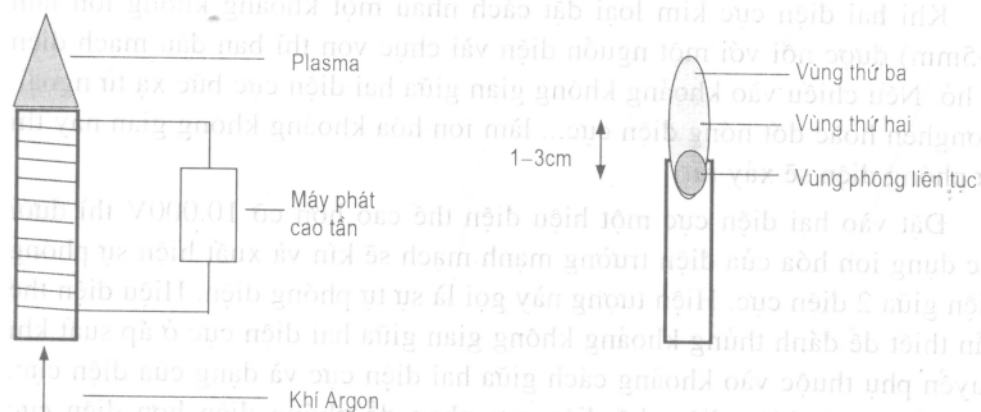
Nguồn plasma cao tần có nhiều ưu điểm như:

- Nhiệt độ cao, mật độ điện tử cao.
- Thời gian tồn tại plasma khá lâu.
- Nguyên tử tự do được hình thành trong vùng không có phản ứng hóa học.
- Không có phân tử tồn tại trong plasma, hoặc nếu có thì không đáng kể.
- Nguồn có thể làm mỏng nên tránh được hấp thụ thứ cấp.

– Không cần điện cực.

– Không chứa khí nổ.

Plasma hình thành chia làm ba vùng. Lõi của plasma nằm sâu trong cuộn dây cảm ứng chừng vài mm. Phần của vùng lõi đặc trưng bởi một phong liên tục mạnh, trong đó nổi lên các vạch của Argon (Ar). Phong liên tục này là do sự tái hợp của điện tử và ion. Vì có phong liên tục nên đây không phải là vùng làm việc của nguồn.



Hình 2.2. Nguồn plasma cao tần

Phần trên vùng lõi plasma một chút, nguồn sáng trở nên trong suốt hơn và phong liên tục giảm đi vài bậc. Vùng này dài chừng 1 – 3cm ở phía trên cuộn dây. Phong trong vùng thứ hai này chủ yếu là các vạch Ar và các đám bức xạ của phân tử OH, NO và NH. Nhờ điều chỉnh tốc độ của luồng khí

Ar một cách thích hợp có thể giảm tối đa các phổ đám của các phân tử và chỉ còn các vạch phổ của Ar. Nhiệt độ của vùng thứ hai này thay đổi rất nhiều nên có thể kích thích cùng một lúc nhiều nguyên tố khác nhau. Vùng thứ ba ở trên cùng có nhiệt độ tương đương ngọn lửa nên được dùng để kích thích các nguyên tố dễ kích thích. Có thể thấy nguồn plasma cao tần đáp ứng hầu hết các tiêu chuẩn của một nguồn sáng lý tưởng trong quang phổ phát xạ, có thể kích thích các nguyên tố từ khó đến dễ kích thích, cho phép nghiên cứu đồng thời nhiều nguyên tố khác nhau. Việc chuyển thành nguyên tử tự do được hình thành trong môi trường khí trơ nên tránh được các phản ứng hóa học. Các mẫu lỏng và khí có thể đưa thẳng vào plasma, còn mẫu rắn có thể nhồi vào thanh carbon rồi đưa vào plasma. Nguồn ổn định và lặp lại tốt nên cho kết quả phân tích đáng tin cậy.

Nhược điểm chủ yếu của nguồn plasma cao tần là giá thành cao, phải liên tục dùng khí Ar khá đắt tiền. Ngoài ra vẫn còn những trùng lẫn về phổ mặc dù không nhiều.

2.1.3. Hồ quang và tia điện

a) Sự phóng điện trong không khí

Khi hai điện cực kim loại đặt cách nhau một khoảng không lớn lắm ($\sim 5\text{mm}$) được nối với một nguồn điện vài chục von thì ban đầu mạch điện là hồ. Nếu chiếu vào khoảng không gian giữa hai điện cực bức xạ tử ngoại, Rơnghen hoặc đốt nóng điện cực... làm ion hóa khoảng không gian này thì sự phóng điện sẽ xảy ra.

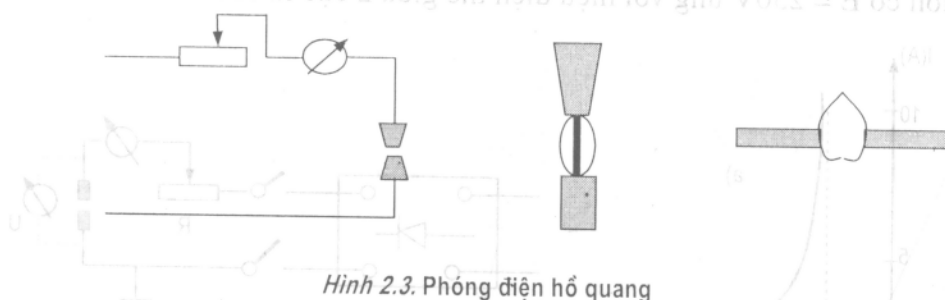
Đặt vào hai điện cực một hiệu điện thế cao hơn cỡ 10.000V thì dưới tác dụng ion hóa của điện trường mạnh mạch sẽ kín và xuất hiện sự phóng điện giữa 2 điện cực. Hiện tượng này gọi là sự tự phóng điện. Hiệu điện thế cần thiết để đánh thủng khoảng không gian giữa hai điện cực ở áp suất khí quyển phụ thuộc vào khoảng cách giữa hai điện cực và dạng của điện cực. Với cùng một hiệu điện thế điện cực nhọn dễ phóng điện hơn điện cực phẳng. Các loại phóng điện khác nhau ở áp suất khí quyển có nhiệt độ thay đổi trong một khoảng rộng từ $3500 - 8000^{\circ}\text{C}$ đối với hồ quang, đến 10.000°C đối với tia điện và phóng điện xung. Dưới đây sẽ trình bày hai dạng phóng điện cơ bản trong không khí là hồ quang và tia điện.

b) Hồ quang

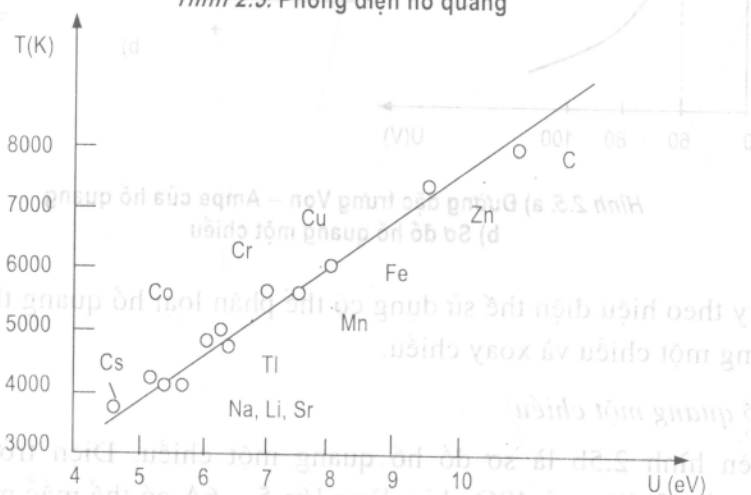
Nếu hai điện cực kim loại được đặt một hiệu điện thế cỡ 80V , khi chạm hai điện cực lại, điện cực sẽ được đốt nóng, lúc kéo hai điện cực ra xa nhau

vài mm thì sẽ xảy ra phóng điện hồ quang. Hiệu điện thế trên các điện cực có thể thay đổi từ 25 – 80V tương ứng với dòng điện cỡ từ 1 – 2A đến vài chục ampe. Điện cực hồ quang thường đặt thẳng đứng, khi đó không khí chạy dọc theo trục của plasma không ảnh hưởng đến sự cháy của hồ quang. Nếu đặt ngang dòng không khí tạo thành do đốt nóng sẽ ảnh hưởng tới hồ quang.

Nhiệt độ hồ quang có thể từ 3500 – 8000⁰C, đạt cực đại ở phần tâm hồ quang vì ở đó mật độ dòng lớn nhất. Nhiệt độ hồ quang phụ thuộc vào hiệu điện thế và mật độ dòng điện được phóng qua khoảng giữa 2 điện cực. Một yếu tố quan trọng ảnh hưởng đến nhiệt độ hồ quang là thể ion hóa của chất tham gia vào sự phóng điện. Nếu thể ion hóa thấp, số hạt mang điện trong plasma nhiều, điện trở của nó sẽ giảm, dẫn đến hiệu điện thế giảm và do đó nhiệt độ giảm. Có thể nói nhiệt độ hồ quang được quy định bởi thành phần có thể ion hóa thấp nhất tham gia vào sự phóng điện. Trên hình 2.4 là đường cong mô tả sự phụ thuộc của nhiệt độ hồ quang vào thể ion hóa của một số thành phần kim loại.



Hình 2.3. Phóng điện hồ quang

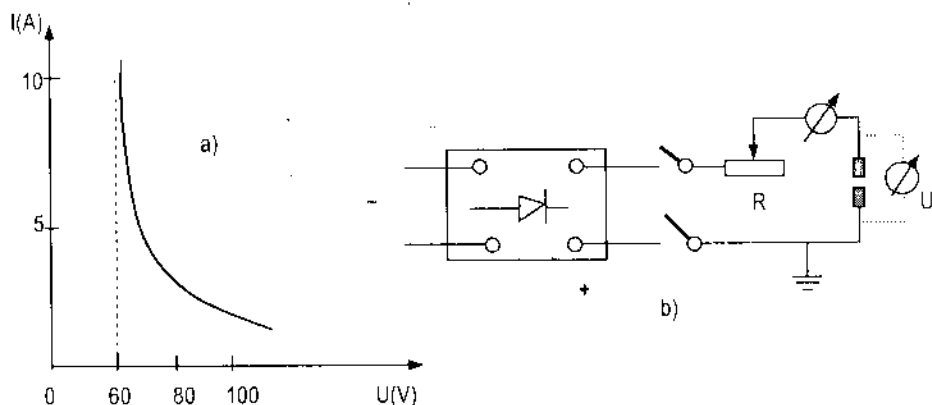


Hình 2.4. Ảnh hưởng của thành phần có thể ion thấp lên nhiệt độ hồ quang

Đặc trưng Von – Ampe

Sự phóng điện hồ quang không tuân theo định luật Ohm, điện trở của nó phụ thuộc vào cường độ dòng điện. Khi dòng càng lớn, số hạt tải điện càng lớn, điện trở giảm và do đó hiệu điện thế giảm. Đường đặc trưng Von – Ampe có dạng phi tuyến như hình 2.5.

Do tính chất này, vì một nguyên nhân nào đó ngẫu nhiên cường độ dòng tăng, hiệu điện thế giảm xuống dưới giá trị cần thiết thì hồ quang sẽ tắt. Để hồ quang cháy ổn định người ta phải mắc nối tiếp với một điện trở điều dòng. Điện trở này có giá trị phải lớn hơn nhiều điện trở khoảng phóng điện hồ quang nên nhờ đó sẽ giữ cho cường độ dòng điện trong mạch không đổi và hiệu điện thế trên 2 điện cực không đổi. Tuy nhiên, khi R tăng, cường độ dòng điện sẽ giảm, biến thiên tỷ đối di/i tăng, hồ quang lại không ổn định. Vì vậy, khi tăng R đồng thời phải tăng hiệu điện thế nguồn nuôi (để tăng dòng). Người ta thường chọn hiệu điện thế nguồn nuôi lớn gấp 2 – 3 lần hiệu điện thế 2 điện cực. Ví dụ, trong hồ quang một chiều nguồn có $E = 250V$ ứng với hiệu điện thế giữa 2 cực là $150V$.



Hình 2.5. a) Đường đặc trưng Von – Ampe của hồ quang
b) Sơ đồ hồ quang một chiều

Tùy theo hiệu điện thế sử dụng có thể phân loại hồ quang thành 2 loại: hồ quang một chiều và xoay chiều.

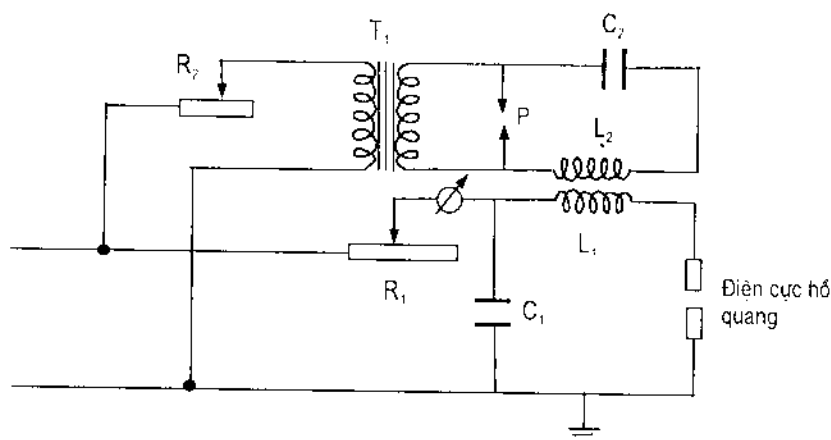
Hồ quang một chiều

Trên hình 2.5b là sơ đồ hồ quang một chiều. Điện trở điều dòng thường gồm 2 điện trở 40Ω chịu dòng lớn 5 – 6A có thể mắc nối tiếp hoặc mắc song song khi dòng lớn 10 – 12A. Thay đổi giá trị điện trở điều dòng

có thể thay đổi nhiệt độ hồ quang. Hiệu điện thế giữa hai điện cực thường chọn là 150V (ứng với thế nuôi 200 – 250V). Để mỗi hồ quang phóng điện có thể dùng một thanh graphite nối hai cực cho nóng lên rồi bỏ ra hoặc dùng bộ môi của hồ quang xoay chiều như sẽ trình bày dưới đây.

Hồ quang xoay chiều

Khi nối mạch phóng điện hồ quang một chiều với nguồn điện xoay chiều 50Hz thì phóng điện chỉ có thể xảy ra với các điện cực than hoặc graphite và dòng phải khá lớn. Nguyên nhân là trong mỗi nửa chu kỳ khi hiệu điện thế giảm nhỏ hơn giá trị cần thiết hồ quang sẽ tắt. Nếu điện cực bằng kim loại, độ dẫn nhiệt tốt, nhiệt độ hạ nhanh, khả năng phát xạ điện tử kém đi. Đến nửa chu kỳ sau, khi hiệu điện thế tăng đủ lớn vẫn không thể xảy ra phóng điện được. Để hồ quang điện cực kim loại thực hiện được với điện xoay chiều cần thiết phải môi bằng cao thế trong mỗi nửa chu kỳ (100 lần trong một giây) để đánh thủng khoảng phóng điện giữa hai điện cực. Sau đó hồ quang sẽ phóng như trường hợp điện một chiều. Sơ đồ hồ quang xoay chiều với mạch môi cao thế được mô tả trên hình 2.6.

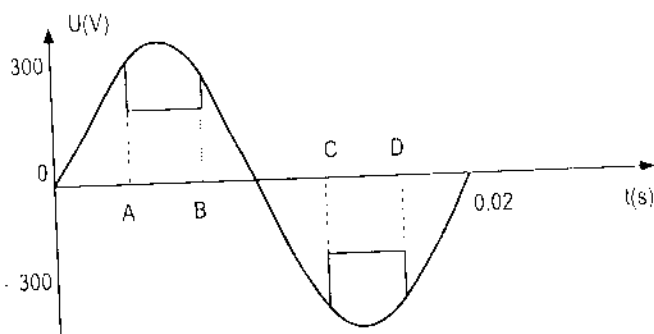


Hình 2.6. Sơ đồ mạch hồ quang xoay chiều

$R_1 = 40\Omega$, $R_2 = 400\Omega$ là các trở điều dòng; $C_1 = 0,5 - 0,25\mu F$ dùng để ngăn dòng cao tần đi vào mạng điện lưới; $C_2 = 0,01 - 0,003\mu F$ là tụ cao thế; $L_1 = 400\mu H$ (150 – 200 vòng); $L_2 = 10\mu H$ (10 vòng).

Biến thế T công suất không lớn lắm (100W) tăng thế lên khoảng 12KV. Tụ cao thế C_2 nạp điện khi hiệu điện thế tăng trong mỗi nửa chu kỳ. Khi thế đủ lớn để đánh thủng khoảng phóng điện P thì tụ phóng điện qua

mạch L_2C_2 . Trong mạch sẽ xuất hiện dao động cao tần ($\omega^2 = 1/L_2C_2$), cao thế truyền sang mạch phóng điện hồ quang qua cặp cuộn dây $L_2 - L_1$ để đánh thủng khoảng phóng điện hồ quang. Do mạch mỗi và mạch hồ quang chung nguồn điện xoay chiều nên hiệu điện thế trên tụ C_2 và trên 2 điện cực hồ quang tăng đồng thời. Sự biến thiên hiệu điện thế trên 2 điện cực hồ quang trong một chu kỳ của dòng điện xoay chiều được mô tả trên hình 2.7. Trong khoảng AB và CD hồ quang phóng như trường hợp điện một chiều.



Hình 2.7. Sự biến thiên hiệu điện thế trên hai điện cực phóng điện hồ quang xoay chiều

Điều chỉnh biến trở R có thể làm giảm dòng nạp tụ C, nhờ đó làm tăng pha mỗi hồ quang. Thời gian phóng hồ quang khi đó sẽ giảm. Cũng có thể điều chỉnh pha bằng cách thay đổi khoảng cách điện cực P.

So sánh hồ quang điện một chiều và xoay chiều

Điện trở hồ quang và hiệu điện thế trên các điện cực phụ thuộc vào khoảng cách 2 điện cực. Để có nhiệt độ plasma hồ quang không đổi phải giữ khoảng cách điện cực không đổi. Trong hồ quang một chiều khoảng cách này thay đổi nhanh chóng. Hơn nữa, thời gian đốt nóng điện cực ở hồ quang một chiều là liên tục, làm bay hơi mạnh chất có thể ion hóa thấp, dẫn đến dòng tăng theo thời gian và hiệu điện thế giảm. Nói chung, hồ quang một chiều cháy không ổn định. Ở hồ quang xoay chiều điện cực luôn đổi dấu nên khoảng cách giữa chúng thay đổi ít hơn. Hơn nữa lại được môi để phóng điện ở những thời điểm xác định ứng với hiệu điện thế như nhau. Sự đốt nóng điện cực và sự bay hơi của chất có thể ion hóa thấp ít hơn. Độ ổn định của hồ quang xoay chiều do đó tốt hơn. Tuy nhiên, hồ

quang một chiều có đốt nóng liên tục, với sự bay hơi mạnh của điện cực nên có độ chói cao hơn.

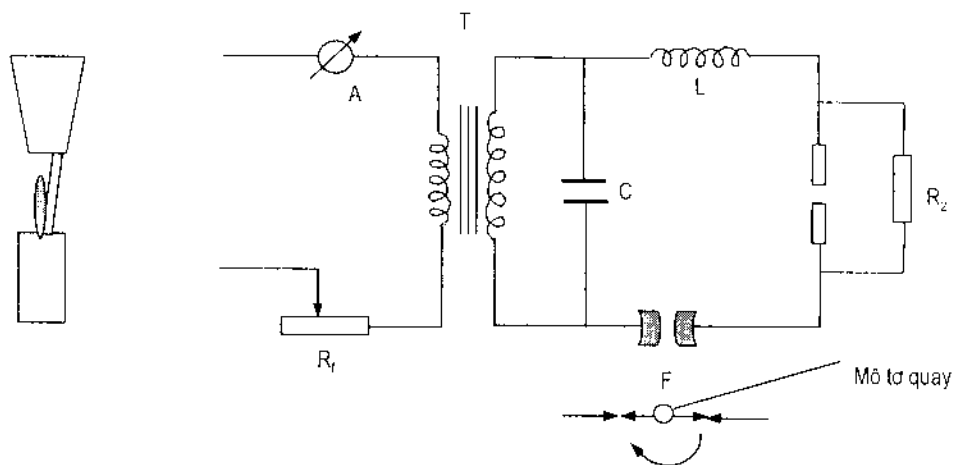
Trong sơ đồ hình 2.7, có thể tăng công suất (độ chói hồ quang) bằng biến trở R_1 , tuy không nhiều.

Nhiệt độ hồ quang sẽ tăng đáng kể khi tăng hiệu điện thế.

c) Tia điện

Để có nhiệt độ plasma cao mà không cần nguồn công suất lớn người ta dùng tia điện. Trong hồ quang, để có nhiệt độ cao phải tăng hiệu điện thế. Với hiệu điện thế cao, muốn có mật độ dòng lớn cần phải dùng nguồn công suất lớn. Tuy nhiên có thể không cần dùng nguồn công suất lớn mà vẫn có được mật độ dòng lớn nhờ phóng điện xung ngắn. Chế độ phóng điện này thực hiện nhờ một tụ điện cao thế và được gọi là tia điện tích tụ.

Trước tiên, điện được nạp vào tụ điện rồi sau đó được phóng qua hai điện cực. Cấu trúc của tia điện khác với hồ quang. Trong mỗi lần phóng điện, đầu tiên một kênh rất hẹp plasma được tạo thành, trong đó hầu như không có chất làm điện cực. Nhiệt độ kênh plasma này rất lớn, hàng chục nghìn độ C. Ánh sáng phát ra chủ yếu gồm các vạch bức xạ của nitơ và oxy cùng với một phóng liên tục mạnh. Tại vùng hẹp mà tia điện phóng tới trên mặt điện cực, nhiệt độ rất cao nhưng không kịp truyền sang bên cạnh sẽ phụ lên một ngọn lửa rất chói nhiệt độ gần 10.000°C .



Hình 2.8. Sơ đồ mạch phóng tia điện và cấu trúc tia điện

Trong ngọn lửa này cân bằng nhiệt kịp tạo thành, bức xạ của nó gồm các vạch của chất làm điện cực. Phương của plasma và ngọn lửa không trùng nhau (hình 2.8).

Biến thế T tăng thế lên tới 800 – 1500V (công suất cỡ 0,2 – 0,8kW). $C = 0,003 - 0,02\mu F$. Nếu không có điện cực F và điện trở R_2 thì tụ C sẽ nạp điện tới hiệu điện thế đủ lớn thì phóng điện qua điện cực P . Do thế tự phóng điện phụ thuộc nhiều vào dạng và khoảng cách 2 điện cực mà khoảng cách này thay đổi trong quá trình phóng điện nên thời điểm phóng điện thay đổi sau những chu kỳ khác nhau của mạng điện. Để điều khiển thời điểm phóng điện người ta đưa thêm vào một cặp điện cực phụ F (hoặc dùng một mô tơ chỉ huy). Điện cực F làm bằng Wolfram (W) và có khoảng cách rất xác định. Song song với điện cực chính P có mắc thêm một điện trở $R_2 = 5M\Omega$ hoặc một cuộn cảm sao cho với dòng điện cao tần thì có trở kháng lớn, còn với dòng điện 50Hz thì trở kháng nhỏ. Khi tụ C nạp điện, hiệu điện thế trên 2 điện cực phụ F cũng tăng theo, đến một giá trị xác định sẽ phóng điện qua F . Lúc đó trong mạch LC sẽ sinh ra dòng cao tần và do R_2 lớn nên hiệu điện thế tập trung lên điện cực chính P . Người ta chọn khoảng cách điện cực sao cho thế tự phóng điện của điện cực chính P nhỏ hơn thế tự phóng điện của điện cực phụ F . Như vậy, sau khi điện cực F phóng điện thì điện cực P cũng phóng điện. Thay cho điện cực phụ F cũng có thể dùng một mô tơ đồng bộ điều khiển sự đóng mở của mạch phóng điện vào các thời điểm theo ý muốn của bán chu kỳ điện xoay chiều.

2.2. NGUỒN SÁNG TRONG QUANG PHỔ HẤP THỤ, HUỖNH QUANG VÀ TÁN XẠ RAMAN

Trong quang phổ hấp thụ, huỳnh quang người ta thường cần một nguồn sáng cường độ đủ mạnh trên một vùng phổ rộng, có bước sóng thay đổi liên tục. Trong quang phổ Raman lại cần một nguồn sáng đơn sắc, cường độ mạnh tập trung vào một vạch bức xạ hẹp. Tùy theo mục đích nghiên cứu, người ta sẽ cần đến những nguồn sáng liên tục hay đơn sắc trong một vùng phổ xác định nào đó từ hồng ngoại, khả kiến đến tử ngoại. Sau đây là một số nguồn sáng thông dụng thỏa mãn các yêu cầu khác nhau trong quang phổ thực nghiệm.

2.2.1. Nguồn bức xạ nhiệt

a) Vật đen tuyệt đối

Một vật khi nung nóng sẽ bức xạ sóng điện từ. Nhiệt độ vật càng cao thì bước sóng bức xạ phát ra càng ngắn. Vật đen tuyệt đối là vật có khả năng hấp thụ hoàn toàn bức xạ chiếu tới. Năng suất hấp thụ với mọi bước sóng $a(\lambda) = 1$. Theo định luật Kirchhoff khi ở cân bằng nhiệt vật có khả năng hấp thụ mạnh bước sóng nào thì cũng có khả năng bức xạ mạnh bước sóng đó. Vì vậy, vật đen tuyệt đối là vật có năng suất bức xạ mạnh. Hơn thế, phân bố năng lượng bức xạ của vật đen tuyệt đối theo bước sóng ở một nhiệt độ cho trước là đã biết bởi công thức Planck:

$$r(\lambda, T) = \frac{2\pi hc^2 \lambda^{-5}}{e^{\frac{hc}{kT\lambda}} - 1}$$

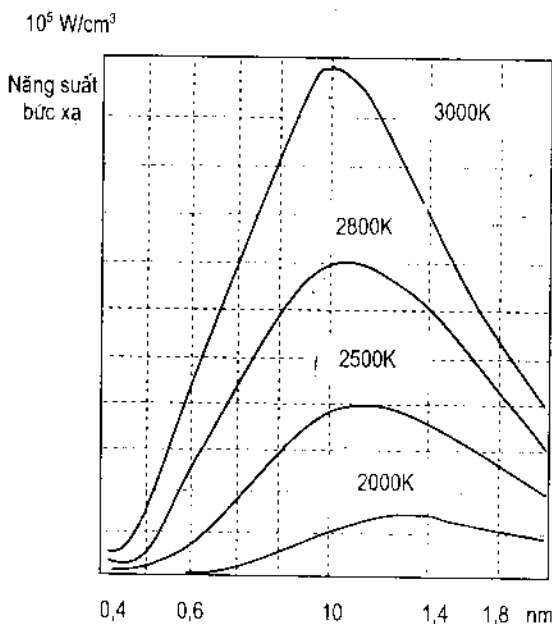
Trong đó: $r(\lambda, T)$ là công suất bức xạ của vật đen tuyệt đối; $c = 3 \cdot 10^8$ m/s là vận tốc ánh sáng trong chân không; $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J.s là hằng số Planck, $k = 1,38054 \cdot 10^{-23}$ J/K là hằng số Boltzman.

Như vậy, vật đen tuyệt đối có thể bức xạ ở mọi vùng bước sóng, nhiệt độ để công suất bức xạ lớn nhất ứng với bước sóng λ là:

$$\lambda(\text{nm}) = \frac{2,896 \cdot 10^6}{T}$$

(định luật Wiens), trong đó T là nhiệt độ tuyệt đối (K).

Trong thực tế không có vật đen lý tưởng như định nghĩa trên. Người ta tạo ra vật đen gần đúng lý tưởng bằng cách dùng một quả cầu rỗng có một lỗ hở nhỏ, nung nóng ở một nhiệt độ xác định. Các tia sáng đi vào vật qua lỗ nhỏ sau nhiều lần phản xạ bên trong sẽ bị hấp thụ hoàn toàn và vật có tính chất của vật đen lý tưởng. Phân bố năng suất bức xạ theo phổ của vật đen tuyệt đối có dạng như đồ thị hình 2.9.



Hình 2.9. Phân bố năng lượng bức xạ trong phổ vật đen tuyệt đối

Sự phân bố năng lượng theo phổ bức xạ của vật được nung nóng trong thực tế ít nhiều khác với công thức Planck. Nếu sự phân bố năng lượng tương đối trong phổ bức xạ của vật giống với vật đen tuyệt đối ở cùng nhiệt độ thì vật gọi là vật xám. Các vật "xám" có hệ số hấp thụ nhỏ hơn 1 và không phụ thuộc vào bước sóng. Những vật không khác nhiều với vật xám, sự phân bố năng lượng tương đối trong phổ bức xạ ở nhiệt độ T có thể gần đúng được mô tả bằng công thức Planck nhưng ứng với nhiệt độ khác, gọi là *nhiệt độ màu* T_M . Vật xám có nhiệt độ màu bằng nhiệt độ thực. Để đặc trưng cho độ chói tuyệt đối của vật bức xạ người ta sử dụng khái niệm nhiệt độ chói T_C . Nó được định nghĩa là *nhiệt độ của vật đen tuyệt đối có độ chói phổ bằng độ chói phổ của vật cho trước*. Nhiệt độ chói của vật nhỏ hơn nhiệt độ thực và nói chung phụ thuộc vào bước sóng. Đối với vật xám nhiệt độ chói không phụ thuộc vào bước sóng (đương nhiên đối với vật đen tuyệt đối thì nhiệt độ chói, nhiệt độ màu trùng với giá trị thực). Trong thực tế, đối với phép đo năng lượng người ta thường dùng đèn dây tóc Wolfram đốt nóng.

b) Đèn dây tóc Wolfram

Phổ biến hơn, để có nguồn bức xạ phân bố liên tục trên vùng phổ rộng người ta dùng đèn dây tóc đốt nóng. Tùy theo nhiệt độ của dây tóc được đốt nóng mà đèn cho bức xạ nằm trong vùng phổ nào. Để có phổ liên tục trong vùng khả kiến và tử ngoại người ta thường dùng dây tóc Wolfram đốt nóng bằng dòng điện. Nhiệt độ của sợi Wolfram có thể đạt 2000 – 3000 K. Vỏ đèn làm bằng thủy tinh đặc biệt để có thể truyền qua bức xạ khả kiến, một phần bức xạ tử ngoại và hồng ngoại từ 320 – 2500nm. Thông thường, bước sóng mạnh nhất của đèn Wolfram là 500nm. Nếu vỏ đèn được làm bằng thạch anh thì vùng bức xạ rộng hơn: 200 – 3000nm. Khi đèn hoạt động lâu, Wolfram bị bốc hơi. Để kéo dài tuổi thọ người ta thêm hơi iode vào trong đèn để tạo nên WI_2 . Các phân tử WI_2 khuếch tán đến dây tóc đèn, bổ sung lượng Wolfram mất đi.

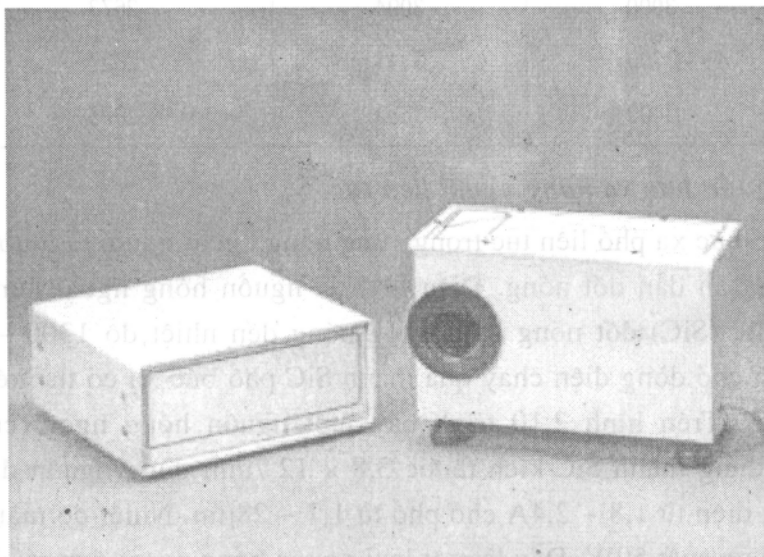
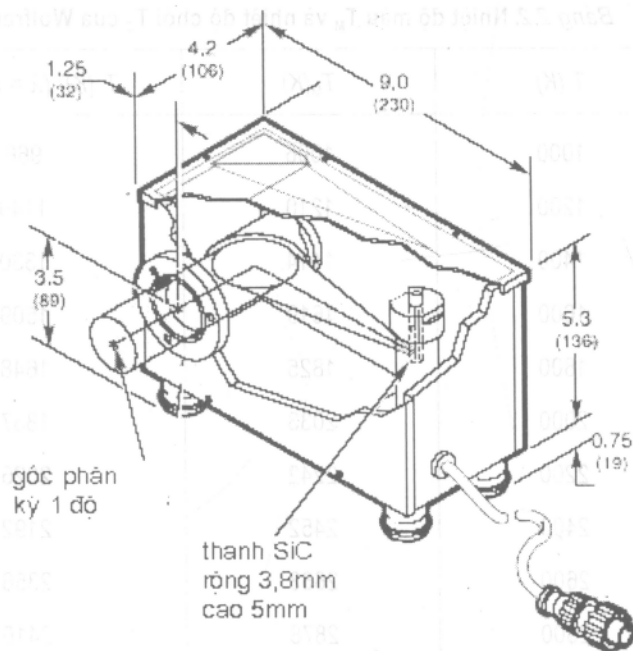
Trên bảng 2.2 trình bày các nhiệt độ màu T_M và nhiệt độ chói T_C của Wolfram. Sự bức xạ của Wolfram yếu hơn gần 2 lần so với vật đen tuyệt đối ở cùng nhiệt độ.

Bảng 2.2. Nhiệt độ màu T_M và nhiệt độ chói T_C của Wolfram.

$T (K)$	$T_M(K)$	$T_C(K); (\lambda = 565nm)$
1000	1006	966
1200	1210	1149
1400	1414	1330
1600	1619	1509
1800	1825	1648
2000	2033	1857
2200	2242	2026
2400	2452	2192
2600	2663	2356
2800	2878	2416
3000	3094	2673
3200	3311	2827
3400	3533	2978

c) Nguồn bức xạ hồng ngoại liên tục

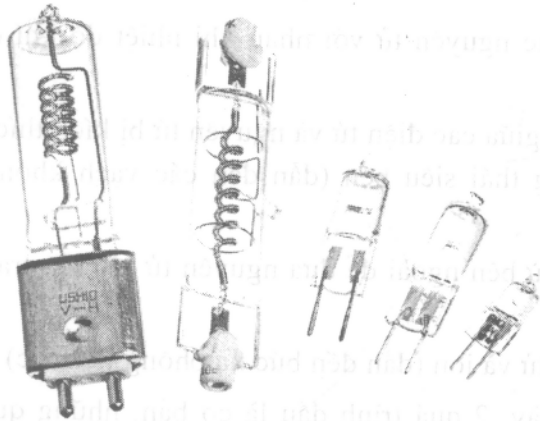
Để có bức xạ phổ liên tục trong vùng hồng ngoại người ta thường dùng các thanh bán dẫn đốt nóng. Điển hình là nguồn hồng ngoại dùng thanh carbua silic (SiC) đốt nóng. Khi nung nóng đến nhiệt độ 1300 – 1500K bằng cách cho dòng điện chạy qua thanh SiC phổ bức xạ có thể kéo dài từ 1 – 40 μ m. Trên hình 2.10 trình bày một nguồn hồng ngoại của hãng Newport dùng thanh SiC kích thước 3,8 × 12,7mm dùng nguồn điện 12V DC, dòng điện từ 1,8 – 2,4A cho phổ từ 1,7 – 28 μ m. Nhiệt độ màu vào cỡ 1273K, công suất 50W. Đây là một loại nguồn hồng ngoại đơn giản, không đắt tiền. Trong hộp đựng thanh SiC có một gương chuẩn trục tạo ra chùm sáng lối ra có đường kính vết cỡ 38mm với độ phân kỳ 1⁰. Người ta dùng gương phản xạ parabol thay cho thấu kính vì các vật liệu hồng ngoại rất đắt và có độ truyền qua giới hạn. Thay cho SiC người ta còn dùng Zirconi, Ytri... (có tên là thanh Nemst) được nung nóng đến 1200 – 2000K trong không khí. Phổ bức xạ của thanh Nemst từ 0,4 – 20 μ m.



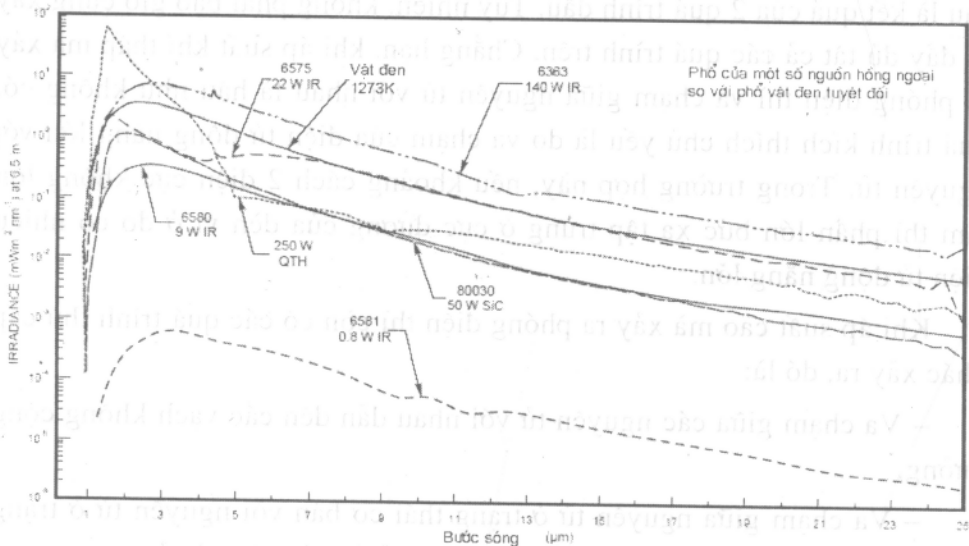
Hình 2.10. Nguồn bức xạ hồng ngoại dùng SiC (model 80007. – Newport)

Ngoài ra, các đèn Halogen Wolfram thạch anh cũng được dùng làm nguồn sáng hồng ngoại mạnh. Bức xạ hồng ngoại phát ra từ dây tóc đốt nóng đi qua vỏ bóng đèn thạch anh bị cắt phổ trên $3,5\mu\text{m}$. Khi bị đốt nóng ở nhiệt độ cao, Wolfram bay hơi từ dây tóc bám vào thành vỏ thạch anh của đèn làm giảm độ sáng và thời gian sống của đèn. Chất khí Halogen có

tác dụng đưa Wolfram bám trên thành đèn trở về dây tóc. Quá trình nhiệt hóa này gọi là chu trình Halogen.



Hình 2.11a. Một số dạng đèn hồng ngoại Halogen Wolfram vỏ thạch anh



Hình 2.11b. Phổ của một số nguồn hồng ngoại liên tục của hãng Newport

80030 – nguồn hồng ngoại dùng thanh SiC

QTH, 6580, 6581 – đèn Halogen Wolfram thạch anh

6575 – thanh Nemst (ceramic)

6363 – IR emitter – nguồn hồng ngoại dạng thanh đốt nóng.

2.2.2. Đèn phóng điện qua chất khí

a) Đặc điểm chung

Các nguồn sáng này dựa trên sự phóng điện qua chất khí ở một áp suất xác định trong một ống kín. Bản chất bức xạ của chất khí trong ống phóng điện liên quan đến những quá trình cơ bản sau:

– Sự va chạm của điện tử với nguyên tử ở trạng thái cơ bản (dẫn đến các vạch cộng hưởng).

– Sự va chạm giữa các nguyên tử với nhau khi nhiệt độ khí cao, áp suất lớn.

– Sự va chạm loại hai giữa các điện tử và nguyên tử bị kích thích cũng như các nguyên tử ở trạng thái siêu bền (dẫn đến các vạch không cộng hưởng).

– Sự hấp thụ photon từ bên ngoài để đưa nguyên tử khí lên trạng thái kích thích.

– Sự tái hợp của điện tử và ion (dẫn đến bức xạ phổ liên tục)

Trong các quá trình này, 2 quá trình đầu là cơ bản, những quá trình sau là kết quả của 2 quá trình đầu. Tuy nhiên, không phải bao giờ cũng xảy ra đầy đủ tất cả các quá trình trên. Chẳng hạn, khi áp suất khí thấp mà xảy ra phóng điện thì va chạm giữa nguyên tử với nhau là hầu như không có, quá trình kích thích chủ yếu là do va chạm của điện tử động năng lớn với nguyên tử. Trong trường hợp này, nếu khoảng cách 2 điện cực không lớn lắm thì phần lớn bức xạ tập trung ở cực dương của đèn vì ở đó có nhiều điện tử động năng lớn.

Khi áp suất cao mà xảy ra phóng điện thì còn có các quá trình thứ cấp khác xảy ra, đó là:

– Va chạm giữa các nguyên tử với nhau dẫn đến các vạch không cộng hưởng.

– Va chạm giữa nguyên tử ở trạng thái cơ bản với nguyên tử ở trạng thái kích thích dẫn đến làm giảm số nguyên tử ở mức cộng hưởng.

– Va chạm loại 2 giữa các điện tử với các nguyên tử kích thích và nguyên tử ở mức siêu bền dẫn đến các vạch không cộng hưởng.

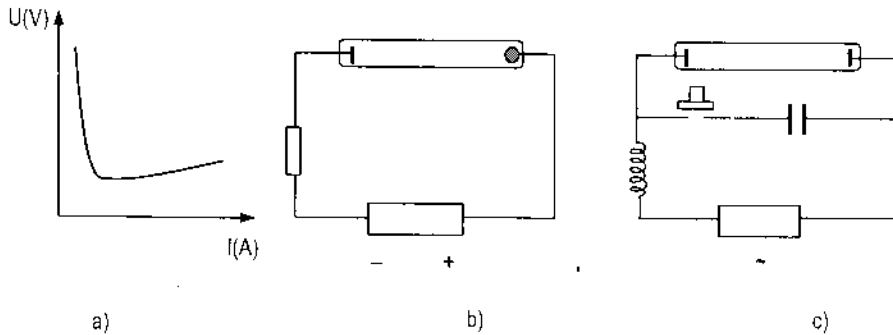
– Sự tái hợp giữa điện tử và ion dẫn đến bức xạ phổ liên tục.

Nắm được bản chất bức xạ của đèn phóng khí, tùy theo mục đích nghiên cứu ta có thể chọn đèn ở áp suất thích hợp. Ví dụ, muốn có bức xạ cộng hưởng của thủy ngân (Hg) bước sóng 254 và 185nm ta dùng đèn Hg áp suất thấp. Muốn có bức xạ phổ liên tục trong vùng 300 – 400nm cũng như các vạch 572 và 546nm ta dùng đèn Hg áp suất cao. Muốn có bức xạ tử ngoại độ chói lớn ta dùng đèn Hg áp suất siêu cao.

Đặc trưng Von – Ampe

Sự phụ thuộc của hiệu điện thế giữa 2 điện cực đèn và cường độ dòng điện qua đèn có dạng như hình 2.12a. Nếu vì lý do nào đó dòng điện tăng lên thì hiệu điện thế sẽ giảm và có thể dẫn đến ngừng phóng điện.

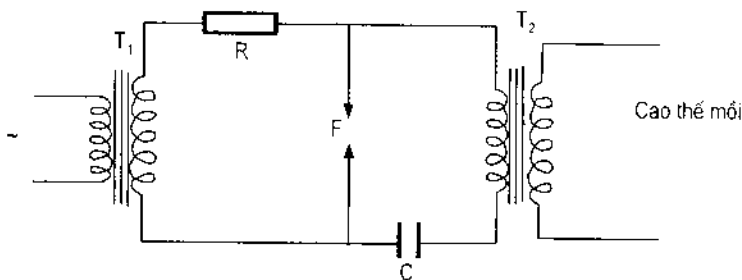
Để đèn sáng ổn định người ta phải mắc thêm một điện trở điều dòng nối tiếp với đèn. Trở điều dòng có thể là một trở thuần khi dùng điện một chiều (h.2.12b) và là một cuộn cảm (h.2.12c) khi dùng điện xoay chiều, có tác dụng hạn chế sự thay đổi dòng, giữ cho hiệu điện thế trên đèn không đổi.



Hình 2.12. Đặc trưng Von – Ampe và sơ đồ mạch phóng điện

Môi đèn phóng khí

Muốn có phóng điện qua ống khí cần phải có hiệu điện thế đủ lớn. Hiệu điện thế tối thiểu để gây ra phóng điện gọi là thế môi. Tuy nhiên, khi đèn đã phóng rồi thì chỉ cần một hiệu điện thế thấp hơn cũng đủ duy trì cho đèn tiếp tục sáng. Như vậy, muốn đèn sáng chỉ cần tạo nên một xung cao thế trên 2 cực đèn và dùng một điện thế thấp hơn để duy trì đèn sáng. Có nhiều cách khác nhau để tạo ra xung môi đèn. Dưới đây là sơ đồ thiết bị môi vạn năng thường dùng và có thể môi cho nhiều loại đèn phóng khí, kể cả hồ quang.



Hình 2.13. Sơ đồ mạch môi vạn năng

Biến thế T_1 tạo ra cao thế nạp vào tụ C. Khi thế trên tụ đủ lớn tụ C sẽ phóng điện qua 2 điện cực F tạo ra dao động cao tần cao thế. Biến thế T_2 tăng thế một lần nữa tạo ra xung mỗi cao thế cần thiết. Dùng cộng hưởng thế trong mạch LC cũng có thể sử dụng để mỗi đèn như trong sơ đồ hình 2.12c. Chọn thông số L, C thích hợp sao cho chỉ cần nhấn chốt K trong mạch LC sẽ xảy ra cộng hưởng, hiệu điện thế hai đầu điện cực tăng vọt lên làm đèn sáng.

b) Đèn thủy ngân

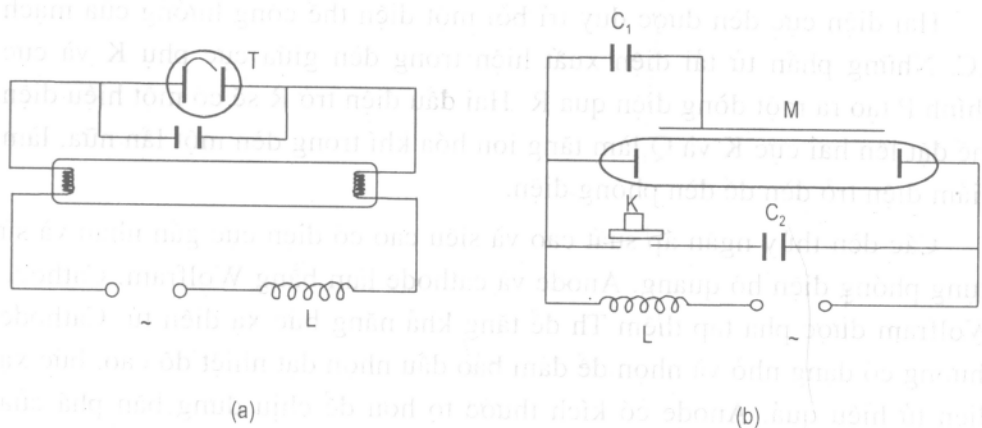
Đèn thủy ngân được dùng phổ biến trong các phòng thí nghiệm vì nó cho bức xạ đơn sắc, cường độ khá mạnh trong vùng khả kiến và tử ngoại. Phổ bức xạ đèn Hg thay đổi nhiều theo áp suất hơi Hg trong đèn. Với đèn áp suất thấp, năng lượng bức xạ tập trung vào bước sóng 254nm và 185nm. Khi áp suất tăng năng lượng bức xạ chuyển sang vùng tử ngoại gần 300 – 400nm cùng với vạch vàng 572nm và vạch xanh 546nm. Nếu áp suất tiếp tục tăng nữa thì độ rộng các vạch phổ sẽ tăng mạnh đến hàng chục Angstrom (Å) và xuất hiện phổ liên tục. Có thể chia làm 3 loại đèn thủy ngân:

- Đèn Hg áp suất thấp: 0,01 – 1mmHg
- Đèn Hg áp suất cao: 1 – 3mmHg
- Đèn Hg áp suất siêu cao: vài chục atm.

Đèn Hg áp suất thấp là một ống thủy tinh chứa Hg áp suất cỡ mmHg và một lượng nhỏ khí Ar. Hai điện cực làm bằng dây tóc kim loại. Đèn ống huỳnh quang chính là một dạng đèn Hg áp suất thấp với thành ống thủy tinh được phủ một lớp bột huỳnh quang phát sáng dưới tác dụng của tia tử ngoại. Thông thường đèn được nuôi và mối theo sơ đồ hình 2.14a.

Đèn được mồi bằng Starter T, đó là một bầu đèn nhỏ chứa khí Ne. Một cực làm bằng kim loại dễ giãn nở đóng mạch khi bị đốt nóng. Khi đóng mạch giữa hai cực của Starter sẽ có phóng điện hồ quang thấp thế, làm nóng điện cực và nối tắt hai điện cực. Khi đó, dây tóc điện cực chính của đèn Hg được đốt nóng, phát xạ điện tử dẫn đến phóng điện dễ dàng qua đèn. Khi đèn phóng điện thì Starter không hoạt động nữa, điện cực nguội và co lại để mạch hở. Cuộn cảm L có tác dụng điều dòng.

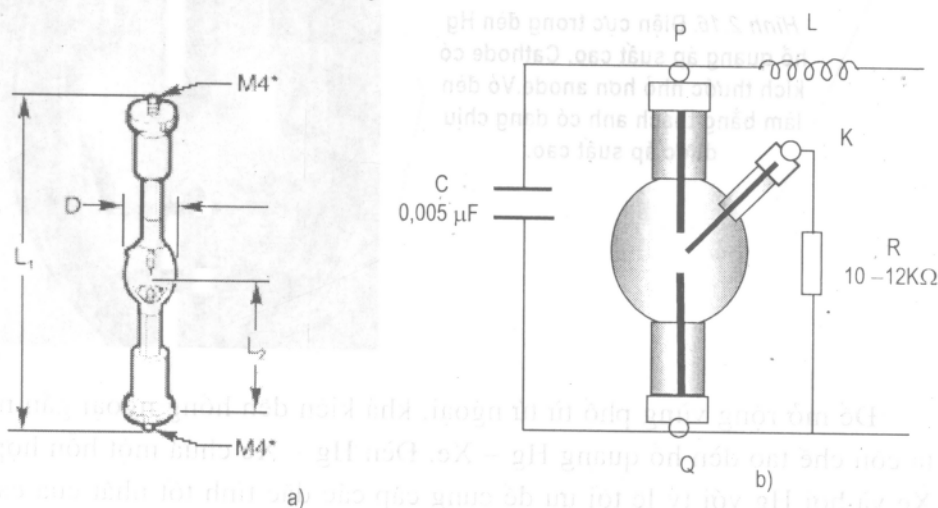
Đèn thủy ngân áp suất cao làm bằng ống thạch anh chứa khí Ar và vài giọt thủy ngân. Khi làm việc Hg lỏng sẽ biến thành hơi áp suất cỡ 1 – 3-mmHg. Sơ đồ mắc đèn Hg áp suất cao có thể dùng như hình 2.14b.



Hình 2.14. Sơ đồ mắc đèn thủy ngân

Ban đầu khi chốt K mở, điện nạp cho tụ C_1 ($0,003 - 0,005\mu F$) làm cho giữa lá đồng M và các điện cực đèn có một hiệu điện thế ion hóa chất khí trong đèn. Khi đóng chốt K trong mạch L, C_2 ($2 - 3\mu F$) xuất hiện cộng hưởng thế, hiệu điện thế 2 cực đèn cỡ $300 - 600V$ làm đèn sáng. Sau khi đèn đã sáng ta mở chốt K vì không cần thế cao.

Đèn thủy ngân áp suất siêu cao có áp suất từ $10 - 50\text{atm}$. Do áp suất siêu cao nên hai điện cực được bố trí gần nhau hơn. Ngoài ra còn có thể có thêm một điện cực phụ để ion hóa chất khí trong đèn. Sơ đồ nguyên lý mắc đèn Hg áp suất siêu cao trình bày trên hình 2.15b.



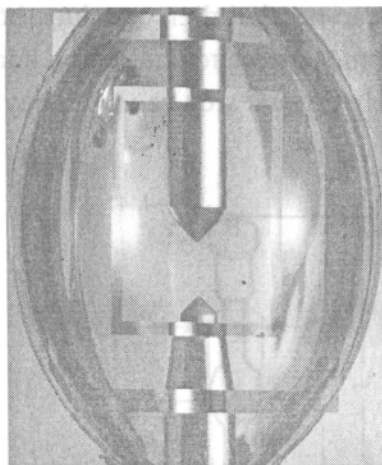
Hình 2.15. a) Đèn thủy ngân áp suất siêu cao;
b) Sơ đồ nguyên lý mắc đèn Hg áp suất siêu cao

Hai điện cực đèn được duy trì bởi một điện thế cộng hưởng của mạch LC. Những phần tử tải điện xuất hiện trong đèn giữa cực phụ K và cực chính P tạo ra một dòng điện qua R. Hai đầu điện trở R sẽ có một hiệu điện thế đặt lên hai cực K và Q làm tăng ion hóa khí trong đèn một lần nữa, làm giảm điện trở đèn để đèn phóng điện.

Các đèn thủy ngân áp suất cao và siêu cao có điện cực gần nhau và sử dụng phóng điện hồ quang. Anode và cathode làm bằng Wolfram. Cathode Wolfram được pha tạp thêm Th để tăng khả năng bức xạ điện tử. Cathode thường có dạng nhỏ và nhọn để đảm bảo đầu nhọn đạt nhiệt độ cao, bức xạ điện tử hiệu quả. Anode có kích thước to hơn để chịu đựng bắn phá của điện tử và tỏa nhiệt hiệu quả (hình 2.16). Khoảng cách anode – cathode có thể từ 0,25 đến vài mm tùy theo công suất đèn. Công suất của đèn Hg có thể từ 50 – 1600W. Đèn thủy ngân hồ quang có các cuộn dây trên một hoặc cả hai điện cực để giúp ích cho việc tạo hồ quang (hình 2.17a).

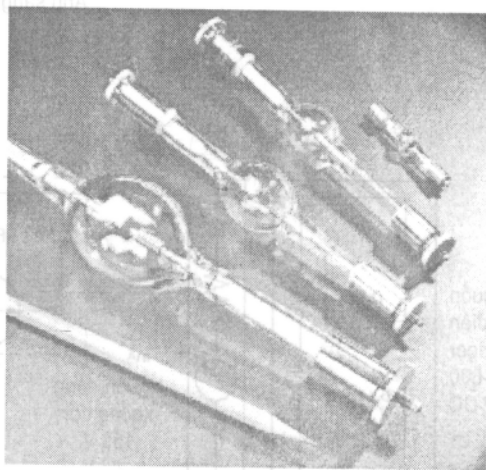
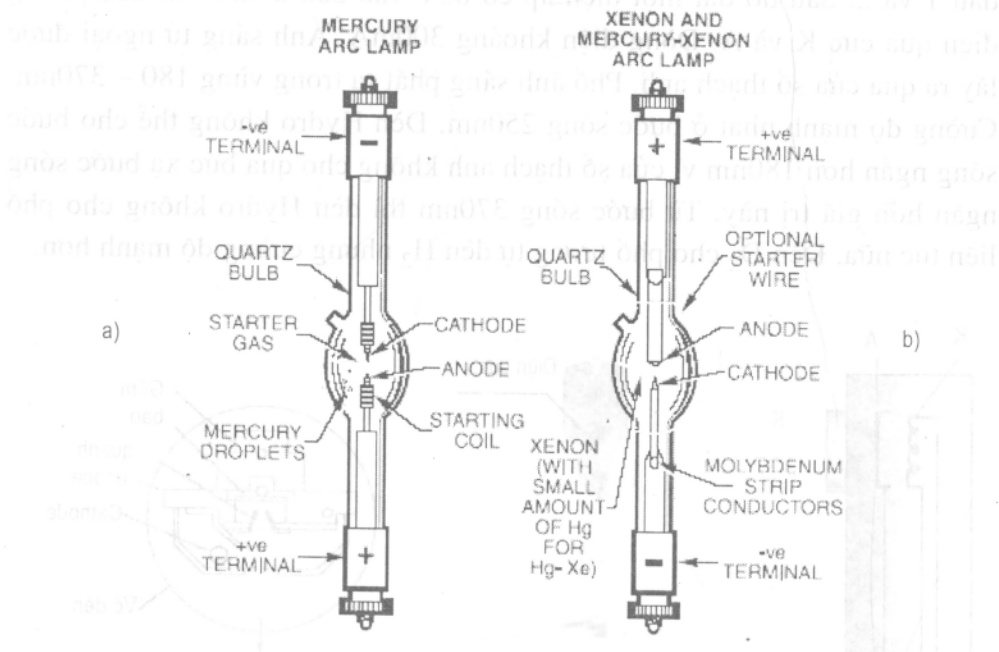
Trong đèn có chứa một ít khí hiếm và một lượng thủy ngân chính xác. Khi đèn phóng điện áp suất bên trong tăng dần từ 12 – 75 bar tùy theo loại đèn. Áp suất cao đòi hỏi phải hết sức cẩn thận khi sử dụng các loại đèn này.

Hình 2.16. Điện cực trong đèn Hg hồ quang áp suất cao. Cathode có kích thước nhỏ hơn anode. Vỏ đèn làm bằng thạch anh có dạng chịu được áp suất cao.



Để mở rộng vùng phổ từ tử ngoại, khả kiến đến hồng ngoại gần người ta còn chế tạo đèn hồ quang Hg – Xe. Đèn Hg – Xe chứa một hỗn hợp khí Xe và hơi Hg với tỷ lệ tối ưu để cung cấp các đặc tính tốt nhất của cả đèn Xe và đèn Hg áp suất siêu cao. Chẳng hạn, đèn này có phân bố phổ bao gồm phổ liên tục của Xe từ tử ngoại (UV) đến hồng ngoại (IR) và những vạch phổ mạnh của Hg trong vùng từ tử ngoại đến khả kiến. Phổ bức xạ

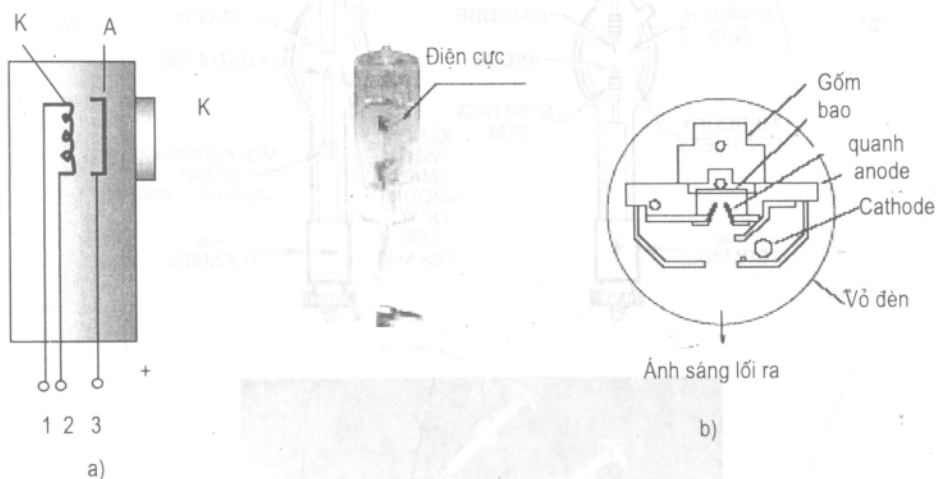
trong vùng UV mạnh hơn về cường độ và độ rộng vạch hẹp, sắc nét hơn so với đèn Hg áp suất siêu cao và đèn Xe. Đèn Hg – Xe còn có đặc tính là phát sáng và sáng lại được tức thời, điều mà đèn Hg áp suất siêu cao khó có thể đạt được. Các đèn Hg – Xe dùng Xe ở áp suất trên áp suất khí quyển làm khí khởi động và hoạt động với anode đặt ở trên (hình 2.17):



Hình 2.17. Một số cấu trúc đèn Hg và đèn Hg – Xe của hãng Newport.
a) Đèn hồ quang thủy ngân; b) Đèn hồ quang thủy ngân – Xenon

c) Đèn Hydro (H_2) và Đơteri (D_2)

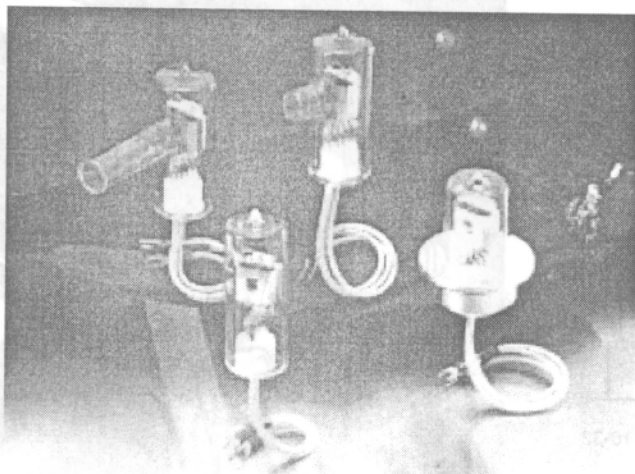
Khi đo phổ hấp thụ của nhiều chất người ta cần nguồn sáng có phổ liên tục trong vùng tử ngoại. Đèn Hydro (hoặc Đơteri D_2) là một trong những nguồn sáng đáp ứng nhu cầu đó. Nguyên lý cấu tạo của đèn Hydro mô tả trên hình 2.18a. Dây tóc đèn được đốt nóng bằng một hiệu điện thế đặt vào đầu 1 và 2. Sau đó đặt một điện áp cỡ 80V vào đầu 2 và 3 thì đèn phóng điện qua cực K và A. Dòng điện khoảng 300mA. Ánh sáng tử ngoại được lấy ra qua cửa sổ thạch anh. Phổ ánh sáng phát ra trong vùng 180 – 370nm. Cường độ mạnh nhất ở bước sóng 250nm. Đèn Hydro không thể cho bước sóng ngắn hơn 180nm vì cửa sổ thạch anh không cho qua bức xạ bước sóng ngắn hơn giá trị này. Từ bước sóng 370nm thì đèn Hydro không cho phổ liên tục nữa. Đèn D_2 cho phổ tương tự đèn H_2 nhưng cường độ mạnh hơn.



