



Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik
Lehrstuhl für Messsystem- und Sensortechnik

Breitbandige statische Fourier-Transformations-Spektrometer für den mittleren Infrarotbereich

Michael Köhler

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für
Elektrotechnik und Informationstechnik
der Technischen Universität München
zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktor-Ingenieurs

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Prof. Dr. rer. nat. Oliver Hayden
Prüfer der Dissertation: 1. Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Alexander W. Koch
2. Prof. Dr. techn. Christian Kargel

Die Dissertation wurde am 28.09.2020 bei der
Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für
Elektrotechnik und Informationstechnik am 16.06.2021 angenommen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	2
1.2	Wissenschaftliche Problemstellung	3
1.3	Inhalt der Arbeit	4
2	Physikalische Grundlagen und Stand der Technik	7
2.1	Optik	7
2.1.1	Interferometrie und Kohärenz	7
2.1.2	Dispersion und Brechung	12
2.2	Infrarotspektroskopie	14
2.2.1	Elektromagnetisches Spektrum	14
2.2.2	Absorption infraroter Strahlung	15
2.2.3	Chemometrie	17
2.2.4	Lichtquellen und Detektoren für den Infrarotbereich	20
2.3	Klassische Infrarotspektrometer	24
2.3.1	Dispersive Spektrometer	24
2.3.2	Filter- und laserbasierte Spektrometer	25
2.3.3	Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer	26
2.3.4	Statische Fourier-Transformations-Spektrometer	29
2.4	Abbildende Infrarotspektrometer	34
2.4.1	Grundprinzip und Funktionsweise	34
2.4.2	Grundlegende Klassifizierung	35
2.4.3	Konzepte für den mittleren Infrarotbereich	38
3	Statisches Einzelspiegel-Fourier-Transformations-Spektrometer	43
3.1	Grundlegender Aufbau und Funktionsprinzip	43
3.2	Grundlegende Limitierungen	46
3.2.1	Dispersionseffekte und Fourierlinsen	46
3.2.2	Spektrale Auflösung und Bandbreite	49

3.2.3	Detektorcharakteristik	51
4	Breitbandiges statisches Fourier-Transformations-Spektrometer	55
4.1	Grundlegender Aufbau und Funktionsprinzip	55
4.2	Dispersionseffekte und Aberrationen	56
4.3	Messaufbauten	58
4.3.1	Experimenteller Aufbau	58
4.3.2	Laborprototyp	60
4.4	Spektrenberechnung und Kalibrierung	61
4.5	Stufenspiegel-Variante zur Erhöhung der spektralen Auflösung	62
4.6	Kontinuierliche Background-Korrektur	65
4.7	Designvarianten und Optimierungsmöglichkeiten	68
4.7.1	Spektropolarimeter	68
4.7.2	Rotiertes Detektorarray	71
5	Abbildendes statisches Fourier-Transformations-Spektrometer	73
5.1	Grundlegender Aufbau und Funktionsprinzip	73
5.1.1	Abbildendes Einzelspiegel-Interferometer	73
5.1.2	Windowing-Verfahren	76
5.2	Experimenteller Aufbau	77
5.3	Designvarianten und Optimierungsmöglichkeiten	78
5.3.1	Pushbroom-Variante	78
5.3.2	Aufbau zur Messung in Reflexion	79
5.3.3	Variante für den sichtbaren Bereich	80
6	Ergebnisse und Diskussion	83
6.1	Breitbandiges statisches Fourier-Transformations-Spektrometer	83
6.1.1	Background-Spektrum	83
6.1.2	Wellenzahlgenauigkeit	85
6.1.3	Stufenspiegel-Variante	87
6.1.4	Kontinuierliche Background-Korrektur	92
6.1.5	Ausgewählte Anwendungen	95
6.2	Abbildendes statisches Fourier-Transformations-Spektrometer	101
6.2.1	Räumliche Auflösung	102
6.2.2	Eindimensionale hyperspektrale Abbildung	103
6.2.3	Zweidimensionale hyperspektrale Abbildung	105
7	Zusammenfassung und Ausblick	111
	Symbolverzeichnis	115

Abkürzungsverzeichnis	119
Abbildungsverzeichnis	121
Literaturverzeichnis	127
Eigene Veröffentlichungen	136
Betreute studentische Arbeiten	139

Kapitel 1

Einleitung

Eines der meistgenutzten messtechnischen Verfahren zur chemischen Analyse von Flüssigkeiten, Gasen und Feststoffen stellt die Infrarotspektroskopie (IR-Spektroskopie) dar [32]. Da mithilfe dieser zerstörungsfreien Methode im mittleren Infrarotbereich (MIR) Moleküle nicht nur spektral unterschieden und identifiziert werden können, sondern durch den Einsatz multivariater Auswertemethoden auch eine quantitative Bestimmung von Stoffmengenkonzentrationen möglich ist, finden sich vielfältige praktische Anwendungen.

In der Lebensmittelindustrie können beispielsweise Fett- und Zuckergehalt [45], Alkoholgehalt [17], aber auch Verfälschungen [89] und Verunreinigungen [2] von Lebensmitteln bestimmt werden. Für die Umweltmesstechnik spielen aktuell beispielsweise die Detektion von Gaslecks [62] sowie die Messung von Abgasen [27, 39] und Treibhausgasen in der Atmosphäre [6, 46] eine bedeutende Rolle. Im medizinischen Bereich können zudem durch die spektrale Analyse von Körperflüssigkeiten [10, 78] und Gewebeproben [54] Rückschlüsse auf den Gesundheitszustand des Patienten getroffen werden.

Vor allem für Anwendungen in der Fernerkundung [20, 103], der industriellen Prozessanalytik [22, 116] sowie im pharmazeutischen und medizinischen Bereich [1, 63, 92] kommen zudem neben klassischen Spektrometern vermehrt abbildende Spektrometer (engl.: hyperspectral imager – HSI) zum Einsatz. Diese liefern zusätzlich zur rein spektralen Information der Probe eine zweidimensionale, räumliche Auflösung des Messobjekts. Das entsprechend generierte dreidimensionale Datenset wird als hyperspektraler Datenwürfel bezeichnet.

Wurden für erste spektroskopische Untersuchungen im MIR noch dispersive Spektrometer basierend auf Prismen oder Gittern eingesetzt, so kommen seit den 1960er Jahren standardmäßig Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer (FTIR-Spektrometer) zur Analyse von breitbandigen Lichtquellen zum Einsatz [35]. Diese weisen durch die Verwendung eines Michelson-Interferometers einen wesentlich höheren Lichtdurchsatz als dispersive Spek-

trometer auf und erzielen so ein höheres Signal-Rausch-Verhältnis (engl.: signal-to-noise ratio – SNR) bei gleicher Messzeit. Die Eingangsapertur des Spektrometers kann um ein Vielfaches größer gewählt werden, zudem werden alle Wellenlängen gleichzeitig mit einem einzelnen Detektor gemessen [25].

1.1 Motivation

Diese Vorteile von FTIR-Spektrometern kommen vor allem unter kontrollierten Umgebungsverhältnissen zur Geltung. Aus diesem Grund werden bislang viele der zuvor angeführten Anwendungsbeispiele im Labor durchgeführt, was sich oft als langwierig und kostspielig erweist.

Gleichzeitig steigt vor allem mit der fortschreitenden Digitalisierung und der Möglichkeit, große Datenmengen sinnvoll zu verarbeiten, der Bedarf, spektroskopische Untersuchungen on-line durchzuführen, um Prozesse zeitnah auf Grundlage der entsprechenden Messdaten anpassen zu können. Dazu werden kompakte, für den industriellen Einsatz geeignete kostengünstige Spektrometeralternativen benötigt [95].

Vor allem für Anwendungen, bei denen eine moderate spektrale Auflösung genügt, bieten hier statische Fourier-Transformations-Spektrometer (sFTS) eine ernsthafte Alternative. Diese basieren ebenfalls auf einem interferometrischen Ansatz und weisen daher im Vergleich zu dispersiven Systemen einen erhöhten Lichtdurchsatz auf. Im Gegensatz zu klassischen FTIR-Spektrometern werden allerdings keinerlei bewegliche Teile verwendet, was zu einer erhöhten Robustheit sowie einer kompakteren Bauweise führt. Zudem ist die erreichbare Messgeschwindigkeit aufgrund einer örtlichen Modulation des Interferogramms ausschließlich vom verwendeten Detektor abhängig, wodurch Analysen mit hoher Zeitauflösung möglich sind, was beispielsweise für die Gasmesstechnik von großem Vorteil sein kann [142].

In der Vergangenheit wurden vielfältige sFTS-Varianten vorgeschlagen, welche im Detail in Abschnitt 2.3.4 dieser Arbeit vorgestellt werden. Waren viele dieser sFTS für den sichtbaren Bereich des Spektrums optimiert, so finden sich mit der Kommerzialisierung von ungekühlten Mikrobolometerarrays in den letzten Jahren auch vermehrt sFTS für den MIR.

Die in dieser Arbeit entwickelten Spektrometer basieren auf dem Konzept des statischen Einzelspiegel-Fourier-Transformations-Spektrometers (engl.: static single-mirror Fourier transform spectrometer – sSMFTS), welches in [95, 96] vorgestellt und speziell für den MIR entwickelt wurde. Aufgrund geringer interner Lichtverluste und einer hohen Étendue ist das sSMFTS für die Analyse von schwachen, ausgedehnten Lichtquellen, wie sie

typischerweise in diesem Spektralbereich verwendet werden, optimiert. Auch wenn das grundlegende sSMFTS-Konzept in einer vorhergehenden Arbeit bereits validiert wurde und vielversprechende Ergebnisse zeigt [95], ergeben sich einige grundsätzliche Limitierungen, welche einen industriellen Einsatz des Spektrometers erschweren.

Zunächst ist hier die im Vergleich zu Labor-FTIR-Spektrometern geringe spektrale Bandbreite von sSMFTS zu nennen, welche bislang lediglich einen Wellenlängenbereich von etwa $8\ \mu\text{m}$ bis $15\ \mu\text{m}$ umfasst [95]. Diese ist vor allem durch die bisher verwendeten Detektoren und Dispersionseffekte der optischen Komponenten begrenzt. Zudem ist die spektrale Auflösung, wie prinzipiell bei allen sFTS-Varianten, durch die Pixelanzahl des Detektors limitiert und ebenfalls vergleichsweise gering.

Neben diesen grundsätzlichen Leistungsparametern sind Drifteffekte der Lichtquelle sowie der Kamera als Nachteil zu nennen, welche zu signifikanten Messfehlern bei Langzeitmessungen führen können und so eine on-line Überwachung von industriellen Prozessen bislang ausschließen.

Schließlich fehlt bislang ein Konzept zur Entwicklung eines abbildenden sSMFTS, welches die möglichen Anwendungsgebiete für diese Spektrometer entscheidend erweitern könnte.

1.2 Wissenschaftliche Problemstellung

Abgeleitet von der zuvor dargelegten Motivation dieser Arbeit, ergeben sich folgende Anforderungen, bzw. wissenschaftliche Herausforderungen im Hinblick auf die vorliegende Dissertation:

- **Spektrale Bandbreite.** Um die spektrale Bandbreite der entwickelten Spektrometer zu erweitern, muss ein Konzept gefunden werden, um Dispersions- und Temperaturabhängigkeiten des optischen Aufbaus zu minimieren. Zudem ist auf eine kostengünstige, kompakte und robuste Bauweise des Systems zu achten.
- **Spektrale Auflösung.** Prinzipbedingt verringert sich die spektrale Auflösung bei der gewünschten Erhöhung der spektralen Bandbreite entsprechend. Hier muss eine Methode gefunden werden, um diesen Effekt zu umgehen und sowohl einen großen Spektralbereich als auch eine moderate spektrale Auflösung zu ermöglichen.
- **Langzeitstabilität.** Um die Langzeitstabilität des sSMFTS zu verbessern, muss ein Konzept gefunden werden, welches eine Korrektur von Lichtquellen- und Kameradrifts in Echtzeit erlaubt.
- **Abbildendes Spektrometerkonzept.** Hier gilt es eine Möglichkeit zu finden, das sSMFTS zu einem abbildenden Spektrometer zu erweitern. Dabei ist darauf

zu achten, möglichst keine zusätzlichen Optiken zu verwenden. Zudem sollte eine Aufnahmetechnik gewählt werden, die weiterhin einen möglichst hohen Lichtdurchsatz garantiert.

1.3 Inhalt der Arbeit

In diesem Abschnitt folgt nun ein kurzer Überblick über den Inhalt sowie die Gliederung der vorliegenden Arbeit.

Kapitel 2 behandelt zu Beginn relevante theoretische Grundlagen, um den Zugang zu dieser Arbeit zu erleichtern. Dazu wird zunächst auf optische Prinzipien wie Interferenz, Kohärenz sowie Dispersion und Brechung eingegangen. Daraufhin folgt eine kurze Einführung in die Infrarotspektroskopie, chemometrische Analysemodelle sowie relevante Lichtquellen und Detektoren für den MIR. Das Kapitel schließt mit einer Zusammenfassung des Stands der Technik im Hinblick auf klassische sowie abbildende Infrarotspektrometer.

Kapitel 3 widmet sich gesondert dem Konzept des sSMFTS, welches die Grundlage für die in dieser Arbeit entwickelten Spektrometer darstellt. Neben einer Erläuterung der Funktionsweise werden einige der fundamentalen Einschränkungen erläutert und genauer untersucht.

Zur Erweiterung der spektralen Bandbreite wurde im Rahmen dieser Arbeit zunächst ein breitbandiges statisches Fourier-Transformations-Spektrometer (bsFTS) entwickelt. Dieses wird in Kapitel 4 vorgestellt. Neben dem optischen Design und mechanischen Aufbau der Laborprototypen werden Dispersionseffekte und Aberrationen des bsFTS simulativ untersucht. Zudem wird eine Stufenspiegel-Variante zur Erhöhung der spektralen Auflösung sowie eine Methode zur kontinuierlichen Background-Korrektur vorgestellt, um die Langzeitstabilität des bsFTS zu verbessern. Das Kapitel schließt mit einigen möglichen Varianten des Designs, welche für zukünftige wissenschaftliche Arbeiten von großem Interesse sein können.

In Kapitel 5 wird eine abbildende Variante des sSMFTS aufgezeigt. Neben dem grundsätzlichen Funktionsprinzip erfolgt eine Erläuterung des verwendeten Windowing-Verfahrens zur Generierung des hyperspektralen Datenwürfels. Zudem werden der experimentelle Aufbau sowie einige Design-Varianten des statischen abbildenden Fourier-Transformations-spektrometers (engl.: static imaging Fourier transform spectrometer – sIFTS) vorgestellt.

Die Ergebnisse der im Zuge dieser Arbeit durchgeführten Experimente finden sich in Kapitel 6. Dazu wird zunächst das bsFTS im Hinblick auf Background-Spektrum und Wellenzahlgenauigkeit überprüft. Anschließend werden die Stufenspiegel-Variante sowie die kontinuierliche Background-Korrektur validiert. Zudem werden mit der Flüssigkeits-

analyse in abgeschwächter Totalreflexion sowie der zeitaufgelösten Spektroskopie mögliche Anwendungen des bsFTS evaluiert.

Das sIFTS wird zunächst auf die erzielbare räumliche Auflösung überprüft. Im Anschluss wird die spektrale Genauigkeit sowie das Windowing-Verfahren mithilfe unterschiedlicher Kunststoffproben validiert.

Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick in Kapitel 7. Neben einer grundlegenden Einordnung der Ergebnisse erfolgt eine Einschätzung für weitere mögliche wissenschaftliche Arbeiten auf dem Gebiet der statischen Fourier-Transformations-Spektrometer für den mittleren Infrarotbereich.

Kapitel 2

Physikalische Grundlagen und Stand der Technik

Zu Beginn dieser Arbeit stellt dieses Kapitel relevante Grundlagen dar, die ein Verständnis der im weiteren Verlauf diskutierten wissenschaftlichen Ergebnisse erleichtern. Dazu wird zunächst auf grundlegende optische Konzepte sowie die Funktionsweise von Infrarotspektroskopie eingegangen. Zudem wird der Stand der Technik hinsichtlich klassischer sowie abbildender Infrarotspektrometer aufgezeigt.

2.1 Optik

In diesem Abschnitt werden für die in dieser Arbeit entwickelten statischen Fourier-Transformations-Spektrometer essentielle Grundlagen der Optik erörtert. Dazu zählen neben der Interferometrie auch Dispersions- und Brechungseffekte.

2.1.1 Interferometrie und Kohärenz

Da das elektrische Feld von Infrarotstrahlung mit Frequenzen von etwa 100 THz oszilliert und daher nicht direkt gemessen werden kann, kommt der Interferometrie hier in vielen Fällen eine bedeutende Rolle zur Bestimmung der Wellenlänge und Phasenlage zu. Sowohl konventionelle, als auch statische Fourier-Spektrometer nutzen das Prinzip der Zweistrahl-Interferenz, d.h. es werden die Amplituden zweier Einzelwellen nach dem Superpositionsprinzip überlagert.

Dies wird hier zunächst anhand eines einfachen Beispiels nach [38] erläutert. Dazu werden zwei monochromatische, linear polarisierte, ebene Wellen, welche sich im freien Raum

ausbreiten, angenommen. Beide weisen die gleiche Wellenlänge λ und jeweils einen Wellenvektor \vec{k}_i auf. Die jeweiligen elektrischen Felder \vec{E}_1 und \vec{E}_2 können gemäß Gleichung (2.1) und Gleichung (2.2) beschrieben werden. Hier ist \vec{r}_i jeweils der Ortsvektor, die Kreisfrequenz wird mit ω beschrieben und initiale Phasenverschiebungen werden über ϕ_i einbezogen.

$$\vec{E}_1 = \vec{E}_{0,1} \cdot \cos(\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1 - \omega t + \phi_1) \quad (2.1)$$

$$\vec{E}_2 = \vec{E}_{0,2} \cdot \cos(\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2 - \omega t + \phi_2) \quad (2.2)$$

Als zugängliche Messgröße ist nun die Intensität I bei Überlagerung der beiden Teilwellen von besonderem Interesse. Diese ist als die Flächenleistungsdichte des elektromagnetischen Feldes definiert und ergibt sich aus dem zeitlichen Mittelwert des Poynting-Vektors \vec{S} nach Gleichung (2.3). Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der elektromagnetischen Welle wird mit v bezeichnet, die Permittivität des Ausbreitungsmediums mit ϵ [38].

$$I = \langle \vec{S} \rangle = \epsilon v \langle \vec{E}^2 \rangle = \epsilon v \frac{|\vec{E}_0|^2}{2} = \epsilon v \frac{E_0^2}{2} \quad (2.3)$$

Für die Überlagerung von \vec{E}_1 und \vec{E}_2 lässt sich die Gesamtintensität unter Vernachlässigung von Konstanten nun gemäß Gleichung (2.4) berechnen.

$$I \propto \langle \vec{E}^2 \rangle = \langle (\vec{E}_1 + \vec{E}_2)^2 \rangle = \underbrace{\langle \vec{E}_1^2 \rangle}_{I_1} + \underbrace{\langle \vec{E}_2^2 \rangle}_{I_2} + 2 \underbrace{\langle \vec{E}_1 \cdot \vec{E}_2 \rangle}_{I_{12}} \quad (2.4)$$

Während I_1 und I_2 unabhängig voneinander sind, beschreibt I_{12} die Wechselwirkung der beiden Teilwellen und wird deshalb als Interferenzterm oder Interferogramm bezeichnet. Dieses lässt sich mithilfe von Gleichung (2.5) ausdrücken. Eine ausführliche Herleitung findet sich in [38].

$$\langle \vec{E}_1 \cdot \vec{E}_2 \rangle = \frac{1}{2} \cdot \vec{E}_{0,1} \cdot \vec{E}_{0,2} \cdot \cos(\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1 - \vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2 + \phi_1 - \phi_2) \quad (2.5)$$

Wird nun angenommen, dass die beiden ebenen Wellen \vec{E}_1 und \vec{E}_2 linear und parallel zueinander polarisiert sind, so lässt sich die vektorielle Betrachtungsweise in ein skalares Problem überführen. Betrachtet werden dabei lediglich die jeweiligen Amplituden $E_{0,1}$ und $E_{0,2}$. Die Gesamtintensität lässt sich dann gemäß Gleichung (2.6) ausdrücken.

$$\begin{aligned}
I &\propto \frac{E_{0,1}^2}{2} + \frac{E_{0,2}^2}{2} + E_{0,1}E_{0,2} \cdot \cos\left(\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1 - \vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2 + \phi_1 - \phi_2\right) \\
&= I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Die Gesamtintensität wird also durch eine Phasendifferenz δ moduliert. Diese wird unter Vernachlässigung der initialen Phasendifferenz durch die optische Pfaddifferenz (OPD) $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ sowie die Ausbreitungsrichtung der überlagerten Wellen bestimmt.

Wird nun angenommen, dass sich beide Wellen in die gleiche Richtung (hier in z-Richtung) ausbreiten, was beispielsweise bei Michelson-Interferometern und damit bei klassischen Fourier-Transformations-Spektrometern (siehe Abschnitt 2.3.3) der Fall ist, so vereinfacht sich Gleichung (2.6) zu

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot \text{OPD}\right). \tag{2.7}$$

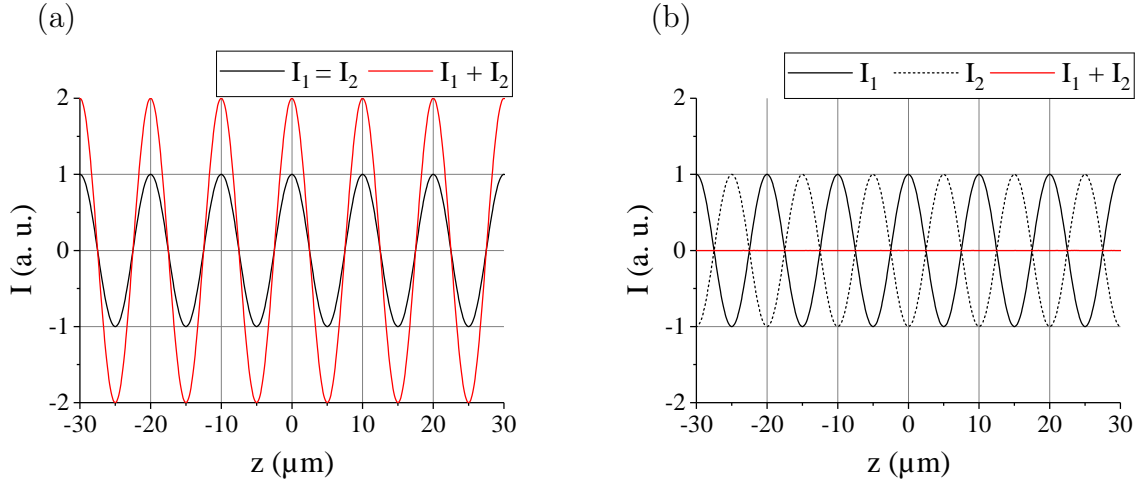


Abbildung 2.1: Beispielhafte Darstellung von Zweistrahl-Interferenz anhand einer monochromatischen Lichtquelle mit einer Wellenlänge von $10\ \mu\text{m}$ und Ausbreitung in z-Richtung. (a) konstruktive Interferenz; (b) destruktive Interferenz.

Es lassen sich zwei Extremfälle erkennen, welche in Abb. 2.1 dargestellt sind. Zum einen kommt es wie in Abb. 2.1(a) gezeigt zu konstruktiver Interferenz wenn gilt

$$\text{OPD} = m\lambda \quad \text{mit } m = 0,1,2,3,\dots \tag{2.8}$$

Zum anderen kommt es zu destruktiver Interferenz bzw. einer gegenseitigen Auslöschung der elektrischen Felder, wenn gilt

$$\text{OPD} = (2m + 1) \frac{\lambda}{2} \quad \text{mit } m = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.9)$$

Dies ist beispielhaft in Abb. 2.1(b) dargestellt.

Um in diesem Fall Interferenzeffekte beobachten zu können, müssen die überlagerten Wellen zeitlich kohärent zueinander sein, d.h. eine zeitlich konstante Phasenbeziehung zueinander aufweisen. Ein Maß für die zeitliche Kohärenz ist die zeitliche Kohärenzlänge $l_{c,t}$ gemäß Gleichung (2.10). Diese gibt an, ab welcher OPD keine Interferenz mehr auftritt. Der maßgebende Parameter ist hier die Bandbreite der verwendeten Lichtquelle $\Delta\lambda$. Je breiter das betrachtete Lichtspektrum, desto geringer ist die Kohärenzlänge [38].

$$l_{c,t} = \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda}. \quad (2.10)$$

Ein weiterer Spezialfall ist die Interferenz zweier zueinander verkippter ebener Wellen mit den Wellenvektoren \vec{k}_1 und \vec{k}_2 , welche einen Winkel 2ϑ einschließen. Schematisch ist dies in Abb. 2.2 dargestellt und ist beispielsweise der Fall in einem sSMFTS (siehe Kapitel 3), welches die Basis für die in dieser Arbeit entwickelten sFTS bildet.

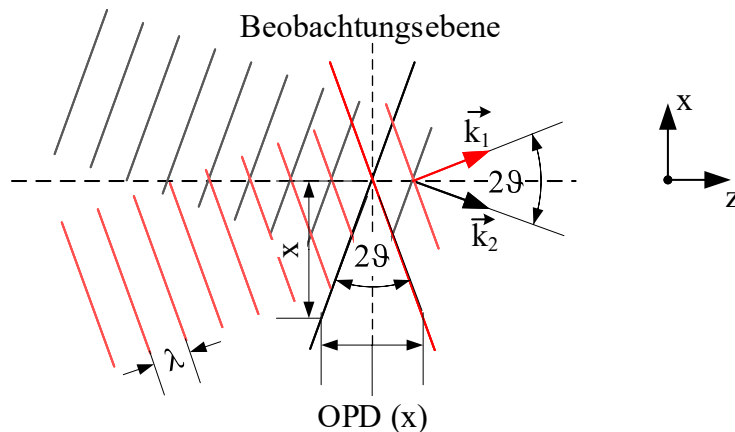


Abbildung 2.2: Interferenz zweier zueinander verkippter ebener Wellenfronten [82].

Über geometrische Überlegungen lässt sich zeigen, dass in diesem Fall eine ortsabhängige Modulation der OPD in der Beobachtungsebene entsteht, welche sich durch Gleichung (2.11) berechnen lässt.

$$\text{OPD} = 2 \tan(\vartheta) \cdot x \quad (2.11)$$

Damit lässt sich die Interferenzgleichung in Abhängigkeit der Position x folgendermaßen ausdrücken:

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos\left(\frac{4\pi}{\lambda} \cdot \tan(\vartheta) \cdot x\right). \quad (2.12)$$

Die Raumfrequenz k_s dieser Interferenzerscheinung lässt sich über Gleichung (2.13) bestimmen.

$$k_s = \frac{2 \tan(\vartheta)}{\lambda} \quad (2.13)$$

Zusätzlich zur zeitlichen Kohärenz ist in diesem Fall auch die räumliche Kohärenz zu berücksichtigen. Diese ist hauptsächlich abhängig vom Lichtquellendurchmesser d_{LQ} sowie dem Abstand R zwischen Lichtquelle und Beobachtungsebene und beschreibt den räumlichen Bereich der Beobachtungsebene, in dem Interferenzeffekte sichtbar sind. Mathematisch lässt sich dieser Zusammenhang durch eine räumliche Kohärenzlänge $l_{c,r}$ definieren [82]:

$$l_{c,r} = \frac{R\lambda}{d_{LQ}}. \quad (2.14)$$

Die in dieser Arbeit herangezogene Größe zur Beurteilung der Güte eines interferometrischen Messsystems ist der Michelson-Kontrast oder auch die Sichtbarkeit V [82]:

$$V = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}} = \frac{2\sqrt{I_1 I_2}}{I_1 + I_2} |\gamma(\text{OPD})|. \quad (2.15)$$

Diese ist zunächst abhängig vom Intensitätsverhältnis I_1/I_2 der interferierenden optischen Felder, wobei sie für $I_1 = I_2$ maximal wird. Zudem werden die zuvor diskutierten Kohärenzeffekte über den Betrag des Kohärenzgrads $|\gamma(\text{OPD})|$ berücksichtigt. Dieser entspricht der Amplitude der Hüllkurve des Interferogramms und ist abhängig von der OPD. Dabei gilt [38]:

- $|\gamma(\text{OPD})| = 1$: vollständig kohärentes Licht
- $0 < |\gamma(\text{OPD})| < 1$: teilweise kohärentes Licht
- $|\gamma(\text{OPD})| = 0$: vollständig unkohärentes Licht

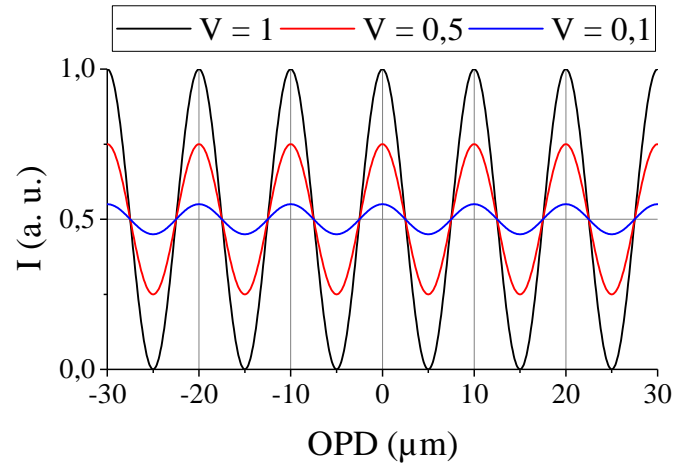


Abbildung 2.3: Interferenzsignale mit unterschiedlichen Michelson-Kontrasten bzw. Sichtbarkeiten.

Eine detaillierte mathematische Beschreibung und Herleitung des Kohärenzgrads findet sich in [38] sowie [82]. Abbildung 2.3 zeigt abschließend beispielhafte Interferogramme mit unterschiedlich hohem Michelson-Kontrast.

2.1.2 Dispersion und Brechung

Breitet sich Licht wie bislang angenommen im Vakuum aus, so bewegt es sich mit einer Phasengeschwindigkeit c_0 nach Gleichung (2.16) fort. Diese berechnet sich mithilfe der elektrischen sowie der magnetischen Feldkonstante ϵ_0 , bzw. μ_0 und wird auch als Lichtgeschwindigkeit im Vakuum bezeichnet [38].

$$c_0 = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \quad (2.16)$$

Bewegt sich Licht nun allerdings in Materie, so wird die entsprechende Phasengeschwindigkeit c_M um einen Faktor n reduziert [38]:

$$n = \frac{c_0}{c_M} = \sqrt{\epsilon_r \mu_r}. \quad (2.17)$$

Dieser ist materialabhängig und wird als Brechungsindex bezeichnet. Berücksichtigt werden hier die relative Permittivität ϵ_r sowie die relative Permeabilität μ_r des Materials. Mit den entsprechenden Brechungsindizes von m durchlaufenen Medien lässt sich nun als Ergänzung zur geometrischen Pfadlänge l_{geo} eine optische Pfadlänge l_{opt} gemäß Gleichung (2.18) definieren [38].

$$l_{\text{opt}} = \sum_{i=1}^m n_i \cdot l_{\text{geo},i} \quad (2.18)$$

Die optische Pfadlänge gibt die geometrische Pfadlänge an, welche Licht in der gleichen Zeit im Vakuum zurücklegen würde und ist ein wichtiges Konzept in Optik und Interferometrie.

Neben dem durchstrahlten Material zeigt der Brechungsindex Abhängigkeiten von Wellenlänge und Temperatur. Im gleichen Material breitet sich Licht unterschiedlicher Wellenlänge also unterschiedlich schnell aus, was als Dispersion bezeichnet wird und die Bandbreite optischer Systeme begrenzt. Gleichzeitig ändert sich die Ausbreitungsgeschwindigkeit bei sich ändernder Umgebungstemperatur, weshalb optische Systeme oft aktiv oder passiv temperaturstabilisiert werden müssen [21].

Eine Möglichkeit, die entsprechenden Werte $n(\lambda, T)$ des Brechungsindex zu bestimmen, ist die Sellmeier-Gleichung [28]:

$$n(\lambda, T) = \left(A + B \frac{\lambda^2}{(\lambda^2 - C)} + D \frac{\lambda^2}{(\lambda^2 - E)} \right)^{1/2}. \quad (2.19)$$

Die verwendeten temperaturabhängigen Konstanten A , B , C , D und E werden üblicherweise empirisch ermittelt und sind nur für einen eingeschränkten Spektral- und Temperaturbereich gültig.

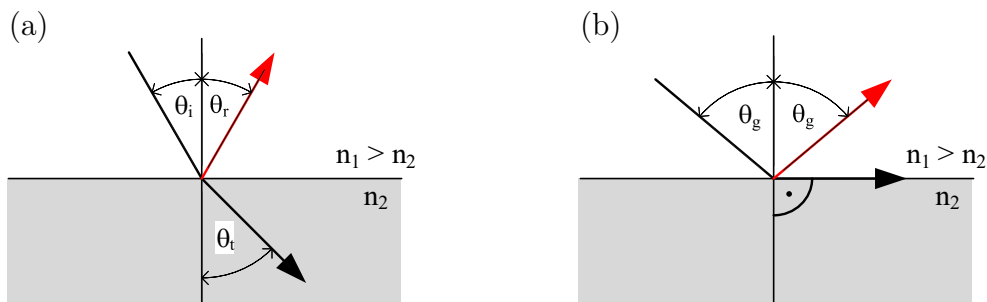


Abbildung 2.4: Brechung und Reflexion von Lichtstrahlen an optischen Grenzflächen [38].

Kommt es nun zu einem Übergang von Licht zwischen zwei Bereichen unterschiedlicher Brechungsindizes n_1 und n_2 , so wird unter Vernachlässigung von Absorption ein Teil der einfallenden Strahlung reflektiert, während der andere Teil transmittiert wird. Schematisch ist dies in Abb. 2.4(a) dargestellt. Während der Ausfallswinkel θ_r der reflektierten Strahlung dabei dem Einfallswinkel θ_i entspricht, ändert sich der Winkel der transmittierten Strahlung

θ_t in Abhängigkeit der Brechungsindizes nach Gleichung (2.20). Dieser Zusammenhang wird als Snellius-Gesetz bezeichnet [38].

$$n_1 \cdot \sin(\theta_i) = n_2 \cdot \sin(\theta_t) \quad (2.20)$$

Einen Spezialfall stellt die Totalreflexion dar, welche auftritt, wenn Licht von einem optisch dichteren Medium, d.h. mit größerem Brechungsindex, in ein optisch dünneres Medium übertritt und der Einfallswinkel einen gewissen Winkel θ_g übersteigt. Dieser wird als Grenzwinkel der Totalreflexion bezeichnet und lässt sich mithilfe von Gleichung (2.21) berechnen [82].

$$\theta_g = \arcsin\left(\frac{n_2}{n_1}\right) \quad (2.21)$$

Schematisch ist die Totalreflexion in Abb. 2.4(b) dargestellt. Diesen Effekt machen sich beispielsweise optische Fasern zur Lichtleitung zunutze [131] und auch in der Infrarotspektroskopie wird Fluid- und Feststoffanalyse in abgeschwächter Totalreflexion (ATR) betrieben (siehe Abschnitt 6.1.5.1).

2.2 Infrarotspektroskopie

Nach einer generellen Einführung in relevante Optikgrundlagen beschäftigt sich dieser Abschnitt nun konkret mit der Infrarotspektroskopie (IR-Spektroskopie). Dabei liegt das Hauptaugenmerk auf dem grundlegenden Funktionsprinzip sowie auf gängigen multivariaten Auswertemethoden und Analyseverfahren zur Bestimmung von Stoffmengenkonzentrationen. Zudem werden Lichtquellen und Detektoren vorgestellt, die in diesem Spektralbereich Verwendung finden.

2.2.1 Elektromagnetisches Spektrum

Elektromagnetische Strahlung kann, wie in Abb. 2.5 gezeigt, über die Wellenlänge des elektrischen Feldes in unterschiedliche Spektralbereiche eingeteilt werden. Der Infrarotbereich lässt sich auf diese Weise nach [12] in einem Wellenlängenbereich von 780 nm bis 1 mm zwischen dem sichtbaren Teil des Spektrums und den Mikrowellen einordnen.

Zusätzlich wird infrarote Strahlung typischerweise in drei Unterbereiche gegliedert, den nahen Infrarotbereich (NIR), den mittleren Infrarotbereich (MIR) und den fernen Infrarotbereich (FIR). Während sich in der Literatur keine einheitliche Definition der Grenzen zwischen diesen Bereichen findet, so wird für die IR-Spektroskopie im MIR, welche für diese

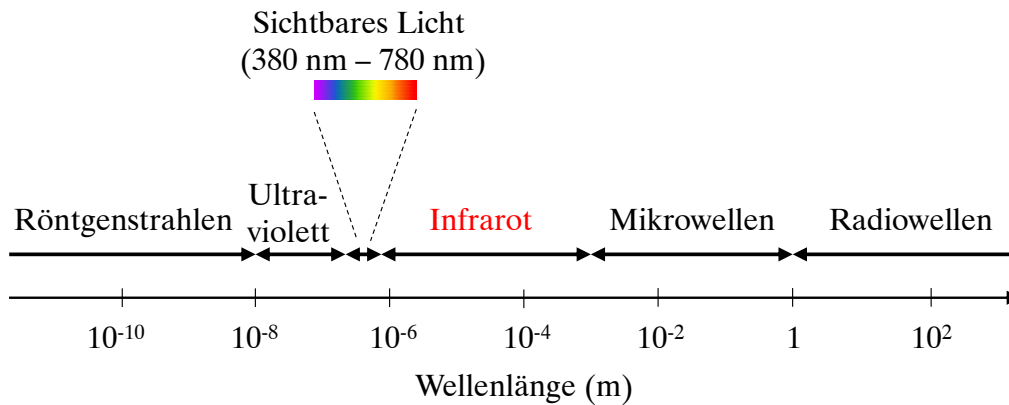


Abbildung 2.5: Einordnung des Infrarotbereichs im elektromagnetischen Spektrum nach [12].

Arbeit entscheidend ist, zumeist ein Wellenlängenbereich von $2,5 \mu\text{m}$ bis $25 \mu\text{m}$ angegeben [32]. Tabelle 2.1 zeigt die daraus abgeleitete Einteilung des Infrarotbereichs.

Statt der Wellenlänge λ wird in der IR-Spektroskopie oft deren Kehrwert, die Wellenzahl $\tilde{\nu}$ angegeben. Aus diesem Grund sind in Tab. 2.1 auch die jeweiligen Wellenzahlbereiche angegeben. Das MIR erstreckt sich demzufolge von 4000 cm^{-1} bis 400 cm^{-1} .

Tabelle 2.1: Unterteilung des Infrarotbereichs nach [12] und [32].

	NIR	MIR	FIR
λ in μm	0,78 – 2,5	2,5 – 25	25 – 1000
$\tilde{\nu}$ in cm^{-1}	12800 – 4000	4000 – 400	400 – 10

Die Wellenzahl ist nach Gleichung (2.22) linear mit der Energie der Strahlung E_{rad} verknüpft und wird standardmäßig in cm^{-1} angegeben. Das Planck'sche Wirkungsquantum wird hier mit h bezeichnet, die Frequenz der Strahlung mit ν [38].

$$E_{\text{rad}} = h\nu = h \frac{c_M}{\lambda} = hc_M \tilde{\nu} \quad (2.22)$$

2.2.2 Absorption infraroter Strahlung

IR-Spektroskopie basiert auf der Interaktion zwischen infraroter Strahlung und Molekülen, in denen ein Dipolmoment hervorgerufen werden kann. Diese können durch Absorption infraroter Strahlung aus dem Gleichgewichtszustand auf ein höheres Energieniveau gehoben werden. Die Absorption lässt sich dann prinzipiell als Anregung des Moleküls mit einer charakteristischen diskreten Resonanzenergie beschreiben. Da die Energie eines Photons

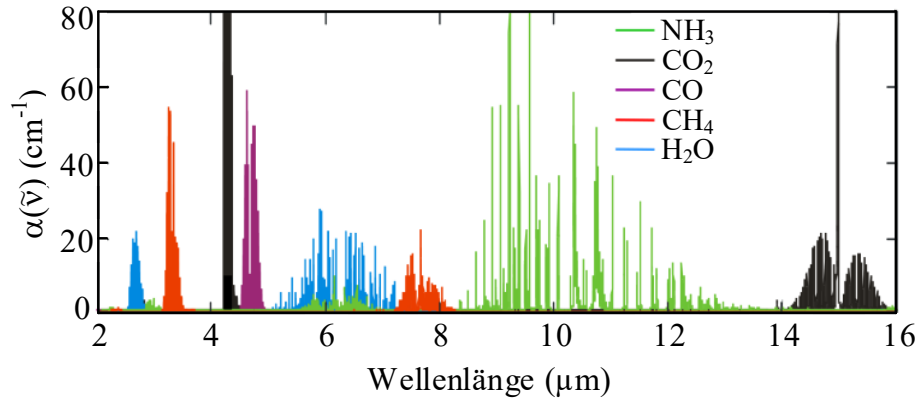


Abbildung 2.6: Linearer Absorptionskoeffizient verschiedener Gasmoleküle im mittleren Infrarotbereich [42].

gemäß Gleichung (2.22) von der Wellenlänge bzw. der Wellenzahl abhängt, lassen sich so unterschiedliche Moleküle im Spektrum unterscheiden. Beispielhaft zeigt Abb. 2.6 dazu die Absorptionskoeffizienten $\alpha(\tilde{\nu})$ von verschiedenen Gasen, welche jeweils ein einzigartiges Spektrum im MIR ausbilden.