Hình 2.18. Cấu trúc bên trong đèn D2 và sơ đồ mạch nuôi đèn

Trên hình 2.18b trình bày cấu tạo bên trong của một đèn D_2 . Anode có cấu trúc gồm bao quanh để ngăn phóng điện ngoài ý muốn. Cathode làm bằng điện cực có độ cứng cao. Vì đèn D_2 sử dụng cột phóng điện dương của phóng điện hồ quang nên cathode được đặt dịch sang một bên và một cửa sổ được đặt ngay trước anode, thu hẹp miền phóng điện để nhận được cường độ cao. Khung cửa sổ đặt giữa anode và cathode có thể được dùng làm điện cực phụ đối với các đèn thiết kế hoạt động ở điện áp thấp. Khi cathode được đốt đủ nóng sẵn sàng cho phóng điện hồ quang, một điện áp xung Trigger được đặt vào giữa anode và cathode và phóng điện bắt đầu. Điện áp môi phóng điện cho đèn D_2 30W vào khoảng 350 – 400V. Tuy nhiên theo thời gian làm việc, điện áp môi tăng lên, để đảm bảo sự phóng điện cần có điện áp môi cỡ 500V (cực đại là 650V). Thế môi thay đổi tùy theo phương pháp Trigger.

Ví dụ đèn L2D2 (Hamamatsu – Japan) có điện áp môi 500 – 600V. Sơ đồ nuôi đèn như trên hình 2.18c. Nguồn điện cung cấp cho đèn dòng điện không đổi khoảng 300mA ứng với điện áp 150V. Một nguồn điện khác công suất cỡ 10W dùng để đốt nóng cathode. Cửa sổ anode có đường kính 0,5mm.



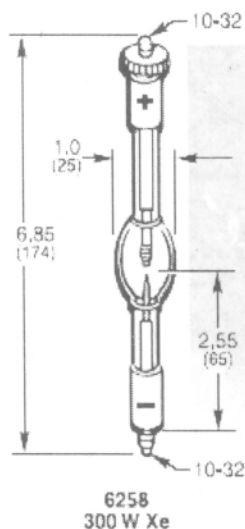
Hình 2.19. Đèn Đơteri model L2D2 (Hamamatsu)

d) Đèn Xenon

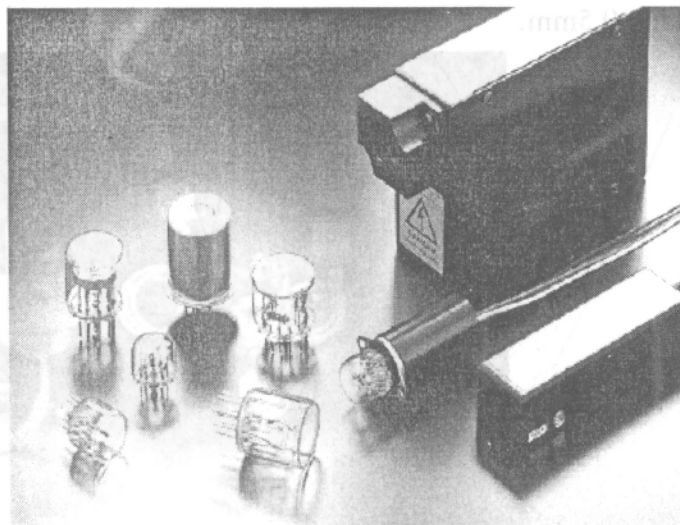
Để có phổ bức xạ liên tục, công suất cao người ta dùng đèn Xenon (Xe). Đèn Xenon có thể cho phổ rất rộng từ 200 – 2500nm, nghĩa là từ vùng tử ngoại, khả kiến đến hồng ngoại gần. Công suất có thể từ 35 – 10000W.

Đèn Xenon phóng điện hồ quang một chiều có nhiệt độ màu $\sim 5800\text{K}$, gần với nhiệt độ mặt trời. Khí trong đèn có áp suất cao có thể đến 10atm . Đèn có thể hoạt động ở cả chế độ xung và liên tục. Chế độ xung thường được dùng để bơm quang học cho các laser rắn như laser Ruby, Neodim... do có bức xạ mạnh trong vùng $400 - 500\text{nm}$. Vì có phổ liên tục, cường độ mạnh khá đều trong vùng bước sóng từ $400 - 700\text{nm}$ nên đèn Xe thường được sử dụng làm nguồn sáng giả mặt trời (Solar simulator). Đèn Xe khi đó được phối hợp với một hệ quang học gồm gương phản xạ elip, kính khuếch tán, thấu kính chuẩn trực và các kính lọc khác nhau để tạo ra nguồn sáng gần giống với ánh sáng tự nhiên có công suất từ $300 - 1000\text{W}$. Đèn Xe có hình dạng khác nhau tùy theo mục đích sử dụng. Có thể hình xoắn, hình ống thẳng hay hình trụ nhỏ (hình 2.20).

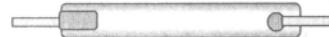
Khi hoạt động ở chế độ phát sáng liên tục, đèn có cấu trúc gần giống đèn Hg áp suất siêu cao (hình 2.20a). Đèn Xe hoạt động ở chế độ xung phổ biến có dạng hình 2.20b. Trường hợp đèn Xe xung dùng bơm laser rắn thì cấu trúc có dạng ống thẳng hoặc ống xoắn (hình 2.20c).



a)



b)

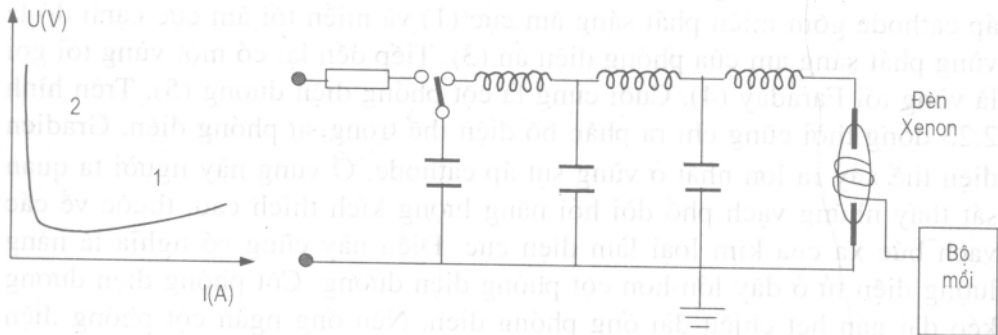


c)

Hình 2.20. Một số dạng đèn Xenon

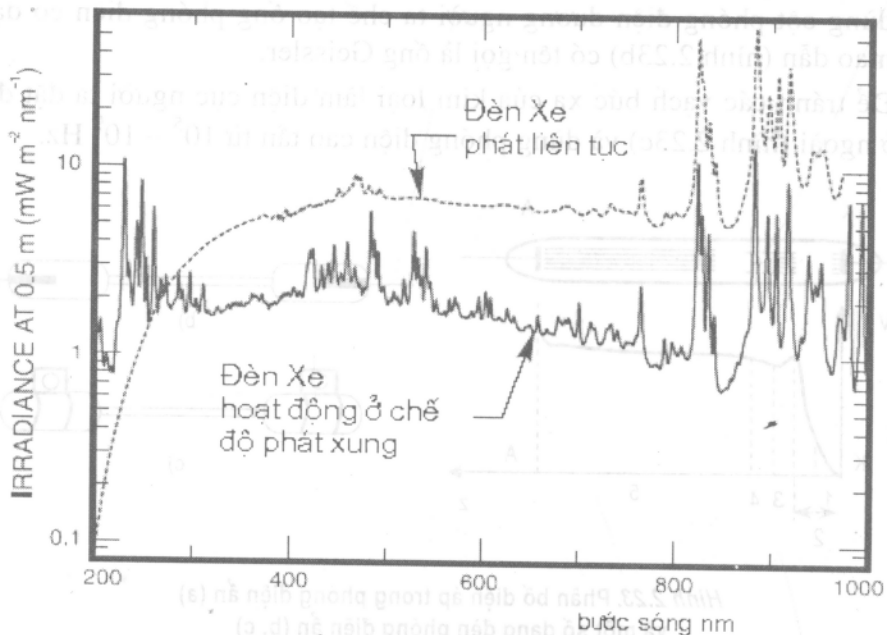
Khoảng cách điện cực của đèn có thể thay đổi từ 40mm đến một mét. Vỏ đèn thường làm bằng thạch anh với đường kính ống từ 2 – 30mm.

Đặc trưng Von – Ampe của đèn có dạng $U_D \Rightarrow k \cdot \sqrt{I_D}$, trong đó $k = 1,3 \cdot l/d$ tùy thuộc độ dài l và đường kính d của đèn. Đoạn 1 ứng với miền làm việc của đèn. Đoạn 2 ứng với trở động học âm ($dU/dI < 0$). Trường hợp đèn Xe hoạt động ở chế độ xung để bơm laser rắn thường được mắc theo sơ đồ hình 2.21.



Hình 2.21. Đặc trưng Von – Ampe và sơ đồ mắc đèn Xe ở chế độ xung

Phổ bức xạ của đèn Xe khi phát sáng ở chế độ liên tục và phát sáng ở chế độ xung được minh họa trên hình 2.22.



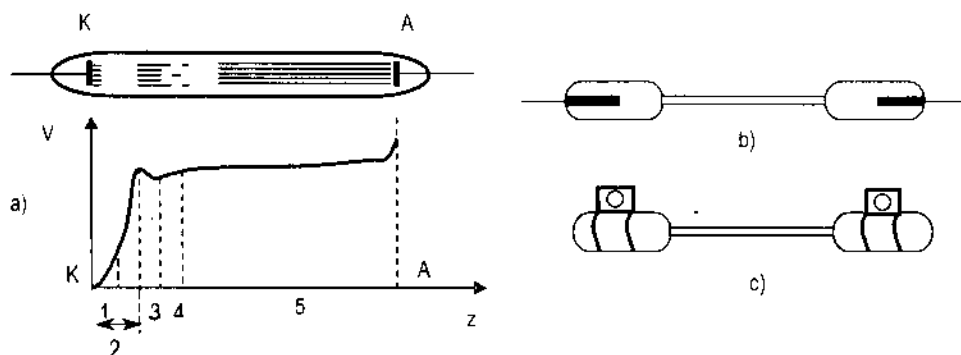
Hình 2.22. Phổ của đèn Xe chế tạo bởi hãng Newport

2.2.3. Đèn cathode rỗng

a) Phóng điện ẩn

Dùng một ống phóng điện đường kính 1 – 10mm, chứa khí ở áp suất vài Torr và đặt vào 2 điện cực một hiệu điện thế một chiều không nhỏ hơn 500 – 1000V ta sẽ quan sát thấy sự phóng điện ẩn. Nhiệt độ trong ống phóng điện khi đó chỉ lớn hơn một chút nhiệt độ thành ống, và vào khoảng 400 – 600K. Nếu quan sát ta sẽ thấy ống phóng điện sáng không đều, có thể chia làm các vùng như trên hình 2.23. Vùng (2) gần âm cực là vùng sụt áp cathode gồm miền phát sáng âm cực (1) và miền tối âm cực cạnh đó là vùng phát sáng âm của phóng điện ẩn (3). Tiếp đến lại có một vùng tối gọi là vùng tối Faraday (4). Cuối cùng là cột phóng điện dương (5). Trên hình 2.23 đồng thời cũng chỉ ra phân bố điện thế trong sự phóng điện. Gradient điện thế xảy ra lớn nhất ở vùng sụt áp cathode. Ở vùng này người ta quan sát thấy những vạch phổ đòi hỏi năng lượng kích thích cao, thuộc về các vạch bức xạ của kim loại làm điện cực. Điều này cũng có nghĩa là năng lượng điện tử ở đây lớn hơn cột phóng điện dương. Cột phóng điện dương kéo dài gần hết chiều dài ống phóng điện. Nếu ống ngắn cột phóng điện dương có thể không xuất hiện. Điện trường và năng lượng điện tử trong cột phóng điện dương nhỏ hơn đáng kể so với vùng sụt áp cathode. Các vạch bức xạ ở vùng này tương ứng với thể năng kích thích thấp. Sự phóng điện ở cột phóng điện dương chỉ kích thích những vạch và dải phân tử của chất khí chứa trong ống, thường là khí trơ, hơi thủy ngân. Để tăng độ sáng của đèn dùng cột phóng điện dương người ta chế tạo ống phóng điện có dạng ống mao dẫn (hình 2.23b) có tên gọi là ống Geissler.

Để tránh các vạch bức xạ của kim loại làm điện cực người ta đặt điện cực ở ngoài (hình 2.23c) và dùng phóng điện cao tần từ $10^5 - 10^9$ Hz.

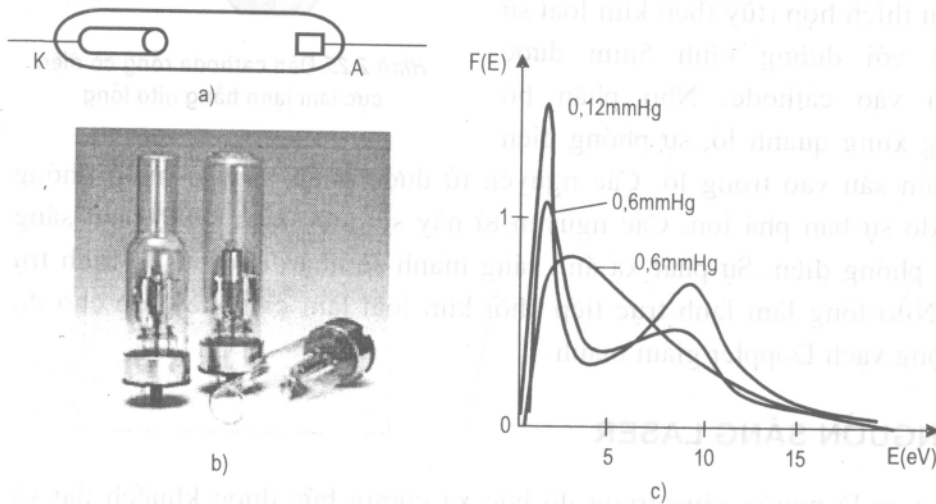


Hình 2.23. Phân bố điện áp trong phóng điện ẩn (a) và một số dạng đèn phóng điện ẩn (b, c)

b) Đèn cathode rỗng

Trong ống phóng điện ẩn, nếu cathode có dạng hình trụ nhỏ thì với một tỷ lệ xác định giữa độ dài của nó với đường kính và áp suất khí sự phát sáng sẽ tập trung bên trong hình trụ này và có một loạt tính chất đặc biệt. Đặc điểm của phóng điện trong cathode rỗng là sự kích thích mạnh của các vạch ion và các vạch với năng lượng kích thích cao. Điều này là do phân bố điện tử theo năng lượng không đặc trưng bởi hàm phân bố Maxwell. Phân bố này có dạng như hình 2.24c. Mật độ điện tử trong phóng điện thường không lớn và vào khoảng $10^{10} - 10^{12} \text{ cm}^{-3}$.

Nhờ tốc độ cao của ion trong cathode rỗng, các vạch bức xạ của kim loại làm cathode phát sáng khá mạnh ngay cả khi nhiệt độ thấp. Trong những điều kiện xác định, độ chói của chúng mạnh hơn cả những vạch của khí trợ đóng vai trò hạt tải điện. Người ta có thể chế tạo đèn cathode rỗng với cathode làm lạnh để giảm hiệu ứng Doppler.

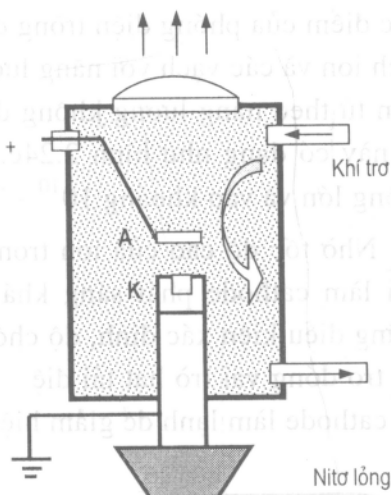


Hình 2.24. a) Sơ đồ nguyên lý đèn cathode rỗng;
b) Đèn cathode rỗng; c) Hàm phân bố điện tử theo năng lượng trong đèn với áp suất khí Argon khác nhau, dòng điện 5mA.

Cường độ sáng đèn cathode rỗng có thể lớn gấp 100 lần cường độ sáng trong phóng điện ẩn. Đèn cathode rỗng đã được chế tạo với nhiều kim loại

khác nhau và được sử dụng nhiều trong phân tích phổ hấp thụ nguyên tử. Máy hấp thụ nguyên tử có tới 66 đèn tạo bởi tất cả các kim loại kể cả Sb, B, As và Si. Ngoài ra còn có đèn dùng hỗn hợp 2 nguyên tố kim loại như Na – K, Ca – Mg...

Đèn cathode rỗng cho phổ vạch tương đối hẹp của kim loại làm cathode. Để giảm độ mở rộng vạch Doppler người ta có thể làm lạnh cathode bằng nitơ lỏng theo cấu trúc đèn trên hình 2.25. Nguồn phóng điện một chiều DC tạo ra dòng điện từ 10 – 500mA phóng qua môi trường khí trơ (áp suất 1 – 5 Torr) giữa anode dạng vòng xuyên và cathode làm bằng kim loại cho trước. Một lỗ hình trụ có độ sâu thích hợp (tùy theo kim loại sử dụng) với đường kính 5mm được khoan vào cathode. Nhờ phân bố trường xung quanh lỗ, sự phóng điện sẽ thấm sâu vào trong lỗ. Các nguyên tử được phun xạ vào miền phóng điện do sự bắn phá ion. Các nguyên tử này sẽ được kích thích phát sáng trong phóng điện. Sự phát xạ ánh sáng mạnh sẽ nhận được từ lỗ hình trụ này. Nitơ lỏng làm lạnh trực tiếp khối kim loại làm cathode giúp cho độ mở rộng vạch Doppler giảm mạnh.



Hình 2.25. Đèn cathode rỗng có điện cực làm lạnh bằng nitơ lỏng

2.3. NGUỒN SÁNG LASER

Laser là nguồn sáng trong đó bức xạ cưỡng bức được khuếch đại và phát ra với sự định hướng cao. Chữ Laser được viết tắt từ tiếng Anh: light amplification by stimulated emission of radiation.

Đặc tính của chùm laser đó là ánh sáng kết hợp, có tính định hướng cao trong không gian, độ đơn sắc rất lớn, cường độ tập trung mạnh vào một vùng phổ rất hẹp của bức xạ. Với những đặc tính như vậy nên ngay từ khi ra đời, laser đã được dùng làm nguồn sáng trong quang phổ và dần dần thay thế các nguồn sáng truyền thống. Kỹ thuật laser ngày càng phát triển và hiện nay laser có thể hoạt động ở nhiều chế độ khác nhau (chế độ phát

liên tục, chế độ phát xung từ micro giây đến xung cực ngắn cỡ femto giây...), bước sóng phát ra phủ gần toàn bộ thang sóng quang học (từ hồng ngoại, khả kiến đến tử ngoại) và còn có thể điều hướng được bước sóng trong một vùng rộng.

Laser có thể được phân loại theo nhiều cách, hoặc theo phương pháp kích thích laser (kích thích bằng phóng điện hay quang học, hóa học...), hoặc theo môi trường khuếch đại ánh sáng (laser khí, lỏng hay rắn), hoặc theo chế độ hoạt động liên tục hay xung.

Bảng 2.3. Một số laser thông dụng

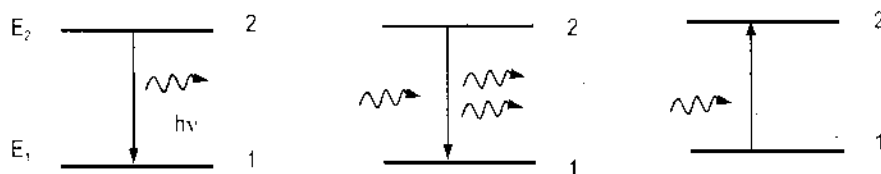
Laser	Vùng phổ bức xạ	Chế độ hoạt động
Laser khí CO ₂	9600 – 10600nm	Có thể liên tục hoặc xung
Laser bán dẫn Ga As/GaAlAs InGaAsP/InP	750 – 900nm 0.92 – 1.7μm	Có thể liên tục hoặc xung
Laser rắn Nd:YAG Nd:YVO ₄	1064nm	Có thể liên tục hoặc xung
Laser rắn Ti: sapphire	708 – 900nm	Có thể liên tục hoặc xung
Laser rắn Ruby	694,3nm	Xung
Laser khí He – Ne	632,8nm	Liên tục
Laser khí ion Argon	454,5nm; 457,9nm; 465,8nm; 472,7nm; 476,5nm; 488,0nm; 496,5nm; 501,7nm; 514,5nm	Liên tục
Laser khí nitơ	337nm	Xung
Laser hơi đồng (Cu)	510nm – 580nm	Xung
Laser màu	300 – 1300nm (với nhiều chất màu khác nhau)	Có thể liên tục hoặc xung

Để tiện sử dụng laser như là một nguồn sáng quang phổ, chúng tôi hệ thống một số nguồn laser theo vùng bước sóng phát từ hồng ngoại, khả kiến đến tử ngoại cùng với chế độ hoạt động tương ứng (bảng 2.3). Để tạo ra các nguồn bức xạ laser có bước sóng thay đổi ngoài việc sử dụng các hoạt chất có vùng phổ bức xạ rộng kết hợp với buồng cộng hưởng thích hợp, người ta còn sử dụng hiệu ứng quang học phi tuyến để nhân tần số, hoặc tạo ra các máy phát thông số quang học (OPO), hoặc bộ khuếch đại thông số (OPA) v.v...

2.3.1. Nguyên lý hoạt động laser

a) Môi trường hoạt chất

Chúng ta hãy khảo sát một môi trường có hai mức năng lượng 1 và 2. Số nguyên tử trong một đơn vị thể tích nằm ở một mức năng lượng gọi là mật độ tích lũy của mức năng lượng đó. Gọi mật độ tích lũy tương ứng của 2 mức trên là N_1 và N_2



Hình 2.26. Các quá trình dịch chuyển bức xạ

Sự biến thiên độ tích lũy của các mức năng lượng có thể gây nên bởi các quá trình sau:

- Quá trình bức xạ tự phát từ mức 2 xuống mức 1:

$$(N_2)_{tp} = -A \cdot N_2$$

Trong đó A đặc trưng cho xác suất bức xạ tự phát gọi là hệ số Einstein.

Đại lượng $\tau = 1/A$ được gọi là thời gian sống tự phát, phụ thuộc vào từng dịch chuyển bức xạ cụ thể.

- Quá trình bức xạ cưỡng bức từ mức 2 xuống mức 1:

Nếu môi trường được chiếu tới sóng điện từ tần số ν có $h\nu = E_2 - E_1$ và trên mức 2 đang có nguyên tử được tích lũy thì sẽ có một xác suất dịch chuyển từ mức 2 xuống mức 1 gọi là dịch chuyển bức xạ cưỡng bức

$$(N_2)_{cb} = -B_{21} \cdot N_2$$

ở đây B_{21} là xác suất dịch chuyển cường bức: $B_{21} = \sigma_{21} F$

Trong đó F là mật độ dòng photon của sóng tới, σ_{21} là tiết diện bức xạ cường bức.

– Quá trình hấp thụ 1 → 2

Nguyên tử ở trạng thái 1 có thể hấp thụ năng lượng photon tới có tần số ν để chuyển lên trạng thái 2:

$$N_1 = -B_{12} \cdot N_1$$

Trong đó $B_{12} = \sigma_{12} F$ với σ_{12} là tiết diện hấp thụ phụ thuộc vào từng dịch chuyển cụ thể. Theo Einstein: $\sigma_{12} = \sigma_{21} = \sigma$ nghĩa là xác suất bức xạ cường bức và hấp thụ bằng nhau

Giả sử trong môi trường này theo hướng Z có một sóng phẳng đơn sắc tần số ν , cường độ ứng với mật độ dòng photon F truyền qua. Khi đó biến thiên mật độ dòng photon dF qua một lớp dz của môi trường xác định như sau:

$$dF = \sigma F (N_2 - N_1) dz$$

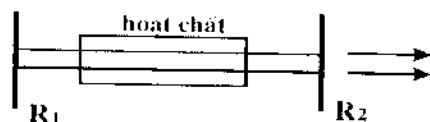
Ở cân bằng nhiệt động, độ tích lũy mức năng lượng tuân theo phân bố Boltzman:

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right)$$

Với k là hằng số Boltzman, T là nhiệt độ tuyệt đối.

Như vậy, ở cân bằng nhiệt động dễ thấy rằng $N_2 < N_1$ và môi trường hấp thụ ánh sáng tần số ν . Tuy nhiên, nếu ta tạo được trạng thái không cân bằng nhiệt động sao cho $N_2 > N_1$ thì sẽ có môi trường khuếch đại ánh sáng. Khi đó người ta nói rằng đã tạo được *ngịch đảo độ tích lũy* trong môi trường và môi trường có nghịch đảo độ tích lũy được gọi là *môi trường hoạt chất*.

b) Buồng cộng hưởng



Hình 2.27. Buồng cộng hưởng Fabry – Perot

Để bộ khuếch đại biến thành máy phát cần phải có một liên kết phản hồi dương. Muốn vậy người ta đặt môi trường hoạt chất vào một buồng cộng hưởng quang học cộng hưởng với tần số ν . Trong laser hoạt chất được đặt vào giữa hai gương có hệ số phản xạ cao, ví dụ hai gương phẳng đặt song song đối diện nhau (buồng cộng hưởng Fabry – Perot) hoặc hai gương cầu đồng trục.

Khi dùng hai gương phẳng, sóng phẳng truyền theo phương vuông góc với gương sẽ được phản xạ trở lại và được khuếch đại sau mỗi lần đi qua hoạt chất. Nếu một trong 2 gương truyền qua một phần thì có thể lấy ra chùm sáng đã khuếch đại.

Tuy nhiên, sự phát laser chỉ xảy ra khi thực hiện được điều kiện ngưỡng đảm bảo sự khuếch đại của môi trường bù trừ được những mất mát trong buồng cộng hưởng.

Từ biểu thức:

$$dF = \sigma F(N_2 - N_1) dz \rightarrow dF/F = \sigma(N_2 - N_1)dz$$

Lấy tích phân ta được:

$$F_{ra}/F_{vào} = \exp [\sigma(N_2 - N_1)l]$$

với l là độ dài hoạt chất.

Nếu mất mát trong buồng cộng hưởng gây nên chỉ do gương phản xạ thì ngưỡng phát được xác định bởi điều kiện sau:

$$R_1 R_2 \exp [2\sigma (N_2 - N_1)l] = 1$$

ở đây R_1, R_2 là hệ số phản xạ của hai gương.

Điều kiện này chỉ ra rằng ngưỡng phát chỉ đạt được khi nghịch đảo độ tích lũy $(N_2 - N_1)$ tiến đến một giá trị tới hạn nào đó gọi là độ nghịch đảo tới hạn. Khi đó các photon bức xạ tự phát đi dọc buồng cộng hưởng sẽ dẫn đến bức xạ cưỡng bức và bức xạ này được khuếch đại thành tia laser.

Tuy nhiên, vai trò của buồng cộng hưởng không phải chỉ là để khuếch đại nhiều lần bức xạ cưỡng bức. Vai trò chính của buồng cộng hưởng là tạo nên các trạng thái xác định của trường bức xạ (mode của buồng cộng hưởng). Trong một số buồng cộng hưởng cấu trúc trường được hình thành sau nhiều lần phản xạ giữa 2 gương. Ở một số buồng cộng hưởng quá trình này xảy ra chỉ sau một vài lần phản xạ.

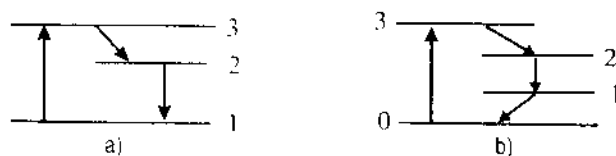
Nếu độ tăng ích cao, chỉ cần sau một lần bức xạ đi qua môi trường có nghịch đảo độ tích lũy cũng đủ tạo nên bức xạ cưỡng bức khuếch đại (laser). Khi đó laser có thể hoạt động không cần gương (chế độ siêu bức xạ).

Để có tia sáng kết hợp, điều cần thiết là các dịch chuyển bức xạ của một số lớn các nguyên tử, phân tử phải được liên hệ với nhau không chỉ về tần số mà cả về hướng truyền và tính phân cực. Ngay trong trường hợp không dùng gương, để có tia laser phải tạo ra một hướng ưu tiên. Theo quan điểm lượng tử như thế cũng là đã tạo ra một buồng "cộng hưởng". Buồng cộng hưởng quang học trong laser đảm bảo tính lọc lựa các trạng thái photon hay là buồng cộng hưởng đã tách biệt một số trạng thái photon, trong đó sự phát laser chế ngự. Thuộc tính kết hợp của tia laser (tính định hướng, đơn sắc, độ phân cực) phụ thuộc vào việc buồng cộng hưởng đảm bảo tính lọc lựa các trạng thái photon như thế nào.

c) Các sơ đồ bơm

Để tạo ra nghịch đảo độ tích lũy ta phải kích thích môi trường hoạt chất bằng cách nào đó. Có nhiều cách khác nhau để kích thích các mức năng lượng hoạt động laser, người ta gọi chung là *bơm*.

Nếu chỉ sử dụng 2 mức năng lượng của môi trường hoạt chất thì không thể tạo ra nghịch đảo độ tích lũy. Ở cân bằng nhiệt động mức 1 được tích lũy nhiều hơn mức 2 nên sự hấp thụ ưu thế hơn bức xạ cưỡng bức. Có thể tích lũy mức 2 bằng cách chiếu vào hoạt chất ánh sáng tần số ν có $h\nu = E_2 - E_1$ với cường độ đủ lớn. Tuy nhiên, khi mật độ tích lũy 2 mức bằng nhau $N_2 = N_1$, quá trình hấp thụ và bức xạ cưỡng bức bù trừ lẫn nhau, thì môi trường sẽ trở nên trong suốt. Ta chỉ đạt được sự bão hòa mà không có nghịch đảo độ tích lũy. Như vậy phải sử dụng nhiều hơn hai mức. Thông thường người ta sử dụng 3 hoặc 4 mức và gọi là các sơ đồ bơm 3 mức hoặc 4 mức (hình 2.28).



Hình 2.28. Sơ đồ nguyên lý hoạt động laser:
a) Sơ đồ 3 mức, b) Sơ đồ 4 mức.

Trong laser hoạt động theo sơ đồ 3 mức (h.2.28a) bằng cách nào đó các nguyên tử được chuyển từ mức 1 lên mức 3. Môi trường được chọn sao cho nguyên tử của nó sau khi được kích thích lên mức 3 sẽ dịch chuyển nhanh về mức 2. Như vậy có thể tạo được nghịch đảo độ tích lũy giữa mức

2 và 1. Trong laser hoạt động theo sơ đồ 4 mức (h.2.28b) các nguyên tử được đưa từ mức cơ bản 0 lên mức 3. Nếu sau đó nguyên tử dịch chuyển nhanh về mức 2 thì giữa mức 2 và 1 có thể có nghịch đảo độ tích lũy. Để laser hoạt động liên tục theo sơ đồ 4 mức thì các hạt sau khi về mức 1 phải được dịch chuyển rất nhanh về mức 0. Trong cả 2 sơ đồ, mức 2 được gọi là *mức laser trên*, còn mức 1 gọi là *mức laser dưới*.

Rõ ràng là không phải môi trường nào cũng có các mức năng lượng thoả mãn các yêu cầu trên. Người ta phải chọn hoặc chế tạo ra những chất có cấu trúc phân tử, nguyên tử thích hợp. Trong thực tế, các hoạt chất laser có thể làm việc với nhiều hơn 4 mức năng lượng nhưng người ta cố gắng xếp chúng vào một trong hai sơ đồ bơm nói trên.

2.3.2. Các chế độ hoạt động của laser

Laser có thể làm việc ở chế độ phát xung bức xạ hoặc phát bức xạ liên tục. Chế độ xung hay liên tục trước hết phụ thuộc vào hoạt chất sử dụng và sau đó là do chế độ bơm. Trong chế độ phát xung cũng có 3 chế độ gọi là chế độ phát xung tự do, chế độ điều biến độ phẩm chất buồng cộng hưởng (Q – switching) và chế khóa mode (mode – locking).

Ở chế độ phát xung tự do, xung bức xạ laser được thực hiện trong thời gian tác dụng của xung bơm. Trong đó xung bức xạ trễ so với xung bơm một thời gian. Đó là khoảng thời gian cần thiết để tạo ra nghịch đảo độ tích lũy giữa các mức năng lượng trong hoạt chất. Thời gian trễ này tùy thuộc vào tính chất của hoạt chất, ví dụ đối với ruby là gần $300\mu\text{s}$, kính Nd là $200\mu\text{s}$ và tinh thể Nd:YAG là $50\mu\text{s}$. Độ dài cực đại của xung bức xạ laser ở chế độ phát tự do được xác định tùy theo yêu cầu và có thể đạt tới vài chục ms.

Tần số lặp lại của xung bức xạ laser tùy thuộc vào yếu tố hoạt chất và hiệu quả làm lạnh của bộ phận quang. Đối với laser ruby và kính Nd có thể nhận được tần số lặp lại xung tới chục Hz, khi được làm lạnh tốt ở laser Nd YAG thì tần số lặp lại cao hơn, cỡ 500Hz. Trong khi đó ở chế độ điều biến độ phẩm chất tần số lặp lại có thể là 50 KHz và ở chế độ mode locking tần số có thể tới vài chục MHz. Việc tăng công suất bức xạ laser rắn có thể nâng cao đáng kể khi sử dụng chế độ điều biến độ phẩm chất buồng cộng hưởng.

Ở chế độ điều biến độ phẩm chất người ta sử dụng hiệu ứng ngắt ánh sáng nhờ các van điện – cơ, điện – quang, từ – quang và quang – hoá.

Trong thời gian xung bơm tác dụng nếu độ phẩm chất của buồng cộng hưởng kém (van đóng) thì không thể phát laser trước khi hoạt chất được bơm đầy. Khi mở van để độ phẩm chất của buồng cộng hưởng trở lại bình thường thì bức xạ laser mới phát ra với năng lượng lớn trong một khoảng thời gian rất ngắn ($10^{-7} - 10^{-9}$ s) nên công suất rất cao (10 – 1000 MW).

Chế độ khóa mode (mode – locking)

Để tạo ra những xung laser cực ngắn (cỡ femto giây) người ta sử dụng phương pháp khóa pha các mode của laser.

Môi trường khuếch đại ánh sáng được đặt trong một buồng cộng hưởng gồm hai gương cách nhau một khoảng L. Trong một buồng cộng hưởng laser như vậy chỉ những tần số quang học $\nu = qc/2L$ (c – vận tốc ánh sáng trong chân không, q là một số nguyên) và thỏa mãn điều kiện ngưỡng mới có thể dao động và sau đó phát laser. Mỗi một tần số nói trên gắn với một mode dọc của buồng cộng hưởng (BCH). Thông thường bức xạ laser là đa mode. Số mode càng nhiều nếu phổ bức xạ của hoạt chất laser rộng. Trong chế độ đa mode biên độ trường tạo thành trong BCH là:

$$E = \sum_{i=1}^N A_i \sin(2\pi\nu_i t + \phi_i),$$

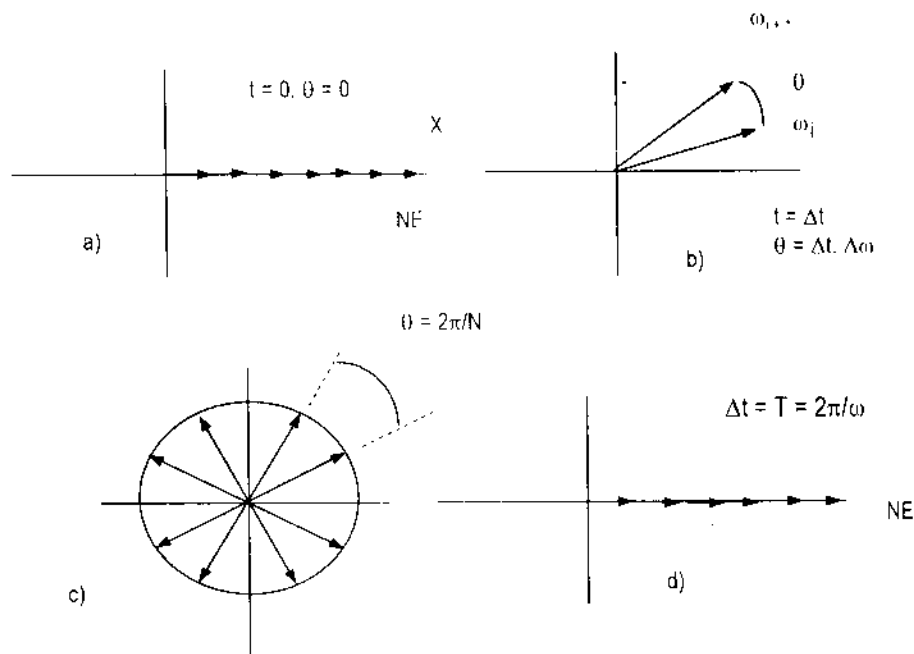
với N – số mode, ϕ_i – pha của mode thứ i .

Pha của các mode là hoàn toàn ngẫu nhiên, không có mối liên hệ nào giữa pha của các mode dọc khác nhau. Vì vậy cường độ laser I tỷ lệ với E^2 sẽ thăng giáng theo thời gian. Tuy nhiên bằng cách nào đó làm cho tất cả các mode dọc này đồng pha (chẳng hạn $\phi_i = 0$ với mọi i) thì cường độ laser sẽ khác đi và ta sẽ thu được các xung cực ngắn phát ra ở những khoảng cách đều đặn. Phương pháp này gọi là sự khóa mode theo pha (mode locking).

Để đơn giản, giả sử bằng cách nào đó ta tạo ra ở thời điểm $t = 0$ các mode có pha $\phi_i = 0$, và biên độ là E_0 : $E_i = E_0 \sin(\omega_i t)$ với $\omega_i = 2\pi\nu_i = 2\pi qc/2L$; $\Delta\omega = 2\pi c/2L = \pi c/L$. Khi $t = 0$, biên độ tổng hợp $E = nE_0$ và định hướng theo trục X của giản đồ véc tơ (hình 2.29a).

Sau một thời gian Δt vectơ biểu diễn mode thứ i sẽ quay một góc $\Delta t \cdot \omega_i$. Hiệu số góc giữa hai vectơ đại diện cho hai mode liên tiếp là $\theta = \Delta t \cdot \Delta\omega$ với

$\Delta\omega = 2\pi c/2L = \pi c/L$ (hình 2.29b). Khi $\theta = 2\pi/N$ thì biên độ tổng hợp của các mode sẽ bằng không (hình 2.29c). Điều này bắt đầu xảy ra sau khoảng thời gian: $\Delta t = \theta / \Delta\omega = 2\pi/N \cdot \Delta\omega = 2L/N \cdot c$.



Hình 2.29. Nguyên lý khóa pha các mode laser (mode locking)

Số mode N càng nhiều thì khoảng thời gian Δt để biên độ cực đại giảm về 0 càng ngắn.

Đồng thời, mỗi khi $\theta = 2k\pi$ thì biên độ tổng hợp lại cực đại bằng NE_0 (hình 2.29d) tương ứng với chu kỳ là $\Delta t = T = \theta / \Delta\omega = 2\pi / \Delta\omega = 2L/c$. Như vậy khi các mode đồng pha, cường độ laser gồm một dãy các xung với chu kỳ $2L/c$ (đúng bằng thời gian ánh sáng đi lại một lượt trong BCH). Độ dài xung $\Delta t = 2L/N \cdot c = T/N$ càng ngắn khi số mode N tăng và cường độ xung cũng càng cao khi N càng lớn [$J_{\max} = (N \cdot E_0)^2$].

Ví dụ trong laser Ti:Sapphire phổ phát xạ của Ti^{3+} rộng $\sim 400nm$ với BCH dài $2m$, về lý thuyết có thể phát xung ngắn tới 2 femto giây. Với laser Nd:YAG độ rộng phổ bức xạ của Nd^{3+} là $0,4nm$ dẫn đến độ dài xung giới hạn là 10ps.

Để thực hiện sự đồng pha các mode có nhiều cách khác nhau. Có thể chia ra làm ba phương pháp chính như sau:

– *Khóa pha chủ động (Active mode locking)*

Trong phương pháp này, người ta chủ động điều biến mất mát của BCH với tần số gần bằng $\Omega = 1/T = c/2L$. Chẳng hạn đưa vào BCH một bộ điều biến quang âm nuôi bằng một máy phát RF hoặc điều biến độ tăng ích của môi trường khuếch đại bằng cách bơm môi trường này bằng một laser khóa mode khác.

– *Khóa pha bị động (Passive mode locking)*

Một môi trường hấp thụ bão hòa được đưa vào BCH để tự khóa mode theo pha mà không cần có sự can thiệp bên ngoài.

– *Tự khóa mode (Self - locking)*

Nhờ hiệu ứng quang học phi tuyến (hiệu ứng Kerr quang học) có thể tạo ra tự hội tụ của ánh sáng truyền qua hoạt chất. Sự tự hội này chỉ xảy ra với peak cường độ mạnh. Kết hợp với việc đưa vào BCH một khe hẹp ta có thể tạo ra một bộ lọc không gian mà chỉ có những peak có cường độ mạnh mới được truyền qua và được khuếch đại trong quá trình đi lại trong BCH. Phương pháp này có phần tương tự như đưa vào BCH một môi trường hấp thụ bão hòa.

Chế độ bức xạ liên tục

Các laser có thể bức xạ liên tục hoặc gần liên tục (với tần số lặp lại tới hàng chục MHz). Các laser khí phóng điện dọc thường hoạt động ở chế độ liên tục như laser He - Ne, laser CO₂, laser Argon... Chế độ hoạt động liên tục ở laser rắn chỉ có thể thực hiện được trên một số môi trường hoạt chất như tinh thể như Nd:YAG (- Yttrium Aluminum garnet), Nd:YLF (- Yttrium Lithium Fluoride), Nd:YVO₄ (- Yttrium Vanadate) hoặc Ti: Sapphire. Đây là những môi trường hoạt chất có khả năng dẫn nhiệt tốt cho phép bơm quang học liên tục với cường độ mạnh.

Một số hoạt chất, trong số đó có Nd:YAG, có thể hoạt động ở cả hai chế độ xung và liên tục. Vì vậy có thể chế tạo các laser hoạt động ở cả 2 chế độ nhưng phải thiết kế nguồn nuôi thích hợp. Sau đây là một số laser thông dụng dùng trong nghiên cứu quang phổ học.

2.3.3. Một số laser thông dụng trong quang phổ học

a) Laser Argon

Hiện nay, laser Argon là laser có công suất phát liên tục mạnh nhất ở vùng phổ khả kiến và tử ngoại. Laser Argon có hoạt chất là khí ion Ar⁺

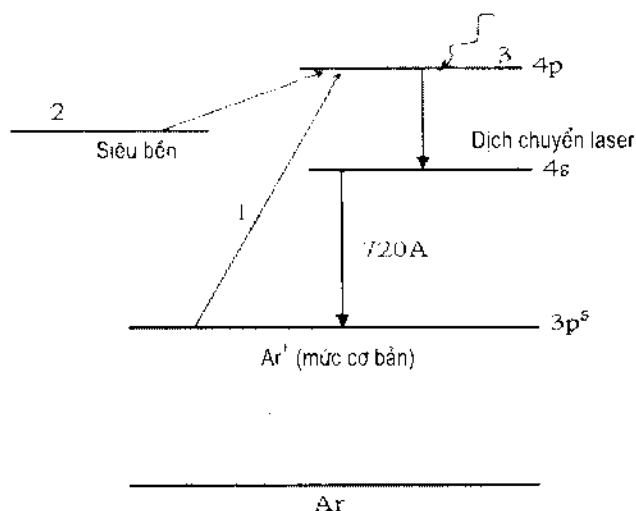
trong đó mức laser trên được tích lũy nhờ 2 lần va chạm với điện tử. Lần thứ nhất các ion được tạo thành từ nguyên tử trung hoà, lần thứ 2 những ion này được kích thích. Do đó quá trình bơm là quá trình 2 bậc mà hiệu suất của mỗi bậc tỷ lệ với mật độ phóng điện J . Như vậy bơm laser khí ion đòi hỏi mật độ dòng lớn.

Sơ đồ mức năng lượng của ion Ar^+ được trình bày trên hình 2.30.

Mức laser trên $4p$ có thể được tích lũy nhờ 3 quá trình sau:

- Va chạm của điện tử với Ar^+ ở trạng thái cơ bản (quá trình 1).
- Va chạm của điện tử với các ion ở mức siêu bền (quá trình 2).
- Dịch chuyển bức xạ từ các mức cao hơn về $4p$ (quá trình 3).

Tính toán cho thấy tốc độ bơm nhờ 3 quá trình này đều tỷ lệ với bình phương của mật độ điện tử và do đó tỷ lệ với bình phương của mật độ dòng phóng điện.



Hình 2.30. Sơ đồ mức năng lượng laser Argon

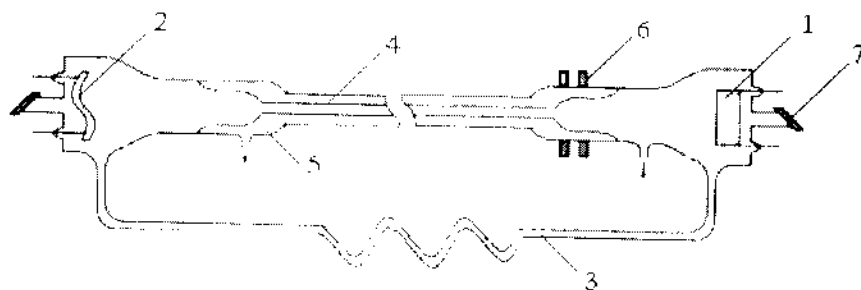
Năng lượng ion hoá Ar là $15,75\text{eV}$, còn năng lượng kích thích mức laser trên $4p$ từ $3p$ là 20eV . Thời gian sống của mức laser trên $4p$ là $\sim 10^{-8}\text{s}$ trong khi thời gian sống của mức laser dưới $4s$ được xác định bởi dịch chuyển bức xạ về trạng thái cơ bản là $\sim 10^{-9}\text{s}$. Như vậy, điều kiện để tạo nghịch đảo độ tích lũy có thể thoả mãn đối với 2 mức này.

Có 9 vạch xuất hiện trong dịch chuyển $4p - 4s$: $454,5\text{nm}$; $457,9\text{nm}$; $465,8\text{nm}$; $472,7\text{nm}$; $476,5\text{nm}$; $488,0\text{nm}$; $496,5\text{nm}$; $501,7\text{nm}$ và $514,5\text{nm}$.

Vạch màu xanh da trời 488nm ($3p^4 4p^2 D_{5/2} \rightarrow 3p^4 4s^2 P_{3/2}$) mạnh nhất với cường độ tỷ đối 45%. Tiếp đó là vạch màu xanh lá cây 514,5nm ($3p^4 4p^4 D_{5/2} \rightarrow 3p^4 4s^2 P_{3/2}$) với cường độ tỷ đối 35%.

Tốc độ kích thích bởi điện tử của mức laser trên 4p thấp hơn tốc độ kích thích điện tử của mức laser dưới cỡ 2 lần. Nghịch đảo độ tích lũy đạt được nhờ mức laser dưới có tốc độ phân rã nhanh hơn mức laser trên cỡ 10 lần. Sự phân rã của mức laser trên xảy ra chủ yếu nhờ bức xạ tự phát, trong khi dịch chuyển bức xạ 4p – 3p là bị cấm trong gần đúng lưỡng cực và mức này lại ở khá cao so với trạng thái cơ bản. Do đó có thể nói nghịch đảo độ tích lũy trong laser Ar được tạo thành không phải chủ yếu nhờ quá trình tích lũy mức laser trên mà chủ yếu nhờ quá trình phân huỷ mức laser dưới.

Sơ đồ cấu trúc laser Ar có dạng như hình 2.31. Áp suất khí Ar trong ống phóng cỡ vài chục Pa, mật độ dòng phóng điện có thể lên đến hơn 1000 A/cm^2 . Do mật độ dòng điện đòi hỏi cao, trong ống phóng sẽ sinh ra sự dịch chuyển các ion Ar về phía cathode. Để bù trừ hiệu ứng này, trong cấu trúc ống phóng có thêm một ống phụ để đảm bảo chu trình ngược của chất khí. Để ngăn sự phóng điện qua ống này thì độ dài của nó phải lớn hơn độ dài của ống phóng chính.



Hình 2.31. Sơ đồ cấu trúc laser khí Argon

- 1 anode; 2 cathode; 3 ống phụ; 4 ống phóng;
5 làm lạnh nước; 6 từ trường; 7 cửa sổ Brewster

Một trong những vấn đề công nghệ quan trọng nhất nảy sinh do làm việc ở mật độ dòng cao là sự phá huỷ do va chạm của các ion với thành ống. Độ mở rộng Dopler của vạch bức xạ laser $\sim 3500 \text{ MHz}$ tương ứng với nhiệt độ cỡ 3000K. Điều này có nghĩa là các ion đã được gia tốc trong điện trường và trở nên rất "nóng" và động năng rất lớn. Do vậy, ống phóng laser Ar thường được làm bằng gốm Bery ($\text{Be}_3\text{Al}_2(\text{SiO}_3)_6$) chứ không dùng thạch

anh và được làm lạnh bằng nước. Với ống phóng bằng thạch anh thời hạn sử dụng là 100 giờ, với ống phóng bằng gốm Bery thời hạn sử dụng lên đến 1000 – 2000 giờ.

Ngoài ra, ống phóng còn được đặt trong một từ trường không đổi song song với trục ống. Lực Lorentz sinh ra trong plasma tập trung các điện tử tự do vào tâm ống. Điều này sẽ làm giảm tốc độ khuếch tán của điện tử vào thành ống, đồng thời tăng tốc độ bơm dẫn đến tăng công suất phát. Do từ trường duy trì sự phóng điện trong tâm ống nên còn có tác dụng làm giảm sự phá huỷ thành ống đã nói tới ở trên.

Công suất laser tăng nhanh khi tăng cường độ dòng phóng điện. Điều này có được là do sự bão hoà của quá trình nghịch đảo chỉ trở nên đáng kể khi mật độ dòng vượt hơn một giá trị mà thực tế khó đạt được. Quá trình nghịch đảo độ tích lũy ở đây thực hiện chủ yếu nhờ dịch chuyển bức xạ $4s - 3p$ (72nm) làm rộng mức laser dưới. Sự bão hoà nghịch đảo xảy ra là do sự tắt dần bức xạ của dịch chuyển này. Vì vậy laser Argon có thể đạt được công suất rất cao ở chế độ liên tục (100 – 150W với đường kính ống 1cm). Về lý thuyết có thể đạt tới hàng trăm oát. Hiện nay, laser Ar là laser có công suất phát liên tục mạnh nhất ở vùng phổ khả kiến và tử ngoại.

Sử dụng một lăng kính tán sắc đặt trước gương phản xạ toàn phần hoặc một lăng kính Littrow có thể tách các bước sóng trên cho phép nhận được chế độ phát một bước sóng.

Khi cường độ dòng phóng điện cao có thể nhận được dịch chuyển laser ở các ion 2 lần ion hoá và cho bức xạ phát ở vùng tử ngoại bước sóng 300 – 386nm với công suất cỡ 5W.

Cùng cấu trúc như trên, nếu thay khí Ar bằng Kr ta có laser Kr phát trên một số bước sóng. Bên cạnh các vạch màu xanh, có nhiều vạch màu đỏ (793,1nm; 752,5nm; 676,4nm; 647,1nm; 568,2nm; 530,9nm; 520,8nm; 482,5nm; 472,6nm; 468,0nm; 413,1nm và 406,7nm), mạnh nhất là bước sóng 647,1nm (màu đỏ). Ngoài ra còn có các vạch mạnh trong vùng tử ngoại (356,4nm; 350,7nm; 337,5nm). Trên hình 2.31 là cấu trúc của một laser Ar có công suất liên tục 30W, áp suất khí $P = 0,2$ Torr, ống phóng dài 1 – 2m, đường kính 5mm, làm lạnh bằng nước, mật độ dòng $\sim 500\text{A/cm}^2$. Nguồn nuôi điện áp 200 – 400V, công suất $\sim 10\text{KW}$.

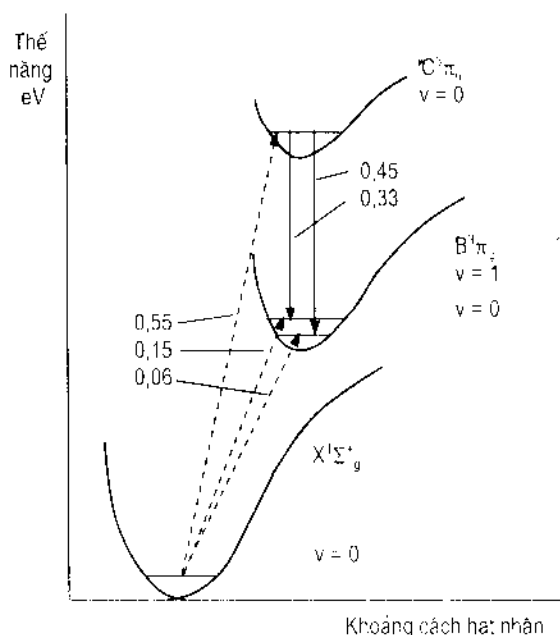
b) Laser Nito

Laser khí N_2 là một nguồn sáng tử ngoại thông dụng trong các phòng thí nghiệm quang - quang phổ vì giá thành tương đối thấp so với các laser tử ngoại khác, hoạt động ít tốn kém. Dịch chuyển bức xạ laser N_2 được thực hiện giữa các trạng thái điện tử dao động của phân tử N_2 . Sơ đồ mức năng lượng điện tử dao động có liên quan tới hoạt động laser của phân tử được trình bày trên hình 2.32. Thời gian sống bức xạ tự phát của mức $C^3\pi_u$ vào cỡ 40ns trong khi thời gian sống tương ứng của mức $B^3\pi_g$ vào khoảng từ 5 – 8 μ s. Do đó không thể có hoạt động laser ở chế độ liên tục trên hai mức này. Tuy nhiên, nếu tích lũy mức $C^3\pi_u$ trong một khoảng thời gian xung ngắn hơn 40ns thì có thể tạo được nghịch đảo độ tích lũy giữa mức $C^3\pi_u$ và $B^3\pi_g$ và nhận được sự khuếch đại bức xạ cường bức.

Khi đó có thể xem laser N_2 hoạt động theo chế độ 3 mức:

- Mức 1: Trạng thái cơ bản $X^1\Sigma_g^+$
- Mức 2: Mức laser dưới $B^3\pi_g$
- Mức 3: Mức laser trên $C^3\pi_u$.

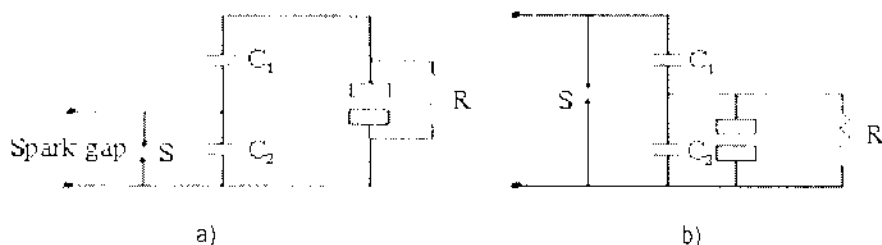
Các mức laser được kích thích nhờ va chạm điện tử trong phóng điện khí. Các nghiên cứu về tiết diện va chạm điện tử đối với các trạng thái điện tử của N_2 cho thấy tiết diện kích thích mức laser trên $C^3\pi_u$ cao hơn mức laser dưới $B^3\pi_g$. Điều này được lý giải bởi nguyên lý Frank – Condon. Trên hình 2.32 đồng thời chỉ ra các đường cong thế năng cho các trạng thái $C^3\pi_u$, $B^3\pi_g$ và $X^1\Sigma_g^+$ của N_2 cùng với các hệ số Frank – Condon chế ngự tốc độ kích thích điện tử các trạng thái này và các xác suất dịch chuyển quang học (trong đơn vị tương đối).



Hình 2.32. Sơ đồ mức năng lượng điện tử dao động của phân tử N_2 liên quan đến hoạt động laser

Hệ số Frank – Condon của dịch chuyển $X^1\Sigma_g^+(v=0) \rightarrow C^3\Pi_u(v=0)$ lớn hơn cỡ 10 lần so với dịch chuyển $X^1\Sigma_g^+(v=0) \rightarrow B^3\Pi_g(v=0)$.

Điều này cộng với thời gian xung kích thích ngắn sẽ tạo ra nghịch đảo độ tích lũy giữa 2 mức $C^3\Pi_u(v=0)$ và $B^3\Pi_g(v=0)$ và dẫn tới hoạt động laser ở bức xạ bước sóng 337nm. Tuy nhiên, ngoài dịch chuyển laser 337nm ta thấy dịch chuyển $C^3\Pi_u(v=0) \rightarrow B^3\Pi_g(v=1)$ cũng cho phép dẫn tới bức xạ 357.5nm mặc dù điều kiện thực hiện nghịch đảo độ tích lũy không thuận lợi bằng do nguyên lý Frank – Condon. Dịch chuyển này xảy ra ở áp suất cao và nhiệt độ điện từ Te cao. Ngoài bức xạ trong vùng tử ngoại nói trên, laser N_2 còn có thể hoạt động ở vùng hồng ngoại gần, tất nhiên là với điều kiện kích thích khác. Đó là dịch chuyển $B^3\Pi_g \rightarrow A^3\Sigma_u^+$ cho một dải bước sóng từ 750 – 1250nm.



Hình 2.33. Sơ đồ nguyên lý mạch phóng điện trong laser N_2

Việc thực hiện một laser nitơ phụ thuộc chủ yếu vào việc tạo ra hệ phóng điện thích hợp. Có hai sơ đồ mạch điện thường được dùng đó là mạch Blumlein (hình 2.33a) và mạch tự truyền (hình 2.33b). Trong cả 2 sơ đồ, bộ phóng tia điện (spark gap) đóng vai trò một khoá đóng mở mạch điện tự động và đều có thể thay thế bằng một đèn Thyatron. Cao áp lấy ra từ 2 máy phát xung điện áp trên được đặt vào 2 điện cực của ống phóng laser. Trong cả 2 trường hợp, cao áp lối ra đều là kết quả của dao động trong mạch điện RLC. Những dao động điện này bắt đầu khi spark gap làm đóng mạch (phóng điện).