Grundsätzlich werden durch die Absorption im MIR hauptsächlich Molekülschwingungen hervorgerufen, weshalb Spektroskopie in diesem Spektralbereich auch als Schwingungs-Spektroskopie bezeichnet wird [32].

Jede dabei auftretende Schwingungsmode i mit zugehöriger Frequenz ψ_i beinhaltet Auslenkungen der Atome aus ihrem Gleichgewichtspunkt. Tritt bei einer solchen Schwingung eine Änderung des Dipolmoments auf, so wird die Schwingung als „IR-aktiv“ bezeichnet und das Molekül absorbiert infrarote Strahlung [41]. Abbildung 2.7 zeigt beispielhaft die wichtigsten Schwingungsarten anhand eines dreiatomigen Moleküls.

Die potentielle Energie $E_{i\zeta}$, die zur Anregung der Schwingungsmoden bzw. der entsprechenden Energiezustände benötigt wird, lässt sich mit der Schwingungsquantenzahl der i -ten Mode $\zeta_i = 1, 2, \dots$ näherungsweise durch das Hooke'sche Gesetz abbilden:

$$E_{i\zeta} = h\psi_i \left(\zeta_i + \frac{1}{2} \right). \quad (2.23)$$

Setzt man diesen Ausdruck mit Gleichung (2.22) gleich, so lässt sich bestimmen, bei welcher Wellenzahl $\tilde{\nu}$ Absorption auftritt. Diese Beschreibung ist für viele Absorptionsvorgänge im MIR ausreichend, da zumeist eine harmonische Molekülschwingung angenommen werden kann [32].

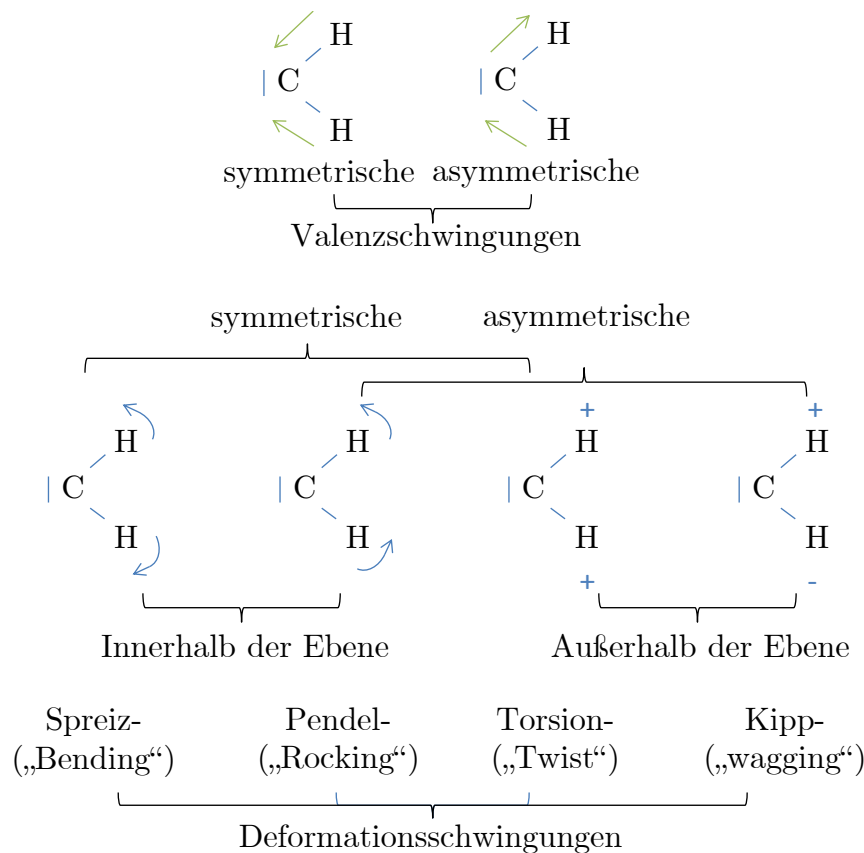


Abbildung 2.7: Schwingungsarten eines dreiatomigen Moleküls nach [41]. Schwingungen aus der Zeichenebene heraus sind mit + gekennzeichnet, Schwingungen in die Zeichenebene hinein mit –.

2.2.3 Chemometrie

Eine Unterscheidung und Identifikation verschiedener Moleküle ist durch Betrachtung des Absorptionsspektrums und mithilfe spektraler Datenbanken relativ einfach möglich. Um allerdings quantitative Aussagen über die Stoffmengenkonzentration treffen zu können, müssen die in diesem Abschnitt beschriebenen chemometrischen Verfahren verwendet werden, welche Absorption und Stoffmengenkonzentration über geeignete Modelle miteinander verknüpfen.

2.2.3.1 Lambert-Beer-Gesetz

Grundlage dieser Auswertemethoden ist das Lambert-Beer-Gesetz. Dieses liefert gemäß Gleichung (2.24) einen linearen Zusammenhang zwischen wellenzahlabhängiger Absorption, bzw. Absorptionsspektrum $A(\tilde{\nu})$ und Probendicke b sowie Stoffmengenkonzentration c_{mol} [32].

$$A(\tilde{\nu}) = a(\tilde{\nu})bc_{\text{mol}}. \quad (2.24)$$

Der Absorptionsgrad $a(\tilde{\nu})$ ist dabei über den materialspezifischen, linearen Absorptionskoeffizient $\alpha(\tilde{\nu})$ wie folgt definiert [32]:

$$a(\tilde{\nu}) = \frac{1}{\ln 10} \alpha(\tilde{\nu}). \quad (2.25)$$

Üblicherweise wird zur Bestimmung des Absorptionsspektrums zunächst das Transmissionsspektrum $T(\tilde{\nu})$ einer Probe gemessen [32]:

$$T(\tilde{\nu}) = \frac{I_{\text{probe}}(\tilde{\nu})}{I_0(\tilde{\nu})}. \quad (2.26)$$

Dazu wird, wie in Abb. 2.8 schematisch dargestellt, zunächst eine Referenz-Messung durchgeführt, um das Background-Spektrum $I_0(\tilde{\nu})$ zu bestimmen. Im Anschluss wird eine Proben-Messung durchgeführt, aus der das Proben-Spektrum $I_{\text{probe}}(\tilde{\nu})$ hervorgeht. Aus dem Transmissionsspektrum kann das Absorptionsspektrum $A(\tilde{\nu})$ dann direkt berechnet werden [32]:

$$A(\tilde{\nu}) = \log_{10} \left(\frac{1}{T(\tilde{\nu})} \right). \quad (2.27)$$

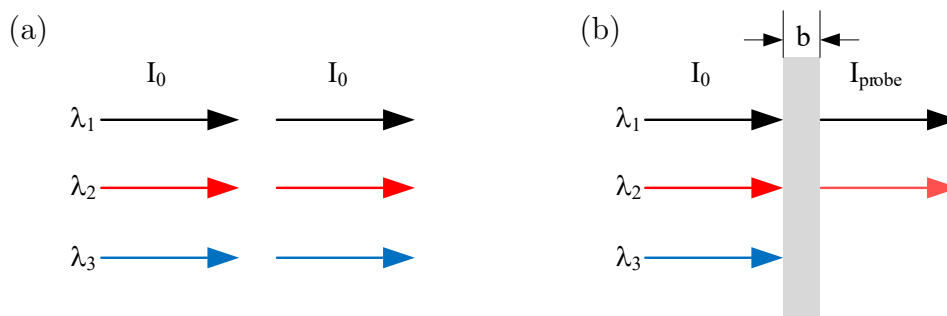


Abbildung 2.8: Bestimmung des Transmissionsspektrums einer Probe. (a) Background-Messung; (b) Proben-Messung.

Hat die Probe mehrere Bestandteile i , so ergibt sich die Absorption $A_i(\tilde{\nu})$ bei einer Konzentration von $c_{\text{mol},i}$ für jede Komponente zu [32]

$$A_i(\tilde{\nu}) = a_i(\tilde{\nu})bc_{\text{mol},i}. \quad (2.28)$$

Sind N Komponenten vorhanden, von denen mehrere Absorption bei der Wellenzahl $\tilde{\nu}$ hervorrufen, so wird die Gesamtabsorption folgendermaßen berechnet [32]:

$$A(\tilde{\nu}) = \sum_{i=1}^N [a_i(\tilde{\nu})bc_{\text{mol},i}]. \quad (2.29)$$

2.2.3.2 Lineare Regressionsmodelle

Da nach dem Lambert-Beer-Gesetz gemäß Gleichung (2.29) also grundsätzlich ein linearer Zusammenhang zwischen Absorptionsspektrum und Stoffmengenkonzentration besteht, werden typischerweise lineare Regressionsmodelle für quantitative Messungen auf Grundlage von IR-Spektroskopie verwendet [115].

Diese stellen zunächst gemäß Gleichung (2.30) mithilfe der Regressionskoeffizienten b_0 und $\vec{b}^{(n \times 1)}$ einen Zusammenhang zwischen m abhängigen Zielgrößen, in diesem Fall Stoffmengenkonzentrationen $\vec{c}_{\text{mol}}^{(m \times 1)}$ und den zugehörigen abhängigen Variablen, bzw. gemessenen Absorptionsspektren mit jeweils n Datenpunkten $\vec{A}(\tilde{\nu})^{(m \times n)}$ her [52].

$$\vec{c}_{\text{mol}} = b_0 + \vec{A}(\tilde{\nu})\vec{b} \quad (2.30)$$

Zur Bestimmung der Regressionskoeffizienten muss zunächst ein Kalibrierschritt durchgeführt werden, bei dem die Absorptionsspektren von m unterschiedlichen Proben mit bekannter Molekülkonzentration gemessen werden, welche in einem Vektor \vec{c}_{ref} zusammengefasst sind. Aus diesen Daten können daraufhin beispielsweise mit einer multiplen linearen Regression (MLR), einer Hauptkomponentenregression (PCR) oder einer Partial-Least-Squares-Regression (PLS-Regression) die Regressionskoeffizienten berechnet werden. Dabei wird versucht die in Gleichung (2.31) angegebenen Residuen \vec{e} zu minimieren. Diese beschreiben die Abweichung zwischen den Referenzkonzentrationen \vec{c} und den mit dem Modell vorhergesagten Konzentrationen \vec{c}_{ref} [52].

$$\vec{e} = \vec{c}_{\text{ref}} - \vec{c} \quad (2.31)$$

Ist dieser Kalibrierschritt abgeschlossen und damit b_0 und \vec{b} bekannt, so kann die jeweilige Stoffmengenkonzentration für unbekannte Proben anhand Gleichung (2.30) abgeschätzt werden.

Eine detaillierte Übersicht und mathematische Betrachtung linearer Regressionsmethoden findet sich in [52].

2.2.3.3 Güteparameter

Um die Qualität eines Kalbriermodells zu quantifizieren, lassen sich verschiedene Güteparameter anwenden. In dieser Arbeit wurde zunächst die Wurzel des mittleren quadratischen Fehlers (engl.: Root Mean Square Error – RMSE) betrachtet, welche nach Gleichung (2.32) definiert ist [52].

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (c_{\text{ref},i} - \hat{c}_i)^2}{n}} \quad (2.32)$$

Dabei beschreibt n wiederum die Anzahl der gemessenen Proben, die Referenzkonzentrationen der einzelnen Proben werden mit $c_{\text{ref},i}$ bezeichnet und die jeweilige durch das Modell vorhergesagte Konzentration wird mit \hat{c}_i angegeben.

Der zweite betrachtete Parameter ist das Bestimmtheitsmaß R^2 , welches sich mit dem Mittelwert der Referenzwerte \bar{c} gemäß Gleichung (2.33) ergibt [52].

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{c}_i - \bar{c})^2}{\sum_{i=1}^n (c_{i,\text{ref}} - \bar{c})^2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (c_{i,\text{ref}} - \hat{c}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (c_{i,\text{ref}} - \bar{c})^2} \quad (2.33)$$

Das Bestimmtheitsmaß erklärt den Anteil der Varianz der Zielgröße, welcher durch das lineare Modell und damit die gemessenen Absorptionsspektren abgebildet werden kann. Ein ideales Modell, bei dem alle Schätzwerte \hat{c} auf der Regressionsgerade liegen, bzw. die Residuen null sind, hat demzufolge ein R^2 von eins [52].

2.2.4 Lichtquellen und Detektoren für den Infrarotbereich

Bevor im weiteren Verlauf dieses Kapitels auf die Funktionsweise von etablierten Infrarotspektrometern eingegangen wird, werden hier relevante Lichtquellen und Detektoren für diesen Spektralbereich vorgestellt, welche im Zuge dieser Arbeit eingesetzt wurden.

2.2.4.1 Lichtquellen

Lichtquellen für den Infrarotbereich lassen sich zunächst grundsätzlich unterteilen in thermische Strahler und Lumineszenzstrahler, zu denen auch Laser zählen, [82].

Thermische Strahler Thermische Strahler erzeugen hierbei breitbandige inkohärente Strahlung typischerweise über den gesamten Infrarotbereich und einen Teil des sichtbaren Bereichs.

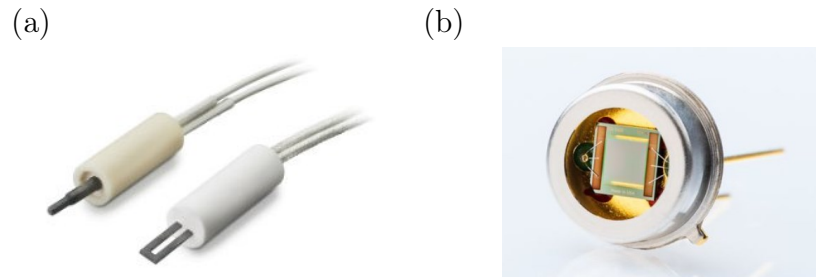


Abbildung 2.9: Verwendete thermische Lichtquellen. (a) Globare von Hawkeye Technologies [37]; (b) MEMS-Emitter von Micro-Hybrid [69].

In FTIR-Spektrometern allgemein und für die meisten der in dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen werden sogenannte Globare genutzt, welche größtenteils aus Siliziumkarbid oder Siliziumnitrid bestehen und durch das Zuführen von elektrischer Energie auf Temperaturen von etwa 1400 K erhitzt werden. Abbildung 2.9(a) zeigt Globare von Hawkeye Technologies.

Die spezifische spektrale Ausstrahlung $M_{e\lambda}$ einer solchen Lichtquelle lässt sich mithilfe des Planck'schen Strahlungsgesetzes nach Gleichung (2.34) berechnen [82].

$$M_{e\lambda} = \epsilon(\lambda) \frac{2\pi hc_0^2}{\lambda^5} \left(\frac{1}{\exp(hc_0/\lambda k_B T) - 1} \right) \quad (2.34)$$

Hier ist $\epsilon(\lambda)$ der Emissionskoeffizient des Strahlers, h die Planck'sche Konstante sowie k_B die Boltzmann-Konstante. Die Vakuumlichtgeschwindigkeit sowie die Wellenlänge werden mit c_0 bzw. λ beschrieben. Da ein Globar im Gegensatz zu Hohlraumstrahlern kein idealer schwarzer Strahler ist, ist $\epsilon(\lambda)$ hier ungleich 1 und beträgt typischerweise annähernd wellenlängenunabhängig 0,88. Globare werden daher den *grauen Strahlern* zugeordnet [82].

Abbildung 2.10 zeigt die spezifische spektrale Abstrahlung für einen idealen schwarzen Strahler bei verschiedenen Temperaturen. Zu erkennen ist eine steigende Intensität mit steigender Temperatur sowie ein Maximum im NIR. Da die Leistung des Strahlers im MIR rapide abnimmt, ist hier ein möglichst effizientes Spektrometerdesign notwendig, was im weiteren Verlauf dieser Arbeit diskutiert wird.

Eine weitere Art thermischer Lichtquellen sind die beispielhaft in Abb. 2.9(b) gezeigten MEMS-basierten Dünnschichtemitter. Diese lassen sich kostengünstig und mit kleinem Formfaktor herstellen und eignen sich somit besonders für miniaturisierte Anwendungen, wie beispielsweise nicht-dispersive Sensorik für Gase [13, 27] oder Fluide [145, 146]. Zudem lassen sich diese Strahler hermetisch versiegeln, was vor allem bei rauen Umweltbedingungen vorteilhaft ist.

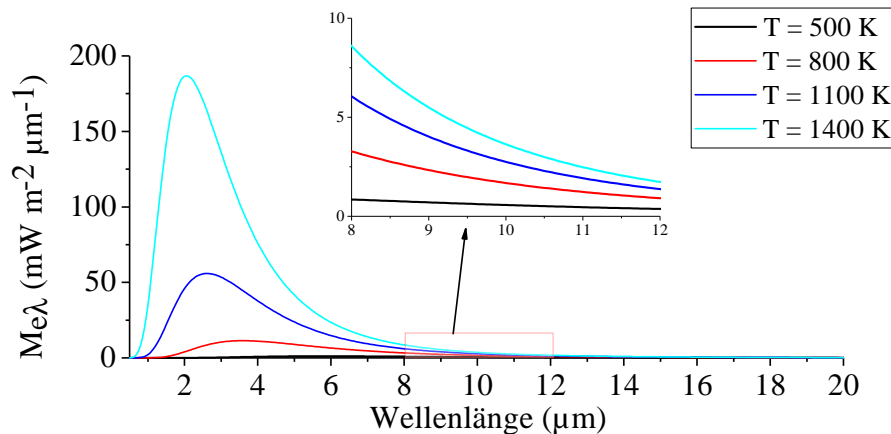


Abbildung 2.10: Spezifische spektrale Abstrahlung eines idealen schwarzen Strahlers bei unterschiedlichen Temperaturen im Infrarotbereich.

Dünnschichtemitter lassen sich ebenfalls den grauen Strahlern zuordnen, können allerdings im Gegensatz zu Globaren mit hohen Frequenzen gepulst werden. Das Kernelement ist typischerweise ein Metallfilm oder eine Membran aus nanoamorphen Kohlenstoffschichten, welche durch Stromfluss erhitzt werden. MEMS-basierte Emittoren erreichen prinzipbedingt mit etwa 1100 K niedrigere Temperaturen als Globare, was mit einer deutlich geringeren optischen Leistung einhergeht [113].

Laser Neben breitbandigen thermischen Strahlern wurden in dieser Arbeit für Kalibrierungsaufgaben auch Laser eingesetzt. Diese emittieren zeitlich und räumlich kohärentes Licht bei einem annähernd monochromatischem Spektrum. Eine ausführliche Einführung in das grundlegende Funktionsprinzip dieser Lichtquellen findet sich beispielsweise in [38] oder [14]. Für die spektrale Kalibrierung wurde ein Kohlenstoffdioxid-Laser (CO_2 -Laser) eingesetzt, welcher in einem Spektralbereich von $9,3 \mu\text{m}$ bis $10,8 \mu\text{m}$ durchstimmbar ist. Zur Justierung von optischen Aufbauten kam ein Helium-Neon-Laser (HeNe-Laser) zum Einsatz, welcher eine Zentralwellenlänge von 632 nm aufweist.

Mittlerweile werden im MIR für laserspektroskopische Verfahren auch vermehrt durchstimmbare Quantenkaskadenlaser [83, 108] eingesetzt, welche für den gesamten MIR-Bereich erhältlich sind. Zudem ist es möglich, mit sogenannten Superkontinuum-Lasern ein breitbandiges Spektrum mit hoher Leistungsdichte im MIR zu erzeugen, wobei die räumliche Kohärenz der Laserquelle beibehalten wird. Dies ist vor allem auch für abbildende Spektrometer von großem Interesse [9, 53, 109].

2.2.4.2 Ungekühlte Detektoren

In diesem Abschnitt werden relevante ungekühlte Infrarotdetektoren beschrieben und hinsichtlich eines Einsatzes im MIR eingeordnet. Prinzipiell lassen sich die verfügbaren Technologien in thermische Detektoren und Quantendetektoren unterteilen. Da der Fokus dieser Arbeit auf der Entwicklung von kostengünstigen Fourier-Spektrometern für Wellenlängen größer $3\ \mu\text{m}$ liegt, wurden hauptsächlich thermische Detektoren betrachtet. Quantendetektoren wie Photodioden oder Photomultiplier benötigen in diesem Spektralbereich eine aufwändige externe Kühlung, weshalb sie hier nicht berücksichtigt werden [91].

Pyroelektrische Detektoren Ein vor allem für nicht-dispersive Spektrometer genutzter thermischer Sensor ist der pyroelektrische Detektor [42, 145, 146]. Dieser detektiert infrarote Strahlung über den pyroelektrischen Effekt, also eine temperaturbedingte Ladungsverschiebung in einer Piezokeramik [84].

Ein Nachteil besteht darin, dass diese Art von Detektoren nicht auf einen Absolutwert, sondern lediglich auf eine Änderung der Temperatur reagieren. Aus diesem Grund muss entweder die Lichtquelle gepulst werden oder ein Shutterrad verwendet werden, um die Strahlung periodisch zu modulieren. Zudem zeigte sich in früheren eigenen Untersuchungen, dass weder die Modulationsübertragungsfunktion von pyroelektrischen Detektorarrays, noch die Pixelanzahl kommerziell erhältlicher Sensoren ausreicht, um ein leistungsstarkes sFTS zu entwickeln.

Mikrobolometer Aus diesem Grund kommt in dieser Arbeit eine Mikrobolometerkamera zum Einsatz. Diese erreicht die nötige Modulationsübertragungsfunktion für sFTS [16] und kann mit kontinuierlicher Bestrahlung betrieben werden. Den Aufbau eines einzelnen Pixels zeigt Abb. 2.11.

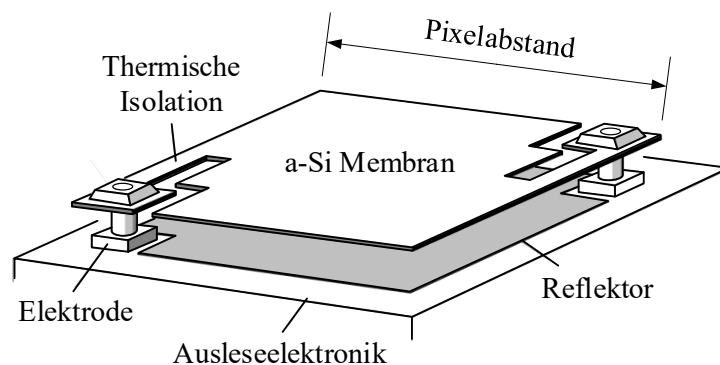


Abbildung 2.11: Funktionsprinzip von ungekühlten Mikrobolometerdetektoren nach [117].

Der sensitive Teil des Pixels ist typischerweise eine Membran aus amorphem Silizium (a-Si) oder Vanadiumoxid (VOx), welche sich bei Bestrahlung erwärmt und als Widerstandsthermometer fungiert, also einen temperaturabhängigen Widerstand aufweist. Die Membran ist über Stützbeine, welche gleichzeitig als Elektroden dienen, mit dem Substrat und der Ausleseelektronik verbunden. Auf der Substratoberfläche ist zudem eine Reflektorschicht angebracht, welche zusammen mit der Membran einen optischen $\lambda/4$ -Resonator bildet, um die Absorption einfallender Strahlung in einem bestimmten Spektralbereich zu verstärken und damit die Empfindlichkeit des Pixels zu erhöhen. Typischerweise wird die Resonatorlänge zu etwa $2,5\ \mu\text{m}$ gewählt, um die Absorption bei einer Wellenlänge von $10\ \mu\text{m}$ zu maximieren, da hier nach Gleichung (2.34) das Intensitätsmaximum für Objekte bei Raumtemperatur liegt [117]. Großer Vorteil dieser Detektoren ist unter anderem, dass die Herstellung mithilfe von Halbleiterfertigungsmethoden skalierbar ist. Typische Pixelabstände liegen zwischen $10\ \mu\text{m}$ und $17\ \mu\text{m}$.

Eine Erläuterung wichtiger Kenngrößen und Eigenschaften im Hinblick auf den Einsatz von Mikrobolometerarrays in statischen Fourier-Spektrometern erfolgt in Abschnitt 3.2.3.

2.3 Klassische Infrarotspektrometer

Um nun das Spektrum einer Lichtquelle, bzw. das Spektrum einer Probe zu messen, sind eine Vielzahl an Spektrometerkonzepten bekannt. In diesem Abschnitt wird ein Überblick etablierter Techniken gegeben, die bevorzugt für die Spektroskopie im MIR eingesetzt werden.

2.3.1 Dispersive Spektrometer

Vor allem in den Anfängen der IR-Spektroskopie wurden dispersive Spektrometer für die spektrale Analyse eingesetzt [35]. Diese teilen einfallende Strahlung mithilfe eines Prismas oder Gitters in seine spektralen Bestandteile auf.

Anschließend kann das Spektrum beispielsweise mit einem Zeilendetektor analysiert werden, wobei jeder Detektorpixel einen bestimmten Wellenlängenbereich aufnimmt.

Das Prinzip eines dispersiven Spektrometers wird hier anhand eines Czerny-Turner-Designs [47, 66] erläutert, das in Abb. 2.12 schematisch dargestellt ist. Licht ausgehend von einem Eingangsspalt wird mit einem Konkavspiegel kollimiert und auf ein Beugungsgitter geleitet. Dieses sorgt dafür, dass unterschiedliche Wellenlängen in unterschiedlichen Winkeln abgelenkt werden. Ein weiterer Konkavspiegel bildet dann schließlich unterschiedliche Wellenlängen auf die jeweiligen Detektorpixel ab.

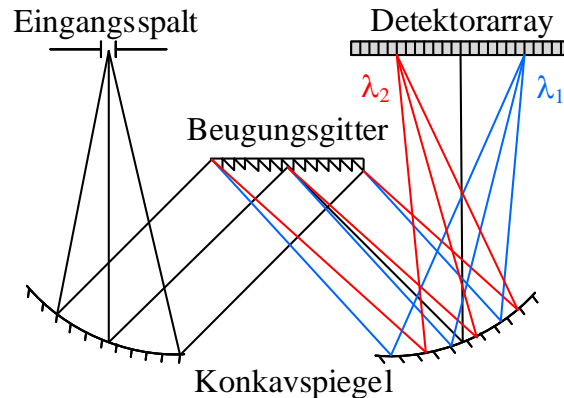


Abbildung 2.12: Dispersives Czerny-Turner Spektrometer mit Reflexionsbeugungsgitter und Konkavspiegeln nach [47].

Zwar weisen diese Spektrometer einen äußerst kompakten und robusten Aufbau auf, jedoch ergeben sich zwei entscheidende Nachteile im Hinblick auf einen Einsatz im MIR. So hängt das Auflösungsvermögen direkt von der Breite des Eingangsspalt ab, wodurch der Lichtdurchsatz limitiert wird. Zudem misst jeder Pixel nur einen sehr geringen Teil der Eingangslichtleistung, was vor allem im MIR zu geringen SNR-Werten führt [32].

2.3.2 Filter- und laserbasierte Spektrometer

Einen vergleichsweise simplen Aufbau weisen filter- und laserbasierte IR-Spektrometer auf. Einfache filterbasierte Systeme, sogenannte nicht-dispersive Infrarotsensoren (NDIR-Sensoren), werden beispielsweise zur Gasmessung eingesetzt [42]. Diese bestehen, wie in Abb. 2.13(a) gezeigt, lediglich aus einer breitbandigen Lichtquelle, einem Bandpassfilter und typischerweise einem pyroelektrischen Sensor. Dabei wird die Zentralwellenlänge des Bandpasses so angepasst, dass nur Strahlung den Sensor erreicht, die von dem nachzuweisenden Gasmolekül absorbiert werden kann.

Für komplexere Anwendungsfälle mit höherer Querempfindlichkeit, wie beispielsweise die Ölqualitätsanalyse, können Mehrkanaldetektoren in Kombination mit unterschiedlichen Bandpassfiltern verwendet werden (siehe Abb. 2.13(b)), um mehrere spektrale Banden in die Analyse einzubeziehen [144, 146].

Eine Möglichkeit, ein quasi-kontinuierliches Spektrum zu messen, stellt der Einsatz von durchstimmbaren Filtern dar. Hier sind im MIR vor allem verstimmbare Fabry-Pérot-Filter zu nennen, die durch eine mechanische Deformation die Kavitätslänge und somit die transmittierte Zentralwellenlänge ändern können. Diese Systeme wurden ebenfalls bereits für die Ölanalyse verwendet [145] sowie in der Gasanalyse eingesetzt [27, 60].

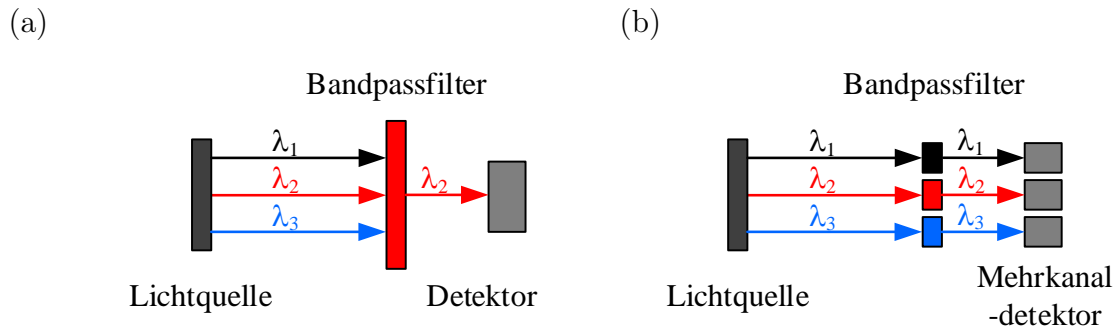


Abbildung 2.13: Filterbasierte NDIR-Sensoren. (a) Einkanal-detektor mit individuellem Bandpassfilter; (b) Mehrkanal-detektor mit mehreren Bandpassfiltern.

Nachteile liegen hier im Lichtdurchsatz, da nur ein sehr kleiner Teil des Lichtquellspektrums am jeweiligen Sensor ankommt. Zudem müssen NDIR-Sensoren spezifisch für jede Anwendung neu ausgelegt werden.

Sehr ähnlich zu den filterbasierten Spektrometern sind laserbasierte Instrumente aufgebaut. Allerdings wird die betrachtete Wellenlänge hier durch die Lichtquelle, im MIR typischerweise ein durchstimmbarer Quantenkaskadenlaser [83], bestimmt. Diese Spektrometer bieten ein sehr hohes SNR, eine hohe spektrale Auflösung sowie beugungsbegrenzte Abbildungseigenschaften, was besonders für abbildende Spektrometer interessant ist. Nachteile liegen in den relativ hohen Anschaffungskosten sowie einer begrenzten spektralen Bandbreite.

2.3.3 Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer

Vor allem in der Laborumgebung wird standardmäßig auf Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer (FTIR-Spektrometer) zurückgegriffen. Diese zeichnen sich dadurch aus, dass sie trotz geringer Eingangslichtleistung ein verhältnismäßig hohes SNR bieten. Zudem weisen FTIR-Spektrometer eine sehr hohe Genauigkeit der spektralen Achse auf. Dies lässt sich in drei Vorteilen gegenüber dispersiven Spektrometern zusammenfassen:

- Jacquinot-Vorteil

Da im Gegensatz zu dispersiven Spektrometern die spektrale Auflösung in erster Näherung nicht von der Breite des Eingangsspalts abhängt, erreicht eine wesentlich höhere Lichtleistung den Detektor [33].

- Fellgett-Vorteil

Die einfallende Strahlung wird in FTIR-Spektrometern nicht spektral aufgeteilt. Durch das interferometrische Prinzip werden alle Wellenlängen gleichzeitig mit einem

einzelnen Detektor gemessen, was das SNR im Vergleich zu einem Gitterspektrometer um den Faktor \sqrt{N} bei N Spektralelementen erhöht [32].

- Connes-Vorteil

Die spektrale Achse lässt sich durch Verwenden eines HeNe-Referenzlasers extrem genau bestimmen. Dies ermöglicht Wellenzahlgenauigkeiten von bis zu $0,001 \text{ cm}^{-1}$ [111].

Abbildung 2.14 zeigt schematisch die Funktionsweise von klassischen FTIR-Spektrometern, welche typischerweise ein Michelson-Interferometer zur zeitlichen Modulation der OPD verwenden.

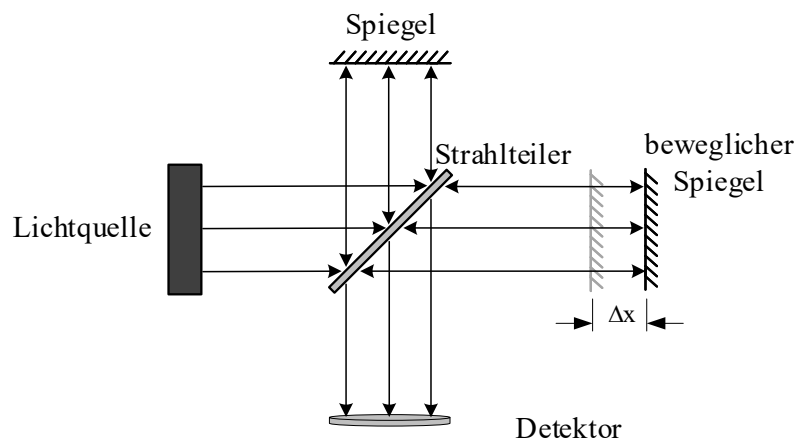


Abbildung 2.14: Veranschaulichung des FTIR-Grundprinzips nach [32].

Kollimiertes Licht trifft auf einen Strahlteiler, welcher einen Teil der Strahlung zu einem fixierten Spiegel reflektiert, während der andere Teil der Strahlung zu einem beweglichen Spiegel transmittiert wird. Dieser wird während einer Messung schrittweise oder kontinuierlich um verschiedene Distanzen Δx aus der Neutralposition verschoben, was einer Erhöhung der OPD zwischen den beiden Interferometerarmen entspricht. Nach Reflexion an den beiden Spiegeln werden die Teilstrahlen am Strahlteiler rekombiniert und auf einem Detektor zur Interferenz gebracht.

Auf diese Weise wird über die Zeit ein Intensitätssignal $I_D(\text{OPD})$ aufgenommen, welches sich für eine monochromatische Lichtquelle mit Wellenzahl $\tilde{\nu}$ über Gleichung (2.35) ausdrücken lässt [32]. Diese lässt sich unter der Annahme von $I_1 = I_2 = S_0(\tilde{\nu})/2$ aus Gleichung (2.6) herleiten.

$$I_D(\text{OPD}) = \frac{1}{2} S_0(\tilde{\nu}) [1 + \cos(2\pi\tilde{\nu}\text{OPD})] \quad (2.35)$$

Klar zu erkennen ist, dass das Signal aus einem Gleichanteil sowie einem von der OPD abhängigen Anteil besteht. Letzterer ist entscheidend für die Rekonstruktion des Spektrums $S_0(\tilde{\nu})$ der Lichtquelle und wird als Interferogramm $I(\text{OPD})$ bezeichnet [32]:

$$I(\text{OPD}) = \frac{1}{2} S_0(\tilde{\nu}) \cos(2\pi\tilde{\nu}\text{OPD}). \quad (2.36)$$

Wird nun eine reale, breitbandige Lichtquelle gemessen, so ergibt sich das Interferogramm aus einer Superposition von solchen Einzel-Interferogrammen für jede Wellenzahl. Bei einem kontinuierlichen Spektrum kann das Interferogramm also durch eine Integration der Einzel-Interferogramme über den betrachteten Wellenzahlbereich gemäß Gleichung (2.37) berechnet werden [32].

$$I(\text{OPD}) = \frac{1}{2} \int_0^\infty S_0(\tilde{\nu}) \cos(2\pi\tilde{\nu}\text{OPD}) d\tilde{\nu} \quad (2.37)$$

Abbildung 2.15(a) zeigt ein reales Interferogramm einer breitbandigen Quelle. Diese Messung wurde mit einem Labor-FTIR-Spektrometer (Thermo Fisher – Avatar 300) durchgeführt, welches im weiteren Verlauf der Arbeit als Referenzgerät dient.

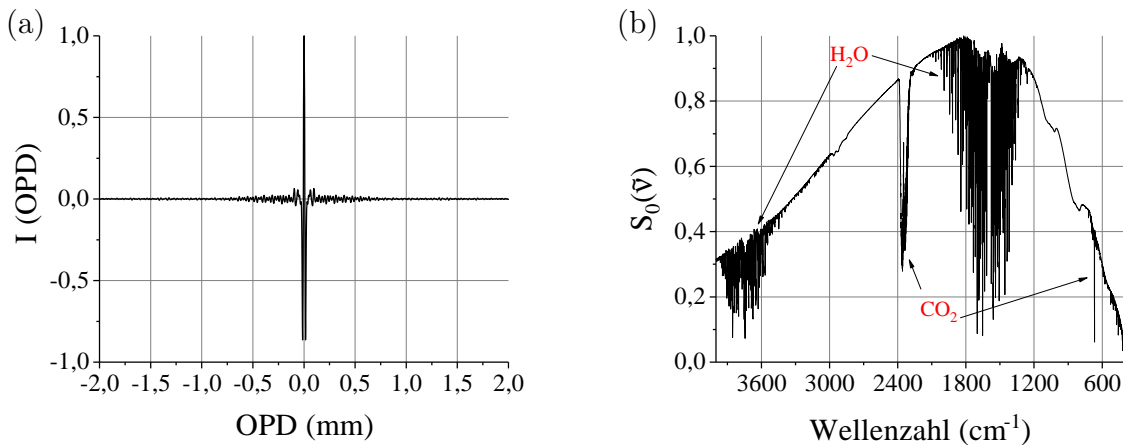


Abbildung 2.15: (a) Reales Interferogramm einer breitbandigen thermischen Lichtquelle, gemessen mit einem Labor-FTIR-Spektrometer; (b) Entsprechendes Spektrum der Lichtquelle, die Absorption durch H_2O und CO_2 ist klar erkennbar.

Das Intensitätsmaximum des Interferogramms, auch Mid-Peak genannt, findet sich bei einer OPD von null, bei der sich alle Einzelinterferogramme konstruktiv überlagern. Da die gemessene Lichtquelle eine hohe spektrale Bandbreite $\Delta\lambda$ aufweist, ist die zeitliche Kohärenzlänge gemäß Gleichung (2.10) entsprechend kurz und das Interferogramm verliert bei steigender OPD stark an Intensität.

Das Interferogramm kann mathematisch auch als Autokorrelationsfunktion der einfallenden Infrarotstrahlung interpretiert werden. Folgerichtig lässt sich das Leistungsdichtespektrum der Quelle $S_0(\tilde{\nu})$ nach dem Wiener-Chintschin-Theorem über eine Fourier-Transformation des Interferogramms nach Gleichung (2.38) bestimmen.

$$\mathcal{F}\{I(\text{OPD})\} = S_0(\tilde{\nu}) = \int_{-\infty}^{\infty} I(\text{OPD})\cos(2\pi\tilde{\nu}\text{OPD})d\text{OPD}. \quad (2.38)$$

Vor der Fourier-Transformation wird das Interferogramm in der Praxis mit einer Fensterfunktion multipliziert, was als Apodisation bezeichnet wird [32]. Zudem wird im Anschluss typischerweise eine Phasenkorrektur durchgeführt, um Phasenfehler, die beispielsweise durch den Strahlteiler verursacht werden, auszugleichen [68].