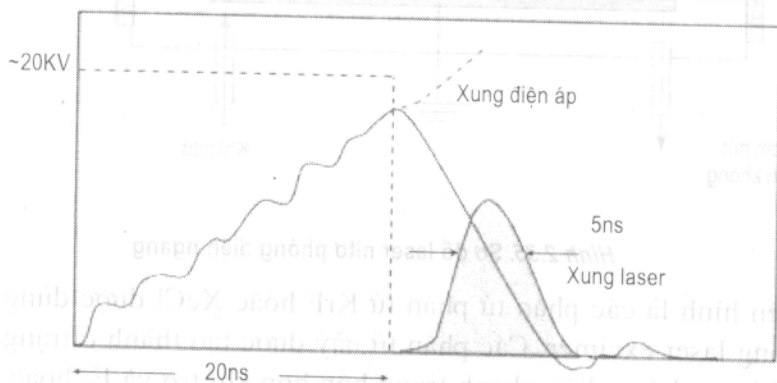
Đối với mạch Blumlein hai tụ điện là giống nhau. Ngay trước lúc spark gap đóng mạch, điện áp trên 2 tụ được nạp đầy là V_0 , trong khi đó điện áp trên 2 điện cực của kênh laser gần bằng 0. Điện trở R giữ cho điện áp trên 2 cực kênh laser bằng 0 trong khi các tụ C_1, C_2 nạp điện. Ở thời điểm khi spark gap đóng mạch, mạch điện LC bao gồm tụ C_2 và độ tự cảm L_s của spark gap cộng tất cả các độ tự cảm ký sinh bắt đầu dao động với tần số gần đúng bằng $\omega = (L_s C_2)^{-1/2}$.

Lúc đó điện áp trên ống laser ($U = U(C_1) + U(C_2)$) bắt đầu dao động với cùng tần số nhưng biên độ có thể đạt tới giá trị cực đại là $2V_0$ do nửa chu kỳ sau điện áp trên tụ C_2 đổi chiều.

Trong thực tế điện áp trên ống laser sẽ không đạt tới $2V_0$ vì chất khí trong ống phóng sẽ bị đánh thủng ở điện áp thấp hơn, thông thường là gần giá trị V_0 . Trong sơ đồ mạch tụ truyền, khi spark gap đóng mạch ta có một dao động điện xảy ra trong mạch C_1 , C_2 và L mắc nối tiếp nên tần số dao động bằng $\omega = [L C_1 C_2 / (C_1 + C_2)]^{-1/2}$.

Nếu $C_1 = C_2$ điện áp lỗi ra cực đại sẽ là V_0 . Hiệu ứng tắt dần do điện trở của spark gap có ảnh hưởng mạnh hơn đối với mạch tụ truyền vì tất cả các điện tích dự trữ trong tụ điện C_1 đều phải truyền qua spark gap. Để bù trừ mất mát năng lượng trên spark gap, người ta phải chọn $C_1 > C_2$.

Nếu áp suất trong ống laser vào khoảng từ 20 – 100 Torr thì điện áp trên ống laser đạt giá trị cực đại vào cỡ V_0 đối với máy phát Blumlein và vào cỡ $V_0/2$ đối với mạch tụ truyền, sau đó giảm nhanh vì phóng điện trong ống tạo ra một plasma dẫn điện cao. Điều này được minh họa trên hình 2.34.



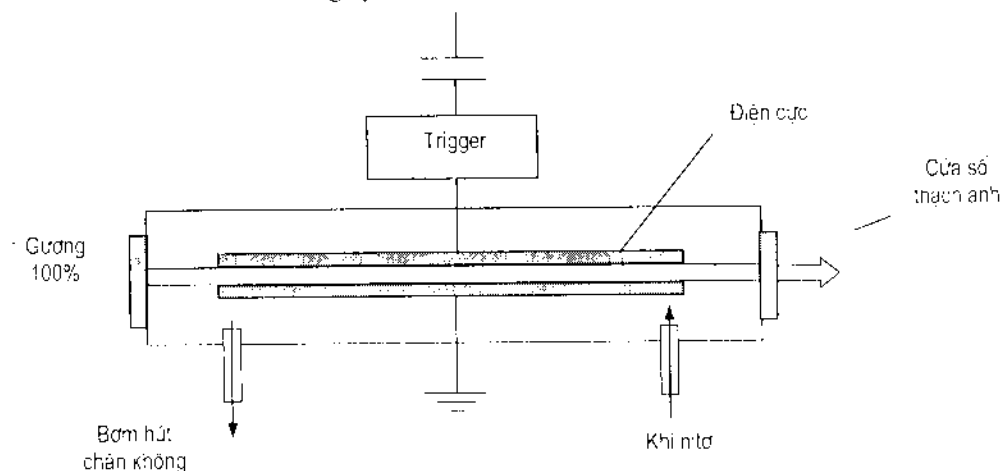
Hình 2.34. Diễn biến phóng điện laser

Hầu hết các laser nitor thông dụng hiện nay là laser nitor phóng điện ngang, có thể hoạt động với áp suất khí từ vài chục Torr cho tới áp suất khí quyển (TEA – N_2 Laser). Những laser nitor này có cấu trúc bơm khá đơn giản, độ dài xung cỡ vài ns đến chục ns, tần số lặp lại cao, có bức xạ tử ngoại (337,1nm) rất thích hợp cho việc bơm laser màu.

Trên hình 2.35 là sơ đồ một laser nitor phóng điện ngang, hoạt động ở áp suất 100 Torr phóng điện nhờ mạch Blumlein cho xung khoảng 10ns với

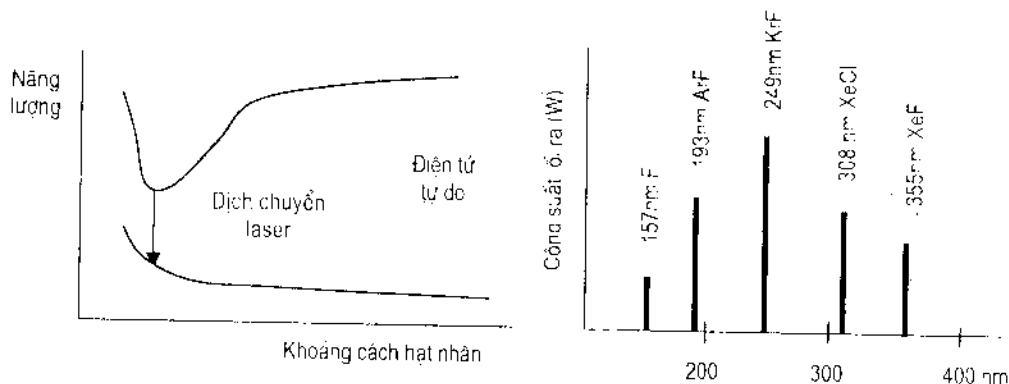
tần số lặp lại từ 10 – 100Hz. Năng lượng xung có thể tới vài mili jun tương ứng với công suất đỉnh tới 1MW. Khí nitơ được lưu chuyển qua ống phóng nhờ một bơm chân không. Laser nitơ có độ tăng ích cao đến mức có thể nhận được tia laser không cần gương buồng cộng hưởng (chế độ laser siêu bức xạ).

Thông thường, một gương phản xạ toàn phần được đặt ở một đầu của ống phóng điện nitơ và một cửa sổ có độ truyền qua cao được đặt ở đầu đối diện. Độ phân kỳ của laser nitơ tương đối cao, tùy thuộc vào cấu hình kênh phóng điện, vào cỡ 10 mrad. Laser Excimer cũng có cấu trúc tương tự như laser nitơ. Phân tử hai nguyên tử bị kích thích được gọi là phân tử excimer.



Hình 2.35. Sơ đồ laser nitơ phóng điện ngang

Điện hình là các phân tử phân tử KrF hoặc XeCl được dùng làm hoạt chất trong laser excimer. Các phân tử này được tạo thành ở trạng thái kích thích nhờ sự phóng điện nhanh trong hỗn hợp khí trơ và F₂ hoặc HCl. Đặc điểm của các phân tử excimer là không có trạng thái cơ bản bền vững trong khi trạng thái kích thích tồn tại với thời gian sống ngắn. Sơ đồ mức năng lượng của laser excimer và các bước sóng phát đối với các phân tử excimer khác nhau được trình bày trên hình 2.36. Vì không tồn tại trạng thái cơ bản nên các phân tử excimer tạo nên môi trường hoạt chất laser hoàn hảo với nghịch đảo độ tích lũy tự động mỗi khi một phân tử được tạo thành. Các vạch bức xạ laser chính là 249nm (KrF) 308nm (XeCl) và 193nm (ArF). Năng lượng xung có thể tới hàng trăm mili – jun và công suất trung bình tới 100W. Bức xạ 308nm của laser excimer XeCl rất thích hợp để bơm laser màu.



Hình 2.36. Sơ đồ mức năng lượng của laser excimer và các bước sóng phát của một số phân tử excimer

c) Laser Neodym

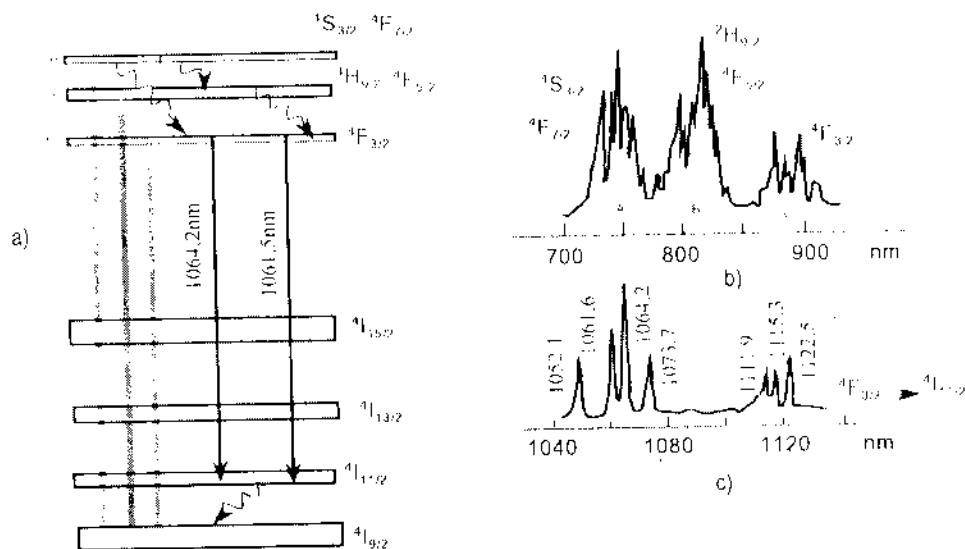
Một trong những laser rắn được sử dụng rộng rãi nhất hiện nay là laser Nd:YAG, trong đó hoạt chất là tinh thể Yttrium Aluminium Garnet ($Y_3Al_5O_{12}$) có pha tạp các ion Nd^{3+} làm tâm hoạt chất phát laser mạnh ở bước sóng 1064,2nm. Laser Nd:YAG có ngưỡng kích thích khá thấp, độ dẫn nhiệt cao cho phép phát ở chế độ tần xung số cao và chế độ phát liên tục. Hiệu suất của laser này khá cao vào cỡ vài phần trăm. Trong chế độ hoạt động liên tục, để tăng độ dẫn nhiệt người ta còn hay dùng tinh thể Nd:YVO₄ (Neodymium Yttrium Vanadate) phát bức xạ laser bước sóng 1064nm hoặc tinh thể Nd:LiF₄ (Nd:YLF) phát laser ở bước sóng 1053nm. Tâm hoạt chất trong các trường hợp này vẫn là ion Nd^{3+} .

Sơ đồ mức năng lượng của ion Neodymium Nd^{3+} trong tinh thể Garnet được chỉ ra trên hình 2.37.

Mỗi một dải năng lượng ứng với một nhóm các mức rất gần nhau xuất hiện do sự tách mức trong điện trường của mạng tinh thể garnet (hiệu ứng Stark). Nhờ bơm các ion Nd chuyển từ trạng thái cơ bản ứng với mức năng lượng $^4I_{9/2}$ lên 3 nhóm mức năng lượng A, B và C.

Nhóm A ứng với các mức năng lượng $^4F_{7/2}$ và $^4S_{3/2}$. Nhóm B ứng với các mức năng lượng $^4F_{5/2}$ và $^2H_{9/2}$ và nhóm C ứng với mức năng lượng $^4F_{3/2}$.

Những nhóm năng lượng này ứng với 3 đám trong phổ hấp thụ của ion Nd trong garnet. Cấu trúc phổ hấp thụ phản ánh sự tách mức năng lượng bởi hiệu ứng Stark.



Hình 2.37. a) Sơ đồ mức năng lượng của ion Nd trong tinh thể Nd:YAG
b) Ba nhóm phổ hấp thụ của ion Nd; c) Phổ bức xạ của ion Nd.

Mức năng lượng $^4F_{3/2}$ là mức laser trên. Các ion Nd có thể dịch chuyển bức xạ từ mức này về các mức $^4I_{11/2}$, $^4I_{9/2}$, $^4I_{13/2}$, $^4I_{15/2}$ và giải phóng năng lượng. Phần lớn năng lượng này (60 %) tập trung vào dịch chuyển $^4F_{3/2} \rightarrow ^4I_{11/2}$.

Mức năng lượng $^4I_{11/2}$ được xem là mức laser dưới.

Trên hình 2.34b chỉ ra phổ phát xạ của Nd trong Garnet đối với dịch chuyển $^4F_{3/2} \rightarrow ^4I_{11/2}$. Phổ này gồm 7 vạch trong đó vạch ứng với $1,0615\mu\text{m}$ và $1,0642\mu\text{m}$ là sáng nhất. Nếu kể tới các dịch chuyển khác tổng cộng có tới 18 vạch phát xạ. Yếu nhất là vạch $1,833\mu\text{m}$ ứng với dịch chuyển $^4F_{3/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$.

Một cách đơn giản có thể xem laser Nd:YAG hoạt động theo sơ đồ 4 mức, trong đó mức cơ bản là mức $^4I_{9/2}$ và mức kích thích là các mức $^4F_{7/2}$, $^4F_{5/2}$. Chú ý rằng dịch chuyển $F \rightarrow I$ là bị cấm theo gần đúng lưỡng cực vì số lượng tử quỹ đạo thay đổi là 3 trong dịch chuyển này. Như vậy các trạng thái ứng với các mức năng lượng F có thể xem là siêu bền.

Đèn Krypton thường được dùng để bơm laser Nd:YAG. Trong vài trường hợp ion Chromium được đưa vào mạng tinh thể garnet làm chất nhạy hoá và khi đó đèn Xenon được dùng để bơm vì ion Cr trong garnet có các dải hấp thụ $0,43\mu\text{m}$ và $0,59\mu\text{m}$ trùng hợp với phổ bức xạ của đèn Xenon. Các ion Cr được kích thích sẽ truyền năng lượng kích thích của nó

cho các tâm hoạt chất Nd. Thời gian truyền năng lượng từ Cr sang Nd khá dài (cỡ 6ms) nên việc ứng dụng giải pháp làm tăng hiệu quả bơm này chỉ thích hợp đối với chế độ hoạt động liên tục.

Một ví dụ về laser rắn hoạt động ở chế độ điều biến độ phẩm chất là laser Merlin (hãng Spectra Physics). Thanh hoạt chất là tinh thể Nd:Li F₄ (Nd:YLF) phát laser ở bước sóng 1053nm.

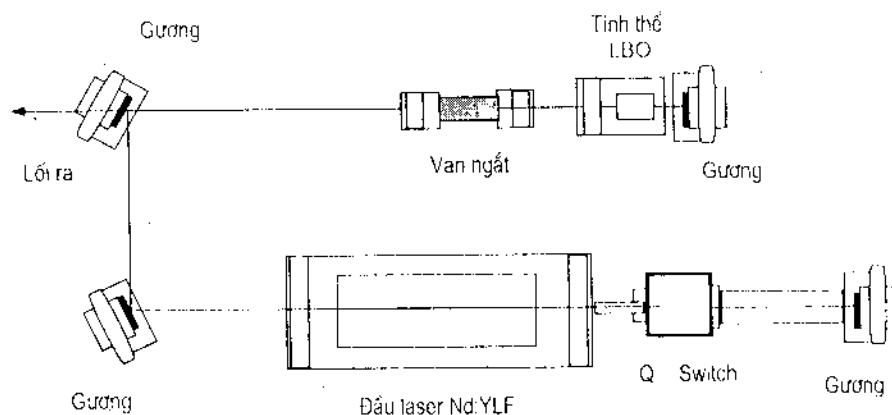
Độ dẫn nhiệt tương đối cao của Nd:YLF cho phép tản nhiệt ra ngoài hiệu quả. Thanh hoạt chất Nd:YLF và đèn hồ quang Krypton đặt tại các tiêu điểm của hộp phản xạ trong đầu laser và được làm lạnh bằng nước nhờ hệ thống làm lạnh khép kín (hình 2.38)

Laser hoạt động ở chế độ Q - switching nhờ một bộ điều biến quang âm. Một sóng siêu âm tạo bởi biến từ áp điện được phóng vào khối vật liệu quang học trong suốt (silic nóng chảy). Sóng đứng siêu âm hình thành do phản xạ trên hai mặt bên làm điều biến chiết suất (hiệu ứng quang đàn hồi) và tạo ra một cách tử pha. Trong thời gian ngắn khi cách tử hình thành, ánh sáng truyền qua sẽ bị nhiễu xạ lệch khỏi trục quang học, tăng cường mất mát BCH. Khi ngắt điện áp trên biến từ áp điện, sóng siêu âm mất, khối vật liệu trở lại trong suốt với BCH độ phẩm chất cao. Kỹ thuật Q - switching này cho phép tạo ra các xung laser độ dài 250ns với tần số lặp lại từ 1KHz đến 5KHz, năng lượng xung 10mJ.

Để chuyển đổi bước sóng sang vùng khả kiến hoặc ngắn hơn người ta dùng tinh thể phi tuyến LBO (Lithium triborate) đặt trong buồng cộng hưởng. Gương của BCH phản xạ 100% bức xạ tần số cơ bản và truyền qua bức xạ tần số hòa ba bậc hai. Nhờ vậy hiệu suất nhân đôi tần số lớn. Tinh thể LBO là một tinh thể phi tuyến loại mới, truyền tốt qua vùng tử ngoại, ngưỡng phá hủy quang học rất cao và hệ số quang học phi tuyến vừa phải, đảm bảo cho laser hoạt động ổn định. Tính lưỡng chiết của tinh thể LBO nhỏ, có thể phù hợp pha không tới hạn và góc mở đối với hiệu ứng nhân đôi tần số lớn. Tinh thể phi tuyến này được làm lạnh và ổn nhiệt ở nhiệt độ 140 -- 160⁰C. Tia laser ló ra có bước sóng là 527nm.

Hiện nay với sự phát triển ngày càng nhanh chóng của kỹ thuật laser, người ta đã chế tạo được các hệ laser diode công suất mạnh dùng để bơm laser Neodym với hiệu suất cao thay cho các đèn Krypton và Xenon.

Một ví dụ điển hình của laser rắn liên tục, bơm bằng laser diode là hệ laser Millennia (hãng Spectra -- Physics).



Hình 2.38. Sơ đồ laser Nd:YLF

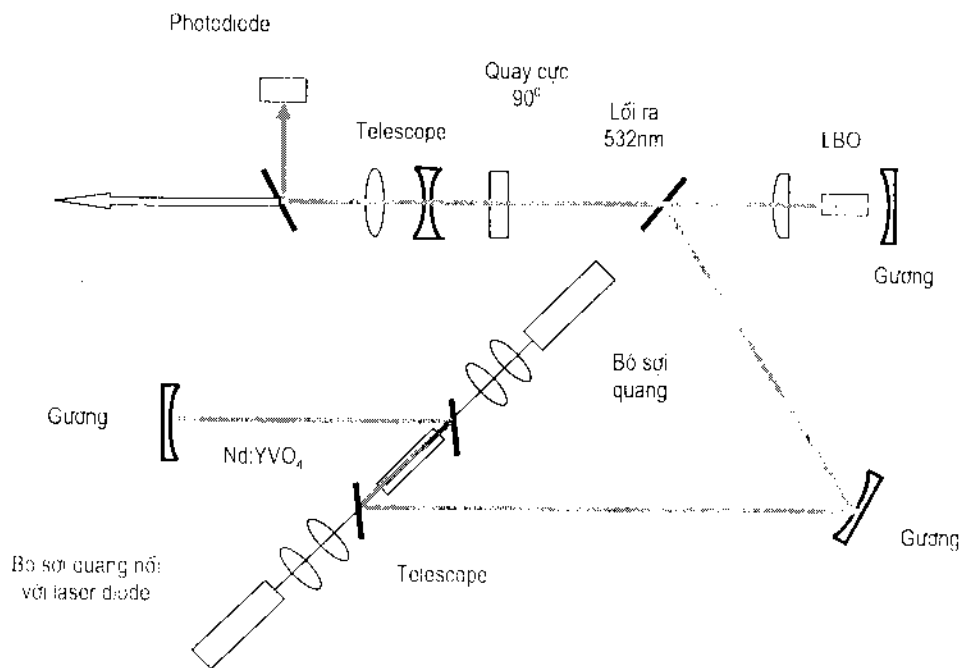
Thanh hoạt chất laser là tinh thể Nd:YVO_4 (Neodymium Yttrium Vanadate). Tâm hoạt chất là ion Nd^{3+} có dải hấp thụ trong vùng đỏ và hồng ngoại, trong đó có một cực đại hấp thụ ở bước sóng trùng với bức xạ laser diode ($\sim 820\text{nm}$). Điều này đảm bảo việc bơm quang học hiệu suất cao bằng laser. Điện tử được kích thích chuyển nhanh về mức $4F_{1/2}$ (mức laser trên) và có thời gian sống ở mức này khá lâu ($\sim 60\mu\text{s}$). Dịch chuyển laser xác suất lớn nhất là dịch chuyển về mức $4I_{11/2}$ (mức laser dưới) và bức xạ bước sóng 1064nm .

Vì điện tử ở trạng thái này hồi phục nhanh về trạng thái cơ bản nên dễ dàng tạo được nghịch đảo độ tích lũy.

Để bơm quang học môi trường hoạt chất Nd:YVO_4 người ta đã chế tạo các thanh laser diode gồm từ 10 đến 20 diode laser, công suất của mỗi thanh laser 20W . Bức xạ lối ra từ thanh laser diode được chuẩn trực bởi một vi thấu kính trụ gắn ở đầu thanh rồi ghép nối vào một bó sợi quang đa mode dẫn tới tinh thể Nd:YVO_4 . Bó sợi quang gồm nhiều sợi quang có đường kính tổng cộng $1 - 1,5\text{cm}$, có hệ số ghép nối tới 90% . Tinh thể được bơm từ hai đầu bởi hai thanh laser diode liên tục công suất 20W .

Bức xạ laser phát ra từ tinh thể có bước sóng 1064nm sẽ được biến đổi sang vùng khả kiến 532nm nhờ hiệu ứng phát hòa ba bậc hai trong tinh thể phi tuyến LBO. Đây là tinh thể phi tuyến có sự phù hợp pha không tới hạn, tia cơ bản và hòa ba bậc hai đồng trục giúp điều chỉnh thẳng hàng dễ dàng.

Hiệu suất biến đổi tần số có thể tối ưu bằng thay đổi nhiệt độ tinh thể. Với cấu hình này hệ laser Millenia có thể cho công suất phát liên tục từ 5 đến 10W ở bước sóng 532nm (xanh) với hệ làm lạnh đơn giản hơn nhiều so với laser Argon có cùng công suất. Tia laser lồi ra phân cực thẳng với độ phân cực 100:1, đường kính vết 2mm, góc phân kỳ nhỏ hơn 0,5mrad.



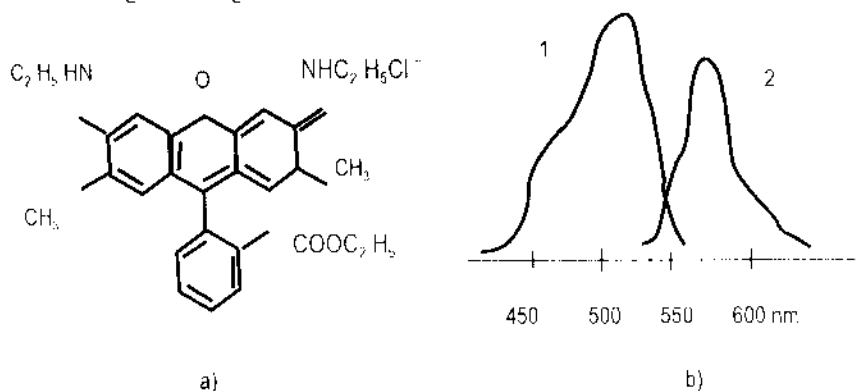
Hình 2.39. Sơ đồ quang học của laser Millenia

d) Laser màu

Chất màu là các hợp chất hữu cơ phức tạp gồm một hệ thống các liên kết liên hợp có phân nhánh. Các chất màu có đại hấp thụ mạnh trong vùng khả kiến và tử ngoại gần. Cấu trúc hoá học của chúng được đặc trưng bởi tổ hợp các vòng benzene, vòng pyridine, vòng azine, vòng pyrrol v.v... Các chất màu phát quang mạnh nhất được phân làm 8 loại sau: xanthenes, polymethines, oxazines, coumarins, anthracenes, acridines, azines và phthalocyanines.

Một ví dụ điển hình là Rhodamine 6G (thuộc nhóm xanthenes). Công thức cấu trúc dựa trên các vòng benzene được chỉ ra trên hình 2.40a. Vì là chất màu nhóm xanthenes nên Rhodamine 6G hấp thụ và bức xạ ánh sáng trong vùng phổ khả kiến. Trên hình 2.40b, đường 1 là phổ hấp thụ và

đường 2 là phổ phát quang của Rhodamine 6G. Dải bức xạ của chất màu này nằm trong khoảng 550 -- 600nm.



Hình 2.40. Phổ phát quang của phân tử Rhodamine 6G

Cho đến nay có tới 200 chất màu khác nhau đã được sử dụng làm hoạt chất laser màu. Dải bước sóng của những chất màu này trong miền 300 – 1300nm. Bằng cách chọn chất màu thích hợp ta có thể có bức xạ laser bước sóng bất kỳ trong miền phổ này. Các dung môi thường được sử dụng để pha chất màu là nước, ethanol, methanol, xycloctan, toluene, glycerine, benzene, acetone...

Đáng chú ý là độ rộng dải phát quang của chất màu là rất rộng, cỡ 10nm trong khi độ rộng vạch phát laser rất hẹp, chỉ cỡ 0,1nm hoặc có thể nhỏ hơn. Bước sóng phát laser có thể thay đổi liên tục trong giới hạn dải phát quang của chất màu sử dụng.

Phân tử chất màu có cấu trúc phức tạp gồm nhiều nguyên tử và do đó sẽ có một số lớn trạng thái điện tử dao động quay. Khó có thể vẽ đầy đủ và chính xác các mức năng lượng của nó. Tuy nhiên, để khảo sát quá trình tạo nghịch đảo độ tích lũy có thể sử dụng sơ đồ mức năng lượng đơn giản hoá như trên hình 2.41. Hình 2.41 mô tả 5 trạng thái năng lượng điện tử dao động – quay đầu tiên của phân tử chất màu S_0 , S_1 , S_2 , T_1 , T_2 với S_0 là trạng thái cơ bản. Khi nhận năng lượng photon từ bên ngoài chiếu tới (nhờ bơm quang học) một điện tử của phân tử được kích thích lên mức cao hơn. Nếu spin của điện tử này vẫn giữ đối song với điện tử còn lại của phân tử thì trạng thái điện tử mới này có spin tổng cộng bằng 0 và được gọi là trạng thái đơn (singlet), ký hiệu bằng chữ S_j .

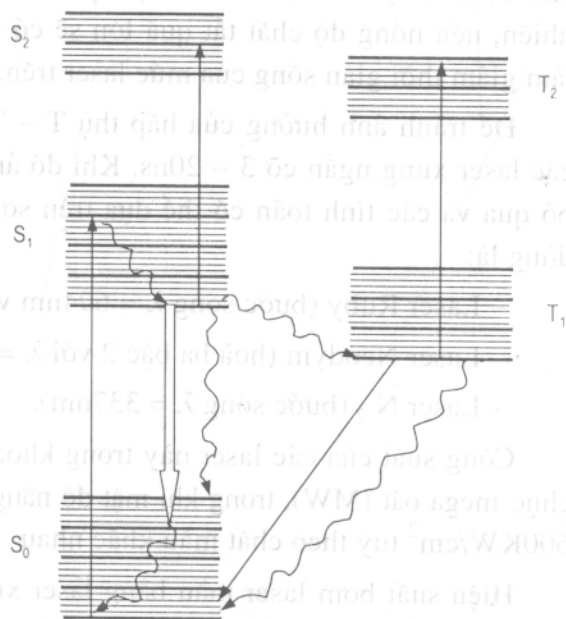
Ngược lại, nếu sự kích thích dẫn tới làm đảo spin, làm cho spin của điện tử được kích thích song song với điện tử còn lại của phân tử thì khi đó trạng thái điện tử mới này có spin tổng cộng bằng 1 và được gọi là trạng thái bội ba (triplet), ký hiệu bằng chữ T_1 . Có nhiều trạng thái đơn và bội ba ứng với các kích thích điện tử khác nhau. Những dịch chuyển đơn – bội ba dẫn tới làm đảo spin điện tử nên có xác suất thấp hơn các dịch chuyển đơn – đơn (S – S) và bội ba – bội ba (T – T).

Trên hình 2.41, các mũi tên thẳng chỉ các dịch chuyển quang học, mũi tên lớn chỉ dịch chuyển laser, và mũi tên uốn lượn chỉ dịch chuyển không quang học. Nhờ bơm quang học, phân tử được kích thích từ trạng thái cơ bản S_0 lên trạng thái S_1 . Phân tử sau khi được kích thích sẽ hồi phục rất nhanh về mức dao động thấp hơn của trạng thái điện tử S_1 (trong khoảng thời gian cỡ 10^{-11} s) bằng cách truyền năng lượng dư cho dung môi. Như vậy có thể tạo ra nghịch đảo độ tích lũy giữa mức năng lượng dao động thấp của trạng thái điện tử S_1 với mức năng lượng dao động cao của trạng thái điện tử cơ bản S_0 .

Đối với những tần số $\nu < \nu_e$ (với ν_e là tần số ứng với dịch chuyển giữa 2 trạng thái điện tử, $\nu = 0$) dịch chuyển laser xảy ra ngay cả khi mật độ tích lũy mức S_1 thấp hơn mức S_0 . Từ đó suy ra rằng cực đại của dải phổ laser dịch chuyển về phía sóng dài của phổ huỳnh quang chất màu.

Nếu bơm mạnh (tăng độ tích lũy mức laser trên) thì dải phổ laser sẽ dịch về phía sóng ngắn gần với vị trí và dạng của phổ huỳnh quang chất màu.

Tuy nhiên còn có nhiều quá trình khác ảnh hưởng đến việc tạo thành nghịch đảo độ tích lũy. Từ trạng thái S_1 (mức laser trên) có 3 dịch chuyển cạnh tranh với dịch chuyển laser:



Hình 2.41. Các mức năng lượng của phân tử chất màu

- Dịch chuyển $S_1 \rightarrow S_2$ liên quan tới sự hấp thụ phụ bức xạ bơm
- Dịch chuyển không bức xạ $S_1 \rightarrow S_0$ (chuyển đổi nội)
- Dịch chuyển không bức xạ $S_1 \rightarrow T_1$ (chuyển đổi đơn bội ba)

Sau dịch chuyển $S_1 \rightarrow T_1$ có thể xảy ra hấp thụ phụ bức xạ bơm dẫn tới dịch chuyển $T_1 \rightarrow T_2$ (hấp thụ bội ba - bội ba). Ngoài ra các dịch chuyển bức xạ và không bức xạ $T_1 \rightarrow S_0$ cũng có thể xảy ra. Như vậy các dịch chuyển $S_1 \rightarrow S_2$ và $T_1 \rightarrow T_2$ làm hao phí năng lượng bơm. Các dịch chuyển không bức xạ $S_1 \rightarrow S_0$ và các dịch chuyển $S_1 \rightarrow T_1 \rightarrow S_0$ làm giảm số phân tử được kích thích. Để tránh ảnh hưởng của hấp thụ $T_1 \rightarrow T_2$ có thể dùng bơm nhanh và mạnh sao cho đạt được ngưỡng phát trước khi có độ tích lũy đáng kể của mức T_1 (tăng độ dốc mật xung kích thích). Nói chính xác hơn là thời gian đạt ngưỡng phát phải ngắn hơn thời gian sống của mức T_1 (cỡ 10^{-6} s). Laser màu sẽ phát khi bơm bằng những xung mạnh và ngắn. Cũng có thể làm giảm ảnh hưởng của mức triplet T_1 bằng cách thêm vào dung dịch chất màu những chất phụ đặc biệt - còn gọi là chất tắt trạng thái T. Những chất này làm tăng xác suất dịch chuyển $T_1 \rightarrow S_0$, giảm độ tích lũy mức T_1 . Trong một số trường hợp dùng chất tắt có thể làm chất màu phát ở chế độ liên tục. Các chất tắt hiệu quả nhất là O_2 , C_8H_8 và $C_{10}H_{12}$. Tuy nhiên, nếu nồng độ chất tắt quá lớn sẽ có tác dụng ngược lại vì nó có thể làm giảm thời gian sống của mức laser trên.

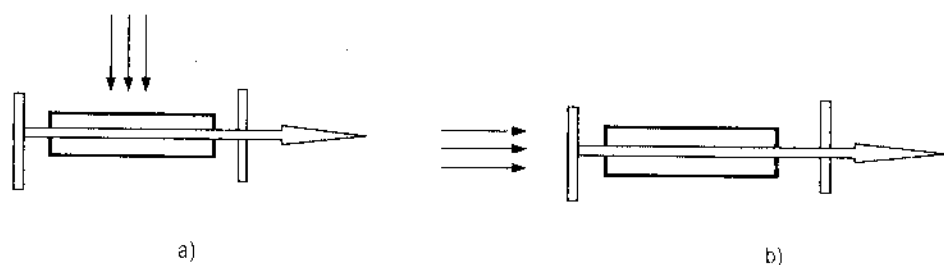
Để tránh ảnh hưởng của hấp thụ $T \rightarrow T$ người ta bơm laser màu bằng các laser xung ngắn cỡ 3 - 20 ns. Khi đó ảnh hưởng của mức triplet có thể bỏ qua và các tính toán có thể dựa trên sơ đồ 2 mức. Những laser thường dùng là:

- Laser Ruby (bước sóng $\lambda = 694$ nm và hoà ba bậc 2 với $\lambda = 347$ nm)
- Laser Neodym (hoà ba bậc 2 với $\lambda = 530$ nm, bậc 3 với $\lambda = 353$ nm)
- Laser N_2 (bước sóng $\lambda = 337$ nm).

Công suất của các laser này trong khoảng từ vài kilô oát (kW) đến vài chục mega oát (MW), trong khi mật độ năng lượng ngưỡng cần thiết là 0,6 - 600 kW/cm² tùy theo chất màu khác nhau

Hiệu suất bơm laser màu bằng laser xung rất lớn, cỡ vài chục %. Cực đại là 75% đối với chất màu Rhodamine 6G khi bơm bằng hoà ba bậc 2 của laser Neodym (530 nm). Dải phổ laser màu khi bơm bằng laser trong vùng 340 - 1100 nm.

Có thể kích thích laser màu theo hai sơ đồ nguyên tắc: Bơm ngang (hình 2.42a) và bơm dọc (hình 2.42b).



Hình 2.42. Sơ đồ bơm ngang và bơm dọc

Trong điều kiện kích thích như nhau, thì hiệu suất của 2 sơ đồ là như nhau. Sự khác nhau là ở tính phân cực của bức xạ laser lõi ra. Với sơ đồ bơm dọc, khi bơm bằng laser phân cực thẳng thì bức xạ laser màu phân cực hoàn toàn. Với sơ đồ bơm ngang, mức độ phân cực phụ thuộc vào góc giữa vectơ điện của bức xạ bơm và quang trục của buồng cộng hưởng laser màu. Sự phân cực hoàn toàn chỉ xảy ra khi vectơ điện của bức xạ bơm vuông góc với quang trục của buồng cộng hưởng laser màu.

Nồng độ và độ dày lớp dung dịch phải chọn sao cho công suất kích thích là gần như nhau trên toàn bộ thể tích cuvet. Điều này sẽ làm giảm độ mở rộng chùm tia. Nồng độ chất màu thường chọn là 10^{-4} mol/l.

Nếu như chất màu được luân chuyển nhanh thì tần số lặp lại của laser màu chỉ còn phụ thuộc vào tần số của laser bơm.

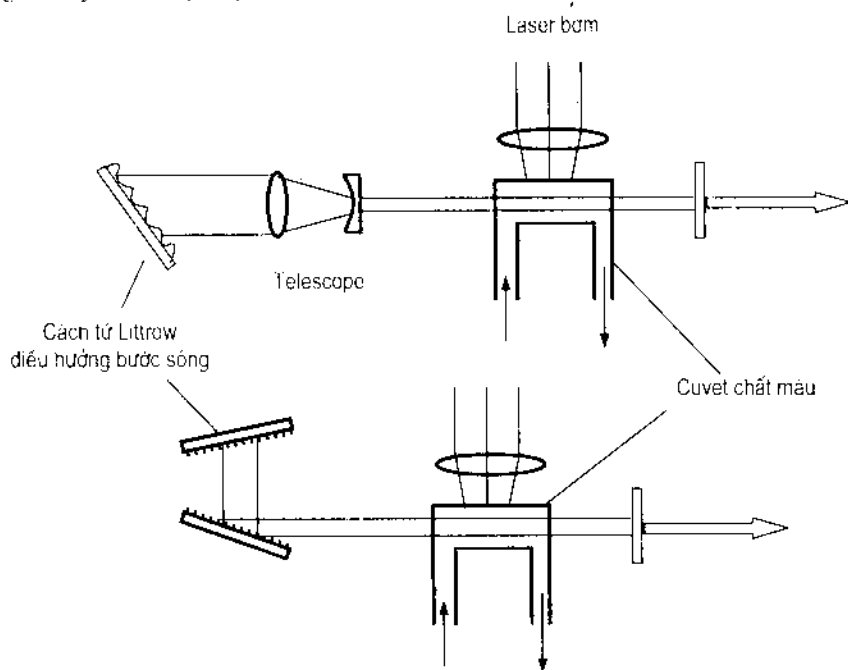
Laser màu khí không có yếu tố lọc lựa (như lăng kính, cách tử...) thì bức xạ phát có phổ rộng khoảng 5 – 20nm (chế độ băng rộng). Ở các chất màu phổ huỳnh quang bị phủ một phần bởi dải hấp thụ nên phổ phát không trùng với cực đại của phổ huỳnh quang mà dịch chuyển về phía sóng dài. Bước sóng trung bình của dải phổ phát phụ thuộc vào nồng độ chất màu, hệ số phản xạ gương, kích thước dải lớp hoạt chất và độ dài trục buồng cộng hưởng. Vị trí cực đại của phổ phát của một số chất màu còn phụ thuộc vào nhiệt độ dung dịch. Bằng cách thay đổi các yếu tố trên có thể thay đổi vị trí dải phổ phát của laser màu.

Để có thể làm hẹp phổ bức xạ laser, đồng thời có thể tinh chỉnh bước sóng phát người ta đưa vào buồng cộng hưởng những yếu tố lọc lựa như: lọc sáng, giao thoa kế song phẳng và dạng nêm, lăng kính tán sắc, cách tử nhiễu xạ...

Khi đó độ rộng vạch phổ phát giảm tới $0,05 - 1\text{nm}$. Tổ hợp các yếu tố lọc lựa cho phép nhận được độ rộng phổ $10^{-3} - 10^{-4}\text{nm}$. Việc đưa vào các yếu tố lọc lựa không làm mất mát đáng kể năng lượng phát mà lại có tác dụng làm tăng mạnh mật độ năng lượng phổ.

Trên hình 2.43 trình bày một số sơ đồ laser màu có bước sóng điều chỉnh được.

Một trong những đặc tính quan trọng của laser màu là khả năng điều chỉnh bước sóng phát. Việc lựa chọn hợp lý chất màu, dung môi hoặc thay đổi độ phẩm chất Q của buồng cộng hưởng là bước đầu tạo ra những vùng phổ bước sóng phát khác nhau. Sau đó để tinh chỉnh bước sóng phát phải sử dụng các yếu tố lọc lựa trên.



Hình 2.43. Một số sơ đồ laser màu điều hướng bước sóng

Trường hợp dùng cách tử, cường độ ánh sáng phản xạ từ cách tử phụ thuộc vào góc tới i , góc nhiễu xạ r . Giả sử bước sóng là λ , hằng số cách tử là d thì hiệu quang trình ứng với cường độ cực đại là:

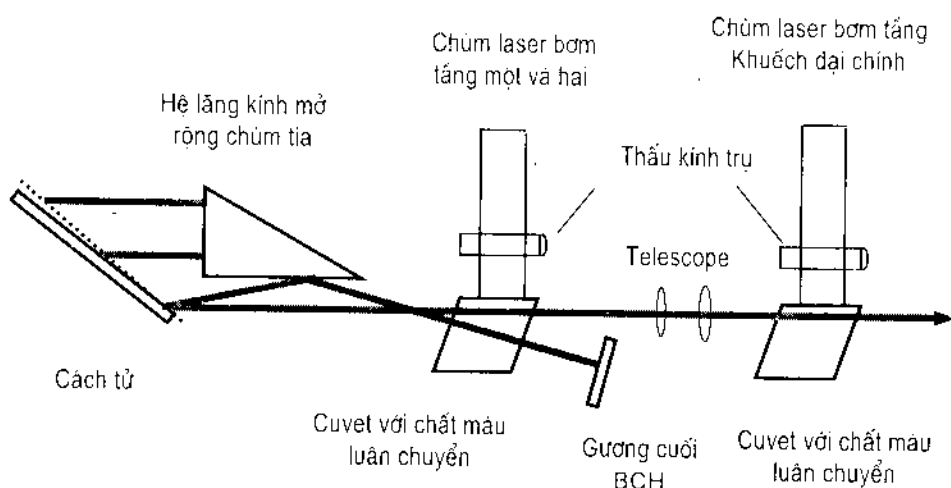
$$\delta = d(\sin i + \sin r) = k\lambda, \text{ với } k = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Khi $i = r$ ta có $2d \sin i = k\lambda$. Với $k = 1$ (phổ nhiễu xạ bậc một) ta có $\sin i = k\lambda/2d$.

Cách tử sử dụng với bố trí như vậy (bố trí Littrow) có hệ số phản xạ cao 80 – 90%. Nhờ quay cách tử, tính chỉnh góc i ta có thể thay đổi bước sóng phát.

Một ví dụ điển hình về laser màu điều hướng liên tục bước sóng là hệ laser màu FL – 3002 của hãng Lambda Physics (Germany). Sơ đồ quang học của hệ laser này được trình bày trên hình 2.44. Cách tử 600 vạch/mm có thể quay giữa các góc Littrow $42,5^\circ$ và $72,5^\circ$, dùng với bậc từ 3 đến 8. Hệ lăng kính mở rộng chùm tia gồm 5 lăng kính nhỏ. Hệ gương cuối BCH gồm 3 lớp điện môi tách biệt, có hệ số phản xạ 100% lần lượt với 3 vùng bước sóng: 610 – 860nm; 420 – 650nm và 320 – 450nm. Giá gương có thể xê dịch cho phép dễ dàng chọn vùng bước sóng.

Hệ laser được bơm bằng laser Excimer XeCl bước sóng 308nm, năng lượng xung lớn hơn 100mJ, độ rộng xung 6 – 8ns, với tần số lặp lại từ vài Hz đến 250Hz. Công suất xung laser màu có thể tới 20MW tùy thuộc chất màu sử dụng. Độ rộng băng hẹp 0,005nm.



Hình 2.44. Sơ đồ quang học laser màu FL – 3002 (Lambda – Physics)

Chương 3

CÁC LINH KIẾN QUANG HỌC

3.1. LĂNG KÍNH

Một chùm ánh sáng trắng đi qua một lăng kính sau khi khúc xạ sẽ bị tách ra thành các chùm sáng đơn sắc có màu sắc thay đổi liên tục từ đỏ đến tím như màu sắc cầu vồng. Đó là hiện tượng tán sắc ánh sáng bởi lăng kính. Bản chất của hiện tượng là sự phụ thuộc của chiết suất lăng kính vào bước sóng ánh sáng tới. Tia tím có chiết suất lớn hơn tia đỏ nên lệch nhiều hơn về phía đáy lăng kính. Đường cong biểu diễn sự phụ thuộc của chiết suất của một chất theo bước sóng gọi là đường cong tán sắc của chất ấy. Bằng thực nghiệm người ta đã xác định đường cong tán sắc của nhiều chất. Thông thường ở miền bước sóng xa vùng hấp thụ, chiết suất tăng khi bước sóng giảm. Khả năng tán sắc ánh sáng của lăng kính thủy tinh hoặc thạch anh được ứng dụng làm máy đơn sắc và máy quang phổ lăng kính. Chúng ta sẽ đánh giá độ tán sắc và năng suất phân giải của lăng kính.

3.1.1. Độ tán sắc và năng suất phân giải

a) Độ tán sắc

Xét đường đi của một tia sáng đơn sắc qua lăng kính chiết suất n đặt trong không khí (hình 3.1).

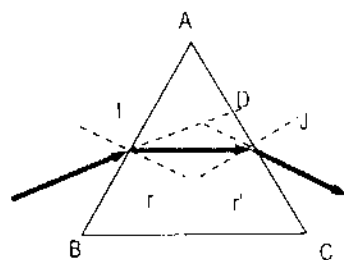
Theo định luật khúc xạ ta có tại điểm tới I: $\sin i = n \sin r$

Tại điểm J: $\sin i' = n \sin r'$

Ngoài ra dễ thấy $r + r' = A$ với A là góc chiết quang của lăng kính.

Góc lệch của tia ló $D = i + i' - A$

Góc lệch D đạt giá trị cực tiểu khi $i = i'$, tương ứng $r = r'$, $D = D_{\min} = \delta = 2i - A$.



Hình 3.1. Đường đi của một tia sáng qua lăng kính

Từ đó góc tới i để

$$D = D_{\min} \text{ là } i = (\delta + \Lambda)/2; r = \Lambda/2.$$

Suy ra:

$$\sin [(\delta + \Lambda)/2] = n \cdot \sin(\Lambda/2) \quad (3.1)$$

Có thể thấy là ở vị trí góc lệch cực tiểu, tia sáng truyền qua lăng kính một cách đối xứng.

Trường hợp chùm sáng không đơn sắc được chiếu tới lăng kính ở vị trí góc lệch cực tiểu, để tìm độ tán sắc góc của lăng kính ta lấy vi phân phương trình (3.1):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d\delta}{d\lambda} \cdot \cos \frac{\delta + \Lambda}{2} &= \frac{dn}{d\lambda} \cdot \sin \frac{\Lambda}{2} \\ \frac{d\delta}{d\lambda} &= \frac{dn}{d\lambda} \cdot \frac{2 \sin(\Lambda/2)}{\cos[(\delta + \Lambda)/2]} = \frac{dn}{d\lambda} \cdot \frac{2 \sin(\Lambda/2)}{\sqrt{1 - n^2 \sin^2(\Lambda/2)}} \\ D &= \frac{d\delta}{d\lambda} \end{aligned}$$

D được gọi là độ tán sắc góc của lăng kính, $dn/d\lambda$ là độ tán sắc vật liệu. Độ tán sắc vật liệu phụ thuộc vào bước sóng và tăng mạnh ở vùng phổ hấp thụ của vật liệu. Thủy tinh nặng (thủy tinh flint) có độ tán sắc lớn ở vùng sóng ngắn của ánh sáng khả kiến nhưng lại bị hấp thụ mạnh ở vùng này. Thủy tinh nhẹ (thủy tinh crown) có độ tán sắc nhỏ hơn nhưng ít bị hấp thụ ở vùng tím và tử ngoại. Với một vật liệu xác định, độ tán sắc góc càng lớn nếu góc chiết quang Λ của lăng kính lớn. Tuy nhiên, không thể tăng góc Λ nhiều vì sẽ dẫn đến phản xạ toàn phần ở mặt bên lăng kính ($\Lambda < 2i_0$ với $\sin i_0 = 1/n$). Thông thường người ta chọn $\Lambda = 60^\circ$.

b) Năng suất phân giải

Theo định nghĩa năng suất phân giải: $R = \lambda/d\lambda$

Trong đó: $d\lambda$ là hiệu bước sóng của hai bức xạ đơn sắc còn có thể phân ly được theo tiêu chuẩn Rayleigh, λ là bước sóng trung bình của chúng. Theo tiêu chuẩn Rayleigh mở rộng, hai đường cong phân bố cường độ sáng được xem là phân ly nếu khoảng cách góc giữa chúng bằng nửa độ rộng góc của đường cong cường độ sáng. Đường phân bố cường độ sáng ở đây chính là các vạch phổ với một độ rộng nhất định do nhiễu xạ gây ra.

Kích thước của mặt bên lăng kính là hữu hạn nên chùm ánh sáng truyền qua mặt bên lăng kính sẽ bị nhiễu xạ. Theo lý thuyết nhiễu xạ, ánh nhiễu xạ của chùm sáng song song qua một khe độ rộng a có nửa độ rộng

góc $\theta_1 \sim \sin\theta_1 = \lambda/a$ (Đây là khoảng cách góc từ tâm cực đại nhiễu xạ đến cực tiểu nhiễu xạ đầu tiên).

Như vậy, theo tiêu chuẩn Rayleigh

$$d\delta = \frac{\lambda}{a} \rightarrow \lambda = a \cdot d\delta$$

$$\rightarrow R = \frac{\lambda}{d\lambda} = \frac{d\delta}{d\lambda} \cdot a$$

Khi mặt bên lăng kính được chiếu sáng hết (hình 3.2), kích thước a của chùm sáng sẽ là:

$$a = b \cdot \cos i = \frac{L}{2} \cdot \frac{\cos i}{\sin(A/2)}$$

Ở vị trí góc lệch cực tiểu $i = (\delta + A)/2$

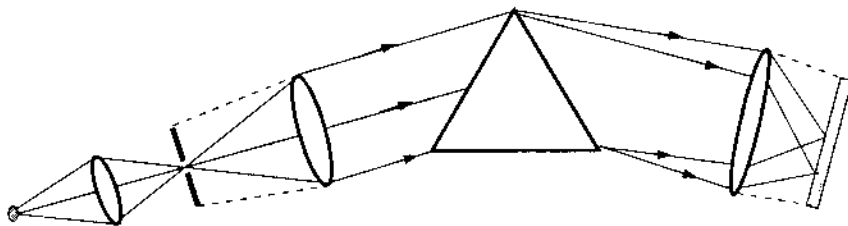
Thay biểu thức của $d\delta/\lambda$ và a vào R ta được:

$$R = \frac{dn}{d\lambda} \cdot \frac{2 \sin(A/2)}{\cos[(\delta + A)/2]} \cdot \frac{L \cos[(\delta + A)/2]}{2 \sin(A/2)} = L \cdot \frac{dn}{d\lambda}$$

$$R = L \cdot \frac{dn}{d\lambda}$$

Từ đó ta thấy năng suất phân giải của lăng kính phụ thuộc vào độ tán sắc vật liệu làm lăng kính và độ rộng đáy lăng kính L sử dụng. Để tăng năng suất phân giải cần tăng độ dài sử dụng L của lăng kính. Về nguyên tắc có thể tăng góc A và kích thước lăng kính. Tuy nhiên, người ta không thể tăng góc A nhiều và cũng không thể tăng quá lớn kích thước lăng kính. Thực tế trong máy quang phổ người ta thường đặt liên tiếp 2 hoặc 3 lăng kính để làm tăng độ dài hiệu dụng của đáy lăng kính.

Sơ đồ máy quang phổ lăng kính có dạng như trên hình 3.3



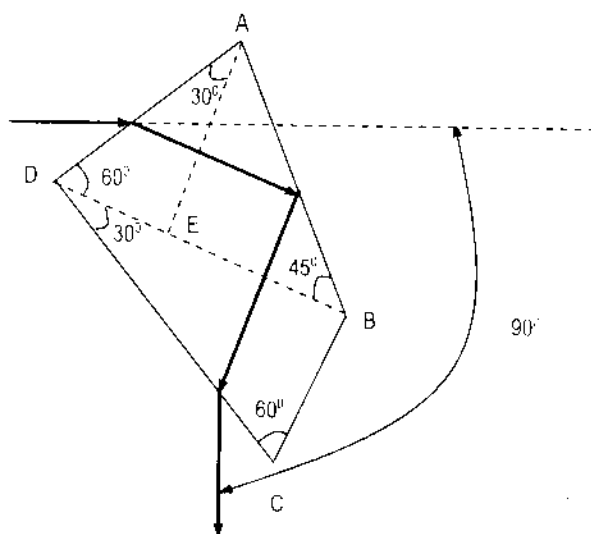
Hình 3.3. Sơ đồ quang học máy quang phổ lăng kính

3.1.2. Một số loại lăng kính

Ngoài tác dụng làm tán sắc ánh sáng trong máy quang phổ, làm yếu tố lọc lựa bước sóng trong buồng cộng hưởng laser, lăng kính còn được dùng để làm lệch đường đi tia sáng và thay đổi hướng phân cực của ánh sáng phân cực... Dưới đây là một số dạng lăng kính khác nhau đã được chế tạo để dùng trong quang học và quang phổ học.

Trên hình 3.4 trình bày một loại lăng kính thường dùng trong kỹ thuật laser - lăng kính Pellin - Broca. Có thể xem lăng kính Pellin - Broca là một khối thủy tinh quang học tạo bởi hai lăng kính $30^\circ - 60^\circ - 90^\circ$ và một lăng kính $45^\circ - 45^\circ - 90^\circ$ tạo thành.

Giả sử có một tia sáng đơn sắc λ đi qua lăng kính DAE một cách đối xứng (khúc xạ song song với đáy), khi đó nó sẽ phản xạ 45° trên mặt AB. Tia sáng này tiếp tục đi qua lăng kính CDB một cách đối xứng, tổng cộng sẽ có góc lệch là 90° . Có thể xem tia sáng đã đi qua một lăng kính có góc chiết quang 60° (tạo bởi 2 lăng kính DAE và CDB) ở vị trí góc lệch cực tiểu. Trong trường hợp ánh sáng không



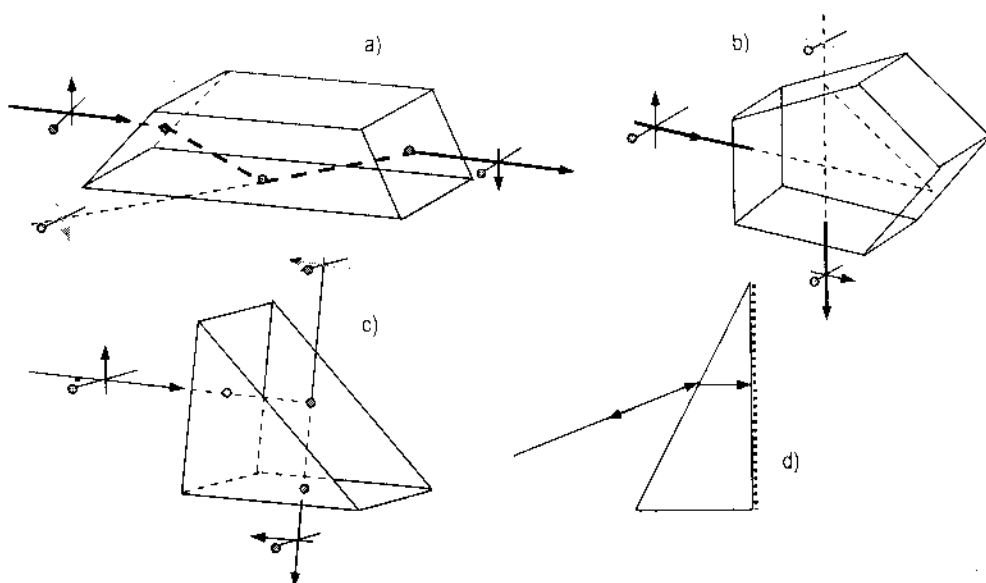
Hình 3.4. Lăng kính Pellin - Broca

đơn sắc, các bước sóng khác nhau có mặt trong chùm sáng này sẽ ló ra với góc khác nhau. Nếu lăng kính có thể quay quanh trục vuông góc với mặt phẳng hình vẽ thì tia tới sẽ có một góc tới mới cho thành phần bước sóng λ' sao cho tia này đi qua lăng kính với góc lệch cực tiểu và sẽ có góc lệch toàn phần là 90° . Với lăng kính loại này ta có thể dễ dàng tạo ra một nguồn sáng và quan sát ở một góc cố định (ở đây là 90°). Chỉ cần quay lăng kính ta sẽ có các bước sóng đơn sắc khác nhau luôn ló ra theo phương vuông góc với phương tới.

Hình 3.5A giới thiệu một số dạng lăng kính vừa làm đổi hướng truyền vừa thay đổi chiều của hình ảnh và lăng kính Littrow có mặt một mặt

bên thường dùng làm gương sau của buồng cộng hưởng laser điều chỉnh bước sóng.

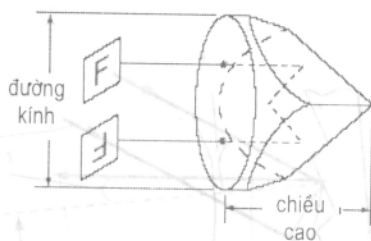
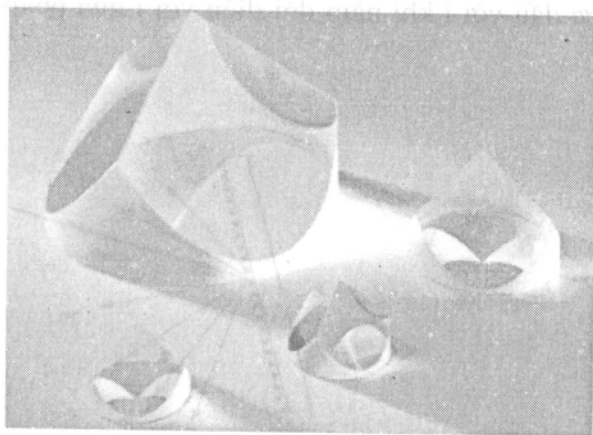
Lăng kính cân vuông làm lệch đường đi tia sáng 90° và làm đảo chiều của hình (mũi tên đảo ngược) giống như gương phẳng nghiêng 45° . Đặc điểm của lăng kính Penta là làm lệch tia sáng đúng 90° nhưng không làm đảo ảnh cả ngang và dọc. Lăng kính Dove không làm thay đổi hướng chùm sáng chuẩn trực nhưng làm xoay đảo ngược chiều của ảnh xung quang trục là phương truyền.



Hình 3.5A. Một số dạng lăng kính:
a) Lăng kính Dove; b) Lăng kính Penta.

Ngoài ra, người ta còn chế tạo lăng kính làm phản xạ ngược lại theo hướng tới của mọi tia sáng đến. Lăng kính này có tên gọi là lăng kính đảo hướng (Retroreflector) hay còn gọi là lăng kính góc lập phương vì được tạo bởi ba mặt phẳng vuông góc tương hỗ với nhau (hình 3.5B). Với cấu tạo như vậy nó làm phản xạ tất cả các tia tới trở lại hướng ban đầu.

Lăng kính đảo hướng phản xạ ánh sáng 180° mà không cần định hướng lăng kính một cách chính xác. Các hình ảnh sau phản xạ vừa đảo cả chiều dọc lẫn chiều ngang. Thông thường lăng kính này được chế tạo với ba kích thước khác nhau: 6,35mm; 12,7mm và 25,4mm như trên hình 3.5B.



Hình 3.5.B. Lăng kính đảo hướng (Retroreflector)

3.2. CÁCH TỬ NHIỀU XẠ

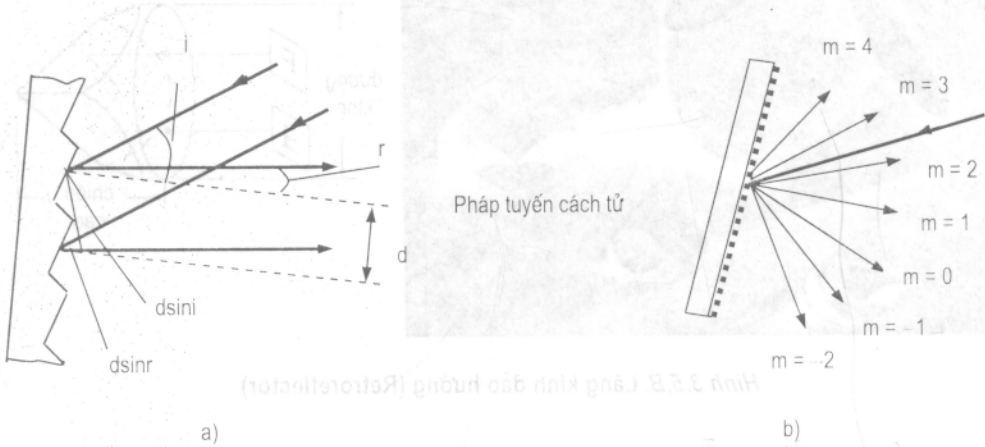
Hiện nay, cách tử nhiễu xạ đang thay thế lăng kính để làm tán sắc ánh sáng trong hầu hết các thiết bị phân tích quang phổ. Thông thường, cách tử gồm một đế quang học với một số lớn các rãnh song song trên bề mặt gọi là các vạch và được phủ một lớp phản xạ nhôm hoặc vàng. Hầu hết các cách tử là các bản sao từ một bản chính. Các rãnh trên cách tử bản chính thường được vạch ra bằng phương pháp khắc axit hoặc bằng phương pháp giao thoa holography. Chất lượng và khoảng cách của các rãnh là vấn đề cốt lõi của cách tử.