Die spektrale Auflösung $\Delta\tilde{\nu}$ des Messsystems hängt hier ausschließlich von der maximalen optischen Weglängendifferenz OPD_{max} ab [32]:

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{1}{\text{OPD}_{\text{max}}}. \quad (2.39)$$

Dadurch ist es möglich, mit entsprechend großen Spiegelauslenkungen Spektrometer mit sehr hoher Auflösung und Genauigkeit aufzubauen. Allerdings sind klassische FTIR-Spektrometer aufgrund des beweglichen Spiegels relativ anfällig gegenüber widrigen Umweltbedingungen wie Temperaturschwankungen und Vibrationen und müssen durch aufwändige optische und mechanische Designs stabilisiert werden [48]. Desweiteren wird ein Referenzlaser benötigt, um die aktuelle Spiegelposition exakt zu bestimmen und die Messgeschwindigkeit ist aufgrund der zeitlichen OPD-Modulation prinzipbedingt eingeschränkt.

2.3.4 Statische Fourier-Transformations-Spektrometer

Statische Fourier-Transformations-Spektrometer (sFTS) können hier eine Alternative zu klassischen FTIR-Spektrometern bieten, insbesondere dann, wenn die spektrale Auflösung für die jeweilige Anwendung nicht das entscheidende Kriterium darstellt. Da sFTS keine beweglichen Bauteile aufweisen und ohne Referenzlaser auskommen, lassen sie sich vergleichsweise kompakt, robust und kostengünstig aufbauen. Zudem sind durch eine räumliche Modulation der OPD hohe Messgeschwindigkeiten möglich. In diesem Abschnitt wird zunächst das Grundprinzip von sFTS dargelegt. Daraufhin wird der Stand der Technik erläutert, wobei der Fokus auf Instrumenten liegt, die im MIR eingesetzt werden können.

2.3.4.1 Grundprinzip und Funktionsweise

Grundidee von statischen Fourier-Transformations-Spektrometern ist es, die zeitliche Modulation der optischen Pfaddifferenz in klassischen FTIR-Spektrometern durch eine räumliche Modulation zu ersetzen. Dies lässt sich anhand des in Abb. 2.16 gezeigten sFTS-Aufbaus verdeutlichen. Dabei handelt es sich um ein Michelson-Interferometer, bei dem der bewegliche Spiegel durch einen Stufenspiegel ersetzt wurde [70]. Dadurch erfahren einzelne Teilstrahlen, abhängig von der getroffenen Spiegelstufe, unterschiedliche optische Pfaddifferenzen, was hier durch unterschiedliche Farben gekennzeichnet ist. Das auf diese Weise entstehende räumliche Interferogramm kann dann mit einem Detektorarray aufgezeichnet werden, was unter anderem hohe Messgeschwindigkeiten erlaubt.

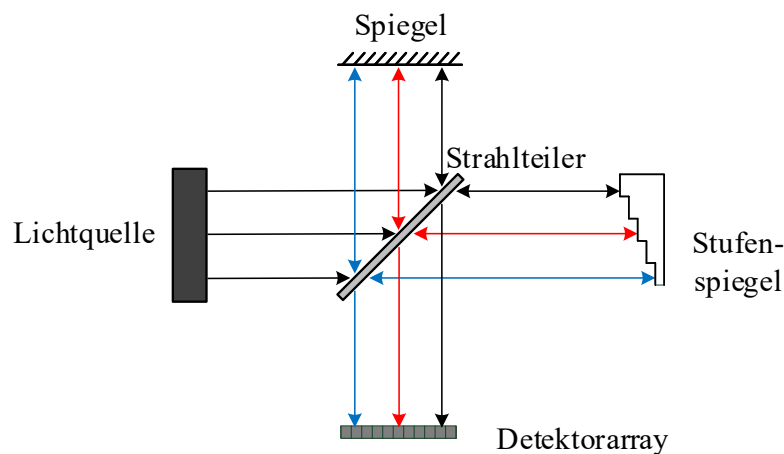


Abbildung 2.16: Veranschaulichung des sFTS-Grundprinzips nach [70].

Ein Nachteil dieses modifizierten Michelson-Interferometers liegt darin, dass nur sehr gut kollimierte Lichtquellen für ein fehlerfreies Interferogramm sorgen, was den Lichtdurchsatz dieser Interferometer stark einschränkt [26]. Umgehen lässt sich dies beispielsweise, indem der Stufenspiegel auf den Detektor abgebildet wird. Dazu wird allerdings eine Optik mit hoher Tiefenschärfe benötigt, um jede Spiegelstufe scharf auf den Detektor abzubilden, was den Einsatz von optischen Standardkomponenten unter Umständen erschwert [57]. Eine ähnliche Problematik findet sich prinzipiell bei allen weiteren sFTS-Konzepten, welche auf eine gewisse räumliche Kohärenz der einfallenden Strahlung angewiesen sind. Daher werden auch Konzepte wie Doppelspiegel-Interferometer [50], Mach-Zehnder-Interferometer mit Stufenspiegel [70] oder Michelson-Interferometer mit verkippten Spiegeln [26] hier nicht im Detail erläutert.

2.3.4.2 Doppelbrechende Interferometer

Eine der meistpublizierten sFTS-Varianten sind Spektrometer, welche ein doppelbrechendes Element als polarisationsabhängigen Strahlteiler im Interferometer nutzen. Beispielsweise kann die einfallende Strahlung mit Wollaston-Prismen in zwei Teilstrahlen aufgeteilt werden, welche nach Gleichung (2.40) einen Winkel α einschließen und senkrecht zueinander polarisiert sind [81].

$$\alpha \approx 2(n_e - n_o) \tan(\vartheta) \quad (2.40)$$

Dieser hängt zum einen vom Wert der Doppelbrechung ($n_e - n_o$) des verwendeten Materials und zum anderen vom internen Winkel ϑ des Wollaston-Prismas ab.

Eine mögliche Realisierung eines solchen sFTS zeigt Abb. 2.17. Das einfallende Licht wird durch einen Polarisator linear polarisiert. Anschließend wird die Strahlung durch das Wollaston-Prisma aufgeteilt und die Polarisierung der beiden Teilstrahlen durch einen weiteren Polarisator wieder angeglichen, um Interferenz zu ermöglichen.

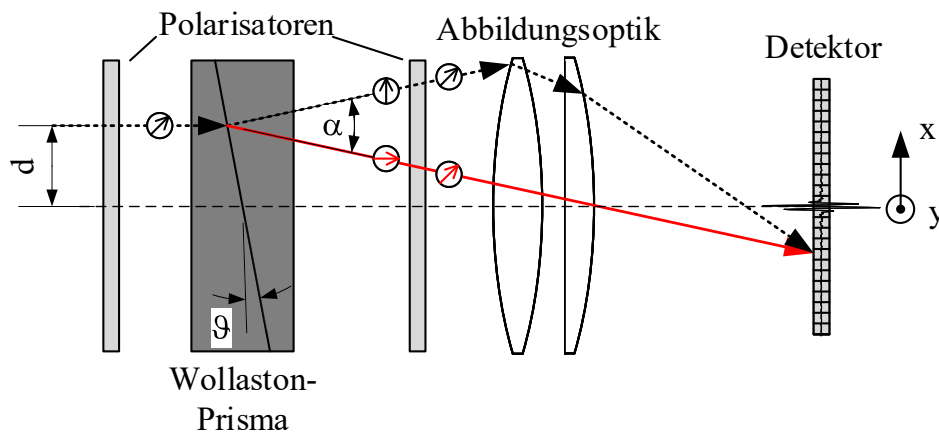


Abbildung 2.17: Schematische Darstellung eines sFTS basierend auf einem Wollaston-Prisma nach [81].

Anschließend wird die Teilungsebene des Wollaston-Prismas auf einen Detektor abgebildet, wodurch eine ortsabhängige OPD gemäß Gleichung (2.41) erzeugt wird. Dabei beschreibt d den Abstand des jeweiligen Punktes zur optischen Achse. Dies kann auch mit einem zweiten Wollaston-Prisma statt einer Abbildungsoptik erreicht werden [80].

$$\text{OPD} \approx 2d(n_e - n_o) \tan(\vartheta) \quad (2.41)$$

Als Vorteile dieses Aufbaus sind eine hohe Robustheit gegenüber Vibrationen sowie eine äußerst kompakte Bauform zu nennen [60]. Zudem können diese sFTS monolithisch aufgebaut werden.

Nachteile im Hinblick auf einen Einsatz im MIR ergeben sich zum einen aus einem relativ hohen Lichtverlust durch die Verwendung zweier Polarisatoren. Zum anderen sind geeignete doppelbrechende Materialien für diesen Spektralbereich aktuell noch nicht kommerziell erhältlich.

2.3.4.3 Source-Doubling-Interferometer

Im Gegensatz zu anderen Konzepten zur statischen Fourier-Spektroskopie bieten Source-Doubling-Interferometer den entscheidenden Vorteil, dass die Lichtquellengröße, und damit nach Gleichung (2.14) die räumliche Kohärenzlänge, weder den Interferogrammkontrast, noch die spektrale Auflösung des Spektrometers beeinflusst [75, 95]. Dadurch erlauben diese sFTS einen vergleichsweise hohen Lichtdurchsatz, was vor allem im MIR von großem Vorteil ist.

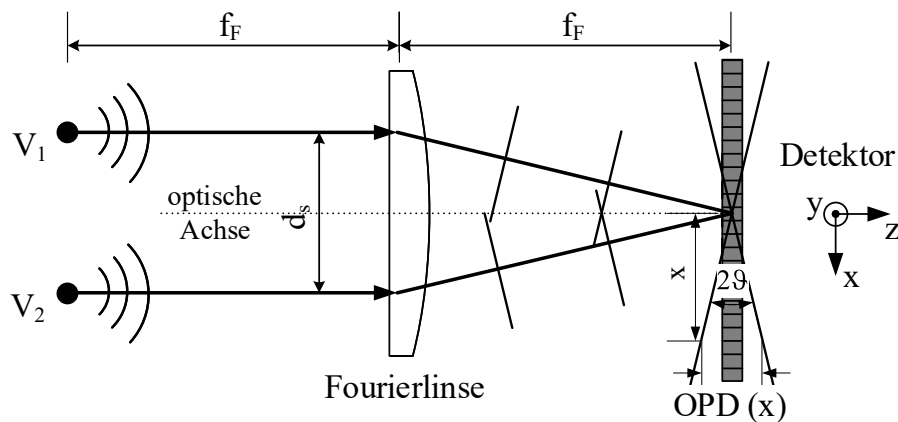


Abbildung 2.18: Schematische Darstellung des Source-Doubling-Prinzips nach [75, 95].

Interferometer, welche nach dem Source-Doubling-Prinzip arbeiten, verdoppeln die zu analysierende, divergente Lichtquelle vor einer Fourierlinse. Dies ist schematisch als virtuelles Quellenmodell in Abb. 2.18 gezeigt. Die Verdopplung der Lichtquelle wird hier durch die beiden virtuellen Quellen V_1 und V_2 dargestellt, welche in einem vertikalen Abstand d_s in der vorderen Brennebene der Fourierlinse mit Brennweite f_F platziert werden. Diese kollimiert die von den virtuellen Quellen ausgehenden sphärischen Wellenfronten und verkippt diese auf einen Detektor, welcher in der hinteren Brennebene der Linse angeordnet ist.

Analog zu Gleichung (2.11) entsteht durch die Wellenfrontkipfung eine ortsabhängige Modulation der optischen Pfaddifferenz in der Detektorebene. Diese kann mithilfe des Zusammenhangs in Gleichung (2.42) hergeleitet werden und ergibt sich in Abhängigkeit der Raumkoordinate x gemäß Gleichung (2.43) unabhängig von der Lichtquellengröße.

$$\tan(\vartheta) = \frac{d_s}{2f_F} = \frac{\text{OPD}}{2x} \quad (2.42)$$

$$\text{OPD} = \frac{d_s}{f_F} \cdot x \quad (2.43)$$

Zur Umsetzung des Source-Doubling-Prinzips sind neben modifizierten Mach-Zehnder-Interferometern [50, 118], Aufbauten mit Savart-Platte [18, 36] sowie statischen Prismeninterferometern [87] vor allem Sagnac- bzw. Common-Path-Interferometer [75] zu nennen.

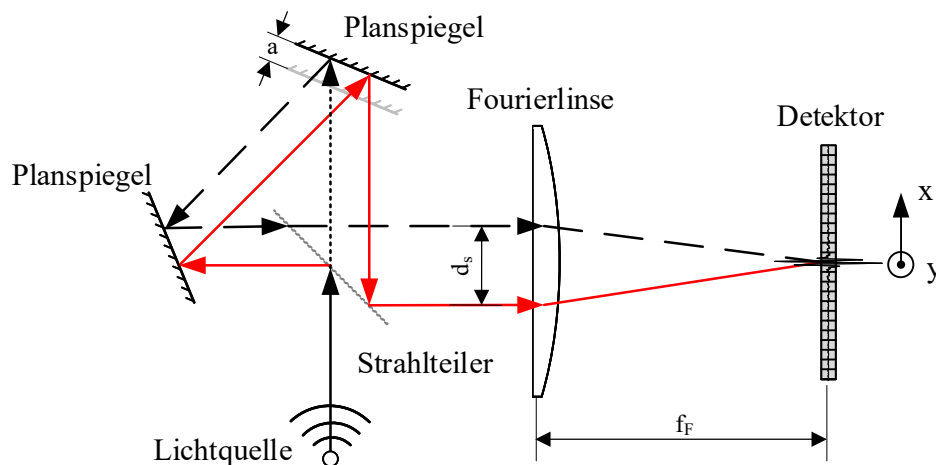


Abbildung 2.19: Schematische Darstellung eines sFTS basierend auf einem verstimmtten Sagnac-Interferometer nach [75].

Eine mögliche Realisierung eines sFTS basierend auf einem Sagnac-Interferometer ist schematisch in Abb. 2.19 dargestellt. Strahlung einer divergenten Lichtquelle trifft auf einen Strahlteiler, worauf der reflektierte Teil des Lichts (hier in rot dargestellt) das Interferometer über zwei Planspiegel im Uhrzeigersinn passiert und der transmittierte Anteil (hier gestrichelt dargestellt) gegen den Uhrzeigersinn durch das System geleitet wird. Durch eine Verschiebung eines der Planspiegel um a aus der Neutralposition gelingt es, die beiden Interferometerarme räumlich in einem vertikalen Abstand $d_s = \sqrt{2}a$ vor

einer Fourierlinse mit Brennweite f_F zu trennen. Diese bringt schließlich gemäß des Source-Doubling-Prinzips die beiden Teilstrahlen auf einem Detektor in ihrer hinteren Brennebene zur Interferenz.

Dieses System wird in der Literatur häufig erwähnt und mittlerweile auch kommerziell vertrieben. Neben der hier gezeigten Variante finden sich auch Varianten mit drei Planspiegeln [4], sphärischen [120] bzw. parabolischen Konkavspiegeln [106] als Fourierelement sowie monolithische Designs [15] in der Literatur. Eine spezielle Variante wird in [71] vorgestellt, bei der die beiden Planspiegel durch Konkavspiegel ersetzt werden und somit keine zusätzliche Einkoppel- oder Fourieroptik benötigt wird. Ein großer Vorteil der Common-Path-Interferometer ist die hohe Robustheit gegenüber Vibrationen sowie die einfache Justierbarkeit. Allerdings wird prinzipbedingt mindestens 50 % der einfallenden Lichtleistung verloren, bzw. zurück zur Lichtquelle geleitet.

Ein relativ neuer Ansatz, der für das MIR optimiert wurde, ist das statische Einzelspiegel-Fourier-Transformations-Spektrometer [95, 96], welches prinzipiell keine internen Lichtverluste aufweist. Aus diesem Grund wurde dieser Aufbau als Grundlage der in dieser Arbeit entwickelten Spektrometer verwendet und wird in Kapitel 3 gesondert im Detail betrachtet.

Einen ausführlicheren Überblick über weitere sFTS und eine detaillierte Einordnung im Hinblick auf den MIR findet sich in [95].

2.4 Abbildende Infrarotspektrometer

Während die bisher vorgestellten klassischen Infrarotspektrometer lediglich die mittlere spektrale Information einer Probe liefern, können Proben mithilfe von abbildenden Infrarotspektrometern (engl.: hyperspectral imager – HSI) sowohl spektral als auch örtlich aufgelöst analysiert werden. Typische Anwendungsbereiche umfassen beispielsweise die Fernerkundung mittels Satellit [20, 103], medizinische und pharmazeutische Analysen [1, 63, 92] sowie Lebensmittelqualitätskontrolle [30, 86, 110] und industrielle Prozessüberwachung [22, 116]. Zudem finden abbildende Spektrometer vermehrt Anwendung zur Untersuchung von 2D-Materialien [128–130]. In diesem Abschnitt wird die Funktionsweise sowie der Stand der Technik dieser Messsysteme mit einem Fokus auf den MIR dargelegt.

2.4.1 Grundprinzip und Funktionsweise

Abbildende Spektrometer vereinen grundsätzlich das Funktionsprinzip einer Kamera mit dem eines Spektrometers. Das resultierende Datenset wird als hyperspektraler Datenwürfel (eng.: hyperspectral datacube) bezeichnet und ist schematisch in Abb. 2.20 dargestellt.

Zwei Dimensionen des Würfels beschreiben dabei die örtliche Information der Probe in x - und in y -Richtung, die dritte Dimension enthält die zugehörige spektrale Information $S_0(\lambda)$ für jedes Raumelement, bzw. jedes Pixel der Kamera.

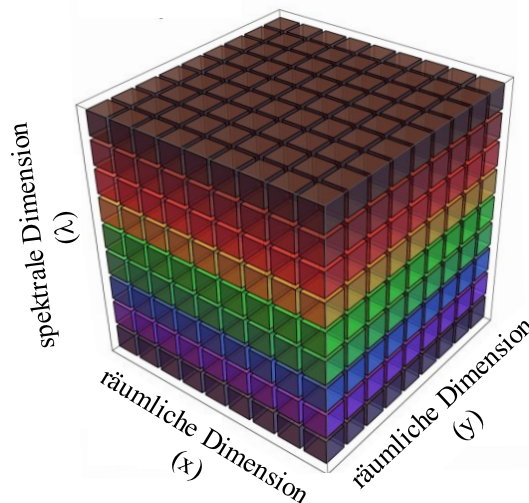


Abbildung 2.20: Schematische Darstellung eines hyperspektralen Datenwürfels nach [93].

Dies gelingt im MIR typischerweise durch die Kombination eines der in Abschnitt 2.3 vorgestellten Spektrometer mit einer Abbildungsoptik sowie einem zweidimensionalen Detektorarray.

2.4.2 Grundlegende Klassifizierung

Abbildende Spektrometer können anhand des verwendeten Aufnahmeverfahrens gemäß Abb. 2.21 zunächst grundlegend klassifiziert werden. In diesem Abschnitt werden die unterschiedlichen Aufnahmetechniken kurz erläutert und hinsichtlich ihrer Eignung für statische Fourier-Transformations-Spektrometer im MIR eingeordnet. Ein ausführlicherer Überblick findet sich beispielsweise in [93] oder [100].

2.4.2.1 Whiskbroom-Scanner

Eine Methode, einen hyperspektralen Datenwürfel aufzunehmen, ist das sogenannte Whiskbroom- bzw. Punktscan-Verfahren. Dabei erfasst das Sichtfeld (engl.: Field of View – FOV) des HSI gemäß Abb. 2.22(a) jeweils nur ein räumliches Pixel der Probe und das zugehörige Spektrum wird ermittelt. Der Scanvorgang wird dabei entweder durch ein Schwenken und eine Vorwärtsbewegung des Spektrometers, oder durch schwenkbare Eingangsspiegel durchgeführt. Diese Technik kann prinzipiell mit jedem Spektralapparat

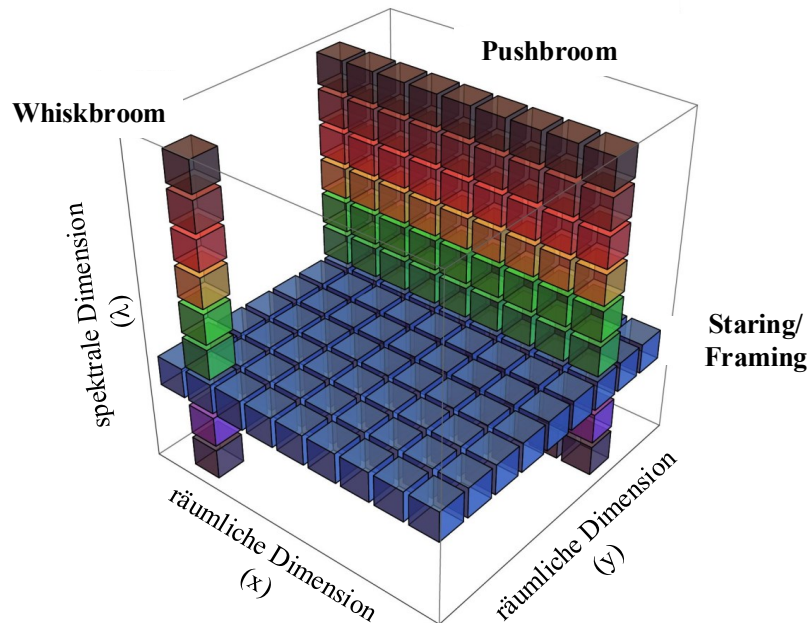


Abbildung 2.21: Schematische Darstellung verschiedener Aufnahmetechniken zur Erzeugung hyperspektraler Datenwürfel nach [93].

aus Abschnitt 2.3 kombiniert werden, allerdings ist die Messgeschwindigkeit durch den Scanvorgang erheblich eingeschränkt [93].

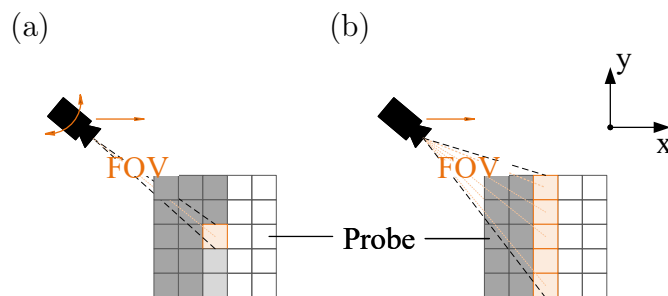


Abbildung 2.22: (a) Whiskbroom-Scanner. Die Probe wird durch ein Schwenken und eine Vorwärtsbewegung des Spektrometers Punkt für Punkt analysiert.; (b) Pushbroom-Scanner. Die Probe wird linienweise in Bewegungsrichtung analysiert.

2.4.2.2 Pushbroom-Scanner

Eine effizientere Methode ist das sogenannte Pushbroom- oder Linienscan-Verfahren. Dabei wird die Probe linienweise vermessen, d.h. es wird zeitgleich jedes räumliche Element einer Linie sowie das dazugehörige Spektrum aufgenommen. Schematisch ist dies in Abb.2.22(b)

dargestellt. Der komplette Datenwürfel wird dann durch schrittweise oder kontinuierliche Verschiebung des Spektrometers oder der Probe in x-Richtung aufgenommen. Diese Technik wird vor allem in Verbindung mit dispersiven Spektrometern im sichtbaren Bereich sowie mit statischen Fourier-Transformations-Spektrometern verwendet. Ein Nachteil dieser Technik ist ein relativ geringer Lichtdurchsatz aufgrund des linienförmigen FOV. Zudem werden zusätzliche zylindrische Optiken benötigt, um die Probenlinie entsprechend abzubilden [93].

2.4.2.3 Staring- und Framing-Verfahren

Beim Staring- bzw. Framing-Verfahren wird ein zweidimensionales räumliches Bild der Probe aufgenommen. Anschließend wird diese, wie in Abb. 2.23(a) schematisch dargestellt, schrittweise spektral vermessen [93]. Typische Anwendungen sind hier Systeme mit durchstimmbaren Lichtquellen oder Filtern. Auch in Verbindung mit klassischen, scannenden Fourier-Transformations-Spektrometern wird diese Technik angewendet. Dabei wird mithilfe eines 2D-Detektorarrays die Pfaddifferenz für jedes räumliche Element über die Zeit aufgenommen [58]. Diese Verfahren werden mit sFTS typischerweise nicht eingesetzt. Während ein Framing-Verfahren grundsätzlich umsetzbar wäre, wäre die räumliche Auflösung in x-Richtung extrem gering, weshalb hier andere Aufnahmetechniken bevorzugt werden sollten.

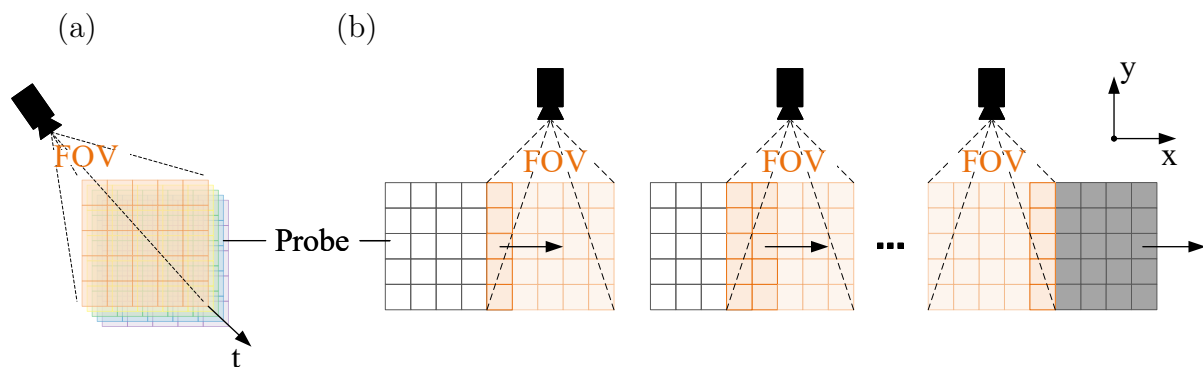


Abbildung 2.23: (a) Staring-Verfahren. Die Probe wird schrittweise spektral vermessen.; (b) Windowing-Verfahren. Die Probe durchläuft schrittweise das zweidimensionale FOV des HSI.

2.4.2.4 Windowing-Verfahren

Neben dem Pushbroom-Verfahren ist das Windowing-Verfahren für sFTS vielversprechend. Dabei durchläuft die Probe ähnlich wie beim Pushbroom-Verfahren schrittweise das FOV des HSI in x-Richtung. Der Unterschied besteht darin, wie in Abb. 2.23(b) schematisch gezeigt, ein zweidimensionales FOV verwendet wird. Über die Zeit durchläuft so jede

Spalte der Probe das gesamte FOV und damit beispielsweise bei linear variablen Filtern einzelne Wellenlängenbereiche oder bei statischen Fourier-Spektrometern unterschiedliche optische Pfaddifferenzen. Vorteile im Hinblick auf sFTS liegen im erhöhten Lichtdurchsatz im Vergleich zu Pushbroom-Scannern und darin, dass keine zusätzlichen Optiken benötigt werden [43, 138].

Aus diesem Grund wurde für das in dieser Arbeit entwickelte abbildende Spektrometer ein Windowing-Verfahren verwendet, welches in Abschnitt 5.1.2 nochmals genauer anhand des entwickelten Systems erläutert wird.

2.4.3 Konzepte für den mittleren Infrarotbereich

In diesem Abschnitt wird nun ein Überblick über gängige HSI-Verfahren im MIR gegeben. Zudem werden die einzelnen Messsysteme den zuvor erläuterten Kategorien zugeordnet sowie hinsichtlich ihrer Vor- und Nachteilen evaluiert. Während hier der Fokus auf für diese Arbeit relevante Konzepte gelegt wird, sei für einen kompletteren Überblick auf [105] verwiesen.

2.4.3.1 Dispersive Spektrometer

Eine gängige Möglichkeit, ein abbildendes Spektrometer zu konstruieren, ist die Erweiterung eines dispersiven Spektrometers um eine Abbildungsoptik und einen 2D-Detektor. Dadurch kann eine Detektordimension weiterhin verwendet werden, um die spektrale Information der Eingangsapertur aufzunehmen. Die entsprechende räumliche Information des Eingangsspalts wird entlang der zweiten Detektordimension abgebildet. Der hyperspektrale Datenwürfel wird dann durch ein Pushbroom-Verfahren aufgezeichnet.

Als dispersives Element eignen sich Prismen [40], Gitter [19, 24, 29] sowie Verlaufsfilter [49, 88, 102]. Aufgrund der in Abschnitt 2.3.1 diskutierten Nachteile im Hinblick auf Lichtdurchsatz und SNR werden diese Systeme typischerweise im sichtbaren Bereich eingesetzt und spielen im MIR aktuell eine untergeordnete Rolle.

2.4.3.2 Durchstimmbare Filter und Lichtquellen

Eine häufiger angewendete Technik im MIR ist der Einsatz von durchstimmbaren Filtern oder Lichtquellen. Auf diese Weise wird das Objekt typischerweise zweidimensional abgebildet und über die Zeit durch eine Änderung der transmittierten bzw. emittierten Wellenlänge spektral analysiert. Der Datenwürfel wird also über ein Staring- oder Framing-Verfahren aufgenommen.

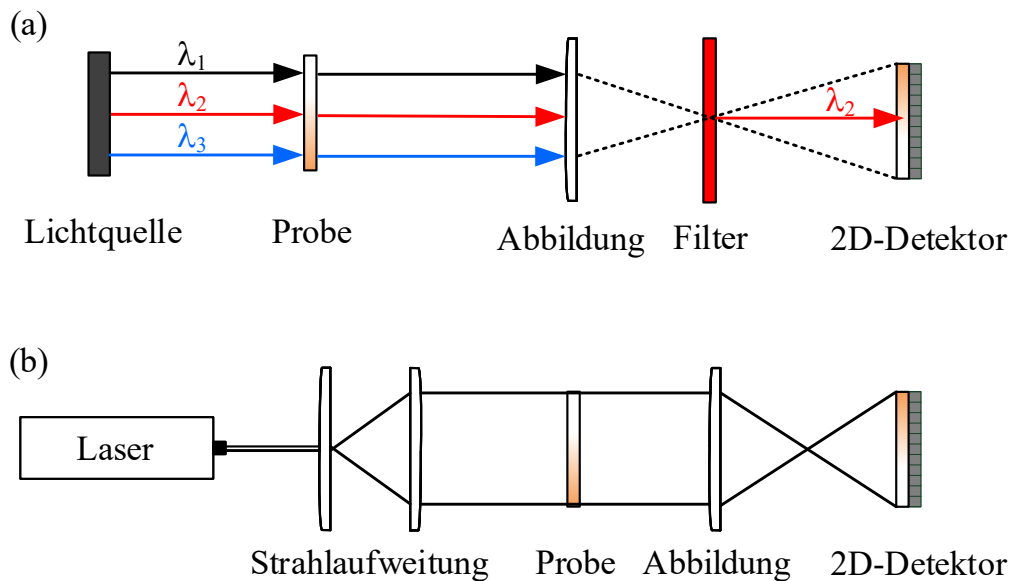


Abbildung 2.24: Schematische Darstellung von abbildenden Infrarotspektrometern auf Grundlage (a) eines durchstimmbaren Filters und (b) eines durchstimmbaren Lasers.

Abbildung 2.24(a) zeigt einen möglichen Aufbau für ein filterbasiertes System. Die Probe wird von einer breitbandigen Lichtquelle bestrahlt und im Anschluss auf einen 2D-Detektor abgebildet. Zwischen Abbildungsoptik und Detektor wird ein durchstimmbares Filter platziert, welches nur jeweils eine bestimmte Wellenlänge transmittiert. Aktuell werden hier aufgrund der hohen Verfügbarkeit vor allem die bereits in Abschnitt 2.3.2 beschriebenen Fabry-Pérot-Filter eingesetzt [53]. Einen ausführlichen Überblick über filterbasierte HSI gibt zudem [23]. Da pro Messung nur ein kleiner Teil des Spektrums den Detektor erreicht, bieten filterbasierte Systeme ein relativ niedriges Signal-Rausch-Verhältnis, welches nur durch eine deutliche Erhöhung der Messzeit ausgeglichen werden kann.

Ein laserbasierter Ansatz ist schematisch in Abb. 2.24(b) dargestellt. Dieser ist dem filterbasierten Verfahren sehr ähnlich, jedoch wird in diesem Fall statt eines Filters die Lichtquelle, bzw. der Laser, spektral durchgestimmt.

Typischerweise werden im MIR dazu Quantenkaskadenlaser eingesetzt, da diese mittlerweile in nahezu jedem relevanten Wellenlängenbereich verfügbar sind und bei Raumtemperatur betrieben werden können [108]. Laserbasierte HSI erreichen eine beugungsbegrenzte räumliche Auflösung sowie ein hohes SNR [83]. Als Nachteile sind der relativ stark eingeschränkte Spektralbereich sowie hohe Anschaffungskosten zu nennen.

2.4.3.3 Klassische Fourier-Transformations-Spektrometer

Eine der vor allem kommerziell eingesetzten HSI-Techniken für den Infrarotbereich basiert auf dem in Abschnitt 2.3.3 vorgestellten klassischen Michelson-FTIR-Spektrometer. Dieses wird gemäß Abb. 2.25 um eine Abbildungsoptik ergänzt und der Einzeldetektor wird durch ein 2D-Detektorarray ersetzt [51, 58].

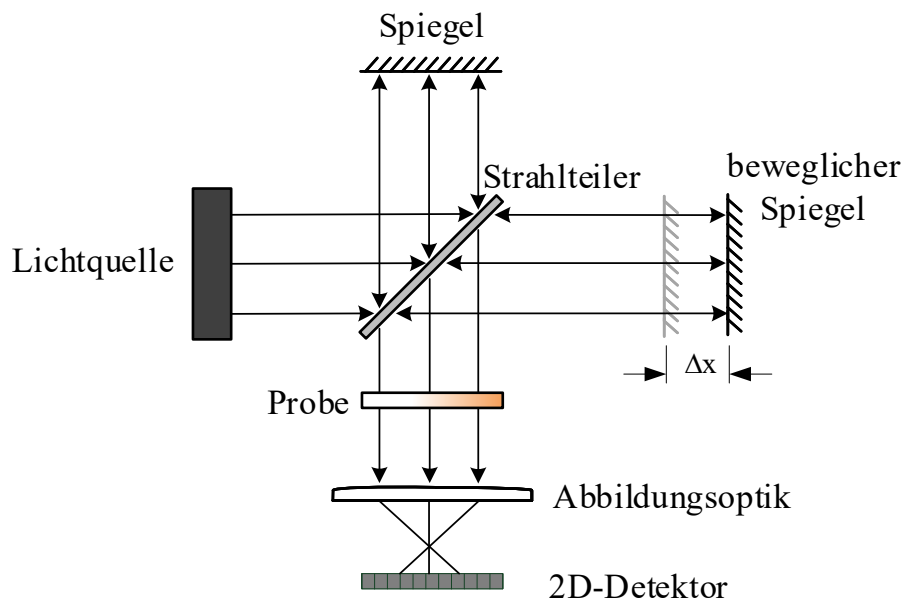


Abbildung 2.25: Schematische Darstellung eines abbildenden Michelson-FTIR-Spektrometers nach [58].

Durch ein Verschieben eines der Spiegel über die Zeit wird so für jeden Probenpixel das Interferogramm bestimmt. Im Anschluss kann dann wiederum das jeweilige Spektrum über eine Fourier-Transformation berechnet werden. Prinzipiell lässt sich dieses System also als eine Parallelschaltung von N Michelson-FTIR-Spektrometern darstellen, wobei N die Gesamtanzahl der Pixel des verwendeten Detektors beschreibt.

Vorteile bietet diese HSI-Methode im Hinblick auf die spektrale Bandbreite sowie die spektrale Auflösung. Allerdings sinkt mit höherer spektraler Auflösung auch die Messgeschwindigkeit. Zudem darf sich die Szene durch die Verwendung eines Staring-Verfahrens wie bei den filter- und laserbasierten Ansätzen über die gesamte Messdauer nicht ändern, was eine Beobachtung von dynamischen Vorgängen ausschließt.

2.4.3.4 Statische Fourier-Transformations-Spektrometer

Abbildende Spektrometer, welche auf statischen Fourier-Spektrometern basieren, arbeiten typischerweise mit Pushbroom- oder Windowing-Verfahren. Abbildung 2.26 zeigt den schematischen Aufbau einer typischen Konfiguration [64]. Dazu wurde das Sagnac-sFTS aus Abb. 2.19 durch einen Eingangsspalt sowie eine zusätzliche Zylinderlinse mit Brennweite f_C erweitert.

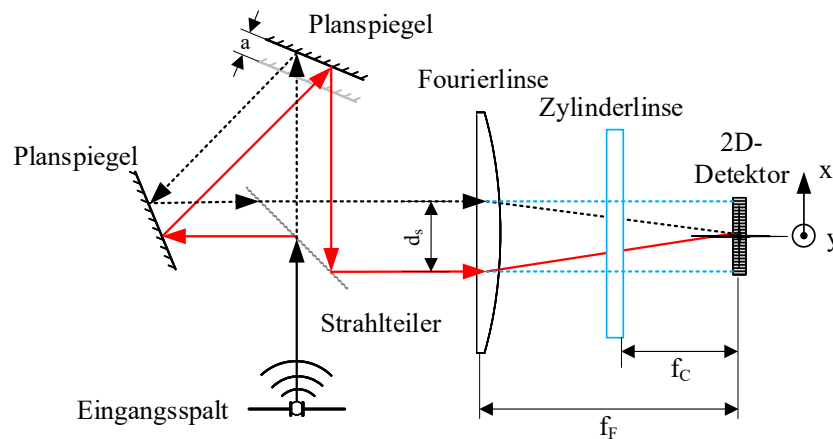


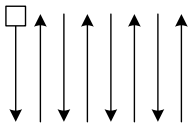

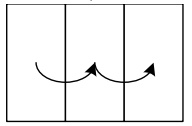
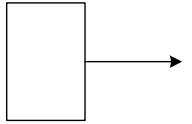
Abbildung 2.26: Schematische Darstellung eines abbildenden sFTS basierend auf einem Sagnac-Interferometer nach [64].

Während das Sagnac-Interferometer in Kombination mit der Fourierlinse weiterhin Interferogramme entlang der x -Richtung des Detektors erzeugt, sorgt die Zylinderlinse für eine eindimensionale Abbildung des Eingangsspalts entlang der y -Dimension. Somit enthält jede Zeile des Detektors das Interferogramm und damit die spektrale Information jeweils eines Punktes des Eingangsspalts. Durch ein Pushbroom-Verfahren kann dann der komplette hyperspektrale Datenwürfel generiert werden. Vorteile dieser Anordnung liegen darin, dass die spektrale Auflösung im Gegensatz zu dispersiven Spektrometern unabhängig von der Größe des Eingangsspalts ist. Somit kann die räumliche Auflösung unabhängig von der spektralen Auflösung und Kalibrierung gewählt werden.

Weiterhin finden sich eine monolithische Version dieses Aufbaus [85] sowie ähnliche Verfahren mit doppelbrechenden Interferometern und mit Windowing-Verfahren [43, 65] in der Literatur.

Abschließend fasst Tabelle 2.2 die beschriebenen Aufnahmeverfahren und Spektrometerkonzepte noch einmal zusammen.

Tabelle 2.2: Übersicht der vorgestellten Verfahren sowie verwendeten Technologien zur Realisierung von HSI nach [100].

Verfahren	Technologie		
	Filter	Dispersiv	Interferometer
Whiskbroom 	Verlaufsfilter, durchstimmbare Filter	Prisma, Gitter	statisch, scannend
Pushbroom 	Verlaufsfilter	Prisma, Gitter	statisch
Staring/Framing 	durchstimmbare Filter / Laser	nicht bekannt	scannend
Windowing 	Filterarrays, Verlaufsfilter	nicht bekannt	statisch

Kapitel 3

Statisches Einzelspiegel-Fourier-Transformations-Spektrometer

Da die in dieser Arbeit entwickelten Spektrometer wie bereits erwähnt auf dem Konzept eines Einzelspiegel-Interferometers, bzw. des statischen Einzelspiegel-Fourier-Transformations-Spektrometers (sSMF_{TS}) basieren, wird dieses im folgenden Kapitel gesondert im Detail betrachtet. Neben einer Erläuterung des grundsätzlichen Funktionsprinzips werden Limitierungen von sSMF_{TS} beschrieben, welche im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden. Dazu zählen neben der spektralen Auflösung und Bandbreite auch Dispersionseffekte und Detektoreigenschaften.