3.2.1. Phương trình cách tử

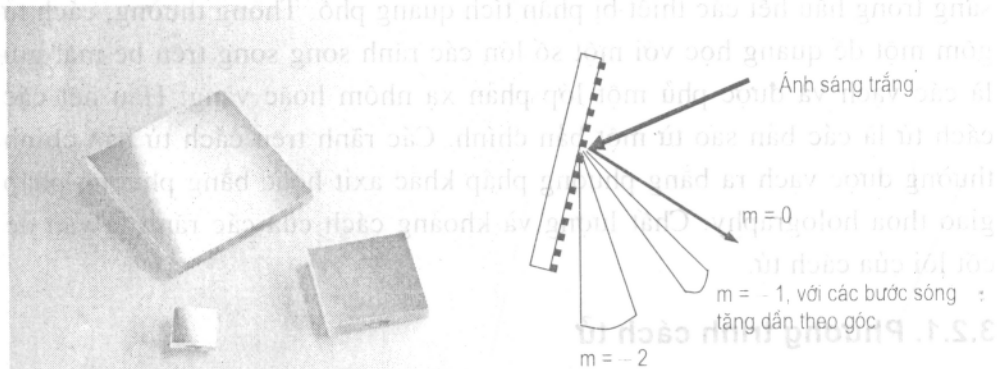
Phương trình cơ bản của cách tử có thể dẫn ra từ sơ đồ chiếu sáng cách tử như sau: Khoảng cách d giữa hai vạch liên tiếp gọi là chu kỳ (hay hằng số) của cách tử. Giả sử có một chùm sáng đơn sắc, song song chiếu theo phương vuông góc với các vạch của cách tử (hình 3.6). Xét hai rãnh liên tiếp trên cách tử. Gọi bước sóng là λ , góc giữa tia tới với pháp tuyến của cách tử là i . Ánh sáng nhiễu xạ theo phương làm một góc r với pháp tuyến của cách tử. Hiệu quang trình giữa hai tia sáng phát ra từ hai vạch liên tiếp theo cùng phương r có thể đánh giá từ hình vẽ như sau: $d \sin i + d \sin r$. Theo lý thuyết giao thoa, hai tia này sẽ cho giao thoa với cực đại cường độ sáng khi:

$$d(\sin i + \sin r) = m\lambda, \text{ với } m \text{ là một số nguyên gọi là bậc nhiễu xạ.}$$

Chú ý là góc r sẽ lấy ngược dấu với i khi nằm đối diện với i qua pháp tuyến.



Hình 3.6. a) Hình dạng một phần bề mặt cách tử;
b) Các bậc nhiễu xạ của một chùm sáng thỏa mãn phương trình cách tử.



Hình 3.7. Cách tử và sự tán sắc của cách tử

Khi chiếu ánh sáng không đơn sắc, với cùng bậc nhiễu xạ, các bước sóng khác nhau sẽ nằm ở các góc khác nhau. Bậc nhiễu xạ càng lớn thì độ tán sắc góc càng cao (hình 3.7). Trong hầu hết các máy đơn sắc, khe và gương chuẩn trực lối vào có định hướng của tia sáng tới bề mặt cách tử. Gương chuẩn trực và khe lối ra cố định góc r . Chỉ những bước sóng thỏa mãn phương trình cách tử mới đi qua khe lối ra. Khi quay cách tử, các góc

i và r thay đổi nhưng hiệu của chúng không đổi và cố định bởi cấu hình của máy đơn sắc.

Một dạng khác của phương trình cách tử thích hợp cho máy đơn sắc là:

$$2.d.\cos\varphi.\sin\theta = m\lambda$$

Với φ là một nửa của góc hợp bởi tia tới và tia nhiễu xạ trên cách tử;

θ -- là góc giữa pháp tuyến ở vị trí cách tử cho nhiễu xạ bậc không ($i = r$) và pháp tuyến ở vị trí đang xét. Góc này được gọi là góc cách tử;

φ và θ được xác định từ mối liên hệ: $i = \theta + \varphi$ và $r = \theta - \varphi$.

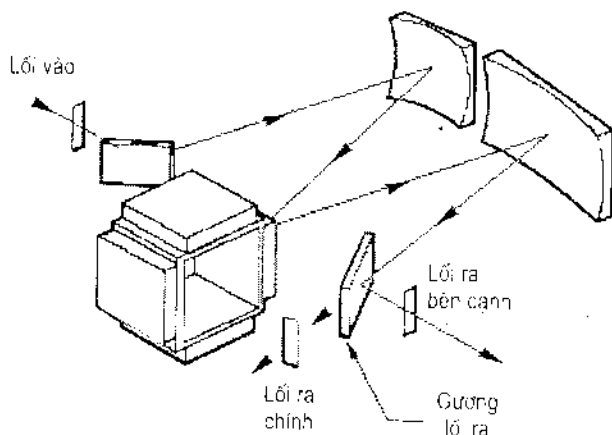
3.2.2. Bậc của cách tử

Cần chú ý là giá trị m trong phương trình cách tử có thể lấy dấu âm hoặc dương. Trong một máy đơn sắc cho trước các góc i và r được xác định bởi vị trí quay cách tử. Ta sử dụng quy ước là tất cả các góc ngược chiều kim đồng hồ đối với pháp tuyến của cách tử mang dấu dương và các góc cùng chiều kim đồng hồ mang dấu âm. Ánh sáng tới, ánh sáng nhiễu xạ, vị trí quay cách tử có thể ứng với các góc âm hoặc dương tùy theo chúng ở phía bên nào của pháp tuyến trên cách tử. Tuy nhiên, nửa góc hợp bởi tia tới và tia nhiễu xạ φ luôn được xem là dương.

Nếu góc $r = -i$ ta có nhiễu xạ bậc 0, khi đó ta xem là cách tử ở vị trí 0 hay là góc cách tử bằng 0. Khi đó ánh sáng đơn giản là phản xạ trên cách tử.

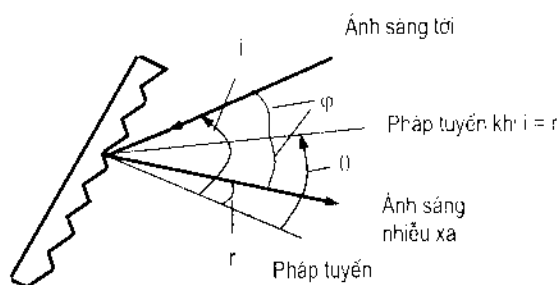
Các máy đơn sắc thông thường chỉ dùng nhiễu xạ bậc 1 (dương hoặc âm). Nếu góc cách tử là dương thì bậc sử dụng là dương ($m = 1$). Nếu góc cách tử âm thì bậc sử dụng là âm ($m = -1$).

Phương trình cách tử cũng được thỏa mãn đối với các bước sóng khác nhau ở cùng một vị trí xác định của cách tử trong máy đơn sắc cho trước.



Hình 3.8. Sơ đồ một máy đơn sắc cách tử điển hình

Giả sử bước sóng λ_1 thỏa mãn phương trình cách tử với $m = \pm 1$ thì ở cùng vị trí khe máy đơn sắc có thể có bước sóng $\lambda_2 = \lambda_1/2$ thỏa mãn đối với $m = \pm 2$ và bước sóng $\lambda_3 = \lambda_1/3$ thỏa mãn đối với $m = \pm 3...$ Như vậy ta sẽ thu được ngoài bước sóng λ_1 ở phổ bậc 1 còn có bước sóng λ_2 ở phổ bậc 2 và bước sóng λ_3 ở phổ bậc 3 v.v... Các bước sóng bậc cao này có thể được chặn lại bằng kính lọc hoặc dùng đầu thu có độ nhạy phổ thích hợp.

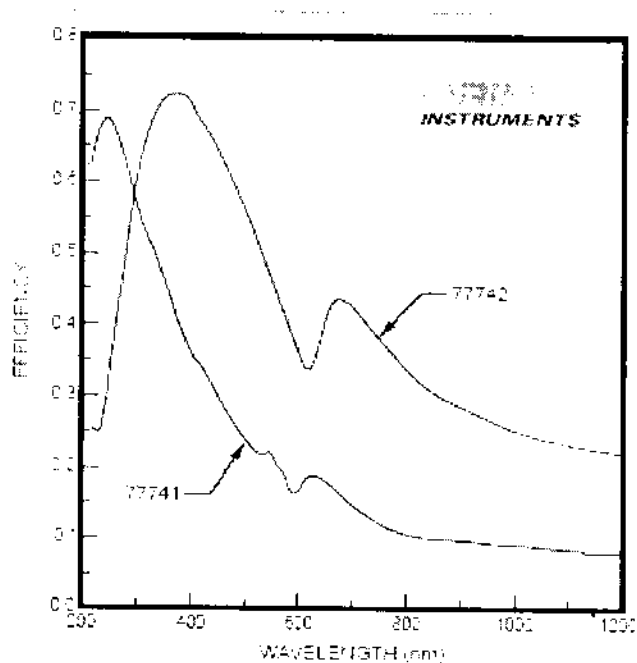


Hình 3.9. Quy ước về dấu của các góc tới i , góc nhiễu xạ r , góc cách tử θ . Trong hình các góc đều dương

3.2.3. Bước sóng chói

Khi một ánh sáng đơn sắc nhiễu xạ trên cách tử, tỷ lệ ánh sáng trên các bậc nhiễu xạ là khác nhau. Tỷ phần ánh sáng nhiễu xạ trên mỗi bậc được xem là hiệu suất của cách tử nhiễu xạ ở bậc đó. Các cách tử thường được thiết kế để nhiễu xạ hiệu quả ở bậc một. Trong một bậc nhiễu xạ, hiệu suất nhiễu xạ không như nhau với mọi bước sóng vì nhiều nguyên nhân. Hiệu suất này có thể tinh chỉnh điều hướng theo bước sóng bằng cách thay đổi góc mặt hoặc hình dạng và độ sâu của các rãnh trên mặt cách tử. Bước sóng chói là bước sóng được nhiễu xạ với hiệu suất cao nhất bởi cách tử. Trên hình 3.10 chỉ ra hai đường cong điển hình về sự phụ thuộc của hiệu suất cách tử vào bước sóng đối với cách tử vạch và cách tử holographic: 77741 là cách tử holographic, 77742 – cách tử vạch.

Cách tử holographic được chế tạo bằng phương pháp ảnh giao thoa holography và đôi khi còn sử dụng kèm quá trình khắc axit. Cách tử holographic có tiếng là tốt nhất nhưng cũng không phải luôn như vậy. Các cách tử với rãnh hình sin ít làm tán xạ ánh sáng nhưng lại có đường cong hiệu suất thấp và phẳng. Để tạo ra các cách tử holography chói người ta sử dụng phương pháp khắc axit trong quá trình giao thoa hoặc bắn ion để tạo ra góc chói trong một quá trình thứ cấp.



Hình 3.10. Đường cong biểu diễn sự phụ thuộc của hiệu suất cách tử vào bước sóng đối với cách tử vạch 77742 (1200vạch/mm; bước sóng chói 350nm) và cách tử holographic 77741 (1200vạch/mm, bước sóng chói 250nm) của hãng ORIEL.

Cách thứ nhất không tạo ra chói mạnh trong khi cách thứ hai tạo ra hiệu suất cách tử cao ở các bước sóng chói nhưng tán xạ ánh sáng tăng độ tạo ra các vi cấu trúc dọc theo mép rãnh. Người ta thường sử dụng tổ hợp cách tử vạch và cách tử holographic để đạt được độ chói, hiệu suất tốt nhất và tán xạ ánh sáng thấp đối với các vùng bước sóng khác nhau.

3.2.4. Độ tán sắc và năng suất phân giải của cách tử

a) Độ tán sắc

Xét một chùm sáng không đơn sắc chiếu vào cách tử dưới một góc tới xác định i . Lấy vi phân hai vế phương trình cách tử ta có:

$$d \cdot \cos r \cdot \delta r = m \delta \lambda$$

Vì $m/d = (\sin i + \sin r)/\lambda$ nên suy ra

$$G = \frac{\delta r}{\delta \lambda} = \frac{m}{d \cdot \cos r} = \frac{\sin i + \sin r}{\lambda \cdot \cos r}$$

$G = \delta r / \delta \lambda$ được gọi là độ tán sắc góc, đó chính là độ thay đổi góc nhiễu xạ ứng với một thay đổi nhỏ bước sóng. Từ công thức trên ta thấy độ tán sắc góc càng tăng khi chu kỳ cách tử d càng nhỏ và bậc nhiễu xạ m sử dụng cũng như góc nhiễu xạ r càng lớn.

Độ tán sắc dài ở khe sáng lối ra của máy đơn sắc sẽ phụ thuộc vào tiêu cự gương chuẩn trực lối ra f và góc nhiễu xạ r .

$$L = \frac{\delta x}{\delta \lambda} = f \cdot \frac{\delta r}{\delta \lambda} = \frac{f \cdot m}{d \cdot \cos r}$$

Ta nhận thấy độ tán sắc của cách tử không phụ thuộc vào bước sóng. Ví dụ, với cách tử 1200v/mm, $d = (1/1200)\text{mm}$; nếu bước sóng tính theo đơn vị nm ta có độ tán sắc dài L của máy đơn sắc cách tử với $f = 257\text{mm}$ là:

$$L = \frac{257 \cdot m \cdot 1200}{10^6 \cdot \cos r} \text{ mm/nm} = 0,61 \text{ mm/nm}$$

khí $r = 60^\circ$, $m = 1$ hay 1,66nm/mm

Thông thường người ta hay dùng đại lượng nghịch đảo của độ tán sắc cho biết độ tán sắc bước sóng trên khe lối ra đo bằng nm/mm.

b) Năng suất phân giải

Theo định nghĩa năng suất phân giải của cách tử: $R = \lambda / \delta \lambda$.

Trong đó $\delta \lambda$ là hiệu bước sóng của hai bức xạ đơn sắc còn có thể phân ly được bởi cách tử theo tiêu chuẩn Rayleigh, λ là bước sóng trung bình của chúng.

Nửa độ rộng góc của đường cong phân bố cường độ ánh sáng nhiễu xạ bởi cách tử theo tính toán là:

$$\Delta r = \frac{\lambda}{N \cdot d \cdot \cos r}$$

với N là số vạch sử dụng của cách tử.

Từ công thức độ tán sắc góc ta có khoảng cách góc giữa hai cực đại có bước sóng λ và $\lambda + \delta \lambda$ là: $\delta r = \frac{m \cdot \delta \lambda}{d \cdot \cos r}$

Theo tiêu chuẩn Rayleigh $\delta r = \Delta r$, suy ra $R = \lambda / \delta \lambda = N \cdot m$

Số vạch của cách tử $N = W/d$ với W là độ rộng được chiếu sáng của cách tử, d là chu kỳ cách tử. Từ đó ta có:

$$R = \frac{\lambda}{\delta\lambda} = \frac{W(\sin i + \sin r)}{\lambda}$$

Năng suất phân giải cao của cách tử theo tính toán trên là cần thiết nhưng năng suất phân giải thực tế còn phải tính đến độ rộng khe.

Ví dụ, cách tử 1200v/mm rộng 50mm được chiếu sáng đầy bởi bước sóng 500nm ở phổ bậc 1, năng suất phân giải của cách tử là $R = N.m = 1200.50 = 60\,000$. Từ đó ta có giới hạn phân ly $\delta\lambda = \lambda/R = 0,008\text{nm}$. Nếu máy đơn sắc dùng cách tử này có độ tán sắc dài nghịch đảo là 3,6nm/mm và khe lối ra có độ rộng 25μm thì độ rộng băng phổ của máy là 0,09nm (~0,1nm) tương ứng với năng suất phân giải của máy là: $\lambda/\delta\lambda = 500/0,1 = 5000$.

Như vậy, khi cách tử đã được chiếu sáng đầy, độ rộng khe chứ không phải năng suất phân giải của cách tử hay là quang sai quyết định năng suất phân giải của máy đơn sắc. Tuy nhiên nếu chiếu sáng cách tử không đúng, chẳng hạn một laser chiếu sáng chỉ 2mm độ rộng cách tử, thì năng suất phân giải của cách tử sẽ làm mở rộng độ rộng phổ đo được so với độ rộng phổ rất hẹp của laser.

Trong trường hợp máy quang phổ dùng CCD hay mạng diode, năng suất phân giải được xác định bởi độ rộng pixel.

3.2.5. Băng phổ truyền qua và năng suất phân giải của máy quang phổ

Băng phổ truyền qua là độ rộng phổ đi ra khỏi một máy đơn sắc hay máy quang phổ khi chiếu sáng khe máy bằng một nguồn sáng có phổ liên tục. Băng phổ truyền qua trong một máy quang phổ là rất rộng, chỉ bị giới hạn bởi độ mở lối ra. Trong máy quang phổ thiết kế với mạng diode, độ mở lối ra phù hợp với kích thước của mạng diode có thể dài đến 28mm.

Trong máy đơn sắc, băng phổ truyền qua có thể giảm bằng cách đóng khe đến độ rộng giới hạn. Giới hạn của băng phổ truyền qua được gọi là độ phân giải của thiết bị. Trong phân tích phổ độ phân giải là thước đo của thiết bị trong việc phân tách hai vạch phổ gần nhau. Ví dụ máy quang phổ với cách tử 1200v/mm có thể cho độ phân giải từ 0,1 đến 0,5nm trong miền phổ nhìn thấy. Khi chiếu sáng đầy cách tử, thì quang sai của hệ quang học

xác định độ phân giải của thiết bị. Trong hầu hết các thiết bị quang học quang sai có thể giảm tối thiểu nhờ chiếu sáng chỉ vùng trung tâm của khe lối vào.

Bằng phổ truyền qua có thể tính bằng tích độ tán sắc nghịch đảo và độ rộng khe.

Bảng 3.1. Một số ví dụ về cách tử của hãng Oriel (USA)

Số vạch/mm	Bước sóng chói (nm)	Loại	Vùng bước sóng (nm)	Model No
2400	250	Holographic	200 - 700	77740
1800	500	Holographic	300 - 1050	77763
1200	250	Holographic	180 - 650	77741
1200	350	Vạch (ruled)	200 - 1400	77742
1200	750	Vạch (ruled)	450 - 1400	77752
600	200	Vạch (ruled)	180 - 500	77743
600	400	Vạch (ruled)	250 - 1300	77744
600	1000	Vạch (ruled)	600 - 2500	77745
600	1250	Vạch (ruled)	750 - 3000	77767
600	1600	Vạch (ruled)	900 - 3000	77768
400	1200	Vạch (ruled)	700 - 2500	77746
400	1600	Vạch (ruled)	900 - 2900	77769
300	600	Vạch (ruled)	250 - 1150	77747
300	1000	Vạch (ruled)	975 - 2500	77770
300	2000	Vạch (ruled)	1100 - 3400	77748
246	226	Vạch (ruled)	190 - 450	77771
200	1000	Vạch (ruled)	600 - 2200	77749
150	300	Vạch (ruled)	190 - 800	77772
150	800	Vạch (ruled)	425 - 1600	77773
150	1250	Vạch (ruled)	725 - 2800	77774
150	4000	Vạch (ruled)	250 - 9000	77750
121	413	Vạch (ruled)	250 - 1000	77754
75	7000	Vạch (ruled)	4500 - 20000	77751

3.4. CÁC BÀN BƯỚC SÓNG VÀ MÁY BỎ CHÍNH ĐỘ PHÂN CỰC

Việc điều khiển chính xác trạng thái phân cực là cần thiết để nhận được sự hoạt động tối ưu của các linh kiện và hệ thống quang học. Các đặc trưng như độ phản xạ, sự mất mát trên mặt phân cách, và tỷ lệ tách chùm tia sẽ khác nhau đối với các trạng thái phân cực khác nhau. Các mối quan hệ phụ thuộc này cần được tính đến cẩn thận trong bất kỳ thiết kế quang học nào.

Sự phân cực cũng rất quan trọng vì nó có thể được dùng để truyền tín hiệu và thực hiện các phép đo nhạy. Thậm chí khi cường độ sáng không đổi, thông tin có giá trị vẫn có thể được truyền tải nhờ trạng thái phân cực của chùm sáng. Giải mã sự phân cực có thể nói lên chùm sáng đã thay đổi như thế nào bởi mọi tương tác với vật chất (tương tác từ, hoá, cơ,...). Các thiết bị thu nhận và đo đạc có thể được thiết kế hoạt động trên cơ sở thay đổi này của trạng thái phân cực.

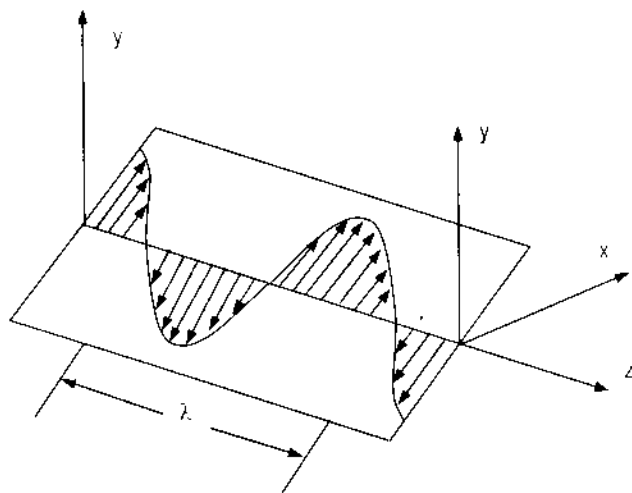
Trong mục này chúng ta sẽ đề cập đến các bàn bước sóng, máy bỏ chính và tác dụng của chúng trong việc làm thay đổi trạng thái phân cực của ánh sáng phân cực.

3.4.1. Các trạng thái phân cực của ánh sáng

Theo lý thuyết sóng về ánh sáng, ánh sáng là sóng điện từ, bao gồm điện trường $\mathbf{E}$ và từ trường $\mathbf{H}$ truyền với cùng vận tốc và trong cùng một hướng $\mathbf{k}$. Ở đây $\mathbf{E}$, $\mathbf{H}$ và $\mathbf{k}$ là các véc tơ, nghĩa là chúng có thể được biểu diễn bởi các mũi tên với cả độ lớn và phương chiều. Từ phương trình sóng Maxwell có thể biết rằng các vectơ $\mathbf{E}$ và $\mathbf{H}$ luôn luôn vuông góc với nhau và vuông góc với $\mathbf{k}$. Khi biết $\mathbf{E}$ ta có thể dễ dàng tính ra $\mathbf{H}$. Vì vậy người ta thường chỉ biểu diễn $\mathbf{E}$ và xác định sự phân cực của sóng theo định hướng của điện trường $\mathbf{E}$.

Có ba trạng thái phân cực cơ bản: phân cực thẳng, phân cực tròn và phân cực elip. Những thuật ngữ này mô tả quỹ đạo vạch ra bởi đầu mũi tên của véc tơ điện trường khi nó lan truyền trong không gian. Ánh sáng đi ra từ một laser có độ phân cực cao và hầu như là phân cực thẳng hoàn toàn. Mặt khác, ánh sáng không phân cực như trường hợp ánh sáng từ một bóng đèn, một LED, hoặc mặt trời, là sự chồng chất ngẫu nhiên của tất cả các trạng thái phân cực có thể. Hình ảnh tức thời của sóng phân cực thẳng được

mô tả trên hình 3.11. Chú ý rằng khoảng cách mà tại đó điện trường $\mathbf{E}$ được lặp lại là bằng một bước sóng, λ . Mặc dù điện trường $\mathbf{E}$ đổi hướng luân phiên, nó vẫn được giữ trong một mặt phẳng.



Hình 3.11. Sóng phân cực thẳng

Nếu quan sát sóng này tại một điểm cố định Z khi sóng truyền đi, ta có thể quan sát thấy đầu mũi tên vectơ $\mathbf{E}$ dao động lên và xuống dọc theo một đường thẳng. Góc θ của đường thẳng này với một hệ trục quy chiếu nào đó sẽ hoàn toàn đặc trưng cho trạng thái phân cực thẳng này. Hơn nữa, ta có thể phân tích sóng này thành 2 thành phần sóng phẳng theo các hướng của trục toạ độ:

$$\mathbf{E} = E_x \cos(\omega t - kz) + E_y \cos(\omega t - kz - l')$$

trong đó $\omega = 2\pi c/\lambda$ là tần số góc của sóng, k là hằng số truyền và c là vận tốc ánh sáng. Hai thành phần cosin thể hiện một sóng đơn sắc. E_x và E_y là các thành phần vuông góc của $\mathbf{E}$. Độ lớn của chúng xác định bởi công thức sau:

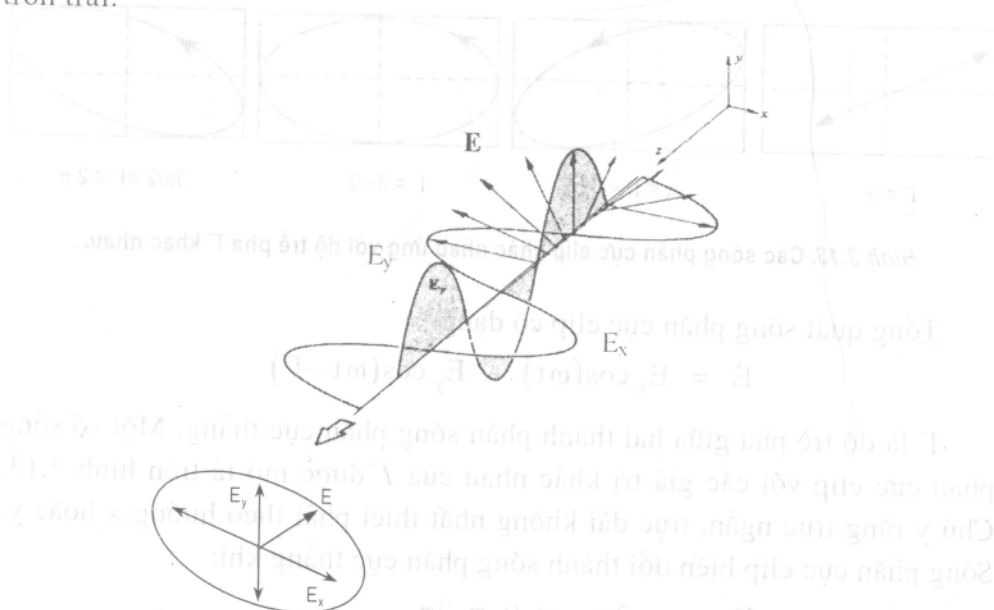
$$|E_x| = |E| \cos \theta$$

$$|E_y| = |E| \sin \theta$$

Độ lệch pha giữa hai thành phần này là $\Gamma = m\pi$ ($m = 0, 1, 2, 3, \dots$)

Nếu trong quá trình truyền sóng vectơ điện trường $\mathbf{E}$ của ánh sáng thay đổi sao cho đầu của vectơ $\mathbf{E}$ vạch thành một đường tròn xoắn ốc trong không gian thì ánh sáng được gọi là phân cực tròn. Hình 3.12 mô tả một

ánh sáng phân cực tròn với các vectơ điện $\mathbf{E}$ trên các vị trí dọc phương truyền (trục z) ở cùng một thời điểm (t). Nếu quan sát trên màn đặt tại một vị trí xác định (chẳng hạn $z = z_0$) theo hướng nhìn về nguồn sáng (sóng truyền đến người quan sát) ta thấy đầu véc tơ quay theo chiều kim đồng hồ thì ánh sáng được gọi là phân cực tròn phải. Ngược lại thì gọi là phân cực tròn trái.



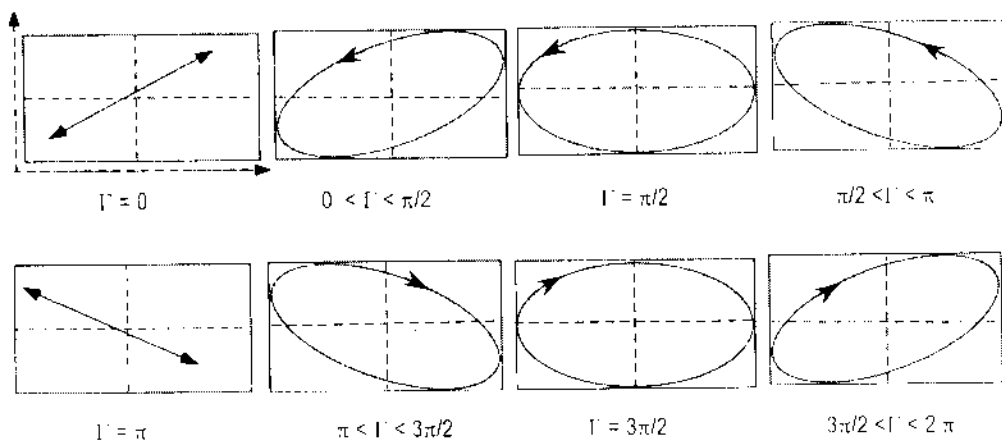
Hình 3.12. Sóng phân cực tròn

Ánh sáng phân cực tròn có thể biểu diễn là tổng của hai thành phần sóng phân cực thẳng, cùng tần số, cùng biên độ, phân cực theo hai hướng vuông góc với nhau nhưng lệch pha nhau là $\pi/2$. Do đó có thể biểu diễn bằng biểu thức sau:

$$\mathbf{E} = E_x \cos(\omega t) + E_y \sin(\omega t)$$

Trong đó $|E_x| = |E_y|$.

Nếu E_x và E_y không bằng nhau về độ lớn, thì ta thu được sóng phân cực elip. Ánh sáng phân cực elip cũng có hai loại phân cực phải và trái như phân cực tròn. Tuy nhiên, để mô tả đầy đủ một sóng elip, không những ta cần biết tỷ số của trục lớn trên trục nhỏ mà còn cần liên kết các trục với một số hệ quy chiếu khác như đặc tính phòng thí nghiệm, thiết bị, dụng cụ hoặc bộ dụng cụ thí nghiệm.



Hình 3.13. Các sóng phân cực elip khác nhau ứng với độ trễ pha Γ khác nhau.

Tổng quát sóng phân cực elip có dạng:

$$E = E_x \cos(\omega t) + E_y \cos(\omega t - \Gamma)$$

Γ là độ trễ pha giữa hai thành phần sóng phân cực thẳng. Một số sóng phân cực elip với các giá trị khác nhau của Γ được mô tả trên hình 3.13. Chú ý rằng trục ngắn, trục dài không nhất thiết phải theo hướng x hoặc y . Sóng phân cực elip biến đổi thành sóng phân cực thẳng khi:

$$\Gamma = \dots, -2\pi, -\pi, 0, \pi, 2\pi, \dots$$

Sự phân cực là tròn khi:

$$\Gamma = \dots, -3\pi/2, -\pi/2, \pi/2, 3\pi/2, \dots \text{ và } |E_x| = |E_y|.$$

Có thể thấy cả phân cực tròn và phân cực thẳng là các trường hợp đặc biệt của ánh sáng phân cực elip.

3.4.2. Các bản bước sóng và máy bỏ chính

Để có thể hiểu được cách sử dụng các bản bước sóng và máy bỏ chính nhằm thay đổi ánh sáng từ một trạng thái phân cực này thành trạng thái phân cực khác trước hết ta nhắc lại tính chất của các tinh thể đơn trục.

Khi ánh sáng đi qua một vật liệu trong suốt như một tinh thể, nó tương tác với các nguyên tử trong mạng. Hệ quả là tốc độ ánh sáng bên trong tinh thể chậm hơn trong chân không và không khí (thường là từ trên 1 đến 3 lần). Tốc độ ánh sáng biến thiên tỷ lệ nghịch với chiết suất tinh thể n , $v = c/n$. Chiết suất càng lớn thì ánh sáng đi càng chậm. Độ trễ pha Γ của

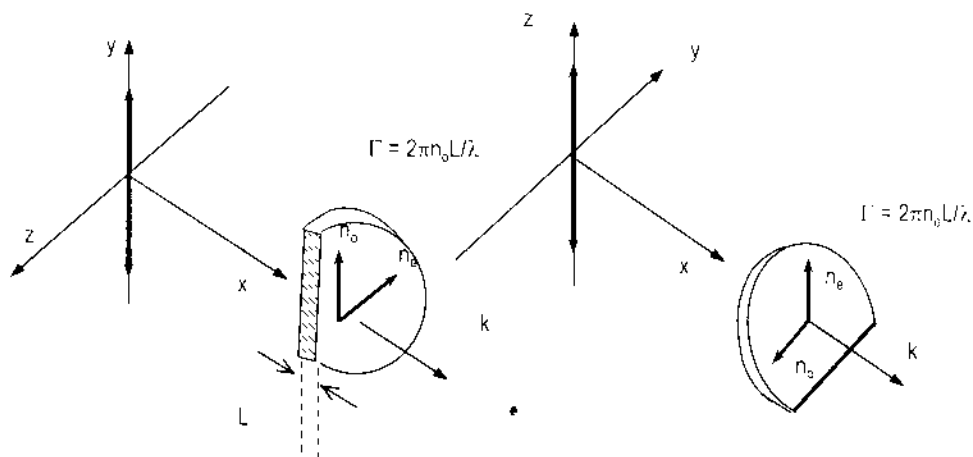
một sóng đơn sắc khi đi qua tinh thể được liên hệ với tốc độ truyền (chiết suất), bước sóng và quang trình L trong tinh thể này:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\lambda} n L \text{ (rad)}$$

Loại tinh thể đơn giản nhất là tinh thể đối xứng lập phương. Trong một tinh thể lập phương thì các trục tinh thể là tương đương nhau nên: $n_x = n_y = n_z$, và tinh thể là đẳng hướng quang học. Không cần để ý tới việc ánh sáng bị phân cực bởi tinh thể như thế nào, ánh sáng sau khi truyền qua sẽ có cùng chiết suất và độ trễ pha. Vì vậy, mọi ánh sáng phân cực ngoài việc nhận được một độ trễ pha không đổi, sẽ giữ nguyên trạng thái phân cực sau khi đi qua tinh thể đồng nhất, đẳng hướng (điều này cũng đúng cho các chất vô định hình như là thủy tinh).

Tuy nhiên, những nhóm các tinh thể bất đối xứng (hoặc bất đẳng hướng) có tính chất quang học hấp dẫn hơn. Chúng được biết đến như là các tinh thể lưỡng chiết. Một loại tinh thể lưỡng chiết là đơn trục, nghĩa là một trục của tinh thể khác với hai trục còn lại $n_z \neq n_x = n_y$. Các tinh thể đơn trục phổ biến có chất lượng quang học cao là thạch anh, calcite và MgF_2 .

Trục tinh thể đơn duy nhất được gọi là trục dị thường (đôi khi gọi là trục quang học), và chiết suất tương ứng của nó được ký hiệu là n_e hai trục còn lại gọi là trục thường với chiết suất n_o .



Hình 3.14. Sự quay tinh thể đơn trục làm thay đổi độ trễ pha đối với sóng phân cực thẳng

Ví dụ như trên hình 3.14, ánh sáng đi vào là phân cực thẳng dọc theo trục y của tinh thể, tác dụng như một sóng thường với chiết suất n_o . Quay tinh thể sao cho ánh sáng phân cực thẳng theo trục z của tinh thể, khi đó ánh sáng tác dụng như một sóng dị thường chiết suất n_e . Trong cả hai trường hợp này, độ trễ pha, hay quang trình sẽ khác ngay cả khi ánh sáng đi qua cùng một độ dày tinh thể. Theo thuật ngữ tinh thể, trong tinh thể đơn trục có trục nhanh và trục chậm. Trục có chiết suất nhỏ nhất là trục nhanh. Nếu $n_e > n_o$, như trường hợp của thạch anh, thì trục dị thường là trục chậm và trục thường là trục nhanh. Ngược lại, nếu $n_e < n_o$, như Calcite và MgF_2 , thì trục dị thường là nhanh và trục thường là chậm. Theo định nghĩa, tinh thể có $n_e > n_o$ được gọi là tinh thể đơn trục dương, tinh thể có $n_e < n_o$ gọi là tinh thể đơn trục âm.

a) Bản bước sóng và các ứng dụng

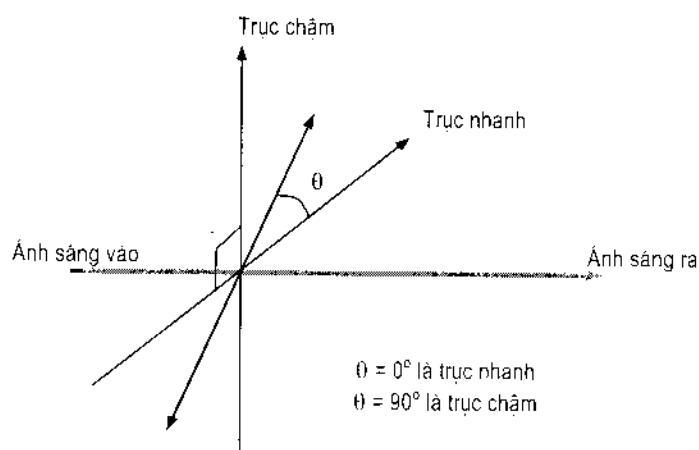
Các bản bước sóng lưỡng chiết hay các bản làm trễ là cực kỳ hữu ích đối với các ứng dụng khi ta muốn tổng hợp và phân tích ánh sáng có các trạng thái phân cực khác nhau. Ví dụ khi dùng bản $1/4$ bước sóng, ta có thể biến đổi chùm sáng tới phân cực thẳng thành phân cực tròn (hoặc elip) và ngược lại. Dùng một bản nửa bước sóng, ta có thể điều chỉnh liên tục góc phân cực của chùm phân cực thẳng. Chỉ cần hai loại bản bước sóng như thế này đã có thể xây dựng một bộ chấn quang học, một bộ suy hao có điều chỉnh hoặc một bộ tách chùm tia có tỷ lệ chia thay đổi được. Một bản bước sóng đơn giản là một tinh thể đơn trục được cắt thành bản hai mặt song song và mài bóng sao cho mặt phẳng lát cắt chứa quang trục tinh thể. Một chùm tia tới vuông góc với mặt bản bước sóng sẽ bị phân tách thành các thành phần theo trục thường và dị thường, với các chiết suất khác nhau. Chùm ló ra sẽ có sự trễ pha khác nhau, hay là có một sự trễ giữa các trục:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\lambda}(n_e - n_o)L \text{ (rad)}$$

Nếu ta chọn độ dày bản bước sóng là L sao cho độ trễ tương ứng là $\pi/2$, thì bản được gọi là bản $1/4$ bước sóng. Một độ dịch pha $\Gamma = \pi/2$ sẽ biến đổi ánh sáng phân cực thẳng thành phân cực tròn và ngược lại. Bản nửa bước sóng có độ trễ là π (rad). Như biểu diễn trên hình 3.13, độ trễ π sẽ làm xoay mặt phẳng dao động của ánh sáng phân cực thẳng. Nếu chùm tới có vectơ E tạo một góc θ với trục nhanh, ánh sáng ra sẽ có E xoay một góc 2θ quanh trục nhanh. Điều này đặc biệt thuận lợi khi dùng nguồn sáng

laser hoặc làm việc với các thiết bị kích thước quá lớn, khó có thể quay. Một phần tư hay là nửa bước sóng không phải là độ dày thực của các bản bước sóng mà chỉ là giá trị để so sánh. Tất cả các bản bước sóng có độ dày cố định được ghi rõ bước sóng được thiết kế (ví dụ 1/4 bước sóng ở 632,8nm). Hơn nữa, chiết suất của tất cả các vật liệu phụ thuộc mạnh vào bước sóng, nên sẽ là sai khi ta cho rằng bản 1/4 bước sóng thiết kế cho 1060nm sẽ là bản 1/2 bước sóng đối với ánh sáng bước sóng 530nm.

Trong bảng 3.1 là tổng hợp các ứng dụng thông thường của các bản bước sóng. Để tuân theo quy luật trong bảng này, cần xác định trục nhanh, trục chậm của bản bước sóng và sau đó quay bản bước sóng sao cho trạng thái phân cực của ánh sáng vào và ra là ở vị trí đúng (hình 13.15).



Hình 3.15. Hệ trục tọa độ xác định trạng thái phân cực

Bảng 3.1. Thay đổi sự phân cực nhờ các bản bước sóng.

Lối vào	Lối ra
Bản 1/4 bước sóng	
Phân cực thẳng, $\theta = 45^\circ$	Phân cực tròn trái
Phân cực thẳng, $\theta = -45^\circ$	Phân cực tròn phải
Phân cực tròn phải	Phân cực thẳng, $\theta = 45^\circ$
Phân cực tròn trái	Phân cực thẳng, $\theta = -45^\circ$
Phân cực thẳng, $\theta \neq 45^\circ$	Phân cực elip

Lối vào	Lối ra
Bản nửa bước sóng	
Phân cực thẳng, θ	Phân cực thẳng, $-\theta$
Phân cực tròn trái	Phân cực tròn phải
Phân cực tròn phải	Phân cực tròn trái
Các bản bước sóng	
Phân cực thẳng, $\theta = 0^\circ$ hoặc 90°	Không đổi

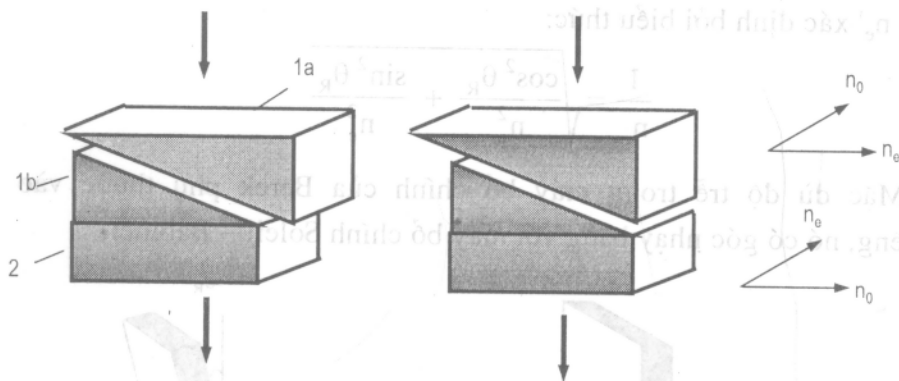
Trong thực nghiệm, rất khó làm nhẵn một bản bước sóng cho độ trễ nhỏ hơn 1 bước sóng. Tinh thể sẽ rất mỏng, dễ vỡ và không chính xác. Thực tế người ta không làm như vậy. Do các sóng được lặp lại sau một chu kỳ (pha 2π), nên độ trễ có thể sai khác một số nguyên lần 2π . Các bản bước sóng thực tế có độ dày lớn hơn. Thay cho độ trễ $\pi/2$, bản $1/4$ bước sóng thực tạo ra độ trễ $2n\pi + \pi/2$, n là một số nguyên được gọi là bậc của bản bước sóng.

Tuy nhiên, các bản bước sóng nhiều bậc hoạt động không được chính xác như các bản bước sóng bậc 0. Nếu thay đổi bước sóng của laser hoặc của nguồn sáng thì có thể thấy rằng độ trễ của các bản bước sóng bậc cao sẽ thay đổi nhanh hơn bản bước sóng bậc 0. Độ trễ bản bậc cao là $2n + 1$ lần nhạy hơn khi nghiêng bản một góc xung quanh tia tới vuông góc. Điều này cũng có nghĩa là sự nghiêng một góc rất nhỏ có thể được dùng để điều chỉnh một bản sóng bậc cao. Nhưng cũng có nghĩa là sai số lớn hơn sẽ xuất hiện khi các tia sáng không song song, mà là chùm hội tụ hoặc phân kỳ. Đối với các phép đo chính xác, vẫn cần có các bản bước sóng bậc 0. Chúng được tạo ra bằng cách kết hợp hai bản bước sóng sao cho hiệu độ trễ của hai bản đúng bằng độ trễ mong muốn. Các bản bước sóng bậc 0 ít nhạy với sự lệch góc, sự thay đổi bước sóng và nhiệt độ.

b) Máy bố chính Soleil – Babinet và Berek

Công nghệ hiện nay đã tạo được các bản bước sóng bậc 0 với độ trễ có thể điều chỉnh được. Một bản bước sóng có độ trễ thay đổi được gọi là máy bố chính phân cực, và nó có thể được dùng để đạt được bất kỳ độ trễ nào,

bao gồm cả bản 1/4 bước sóng và bản 1/2 bước sóng, đối với một khoảng rộng các bước sóng. Chúng ta sẽ nói về 2 loại máy bổ chính: máy bổ chính Soleil – Babinet và máy bổ chính của Berek.



Hình 3.16. Máy bổ chính Soleil – Babinet.

Độ trễ được điều chỉnh bằng cách thay đổi độ dày hiệu dụng của bản 1.

Máy bổ chính Soleil – Babinet gồm hai bản tinh thể đơn trục ghép với nhau. Các trục dị thường của hai bản đặt vuông góc với nhau nên vai trò của trục thường và trục dị thường là đảo cho nhau khi ánh sáng lần lượt đi xuyên qua bản thứ nhất rồi bản thứ 2. Độ lệch pha hoặc độ làm trễ tạo ra được nhờ bản thứ nhất có thể mất đi một phần hoặc hoàn toàn bởi bản thứ 2. Máy bổ chính có độ trễ thay đổi được nhờ thay thế bản thứ nhất bằng hai cái nêm phụ 1a và 1b (hình 3.16). Bằng cách này, độ dày hiệu dụng của bản thứ nhất có thể điều chỉnh bởi sự trượt nêm này đối với nêm kia. Khi độ dày bản thứ nhất bằng độ dày bản thứ 2 thì không có độ trễ.

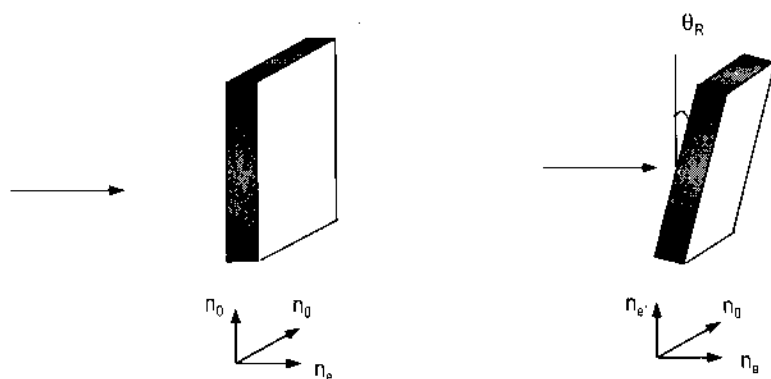
Máy bổ chính Soleil – Babinet rất đắt vì nó yêu cầu 3 tinh thể đơn trục được gia công và lắp đặt rất cẩn thận. Mặt hạn chế khác của Soleil – Babinet là gây mất mát quang học nhiều do sự phản xạ từ 6 mặt của thiết bị.

Loại máy bổ chính thứ 2, máy bổ chính của Berek rất hấp dẫn vì nó chỉ cần một bản tinh thể đơn trục, do đó mà giảm được chi phí và giảm được mất mát quang học, trong khi vẫn giữ được các khả năng như bổ chính Soleil – Babinet. Máy bổ chính phân cực của Berek (hình 3.17) bao gồm 1 bản tinh thể được cắt sao cho trục dị thường vuông góc với mặt bản. Khi ánh sáng tới vuông góc với bản, nó được truyền với vận tốc không phụ

thuộc vào sự phân cực. Không có sự trễ vì ánh sáng chỉ có chiết suất n_o . Nhưng khi bản được làm nghiêng đi với chùm sáng, một trục trong mặt phẳng tới chuyển thành gần dị thường. Trục này bây giờ có chiết suất hiệu dụng n_e' xác định bởi biểu thức:

$$\frac{1}{n_e'} = \sqrt{\frac{\cos^2 \theta_R}{n_o^2} + \frac{\sin^2 \theta_R}{n_e^2}}$$

Mặc dù độ trễ trong máy bỏ chính của Berek phụ thuộc vào độ nghiêng, nó có góc nhảy bằng với máy bỏ chính Soleil – Babinet.



Hình 3.17. Máy bỏ chính Berek.

Trục dị thường vuông góc với bản. Sự nghiêng dẫn đến lưỡng chiết và trễ pha.

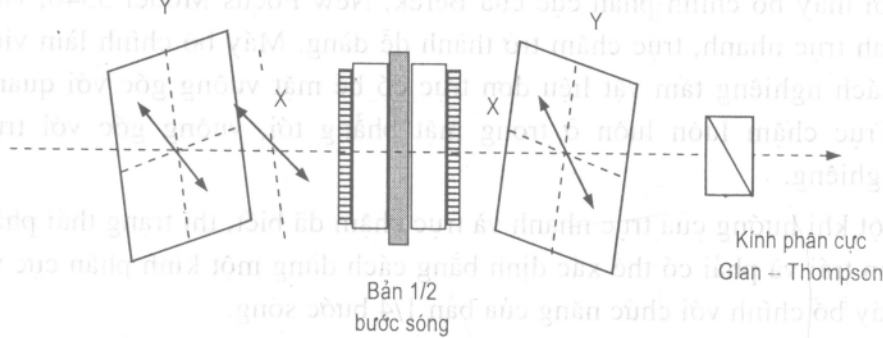
Kiểm tra các trạng thái phân cực

Ta có thể thu được và xác minh bất kỳ trạng thái phân cực nào khi dùng 1 kính phân cực và 1 bản bước sóng, ví dụ như máy bỏ chính Berek, New Focus Model 5540.

Ví dụ 1: Xoay hướng phân cực của ánh sáng

Bản nửa bước sóng làm thay đổi sự định hướng của ánh sáng phân cực thẳng một góc 2θ , ở đây θ là góc giữa hướng phân cực của ánh sáng tới và trục nhanh của bản nửa bước sóng (hình 3.18).

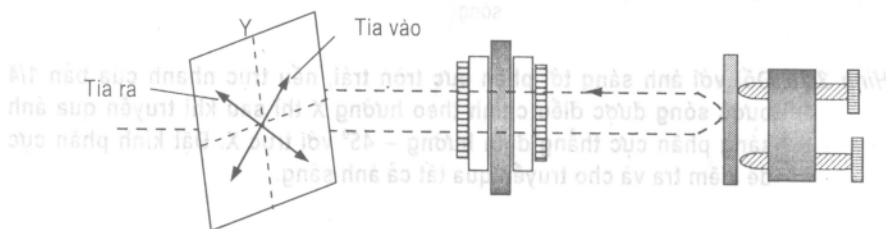
Để xác minh hướng phân cực thẳng của ánh sáng ló đã đúng như mong muốn, phải định hướng kính phân cực (chẳng hạn dùng lăng kính Glan – Thompson) sao cho nó ngăn lại sự phân cực mong muốn.



Hình 3.18. Bản nửa bước sóng tạo ra mối quan hệ khác pha π (rad) giữa các sóng trục nhanh và trục chậm. Nếu ánh sáng tới là phân cực một góc α so với trục nhanh, thì ánh sáng ra sẽ bị quay một góc 2α so với trục nhanh. Các bản 1/2 bước sóng cũng có thể làm đảo khung ánh sáng phân cực tròn hoặc elip.

Ví dụ 2: Biến ánh sáng phân cực thẳng thành tròn

Bản 1/4 bước sóng có thể biến ánh sáng phân cực thẳng thành phân cực tròn khi ánh sáng tới phân cực một góc 45° với trục nhanh của bản. Để xác minh rằng ta đã có ánh sáng phân cực tròn, người ta cho ánh sáng truyền qua phân xạ ngược lại bản 1/4 bước sóng (hình 3.19). Nếu sau khi phản xạ hướng phân cực của ánh sáng trở thành trục giao với hướng phân cực của ánh tới thì ánh sáng đúng là phân cực tròn. Muốn vậy ta dùng một kính phân cực đặt trước bản $\lambda/4$ và xoay tới khi kính phân cực truyền qua ánh sáng tới sẽ chặn lại chùm phản xạ.



Hình 3.19. Bản 1/4 bước sóng tạo ra dịch pha $\pi/2$ giữa hai thành phần sóng theo trục nhanh và trục chậm, làm thay đổi ánh sáng phân cực thẳng thành ánh sáng phân cực elip. Trong trường hợp đặc biệt khi ánh sáng tới định hướng 45° so với các trục thì ánh sáng trở thành phân cực tròn.

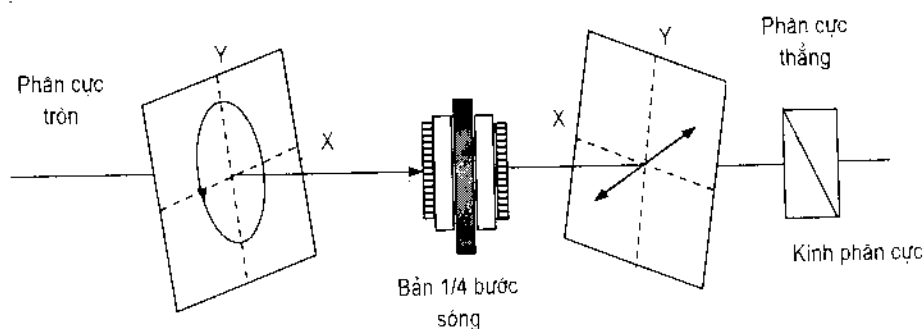
Ví dụ 3: Phân biệt phân cực tròn phải và tròn trái

Xác định chiều phân cực phải hay trái là rất khó nếu ta không biết định hướng trục nhanh và trục chậm của bản bước sóng.

Với máy bố chính phân cực của Berek, New Focus Model 5540, việc xác định trục nhanh, trục chậm trở thành dễ dàng. Máy bố chính làm việc bằng cách nghiêng tấm vật liệu đơn trục có bề mặt vuông góc với quang trục. Trục chậm luôn luôn ở trong mặt phẳng tới, vuông góc với trục quay nghiêng.

Một khi hướng của trục nhanh và trục chậm đã biết, thì trạng thái phân cực tròn trái và phải có thể xác định bằng cách dùng một kính phân cực và một máy bố chính với chức năng của bản 1/4 bước sóng.

Khi ánh sáng tới là phân cực tròn trái, nếu trục chậm của bản 1/4 bước sóng hướng dọc theo trục y, thì ánh sáng đi ra khỏi bản sóng sẽ là phân cực thẳng với góc -45° so với trục x và truyền qua kính phân cực như trong hình 3.20. Định hướng kính phân cực để kiểm tra và cho truyền qua ánh sáng. Với cấu hình này nếu ánh sáng tới là phân cực tròn phải thì sẽ bị ngăn lại. Quay bản bước sóng hoặc kính phân cực 90° thì sẽ cho kết quả ngược lại.



Hình 3.20. Đối với ánh sáng tới phân cực tròn trái, nếu trục nhanh của bản 1/4 bước sóng được điều chỉnh theo hướng X thì sau khi truyền qua ánh sáng phân cực thẳng định hướng -45° với trục X. Đặt kính phân cực để kiểm tra và cho truyền qua tất cả ánh sáng.

3.5. GIAO THOA KẾ FABRY – PEROT

Giao thoa kế Fabry – Perot do Charles Fabry và Alfred Perot chế tạo lần đầu tiên vào cuối thế kỷ XIX đóng vai trò khá quan trọng trong quang học hiện đại. Ngoài việc đó là một dụng cụ quang phổ học có năng suất phân giải cực cao, nó còn được dùng làm buồng cộng hưởng quang học laser.

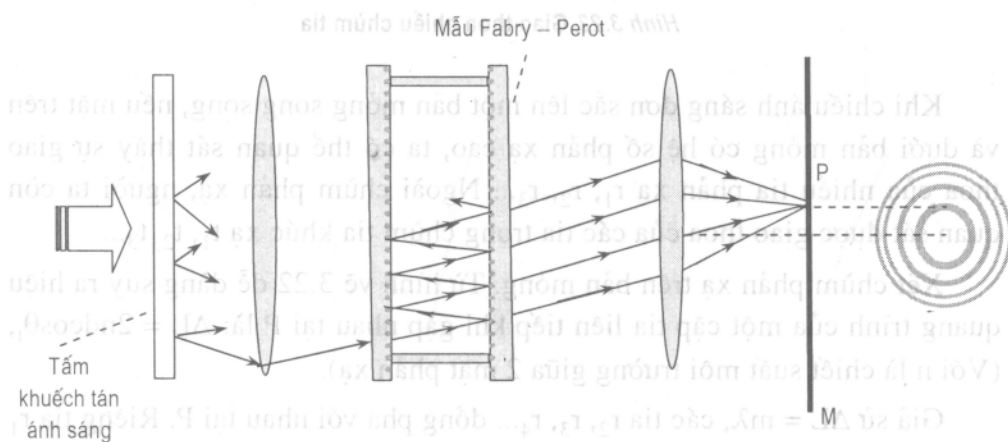
3.5.1. Cấu tạo

Giao thoa kế Fabry – Perot gồm hai mặt phẳng song song có độ phản xạ cao, đặt cách nhau một khoảng nhất định.

Đó có thể là hai tấm thủy tinh quang học bán mạ bạc hoặc nhôm có mặt phản xạ đặt đối diện với nhau trong không khí và cách nhau một khoảng không đổi d . Khi sử dụng trong quang phổ học, d vào khoảng từ vài milimet đến vài centimet. Khoảng cách này lớn hơn nhiều khi dùng làm buồng cộng hưởng laser. Khi khoảng cách d thay đổi được một cách cơ học nhờ dịch chuyển một gương thì dụng cụ được gọi là giao thoa kế Fabry – Perot. Khi hai gương đặt song song một khoảng cách d cố định thì được gọi là mẫu Fabry – Perot.

Vật phân cách hai gương thường là thủy tinh Invar hoặc Quartz có hệ số giãn nở nhỏ. Hai gương sẽ được ép chặt lên vật phân cách này (hình 3.21). Lớp phản xạ được mạ trên bề thủy tinh dạng nêm có hai mặt không song song để tránh giao thoa phụ không mong muốn (góc nêm $\alpha \cong$ vài phút góc).

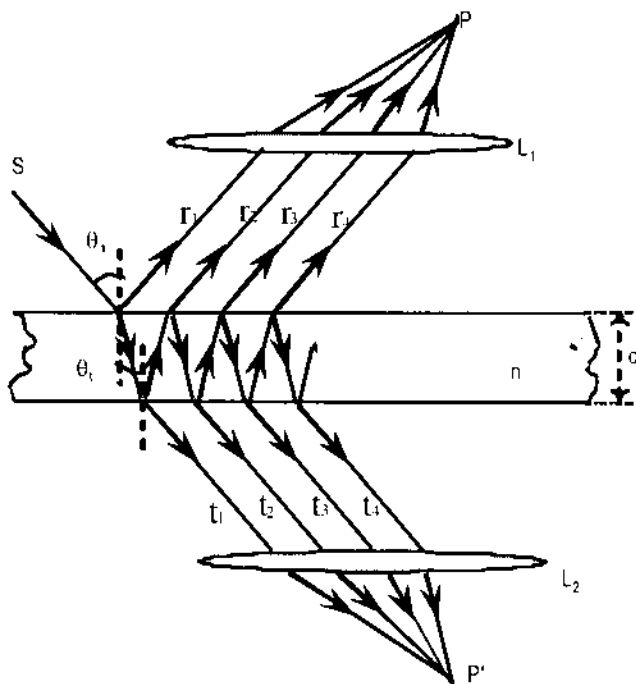
Một tấm thạch anh hai mặt song song, đánh bóng hoặc mạ bạc cũng có thể dùng làm một mẫu Fabry – Perot.



Hình 3.21. Cấu tạo và hoạt động của mẫu Fabry – Perot

Trên hình 3.21, mẫu Fabry – Perot được chiếu sáng bởi nguồn sáng rộng như đèn Hg hoặc chùm tia laser He – Ne được mở rộng vài cm nhờ một telescope. Hình ảnh giao thoa trên màn M là hệ các vòng tròn sáng đồng tâm bán kính tăng không đều. Để thu được các vân sáng có độ rơi đều, nguồn S thường là một tấm khuếch tán đều ánh sáng.