3.1 Grundlegender Aufbau und Funktionsprinzip

Den grundlegenden Aufbau eines sSMF_{TS} [95–97] zeigt Abb. 3.1. Das hier verwendete Einzelspiegel-Interferometer ist grundsätzlich den Source-Doubling-Interferometern zuzuordnen (siehe Abschnitt 2.3.4.3), wodurch es mit ausgedehnten Lichtquellen betrieben werden kann und einen vergleichsweise hohen Lichtdurchsatz aufweist. Zudem zeigt das sSMF_{TS} prinzipiell keine internen Lichtverluste und die gesamte einfallende Strahlung wird unter Vernachlässigung von Reflexionsverlusten der verwendeten Optiken auf den Detektor geleitet. Das Schlüsselement ist hier ein Zinkselenid-Strahlteiler mit einer Dicke von D_{ST} und einem Brechungsindex n_{ST} , welcher deutlich größer als der Brechungsindex n_L der Umgebungsluft ist. Auf diese Weise ist es nach Gleichung (2.18) möglich, trotz unterschiedlicher geometrischer Pfadlängen der Interferometerarme eine Angleichung der optischen Pfadlängen zu erreichen.

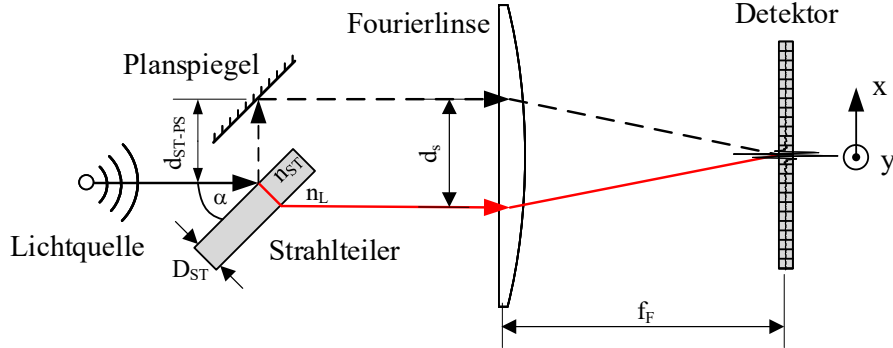


Abbildung 3.1: Grundlegendes Funktionsprinzip eines statischen Einzelspiegel-Fourier-Transformations-Spektrometers nach [96] und [136].

Einer dieser Interferometerarme ist hier in rot gekennzeichnet und besteht aus dem vom Strahlteiler transmittierten Teil des einfallenden Lichts. Der andere Interferometerarm ist mit einer gestrichelten Linie dargestellt und entsteht durch eine zweifache Reflexion der Strahlung am Strahlteiler und an einem zusätzlichen Planspiegel. Die vertikale Distanz zwischen den beiden Zentralstrahlen wird wiederum mit d_s beschrieben und lässt sich bei einem Strahlteilerwinkel α von 45° und einer Distanz d_{ST-PS} zwischen Strahlteiler und Planspiegel über Gleichung (3.1) berechnen [95, 141].

$$d_s = d_{ST-PS} + D_{ST} \cdot \left(\frac{n_L \cdot \sin \left(\frac{\pi}{4} - \arcsin \left(\frac{n_L}{n_{ST} \cdot \sqrt{2}} \right) \right)}{\sqrt{1 - \left(\frac{n_L}{n_{ST} \cdot \sqrt{2}} \right)^2}} \right) \quad (3.1)$$

Der notwendige Abstand zwischen Strahlteiler und Planspiegel lässt sich wie folgt bestimmen [96]:

$$d_{ST-PS} = \Delta d + D_{ST} \cdot \left(\frac{n_{ST} + n_L \cdot \sin \left(\frac{\pi}{4} - \arcsin \left(\frac{n_L}{n_{ST} \cdot \sqrt{2}} \right) \right)}{\sqrt{1 - \left(\frac{n_L}{n_{ST} \cdot \sqrt{2}} \right)^2}} - n_L \cdot \sqrt{2} \right). \quad (3.2)$$

Für einen Offset von $\Delta d = 0$ stimmen die optischen Pfadlängen der Interferometerarme exakt überein und der Mid-Peak des Interferogramms findet sich, wie in Abb. 3.1 gezeigt, zentral auf dem Detektor.

Letztendlich wird die Strahlung durch eine Fourierlinse mit Brennweite f_F auf einem Detektorarray, im MIR typischerweise ein Mikrobolometerarray, zur Interferenz gebracht, welches exakt in der hinteren Brennebene der Linse platziert wird. Das dadurch erzeugte zweidimensionale Interferenzmuster $I(x,y)$ kann über Gleichung (3.3) ausgedrückt werden [136].

$$I(x,y) = \int_0^\infty S_0(\tilde{\nu})D(\tilde{\nu}) \cdot \{1 + \cos(2\pi\tilde{\nu}\text{OPD}(x,y))\} d\tilde{\nu} \quad (3.3)$$

Hier ist $\tilde{\nu}$ die Wellenzahl, das Lichtquellenspektrum ist $S_0(\tilde{\nu})$, die Transferfunktion des Spektrometers wird mit $D(\tilde{\nu})$ abgebildet und die positionsabhängige optische Pfaddifferenz wird als $\text{OPD}(x,y)$ beschrieben. Diese kann über Gleichung (3.4) berechnet werden [141]. Zusätzlich zu der bereits in Abschnitt 2.3.4.3 hergeleiteten linearen OPD ist ein nicht-linearer Anteil $\text{OPD}_{\text{nl}}(\tilde{\nu})$ zu berücksichtigen, welcher durch die unterschiedliche geometrische Pfadlänge der beiden Interferometerarme verursacht wird. Zudem unterscheidet sich $\text{OPD}_{\text{nl}}(\tilde{\nu})$ durch den Astigmatismus des Strahlteilers in x- und y-Richtung, was leicht gekrümmte Interferenzlinien zur Folge hat [96].

$$\text{OPD}(x,y) = \left(x \cdot \frac{d_s + \Delta d}{f_F} + \Delta d \right) + \text{OPD}_{\text{nl}}(x,y) \quad (3.4)$$

Durch die Nichtlinearitäten der OPD muss das Lichtquellenspektrum $S_0(\tilde{\nu})$ schließlich über eine nicht-uniforme Fourier-Transformation [31] rekonstruiert werden. Eine detailliertere Beschreibung der Spektrenberechnung findet sich in Abschnitt 4.4.

Abbildung 3.2 zeigt den typischen OPD-Verlauf eines Einzelspiegel-Interferometers bei Verwendung eines 2D-Detektors. Zu erkennen ist, dass die Hauptmodulation der OPD, wie in jedem Source-Doubling-Interferometer, entlang der x-Achse des Detektors erzeugt wird, während die y-Achse prinzipiell keine zusätzliche spektrale Information liefert. Deshalb wird die x-Achse hier als Interferogrammachse bezeichnet, während die y-Achse als Mittellungssachse gekennzeichnet ist. Die y-Achse kann in der Praxis entweder zum Mitteln der Interferogramme und damit zu einer Erhöhung des SNR genutzt werden (siehe Kapitel 4) oder dazu verwendet werden, zusätzlich zur spektralen Information zeitgleich räumliche Informationen der Probe abzubilden (siehe Kapitel 5).

Auch die gekrümmten Linien gleicher OPD bzw. der Interferenzstreifen sind in Abb. 3.2 zu erkennen. Diese Krümmung muss bei einer Mittelung oder einer Abbildung entsprechend berücksichtigt werden, um valide Ergebnisse zu erhalten.

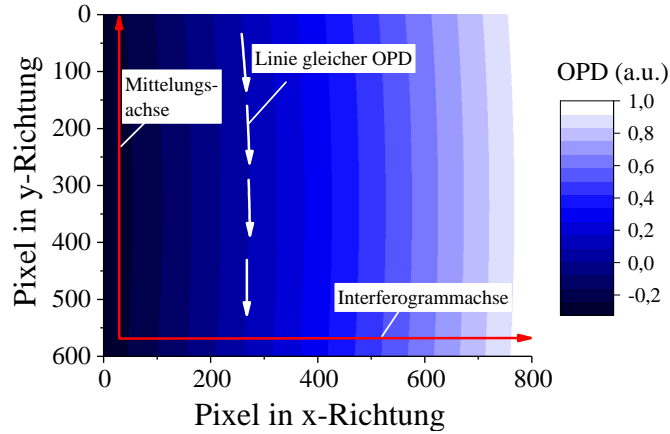


Abbildung 3.2: Typischer zweidimensionaler OPD-Verlauf eines Einzelspiegel-Interferometers nach [136].

3.2 Grundlegende Limitierungen

Während sSMFTS im Hinblick auf Robustheit, Lichtdurchsatz und Messgeschwindigkeit klare Vorteile aufweisen, ergeben sich doch einige grundlegende Leistungsgrenzen, die in diesem Abschnitt aufgezeigt werden.

3.2.1 Dispersionseffekte und Fourierlinsen

Als eine der Hauptlimitierungen im Hinblick auf die Leistungsfähigkeit eines sSMFTS sind Dispersionseffekte zu nennen. Sowohl der Brechungsindex des Strahlteilers, als auch der Brechungsindex der Fourierlinse ändern sich mit der Wellenlänge sowie mit der Temperatur (siehe Abschnitt 2.1.2).

Dies führt dazu, dass der vertikale Abstand der virtuellen Quellen $d_s(\lambda, T)$ sowie die Brennweite der Fourierlinse $f_F(\lambda, T)$ sowohl von der Wellenlänge λ , als auch von der Temperatur T abhängen. Dies ist schematisch in Abb. 3.3 dargestellt. Diese zeigt das virtuelle Quellenmodell eines sSMFTS, wobei die beiden Interferometerarme als divergente, virtuelle Quellen V_1 und V_2 dargestellt werden. Die unterschiedliche geometrische Pfadlänge der Interferometerarme ist durch die unterschiedliche Distanz der Quellen zur Fourierlinse berücksichtigt.

Hier kann $d_s(\lambda, T)$ nach Gleichung (3.5) bestimmt werden, wobei die verwendeten Variablen in Abb. 3.1 definiert sind. Dabei wird angenommen, dass der Abstand der virtuellen Quellen hauptsächlich durch den variierenden Brechungsindex des Strahlteilers $n_{ST}(\lambda, T)$ beeinflusst wird und dass eine temperaturbedingte Ausdehnung des Aufbaus und der Komponenten in erster Näherung vernachlässigt werden kann. Zudem wird angenommen, dass sich

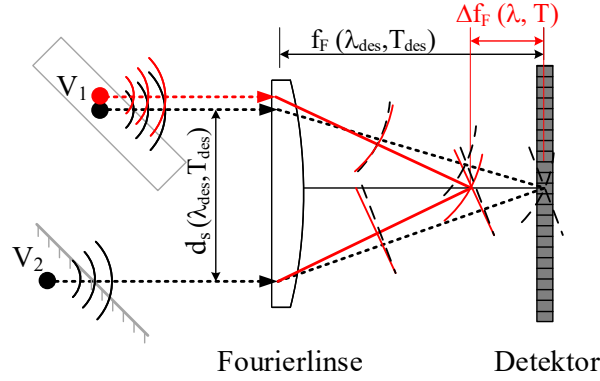


Abbildung 3.3: Temperatur- und wellenlängenabhängiges virtuelles Quellenmodell eines statischen Einzelspiegel-Fourier-Transformations-Spektrometers. [136]

der Brechungsindex der Umgebungsluft n_L hinsichtlich Wellenlänge und Temperatur vergleichsweise geringfügig ändert [99].

$$d_s(\lambda, T) = d_{ST-PS} + D_{ST} \cdot \left(\frac{n_L \cdot \sin \left(\frac{\pi}{4} - \arcsin \left(\frac{n_L}{n_{ST}(\lambda, T) \cdot \sqrt{2}} \right) \right)}{\sqrt{1 - \left(\frac{n_L}{n_{ST}(\lambda, T) \cdot \sqrt{2}} \right)^2}} \right) \quad (3.5)$$

Analog dazu lässt sich die Verschiebung der Brennebene $\Delta f_F(\lambda, T)$ unter der Annahme, dass sich die Brennweite der Fourierlinse hauptsächlich durch eine Brechungsindexvariation und nicht durch Materialausdehnung verändert, mittels Gleichung (3.6) bestimmen. Dabei werden die Brennweite sowie der Brechungsindex bei Designwellenlänge λ_{des} und Designtemperatur T_{des} mit $f_{F,des}$ bzw. n_{des} beschrieben [136].

$$\Delta f_F(\lambda, T) = f_{F,des} \cdot \frac{n_{des} - n(\lambda, T)}{n(\lambda, T) - 1} \quad (3.6)$$

Der wellenlängen- und temperaturabhängige Brechungsindex kann hier mithilfe der Sellmeier-Koeffizienten für Germanium aus [3] über Gleichung (2.19) berechnet werden.

Mithilfe dieser formelmäßigen Zusammenhänge kann nun das wellenzahl- und temperaturabhängige Verhalten einer typischen sSMFTS-Konfiguration simuliert werden. Dafür wurde in diesem Fall die Designwellenzahl zu 943 cm^{-1} sowie die Designtemperatur zu 25°C gesetzt. Die geometrischen Parameter des sSMFTS wurden identisch zu denen des in Kapitel 4 vorgestellten breitbandigen sFTS gewählt, um im weiteren Verlauf der Arbeit einen Vergleich zu ermöglichen. Der Strahlteiler besteht dementsprechend wie im

Messaufbau aus Zinkselenid (ZnSe) und weist eine Dicke von 3,1 mm auf. Die zugehörigen Sellmeier-Koeffizienten wurden [59] entnommen. Zudem wurde eine Germaniumlinse mit einer Brennweite von 75 mm als Fourieroptik verwendet. Der Radius der Lichtquelle ist ebenso an die reale Lichtquellengeometrie angepasst und beträgt 1 mm, der Abstand der virtuellen Lichtquellen beträgt 6,6 mm für die Designparameter.

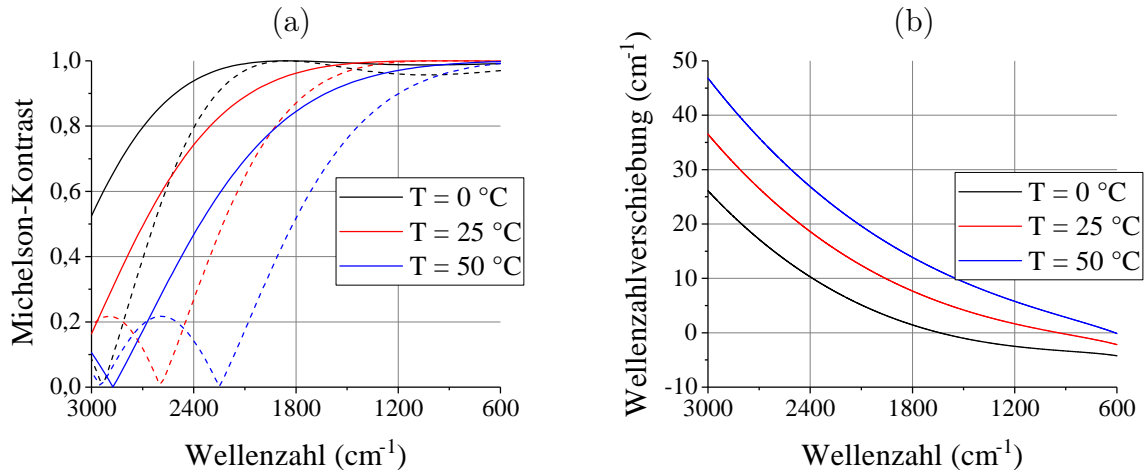


Abbildung 3.4: (a) Simulation des Michelson-Kontrasts für eine typische linsenbasierte sSMFTS-Konfiguration. Durchgezogene Linien entsprechen einer Brennweite von 75 mm, gestrichelte Linien einer Brennweite von 40 mm.; (b) Simulation der Wellenzahlverschiebung durch eine variierende vertikale Distanz zwischen den virtuellen Quellen sowie einer Brennweitenverschiebung der Fourierlinse. [136]

Prinzipiell zeigen sich in Abb. 3.4 zwei entscheidende Effekte. Zum einen variiert der Michelson-Kontrast mit Wellenzahl und Temperatur, zum anderen tritt eine deutliche Verschiebung der Wellenzahlachse auf.

Der Kontrast wird hauptsächlich durch die Brennweitenänderung der Fourierlinse beeinflusst und führt zu quantitativen Messfehlern sowie einer Limitierung des nutzbaren Spektralbereichs. Dieser Effekt kann in Abb. 3.4(a) nachvollzogen werden. Hier wurde der Michelson-Kontrast über die relevante spektrale Bandbreite sowie den relevanten Temperaturbereich mit der Methode aus [99] simuliert. Zu erkennen ist ein Absinken des Michelson-Kontrasts für größere Wellenzahlen. Dieser Effekt wird sowohl durch das Nutzen einer Fourierlinse mit kürzerer Brennweite, als auch durch den Einsatz von Lichtquellen mit größerem Durchmesser verstärkt. Bei dieser Simulation wurden Linsenaberrationen sowie Detektorcharakteristiken nicht berücksichtigt. Zudem wurde ein ideales, linear abgetastetes Interferenzmuster angenommen.

Problematisch ist zudem eine variierende lineare Abtastfrequenz ν_s des Interferogramms, welche zu einer inkorrekten Zuordnung der Wellenzahlachse führt. Nach Gleichung (3.7)

hängt diese sowohl von der Distanz der virtuellen Quellen, als auch von der Brennweite der Fourierlinse ab, was zu einer Wellenzahlverschiebung $\tilde{\nu}_{\text{shift}}$ gemäß Gleichung (3.8) führt [136]. Der Pixelabstand ist hier wiederum als p_{pix} angegeben. Die Wellenzahlverschiebung der zuvor beschriebenen Spektrometerkonfiguration ist in Abb. 3.4(b) in Abhängigkeit der Wellenzahl aufgetragen.

$$\nu_s(\lambda, T) = \frac{f_F(\lambda, T)}{d_s(\lambda, T) \cdot p_{\text{pix}}} \quad (3.7)$$

$$\tilde{\nu}_{\text{shift}} = \tilde{\nu} \left(1 - \frac{\nu_s(\lambda, T)}{\nu_{s,\text{design}}} \right) \quad (3.8)$$

Neben diesen Dispersionseffekten zeigen linsenbasierte sFTS weitere grundlegende Nachteile. So sind die erreichbare Bandbreite des Spektrometers sowie der Lichtdurchsatz entscheidend von der Transmittivität der Linse abhängig. Zudem ändert sich das Transmissionsverhalten von Linsen mit der Temperatur [28].

3.2.2 Spektrale Auflösung und Bandbreite

Neben den beschriebenen Dispersionseffekten ergibt sich für sSMFTS eine weitere grundlegende Limitierung gegenüber klassischen Labor-FTIR-Spektrometern. So muss prinzipbedingt, aufgrund der endlichen Ausdehnung des Detektorarrays, gemäß Gleichung (3.9) stets ein Kompromiss zwischen spektraler Auflösung $\Delta\tilde{\nu}$ und spektraler Bandbreite, bzw. maximal auflösbarer Wellenzahl $\tilde{\nu}_{\text{max}}$ getroffen werden [95, 136].

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{1}{OPD_{\text{max}}} \geq \frac{2 \cdot \tilde{\nu}_{\text{max}}}{g_m \cdot N_x} \quad (3.9)$$

Dabei beschreibt N_x die Anzahl der Pixel in x-Richtung und $g_m \geq 0,5$ legt die Position des Mid-Peaks auf dem Detektorarray fest, wobei dieser für $g_m = 0,5$ zentral auf dem Detektor platziert wird.

Ohne spezielle Techniken zur Modifikation des Spektrometeraufbaus ist eine Erhöhung der spektralen Auflösung ohne Einschränkung des Spektralbereichs also lediglich durch Verwenden eines Detektors mit einer höheren Pixelzahl N_x möglich. Dieser Zusammenhang wird in Abb. 3.5 für verschiedene typische Detektordimensionen graphisch dargestellt. Der Faktor g_m wurde hier zu 0,75 gewählt.