3.5.2. Nguyên tắc hoạt động



Hình 3.22. Giao thoa nhiều chùm tia

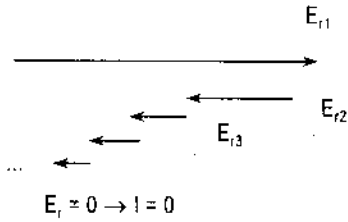
Khi chiếu ánh sáng đơn sắc lên một bản mỏng song song, nếu mặt trên và dưới bản mỏng có hệ số phản xạ cao, ta có thể quan sát thấy sự giao thoa của nhiều tia phản xạ $r_1, r_2, r_3, \dots$. Ngoài chùm phản xạ, người ta còn quan sát được giao thoa của các tia trong chùm tia khúc xạ $t_1, t_2, t_3, \dots$.

Xét chùm phản xạ trên bản mỏng. Từ hình vẽ 3.22 dễ dàng suy ra hiệu quang trình của một cặp tia liên tiếp khi gặp nhau tại P là: $\Delta L = 2nd\cos\theta_i$, (Với n là chiết suất môi trường giữa 2 mặt phản xạ).

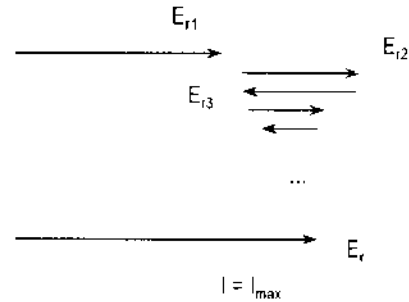
Giả sử $\Delta L = m\lambda$, các tia $r_2, r_3, r_4, \dots$ đồng pha với nhau tại P. Riêng tia r_1 do bị đảo pha khi phản xạ nên sẽ bị ngược pha với các tia còn lại. Giá đồ vectơ biểu diễn như trên hình 3.23a.

Như vậy, khi $\Delta L = 2nd\cos\theta_i = m\lambda$ sóng tổng hợp tại P có cường độ bằng không (cực tiểu giao thoa). Ngược lại, khi $\Delta L = 2nd\cos\theta_i = (m + 1/2)\lambda$ các cặp tia liên tiếp trong chùm phản xạ ngược pha nhau, trừ tia r_1 và r_2 . Từ biểu diễn vectơ trên hình 3.23b ta thấy cường độ sáng tổng hợp được tăng cường dẫn tới cực đại giao thoa.

Đối với chùm truyền qua, do không có hiện tượng đảo pha trạng thái giao thoa chỉ phụ thuộc vào hiệu quang trình.



Hình 3.23a



Hình 3.23b

Nếu $\Delta L = 2nd\cos\theta_t = m\lambda$, các tia truyền qua đồng pha cho cường độ ánh sáng tổng hợp cực đại.

Nếu $\Delta L = 2nd\cos\theta_t = (m + 1/2)\lambda$, từng cặp tia ngược pha triệt tiêu lẫn nhau dẫn tới sóng ánh sáng tổng hợp cực tiểu.

Có thể thấy rõ điều kiện giao thoa cho chùm phản xạ và chùm khúc xạ đảo ngược cho nhau. Sau đây ta sẽ tính biểu thức cường độ sóng tổng hợp cho chùm phản xạ và chùm khúc xạ.

Ký hiệu: t là hệ số truyền qua biên độ khi sóng tổng hợp đi vào bản mỏng; t' là hệ số truyền qua biên độ khi sóng tổng hợp đi ra bản mỏng; r là hệ số phản xạ biên độ ở mặt trên bản mỏng; r' là hệ số phản xạ biên độ ở mặt trong bản mỏng.

Do phản xạ ngoài bản mỏng bị đảo pha nên $r = -r'$. Dùng biểu diễn phức cho sóng ánh sáng ta có thể viết: $E_t = E_0 \cdot e^{i\omega t}$ (sóng tới)

Biểu thức sóng của các tia phản xạ tại P là:

$$\begin{aligned} E_{r1} &= E_0 \cdot r \cdot e^{i\omega t} \\ E_{r2} &= E_0 \cdot t \cdot r' \cdot t' \cdot e^{i(\omega t - \Delta\phi)} \\ + E_{r3} &= E_0 \cdot t \cdot r'^3 \cdot t' \cdot e^{i(\omega t - 2\Delta\phi)} \\ &\dots \\ E_{rN} &= E_0 \cdot t \cdot r'^{(2N-3)} \cdot t' \cdot e^{i[\omega t - (N-1)\Delta\phi]} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_r &= E_0 \cdot e^{i\omega t} \{ r + r' \cdot t \cdot t' \cdot e^{-i\Delta\phi} [1 + (r'^2 \cdot e^{-i\Delta\phi}) + \\ &+ (r'^2 \cdot e^{-i\Delta\phi})^2 + \dots + (r'^2 \cdot e^{-i\Delta\phi})^{N-2}] \} \end{aligned}$$

Chú ý là: r' luôn xuất hiện với số mũ lẻ do số lần phản xạ trong là lẻ. $\Delta\varphi$ là hiệu số pha giữa hai tia phản xạ liên tiếp $\Delta\varphi = (2\pi/\lambda) \cdot \Delta L$.

Nếu số hạng: $r'^2 \cdot e^{-i\Delta\varphi} < 1$ và số số hạng trong tổng trên là vô hạn thì chuỗi số này hội tụ và biểu thức sóng tổng hợp là:

$$E_r = E_0 \cdot e^{i\omega t} \left[r + \frac{r' \cdot t \cdot t' \cdot e^{-i\Delta\varphi}}{1 - r'^2 \cdot e^{-i\Delta\varphi}} \right]$$

Giả sử môi trường bản mỏng không hấp thụ ánh sáng, với chú ý: $r = -r'$ thì $tt' = 1 - r'^2$. Ta có:

$$E_r = E_0 \cdot e^{i\omega t} \left[\frac{r(1 - e^{-i\Delta\varphi})}{1 - r'^2 \cdot e^{-i\Delta\varphi}} \right]$$

Cường độ sóng phản xạ I_r tại P khi đó là: $I_r = E_r \cdot E_r^* / 2$

$$I_r = \frac{E_0^2 r^2 (1 - e^{-i\Delta\varphi})(1 - e^{+i\Delta\varphi})}{2(1 - r'^2 \cdot e^{-i\Delta\varphi})(1 - r'^2 \cdot e^{+i\Delta\varphi})}$$

Đặt $I_i = E_0^2 / 2$ - là cường độ sóng tới, sau biến đổi ta có:

$$I_r = I_i \frac{2r^2 \cdot (1 - \cos \Delta\varphi)}{(1 + r^4) - 2r^2 \cos \Delta\varphi}$$

Tương tự ta có thể tính được cường độ sóng tổng hợp của chùm truyền qua tại P' là:

$$\begin{aligned} E_{t1} &= E_0 \cdot t \cdot t' \cdot e^{i\omega t} \\ E_{t2} &= E_0 \cdot t \cdot t' \cdot r'^2 \cdot e^{i(\omega t - \Delta\varphi)} \\ + \quad E_{t3} &= E_0 \cdot t \cdot t' \cdot r'^4 \cdot e^{i(\omega t - 2\Delta\varphi)} \\ &\dots \\ E_{tN} &= E_0 \cdot t \cdot t' \cdot r'^{2(N-1)} \cdot e^{i[\omega t - (N-1)\Delta\varphi]} \end{aligned}$$

$$E_t = E_0 \cdot e^{i\omega t} \left[\frac{t \cdot t' \cdot e^{-i\Delta\varphi}}{1 - r'^2 \cdot e^{-i\Delta\varphi}} \right]$$

$$[\text{chuỗi } 1 + (r'^2 \cdot e^{-i\Delta\varphi}) + \dots + (r'^2 \cdot e^{-i\Delta\varphi})^{N-1} = \left[\frac{1}{1 - r'^2 \cdot e^{-i\Delta\varphi}} \right]]$$

Lấy liên hợp phức, sau biến đổi ta có biểu thức cường độ sóng tổng hợp của chùm truyền qua:

$$I_t = \frac{I_i \cdot (tt')^2}{(1 + r^4) - 2r^2 \cos \Delta\varphi}$$

Với giả thiết môi trường không hấp thụ:

$tt' + r^2 = 1$, và chú ý $\cos\Delta\varphi = 1 - 2\sin^2(\Delta\varphi/2)$ ta có:

$$I_r = I_i \frac{\left[2r/(1-r^2)\right]^2 \cdot \sin^2(\Delta\varphi/2)}{1 + \left[2r/(1-r^2)\right]^2 \cdot \sin^2(\Delta\varphi/2)}$$

$$I_t = I_i \frac{1}{1 + \left[2r/(1-r^2)\right]^2 \cdot \sin^2(\Delta\varphi/2)}$$

Ký hiệu $F = \left(\frac{2r}{1-r^2}\right)^2$ - gọi là hệ số tính tế F .

Ta có thể viết lại hai biểu thức trên như sau:

$$\frac{I_r}{I_i} = \frac{F \cdot \sin^2(\Delta\varphi/2)}{1 + F \cdot \sin^2(\Delta\varphi/2)} \text{ với } I_t = I_0^2/2;$$

$$F = \left(\frac{2r}{1-r^2}\right)^2 = \frac{4R}{(1-R)^2}, \quad R = r^2$$

$$\frac{I_t}{I_i} = \frac{1}{1 + F \cdot \sin^2(\Delta\varphi/2)} = A(\theta) - \text{còn được gọi là hàm Airy}$$

$R = r^2$ là hệ số phản xạ cường độ

Như vậy ta có:

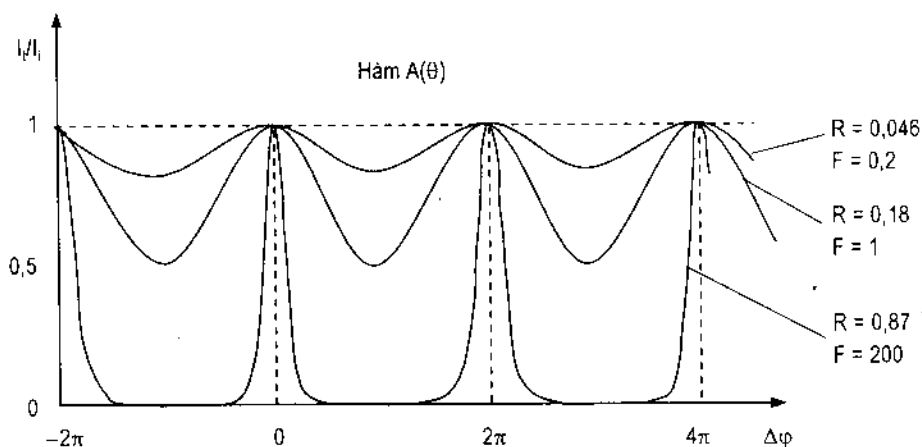
$$\frac{I_t}{I_i} = A(\theta); \quad \frac{I_r}{I_i} = 1 - A(\theta)$$

Từ đây ta có thể biểu diễn sự phụ thuộc của cường độ ánh sáng giao thoa của chùm truyền qua và phản xạ theo hiệu số pha $\Delta\varphi$ (hình 3.24).

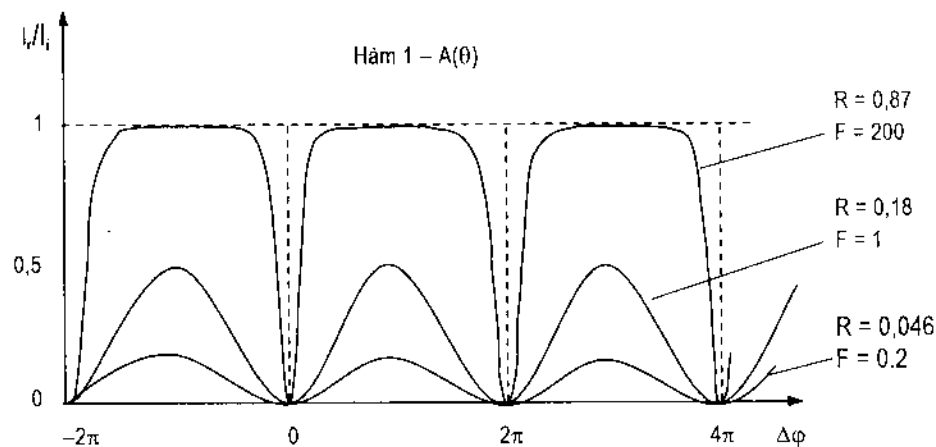
$$\text{Do } \Delta\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \Delta L \text{ và } \Delta L = 2nd \cos\theta_i = 2d\sqrt{n^2 - \sin^2\theta_i}$$

nên hàm Airy phụ thuộc vào góc θ_i . Với những góc nghiêng xác định của chùm sáng tới trên giao thoa kế ta có thể thu được các vân giao thoa sắc nét, hẹp khi hệ số phản xạ r cao (hệ số tính tế F lớn).

Khi quan sát giao thoa của chùm truyền qua các vân sáng hẹp nổi lên trên một nền tối rất dễ quan sát. Ngược lại, trong giao thoa của chùm phản xạ, ta sẽ quan sát được các vân tối hẹp trên nền sáng. Vì vậy trong thực tế, người ta thường sử dụng giao thoa với ánh sáng truyền qua.



Hình 3.24a. Phân bố cường độ ánh sáng giao thoa đối với chùm truyền qua



Hình 3.24b. Phân bố cường độ ánh sáng giao thoa đối với chùm phản xạ

3.5.3. Các đặc trưng của giao thoa kế

a) Khoảng cách góc giữa các vân sáng

Theo điều kiện giao thoa cực đại đối với chùm sáng truyền qua:

$$\Delta L = 2nd \cos \theta_i = m\lambda; m = 0, 1, 2, \dots \quad (3.1)$$

Xét chùm sáng tới đơn sắc λ không đổi. Lấy vi phân 2 vế phương trình trên theo θ_i và theo m ta được:

$$-2nd \sin \theta_i \cdot \Delta \theta_i = \Delta m \cdot \lambda$$

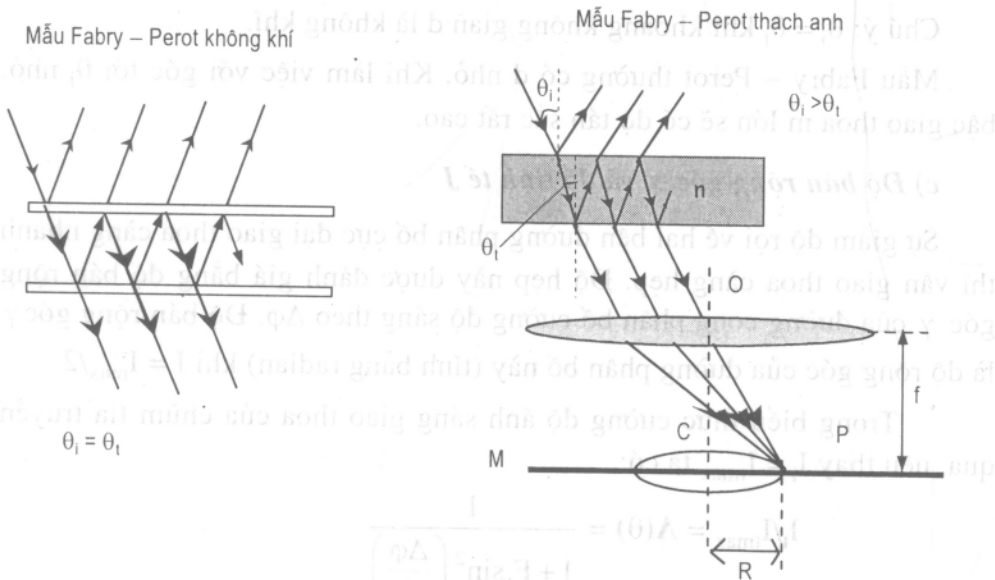
Với $\Delta m = -1$ suy ra: $\Delta \theta_i = \lambda / 2nd \sin \theta_i \quad (3.2)$

Như vậy khi mẫu Fabry – Perot có khoảng cách d nhỏ thì các vân tròn sáng giao thoa cách xa nhau hơn và khi góc tới θ_i tăng, $\sin\theta_i$ tăng, $\Delta\theta_i$ giảm dẫn đến khi ra xa dần tâm tròn các vân sáng xít gần lại với nhau hơn.

Dễ dàng thấy rằng bán kính của vân tròn sáng giao thoa này sẽ là:

$$R_v = f \cdot \tan\theta_i$$

Trong đó f là tiêu cự thấu kính hội tụ sử dụng.



Hình 3.25. Sự tạo thành vân giao thoa

Cũng từ điều kiện giao thoa cực đại ta có:

$$\cos\theta_i = m\lambda/2nd.$$

Với giá trị m lớn sẽ ứng với góc θ_i nhỏ. Như vậy các vân giao thoa ở gần tâm có bậc giao thoa lớn hơn ở xa tâm.

Giả sử tại tâm hệ vân ứng với $\theta_i = 0$, $\theta_t = 0$, $\cos\theta_i = 1$ từ (3.1) ta có $m = 2nd/\lambda$ là bậc giao thoa lớn nhất.

b) Độ tán sắc

Khi nguồn sáng không đơn sắc, từ điều kiện giao thoa $2nd \cos\theta_i = m\lambda$, ta thấy cùng bậc giao thoa m , các sóng đơn sắc với λ khác nhau sẽ hình thành ở các vị trí ứng với góc θ_i khác nhau dẫn đến tán sắc ánh sáng. Vân giao thoa trở nên có màu sắc. Nói cách khác là giao thoa kế Fabry – Perot có khả năng tán sắc ánh sáng.

Lấy vi phân hai vế biểu thức $2nd\cos\theta_i = m\lambda$ theo θ_i và λ tương ứng ta được:

$$-2nd\sin\theta_i \cdot \Delta\theta_i = m \cdot \Delta\lambda.$$

Độ tán sắc theo định nghĩa là:

$$D = \left| \frac{\Delta\theta_i}{\Delta\lambda} \right| = \left| \frac{\Delta\theta_i}{\Delta\lambda} \right| = \frac{m}{2nd\sin\theta_i} \quad (3.3)$$

Chú ý: $\theta_i = \theta_t$ khi khoảng không gian d là không khí.

Mẫu Fabry – Perot thường có d nhỏ. Khi làm việc với góc tới θ_i nhỏ, bậc giao thoa m lớn sẽ có độ tán sắc rất cao.

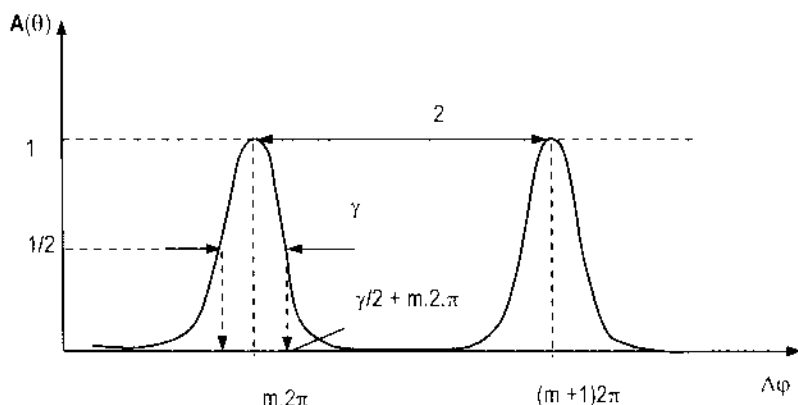
c) Độ bán rộng góc γ và độ tinh tế J

Sự giảm độ rộng về hai bên đường phân bố cực đại giao thoa càng nhanh thì vân giao thoa càng hẹp. Độ hẹp này được đánh giá bằng độ bán rộng góc γ của đường cong phân bố cường độ sáng theo $\Delta\varphi$. Độ bán rộng góc γ là độ rộng góc của đường phân bố này (tính bằng radian) khi $I = I_{\max}/2$.

Trong biểu thức cường độ ánh sáng giao thoa của chùm tia truyền qua, nếu thay $I_i = I_{\max}$ ta có:

$$I_i/I_{\max} = A(\theta) = \frac{1}{1 + F \cdot \sin^2\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right)}$$

Hình 3.26 mô tả phân bố cường độ ánh sáng của hai vân giao thoa kế tiếp theo $\Delta\varphi$.



Hình 3.26. Độ bán rộng góc của vân giao thoa

Các cực đại bậc m ứng với $\Delta\varphi = m.2\pi$. Từ hình 3.26 ta thấy nửa cực đại ứng với số gia $\Delta\varphi = \gamma/2 + 2m\pi$. Thay giá trị này vào hàm Airy ta có:

$$A(\theta) = \frac{1}{1 + F \cdot \sin^2 \left[\left(\frac{\gamma}{2} + 2m\pi \right) / 2 \right]} = \frac{1}{1 + F \cdot \sin^2 \left(\frac{\gamma}{4} \right)} = \frac{1}{2}$$

Suy ra: $\sin(\gamma/4) = \frac{1}{\sqrt{F}}$

Hệ số tinh tế $F = \left(\frac{2r}{1-r^2} \right)^2 = \frac{4R}{(1-R)^2}$ trong đó $R = r^2$ là hệ số phản xạ

cường độ.

Ta thấy khi R lớn, $\frac{1}{\sqrt{F}}$ nhỏ, $\sin(\gamma/4) \approx \frac{\gamma}{4}$

Dẫn đến $\frac{\gamma}{4} = \frac{1}{\sqrt{F}} \rightarrow \gamma = \frac{4}{\sqrt{F}}$ (3.4)

Như vậy, nếu R lớn, F lớn, thì dạng của đường phân bố cực đại cường độ ánh sáng giao thoa càng sắc nhọn.

Tỷ số giữa khoảng cách góc của hai cực đại liên tiếp và độ bán rộng góc gọi là *độ tinh tế* (hay là *độ nét*).

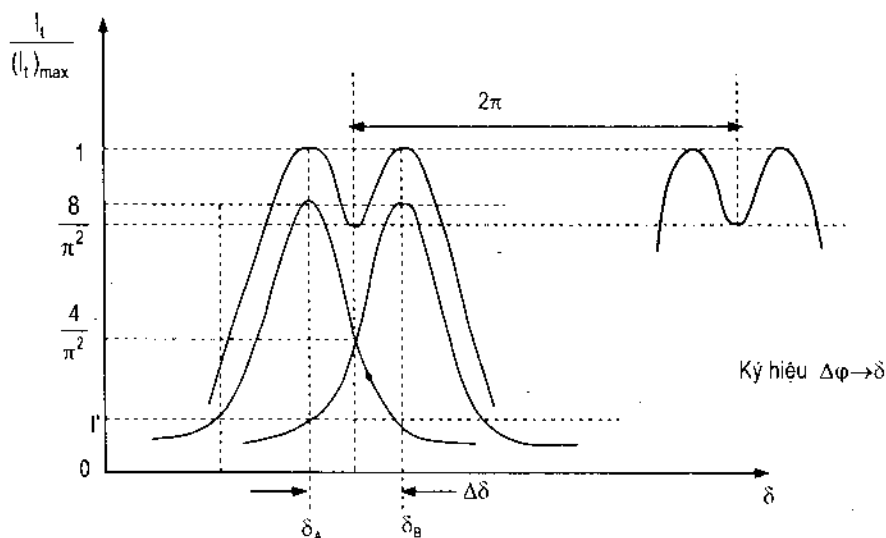
$$\mathfrak{F} = \frac{2\pi}{\gamma} \rightarrow \mathfrak{F} = \frac{\pi\sqrt{F}}{2} \quad (3.5)$$

Thông thường, giá trị $\mathfrak{F}$ của các mẫu Fabry – Perot trong vùng phổ khả kiến cỡ 30. Chú ý là khi độ tinh tế tăng, độ bán rộng vân giao thoa hẹp hơn nhưng tương ứng cường độ cực đại ánh sáng giao thoa truyền qua sẽ giảm theo (vì R tăng thì T giảm do tổng $R + A + T = 1$). Giới hạn vật lý của giá trị $\mathfrak{F}$ quy định bởi tính song – phẳng của hai mặt phản xạ trong giao thoa kế (tính song – phẳng của hai gương giới hạn độ lớn của $\mathfrak{F}$).

d) Giới hạn phân ly và năng suất phân giải

Giới hạn phân ly

Giao thoa kế Fabry – Perot thường được sử dụng để kiểm tra cấu trúc tinh tế vạch phổ. Trong trường hợp ánh sáng không đơn sắc, độ rọi của hai cực đại giao thoa cùng bậc m của hai bước sóng đơn sắc λ và λ' có thể một phần chồng chất lên nhau (hình 3.27).



Hình 3.27. Cường độ vân sáng tổng hợp

Khi nào thì hai cực đại của hai độ rọi được xem phân ly? Người ta phải dùng một tiêu chuẩn chung cho các dụng cụ tán sắc, đó là tiêu chuẩn của Lord – Rayleigh.

Tiêu chuẩn Rayleigh: Hai vân giao thoa được xem là vừa đủ phân ly khi độ rọi tổng cộng của cả hai vân ở tâm của vân tổng hợp (điểm yên ngựa) bằng $\frac{8}{\pi^2}$ lần độ rọi tổng hợp cực đại.

Điều này có nghĩa là người ta sẽ thấy một vân sáng tổng hợp của cả hai vân với vùng xám ở giữa.

Để thuận tiện ta thay ký hiệu độ lệch pha $\Delta\varphi$ bằng δ .

Xét trường hợp hai vân thành phần a và b với bước sóng λ và λ có cường độ bằng nhau:

$$(I_a)_{\max} = (I_b)_{\max}.$$

Các cực đại trong độ rọi tổng hợp I_t xuất hiện tại $\delta = \delta_a$ và $\delta = \delta_b$ có độ rọi bằng nhau.

$$(I_a)_{\max} + I' = (I_b)_{\max} + I' = (I_t)_{\max} \quad (3.6)$$

Tại các điểm yên ngựa (ứng với $\delta = \delta_a + \frac{\Delta\delta}{2}$), độ rọi tổng hợp hai thành phần bằng $\frac{8}{\pi^2}$ của $(I_t)_{\max}$ nên ta có:

$$\frac{8}{\pi^2} \frac{(I_t)_{\max}}{(I_a)_{\max}} = [A(\theta)]_{\delta=\delta_a+\frac{\Delta\delta}{2}} + [A(\theta)]_{\delta=\delta_b+\frac{\Delta\delta}{2}} \quad (3.7)$$

Chú ý là:

$$\frac{I}{(I_a)_{\max}} = [A(\theta)]_{\delta=\delta_a+\Delta\delta} \quad (3.8)$$

Từ (3.6) suy ra:

$$1 + I'/(I_a)_{\max} = (I_t)_{\max}/(I_a)_{\max} \quad (3.6')$$

Thế (3.8) vào (3.6') rồi thay vào (3.7). Sau khi giải (3.7) với chú ý là trị F lớn ta được:

$$\Delta\delta = \frac{4,2}{\sqrt{F}} \approx \gamma \quad (3.9)$$

Đây là số gia độ lệch pha nhỏ nhất $(\Delta\delta)_{\min}$ phân tách hai vân giao thoa có thể phân ly được. Giá trị này liên quan đến giá trị cực tiểu của số gia bước sóng của hai cực đại sáng còn phân ly được theo tiêu chuẩn Rayleigh, $(\Delta\lambda_0) = (\Delta\lambda)_{\min}$ hay còn gọi là giới hạn phân ly.

Năng suất phân giải $\mathfrak{R}$

Cực đại giao thoa xuất hiện khi $\Delta\varphi = \delta = 2\pi.m$ nên $\Delta\delta = 2\pi.\Delta m$ hay

$$\frac{1}{\Delta m} = \frac{2\pi}{\Delta\delta}$$

Điều kiện cực đại giao thoa đối với ánh sáng truyền qua là:

$$\Delta L = 2nd\cos\theta_1 = m\lambda.$$

Lấy vi phân 2 vế phương trình này ta được:

$$0 = m.\Delta\lambda + \lambda.\Delta m$$

$$\text{dẫn đến } \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = -\frac{m}{\Delta m}$$

Dấu "-" có thể bỏ qua vì chỉ có nghĩa là bậc m tăng khi λ giảm. Khi độ lệch pha δ thay đổi 2π thì bậc giao thoa m thay đổi tương ứng là 1 ($\Delta m = 1$). Vì vậy:

$$\frac{2\pi}{\Delta\delta} = \frac{1}{\Delta m} \rightarrow \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = m \cdot \frac{1}{\Delta m} = \frac{2\pi \cdot m}{\Delta\delta} \quad (3.10)$$

Như vậy, số gia độ lệch pha nhỏ nhất $(\Delta\delta)_{\min}$ tương ứng với số gia bước sóng nhỏ nhất $(\Delta\lambda_0) = (\Delta\lambda)_{\min}$ (giới hạn phân ly).

$$\text{Khi } \Delta\lambda = \Delta\lambda_0 \rightarrow \Delta\delta = (\Delta\delta)_{\min} = \frac{4.2}{\sqrt{F}}$$

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda_0} = \frac{2\pi \cdot m}{4.2} \cdot \sqrt{F} \approx \frac{\pi\sqrt{F}}{2} \cdot m = \mathfrak{I} \cdot m$$

Tỷ số $\mathfrak{R} = \frac{\lambda}{\Delta\lambda_0}$ gọi là năng suất phân giải của dụng cụ quang phổ.

$$\text{Vậy} \quad \mathfrak{R} = \mathfrak{I} \cdot m \quad (3.11)$$

trong đó : $\mathfrak{I}$ – độ tinh tế, m – bậc giao thoa.

Với chùm sáng tới gần vuông góc θ_i nhỏ, $\cos\theta_i \approx 1$ thì:

$$2nd \approx m\lambda \rightarrow m = \frac{2nd}{\lambda} \Rightarrow \mathfrak{R} = \mathfrak{I} \cdot \frac{2nd}{\lambda} \quad (3.12)$$

Ví dụ với bước sóng $\lambda = 500\text{nm}$; $n \cdot d = 10\text{mm}$, $R = 90\%$, năng suất phân giải của giao thoa kế Fabry – Perot vào cỡ 10^6 .

c) Vùng phổ tự do

Khi sóng ánh sáng không đơn sắc có bước sóng thay đổi liên tục từ λ đến $\lambda + \Delta\lambda$ thì tùy theo giá trị độ rộng phổ $\Delta\lambda$ khoảng cách giữa hai vân sáng liên tiếp có thể bị lấp đầy.

Khi $\Delta\lambda$ tăng vân sáng bậc m của bước sóng $\lambda + \Delta\lambda$ sẽ tiến tới trùng với vân sáng bậc $m - 1$ của bước sóng λ . Hiệu bước sóng $\Delta\lambda$ ứng với sự trùng vị trí của hai vân sáng ở trên được gọi là vùng phổ tự do $(\Delta\lambda)_{\text{fsr}}$.

Theo (3.10), sự thay đổi $\Delta\delta$ tương ứng với $(\Delta\lambda)_{\text{fsr}}$ có giá trị là $\Delta\delta = 2\pi$

$$\begin{aligned} \frac{\lambda}{\Delta\lambda} &= \frac{2\pi \cdot m}{\Delta\delta} \rightarrow \frac{\lambda}{(\Delta\lambda)_{\text{fsr}}} = m \\ \Rightarrow (\Delta\lambda)_{\text{fsr}} &= \frac{\lambda}{m} \end{aligned} \quad (3.13)$$

Với góc tới nhỏ (chiếu sáng gần vuông góc) ta có $\cos\theta_i = 1$ nên:

$$2nd \approx m\lambda \rightarrow m = \frac{2nd}{\lambda}$$

$$\Rightarrow (\Delta\lambda)_{\text{fsr}} = \frac{\lambda^2}{2nd} \quad (3.14)$$

Rõ ràng là nếu có ý định tăng năng suất phân giải bằng cách tăng d một chút thì vùng phổ tự do giảm dẫn tới trùng nhau giữa các bậc.

Từ (3.11): $\mathfrak{R} = \frac{\lambda}{\Delta\lambda_0} = \mathfrak{I}.m$ và (3.13) $(\Delta\lambda)_{\text{fsr}} = \frac{\lambda}{m}$ suy ra:

$$\frac{(\Delta\lambda)_{\text{fsr}}}{\Delta\lambda_0} = \mathfrak{I}$$

ở đây $\Delta\lambda_0$ là giới hạn phân ly.

Giao thoa kế có $\Delta\lambda_0$ càng nhỏ, $(\Delta\lambda)_{\text{fsr}}$ càng lớn thì độ tinh tế càng cao.

Mặt khác, với $\mathfrak{I}$ xác định $\Delta\lambda_0$ nhỏ thì $(\Delta\lambda)_{\text{fsr}}$ nhỏ. Ta có thể chuyển sang thang tần số ν như sau:

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \rightarrow |\Delta\nu| = \left| c \cdot \frac{\Delta\lambda}{\lambda^2} \right|$$

$$\Delta\nu_0 = \frac{c}{\mathfrak{I}.2nd} \text{ và } (\Delta\nu)_{\text{fsr}} \approx \frac{c}{2nd}.$$

Trong thang số sóng

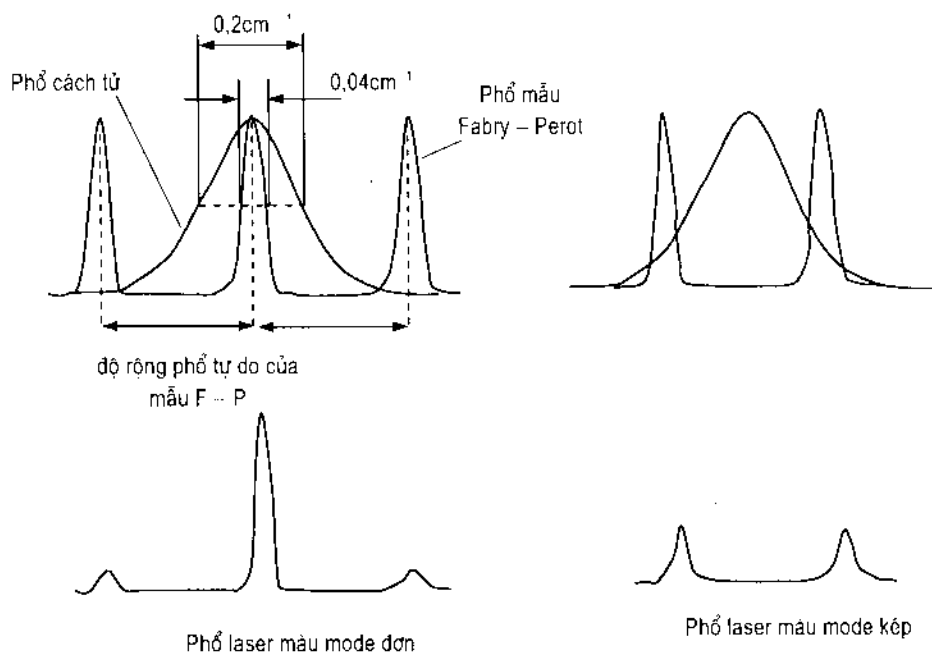
$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}; \quad \Delta\tilde{\nu} = \Delta\lambda / \lambda^2; \quad (\Delta\tilde{\nu})_{\text{fsr}} = \frac{1}{2nd} (\text{cm}^{-1})$$

3.5.4. Một số ví dụ

a) Mẫu Fabry – Perot không khí

Trong kỹ thuật laser màu băng hẹp, sau khi dùng cách tử để chọn lọc và điều hướng bước sóng, để có độ rộng vạch laser hẹp hơn nữa người ta đưa thêm vào buồng cộng hưởng một mẫu Fabry – Perot (intracavity etalon). Để làm giảm độ rộng vạch laser ta cần một mẫu Fabry – Perot có giới hạn phân ly nhỏ. Đồng thời để laser hoạt động đơn mode cần dùng mẫu Fabry – Perot có vùng phổ tự do rộng. Vì vậy người ta thường chọn mẫu Fabry – Perot không khí (airspaced etalon). Ví dụ trong hệ laser màu của hãng Lambda – Physik với cách tử, độ rộng vạch phổ laser là

$0,2\text{cm}^{-1}$. Nhưng nếu dùng thêm một mẫu Fabry – Perot không khí trong buồng cộng hưởng độ rộng vạch laser phát ra có thể nhỏ hơn $0,04\text{cm}^{-1}$. Mẫu Fabry – Perot này có khoảng không khí giữa hai gương dày 1mm, tương ứng độ rộng phổ tự do là $(\Delta\tilde{\nu})_{\text{fsr}} = \frac{1}{2nd}(\text{cm}^{-1}) = 1\text{cm}^{-1}$. Với hệ số tinh tế tối thiểu là 25 nên giới hạn phân ly và do đó độ rộng vạch phổ là $\Delta\tilde{\nu} \leq 0,04\text{cm}^{-1}$.

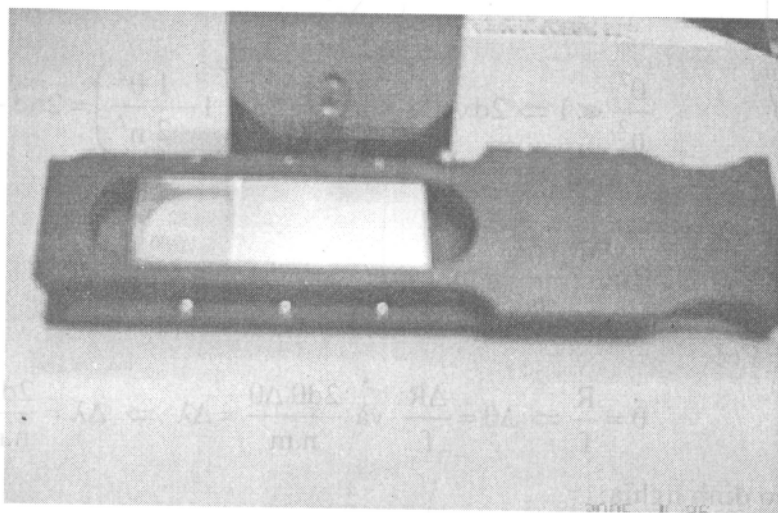


Hình 3.28. Ứng dụng của mẫu Fabry – Perot trong kỹ thuật laser màu băng hẹp

Gương của mẫu Fabry – Perot này gồm 3 vùng tạo bởi 3 lớp mạ với phổ phản xạ tương ứng là $320\text{nm} - 450\text{nm}$; $420\text{nm} - 640\text{nm}$; và $610\text{nm} - 860\text{nm}$ với độ tinh tế từ 25 đến 30. Nhờ vậy, nó có thể hoạt động được từ miền sóng tử ngoại đến hồng ngoại gần. Các mẫu Fabry – Perot không khí (airspaced etalon) thường có độ tinh tế cao hơn mẫu rắn (solide – state etalon) do có sự phù hợp tốt về độ phản xạ của hai gương. Trong mẫu Fabry – Perot không khí, hai gương giống hệt nhau nhờ được cắt ra từ cùng một tấm mạ phản xạ trong khi đối với mẫu rắn hai lớp mạ được gia công trong hai lần khác nhau. Giá thành của mẫu Fabry – Perot không khí đắt hơn mẫu rắn.

b) Mẫu Fabry – Perot thạch anh

Để kiểm tra chế độ hoạt động đúng của laser màu bằng hộp dùng mẫu Fabry – Perot như trên hoặc đo độ rộng vạch của laser này ta cần một mẫu Fabry – Perot khác có vùng phổ tự do lớn hơn độ rộng vạch laser (monitor etalon). Trong trường hợp kiểm tra chế độ hoạt động đơn mode của laser, để đỡ tốn kém người ta thường dùng mẫu Fabry – Perot làm bằng thạch anh với độ tinh tế vào 10 là đủ. Trên hình 3.29 là một mẫu Fabry – Perot làm bằng tấm thạch anh dày 5,1mm, hai mặt được phủ các lớp điện môi thành 3 lớp có độ phản xạ tốt cho 3 vùng phổ 320 – 450nm; 420 – 640nm và 620 – 860nm, vùng phổ tự do là $0,67 \text{ cm}^{-1}$.



Hình 3.29. Mẫu Fabry – Perot thạch anh phủ 3 lớp điện môi phản xạ tốt cho 3 vùng phổ 320 – 450nm; 420 – 640nm và 620 – 860nm.

Để đo độ rộng vạch phổ laser ta cần mẫu có năng suất phân giải đủ cao, thích hợp với độ rộng vạch cần đo và có thể dùng công thức sau đây:

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{8 \cdot (\Delta\tilde{\nu})_{\text{fsr}} \cdot D_2 \cdot \Delta R_2}{D_3^2 - D_1^2} \quad (3.15)$$

Hoặc

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{4 \cdot (\Delta\tilde{\nu})_{\text{fsr}} \cdot \Delta R_2}{D_3 - D_1} \quad (3.16)$$

Thu ảnh vân giao thoa tạo bởi mẫu Fabry – Perot, đo các đường kính D_1 , D_3 của vân thứ nhất và vân thứ ba tính từ trong; đo độ rộng vân thứ hai ΔR_2 ta sẽ tính được $\Delta\tilde{\nu}$ và đánh giá được độ đơn sắc của chùm tia laser.

Các công thức này có thể chứng minh như sau. Sử dụng lý thuyết giao thoa nhiễu chùm tia, ta có điều kiện giao thoa cực đại là:

$$2d\sqrt{n^2 - \sin^2 \theta} = m\lambda$$

Do tia sáng đi gần như song song với quang trục nên θ rất nhỏ và $\sin \theta \approx \theta$.

Ta có

$$2d\sqrt{n^2 - \sin^2 \theta} = 2nd\sqrt{1 - \frac{\sin^2 \theta}{n^2}} \approx 2nd\left(1 - \frac{\theta^2}{n^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Vì

$$\frac{\theta^2}{n^2} \ll 1 \Rightarrow 2d\sqrt{n^2 - \sin^2 \theta} \approx 2nd\left(1 - \frac{1}{2} \frac{\theta^2}{n^2}\right) = 2nd - \frac{d\theta^2}{n}$$

Suy ra

$$2nd - \frac{d\theta^2}{n} = m\lambda \quad (3.17)$$

Ta lại có:

$$\theta = \frac{R}{f} \Rightarrow \Delta\theta = \frac{\Delta R}{f} \quad \text{và} \quad \frac{2d\theta \cdot \Delta\theta}{n \cdot m} = \Delta\lambda \Rightarrow \Delta\lambda = \frac{2d\theta}{n \cdot m} \cdot \frac{\Delta R}{f}$$

Theo định nghĩa:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} \rightarrow \Delta\tilde{\nu} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0^2} = \frac{2d}{n \cdot \lambda_0^2} \cdot \frac{\theta \cdot \Delta R}{m \cdot f}$$

$$\text{Với} \quad \theta = \frac{R}{f} \rightarrow \Delta\tilde{\nu} = \frac{2d}{m \cdot n \cdot \lambda_0^2} \cdot \frac{R \cdot \Delta R}{f^2} = \frac{d \cdot D \cdot \Delta R}{n \cdot m \cdot \lambda_0^2 \cdot f^2}$$

Cũng từ điều kiện giao thoa cực đại: $2nd \cos \beta = m\lambda_0$

Xét tia sáng đi gần trục thì

$$\cos \beta \approx 1 \Rightarrow m = \frac{2nd}{\lambda_0}$$

Vậy

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{D \cdot \Delta R}{2n^2 \cdot \lambda_0 \cdot f^2} \quad (3.18)$$

Mặt khác ta có:

$$(\Delta \tilde{\nu})_{\text{fsr}} = \frac{1}{2nd} \Rightarrow \Delta \tilde{\nu} = \frac{d}{n} \cdot \frac{(\Delta \tilde{\nu})_{\text{fsr}} \cdot D \cdot \Delta R}{\lambda_0 \cdot f^2} \quad (3.18'')$$

Từ công thức (3.17)

$$2nd - \frac{d \cdot \theta^2}{n} = m \lambda_0$$

Với $\theta = \frac{R}{f}; \theta^2 = \frac{R^2}{f^2}$

ta có $2nd - \frac{d \cdot R_1^2}{n \cdot f^2} = m_1 \cdot \lambda_0$

$$2nd - \frac{d \cdot R_3^2}{n \cdot f^2} = m_3 \cdot \lambda_0$$

$$\frac{d}{n \cdot f^2} (R_3^2 - R_1^2) = 2 \cdot \lambda_0$$

Suy ra

$$\lambda_0 = \frac{d}{2nf^2} (R_3^2 - R_1^2)$$

Hay $\lambda_0 = \frac{d}{8nf^2} (D_3^2 - D_1^2) \quad (3.19)$

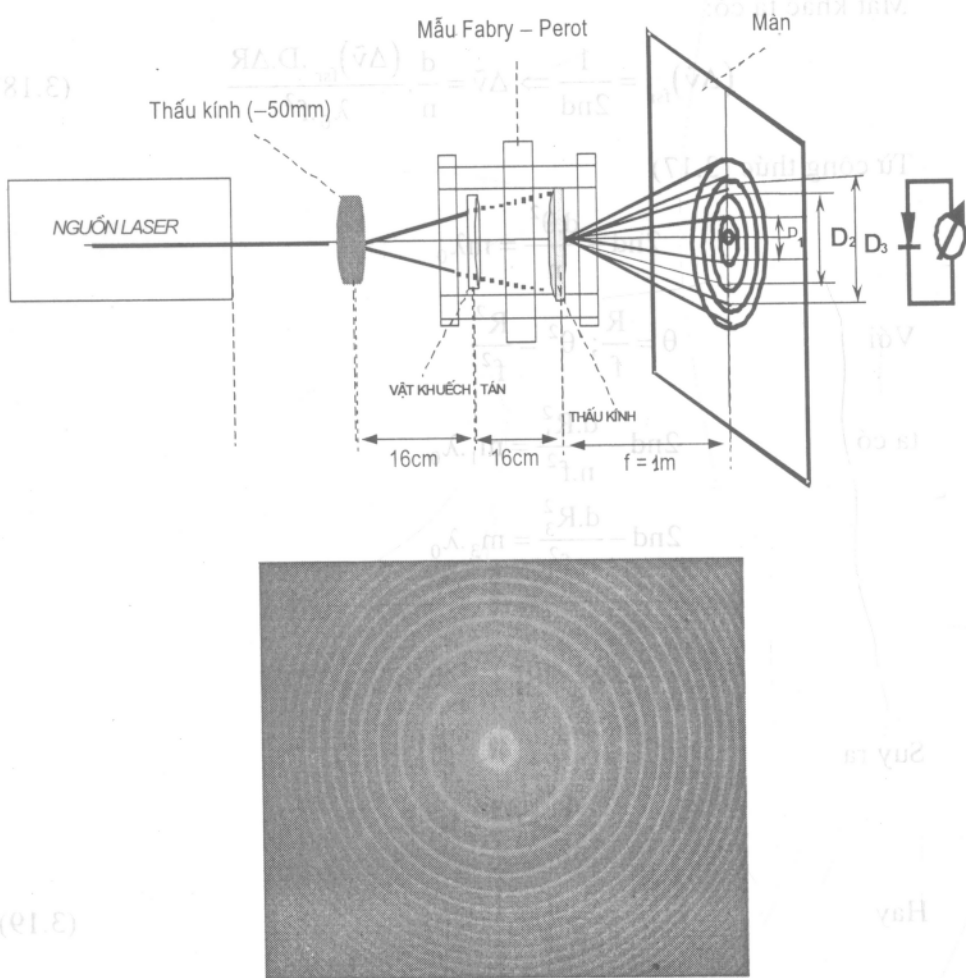
Với $m_1, R_1, D_1, m_3, R_3, D_3$ lần lượt là các bậc, bán kính, đường kính của vân thứ nhất và vân thứ ba.

Thay vào (3.18') ta có:

$$\Delta \tilde{\nu} = \frac{8 \cdot (\Delta \tilde{\nu})_{\text{fsr}} \cdot D \cdot \Delta R}{D_3^2 - D_1^2} \approx \frac{8 \cdot (\Delta \tilde{\nu})_{\text{fsr}} \cdot D_2 \cdot \Delta R_2}{(D_3 - D_1)(D_3 + D_1)}$$

lấy $D_2 \approx \frac{D_3 + D_1}{2} \Rightarrow \Delta \tilde{\nu} = \frac{4 \cdot (\Delta \tilde{\nu})_{\text{fsr}} \cdot \Delta R_2}{D_3 - D_1}$

Với $D_2, \Delta R_2$ là đường kính và độ rộng của vân giao thoa thứ hai. Đây là các công thức (3.15) và (3.16) cần chứng minh. Để thu được ảnh giao thoa ta có thể bố trí theo sơ đồ hình 3.30



Hình 3.30. Sơ đồ bố trí thí nghiệm thu ảnh giao thoa và hệ vân giao thoa của Laser He – Ne 632.8nm thu được với mẫu Fabry – Perot thạch anh

Chương 4 **MÁY QUANG PHỔ**

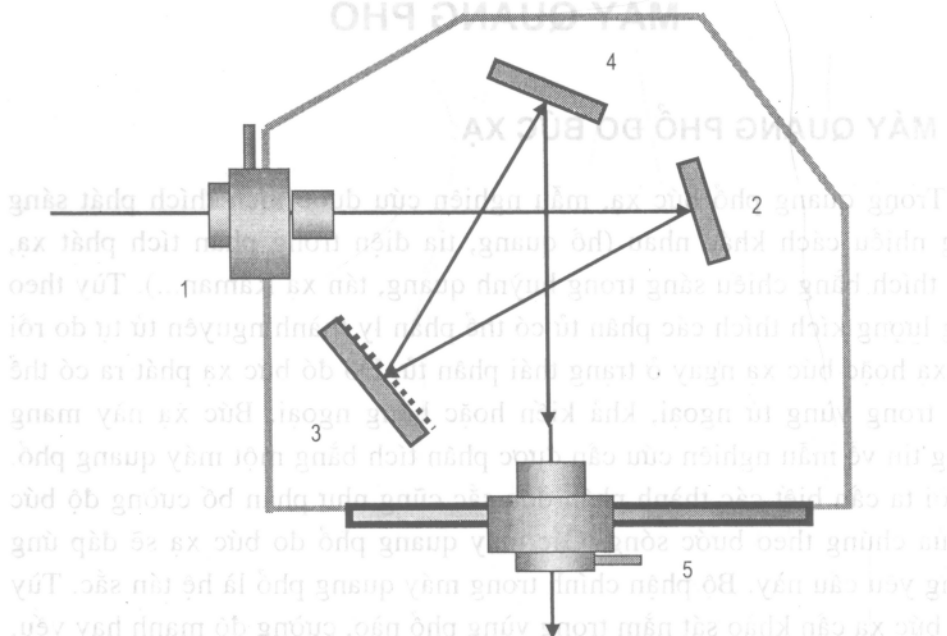
4.1. MÁY QUANG PHỔ ĐO BỨC XẠ

Trong quang phổ bức xạ, mẫu nghiên cứu được kích thích phát sáng bằng nhiều cách khác nhau (hồ quang, tia điện trong phân tích phát xạ, kích thích bằng chiếu sáng trong huỳnh quang, tán xạ Raman...). Tùy theo năng lượng kích thích các phân tử có thể phân ly thành nguyên tử tự do rồi bức xạ hoặc bức xạ ngay ở trạng thái phân tử. Do đó bức xạ phát ra có thể nằm trong vùng tử ngoại, khả kiến hoặc hồng ngoại. Bức xạ này mang thông tin về mẫu nghiên cứu cần được phân tích bằng một máy quang phổ. Người ta cần biết các thành phần đơn sắc cũng như phân bố cường độ bức xạ của chúng theo bước sóng. Các máy quang phổ đo bức xạ sẽ đáp ứng những yêu cầu này. Bộ phận chính trong máy quang phổ là hệ tán sắc. Tùy theo bức xạ cần khảo sát nằm trong vùng phổ nào, cường độ mạnh hay yếu, cần năng suất phân giải cao hay thấp... ta phải sử dụng máy quang phổ có cấu tạo phù hợp. Chẳng hạn nếu bức xạ nghiên cứu là tử ngoại thì lăng kính, thấu kính phải bằng thạch anh để truyền qua tốt vùng phổ tử ngoại, nếu cần năng suất phân giải cao thì phải dùng cách tử thay cho lăng kính...

Trên thực tế có rất nhiều loại máy quang phổ cấu trúc khác nhau, tuy nhiên về cơ bản cấu trúc gồm khe máy lối vào, hệ tán sắc, khe máy lối ra kết hợp với một hệ thu phổ. Trên hình 4.1 là một sơ đồ máy quang phổ khá điển hình.

Thông thường trong máy quang phổ, người ta sử dụng một khe ở lối ra, kết hợp với một motor bước làm quay cách tử, từng thành phần đơn sắc của phổ sẽ lướt qua khe và được thu trên tế bào quang điện hoặc nhân quang điện. Máy quang phổ hoạt động như vậy được gọi là máy quang phổ đơn kênh. Năng lượng ánh sáng thu được chuyển thành tín hiệu điện, sau khi khuếch đại có thể đưa vào máy tự ghi hoặc xử lý và số hóa rồi hiển thị trên màn hình máy tính.

Nếu tách rời hệ thu phổ chỉ có khe sáng lối ra thì máy quang phổ gọi là máy đơn sắc, cho các ánh sáng đơn sắc sau khe lối ra. Dùng nguồn sáng phổ liên tục chiếu vào khe máy lối vào, quay cách tử ta sẽ được các bước sóng đơn sắc khác nhau ở lối ra.



Hình 4.1. Sơ đồ máy quang phổ MS – 125 (Hãng Oriel – USA)

1 – Khe máy lối vào; 2 – Gương cầu chuẩn trực; 3 – Cách tử đặt trên giá quay vi chỉnh; 4 – Gương cầu buồng tối; 5 – Khe sáng lối ra.

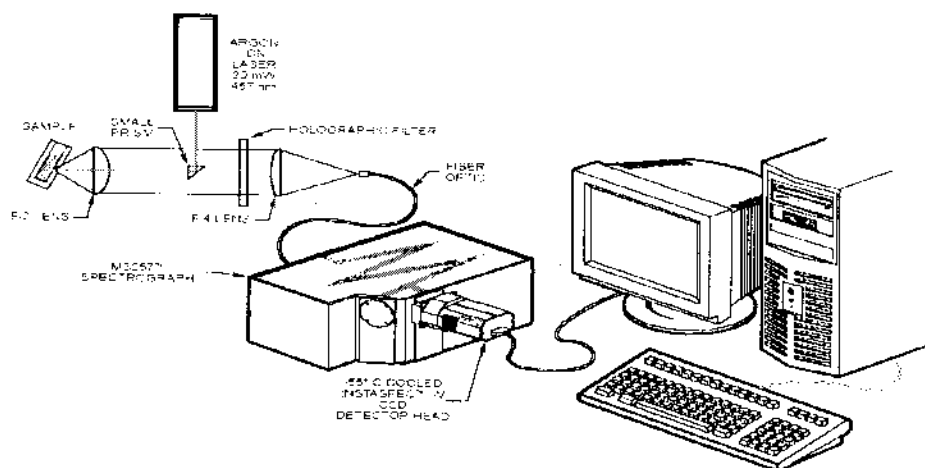
Một đặc trưng quan trọng của máy quang phổ là năng suất phân giải của máy. Với một cấu hình xác định thì năng suất phân giải của máy phụ thuộc vào năng suất phân giải của hệ tán sắc (cách tử, lăng kính) và năng suất phân giải của CCD trong trường hợp thu đa kênh. Ta có thể thay đổi cách tử với số vạch khác nhau để có được năng suất phân giải mong muốn trong vùng phổ làm việc. Thông thường các nhà sản xuất máy quang phổ đều gợi ý mua kèm theo một tập hợp các cách tử làm việc ở các vùng phổ khác nhau với số vạch/mm khác nhau. Các cách tử holography có 1200v/mm, 1800v/mm hoặc 2400v/mm trong khi cách tử thông thường chỉ từ 600 – 1200 vạch/mm. Cách tử phản xạ đều có bước sóng phản xạ mạnh nhất đặc trưng và hoạt động trong một vùng bước sóng nhất định.

Khe máy (lối vào và lối ra) cũng là một bộ phận quan trọng ảnh hưởng đến năng suất phân giải và chất lượng phổ thu được. Độ rộng khe cần được thay đổi tùy theo cường độ ánh sáng tới. Thay đổi độ cao sử dụng của khe lối vào cho phép khảo sát phổ ở các vùng khác nhau của nguồn sáng.

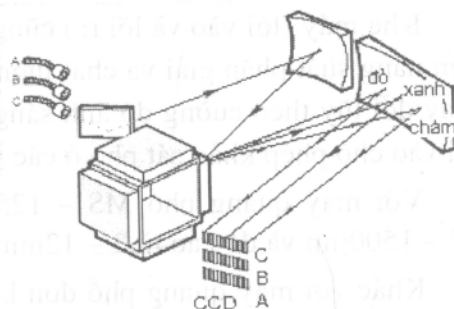
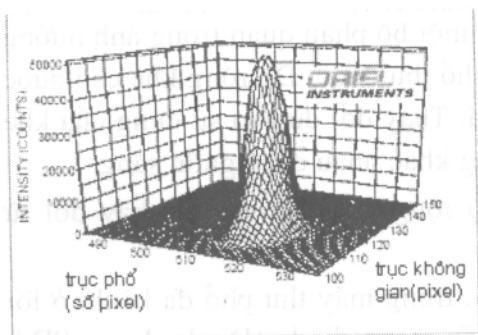
Với máy quang phổ MS – 125 độ rộng khe vào có thể thay đổi từ 25 – 1500 μ m và độ cao từ 3 – 12mm.

Khác với máy quang phổ đơn kênh, trong máy thu phổ đa kênh, ở lối ra không dùng khe sáng mà đặt trực tiếp mạng diode (Diode Array PDA hoặc CCD (Charge coupled device) – xem chương 5 về nguồn thu) thu đồng thời toàn bộ phổ của tín hiệu ánh sáng tới. Phương pháp chụp ảnh cổ điển thực chất cũng là thu phổ đa kênh, tuy nhiên thay vì phổ được xử lý và hiển thị trên màn hình máy tính chỉ là các vạch phổ với độ đen thay đổi trên nhũ tương kính ảnh. Các tấm PDA hoặc CCD được đặt trên mặt phẳng tiêu của buồng tối sẽ chuyển tín hiệu quang của phổ đã được phân giải thành tín hiệu điện, sau xử lý tín hiệu được hiển thị trên màn hình. Trong trường hợp này hệ tán sắc (cách tử) được đặt cố định, không cần quay bởi một mô tơ bước.

Công nghệ quang – điện tử hiện đại đã cho phép người ta chế tạo những máy quang phổ ảnh (Imaging Spectrograph) thu phổ dưới dạng vạch phổ như trên kính ảnh nhưng hiện trên màn hình máy tính. Không những thế, nếu sử dụng độ cao của khe nhiều tín hiệu quang được đồng thời đưa vào (bằng các sợi quang). Khi đó phổ của nhiều tín hiệu đồng thời được hiển thị trên màn hình monitor để so sánh và phân tích.



Hình 4.2. Ví dụ về một hệ thu phổ Raman của hãng Oriol.USA



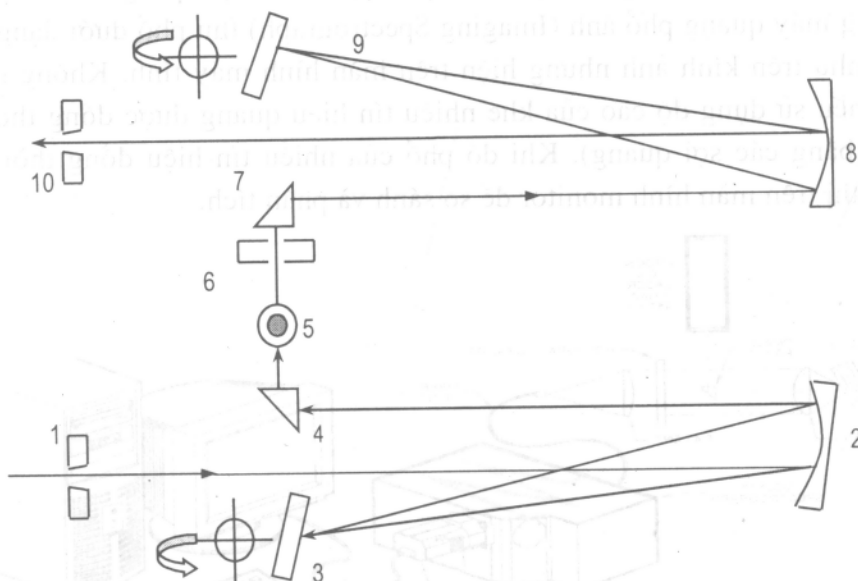
Hình 4.3. Phổ thu được từ máy quang phổ đa kênh

Để có được năng suất phân giải cao người ta chế tạo các máy quang phổ cách tử kép. Trên hình 4.4 trình bày sơ đồ quang học máy quang phổ cách tử kép GDM – 1000 (Carl Zeiss – Jena – Germany).

Máy GDM1000 gồm hai cách tử có 651 vạch/mm với kích thước $60 \times 110\text{mm}^2$.

Độ rộng khe vào và khe ra: $0 \div 3\text{mm}$.

Độ cao khe vào và khe ra: $0 \div 100\text{mm}$.



Hình 4.4. Sơ đồ quang học của máy đơn sắc cách tử kép GDM – 1000

1 – Khe vào; 2, 8 – Gương cầu lõm; 3, 9 – Cách tử; 4, 7 – Gương phản xạ;
5 – Bộ biến điệu; 6 – Khe trung gian; 10 – Khe ra.

Các gương cầu lõm có tiêu cự 1100mm.

Máy quang phổ quét được vùng phổ bậc nhất: $7500 \div 16675\text{cm}^{-1}$ ứng với $13300 \div 6000\text{\AA}^0$; vùng phổ bậc hai: $16675 \div 28700\text{cm}^{-1}$ ứng với $6000 \div 3600\text{\AA}^0$.

Khoảng đặt bộ đếm sóng: phổ bậc nhất $7500\text{cm}^{-1} \div 17500\text{cm}^{-1}$ ứng với $13300 \div 5710\text{\AA}^0$; phổ bậc hai: $15000 \div 3500\text{cm}^{-1}$ ứng với $6650 \div 2855\text{\AA}^0$. Số sóng tập trung năng lượng lớn nhất là 11500cm^{-1} ứng với bước sóng $8700\text{\AA}^0$.

Khoảng cách giữa các xung đánh dấu:

+ phổ bậc nhất: 20, 100, 500cm^{-1}

+ phổ bậc hai: 40, 200, 1000cm^{-1}

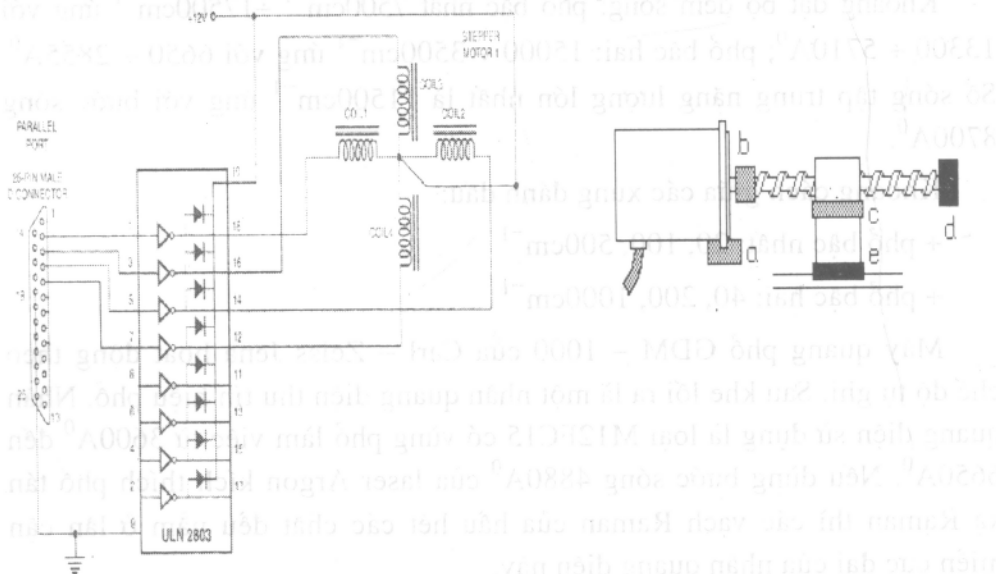
Máy quang phổ GDM – 1000 của Carl – Zeiss Jena hoạt động theo chế độ tự ghi. Sau khe lối ra là một nhân quang điện thu tín hiệu phổ. Nhân quang điện sử dụng là loại M12FC15 có vùng phổ làm việc từ $3600\text{\AA}^0$ đến $6650\text{\AA}^0$. Nếu dùng bước sóng $4880\text{\AA}^0$ của laser Argon kích thích phổ tán xạ Raman thì các vạch Raman của hầu hết các chất đều nằm ở lân cận miền cực đại của nhân quang điện này.

Tín hiệu phổ được khuếch đại rồi được đưa đến bộ phận ghi phổ. Thiết bị ghi phổ là bộ phận tự ghi hoạt động trên cơ sở biến đổi tín hiệu điện thành chuyển động cơ học làm cho bút vẽ ghi lại dạng của tín hiệu lên băng giấy. Đây là hệ tự ghi thuộc thế hệ những năm 1970. Phòng thí nghiệm Quang lượng tử Trường Đại học KHTN Hà nội đã cải tiến nâng cấp hệ máy này thành hệ máy quang phổ ghép nối với máy tính đồng thời sử dụng kỹ thuật khuếch đại lock – in làm tăng độ nhạy của máy.

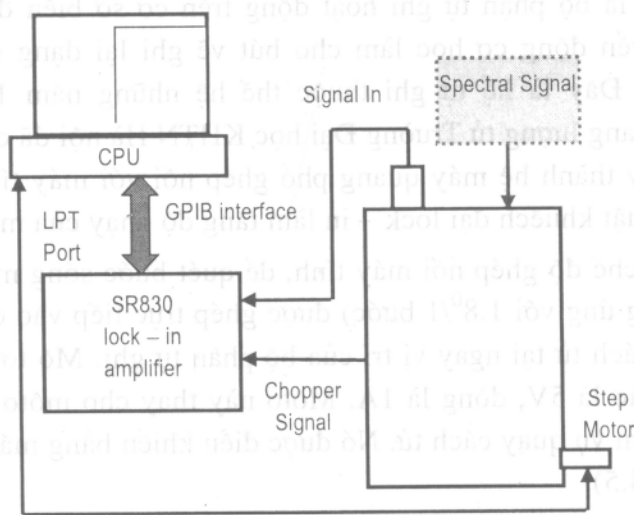
Trong chế độ ghép nối máy tính, để quét bước sóng một mô tơ có 200 bước (tương ứng với $1.8^0/1$ bước) được ghép trực tiếp vào cần truyền động làm quay cách tử tại ngay vị trí của bộ phận tự ghi. Mô tơ có điện áp một chiều lối vào là 5V, dòng là 1A. Mô tơ này thay cho mô tơ của bộ phận tự ghi có nhiệm vụ quay cách tử. Nó được điều khiển bằng máy tính qua cổng LPT (hình 4.5).

Bộ khuếch đại lock – in là thiết bị thu và đo những tín hiệu xoay chiều nhỏ cỡ vài nano von. Phép đo chính xác ngay cả khi tín hiệu nhỏ bị lẫn vào hàng ngàn nguồn nhiễu trong thời gian dài. Bộ khuếch đại này cho

dòng một chiều ở lối ra tỷ lệ với tín hiệu khảo sát. Tín hiệu một chiều này có thể được hiển thị trên các panel số hay trên màn hình máy tính. Hệ thiết bị này sử dụng bộ khuếch đại DSP lock – in SR – 830 (Stanford, USA). Nguyên tắc hoạt động của khuếch đại lock – in được trình bày ở chương sau. Trên hình 4.6 là sơ đồ khối của hệ máy quang phổ này.

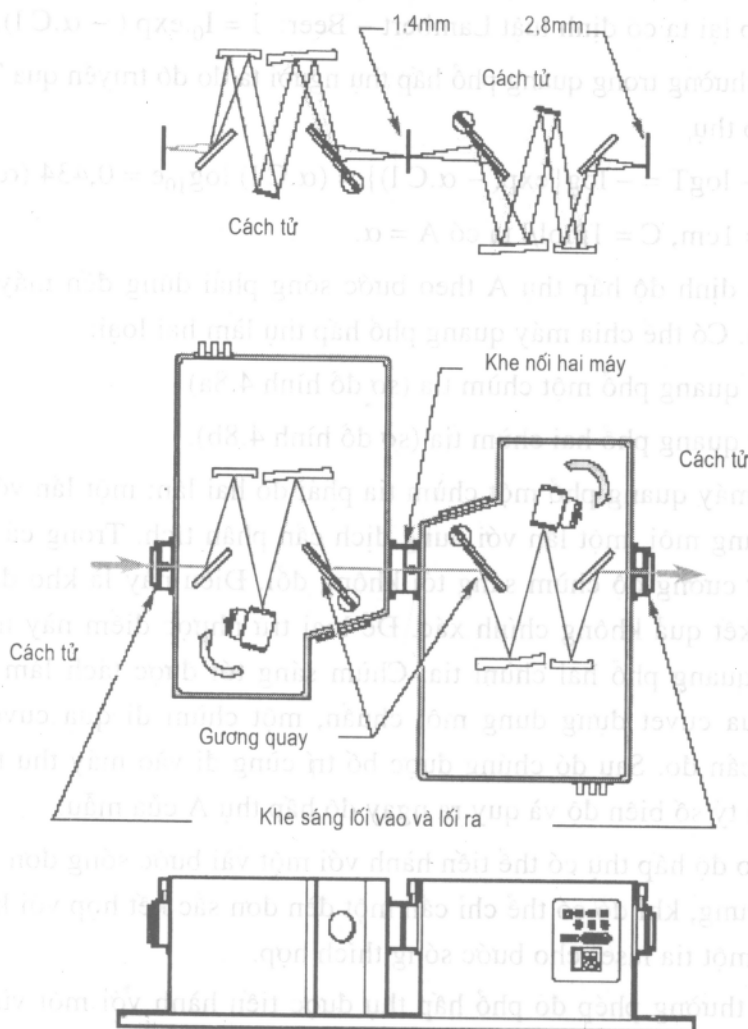


Hình 4.5. Mô tơ bước và sơ đồ điều khiển mô tơ bước



Hình 4.6. Sơ đồ khối hệ máy quang phổ ghép nối với máy tính dùng khuếch đại lock – in

Để thiết kế hệ máy quang phổ cách tử kép người ta ghép nối tiếp hai hệ đơn sắc giống hệt nhau, ví dụ như hệ máy quang phổ cách tử kép MS257 model 77719 của hãng Oriel (USA). Sơ đồ quang học của hệ máy này được trình bày trên hình 4.7. Việc ghép nối tiếp giúp làm tăng quang trình. Năng suất phân giải và do đó là giới hạn phân ly tốt hơn một máy đơn. Phổ lối ra của máy đơn sắc thứ nhất được tán sắc một lần nữa bởi máy đơn sắc thứ hai. Về lý thuyết nếu loại trừ được quang sai, hệ đơn sắc kép cho độ tán sắc gấp hai lần hệ đơn. Cụ thể trong trường hợp này một máy đơn sắc MS257 mode 177719 có độ tán sắc 0,31mm/nm, giới hạn phân ly 0,10nm khi ghép thành hệ đơn sắc kép sẽ có độ tán sắc 0,62mm/nm, giới hạn phân ly 0,07nm.



Hình 4.7. Hệ máy đơn sắc kép MS 257 model 77719 (Oriel,USA)

4.2. MÁY QUANG PHỔ ĐO HẤP THỤ

Cơ sở của quang phổ hấp thụ là định luật Lambert – Beer. Khi chùm sáng cường độ I_0 truyền tới một môi trường độ dày l , do ánh sáng bị hấp thụ một phần, cường độ ánh sáng lối ra còn lại là I . Nếu cường độ ánh sáng tới không lớn và nếu các hiện tượng phản xạ tán xạ không đáng kể thì cường độ ánh sáng lối ra tuân theo định luật Lambert như sau:

$$I = I_0 \cdot \exp(-kl)$$

trong đó k là hệ số hấp thụ phụ thuộc vào bước sóng ánh sáng, bản chất môi trường hấp thụ và nồng độ chất hấp thụ C . Theo Beer: $k = \alpha \cdot C$.

Kết hợp lại ta có định luật Lambert – Beer: $I = I_0 \cdot \exp(-\alpha \cdot C l)$.

Thông thường trong quang phổ hấp thụ người ta đo độ truyền qua $T = I/I_0$ hoặc độ hấp thụ

$$A = -\log T = -\log\{\exp(-\alpha \cdot C l)\} = (\alpha \cdot C l) \cdot \log_{10} e = 0,434 (\alpha \cdot C l).$$

Nếu $l = 1\text{ cm}$, $C = 1\text{ mol/l}$ ta có $A = \alpha$.

Để xác định độ hấp thụ A theo bước sóng phải dùng đến máy quang phổ hấp thụ. Có thể chia máy quang phổ hấp thụ làm hai loại:

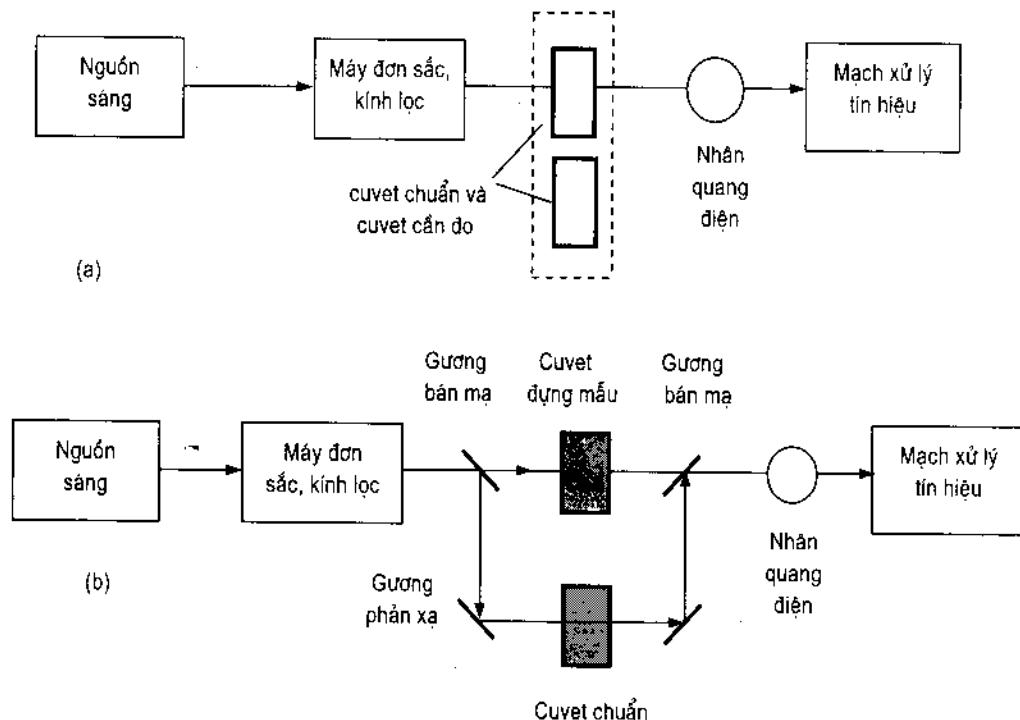
- Máy quang phổ một chùm tia (sơ đồ hình 4.8a)
- Máy quang phổ hai chùm tia (sơ đồ hình 4.8b).

Trong máy quang phổ một chùm tia phải đo hai lần: một lần với cuvet chỉ chứa dung môi, một lần với dung dịch cần phân tích. Trong cả hai lần đo phải giữ cường độ chùm sáng tới không đổi. Điều này là khó đảm bảo và dẫn tới kết quả không chính xác. Để loại trừ nhược điểm này người ta dùng máy quang phổ hai chùm tia. Chùm sáng tới được tách làm 2: một chùm đi qua cuvet đựng dung môi chuẩn, một chùm đi qua cuvet chứa dung dịch cần đo. Sau đó chúng được bố trí cùng đi vào máy thu tín hiệu để xác định tỷ số biên độ và quy ra ngay độ hấp thụ A của mẫu.

Phép đo độ hấp thụ có thể tiến hành với một vài bước sóng đơn sắc xác định, đặc trưng, khi đó có thể chỉ cần một đèn đơn sắc kết hợp với kính lọc hoặc dùng một tia laser cho bước sóng thích hợp.

Thông thường phép đo phổ hấp thụ được tiến hành với một vùng phổ rộng với bước sóng thay đổi liên tục. Các nguồn sáng hay dùng trong đo

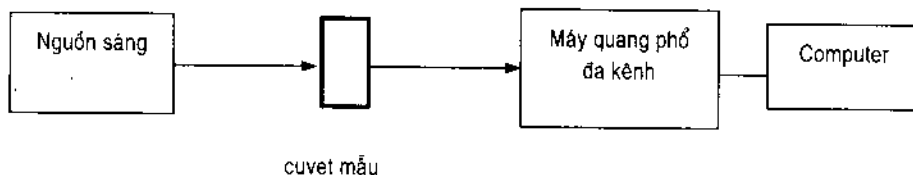
phổ hấp thụ là đèn Wolfram – Halogen cho phổ liên tục trong miền khả kiến và hồng ngoại gần hoặc đèn D_2 , H_2 cho phổ liên tục trong miền tử ngoại... Tốt hơn cả là dùng một laser màu có bước sóng thay đổi liên tục trong vùng phổ hấp thụ cần nghiên cứu.



Hình 4.8.

a) Máy quang phổ một chùm tia; b) Máy quang phổ hai chùm tia

Cũng có thể thu phổ hấp thụ theo kiểu đa kênh. Khi đó chùm sáng có phổ liên tục truyền thẳng vào cuvet mẫu rồi tới máy quang phổ đa kênh. Tín hiệu sau đó được lấy tích phân, xử lý rồi đưa lên màn hình máy tính qua một chương trình đã cài đặt sẵn.



Hình 4.9. Máy quang phổ hấp thụ đa kênh

4.3. MÁY QUANG PHỔ HẤP THỤ HỒNG NGOẠI

Để nghiên cứu cấu trúc dao động của phân tử người ta thường dùng phổ hấp thụ hồng ngoại. Như đã biết, sự dịch chuyển giữa các mức năng lượng dao động (quay) của phân tử tương ứng với các bức xạ và hấp thụ nằm trong vùng hồng ngoại. Tùy theo kiểu liên kết phân tử các nhóm hợp chất được đặc trưng bởi những nhóm tần số riêng. Do phải hoạt động trong vùng ánh sáng hồng ngoại nên máy quang phổ hấp thụ hồng ngoại có những đặc điểm riêng. Chẳng hạn phải chú ý tới sự hấp thụ bức xạ hồng ngoại của hơi nước và CO_2 luôn có trong không khí, hiệu suất quang học của gương và cách tử, tính không ổn định của nguồn sáng hồng ngoại và độ nhạy của đầu thu hồng ngoại... Từ đó cấu trúc máy mang những nét đặc trưng riêng cho vùng hồng ngoại. Hầu hết các máy quang phổ hồng ngoại phải được làm khô, giữ thiết bị trong khí khô, sạch (có thể là khí trơ). Đối với máy hồng ngoại xa phải được đặt trong chân không. Đối với vùng hồng ngoại trung bình nguồn sáng thường là sứ đốt nóng, đầu thu là cặp nhiệt điện...

Có ba kiểu máy được dùng để đo phổ hấp thụ hồng ngoại:

- Máy quang phổ hồng ngoại dùng hệ tán sắc
- Máy quang phổ hồng ngoại biến đổi Fourier
- Máy quang phổ hồng ngoại dùng kính lọc.

4.3.1. Máy quang phổ hồng ngoại dùng hệ tán sắc

Trước hết nó cũng có những bộ phận tương tự như máy quang phổ hấp thụ trong vùng khả kiến và tử ngoại, nhưng có những bố trí và thay đổi về nguyên tắc như sau:

Trong máy quang phổ hồng ngoại cuvet chứa mẫu thường đặt trước hệ tán sắc để khử các hiệu ứng do bức xạ hồng ngoại gây ra cũng như bức xạ nhiều từ ngăn cuvet. Trong khi ở máy hấp thụ tử ngoại khả kiến, cuvet thường đặt sau hệ tán sắc để tránh làm phân hủy mẫu.

Chùm sáng qua mẫu và chùm chuẩn của máy hồng ngoại thường được biến điệu ở tần số thấp (5 – 30Hz) do đầu thu hồng ngoại nói chung có phản ứng chậm.

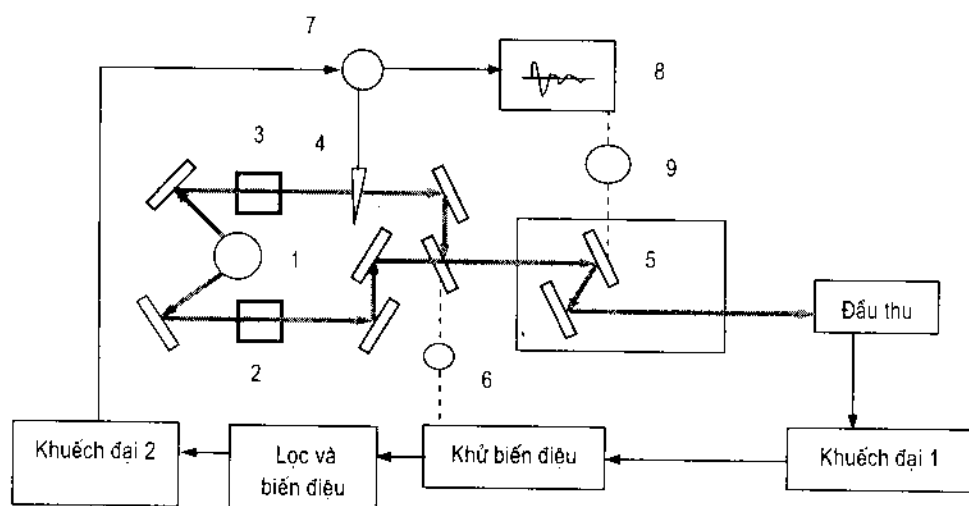
Máy hấp thụ hồng ngoại thường là hai chùm tia để khử sự hấp thụ hồng ngoại của dung môi, của môi trường không khí. Với cấu trúc hai

chùm tia sẽ tránh được tính không ổn định của nguồn sáng và đầu thu đối với bức xạ hồng ngoại.

Vì cường độ của nguồn bức xạ hồng ngoại thay đổi khá nhiều đối với các vùng phổ khác nhau nên một số máy có cài đặt chương trình điều khiển khe máy nhằm bù trừ sự thay đổi này để giữ cho cường độ bức xạ đi vào máy có cường độ gần không đổi. Khi cường độ ánh sáng yếu bắt buộc phải mở rộng khe và chấp nhận năng suất phân giải giảm.

Trong hệ tán sắc của máy hấp thụ hồng ngoại các lăng kính thường làm bằng tinh thể NaCl, LiF hay CaF_2 ... Tuy nhiên những tinh thể này khó bảo quản và đắt tiền nên người ta thường thay bằng cách tử phản xạ. Những cách tử dùng cho vùng hồng ngoại cần có hằng số cách tử lớn hơn khi dùng trong vùng khả kiến. Số vạch khoảng 120 vạch/mm. Độ tán sắc thường là 10nm/mm.

Để hội tụ hay chuẩn trực chùm tia, thay cho dùng thấu kính người ta dùng gương phản xạ. Các gương này có đế thường là thủy tinh Pyrex mạ nhôm để tránh giãn nở vì nhiệt. Các cuvet, cửa sổ cũng đều phải làm bằng vật liệu trong suốt đối với ánh sáng hồng ngoại. Trên bảng 4.1 giới thiệu một số vật liệu hồng ngoại thông dụng. Hình 4.10 là sơ đồ của một máy quang phổ hấp thụ hồng ngoại điển hình.



Hình 4.10

1 – Nguồn sáng; 2 – Cuvet mẫu; 3 – Cuvet chuẩn; 4 – Nêm quang học; 5 – Cách tử;
6 – Động cơ biến điệu; 7 – Mô tơ điều khiển; 8 – Bộ phân ghi phổ; 9 – Mô tơ điều khiển.

Bảng 4.1

Vật liệu	Vùng truyền qua (> 50%)	Chiết suất	Ưu điểm	Nhược điểm
CsBr	0,2 – 40 μm 50000 – 250 cm^{-1}	1,75 – 1,58	Vùng phổ rộng.	Hút ẩm, dễ hòa tan trong nước, acide. Mềm và khó mài nhẵn.
KBr	0,2 – 30 μm 50000 – 330 cm^{-1}	1,95 – 1,4	Tương đối rẻ.	Hút ẩm nhiều, tan trong nước, glycerine và cồn.
AgCl	0,4 – 30 μm 25000 – 330 cm^{-1}	2,02 – 1,9	Không tan trong nước và cồn.	Vật liệu kéo giãn được, phải giữ trong tối, tan trong NH_4OH và kiềm mạnh.
NaCl	0,2 – 16 μm 50000 – 625 cm^{-1}	1,9 – 1,45	Không tan trong HCl, ít tan trong cồn, amoniac.	Hút ẩm, hòa tan trong nước và glycerine.
BaF ₂	0,13 – 12 μm 76000 – 833 cm^{-1}	1,5 – 1,39	Dùng được với dung dịch lỏng. Là vật liệu cứng.	Thang bước sóng hạn chế. Khó mài. Tan trong acide và clorua amoni.
CaF ₂	0,13 – 9 μm 76000 – 1110 cm^{-1}	1,57 – 1,43	Dùng được với dung dịch lỏng. Là vật liệu cứng, ít tan trong acide, không tan trong acetone.	Thang bước sóng hạn chế. Tan trong muối amoni. Khó mài.
LiF	0,13 – 7 μm 76000 – 1430 cm^{-1}	1,45 – 1,28	Không tan trong cồn, acetone, ít tan trong nước.	Thang bước sóng hạn chế, tan trong acide.
CsI	0,24 – 60 μm 41700 – 166 cm^{-1}	1,8 – 1,62	Vùng bước sóng trải dài.	Hút ẩm. Mềm, khó mài. Hòa tan trong cồn.

4.3.2. Máy quang phổ hồng ngoại biến đổi Fourier

Một bộ phận quan trọng của máy hồng ngoại biến đổi Fourier là giao thoa kế Michelson. Sơ đồ giao thoa kế Michelson được trình bày trên hình 4.11a. Một chùm sáng hẹp từ nguồn được tách ra làm hai nhờ bản bán mạ P, đi đến hai gương phẳng phản xạ G_1 và G_2 . Một trong hai gương có thể

dịch chuyển tịnh tiến được còn gương kia cố định. Để quang trình của hai chùm tia gần như nhau khi tới máy thu người ta đặt thêm một bản Q giống hệt P nhưng không bán mạ. Giả sử nguồn sáng đơn sắc bước sóng λ và được tách ra làm 2 chùm sáng có hiệu quang trình bằng 0 khi tới đầu thu. Hai chùm sáng tới là kết hợp nên sẽ giao thoa cho vân sáng tại đầu thu. Nếu ta dịch chuyển gương G_1 một khoảng $\lambda/4$ thì hiệu quang trình của hai chùm tia sẽ bằng $\lambda/2$. Kết quả là giao thoa cho vân tối trên đầu thu. Như vậy khi gương G_1 dịch chuyển tịnh tiến một đoạn đủ dài x (nhiều lần của $\lambda/4$) thì trên đầu thu sẽ xuất hiện lần lượt các vân sáng tối liên tiếp (hình 4.11b).

Thành phần tín hiệu xoay chiều do đầu thu ghi được $S(x)$ phụ thuộc vào độ dịch chuyển x có thể mô tả như sau:

$$S(x) = k.J_\lambda \cdot \cos(4\pi x/\lambda)$$

Trong đó k là hằng số, J_λ là cường độ bức xạ nguồn bước sóng λ .

Trong phổ hồng ngoại thay cho tần số và bước sóng người ta hay dùng số sóng: $\tilde{\nu} = 1/\lambda = \nu/c$, lấy đơn vị là cm^{-1} . Khi đó hàm số trên có thể viết là:

$$S(x) = k.J_\lambda \cdot \cos(4\pi \times \tilde{\nu})$$

Tín hiệu $S(x)$ do theo dịch chuyển x của gương gọi là giao thoa đồ (interferogram).

Nếu cho gương dịch chuyển với vận tốc $v = dx/dt$ thì tín hiệu thu được có tần số là $f = 1/T$ với T là chu kỳ tín hiệu xoay chiều ghi được bởi đầu thu: $T = \lambda/(2v)$. Do đó $f = (2v \cdot \tilde{\nu})/c$ với v và c là tần số và vận tốc ánh sáng tương ứng.

Ví dụ, số sóng hồng ngoại trung bình $\tilde{\nu} = 1000\text{cm}^{-1}$ tương ứng tần số $\nu = 3.10^{13}\text{Hz}$. Giả sử gương dịch chuyển với tốc độ $v = 1\text{mm/s}$ thì tần số của tín hiệu thu được là $f = (2v \cdot \tilde{\nu})/c = 200\text{Hz}$.

Như vậy, giao thoa kế Michelson cho phép biến đổi ánh sáng có tần số rất cao thành một tín hiệu điện tần số thấp hơn nhiều (nằm trong vùng sóng âm).

Trong thực tế, ánh sáng tới không đơn sắc, mỗi tần số đơn sắc sẽ cho một hình giao thoa và giao thoa đồ tổng hợp là tổng tất cả các dao động với tần số thay đổi từ $-\infty$ đến $+\infty$.

Biểu thức của giao thoa đồ tổng hợp là:

$$S(x) = \int_{-\infty}^{\infty} I_\nu \cos(4\pi x \nu / c) d\nu$$

$$I_v = \int_{-\infty}^{\infty} S(x) \cos(4\pi x v / c) dx$$

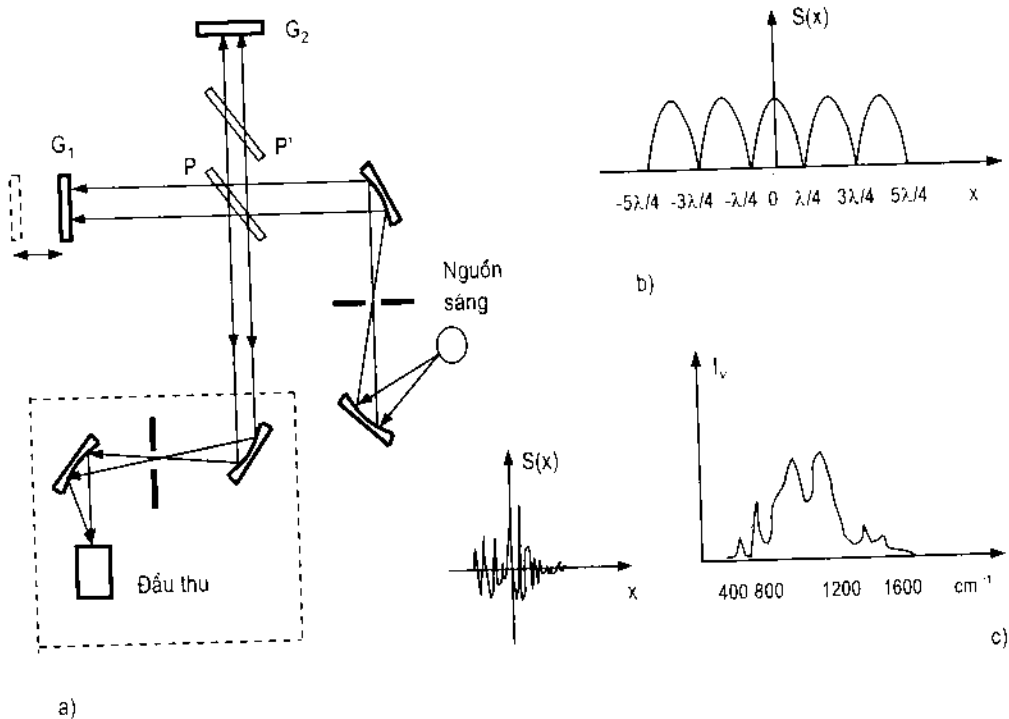
Đường biểu diễn I_v theo v chính là phổ của ánh sáng tới.

Muốn xác định phổ I_v của ánh sáng hồng ngoại nào đó chỉ cần ghi giao thoa đồ tổng hợp $S(x)$ rồi bằng phép biến đổi Fourier sẽ suy ra được I_v . Với công nghệ máy tính hiện nay phép tính này trở nên khả thi và giải quyết nhanh chóng (Ví dụ, hình 4.11b.)

Theo công thức trên, để tính một cách chính xác cần phải dịch chuyển gương từ $-\infty$ đến $+\infty$ nhưng thực tế chỉ có thể dịch gương một khoảng $(\Delta x)_{\max}$. Giá trị này giới hạn độ phân giải của máy. Độ phân giải của máy liên hệ với $(\Delta x)_{\max}$ như sau:

$$(\Delta \tilde{\nu})_{pl} = 1/(\Delta x)_{\max}$$

Như vậy khi gương có thể dịch 1cm thì độ phân giải là 1cm^{-1} .



Hình 4.11. a) Sơ đồ máy quang phổ Fourier ; b) Các vân giao thoa ở đầu thu; c) Giao thoa đồ tổng hợp và biến đổi Fourier của nó.

Ví dụ, ánh sáng có bước sóng $\lambda = 1000\text{nm}$, do $(\Delta \tilde{\nu})_{pl} = -\Delta\lambda/\lambda^2$ nên với độ phân giải trên ta được $\Delta\lambda = 0,1\text{nm}$. Độ phân giải này không thua kém hệ tán sắc dùng cách tử 120 vạch/mm. Nếu dùng lăng kính hồng ngoại thì độ phân giải vào khoảng $\Delta\lambda = 100\text{nm}$.

So với máy quang phổ hồng ngoại dùng hệ tán sắc, máy quang phổ biến đổi Fourier có những ưu điểm là:

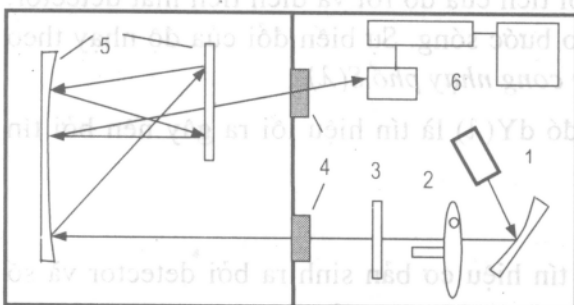
Máy quang phổ biến đổi Fourier không dùng khe nên toàn bộ ánh sáng từ nguồn có thể đến đầu thu, nhờ vậy đo được phổ cường độ yếu.

Máy quang phổ biến đổi Fourier thu được toàn bộ phổ một cách đồng thời trong khi các máy quang phổ thông thường ghi tuần tự từng vạch phổ và muốn quét toàn bộ phổ thì cần một thời gian nhất định. Như vậy, phổ thu được chưa chắc đã phản ánh đúng quá trình động học đang xét. Hơn nữa việc thu phổ tức thời sẽ tránh được các can nhiễu do đầu thu gây ra trong quá trình ghi, đặc biệt đối với máy thu hồng ngoại trung bình và xa. Trong vùng hồng ngoại xa hiện nay chưa có máy nào so sánh được với máy quang phổ biến đổi Fourier. Máy quang phổ biến đổi Fourier được dùng chủ yếu trong vùng hồng ngoại nhưng hoàn toàn có thể áp dụng cho vùng khả kiến, tử ngoại.

4.3.3. Máy quang phổ hồng ngoại dùng kính lọc

Một số máy quang phổ hấp thụ hồng ngoại đặc chủng có thể chỉ cần dùng kính lọc thay cho hệ tán sắc. Tiện lợi của nó là gọn nhẹ, linh hoạt di chuyển. Loại này thường được dùng để phân tích các chất khí như cyanide hydro, acrylonitrilic, carbon monoxit, hydrocarbon clorinat...

Để tăng quãng đường đi lại của chùm sáng trong môi trường khí hấp thụ ở thiết bị này có bố trí một cặp gương phản xạ. Hình 4.12 là sơ đồ một máy quang phổ hồng ngoại dùng kính lọc. Nguồn sáng là một đèn sợi Nicrom hoặc thay bằng một nguồn laser.



Hình 4.12. Máy quang phổ hồng ngoại dùng kính lọc

- 1 – Nguồn sáng; 2 – Chopper; 3 – Kính lọc; 4 – Cửa sổ vào buồng chứa khí;
- 5 – Gương phản xạ;
- 6 – Hệ thu và xử lý số liệu

Chương 5

HỆ THU BỨC XẠ TRONG QUANG PHỔ

Sau khi được hệ tán sắc phân tách thành các thành phần đơn sắc, tín hiệu quang sẽ được biến thành tín hiệu điện, sau đó được khuếch đại, gia công xử lý làm tăng tỷ lệ tín hiệu/ồn rồi hiển thị. Máy tính thường được sử dụng để thể hiện phép đo dưới dạng thích hợp trong mối liên hệ với các thông số khác như là bước sóng. Hệ dò (detector) và hệ đo kết hợp được gọi là bức xạ kế (radiometer). Danh từ quang phổ kế (spectroradiometer) được dùng khi máy thể hiện sự phụ thuộc của cường độ bức xạ theo bước sóng.

Các detector dựa trên một số quá trình biến đổi tín hiệu quang – điện cơ bản. Có thể chia làm hai loại:

- * Detector nhiệt
- * Detector photon.

Các detector đều được mô tả bởi một số đặc trưng cơ bản, đó là:

– **Độ nhạy** (responsivity): $S = Y/X$, trong đó Y là tín hiệu lối ra của detector, X là bức xạ lối vào.

Ví dụ, Y có thể là dòng của nhân quang điện, hoặc thế của pin nhiệt điện. Khi $X = 0$, Y thường có giá trị Y_0 còn gọi là dòng tối hay tín hiệu tối. Trong trường hợp này $S = (Y - Y_0)/X$. X có thể là bất kỳ tín hiệu bức xạ nào thường được đo bằng oát (W) hoặc Lumen (Lm). Nếu bức xạ chiếu đều trên detector thì X có thể cho bởi tích của độ rọi và diện tích mặt detector. Độ nhạy S thường phụ thuộc vào bước sóng. Sự biến đổi của độ nhạy theo bước sóng được mô tả bởi *đường cong nhạy phổ* $S(\lambda)$.

$S(\lambda) = dY(\lambda)/dX(\lambda)$, trong đó $dY(\lambda)$ là tín hiệu lối ra gây nên bởi tín hiệu lối vào $dX(\lambda)$.

– **Hiệu suất lượng tử η**

Đó là tỷ số giữa số yếu tố tín hiệu cơ bản sinh ra bởi detector và số photon tới. Yếu tố tín hiệu cơ bản thường là điện tử quang điện.

– Thời gian đáp ứng τ (Response time)

Là thời gian cần thiết để tín hiệu lỗi ra tăng lên khi đột ngột được rọi bức xạ không đổi. Khi ngắt rọi sáng tín hiệu lỗi ra của detector giảm. Thời gian để tín hiệu lỗi ra giảm xuống $1/e$ giá trị ban đầu gọi là *hằng số thời gian*. Hằng số thời gian tăng và hằng số thời gian giảm thường là khác nhau vì được gây nên bởi các tham số vật lý khác nhau.

– Vùng tuyến tính

Là phạm vi tín hiệu lỗi vào, trong đó tín hiệu lỗi ra là một hàm tuyến tính của tín hiệu lỗi vào. Vùng tuyến tính thường được thể hiện theo công suất (W) hoặc độ rọi lỗi vào. Nó thường kéo dài từ công suất ngang ồn đến giới hạn trên của thiết bị hoặc mạch ngoài.

– Công suất ngang ồn (NEP – noise equivalent power)

Là thông lượng bức xạ (đo bằng W) cần thiết để gây nên một tín hiệu lỗi ra bằng tín hiệu ồn trung bình r.m.s từ detector. Giá trị NEP thường được cho trong một chế độ của các đặc trưng bước sóng, vùng detector, tần số điều biến, nhiệt độ và độ rộng dải phổ của detector. Độ rộng phổ thường chọn là 1 Hz và NEP được tính theo $W \cdot Hz^{-1/2}$. NEP hay được dùng như là tín hiệu lỗi vào tương đương ồn của detector.

– Độ phát hiện (detectivity): $D = 1/NEP$.

Giá trị này lớn hơn đối với detector nhạy hơn.

– **Độ phát hiện chuẩn hóa D^*** . Gọi A là diện tích detector, đối với hầu hết detector tích $D \cdot A^{1/2}$ là không đổi. Điều này có nghĩa là độ phát hiện biến thiên tỷ lệ nghịch với căn bậc hai diện tích detector. Đó là vì công suất ồn điện thường tỷ lệ với diện tích detector A, và dòng hoặc thể thể hiện phép đo ồn thì tỷ lệ với căn bậc hai của công suất. Tương tự, bởi vì hầu hết các ồn của detector là "ồn trắng" (bằng tần rộng) và công suất ồn bằng rộng tỷ lệ với độ rộng băng tần (tín hiệu điện) Δf nên tín hiệu ồn tỷ lệ với $\Delta f^{1/2}$.

Độ phát hiện chuẩn hóa D^* được định nghĩa để cho phép so sánh các loại detector khác nhau độc lập với diện tích detector và độ rộng băng tần.

$$D^* = D (A^{1/2} \cdot \Delta f^{1/2}) = D(A \cdot \Delta f)^{1/2} = (A \cdot \Delta f)^{1/2} / NEP$$

Đơn vị của D^* là $cm \cdot Hz^{1/2} W^{-1}$. Giống như NEP, D^* cũng là hàm của bước sóng và tần số điều biến nên đại lượng này thường được xem là độ nhạy phổ chuẩn hóa (normalized spectral responsivity) $D^*(\lambda)$ hoặc $D^*(\lambda, f, \Delta f)$.

Trên hình 5.9 trình bày một số đường cong độ nhạy phổ D^* của một số detector.

– Ổn nhiễu

Có nhiều loại ổn nhiễu làm giới hạn độ phát hiện của detector. Các loại cơ bản là: ổn thống kê, ổn tái hợp – phát sinh, ổn Johnson, sự rung hay là ồn $1/f$ và ồn đọc lỗi ra đối với detector mạng.

Ổn thống kê (shot noise): loại ồn này có nguyên nhân là tính gián đoạn của bức xạ. Bức xạ gồm các photon đến detector một cách ngẫu nhiên về thời gian. Các photon được hấp thụ tạo ra điện tử quang điện trong các khoảng thời gian ngẫu nhiên và sự biến thiên dòng điện này biểu hiện thành nhiễu. Ổn nhiễu này có thể sinh ra bởi chính các photon tín hiệu cần đo hoặc bởi dòng photon nền trong các trường hợp tín hiệu rất yếu và detector có ồn rất thấp. Khi loại ồn này xuất hiện thì hệ đo được xem là đang hoạt động ở chế độ nền giới hạn.

Ổn tái hợp – phát sinh được quan sát thấy ở các detector quang dẫn, trong đó các photon bị hấp thụ làm sinh ra các hạt tải điện cả dương và âm. Một số hạt tải điện tự do có thể bị tái hợp trước khi thu được. Ngoài ra, sự kích thích nhiệt có thể làm phát sinh các hạt tải điện thêm vào. Cả hai hiện tượng này xảy ra ngẫu nhiên dẫn đến một ồn thăng giáng trong dòng điện ở lối ra.

Ổn Johnson hay là ồn nhiệt gây ra bởi chuyển động ngẫu nhiên của các hạt tải trong vật dẫn. Kết quả dẫn đến sự thăng giáng điện trở nội của detector hoặc trong các điện trở nối tiếp với đầu ra của detector.

Sự rung hay là ồn $1/f$ chưa được hiểu rõ nhưng nó xuất hiện trong các detector quang dẫn đòi hỏi một dòng thiên áp. Độ lớn của nó tỷ lệ với $1/f^B$ với B thường là từ 0,8 – 1,2.

Ồn đọc là đặc trưng của các detector mạng và liên quan đến tính bất ổn định khi chuyển điện tích giữa các bộ lưu trữ.

Ngoài các loại ổn nhiễu kể trên tín hiệu thu còn chịu tác động của *ồn microphone* gây bởi các dao động hoặc sốc chấn động và *ồn nhiệt độ* gây bởi thăng giáng nhiệt độ của detector.

5.1. DETECTOR NHIỆT

Detector nhiệt hoạt động bằng cách biến đổi bức xạ tới thành sự tăng nhiệt độ. Sự thay đổi nhiệt độ có thể được đo bằng nhiều cách. Nó có thể là

điện thế sinh ra ở chỗ nối hai kim loại khác nhau hoặc hiệu ứng hỏa – điện (pyroelectric). Đó là các yếu tố cảm biến giúp ta đo được sự thay đổi nhiệt độ. Người ta bôi đen các yếu tố cảm biến để tăng cường hấp thụ bức xạ, chọn vật liệu làm đen có độ hấp thụ cao và đồng đều sao cho độ nhạy cao trong vùng phổ rộng. Đây là ưu điểm chính của detector nhiệt.

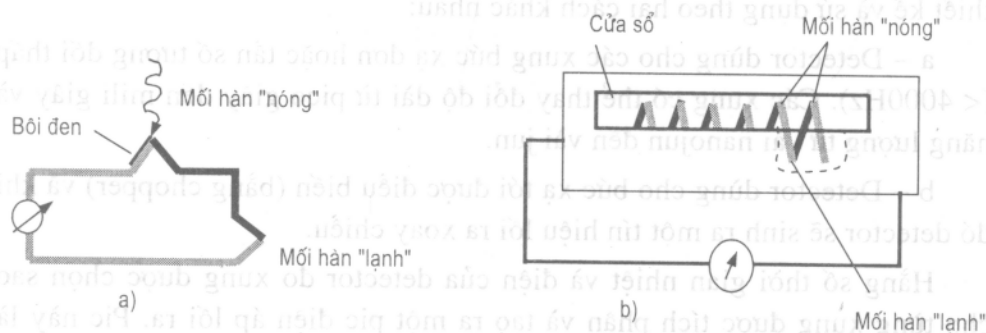
Có hai loại detector nhiệt điển hình thường gặp là:

- Detector pin nhiệt điện, dùng cho bức xạ liên tục;
- Detector hỏa điện (pyroelectric) dùng cho bức xạ xung.

5.1.1. Pin nhiệt điện (thermopile)

Pin nhiệt điện dò bức xạ dựa trên các cặp nhiệt điện. Một cặp nhiệt điện bao gồm hai kim loại khác nhau nối tiếp với nhau. Điểm nối được bôi đen để hấp thụ bức xạ. Sự tăng nhiệt độ của điểm nối sẽ làm sinh ra một hiệu điện thế. Vật liệu làm cặp nhiệt điện thường là Bismuth và antimony có hiệu suất nhiệt điện tương đối cao. Vì điện áp lối ra thấp nên giới hạn khả năng dò của cặp nhiệt điện do độ ồn khuếch đại quy định.

Một cách làm tăng điện áp lối ra là nối tiếp nhiều cặp nhiệt điện (thường là 20 đến 120). Tất cả các điểm nối "nóng" được đặt gần nhau để thu bức xạ. Đây là cách tạo ra một pin nhiệt điện (thermopile). Kinh tế hơn người ta dùng các màng mỏng ghép lại. Loại này có hằng số thời gian từ khoảng 50 – 200ms với những kích thước nhỏ bôi đen bằng ôxyt kim loại. Pin nhiệt điện kích thước lớn, làm bằng các mối nối dây dẫn riêng lẻ, đặt sau một đĩa đen hấp thụ cao có hằng số thời gian dài hơn một giây.



Hình 5.1. a) Cặp nhiệt điện; b) Pin nhiệt điện

Có thể thực hiện các phép đo độ nhạy cao đối với tín hiệu không đổi hoặc tần số vài Hz. Những thiết bị này nhạy trong vùng hồng ngoại nhờ sự

hấp thụ băng rộng của nó. Do đó, phải chú ý cố định góc mở của chúng vì mọi vật ở nhiệt độ phòng, gồm cả người, đều là nguồn bức xạ hồng ngoại. Thông thường các phép đo phải dùng một vật chắn đóng mở dòng bức xạ tới detector rồi quan sát sự thay đổi điện áp lối ra. Sẽ không có gì lạ nếu quan sát thấy tín hiệu "bức xạ âm" nếu nguồn bức xạ lạnh hơn hoặc kém bức xạ hơn vật chắn đã được sử dụng để chỉnh số không của đầu đo.

5.1.2. Detector hỏa điện (pyroelectric)

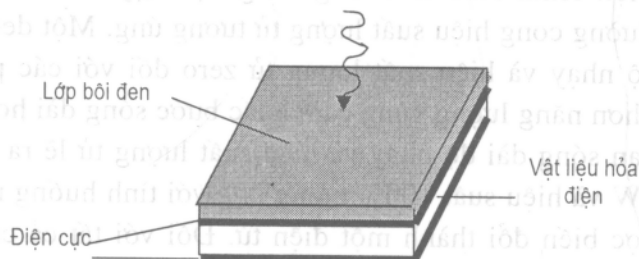
Loại đầu dò này dựa trên hiệu ứng hỏa điện. Một số tinh thể khi bị đốt nóng nở ra làm tính phân cực điện thay đổi, tạo nên điện tích trên các mặt đối diện của vật liệu. Nếu nối hai mặt đối diện này bằng dây dẫn với một mạch kín ta sẽ có một dòng điện xuất hiện trong mạch. Do sự thay đổi nhiệt độ gây nên dòng điện nên detector hỏa điện chỉ đáp ứng các bức xạ xung hoặc đã được điều biến. Sự đáp ứng của nó đối với sự biến thiên của bức xạ nhanh hơn rất nhiều cặp nhiệt điện hoặc pin nhiệt điện và không bị ảnh hưởng bởi bức xạ nền không đổi. Các detector nhỏ với nhiệt khối nhỏ có thể có tính đáp ứng cực nhanh. Khi phủ lên một lớp bôi đen để tạo ra hấp thụ đều trên vùng phổ rộng sẽ làm tăng khối lượng và làm hạ thấp tần số đáp ứng. Điều này là đáng kể vì các yếu tố hỏa điện có độ dày chỉ 25μm trong khi lớp bôi đen dày từ 75 – 100μm. Sự đáp ứng của detector hỏa điện phụ thuộc vào hai hằng số thời gian. Hằng số thời gian nhiệt phụ thuộc chủ yếu vào nhiệt khối và sự dẫn nhiệt sang các vật bao quanh nối với detector. Hằng số thời gian điện là tích của điện trở phân dòng và điện dung phân dòng của mạch detector/khuếch đại. Thông thường detector hỏa điện được thiết kế và sử dụng theo hai cách khác nhau:

a – Detector dùng cho các xung bức xạ đơn hoặc tần số tương đối thấp ($< 4000\text{Hz}$). Các xung có thể thay đổi độ dài từ pico giây đến mili giây và năng lượng từ vài nanojun đến vài jun.

b – Detector dùng cho bức xạ tới được điều biến (bằng chopper) và khi đó detector sẽ sinh ra một tín hiệu lối ra xoay chiều.

Hằng số thời gian nhiệt và điện của detector đo xung được chọn sao cho từng xung được tích phân và tạo ra một pic điện áp lối ra. Pic này là phép đo điện tích sinh ra bởi detector và do đó là phép đo năng lượng xung. Điện tích này phân tán trước khi xung tiếp sau truyền tới. Thời gian tích phân khá dài làm giới hạn khoảng cách giữa các xung hoặc tần số lặp lại của các xung.

Detector đo bức xạ điều biến hoàn toàn khác. Ở đây bức xạ được đo có các chu trình đóng góp 50% và tín hiệu lỗi ra là trung bình của một số lớn các chu trình điều biến. Hệ dò lock – in (xem chương cuối) được sử dụng để loại bỏ hầu hết bức xạ nền. Khi đó giới hạn tần số đáp ứng 100 – 200Hz của các detector hỏa điện này được mở rộng tới 1KHz làm thuận lợi cho việc điều biến nhanh. Điều này đôi khi cần thiết để loại bỏ ồn nền trong các môi trường nhiệt biến đổi nhanh. Tuy nhiên, tần số điều biến nên thấp hơn 200Hz để có đặc trưng ổn cố hữu tốt nhất.



Hình 5.2. Sơ đồ detector hỏa điện

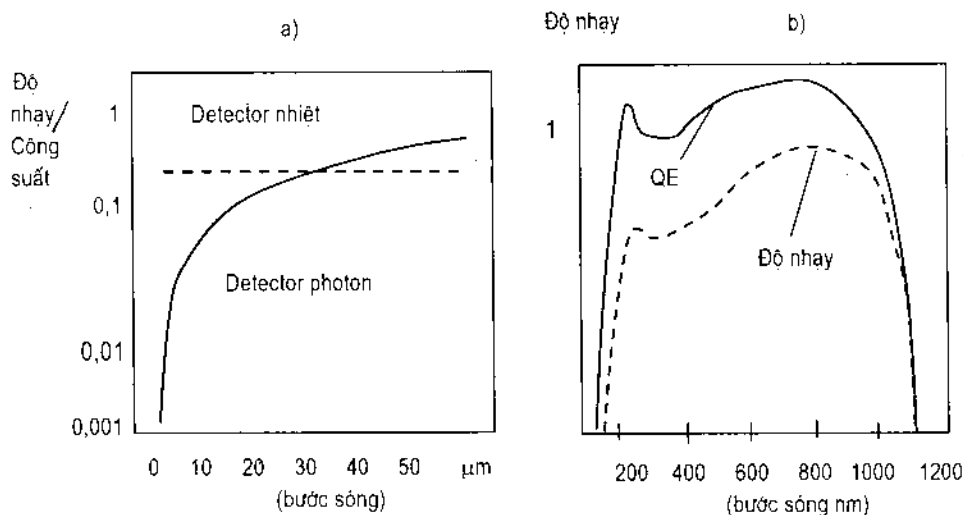
5.2. DETECTOR PHOTON

Detector photon đáp ứng dòng photon tới một cách lượng tử. Trong các điều kiện hoàn hảo người ta tạo ra yếu tố đáp ứng đơn cho từng photon đơn. Tất nhiên, trong thực tế không có những điều kiện hoàn hảo nên phải tính đến những sai lệch nhất định. Các yếu tố đáp ứng đơn có nhiều dạng khác nhau. Nó có thể là một điện tử quang điện trong nhân quang điện, hoặc một cặp điện tử – lỗ trống phân tách trong photodiode, hoặc một điện tử chuyển từ vùng hóa trị sang vùng dẫn trong quang dẫn. Kết quả là một sự thay đổi về dòng hoặc điện áp xuất hiện và sau quá trình khuếch đại, xử lý sẽ được ghi hoặc hiển thị.

Detector photon và nhiệt có những sự khác biệt cơ bản. Detector nhiệt đáp ứng nhiệt. Điều này có nghĩa là 1W cung cấp bởi các photon tử ngoại 200nm tạo ra cùng một kết quả như 1W cung cấp bởi các photon hồng ngoại 10000nm. Detector photon hầu như tạo ra một yếu tố đáp ứng đối với mỗi photon tới mà chưa cần đến bất kỳ sự khuếch đại nào. Năng lượng mang bởi mỗi photon riêng lẻ tỷ lệ nghịch với bước sóng của nó. Do đó, với cùng công suất bức xạ, mật độ dòng photon trong bức xạ UV nhỏ hơn nhiều trong bức xạ IR. Hệ quả là độ nhạy của detector photon (dưới dạng

V/W hoặc A/W) trong vùng tử ngoại thấp hơn đáng kể trong vùng hồng ngoại. Khi đánh giá đặc tính tuyệt đối của detector điều quan trọng không chỉ là nhìn vào các đường cong độ nhạy mà phải chú ý cả các đường cong hiệu suất lượng tử (QE). Các đường cong QE chỉ ra tỷ lệ phần trăm dòng photon tới được biến đổi thành tín hiệu điện, hiệu suất của detector.

Trên hình 5.3a trình bày đường cong độ nhạy tương đối của một detector hiệu suất 100% (thang logarit). Đường nằm ngang là độ nhạy của detector nhiệt. Hình 5.3b là đường cong độ nhạy điển hình của detector silicon và đường cong hiệu suất lượng tử tương ứng. Một detector silicon lý tưởng có độ nhạy và hiệu suất lượng tử zero đối với các photon có năng lượng thấp hơn năng lượng vùng cấm hoặc bước sóng dài hơn $1,1\mu\text{m}$. Ngay dưới giới hạn sóng dài độ nhạy và hiệu suất lượng tử sẽ ra phải vọt lên độ nhạy $0,9\text{A/W}$ và hiệu suất 100% tương ứng với tình huống mỗi một photon tới phải được biến đổi thành một điện tử. Đối với tất cả các photon bước sóng ngắn hơn chúng ta cũng chờ đợi hiệu suất lượng tử 100% và độ nhạy cũng phải có dạng tương tự hình 5.3a. Trên hình 5.3b, bên cạnh một vài đặc trưng đúng như dự đoán, ta thấy sườn đường cong độ nhạy không dốc thẳng đứng đột ngột, không bao giờ đạt được hiệu suất 100% và ở trong vùng sóng ngắn hiệu suất lại bị sụt xuống.



**Hình 5.3. a) Độ nhạy phổ tương đối của detector hoàn hảo;
b) Độ nhạy và hiệu suất lượng tử QE của silicon**

Dưới đây là một số detector photon khác nhau với các cấu trúc cơ bản của chúng.

5.2.1. Tế bào quang điện, nhân quang điện

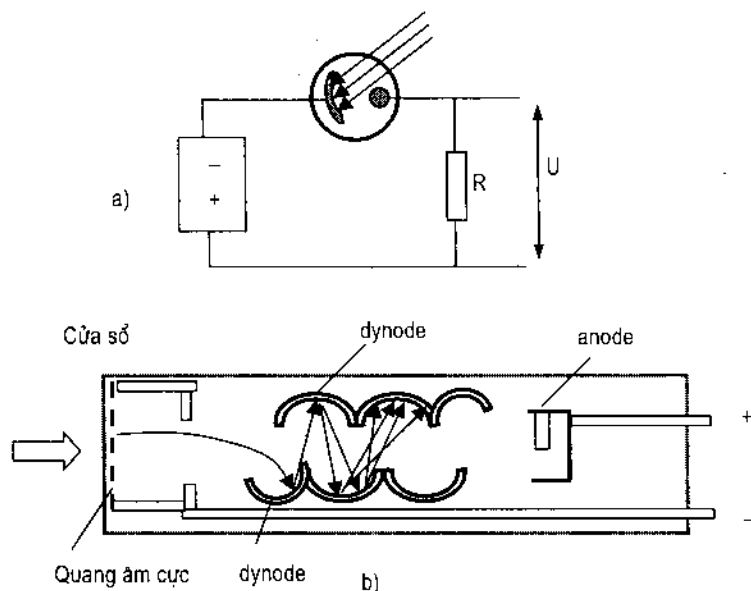
Tế bào quang điện là một detector photon dựa trên hiệu ứng quang điện, trong đó ánh sáng tương tác trực tiếp với điện tử trong vật liệu làm detector. Một photon được hấp thụ sẽ làm giải phóng một điện tử và năng lượng dư được chuyển thành động năng của điện tử. Điện tử với động năng đủ lớn sẽ vượt ra khỏi bề mặt vật liệu. Một hiệu điện thế được thiết lập làm điện tử chuyển động về anode tạo thành một dòng quang điện tỷ lệ với cường độ ánh sáng tới.

Tế bào quang điện có dạng một bầu thủy tinh nhỏ, kín, chân không, trong đó có đặt hai điện cực: anode và cathode. Cathode thường được làm bằng các kim loại kiềm hoặc hợp chất Cs_3Sb , AgOCs . Đối diện với cathode là một cửa sổ trong suốt với ánh sáng cần đo. Hiệu điện thế đặt vào hai cực vào khoảng 75 – 125V. Khi ánh sáng chiếu tới, dòng quang điện xuất hiện trong mạch đi qua điện trở R (hình 5.4a).

Nhân quang điện hoạt động trên cùng nguyên tắc hiệu ứng quang điện nhưng có thêm một bộ phận nhân điện tử làm khuếch đại dòng quang điện bởi hiệu ứng phát xạ điện tử thứ cấp. Nhân quang điện có độ nhạy cao hơn bất kỳ detector nào trong vùng tử ngoại và khả kiến. Trên hình 5.4b mô tả sơ đồ cấu trúc một nhân quang điện có cửa sổ ở một đầu ống (end – on tube). Sát với cửa sổ là quang âm cực bán trong suốt. Chùm quang điện tử tạo thành được hội tụ vào dynode đầu tiên nhờ một cặp điện cực. Các dynode đặt một điện thế tăng dần tạo bởi một dãy các điện trở phân thế (không vẽ trên hình). Mức độ phân thế thường là 1KV. Thời gian phản ứng của nhân quang điện từ 1 – 10ns, vùng phổ làm việc từ 110 – 1000nm.

Để thuận tiện cho sử dụng và loại bỏ ảnh hưởng của môi trường, người ta còn chế tạo loại ống nhân quang điện với cửa sổ ở mặt bên (side – on tube) có các bộ phận tương tự nhưng cấu hình gọn hơn nhiều. Nhân quang điện cửa sổ đầu ống có vùng nhạy quang rộng hơn và đồng đều hơn. Nhân quang điện cửa sổ mặt bên có thời gian phản ứng (rise time) nhanh hơn và đạt được độ nhạy cao hơn, vì hầu hết chúng có quang âm cực không trong suốt tránh được mất mát quang học xảy ra với quang âm cực bán trong suốt của nhân quang điện cửa sổ đầu ống.

Độ ổn định của quá trình nhân điện tử phụ thuộc vào việc đi theo chính xác quỹ đạo của các điện tử. Từ trường có thể ảnh hưởng đáng kể lên hướng chuyển động của dòng điện tử trong nhân quang điện cửa sổ đầu ống nên người ta lắp thêm chắn từ trong các ổ cắm nhân quang điện.



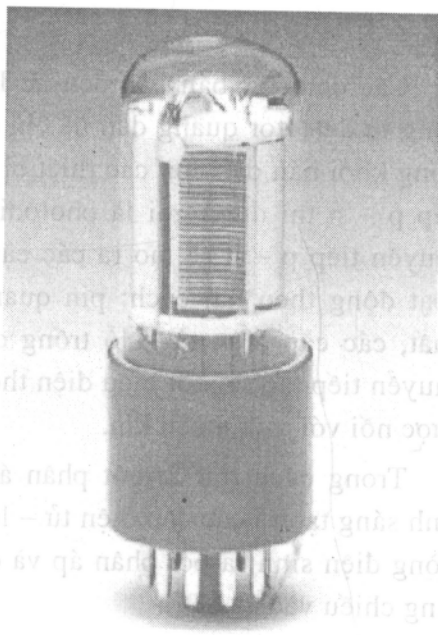
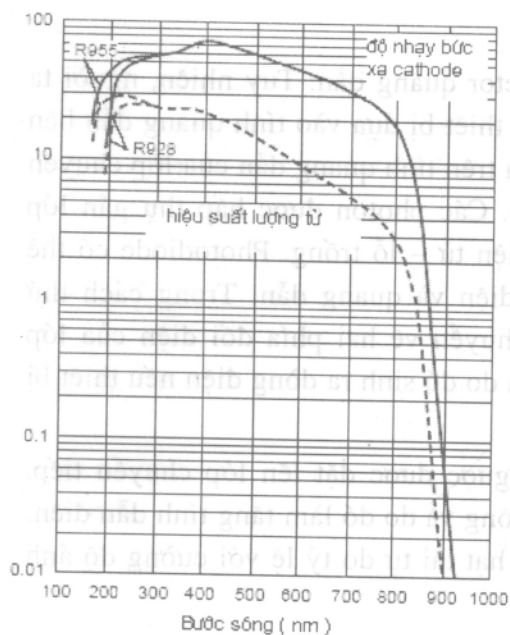
Hình 5.4. a) Tế bào quang điện; b) Nhân quang điện

Một ví dụ điển hình về nhân quang điện hoạt động trong vùng phổ từ tử ngoại đến hồng ngoại gần là nhân quang R928 cửa sổ mặt bên (side – on tube) do hãng Hamamatsu (Nhật) sản xuất. Nhân quang R928 có hiệu suất lượng tử cao, khuếch đại dòng lớn, tỷ lệ tín hiệu trên ồn tốt. Đây là loại nhân quang có vùng hoạt động rộng từ 185 – 900nm, thích hợp cho quang phổ kế băng rộng, quang phổ kế phát xạ và quang phổ kế hấp thụ nguyên tử. Photocathode được làm bằng multialkali, cửa sổ cathode làm bằng kính tử ngoại. Dưới đây là một số đặc điểm kỹ thuật:

- + Độ nhạy sáng của cathode: 250 μ A/lm.
- + Độ nhạy sáng của anode tại hiệu điện thế 1000V: 2500A/lm.
- + Dynode có 9 tầng có bề mặt phát xạ là multiakali.
- + Dòng tối 3 ÷ 50nA.
- + Công suất ngang ồn 1.3.10⁻¹⁶ W.
- + Thời gian đáp ứng: – thời gian tăng xung anode 2,2ns.
– thời gian chuyển tiếp electron 22ns.

Thời gian tăng (rise time) là thời gian để xung lỗi ra tăng từ 10% đến 90% giá trị cực đại khi toàn bộ photocathode được chiếu sáng bởi một xung ánh sáng hàm Delta.

- + Điện thế anode – cathode: 1250V; điện thế anode – dynode cuối: 250V.



Hình 5.5. a) Đồ thị đường đặc trưng độ nhạy và hiệu suất lượng tử của nhân quang R928; b) Nhân quang R – 928

Nguồn nuôi nhân quang R928 bao gồm bộ chuyển thế từ điện xoay chiều 220V sang 15V một chiều. Ổ cắm ống nhân quang C – 6270 sẽ nhận điện thế 15V một chiều thành điện thế cao áp đặt giữa các dynode của nhân quang.

Một số thông số của ổ cắm C – 6270:

- Điện áp vào: $15 \pm 1V_{DC}$
- Dòng vào ứng với điện áp max: 45mA.
- Điện áp lối ra: $0 \div 1250V_{DC}$
- Dòng một chiều ra PTM:
tại 1000 V là $100\mu A$.
tại 500 V là $50\mu A$.
- Thế nhiễu lối ra: 0.008% p – p
- Thời gian hồi đáp điện áp: 80ms.
- Hệ số thay đổi thế vào theo nhiệt độ:
 $\pm 0.01\%/^{\circ}C$.
- Nhiệt độ hoạt động: $0 \div 50^{\circ}C$.
- Nhiệt độ bảo quản: $-20 \div 60^{\circ}C$.



Hình 5.6. Ổ cắm nhân quang C – 6270

5.2.2. Photodiode

Các detector bán dẫn đều là detector quang dẫn. Tuy nhiên, người ta dùng từ detector quang dẫn để chỉ các thiết bị dựa vào tính quang dẫn bên trong khối bán dẫn còn các thiết bị dựa trên tính quang dẫn của lớp chuyển tiếp p – n thì được gọi là photodiode. Các photon được hấp thụ gần lớp chuyển tiếp p – n sẽ tạo ra các cặp điện tử – lỗ trống. Photodiode có thể hoạt động theo hai cách: pin quang điện và quang dẫn. Trong cách thứ nhất, các cặp điện tử – lỗ trống di chuyển về hai phía đối diện của lớp chuyển tiếp tạo ra một hiệu điện thế và do đó sinh ra dòng điện nếu thiết bị được nối với một mạch kín.

Trong cách thứ 2 một phân áp ngược được đặt lên lớp chuyển tiếp. Ánh sáng tạo ra các cặp điện tử – lỗ trống và do đó làm tăng tính dẫn điện. Dòng điện sinh ra bởi phân áp và các hạt tải tự do tỷ lệ với cường độ ánh sáng chiếu vào.

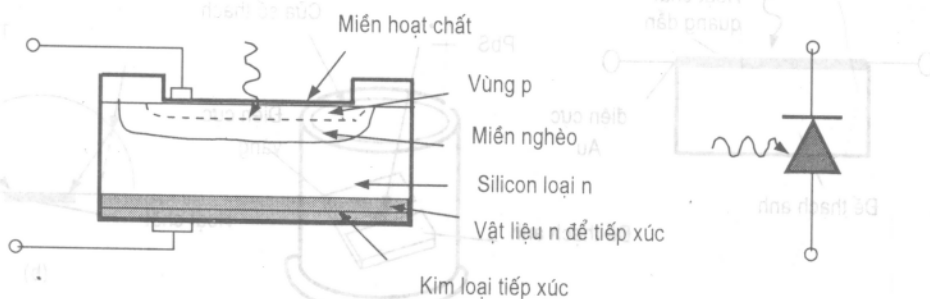
Dòng quang điện trong trường hợp này cũng có thể được khuếch đại thông qua quá trình ion hóa thác lũ nếu tăng phân áp ngược trong một cấu trúc thích hợp. Khi đó thiết bị có tên gọi là photo diode thác lũ (Avalanche Photodiode – APD). Khi cường độ điện trường tạo ra bởi phân áp ngược tăng, các điện tử được gia tốc, nhận thêm năng lượng. Trong quá trình gia tốc này, điện tử va chạm liên tục với mạng tinh thể và có mất mát một chút năng lượng và sẽ đạt tới một vận tốc trung bình bão hòa. Nếu năng lượng đạt được lớn hơn năng lượng vùng cấm E thì có thể làm sinh ra một cặp điện tử – lỗ trống bởi ion hóa do va chạm. Hai điện tử sinh ra lại được gia tốc trong điện trường mạnh và tiếp tục tạo ra các cặp điện tử – lỗ trống khác. Điều này tương tự như trong nhân quang điện nhưng xảy ra bên trong chất rắn chứ không phải trong chân không. Nhờ vậy, một tín hiệu ánh sáng yếu cũng tạo ra một dòng điện đủ lớn đo được. APD là một detector độ nhạy cao, đặc biệt trong vùng hồng ngoại gần.

Photodiode silicon

Photodiode silicon là loại detector photon sử dụng phổ biến nhất. Độ nhạy phổ của nó phủ lên toàn bộ vùng khả kiến và hồng ngoại (hình 5.3b). Độ tuyến tính tốt, độ nhạy tuyến tính với công suất tới từ $10^{-12} - 10^{-2} \text{W}$.

Việc thu tín hiệu cũng đơn giản. Sơ đồ cấu trúc một photodiode silicon điển hình được mô tả trên hình 5.7. Các photon đi qua một lớp mỏng ở mặt

trên làm sinh ra các điện tử và lỗ trống gần vùng chuyển tiếp giữa silicon loại p và loại n. Vùng chuyển tiếp là miền nghèo hạt tải kể cả điện tử và lỗ trống do gradien thế liên quan đến các dải năng lượng. Lớp chuyển tiếp hướng các lỗ trống vào vật liệu p, các điện tử vào vật liệu n. Điều này dẫn đến một hiệu điện thế giữa hai miền và nếu chúng được nối với mạch ngoài sẽ cho dòng điện. Diode silicon đòi hỏi trở tải tổng trở thấp để cung cấp tín hiệu ra tuyến tính trong chế độ pin quang điện. Điều này khiến cho thế lối ra cực đại quá thấp khi sử dụng dao động ký để quan sát. Đặc trưng tuyến tính dễ đạt được hơn trong chế độ phân áp ngược thậm chí với tải $100\text{ K}\Omega$. Lối ra tuyến tính có thể hầu như luôn nhận được với thế phân áp cho phép dễ dàng hiển thị trên dao động ký. Ta có thể dùng phân áp ngược 6V từ một pin Lithium thông dụng.



Hình 5.7. Sơ đồ cấu trúc photodiode silicon

Photodiode thác lũ APD cũng có thể làm từ silicon. Giống như mọi photodiode APD phải có cấu trúc để hấp thụ tối đa photon. Mặt khác, miền nhân hạt tải phải mỏng để giảm thiểu khả năng thác lũ không điều khiển được xảy ra bởi điện trường mạnh dẫn đến bất ổn định hoặc xuất hiện các vi plasma. Trong một vùng mỏng, tính đồng đều của điện trường có thể đạt được lớn hơn.

Photodiode InGaAs

Sau silicon là các diode InGaAs. Loại photodiode này ứng dụng nhiều trong vùng hồng ngoại gần $0,8 - 1,7\mu\text{m}$. Việc tạo ra các detector lớn chất lượng cao còn giới hạn nên đường kính của chúng chỉ khoảng 3mm . Photodiode InGaAs có thể hoạt động ở cả chế độ pin quang điện và phân áp ngược và ở chế độ xung với thời gian phản ứng nano giây.

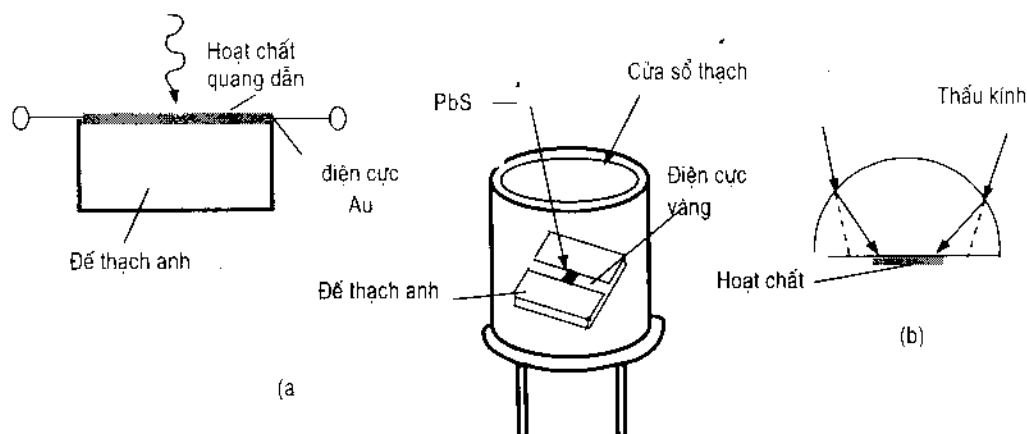
5.2.3. Detector quang dẫn

a) Detector PbS và PbSe

Trong các detector quang dẫn, các photon tới bị hấp thụ sẽ sinh ra các hạt tải điện tự do. Hiệu ứng này gây nên tính dẫn điện của detector. Một hiệu điện thế đặt vào sẽ tạo nên dòng điện tỷ lệ với độ rọi.

PbS và PbSe là ví dụ điển hình về loại detector này. Các detector PbS và PbSe được chế tạo bằng kết tủa hóa học các màng đa tinh thể lên đế thạch anh. Các điện cực vàng (Au) dát mỏng với mép của màng tinh thể tạo ra tiếp xúc điện. Toàn bộ cấu trúc được khếp kín bên trong một vỏ bọc với cửa sổ thích hợp làm bằng thạch anh hoặc sapphire (hình 5.8a).

Vùng phổ hoạt động của PbS là $1 - 4\mu\text{m}$, của PbSe là $2 - 6\mu\text{m}$.



Hình 5.8. a) Detector quang dẫn muối chì;
b) Nguyên lý sử dụng thấu kính kết hợp

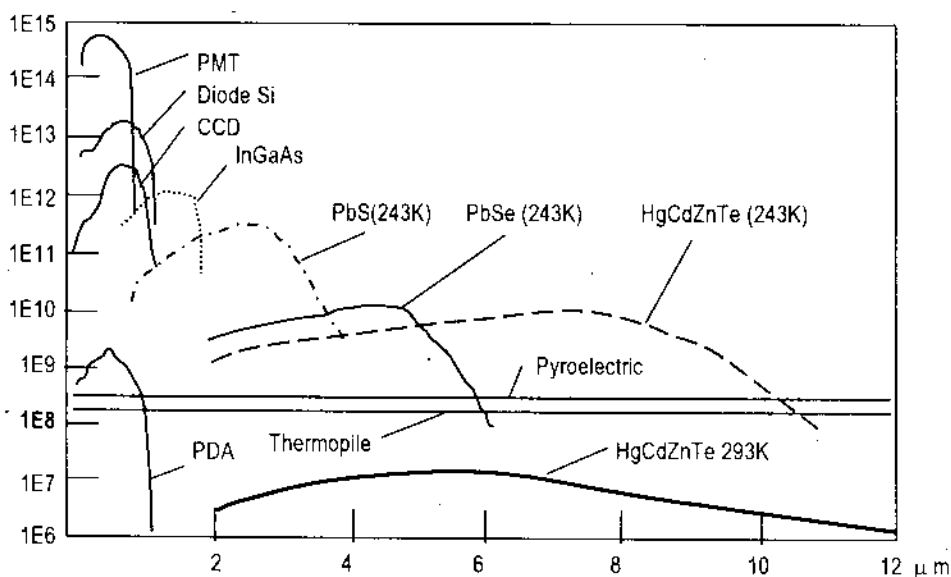
b) Detector HgCdZnTe

Các màng tinh thể HgCdZnTe nuôi bằng phương pháp lai ghép (epitaxy) tạo ra một họ các detector đặc trưng bởi trở kháng thấp nhưng khi được phân áp đúng và giao diện cũng cho đặc trưng tuyến tính, có thể làm việc ở nhiệt độ phòng và gần nhiệt độ phòng.

Detector HgCdZnTe có thể hoạt động ở hai chế độ quang dẫn và quang điện pin quang điện. Trong chế độ quang dẫn, nó được đặc trưng bởi thời gian phản ứng nhanh hơn đáng kể so với PbS và PbSe, đặc biệt ở vùng sóng dài. Kích thước càng nhỏ thì ồn càng nhỏ kèm theo đòi hỏi phải phân áp.

Một cách để tạo ra detector nhỏ mà vẫn tương đương về quang học như kích thước lớn là sử dụng một thấu kính hội tụ (hình 5.8b). Trong đó lớp epitaxy HgCdZnTe được nuôi trực tiếp lên trên bề mặt thấu kính phẳng – cầu. Các detector HgCdZnTe có độ nhạy phổ trong vùng từ 2 – 12 μm . Sự phát triển không ngừng của công nghệ vật liệu detector đã đáp ứng hầu hết các yêu cầu dò tín hiệu quang, tuy nhiên cũng dẫn đến dễ bị lẫn lộn khi lựa chọn hệ tối ưu. Sơ đồ hình 5.9 cho thấy vùng phổ hoạt động cùng với vùng công suất tín hiệu đo thích hợp của một số detector thông dụng.

$$D^* = D \cdot (A_D \cdot \Delta f)^{1/2} = (A_D \cdot \Delta f)^{1/2} / \text{NEP} \text{ (cm.Hz}^{1/2}\text{W}^{-1}\text{)}$$



Hình 5.9. Sự phụ thuộc của độ nhạy D^* vào bước sóng của một số detector

5.3. DETECTOR ĐA KÊNH

Cách thu phổ truyền thống trong quang phổ học là dùng máy đơn sắc quét và một detector đơn (silicon photodiode, nhân quang điện...) đặt ở mặt phẳng khe lối ra của máy. Trong hệ thu phổ quét như vậy phổ sẽ được dựng lại từng điểm một khi quay cách tử hoặc lăng kính để chọn bước sóng. Trong máy thu phổ đa kênh, cách tử hoặc lăng kính được giữ cố định, khe lối ra và detector đơn được thay thế bằng một detector đa kênh cho phép thu toàn bộ phổ.

5.3.1. Kính ảnh

Kính ảnh được dùng để thu quang phổ từ khi bắt đầu có máy quang phổ. Đó chính là một kiểu thu phổ đa kênh vì cùng một lúc thu được nhiều vạch phổ trên mặt phẳng tiêu của thấu kính buồng tối.

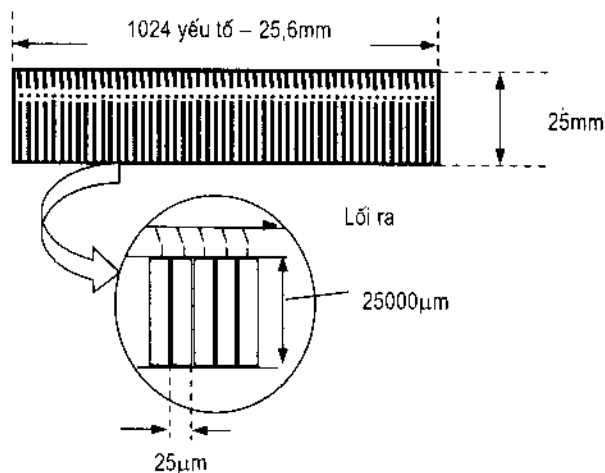
Một lớp nhũ tương nhạy sáng chứa AgBr được phủ lên một đế thủy tinh trong trường hợp kính ảnh hoặc lên đế nhựa trong trường hợp phim ảnh. Dưới tác dụng của ánh sáng, phản ứng quang hóa xảy ra với AgBr làm phân ly nguyên tử bạc. Trong quá trình hiện ảnh, với tác dụng của thuốc hiện các tinh thể AgBr đã được phơi sáng sẽ chuyển thành bạc kim loại tạo nên ảnh âm bản. Nếu cường độ ánh sáng không quá lớn thì lượng bạc giải phóng tỷ lệ bậc nhất với độ rọi sáng. Sau khi mang ra khỏi thuốc hiện và rửa sạch bằng nước, kính ảnh được đưa vào thuốc hãm. Thuốc hãm có tác dụng hòa tan các tinh thể AgBr chưa bị phân huỷ (vì không được chiếu sáng) ra khỏi lớp nhũ tương. Tùy theo quy trình chế tạo các hạt nhũ tương tạo ảnh có kích thước khác nhau. Kích thước hạt nhũ tương càng lớn thì độ nhạy sáng càng lớn nhưng khả năng phân giải phổ càng kém đi. Độ đen của ảnh vạch phổ thu được trên kính tỷ lệ với cường độ của vạch phổ. Kính ảnh cũng được chia thành nhiều loại để dùng cho các vùng bước sóng khác nhau từ tử ngoại, khả kiến đến hồng ngoại gần. Trong vùng hồng ngoại, độ nhạy phổ kém người ta hầu như không dùng kính ảnh.

5.3.2. PDA (Photodiode Array) và CCD (Charge coupled device)

Kính ảnh có thể gọi là detector đa kênh. Tuy nhiên, khái niệm detector đa kênh thực sự chỉ được dùng để chỉ các mạng photodiode (PDA) và CCD (Charge coupled device).

PDA (Photodiode Array)

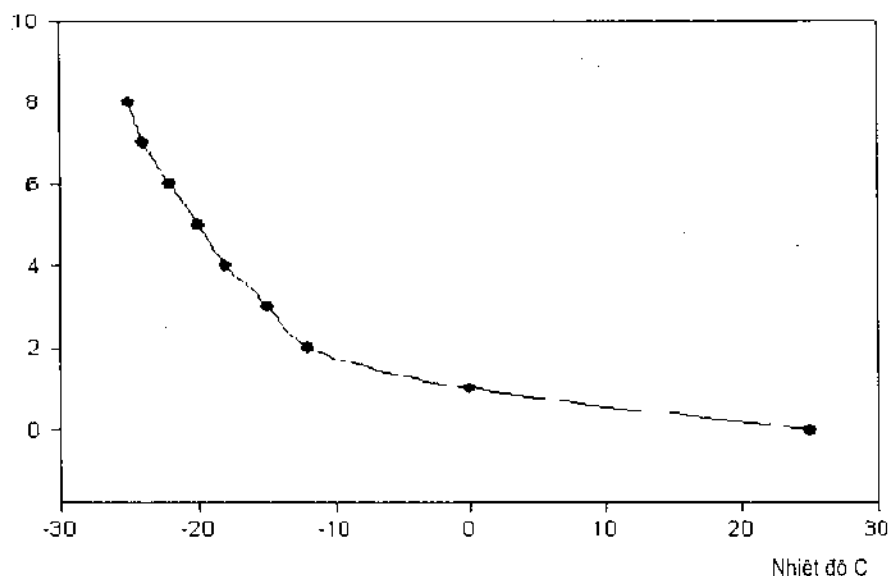
PDA là một mạng tuyến tính các photodiode riêng lẻ được chế tạo nhờ công nghệ mạch tích phân (hình 5.10). PDA còn được gọi là sensor ảnh tuyến tính. Vùng nhạy quang của mỗi photodiode (pixel) có kích thước điển hình là rộng $25\mu\text{m}$, cao $2,5\text{mm}$. Giữa các pixel không có vùng "chết". Độ rộng pixel hẹp là để có được độ phân giải phổ cao. Độ cao pixel lớn để thu được nhiều tín hiệu. Chiều cao này được đặt dọc theo chiều khe máy quang phổ. Số pixel có thể là: 128, 256, 512, 1024.



Hình 5.10. Cấu tạo PDA

Các pixel hoạt động theo cơ chế quang dẫn. Dòng photon tới trên mỗi pixel sẽ sinh ra dòng quang điện. Dòng quang điện này được nạp vào các tụ điện riêng rẽ. Khi "đọc" PDA, các tụ điện sẽ lần lượt được phóng điện vào mạch điện của "chip" và thông tin được lấy ra theo một trình tự thời gian đặt sẵn. Khi PDA được "đọc" từng pixel sẽ được đọc lần lượt chứ không phải đồng thời. Đó là quá trình đo điện tích electron (tính ra e) dự trữ trong từng pixel. Các chuyển mạch điện tử nối với từng photodiode được tạo ra ngay trong cấu trúc của "chip". Thời gian lấy tích phân là một thông số có ý nghĩa khi xây dựng phép đo với PDA.

Đặc biệt là ngay cả khi không có ánh sáng tới vẫn có rò dòng điện trong mỗi photodiode. Dòng điện này gọi là dòng tối. Tụ điện của từng pixel nạp cả dòng tối và dòng quang điện khi được chiếu sáng. Với thời gian lấy tích phân dài, các tụ điện sẽ bị đầy và làm mất hết thông tin hữu ích. Thời gian bão hòa là đại lượng đặc trưng cho quá trình này. Trên hình 5.11 là đường cong mô tả sự phụ thuộc của thời gian bão hòa vào nhiệt độ của một PDA thông dụng. Do mức độ bão hòa cao, dẫn đến khả năng phơi sáng lớn, PDA được dùng để đo phổ tín hiệu ánh sáng mạnh. Tuy nhiên, PDA có độ ồn dọc lớn hàng trăm đến hàng nghìn electron/kênh nên độ nhạy bị giới hạn. Để đo tín hiệu ánh sáng yếu người ta dùng CCD.



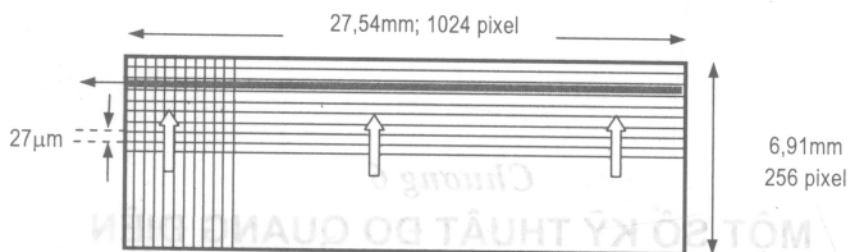
Hình 5.11. Thời gian bão hòa của PDA theo nhiệt độ

CCD (Charge coupled device)

CCD là một hệ cảm biến quang hai chiều (2D array of photosensors). Giống như PDA, CCD được chế tạo nhờ công nghệ mạch tích phân tạo thành một "chip" bán dẫn. Mạng hai chiều này có cấu trúc điện tử khác với PDA. Không có chuyển mạch điện tử nối với từng pixel. Kích thước điển hình của mỗi pixel là $27 \times 27 \mu\text{m}^2$ được xếp thành 256 hàng và 1024 cột (hình 5.12). Giữa các pixel không có vùng "chết" mặc dù có sự phân cách tốt giữa từng kênh tín hiệu. Khi đọc, tín hiệu (dưới dạng điện tích) được chuyển dịch tuần tự sang chốt lồi ra. CCD có độ ồn đọc rất thấp, do đó có độ nhạy rất cao, tương đương với nhân quang điện. Độ ồn đọc của mỗi pixel chỉ vài electron. CCD có độ nhạy 100 lần lớn hơn PDA và thường được dùng khi đo tín hiệu sáng yếu như tán xạ Raman, huỳnh quang...

Khi dùng CCD đo ánh sáng liên tục cần có một màn sập (shutter) nếu không sẽ bị méo ảnh do điện tích chuyển dời trong quá trình đọc.

Bản chất hai chiều của CCD cho phép thu phổ ảnh nếu dùng với máy quang phổ thích hợp (imaging spectrograph). Nhiều tín hiệu quang được chiếu lên các phần khác nhau của khe lối vào của máy quang phổ. Ảnh phân giải phổ của tín hiệu quang được chiếu lên CCD đặt trên mặt phẳng tiêu của máy quang phổ. Khi đó nhiều phổ có thể đồng thời thể hiện trên màn hình computer để so sánh và phân tích. Ví dụ, phổ từ các phần khác nhau của một đèn với tín hiệu quang đưa tới khe bằng các sợi quang.

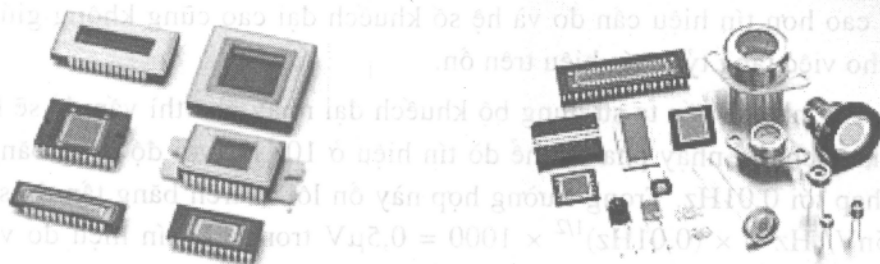


Hình 5.12. Sơ đồ cấu trúc CCD

Một CCD có thể chia làm nhiều rãnh, mỗi rãnh chứa 1024 pixel. Số rãnh, chiều cao rãnh và khoảng cách giữa các rãnh có thể đặt trước nhờ một phần mềm điều khiển. Số rãnh tối đa là 256, bằng số hàng pixel của CCD. Số liệu từ mỗi rãnh có thể được hiển thị trên màn hình máy tính dưới dạng phổ gián đoạn hoặc ảnh đơn với thang màu khác nhau. CCD cũng có thể dùng ở chế độ ảnh một chiều. Khi đó các pixel của từng cột được nối lại với nhau, tạo thành một mạng tuyến tính giống PDA. Ở chế độ này CCD hoạt động như PDA nhưng có độ nhạy cao hơn.

Bảng 5.1. So sánh một số thông số của PDA và CCD

Thông số	PDA	CCD
Kích thước pixel	25 μm x 2500 μm	27 μm x 27 μm
Mức độ bão hòa	$125 \cdot 10^6 \cdot e$	$250 \cdot 10^3 \cdot e$
Phơi sáng bão hòa	$> 107 \text{ mJ} \cdot \text{cm}^{-2}$	$> 250 \text{ pJ} \cdot \text{cm}^{-2}$
Dòng tối ở 25°C	$< 0,1 \text{ pA/pixel}$	$< 0,1 \text{ fA/pixel}$
Giới hạn đo	$< 3,3 \text{ pJ} \cdot \text{cm}^{-2}$ ($\sim 3800e$)	$< 3,8 \text{ fJ} \cdot \text{cm}^{-2}$
Vùng phổ	180 – 1100nm	180 – 1100nm



Hình 5.13. Một số photodiode, PDA và CCD

Chương 6

MỘT SỐ KỸ THUẬT ĐO QUANG ĐIỆN

6.1. KỸ THUẬT KHUẾCH ĐẠI LOCK – IN

Các bộ khuếch đại lock – in được sử dụng để dò và đo tín hiệu AC rất nhỏ, có thể đến vài nano vôn. Kỹ thuật này cho phép thực hiện các phép đo chính xác khi tín hiệu nhỏ bị che lấp bởi các nguồn nhiễu ồn lớn hơn hàng nghìn lần. Khuếch đại lock – in sử dụng kỹ thuật đo nhảy pha nhằm tách biệt thành phần tín hiệu ở một tần số và pha so sánh xác định, ồn nhiễu ở các tần số khác tần số so sánh bị loại trừ và không ảnh hưởng đến phép đo.

Ví dụ, tín hiệu cần đo là một tín hiệu hình sin, 10nV ở tần số 10Hz. Vì tín hiệu cần đo yếu nên phải được khuếch đại vượt lên ồn nhiễu. Một bộ khuếch đại tốt có ồn thấp với ồn lối vào khoảng $5\text{nV/Hz}^{1/2}$. Nếu độ rộng băng tần khuếch đại là 100KHz và hệ số khuếch đại là 1000 thì khi đó tín hiệu đo lối ra là $10\text{nV} \times 1000 = 10\text{ }\mu\text{V}$ và tín hiệu ồn lối ra là $5\text{nV/Hz}^{1/2} \times (100\text{KHz})^{1/2} \times 1000 = 1,6\text{mV}$. Ta sẽ không thể đo được tín hiệu cần đo trừ khi tách biệt được tần số của tín hiệu quan tâm.

Nếu ta dùng một bộ lọc băng tần tốt ở sau bộ khuếch đại với $Q = 100$ ứng với tần số trung tâm 10KHz thì mọi tín hiệu trong một băng tần 100Hz ($= 10\text{KHz}/Q$) sẽ được thu. Tín hiệu ồn sau bộ lọc sẽ là: $5\text{nV/Hz}^{1/2} \times (100\text{Hz})^{1/2} \times 1000 = 50\text{ }\mu\text{V}$, còn tín hiệu đo vẫn là $10\text{ }\mu\text{V}$. Như vậy ồn lối ra vẫn cao hơn tín hiệu cần đo và hệ số khuếch đại cao cũng không giúp ích gì cho việc tăng tỷ lệ tín hiệu trên ồn.

Tuy nhiên, nếu ta sử dụng bộ khuếch đại nhảy pha thì vấn đề sẽ khác. Bộ khuếch đại nhảy pha có thể dò tín hiệu ở 10KHz với độ rộng băng tần rất hẹp tới 0,01Hz. Trong trường hợp này ồn lối ra trên băng tần đo sẽ chỉ là $5\text{nV/Hz}^{1/2} \times (0,01\text{Hz})^{1/2} \times 1000 = 0,5\text{ }\mu\text{V}$ trong khi tín hiệu đo vẫn là $10\text{ }\mu\text{V}$. Tỷ số tín hiệu trên ồn bây giờ là 20 và có thể đo tín hiệu một cách chính xác.

6.1.1. Nguyên tắc của kỹ thuật khuếch đại nhảy pha

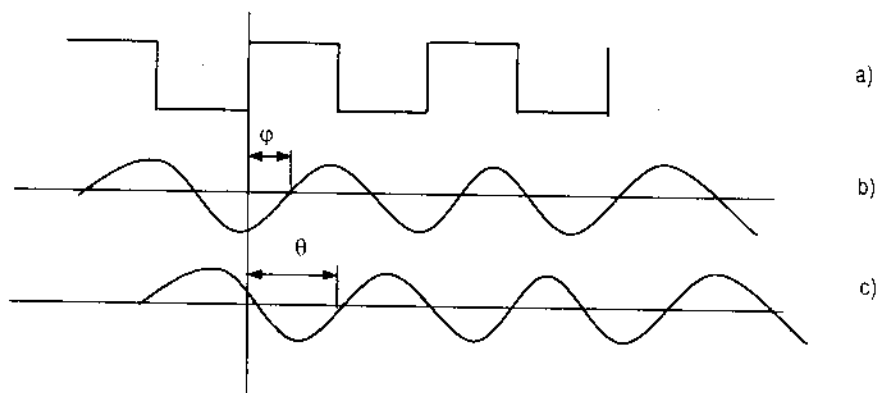
Các phép đo lock – in đều đòi hỏi một tần số so sánh (reference). Thông thường trong một thí nghiệm quang, mẫu đo được kích thích bởi một tần số lặp lại xác định và hệ lock – in sẽ thu tín hiệu đáp ứng ở một tần số so sánh.

Ví dụ trên hình 6.1 tín hiệu so sánh (a) có dạng xung vuông tần số ω_r . Đó có thể là tín hiệu đồng bộ lấy ra từ một máy phát chức năng. Nếu tín hiệu hình sin lấy ra từ máy phát chức năng này được sử dụng để kích thích thí nghiệm thì tín hiệu đáp ứng có thể có dạng (b)

$$V_s = V_0 \cdot \sin(\omega_r t + \varphi_s)$$

với V_s là biên độ, ω_r – tần số tín hiệu, φ_s là pha của tín hiệu đáp ứng cần đo.

Bộ khuếch đại lock – in sẽ phát ra một tần số so sánh riêng (tần số so sánh nội) thường là nhờ một mạch khóa pha được gài bởi tần số so sánh bên ngoài. Tín hiệu so sánh nội có dạng $U = U_0 \cdot \sin(\omega_L t + \theta)$.



Hình 6.1

a) Tín hiệu so sánh ngoài; b) Tín hiệu cần đo; c) Tín hiệu so sánh nội

Bộ khuếch đại nhảy pha sẽ khuếch đại tín hiệu cần đo rồi nhân nó với tín hiệu so sánh nhờ một bộ nhân. Lối ra của bộ khuếch đại nhảy pha đơn giản là tích của hai sóng hình sin:

$$V_{NP} = V_0 \cdot \sin(\omega_r t + \varphi) \cdot U_0 \cdot \sin(\omega_L t + \theta)$$

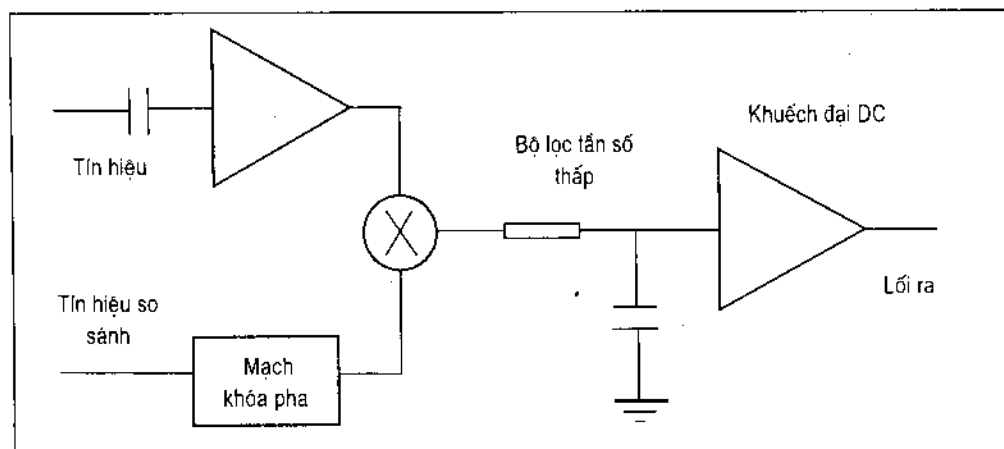
$$= 1/2 \cdot V_0 \cdot U_0 \cos[(\omega_r - \omega_L)t + \varphi - \theta] - 1/2 \cdot V_0 U_0 \cos[(\omega_r + \omega_L)t + \varphi + \theta]$$

Lối ra của bộ khuếch đại nhảy pha là hai tín hiệu sin xoay chiều ở tần số $(\omega_r - \omega_L)$ và $(\omega_r + \omega_L)$. Nếu ta dùng một bộ lọc tần số xoay chiều thì sẽ

không còn tín hiệu lỗi ra. Tuy nhiên, nếu $\omega_r = \omega_L$ thì thành phần xoay chiều tần số hiệu sẽ trở thành tín hiệu một chiều đi ra khỏi bộ lọc:

$$V_{DC} = 1/2 V_0 U_0 \cos(\varphi - \theta)$$

Tín hiệu một chiều này tỷ lệ với biên độ của tín hiệu cần đo V_0 .



Hình 6.2. Sơ đồ khối mạch khuếch đại Lock – in đơn pha

Việc xem xét bản chất vật lý của phép nhân này và quá trình lọc trong các loại khuếch đại lock – in khác nhau là cần thiết. Trong các hệ lock – in tương tự (analog) truyền thống, tín hiệu đo và chỉ dẫn là các tín hiệu điện thể tương tự.

Hai tín hiệu này được nhân với nhau trong một bộ nhân tương tự và sau đó được lọc nhờ một hoặc nhiều tầng mạch lọc RC. Trong các bộ lock – in số (digital) tần số cần đo và tần số so sánh được biểu diễn thành một chuỗi chữ số. Việc nhân và lọc được thực hiện một cách toán học nhờ một chip gia công tín hiệu số.

Giả sử ở lối vào của hệ khuếch đại lock – in có thêm các tín hiệu ồn. Khi đó bộ khuếch đại nhảy pha và bộ lọc tần số thấp chỉ dò các tín hiệu có tần số rất gần với tần số so sánh của hệ lock – in. Các tín hiệu ồn ở tần số xa với tần số so sánh sẽ bị loại trừ nhờ bộ lọc. Tín hiệu ồn ở tần số rất gần với tần số so sánh có thể được thu cùng với tín hiệu đo ở lối ra tuy với cường độ nhỏ. Việc làm suy giảm tín hiệu ồn lối ra tùy thuộc vào độ rộng băng tần của bộ lọc tần số thấp. Độ rộng băng tần của bộ lọc càng hẹp thì càng loại trừ được ồn có tần số gần tần số so sánh. Độ rộng băng tần của bộ lọc tần số thấp xác định độ rộng băng tần của bộ khuếch đại nhảy pha.

Chỉ tín hiệu cần đo ở tần số so sánh được chuyển thành tín hiệu một chiều và không bị ảnh hưởng bởi bộ lọc.

Tần số so sánh lock – in

Ta cần phải tạo ra tần số so sánh lock – in bằng tần số của tín hiệu đo. Không những thế, hiệu pha các tín hiệu này cũng phải giữ không đổi theo thời gian. Nếu không, $\cos(\varphi - \theta)$ sẽ thay đổi và V_{DC} không còn là tín hiệu một chiều.

Nói cách khác tín hiệu so sánh lock – in phải được khóa pha với tín hiệu cần đo. Các bộ khuếch đại lock – in sử dụng một mạch khóa pha để phát ra tần số so sánh. Một tín hiệu so sánh ngoài được đưa vào bộ lock – in. Mạch khóa pha trong bộ lock – in sẽ khóa bộ phát dao động tần số so sánh nội với tín hiệu so sánh ngoài này, tạo ra một tín hiệu hình sin tần số ω_r với một độ lệch pha cố định θ . Bởi vì mạch khóa pha chủ động dò tìm tần số so sánh ngoài, nên các thay đổi trong tần số so sánh ngoài không ảnh hưởng đến phép đo.

Trong trường hợp trên, tần số so sánh ngoài lấy từ nguồn kích thích. Đối với nhiều trường hợp khác có thể dùng chính bộ phát dao động bên trong lock – in để điều khiển nguồn kích thích. Đó là một máy phát chức năng với tín hiệu sin lối ra luôn khóa pha với bộ phát tần số so sánh nội.

Biên độ và pha

Tín hiệu lối ra của bộ dò nhảy pha tỷ lệ với $V_0 \cdot \cos(\varphi - \theta) = V_0 \cdot \cos \alpha$ với $\alpha = (\varphi - \theta)$ là độ lệch pha giữa tín hiệu đo và tín hiệu so sánh nội. Bằng cách điều chỉnh θ ta có thể làm cho $\alpha = (\varphi - \theta) = 0$ và ta có thể đo được giá trị V_0 . ($\cos \alpha = 1$). Hệ lock – in với một bộ dò nhảy pha gọi là lock – in đơn pha và lối ra của nó là $V_0 \cdot \cos \alpha$.

Có thể loại bỏ được sự phụ thuộc vào pha này bằng cách thêm vào một bộ dò nhảy pha thứ hai. Nếu bộ dò nhảy pha thứ hai này nhân tín hiệu đo với tín hiệu so sánh nội đã bị dịch pha 90° , tức là nhân với $U_0 \cdot \sin(\omega_L t + \theta + 90^\circ)$ thì tín hiệu lối ra sau bộ lọc sẽ là:

$$V_{DC2} = 1/2 V_0 U_0 \sin(\varphi - \theta) \sim V_0 \sin \alpha$$

Như vậy ta sẽ có hai tín hiệu lối ra tương ứng tỷ lệ với $\cos \alpha$ và $\sin \alpha$. Ta gọi hai thành phần lối ra này là X và Y:

$$X = V_0 \cdot \cos \alpha ; \quad Y = V_0 \cdot \sin \alpha.$$

Hai đại lượng này thể hiện một vectơ tín hiệu có liên hệ với bộ dao động tần số so sánh lock – in. X gọi là thành phần cùng pha, Y gọi là thành phần "vuông góc" vì khi $\alpha = 0$, X chỉ tín hiệu cần đo, trong khi đó $Y = 0$.

Bằng cách tính biên độ R của vectơ tín hiệu, sự phụ thuộc vào pha có thể loại bỏ: $R = (X^2 + Y^2)^{1/2} = V_0$.

R cho biết biên độ tín hiệu cần đo và không phụ thuộc vào lệch pha giữa tín hiệu đo và tín hiệu so sánh lock – in.

Một hệ lock – in lưỡng pha có hai bộ dò nhạy pha với máy phát dao động so sánh lệch pha nhau 90° cho phép đo X, Y và R trực tiếp. Ngoài ra có thể xác định độ lệch pha giữa tín hiệu đo và tín hiệu so sánh theo công thức sau:

$$\alpha = \text{tg}^{-1}(Y/X).$$

Giá trị đo thực của lock – in

Thực chất lock – in đo giá trị gì? Theo lý thuyết Fourier, một tín hiệu lối vào bất kỳ đều có thể biểu diễn bằng tổng của rất nhiều sóng hình sin với biên độ, tần số và pha khác nhau. Đó là biểu diễn của tín hiệu trên phương diện tần số.

Các dao động ký thông thường thể hiện tín hiệu về phương diện thời gian, sự thể hiện này không mang nhiều thông tin về các tần số khác nhau tạo nên tín hiệu. Một bộ lock – in nhân tín hiệu đo với một sóng hình sin ở tần số so sánh. Tất cả các thành phần của tín hiệu lối vào đều được đồng thời nhân với tín hiệu so sánh. Về mặt toán học, các sóng hình sin tần số khác nhau là vuông góc với nhau, có nghĩa là giá trị trung bình của hai sóng hình sin là bằng 0 trừ khi hai tần số chính xác bằng nhau. Như vậy tích của phép nhân này sẽ tạo ra một tín hiệu một chiều tỷ lệ với thành phần Fourier của tín hiệu có tần số khóa chính xác với tần số so sánh. Sau đó bộ lọc đặt ở sau sẽ cho giá trị trung bình trong đó đã loại bỏ tích của tín hiệu so sánh với tất cả các thành phần có tần số khác. Bộ khuếch đại lock – in đo thành phần Fourier đơn của tín hiệu ở tần số so sánh.

Ví dụ một tín hiệu dạng chuỗi xung vuông có thể biểu diễn theo chuỗi Fourier như sau:

$$S(t) = 1,273\sin(\omega t) + 0,4244\sin(3\omega t) + 0,2546.\sin(5\omega t) + \dots$$

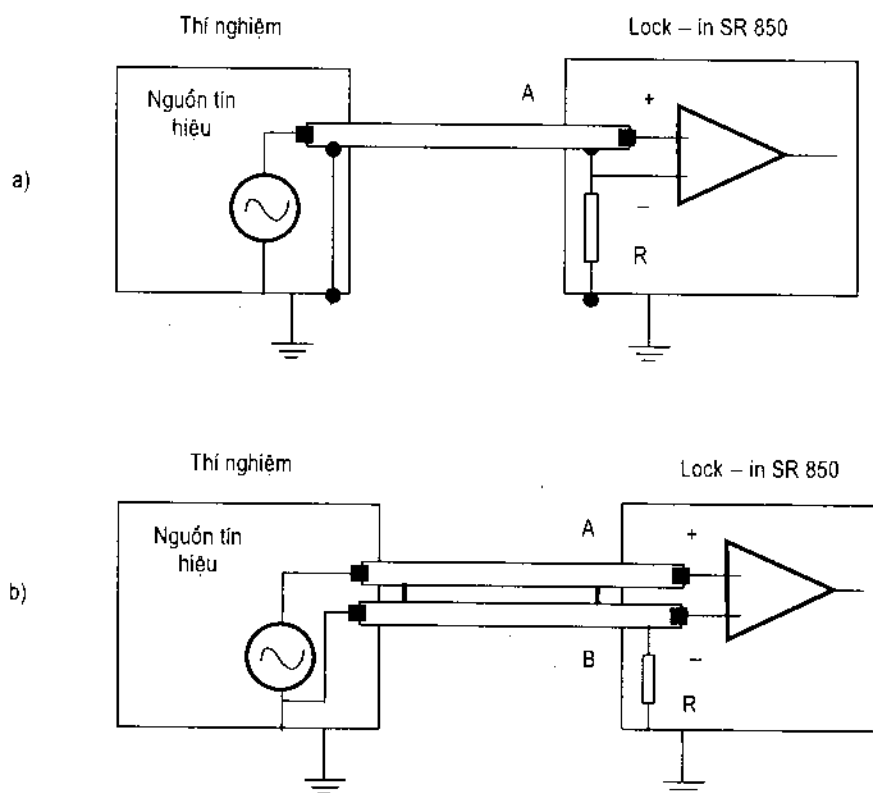
với $\omega = 2\pi f$.

Bộ lock – in khóa với tần số f sẽ chỉ tách biệt thành phần thứ nhất. Tín hiệu đo được sẽ là $1,273 \sin(\omega t)$ chứ không phải tín hiệu xung vuông.

Trong thực tế, tín hiệu lỗi vào gồm tín hiệu đo và ồn. Ổn được xem là các tín hiệu biến thiên ở mọi tần số. Một bộ lock – in lý tưởng chỉ đáp ứng ồn ở tần số so sánh, ồn ở các tần số khác sẽ bị loại bỏ nhờ bộ lọc tần số thấp.

Ghép nối lỗi vào

Để đạt được chính xác cao nhất cho phép đo, cần phải chú ý giảm thiểu các nguồn nhiễu khác nhau có thể xuất hiện trong phòng thí nghiệm (như là mô tơ, máy phát tín hiệu...) và vấn đề chênh lệch đất giữa đầu đo và lock – in. Có hai cách nối tín hiệu điện áp vào lock – in: nối một đầu đơn và nối vi sai.



Hình 6.3. Sơ đồ nối tín hiệu lỗi vào lock – in

a) Nối một đầu A; b) Nối vi sai hai đầu A – B

Trong cách nối thứ nhất (hình 6.3a), tín hiệu được đưa vào đầu A của lock – in bằng một dây bọc kim. Lock – in sẽ dò tín hiệu là độ chênh điện

áp giữa lõi và vỏ dây dẫn. Người ta không nối trực tiếp vỏ của cáp A với đất mà nối với đất của mạch lock – in qua một điện trở. Giá trị điện trở này thông thường từ 10Ω đến $1K\Omega$. Điều này tránh được vấn đề mạch nối đất giữa thí nghiệm và lock – in do điện thế đất khác nhau. Tuy nhiên, ồn nhiều cảm ứng trên vỏ dây dẫn sẽ xuất hiện như là ồn đối với lock – in. Điều này là không tốt vì lock – in không thể loại bỏ được ồn nhiều này.

Trong cách nối thứ hai (hình 6.3b) lock – in đo hiệu điện thế giữa hai lõi dây dẫn nối vào hai đầu vào A và B của lock – in. Nhiều ồn cảm ứng trên vỏ dây sẽ không chuyển thành tín hiệu ồn. Khi sử dụng hai cáp, điều quan trọng là phải giữ sao cho chúng có cùng độ dài khi đi từ thí nghiệm đến lock – in. Đặc biệt là không để tạo thành mạch kín có diện tích lớn giữa hai dây. Diện tích mạch lớn sẽ nhạy với cảm ứng từ.

6.1.2. Ví dụ

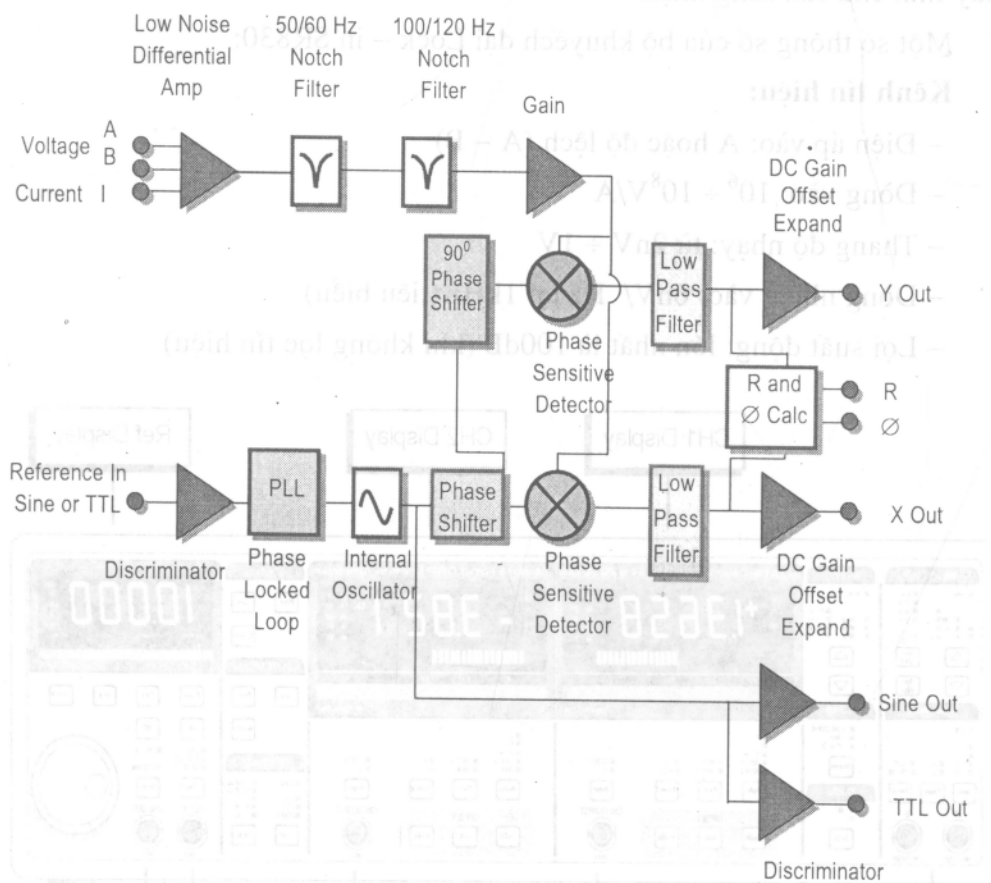
Để làm ví dụ minh họa, ta xét bộ khuếch đại lock – in DSP – SR – 830 (của hãng Stanford, USA). Sơ đồ khối của hệ DSP lock – in amplifier SR – 830 được trình bày trên hình 6.4. Đây là một hệ lock – in lưỡng pha.

Có thể chia hệ DSP lock – in amplifier SR – 830 này làm 5 bộ phận: Key board, display board, Analog input board, DSP logic board + CPU và Power supply board.

DSP logic board lấy tín hiệu digital từ A/D converter của khối Analog input board và thực hiện tất cả các phép tính toán liên quan đến phép đo trước khi nó được thể hiện trên màn hình, bao gồm cả việc phát ra tín hiệu so sánh hình sin, trộn tín hiệu, lọc tần số...

Mạch khóa pha so sánh sẽ điều khiển bộ phận này khi chế độ so sánh được chọn từ bên ngoài. Các hoạt động này được thực thi nhờ 5 khối chức năng: bộ gia công tín hiệu số (DSP), các đầu ra DAC, máy phát tín hiệu đặt thời gian, máy phát đồng hồ so sánh và giao diện I/O. Nhờ các thuật toán có hiệu quả cao, hệ này có thể hoạt động khóa thời gian tới 100kHz với độ lọc 24dB/oct trên cả hai kênh X và Y cũng như cung cấp một tín hiệu hình sin tổng hợp lỗi ra. Hệ lock – in SR – 830 sử dụng một bộ gia công tín hiệu số Motorola 24 – bit DSP56001 (U501). Bộ gia công tín hiệu số DSP này có cấu hình không dùng bộ nhớ ngoài. Thuật toán lock – in sẽ hoạt động hoàn toàn trong phạm vi chương trình nội và bộ nhớ dữ liệu của chính DSP.

Đường dẫn (Bus) gia công chủ được nối với CPU thông qua giao diện I/O trên DSP logic board. Bộ gia công 80C186 trên CPU board sẽ tác dụng như bộ gia công chủ đối với DSP. Các lệnh và chương trình cơ sở (firm ware) DSP được tải về từ CPU board để tạo ra các mode hoạt động khác nhau. Bộ phận Analog input board là cầu nối quan trọng giữa tín hiệu phổ lối vào và bộ gia công DSP. Từ panel mặt tiền BNC tín hiệu phổ đi qua bộ khuếch đại ngoại vi biến dạng thấp, các tầng khuếch đại, các bộ lọc rồi cuối cùng đến A/D converter. Một khi đã chuyển thành dạng số, tín hiệu lối vào sẽ được gia công bởi bộ DSP.



Hình 6.4. Sơ đồ khối của hệ DSP lock – in amplifier SR – 830 (Stanford, USA)

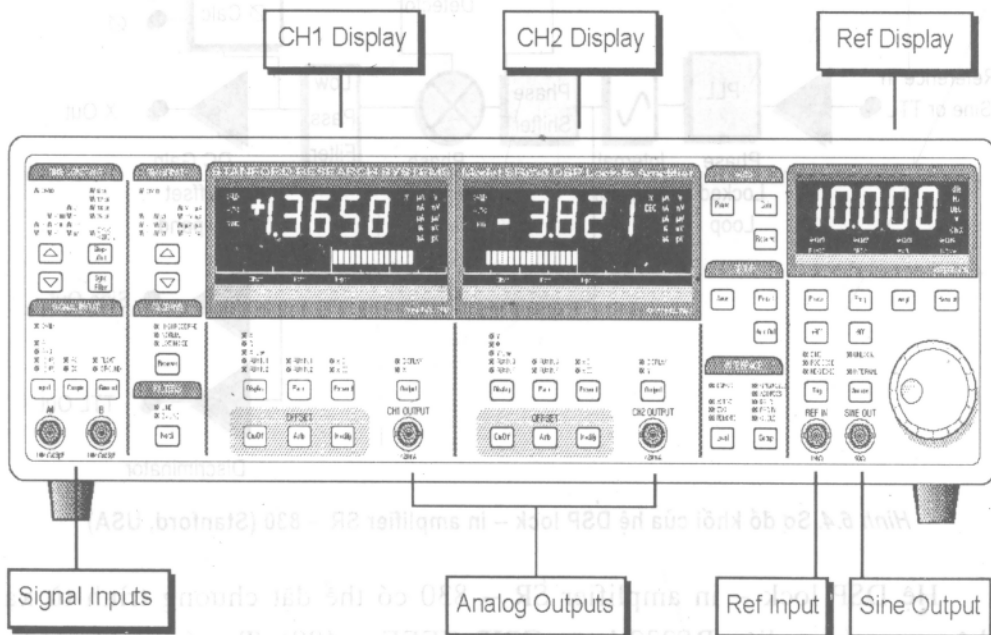
Hệ DSP lock – in amplifier SR – 830 có thể đặt chương trình từ xa thông qua giao diện RS232 hoặc GPIB (IEEE – 488). Ta có thể khai báo giao diện lối ra nhờ bàn phím hoặc lệnh OUTX khi bắt đầu mỗi chương

trình để chỉ dẫn sự hồi đáp đến giao diện mong muốn. Có thể dùng một card GPIB để liên lạc giữa máy tính và SR – 830. Trước khi liên lạc với SR – 830 thông qua giao diện GPIB cần phải đặt địa chỉ thiết bị SR – 830. Địa chỉ này được đặt từ bàn phím và có thể đặt giữa 1 và 30. Sự liên lạc với SR – 830 sử dụng các ký tự ASCII. Các lệnh có thể hoặc là chữ thường hoặc chữ in hoặc chứa các ký tự trống. Hệ SR – 830 có bộ nhớ lối vào 256 ký tự và tiến hành các lệnh theo trật tự nhận được. Tương tự SR – 830 cũng có một bộ nhớ lối ra 256 ký tự để lưu trữ các tín hiệu lối ra cho đến khi máy tính chủ sẵn sàng nhận.

Một số thông số của bộ khuếch đại Lock – in SR830:

Kênh tín hiệu:

- Điện áp vào: A hoặc độ lệch (A – B)
- Dòng vào: $10^6 \div 10^8 \text{ V/A}$
- Thang độ nhạy: từ $2\text{nV} \div 1\text{V}$
- Dòng nhiễu vào: 6nV/Hz tại 1kHz (tiêu biểu)
- Lợi suất động: lớn nhất là 100dB (khi không lọc tín hiệu)



Hình 6.5. Dao động của lock-in RS-830

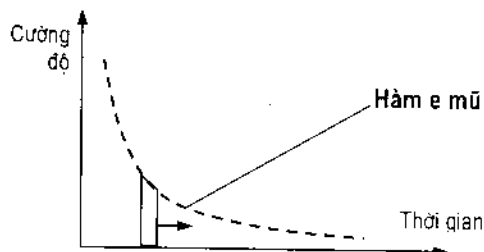
Kênh so sánh:

- Phạm vi tần số so sánh: từ 1mHz đến 102Hz
- Xung so sánh: TTL (vuông) hay dạng hình sin.
- Độ phân giải pha: $0,01^\circ$
- Sai số pha tuyệt đối: $< 1^\circ$
- Sai số pha tương đối: $< 0,01^\circ$
- Pha trực giao: $90^\circ \pm 0,001^\circ$
- Sự trôi pha: $< 0,01^\circ/\text{C}$ nếu tần số so sánh dưới 10kHz
 $< 0,1^\circ/\text{C}$ nếu tần số so sánh trên 100kHz

6.2. KỸ THUẬT BOXCAR

Trong một bộ tích phân boxcar (boxcar integrator), một cửa sổ thời gian với một độ dài nhất định được đặt cho tín hiệu lối vào với một thời gian trễ nào đó sau tín hiệu trigger và điện tích tương ứng được nạp vào một tụ điện với một hằng số thời gian thích hợp. Các xung được ghi lặp lại nhiều lần và tụ điện sẽ nạp đến giá trị dừng. Điện thế trên tụ sẽ được đọc nhờ bộ ghi. Đây là một kỹ thuật để đo sự tắt dần cường độ ánh sáng theo thời gian. Ví dụ, một xung laser ngắn được sử dụng để kích thích nguyên tử ở thời điểm $t = 0$. Các photon huỳnh quang sẽ được dò bằng một ống nhân quang nhanh. Tín hiệu điện tương ứng có dạng như trên hình 6.6. Người ta cần đo tín hiệu quang gần như tức thời trong tiến trình phổ này. Khi dùng bộ tích phân boxcar, nếu sự trễ thời gian được làm tăng lên từ từ (với tốc độ tương thích với hằng số phóng điện đã chọn), thì tiến trình suy giảm cường độ theo hàm e – mũ sẽ được tạo ra trên bộ ghi. Một bộ chuyển đổi tương tự – số ADC (Analog – Digital Converter) ở lối ra của bộ tích phân boxcar có thể được sử dụng để làm tín hiệu phù hợp với quá trình xử lý trên máy tính.

Hình 6.6. Minh họa phương pháp đo các quá trình quang học trung gian tức thời (optical transients)



Kỹ thuật boxcar tương đối đơn giản nhưng rõ ràng là chưa hiệu quả vì chỉ sử dụng các photon sau một thời gian trễ nào đó còn các photon khác bị loại bỏ. Ngoài ra, kỹ thuật boxcar đòi hỏi những trạng thái quang học trung gian gồm một số lớn các xung photon riêng lẻ. Nhân quang điện phải ghi các tín hiệu rất mạnh và rất yếu trong những khoảng thời gian ngắn có thể tạo ra tính phi tuyến trong nhân quang, làm giảm độ chính xác.

Kỹ thuật boxcar thực tế gồm một bộ tích phân – cổng (gated – integrator) và một bộ trung bình Boxcar (Boxcar averager) thiết kế để đo các tín hiệu tương tự (analog) nhanh, lặp lại với thang thời gian từ vài trăm micro giây đến vài trăm micro giây. Thông thường cổng thời gian được phát ra với một sự trễ đặc trưng đối với trigger ngoài (hoặc trong) và có một độ rộng nào đó. Bộ tích phân – cổng khuếch đại và tích phân tín hiệu có mặt trong thời gian cổng mở, bỏ qua mọi ồn nhiễu có thể có ngoài khoảng thời gian này. Bộ trung bình Boxcar làm nhiệm vụ lấy trung bình tín hiệu lối ra của bộ tích phân – cổng trên nhiều xung của thí nghiệm. Vì bất kỳ tín hiệu nào có mặt trong cổng thời gian sẽ được cộng vào tuyến tính trong khi ồn được cộng vào một cách ngẫu nhiên như là căn bậc hai của số xung nên lấy trung bình N xung sẽ làm cải thiện tỷ số tín hiệu/ồn thêm $N^{1/2}$ lần.

Bộ tích phân cổng thường dùng trong phép đo các xung laser. Thiết bị có thể cho các số liệu từng xung được ghi bởi máy tính thông qua bộ chuyển đổi A/D. Bộ tích phân – cổng thường được chỉ định dùng trong tình huống khi tín hiệu có chu kỳ lặp rất thấp, tần số lặp lại xung thấp và tốc độ đếm tức thời cao.

6.2.1. Nguyên lý boxcar

Dưới đây trình bày lý thuyết đơn giản sử dụng cho các thiết kế hiện hành. Chi tiết hơn về lý thuyết boxcar có thể tham khảo trong [15].

Tích phân boxcar (boxcar integrator), hay tích phân cổng (gated integrator) là kỹ thuật analog dựa trên bản chất không kết hợp của các thành phần nhiễu để tăng tỷ số tín hiệu trên ồn (S/N) của lối vào biến đổi tuần hoàn.

Một sóng lối vào có dạng $V_{in}(t)$ có thể xem như tổng của tín hiệu thật $V_s(t)$ cộng với ồn nhiễu $V_n(t)$. Nếu tín hiệu $V_s(t)$ là tuần hoàn với chu kỳ Γ , nó được gọi là kết hợp vì

$$V_s(t) = V_s(t + \Gamma) = V_s(t + m\Gamma) \quad (6.1)$$

trong đó m là một số nguyên.

Thành phần nhiễu $V_n(t)$ theo định nghĩa là không kết hợp do không có sự tương quan giữa $V_n(t)$ và $V_n(t + m\Gamma)$. Nhiễu được xem như có một phân bố phổ không đổi từ không cho đến tần số cao nhất được xét đến.

Trong tích phân boxcar, dạng sóng lối vào $V_{in}(t)$ đưa vào vào mạch lấy tích phân với hằng số thời gian T tại thời điểm t_0 trong khoảng thời gian τ – được gọi là "gate" (cổng). Quan trọng là mạch điện phải chuẩn hoá lối ra theo độ rộng "gate" τ . Với lối vào bao gồm cả tín hiệu $V_s(t)$ và nhiễu $V_n(t)$, lối ra của mạch tích phân $V_{out}(t)$ theo đơn vị (V_s^{-1}) được tính bởi biểu thức sau:

$$V_{out}(t) = \frac{1}{\tau} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+\tau} (V_s(t) + V_n(t)) dt. \quad (6.2)$$

Tích phân được lặp lại trên N lần lấy mẫu $t_0, t_1, \dots, t_N$ (cách nhau bởi chu kỳ Γ), sau đó các kết quả được cộng lại, giá trị $V_{out}(t)$ luôn được đặt lại về 0 sau mỗi lần tích phân. Nếu tổng này được chuẩn hoá theo số lần lấy mẫu N thì điện thế trung bình ở lối ra thu được là:

$$V_{ave}(t) = \frac{1}{N} \sum_{m=0}^N V_{out}(t) = \frac{1}{N} \frac{1}{\tau} \frac{1}{T} \sum_{m=0}^N \left[\int_{t_m}^{t_m+\tau} (V_s(t) + V_n(t)) dt \right]. \quad (6.3)$$

Với tín hiệu tuần hoàn $V_s(t)$, phương trình (6.1) dẫn đến tích phân của $V_s(t)$ trong tất cả các lấy mẫu m tại thời điểm trễ cổng t_0 cho trước và độ rộng τ , nghĩa là:

$$\int_{t_m}^{t_m+\tau} V_s(t) dt = \overline{V_s}(t_0, \tau) = \text{const} \quad (6.4)$$

Phương trình (6.3) bây giờ trở thành:

$$V_{ave}(t) = \frac{1}{\tau} \frac{1}{T} \overline{V_s}(t_0, \tau) + \frac{1}{N} \frac{1}{\tau} \frac{1}{T} \sum_{m=0}^N \left[\int_{t_m}^{t_m+\tau} V_n(t) dt \right]. \quad (6.5)$$

Từ tính chất của nhiễu ngẫu nhiên dừng, tích phân của $V_n(t)$ có thể được biểu diễn bằng một giá trị ngẫu nhiên, toàn bộ nhiễu này phân bố tuần theo hàm Gaussian [3]. Hơn nữa, tổng của N hàm Gauss này cho một giá trị biến đổi thống kê có kỳ vọng tỷ lệ thuận với $\sqrt{N}$, kết quả này là do bản chất không kết hợp của $V_n(t)$.

Nhờ vậy, phương trình (6.5) có thể viết là:

$$V_{ave}(t) = \frac{1}{\tau} \frac{1}{T} \overline{V_s}(t_0, \tau) + \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{\tau} \frac{1}{T} \overline{V_n}(\tau). \quad (6.6)$$

Trong đó, $\overline{V_n}(\tau)$ là biên độ nhiễu tùy ý ứng với độ rộng "gate" τ đã cho (trong thực tế $V_n(\tau)$ biến đổi theo $\sqrt{\tau}$).

Từ phương trình (6.6), có thể thấy rằng, nếu $V_s(t)$ thực sự tuần hoàn, thì việc lấy trung bình trên N lần lấy mẫu sẽ làm tăng tỉ số tín hiệu trên nhiễu với nhân số $\sqrt{N}$. Trong thực tế, $V_s(t)$ cũng sẽ biến đổi trong mỗi lần lấy mẫu, điều này có làm giảm tỉ số S/N một chút; tuy nhiên ảnh hưởng này sẽ không thảo luận ở đây. Một sai biệt khác của mạch boxcar thực là việc lấy trung bình theo N lần lấy mẫu được tiến hành theo quy luật hàm mũ; tuy nhiên kết quả căn bản về tỉ số S/N tăng theo thừa số $\sqrt{N}$ vẫn phù hợp.

Nếu "gate" biến đổi nhảy bậc theo thời gian dọc theo tín hiệu và quá trình lấy trung bình được lặp lại tại mỗi điểm, thì toàn bộ tín hiệu gốc có thể được tái tạo với một sự tăng của tỉ số S/N . Với một tích phân tín hiệu cho trước (ví dụ một lượng không đổi số photon đi đến nhân quang), chúng ta mong muốn có được độ rộng "gate" ngắn nhất có thể được, nhằm làm tăng S/N ; với một "gate" rộng hơn, điện thế ổn nhiễu sẽ giảm theo $1/\sqrt{\tau}$, trong khi đó tín hiệu giảm theo $1/\tau$.

Một xem xét quan trọng cuối cùng là ảnh hưởng của độ rộng "gate" hữu hạn τ lên đáp ứng tần số của mạch tích phân. Nếu xem tín hiệu thực có dạng $V_s(t) = \sin(\omega t)$ thì đáp ứng của mạch điện với tín hiệu này theo miền tần số là:

$$V_{ave}(\omega) = \frac{1}{\tau} \frac{1}{T} \int_0^{0+\tau} \sin(\omega t) dt = \frac{1}{T} \sin\left[\omega\left[t_0 + \frac{\tau}{2}\right]\right] \left[\frac{\sin(\omega t/2)}{\omega t/2}\right]. \quad (6.7)$$

Thời gian lấy mẫu hữu hạn gây ra độ dịch pha $\phi = (\omega t/2)$, và giảm biên độ, thể hiện trong dấu ngoặc thứ hai, theo dạng $\sin(x)/x$ trong đó $x = (\omega t/2)$. Với tần số cực đại được xét đến ω_{max} , độ suy giảm tại $\tau = 1/\omega_{max}$, $\tau = 3/\omega_{max}$ và $\tau = 5/\omega_{max}$ tương ứng là 0,96; 0,66 và 0,24.

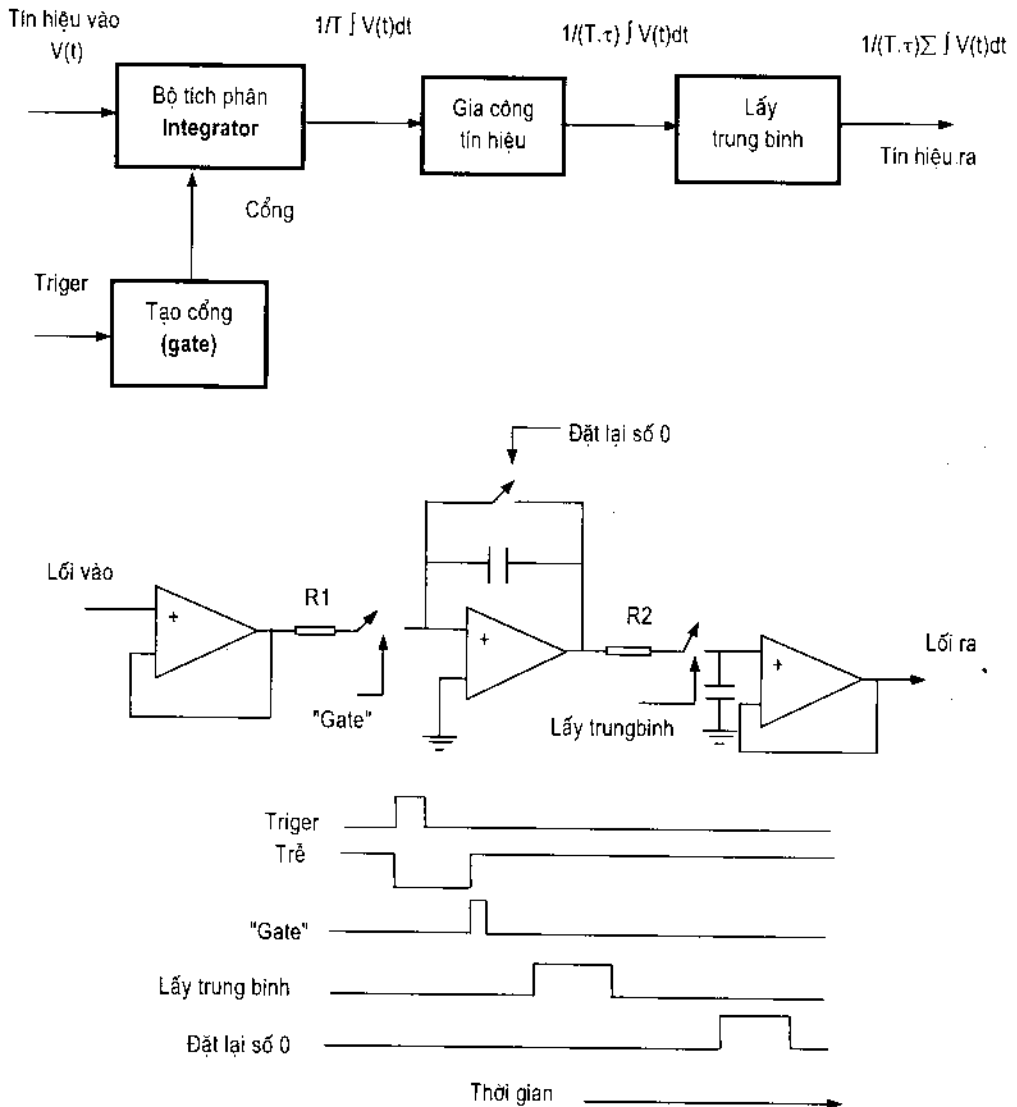
Bởi vậy, phải lựa chọn một thời gian lấy mẫu τ thích hợp với tần số cao nhất được xét đến mà không làm suy giảm đáng kể tín hiệu. Trong thực tế, điều này quy về điều kiện sau:

$$\tau \leq 1/\omega_{max}. \quad (6.8)$$

Trong đó ω_{max} là thành phần tần số cao nhất cần giải quyết trong tín hiệu.

Việc thực hiện độ rộng "gate" như mong muốn trong thực tế có thể không đạt được do những hạn chế về phần cứng, nghĩa là sự đáp ứng tần số của mạch tích phân trở nên bị giới hạn bởi độ rộng "gate" tối thiểu.

Sơ đồ khối của một quá trình tích phân cổng và trung bình boxcar được mô tả trên hình 6.7.



Hình 6.7. Sơ đồ khối của một quá trình tích phân cổng và trung bình boxcar và giản đồ thời gian của các xung điều khiển

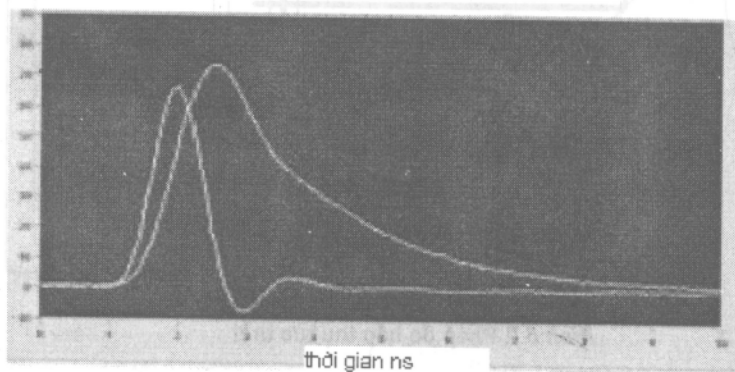
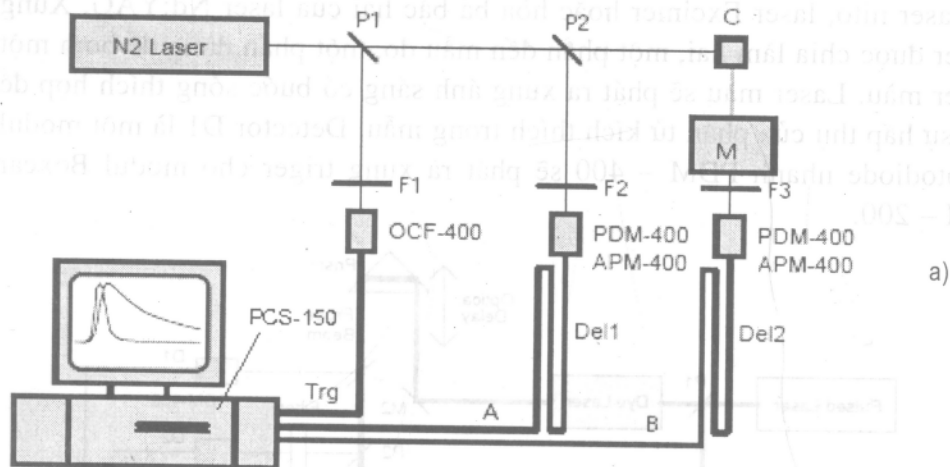
6.2.2. Ví dụ

Để minh họa, sau đây chúng tôi giới thiệu modul boxcar tốc độ cao PCS – 150/PCI – 200 của hãng Becker&Hickl GmbH cùng với một số ứng dụng của hệ này do đặc phân giải thời gian trong nghiên cứu huỳnh quang, hấp thụ laser v.v... Hệ boxcar PSC – 150 và PCI – 200 được thiết kế thành những modul để ghép nối trực tiếp với máy tính. Chúng được dùng để đo các tín hiệu lặp lại với băng phổ rộng và độ phân giải cao. Để ghi tín hiệu người ta sử dụng kỹ thuật lấy mẫu liên tiếp. Nhờ có một cổng tuyến tính tốc độ cao, việc lấy mẫu được thực hiện trong mỗi một chu kỳ tín hiệu. Để có tín hiệu như là một hàm của thời gian, điểm lấy mẫu được dịch đi những số gia thời gian rất nhỏ trên toàn bộ tín hiệu. Để đo giá trị tín hiệu ở một điểm chọn trước, điểm lấy mẫu có thể cố định. Trong trường hợp này, máy sẽ ghi điện thế tín hiệu ở thời điểm đã chọn như là hàm của một thông số thay đổi bên ngoài. Trong tất cả các chế độ hoạt động, tỷ lệ tín hiệu/ồn có thể được tăng cường nhờ lấy mẫu lặp lại từng điểm tín hiệu và lấy trung bình các lần lấy mẫu này. Các modul boxcar PSC – 150 và PCI – 200 có hai kênh tín hiệu được điều khiển bằng một xung "gate" chung. Điều này làm cho các modul ghi được đồng thời hai tín hiệu vào. Độ rộng "gate" của PSC – 150 là $< 150\text{ps}$ (điển hình là 120ps). Độ rộng "gate" của PCI – 200 có thể chọn từ 2ns đến 50ns . Để ghi các tín hiệu quang tốc độ cao, sẵn có rất nhiều detector khác nhau. Tùy theo tốc độ và độ nhạy đòi hỏi có thể lựa chọn các modul photodiode thác lũ và PIN hay là nhân quang điện... Các xung trigger có thể được lấy từ tín hiệu của kênh A hoặc là một xung trigger bên ngoài. Tất cả các chức năng được điều khiển bằng một phần mềm kèm theo.

a) Đo thời gian sống huỳnh quang

Để đo hàm tắt dần huỳnh quang ta có thể bố trí phép đo như trên hình 6.8. Laser nơtơ phát ra xung laser nhỏ hơn 1ns với tần số lặp lại từ 10 đến 100Hz . Các xung này sẽ kích thích mẫu huỳnh quang C. Ánh sáng huỳnh quang được dò bằng photodiode PDM – 400 hoặc APM – 400. Tín hiệu này được đưa vào kênh B của PCS – 150. P1 và P2 là các bản chia chùm tia phản xạ một phần ánh sáng laser vào bộ "trigger tỷ lệ quang học không đổi" OCF – 400 và vào modul photodiode thứ hai. Tín hiệu từ OCF – 400 được dùng làm trigger cho PCS – 150. Tín hiệu từ modul photodiode thứ hai PDM – 400 (hoặc APM – 400) được dùng để ghi dạng của xung kích thích.

Các kính lọc F1, F2, F3 được dùng để điều chỉnh biên độ tín hiệu và máy đơn sắc M dùng để chọn bước sóng thích hợp của ánh sáng huỳnh quang.



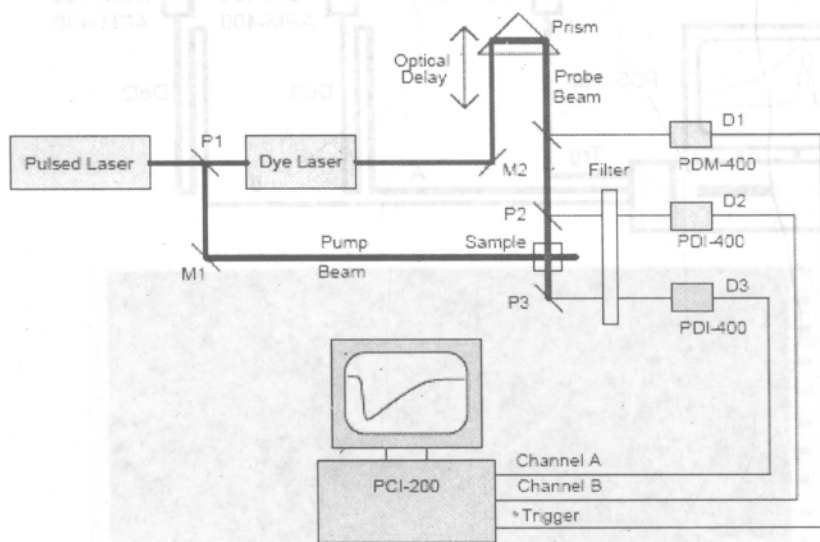
Hình 6.8. a) Sơ đồ bố trí đo tắt dần huỳnh quang;

b) Đường cong tắt dần huỳnh quang ở bước sóng cố định cùng với dạng xung laser kích thích.

Thiết bị như trên có thể ghi hàm tắt dần huỳnh quang, phổ huỳnh quang phân giải thời gian hoặc nhiều đường cong tắt dần ở các bước sóng khác nhau, nghĩa là đây đủ thuộc tính bước sóng – thời gian của huỳnh quang. Đường cong trên hình 6.8 là ví dụ của một phép đo tắt dần huỳnh quang ở một bước sóng chọn trước và dạng của xung laser kích thích. Phép ghi phổ phân giải thời gian đạt được trong chế độ "Fixed delay" (thời gian trễ cố định) của PCS – 150. Điểm lấy mẫu được đặt tại điểm mong muốn của hàm tắt dần. Cố định điểm lấy mẫu, quét bước sóng của máy đơn sắc trong thời gian đo ta sẽ ghi được cường độ huỳnh quang ở thời điểm đã chọn như là một hàm của bước sóng.

b) Phép đo hấp thụ tức thời

Trên hình 6.9 mô tả một phép đo hấp thụ tức thời. Nguồn laser có thể là laser nitơ, laser Excimer hoặc hòa ba bậc hai của laser Nd:YAG. Xung laser được chia làm hai, một phần đến mẫu đo, một phần dùng để bơm một laser màu. Laser màu sẽ phát ra xung ánh sáng có bước sóng thích hợp để dò sự hấp thụ của phân tử kích thích trong mẫu. Detector D1 là một modul photodiode nhanh PDM – 400 sẽ phát ra xung trigger cho modul Boxcar PCI – 200.



Hình 6.9. Phép đo hấp thụ tức thời

Sự hấp thụ trong mẫu được đo bằng detector D2 và D3, đó là các modul photodiode tích phân PDI – 400 cho xung lồi ra tỷ lệ năng lượng và có độ rộng xung cỡ vài trăm nano giây. Biên độ của những xung này được ghi bởi hai kênh tín hiệu của modul boxcar PCI – 200. Trong trường hợp này, PCI – 200 được đặt ở chế độ "Fixed delay" và sẽ ghi đường cong gồm các giá trị trung bình kế tiếp của các giá trị cường độ D2 và D3. Nếu bộ trễ quang học được thay đổi liên tục trong quá trình đo và tỷ số A/B được biểu diễn thì kết quả này chỉ ra sự tắt dần hấp thụ của các trạng thái kích thích trong mẫu.

6.3. STREAK CAMERA

Trong quang phổ học phân giải thời gian, người ta cần đo các xung tín hiệu rất ngắn.

Streak camera là thiết bị cho phép đo các hiện tượng ánh sáng cực nhanh, cho thông tin về cường độ ánh sáng theo thời gian và vị trí hoặc bước sóng. Không một thiết bị nào có thể đo trực tiếp hiện tượng ánh sáng cực nhanh với độ phân giải thời gian tốt hơn Streak camera.

Streak camera là một thiết bị hai chiều cho phép đồng thời dò hàng chục kênh ánh sáng khác nhau. Ví dụ khi kết hợp với một máy quang phổ, có thể đo sự biến thiên theo thời gian của cường độ ánh sáng tới đối với bước sóng (quang phổ phân giải thời gian), kết hợp với hệ quang học chính xác có thể đo sự biến thiên theo thời gian của ánh sáng tới đối với các vị trí (đo phân giải không gian – thời gian)

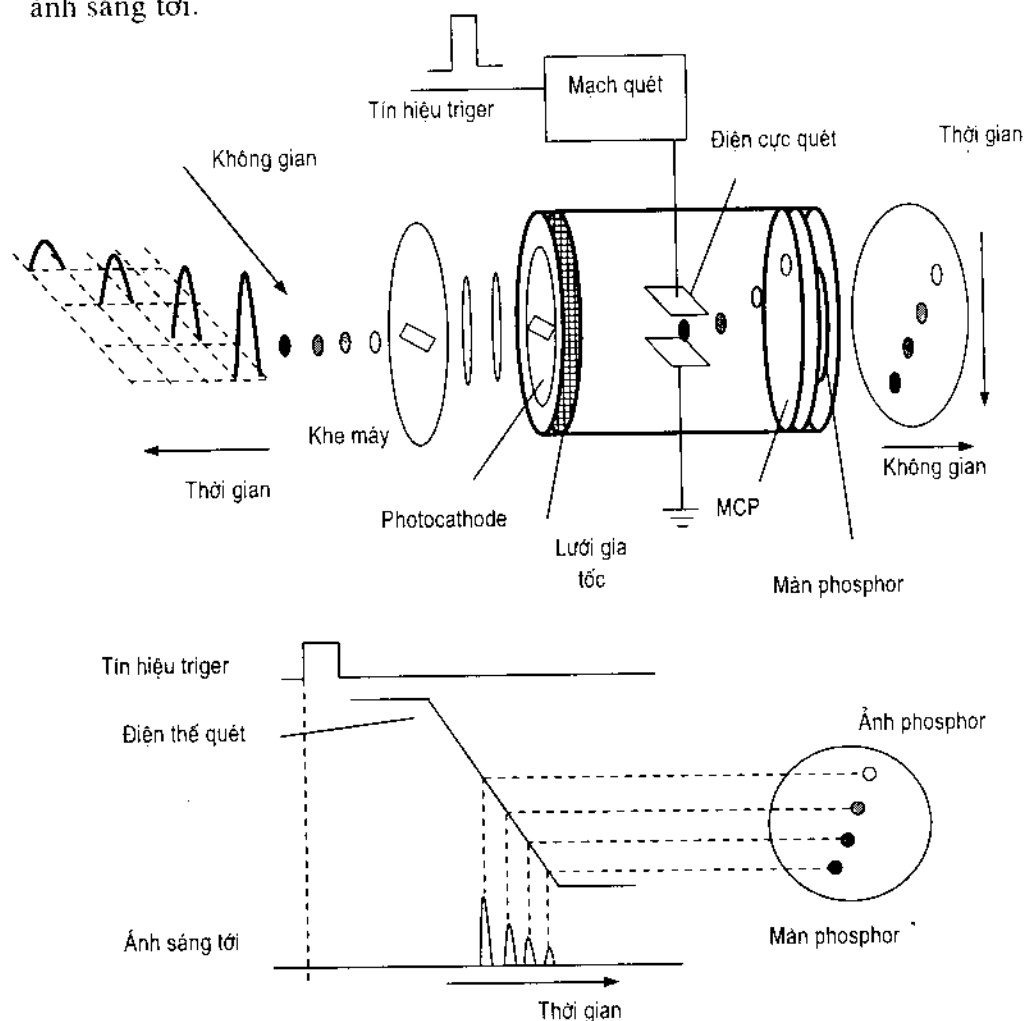
6.3.1. Nguyên lý hoạt động

Sơ đồ nguyên lý hoạt động của Streak camera như trên hình 6.10.

Xung ánh sáng cần đo (hoặc chuỗi xung) được chiếu vào khe máy. Để minh họa, trên hình 6.10 khảo sát một chuỗi 4 xung ánh sáng cường độ khác nhau, nằm ở vị trí không gian khác nhau một chút và đến khe máy ở thời điểm lệch nhau một chút. Một thấu kính hội tụ đưa ảnh của khe lên photocathode của Streak camera. Nhờ hiệu ứng quang điện, ánh sáng tới tạo ra các điện tử quang điện. Số điện tử quang điện tỷ lệ với cường độ ánh sáng tới. Điện tử sinh ra được gia tốc bởi cao thế (2 – 5KV) và đi qua một điện trường quét với tốc độ cực cao trước khi đập vào màn phosphor. Cụ thể là khi chùm điện tử đi qua hai bản cực quét, một cao áp được đặt lên hai bản cực vào thời điểm đồng bộ với ánh sáng tới. Khi đó các điện tử sẽ bị quét với tốc độ cao về phía đáy (từ trên xuống).

Trong quá trình quét rất nhanh này, các điện tử đến ở thời điểm khác nhau sẽ lệch đi những góc khác nhau theo phương thẳng đứng và đập lên tấm MCP (micro – channel plate). Tấm MCP có tác dụng nhân số điện tử lên hàng nghìn lần trước khi bắn phá vào màn phosphor. Vết điện tử va chạm lên màn hình được rải dọc theo trục thời gian chuẩn hóa theo tốc độ quét. Trên màn hình, ảnh phosphor ứng với xung ánh sáng đến trước sẽ nằm ở vị trí trên cùng. Những ảnh khác kế tiếp được sắp đặt theo thứ tự từ trên xuống dưới. Nói cách khác, hướng thẳng đứng của màn phosphor trở thành trục thời gian. Độ sáng của ảnh phosphor tỷ lệ với cường độ tương ứng của ánh sáng tới. Cường độ của vết biểu thị mật độ điện tử và do đó là ảnh thực của xung ánh sáng. Một khe sáng hẹp đặt ở cửa sổ lối vào vuông

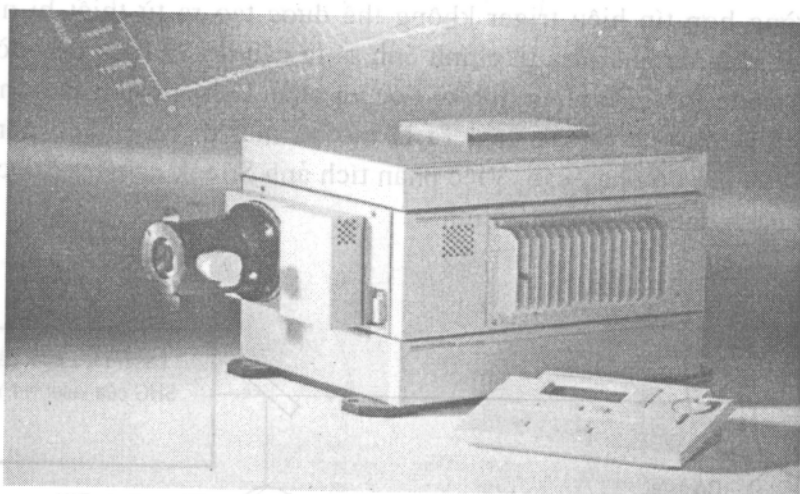
góc với trục thời gian để tăng độ phân giải thời gian. Vị trí theo hướng ngang của màn phosphor tương ứng với vị trí theo phương nằm ngang của ánh sáng tới.



Hình 6.10. Nguyên lý hoạt động của Streak camera

Bằng cách này, Streak camera có thể được sử dụng để biến những thay đổi theo thời gian và không gian của cường độ ánh sáng cần đo thành hình ảnh phân bố độ sáng trên màn phosphor. Như vậy, ta có thể tìm được cường độ quang học từ ảnh phosphor, tìm thấy thời gian và vị trí ánh sáng tới từ vị trí của ảnh phosphor.

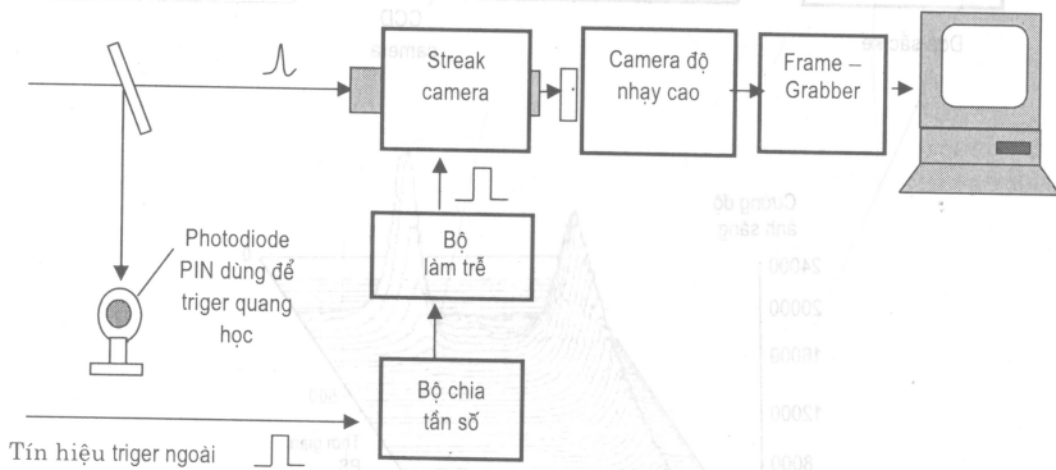
Streak camera phù hợp để đo phân giải thời gian. Nhờ độ phân giải cao có thể dùng để đo các xung laser cực ngắn đến 400fs.



Hình 6.11. Streak – camera C5680 của hãng Hamamatsu (Nhật)

6.3.2. Sơ đồ bố trí đo đặc

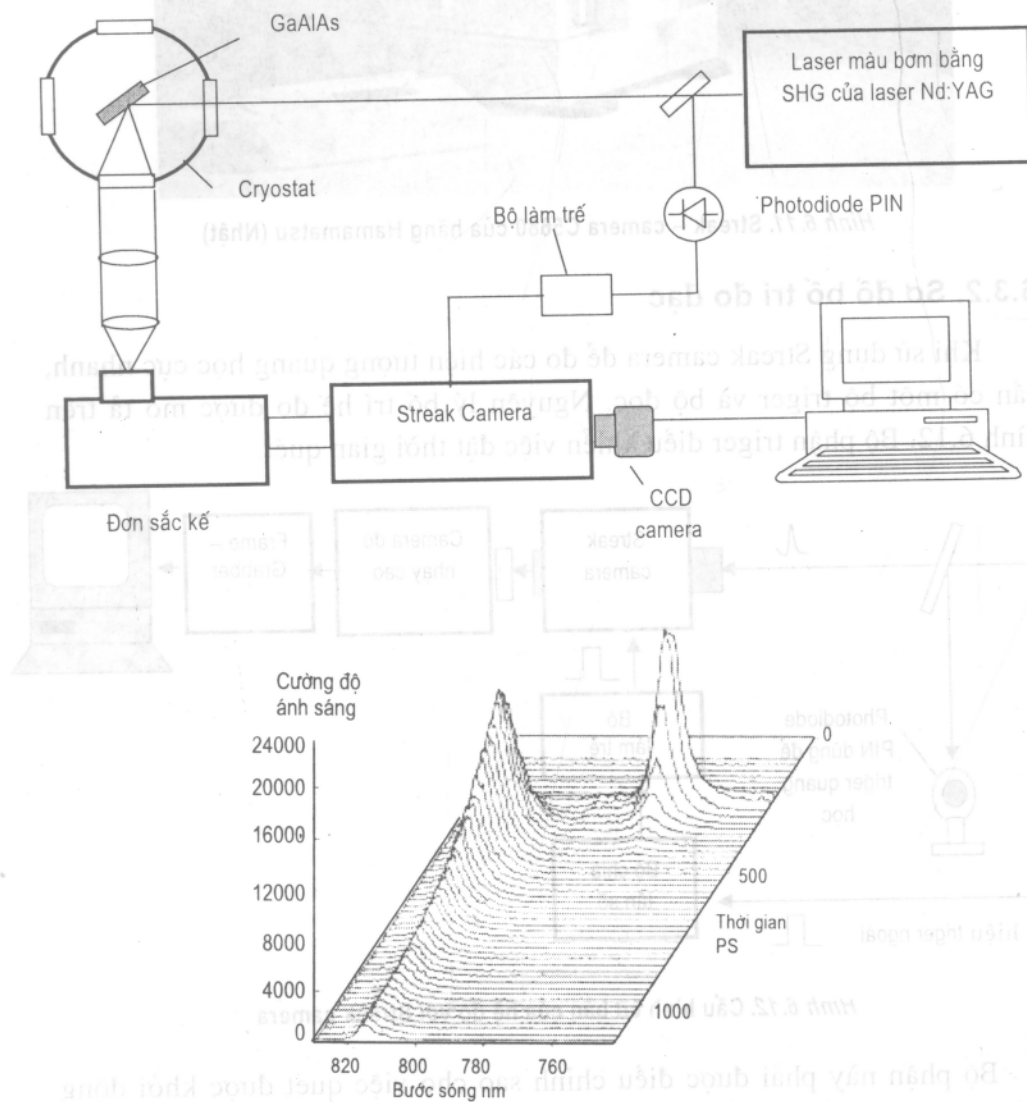
Khi sử dụng Streak camera để đo các hiện tượng quang học cực nhanh, cần có một bộ trigger và bộ đọc. Nguyên lý bố trí hệ đo được mô tả trên hình 6.12. Bộ phận trigger điều khiển việc đặt thời gian quét.



Hình 6.12. Cấu hình cơ bản của hệ đo với Streak camera

Bộ phận này phải được điều chỉnh sao cho việc quét được khởi động khi ánh sáng đến Streak camera. Muốn vậy người ta dùng một bộ làm trễ điều khiển thời gian tín hiệu trigger khởi động quét và một bộ chia tần số để chia tần số của tín hiệu trigger ngoài nếu tần số lặp lại của trigger là quá cao.

Trong trường hợp tín hiệu trigger không thể được tạo ra từ thiết bị như là laser thì nó phải được tạo ra từ chính ánh sáng cần đo và điều này đòi hỏi một photodiode PIN. Bộ phận đọc sẽ đọc và phân tích ảnh tạo ra trên màn phosphor. Vì ảnh của Streak camera là mờ và mất đi rất nhanh nên cần dùng một camera độ nhạy cao. Việc phân tích ảnh Streak camera được thực hiện bằng cách chuyển qua máy tính.



Hình 6.13. Bố trí đo và phổ huỳnh quang phân giải thời gian của GaAlAs

Trên hình 6.13 trình bày một ví dụ về việc dùng Streak camera để đo huỳnh quang phân giải thời gian. Mẫu cần đo là thành phần chất bán dẫn Ga Al As được kích thích bởi xung laser pico giây 580nm. Ánh sáng huỳnh quang phát ra khi điện tử trở về trạng thái cơ bản được cho qua máy quang phổ phân tích bước sóng trước khi được đưa vào Streak camera để phân giải thời gian.

6.4. AUTOCORRELATOR

Các thiết bị điện tử kể cả Streak camera chỉ đo được những xung ánh sáng dài hơn vài trăm femto giây (400fs). Để đo những xung cực ngắn (< 100fs) phải dùng thiết bị riêng, dựa trên phương pháp hoàn toàn quang học gọi là bộ tự tương quan (Autocorrelator).

6.4.1. Nguyên lý hoạt động

Nguyên tắc hoạt động của thiết bị dựa trên hai luận cứ. Trước hết, người ta để ý thấy rằng trong môi trường tương quan không gian – thời gian, ánh sáng truyền trong không khí đi được 300 micromét trong 1 pico giây. Độ dài này có thể đo được.

Thứ hai là tính chất của hàm tương quan đã biết trong toán học:

$$G(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} F'(f)F(t - \tau)dt$$

Khi có hai hàm phụ thuộc vào thời gian $F(t)$ và $F'(t)$, nếu biết $F'(t)$ và hàm tương quan $G(\tau)$ là:

$$G''(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \{F'(f)F(t - \tau)\}'' dt$$

ta sẽ biết được $F(t)$. Hàm $G(t)$ gọi là hàm tương quan bậc một, các hàm tương quan bậc cao hơn được xác định như sau:

- Có cùng tính chất.
- Tất cả đều cho cùng một kết quả chừng nào ta biết được hàm thứ $F'(t)$.

$$G_1(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(t)F(t - \tau)dt$$

Tuy nhiên, trong quang học xung ngắn, rất khó tạo được một xung có dạng xác định $F'(t)$. Người ta chấp nhận đo hàm tương quan của xung cần đo $F(t)$ với bản sao của chính nó $F(t - \tau)$ đã được làm trễ nhờ thay đổi quang trình gọi là hàm tự tương quan $G_I(\tau)$.

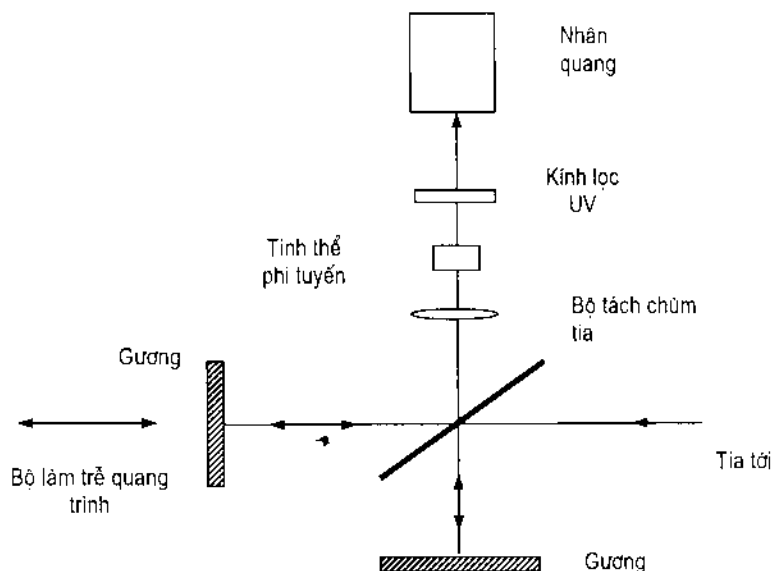
Đo hàm tự tương quan $G_I(\tau)$ sẽ cho phép xác định được độ rộng xung cần đo ứng với $1/2$ cực đại. Tính toán cho thấy một xung dạng Gauss có độ rộng xung $\Delta\tau$ ở $1/2$ cực đại thì độ rộng của hàm tự tương quan là $\Delta t = 1,414 \cdot \Delta\tau$.

Về mặt thực nghiệm, để có hàm tự tương quan bậc nhất người ta dùng giao thoa kế Michelson, để có hàm tương quan bậc hai người ta dùng hiệu ứng quang phi tuyến SHG.

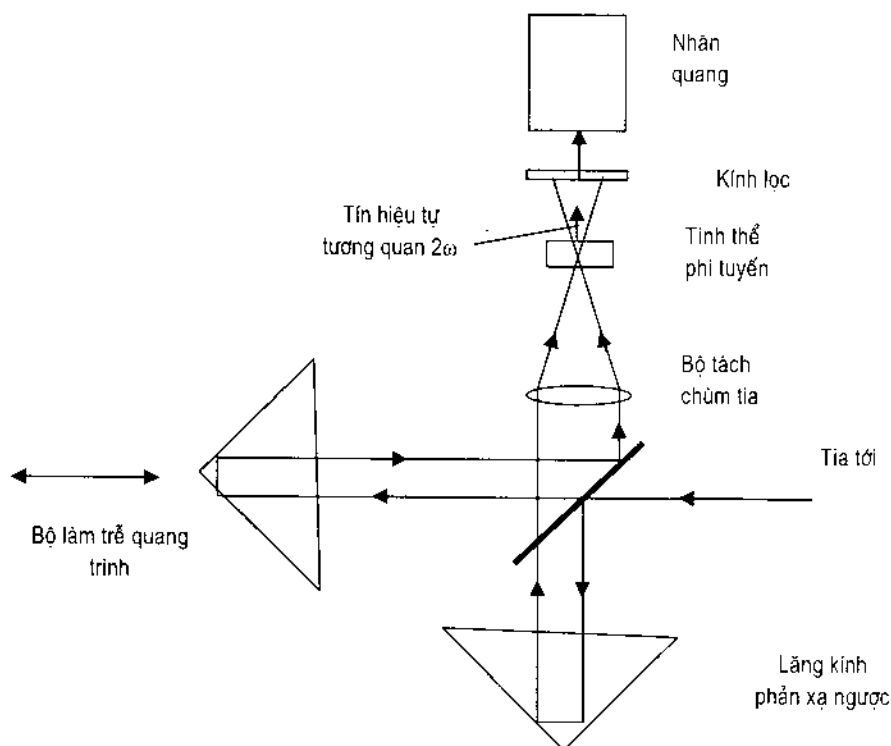
6.4.2. Các sơ đồ quang học

Có hai sơ đồ tự tương quan: đồng trục và không đồng trục.

Trong sơ đồ tự tương quan đồng trục (hình 6.14) hai chùm tia trong giao thoa kế được tổ hợp một cách đồng trục. Cấu hình này dẫn đến tín hiệu tự tương quan nằm ở trên một phong nền không đổi. Nền được tạo ra do sự phát tử ngoại (UV) ngay khi hai xung chưa trùng nhau trong quá trình quét. Trong cấu hình thứ hai, tự tương quan không nền (hình 6.15), hai chùm tia được dịch đi so với trục chung và tổ hợp không đồng trục. Trong cấu hình này nền được loại trừ vì UV phát ra chỉ ở những điểm hai tia giao nhau, điều kiện phù hợp pha được thỏa mãn.



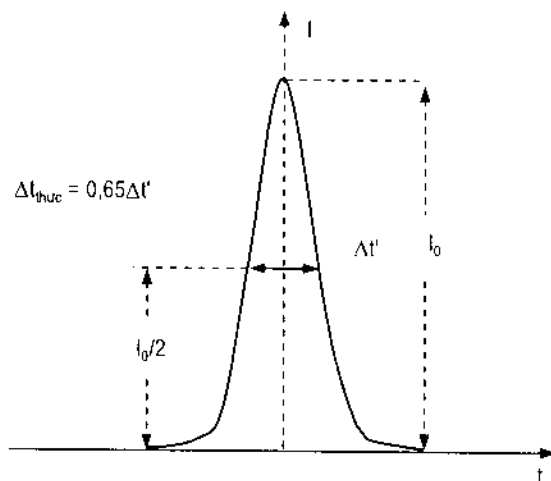
Hình 6.14. Cấu hình tự tương quan đồng trục



Hình 6.15. Cấu hình tự tương quan không đồng trực

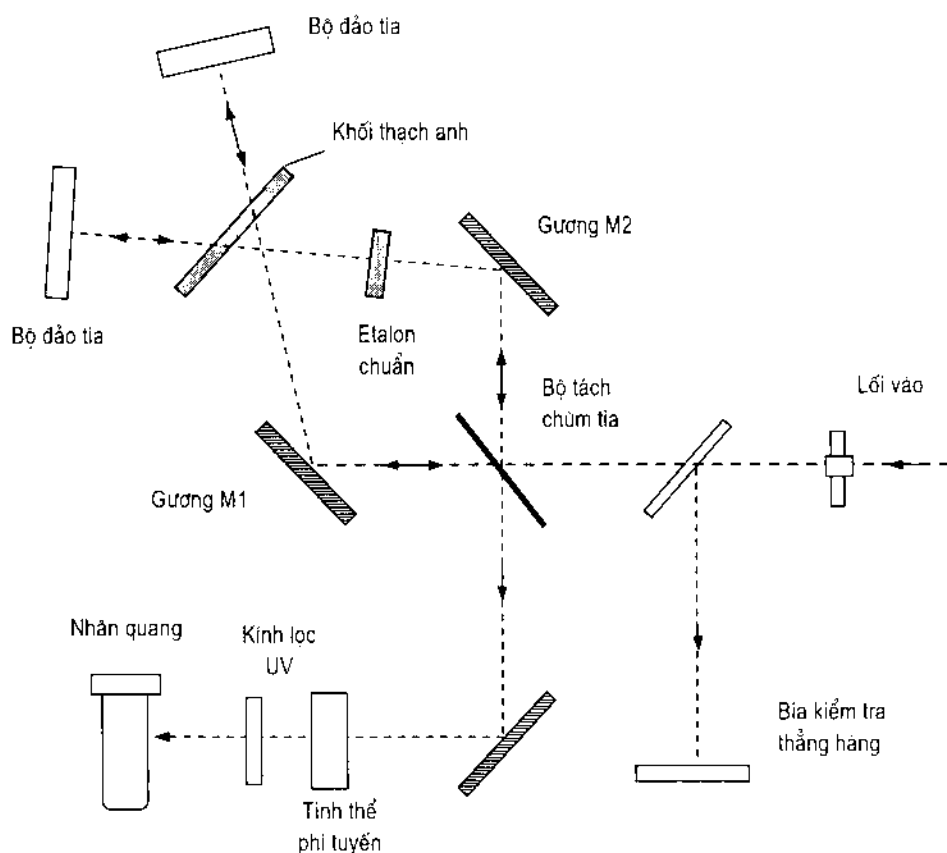
Việc xác định chính xác phép đo độ rộng xung bị khó khăn bởi hai yếu tố:

- Tỷ số giữa độ rộng xung thực và xung tự tương quan là một hàm của dạng xung.
- Dạng xung có thể thay đổi giữa hai thái cực tùy thuộc thông số hoạt động của hệ laser.



Hình 6.16. Dạng xung trong giới hạn biến đổi sech²

Nếu xung laser có dạng sech^2 thì việc xác định độ rộng xung dễ dàng hơn. Đây là dạng xung trong giới hạn biến đổi cho độ rộng xung ngắn nhất có thể (hình 6.16). Đỉnh cực đại của vết tự tương quan thu được là vị trí đỉnh thực của xung cần đo. Độ bán rộng thực của xung cần đo bằng 0,65 độ rộng xung tự tương quan lấy ở 1/2 cực đại vết tự tương quan đo được. Chú ý là hàm tự tương quan phải luôn luôn đối xứng. Nếu tín hiệu lỗi ra không đối xứng, Autocorrelator hoặc đã bị lệch với tia vào hoặc các linh kiện quang học bên trong bị sai lệch.

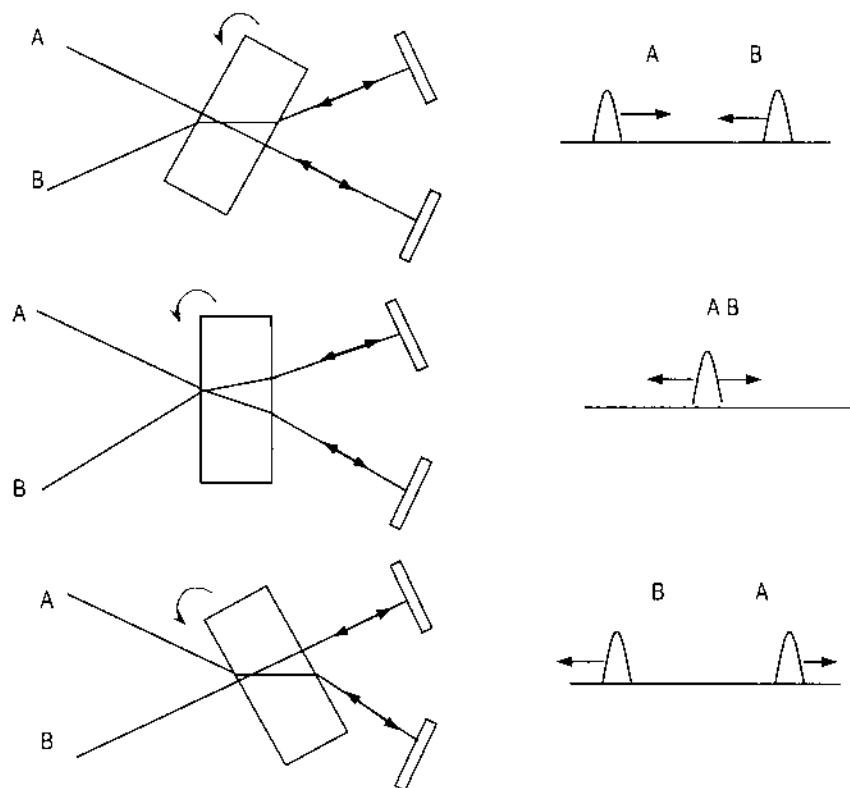


Hình 6.17. Sơ đồ quang học Autocorrelator Model 409 – 08 (Spectra – Physics)

6.4.3. Nguyên tắc xác định độ dài xung

Sơ đồ nguyên tắc đo xung đơn và xung có tần số lặp lại cao là khác nhau. Một sơ đồ điển hình đo xung cực ngắn tần số lặp lại cao ($>10\text{kHz}$) được trình bày trên hình 6.17. Đây là Autocorrelator Model 409 – 08 của

hãng Spectra – Physics. Độ rộng xung đo được từ 60ps – 40fs, bước sóng từ 690 đến 1080nm. Sơ đồ này thiết kế theo cấu hình không đồng trục để tránh phản xạ. Thay vì điều chỉnh quang trình hai chùm tia bằng cách dịch chuyển gương, người ta dùng cơ chế quét bằng cách quay một khối thạch anh đặt trên đường đi của các chùm tia. Hai chùm tia đi vào khối thạch anh với các góc lệch so với pháp tuyến của bề mặt khối. Khi khối thạch anh quay, góc tới của mỗi chùm tia trên mặt khối thay đổi dẫn đến thay đổi quang trình. Bằng cách cho cả 2 tia đi qua khối thạch anh sự biến thiên quang trình của tia này so với tia kia là tuyến tính trong phạm vi góc quay khoảng 72° .



Hình 6.18. Các vị trí xung khi quay khối thạch anh

Trên hình 6.18 chỉ ra các vị trí của xung và sự trùng nhau của chúng khi quay khối thạch anh. Khi bắt đầu quét, quang trình A là cực tiểu, quang trình B là cực đại. Khi khối thạch anh quay, các xung chuyển động so với nhau với tốc độ không đổi. Tại điểm khi góc tới của tia A và B như nhau thì chúng sẽ chồng chất lên nhau. Khi khối thạch anh tiếp tục quay

các xung rời xa nhau, kết thúc một lần quét. Khi các xung chồng chất lên nhau và được hội tụ vào tinh thể phi tuyến (được với một góc tới chính xác định trước) thì sự tự tương quan xuất hiện. Bức xạ tổng hợp từ tinh thể được lọc nhờ một kính lọc UV rồi hướng vào nhân quang điện. Tín hiệu lỗi ra của nhân quang cùng với xung đồng bộ phát ra bởi mô tơ quay khối thạch anh sẽ tạo ra hình ảnh xung trên dao động ký.

Để quan sát tín hiệu tự tương quan chỉ cần một dao động ký bình thường (ví dụ 200mV/div; 5ms/div). Thang thời gian trên dao động ký sẽ được lấy chuẩn dựa vào tỷ số thời gian làm trễ/thời gian quét. Khối thạch anh được quay bởi một mô tơ xoay chiều (AC) đồng bộ với tốc độ 30 vòng/giây với dòng điện tần số 60Hz hoặc 25 vòng/giây với dòng tần số 50Hz. Trong một vòng quay 360° sự quét được thực hiện trong phạm vi góc mở 72° . Thời gian quay một vòng là $1/30$ s, suy ra thời gian quét tương ứng là $72/(360 \times 30)$ s = 6,67ms. Tùy theo độ dày và chiết suất của khối thạch anh ta có thể tính được thời gian làm trễ quang trình và xác lập được tỷ lệ thời gian làm trễ/thời gian quét. Một cách hay hơn để lấy chuẩn dao động ký là dùng một mẫu chuẩn làm bằng một tấm silic nóng chảy có thời gian làm trễ quang trình đã biết xen vào đường đi của một chùm tia. Sự dịch chuyển của xung trên dao động ký về một bên cho phép ta kiểm tra tỷ lệ trên trục thời gian. Trong Autocorrelator Model 409 – 08 có sẵn 3 tấm silic nóng chảy chuẩn với độ dày 13,15mm; 5,0mm và 1,0mm tương ứng với thời gian làm trễ là 20ps; 1,5ps và 300fs. Thời gian làm trễ quang trình này được tính từ công thức $\Delta t = (n - 1)d/c$ với d là độ dày tấm chuẩn, c là vận tốc ánh sáng, n là chiết suất của tấm.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Phan Văn Thích (2000), *Bài giảng Dụng cụ quang phổ*, Đại học Quốc gia Hà Nội.
2. A.H Zaiden., G.V. Ostrorovskaia (1976), *Technique and practice of Spectroscopy*, Moscow.
3. Oriel Company (2002), *Introduction to Multichannel Spectroscopy and detection systems*, USA.
4. B.E.A Saleh, M.C Teich (1991), *Fundamentals of Photonics Wiley Series in Pure and Applied Optics*, J.W. Goodman, Editor, New York, John Wiley & sons, INC.
5. Ecole Franco, (2000), *Vietnamienne de recherche: Spectroscopie et applications*, Hanoi, CNRS.
6. Euro – Tech@euro – tech.com.hk (2002), *Lock – in amplifiers and Boxcar Averaging*, Stanford recherche systems.
7. Sune Savanberg (1993), *Atomic and Molecular Spectroscopy*, Lund, Springer – Verlag.
8. E. Roland Menzel (1995), *Laser Spectroscopy, Techniques and Applications*, Marcel Dekker.Inc.
9. Bhaskar Gupta (2004), *Understanding various types of Stepper Motors And Controlling it through Parallel Port*, Homepage: <http://collection.sharewith.us>.
10. Stanford Research Systems (1993), *Model SR830 DSP Lock – in Amplifier*, 5.1 – 5.34.
11. Halina Baránska 1987, *Laser Raman spectrometry*, John Wiley& Sons Warsaw.
12. Bernhard Schrader (1994), *Infrared and Raman Spectroscopy Weinheim*, New York, VCH.
13. *Universal Streak Camera Series*, Hamamatsu Photonics, Japan, 2005.
14. PCS – 150/PCI – 200 (2005), *High speed Boxcar modules*, Becker& Hckl GmbH Berlin Germany.
15. Sydenham P. and Thorn P (1982), *Handbook of Measurement Science*, NewYork, Wiley.

Chịu trách nhiệm xuất bản :

Chủ tịch HĐQT kiêm Tổng Giám đốc NGÔ TRẦN ÁI
Phó Tổng Giám đốc kiêm Tổng biên tập NGUYỄN QUÝ THAO

Chịu trách nhiệm nội dung :

Chủ tịch HĐQT kiêm Giám đốc Công ty CP Sách ĐH ĐN
TRẦN NHẬT TÂN

Biên tập và sửa bản in :

HOÀNG THỊ QUY

Trình bày bìa :

BÙI QUANG TUẤN

Chế bản :

QUANG CHÍNH

Giáo trình QUANG PHỔ HỌC THỰC NGHIỆM

Mã số: 7K696M6 - DAI

In 1.000 bản, khổ 16 x 24cm, tại Xí nghiệp in Hà Tây.
Số in: 1109/DAI; Số XB: 916 - 2006/CXB/5 - 1323/GD.
In xong và nộp lưu chiểu tháng 9 năm 2006.



CÔNG TY CỔ PHẦN SÁCH ĐẠI HỌC – DẠY NGHỀ
HEVOBCO
25 HÀN THUYỀN – HÀ NỘI
Website: www.hevobco.com.vn

TÌM ĐỌC GIÁO TRÌNH
DÙNG CHO CÁC TRƯỜNG ĐẠI HỌC VỀ VẬT LÝ
CỦA NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC

1.	Giáo trình Cơ học	Bạch Thành Công
2.	Vật lý kỹ thuật	Đặng Hùng
3.	Vật lý siêu dẫn và ứng dụng	Nguyễn Huy Sinh
4.	Vô tuyến điện tử	Ngọc Văn An
5.	Tuyển tập các bài tập Vật lý đại cương (tập 1, 2)	Nguyễn Quang Hậu Ngô Quốc Quỳnh

Bạn đọc có thể tìm mua tại các Công ty Sách – Thiết bị trường học ở các địa phương hoặc các Cửa hàng sách của Nhà xuất bản Giáo dục :

Tại Hà Nội : 25 Hàn Thuyên, 81 Trần Hưng Đạo,

187B Giảng Võ, 23 Tràng Tiền.

Tại Đà Nẵng : 15 Nguyễn Chí Thanh.

Tại Thành phố Hồ Chí Minh : 104 Mai Thị Lựu, Quận 1.



Giá: 20.500đ