Die maximal auflösbare Wellenzahl kann zudem durch das Nyquist-Kriterium gemäß Gleichung (3.10) ausgedrückt werden [95, 136]. In diesem Fall beschreibt p_{pix} den Pixelabstand

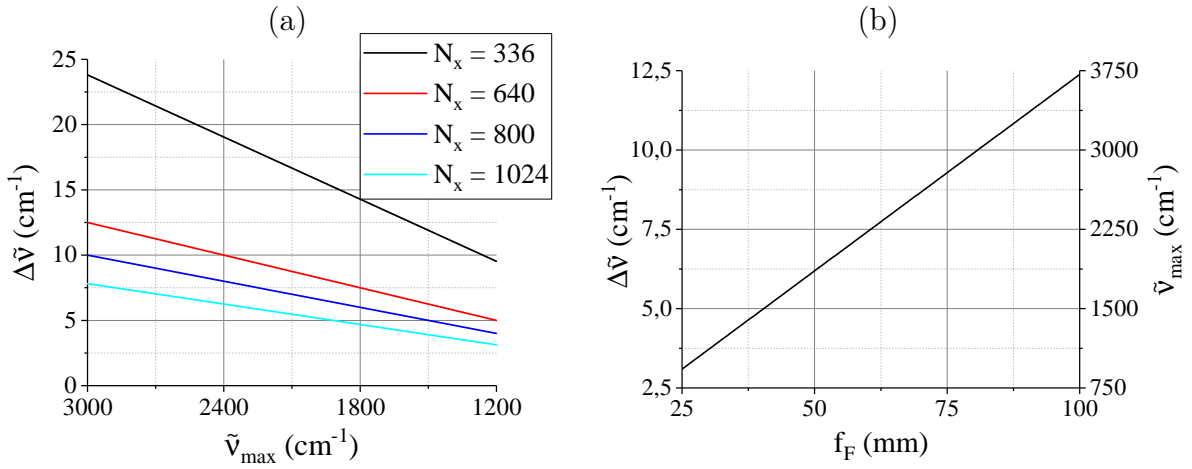


Abbildung 3.5: Graphische Darstellung des Zusammenhangs zwischen spektraler Auflösung und maximal auflösbarer Wellenzahl eines statischen Einzelspiegel-Fourier-Transformations-Spektrometers. (a) Abhängigkeit von Pixelanzahl N_x des Detektors; (b) Abhängigkeit von Brennweite f_F der verwendeten Fourieroptik.

des genutzten Detektors. Zusätzlich wird hier ein Faktor $q \geq 1$ eingeführt, da Spektrometer typischerweise nicht bis zur Abtastgrenze betrieben werden. In der Praxis hat sich ein Faktor von $q = 1,2$ bewährt.

$$\tilde{\nu}_{\max} \leq \frac{f_F}{2 \cdot d_s \cdot p_{\text{pix}} \cdot q} \quad (3.10)$$

Daraus wird ersichtlich, dass die erzielbare spektrale Bandbreite durch die Wahl einer passenden Brennweite f_F der Fourieroptik festgelegt werden kann. Dies ist in Abb. 3.5(b) für einen Detektor mit 800 Pixeln und einem Pixelabstand von 17 μm graphisch dargestellt. Der Faktor g_m beträgt wiederum 0,75, der Abstand der virtuellen Quellen d_s ist 6,6 μm , q wurde hier zu 1,2 gewählt. Zwar führt ein größeres f_F zu einem größeren $\tilde{\nu}_{\max}$, jedoch verschlechtert sich die spektrale Auflösung proportional dazu.

Mithilfe von Gleichung (3.9) und Gleichung (3.10) lässt sich nun abschließend unter Betrachtung der Detektorgröße w_{det} in x-Richtung ein Güteparameter Q für sSMFTS definieren:

$$Q = \frac{\tilde{\nu}_{\max}}{\Delta\tilde{\nu}} = \frac{\overbrace{N_x \cdot p_{\text{pix}}}^{w_{\text{det}}}}{p_{\text{pix}}} \cdot \text{const.} \quad (3.11)$$

Grundsätzlich lassen sich die Güte bzw. die Kenndaten eines sSMFTS also auf zwei Arten optimieren. Wie zuvor beschrieben, führt eine Erhöhung der Pixelanzahl N_x durch die

resultierende Vergrößerung der Detektorbreite zu einer verbesserten spektralen Auflösung $\Delta\tilde{\nu}$. Zudem kann durch die Verwendung eines Detektors mit kleinerem p_{pix} die spektrale Bandbreite, bzw. $\tilde{\nu}_{\text{max}}$ vergrößert werden. Um in diesem Fall die spektrale Auflösung konstant zu halten, muss allerdings wiederum N_x entsprechend erhöht werden, um w_{det} anzupassen.

Wurde im Zuge dieser Arbeit ein Detektor mit einem Pixelabstand von $17\mu\text{m}$ verwendet, so zeigen neue Detektorgenerationen mit Pixelabständen von $12\mu\text{m}$ hier großes Potential für zukünftige Arbeiten [119].

3.2.3 Detektorcharakteristik

Neben der reinen Pixelanzahl und -größe spielen weitere Eigenschaften des verwendeten Detektors eine entscheidende Rolle im Hinblick auf die Leistungsfähigkeit eines statischen Fourier-Spektrometers. In dieser Arbeit wird ein ungekühltes Mikrobolometerarray verwendet, welches im Folgenden näher betrachtet wird.

3.2.3.1 Spektrale Bandbreite und Übertragungsfunktion

Neben dem zuvor diskutierten Abtasttheorem wird die erreichbare spektrale Bandbreite des sSMFTS grundsätzlich von der spektralen Sensitivität des Detektors bestimmt. Diese ist für das in dieser Arbeit eingesetzte breitbandige Mikrobolometerarray (GUIDE Infrared – CUBE817) in Abb. 3.6 dargestellt.

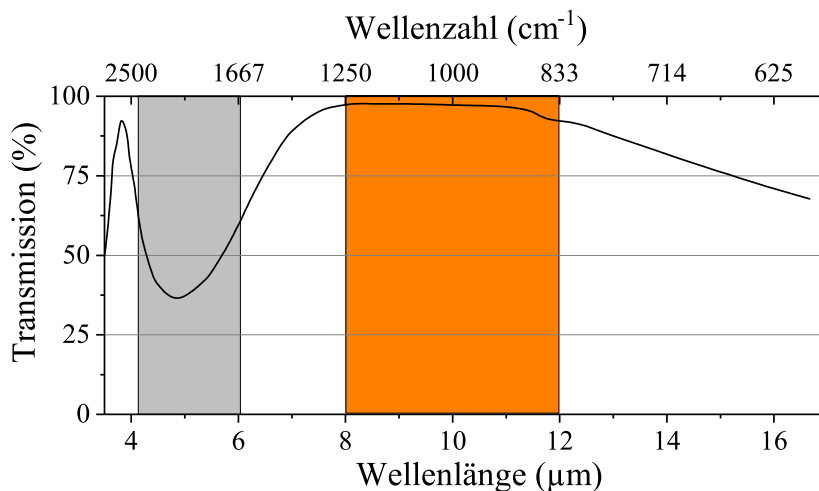


Abbildung 3.6: Sensitivitätsfunktion des in dieser Arbeit verwendeten Mikrobolometerarrays CUBE817 von GUIDE Infrared.

Grundsätzlich sind Mikrobolometer also über einen sehr breiten Spektralbereich sensitiv, welcher den MIR nahezu komplett abdeckt. Es ergeben sich jedoch einige Einschränkungen von kommerziell erhältlichen Kameras. Wie der hier verwendete Detektor, weist ein Großteil eine Kavitätslänge von $2,5\ \mu\text{m}$ auf und ist damit für eine Wellenlänge von $10\ \mu\text{m}$ optimiert [107]. Daraus ergibt sich zwar, wie Abb. 3.6 zu entnehmen ist, ebenfalls ein Sensitivitätsmaximum um $3,33\ \mu\text{m}$, jedoch nimmt das Signal im grau markierten Bereich um $5\ \mu\text{m}$ deutlich ab, was breitbandige spektroskopische Anwendungen erschwert.

Zudem wird in den meisten kommerziellen Mikrobolometerkameras ein Bandpassfilter verbaut, welches nur den orange gekennzeichneten Bereich passieren lässt. Dadurch werden atmosphärische Störungen wie Wasser- und Kohlendioxidabsorption für Anwendungen zur Temperaturmessung oder für abbildende Systeme ausgeblendet. Für eine Erhöhung der Bandbreite eines sSMFTS sind also spezielle Kameras mit breitbandigen Fenstern vonnöten, was den Kostenfaktor erhöht und die Herstellerauswahl stark eingrenzt.

3.2.3.2 Messgeschwindigkeit und Detektionsschwelle

Auch die Messgeschwindigkeit von sSMFTS wird maßgeblich von der Kamera beeinflusst. Zusätzlich zur maximalen Auslesegeschwindigkeit der Elektronik ist hier für quantitative Messungen die thermische Zeitkonstante τ_{mb} der Mikrobolometer zu berücksichtigen. Diese ist mit der Wärmekapazität C_{mb} und dem Wärmeleitwert G_{mb} wie folgt gegeben [55]:

$$\tau_{mb} = \frac{C_{mb}}{G_{mb}}. \quad (3.12)$$

Da die Detektionsschwelle, bzw. der NETD (engl.: Noise Equivalent Temperature Difference) des Detektors proportional zu $G_{mb}^{1/2}$ ist, also im Gegensatz zu τ_{mb} mit dem Wärmeleitwert steigt, ergibt sich hier ein generelles Abwägen zwischen Messgeschwindigkeit und Empfindlichkeit des Spektrometers [90]. Zudem lässt sich die Zeitkonstante durch das Verwenden eines Mikrobolometerarrays mit kleinerer Pixelfläche verringern, jedoch nur auf Kosten eines höheren NETD [55, 119].

3.2.3.3 Langzeitstabilität

Auch die Langzeitstabilität des Spektrometers hängt entscheidend vom Detektor ab. Hier ist bei Verwendung eines ungekühlten Mikrobolometerarrays vor allem der Temperaturdrift der Kamera als problematisch zu nennen. Sowohl die Verstärkung, als auch der Offset der einzelnen Pixel sind temperaturabhängig, was beispielsweise durch eine Erwärmung des Gehäuses, der Elektronik oder der Pixel selbst verursacht wird [73]. Ohne eine geeignete Korrektur führt dies vor allem bei Langzeitmessungen zu signifikanten Messfehlern.

In der Literatur finden sich eine Reihe von Korrekturmethode vor allem für abbildende Anwendungen [73, 76, 77]. Die Auswirkungen eines temperaturabhängigen Kameradrifts auf ein sSMFTS wurde in [95] und [98] bereits im Detail untersucht. Hier zeigte sich ein annähernd linearer Zusammenhang zwischen Kamertemperatur und spektraler Intensität, welcher zu einem gewissen Teil algorithmisch ausgeglichen werden kann.

Kapitel 4

Breitbandiges statisches Fourier-Transformations-Spektrometer

Dieses Kapitel beschreibt nun mit dem breitbandigen statischen Fourier-Transformations-Spektrometer (bsFTS) einen Lösungsansatz für die zuvor in Abschnitt 3.2.1 dargelegten dispersionsbedingten Bandbreitenbegrenzungen und Temperatureinflüsse. Nach Vorstellung des grundlegenden Funktionsprinzips erfolgt eine Analyse der verbleibenden Dispersionseffekte und Aberrationen. Neben den konzipierten bsFTS-Messaufbauten wird zudem mit der Stufenspiegel-Variante des Spektrometers eine Möglichkeit zur Erhöhung der spektralen Auflösung ohne Einschränkung der Bandbreite präsentiert (siehe Abschnitt 3.2.2). Anschließend wird eine Methode zur kontinuierlichen Background-Korrektur und damit zur Langzeitstabilisierung des bsFTS aufgezeigt, welche Lichtquellen- und Kameradrifts in Echtzeit ausgleicht. Das Kapitel schließt mit möglichen Weiterentwicklungen und Designvarianten des bsFTS.

4.1 Grundlegender Aufbau und Funktionsprinzip

Den grundlegenden Aufbau des bsFTS zeigt Abb. 4.1. Als Interferometerkonzept wurde aufgrund der in Kapitel 3 aufgezeigten Vorteile ein Einzelspiegel-Interferometer verwendet. Dieses garantiert auch im MIR ein hohes SNR bei reduziertem optischen Design.

Analog zu Abb. 3.1 zeigt Abb. 4.1(a) einen Schnitt des optischen Aufbaus in der x-y-Ebene. Die Konvexlinse wird nun durch einen sphärischen Konkavspiegel ersetzt, welcher wie die Linse in dieser Dimension on-axis angeordnet ist. Auf diese Weise ist es möglich, einen gleichbleibend hohen Kontrast entlang der x-Achse des Detektorarrays zu garantieren und so die spektrale Auflösung des Systems nicht durch eine Spiegelverkipfung einzuschränken.

Nach der Kollimierung durch den sphärischen Spiegel wird die Strahlung schließlich über einen planen Faltspiegel so reflektiert, dass sie parallel zur z -Achse verläuft und auf einem Detektorarray zur Interferenz gebracht werden kann.

Aus der Ansicht der y - z -Ebene in Abb. 4.1(b) ist ersichtlich, dass der Fourierspiegel leicht um einen Winkel $\Phi/2$ um die x -Achse verkippt ist. Dieser Winkel sollte idealerweise möglichst klein gehalten werden, um auch entlang der y -Achse des Detektors einen ausreichenden Kontrast zu gewährleisten. Je kleiner der Kippwinkel, desto mehr Detektorzeilen können später verwendet werden, um das Interferogramm zu mitteln, wodurch ein höheres SNR erreicht wird. Der Winkel zwischen Faltspiegel und einfallender Strahlung wird zu $\alpha = \Phi$ gewählt, sodass der Detektor parallel zur x - y -Ebene angeordnet werden kann.

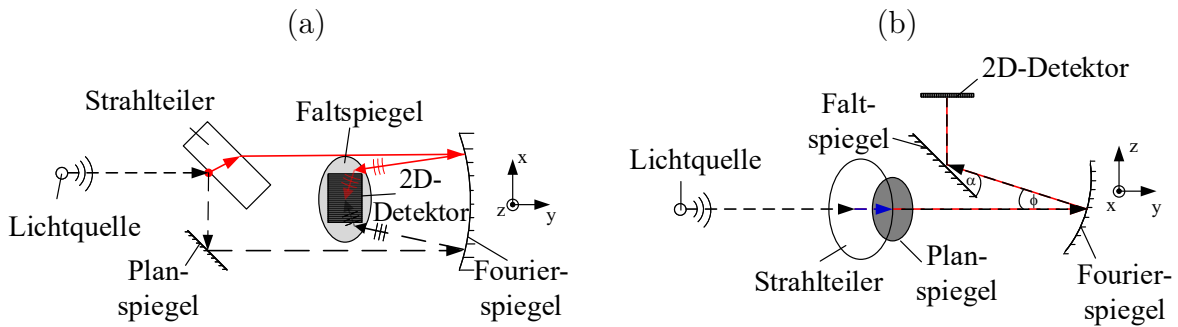


Abbildung 4.1: Schematische Ansicht des bsFTS. (a) Schnitt der x - y -Ebene; (b) Schnitt der y - z -Ebene. [136]

4.2 Dispersionseffekte und Aberrationen

Das vorgestellte bsFTS eliminiert die meisten der in Abschnitt 3.2.1 gezeigten Nachteile von Fourierlinsen. Zunächst ist die Brennweite des sphärischen Spiegels über einen weiten Temperaturbereich konstant und prinzipiell unabhängig von der Wellenlänge. Dadurch ergibt sich kein Kontrastverlust durch eine Verschiebung der Brennebene. Zudem ist die Bandbreite nicht länger durch die Transmittivität der Linse beschränkt, sondern lediglich von der Strahlteilerbeschichtung und dem verwendeten Detektor abhängig [136].

Abbildung 4.2(a) zeigt die simulierte Wellenzahlverschiebung des bsFTS. Der einzige Effekt, der nun berücksichtigt werden muss, ist die Änderung des vertikalen Abstandes der virtuellen Lichtquellen $d_s(\lambda, T)$ gemäß Gleichung (3.5), die von der Strahlteilerdispersion hervorgerufen wird. Gleichung (3.7) vereinfacht sich also näherungsweise zu [136]

$$\nu_s(\lambda, T) = \frac{f_F}{d_s(\lambda, T) \cdot p_{\text{pix}}}. \quad (4.1)$$

Die resultierende wellenzahlabhängige Verschiebung ist im Vergleich zum Linsensystem in Abb. 3.4(b) um einen Faktor von annähernd 10 verringert. Zudem ist der Temperatureinfluss auf die Wellenzahlachse um einen Faktor von bis zu 40 reduziert.

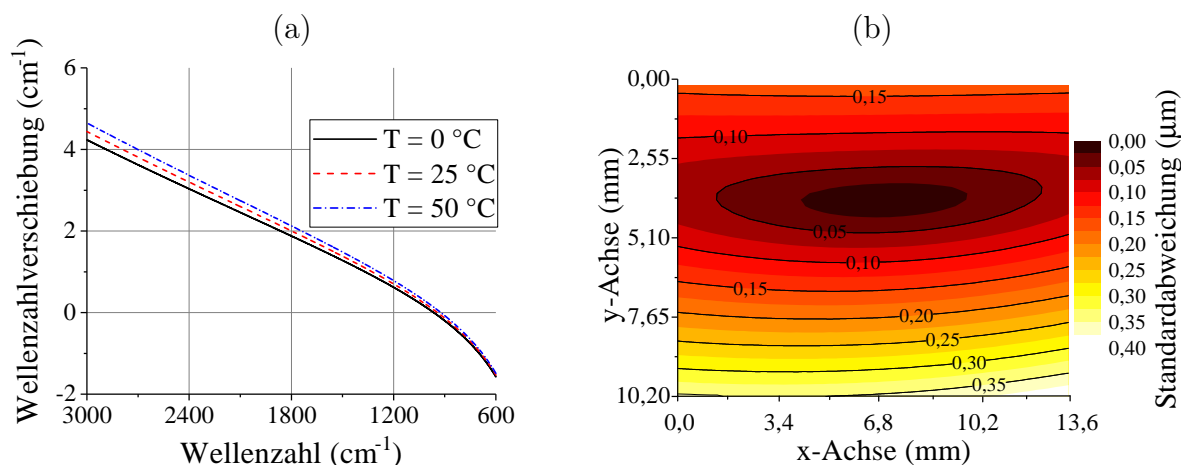


Abbildung 4.2: (a) Simulation der Wellenzahlverschiebung aufgrund des variablen Abstandes der virtuellen Quellen bei konstanter Brennweite des Fourierspiegels; (b) Simulation der Standardabweichung der optischen Pfaddifferenz auf einem 2D-Detektorarray. Der Off-Axis-Winkel des sphärischen Konkavspiegels beträgt 16°. [136]

Während es also möglich ist, Dispersionseffekte durch den Konkavspiegel stark zu reduzieren, sind erhöhte Aberrationen durch die Kippung des Spiegels nicht zu vermeiden. Bei Verwendung eines zur optischen Achse verkippten sphärischen Spiegels wie in dieser Anordnung, nimmt die Abbildungsgüte des Spiegels in Kipprichtung ab. Dies führt zu einer zunehmend ungenauen Zuordnung von optischen Pfaddifferenzen entlang dieser Dimension und damit zu einem sinkenden Kontrast entlang der y-Achse des Detektors. Dieser Effekt wird durch einen größeren Off-Axis-Winkel Φ verstärkt. Abbildung 4.2(b) zeigt die entsprechenden Ergebnisse einer Ray-Tracing-Simulation des bsFTS bei einem Off-Axis-Winkel von 16°.

Wie zu erwarten steigt die Standardabweichung der OPD entlang der Mittelungsachse des Detektors, während sie entlang der Interferogrammchse relativ konstant bleibt. Somit muss in der Praxis eine bestimmte Detektorregion ausgewählt werden, über die sinnvoll gemittelt werden kann.

Die Parameter für diese Simulationen wurden entsprechend des in Abschnitt 4.3.1 vorgestellten Laboraufbaus gewählt. Die Detektordimensionen betragen 13,6 mm × 10,2 mm, die Brennweite des Fourierspiegels beträgt 75 mm. Der Radius der Lichtquelle wurde zu 1 mm angenommen, was näherungsweise dem der real verwendeten Lichtquelle entspricht.

Während ein sphärischer Spiegel in diesem Fall eine kostengünstige Alternative bietet, wäre es sicherlich interessant in Zukunft einen Freiformspiegel zu entwickeln, welcher sowohl die sphärische Aberration entlang der Interferogrammachse minimiert, als auch die Verkippung entlang der Mittelungsachse ausgleicht.

4.3 Messaufbauten

Aufbauend auf der zuvor gezeigten Grundidee des bsFTS wurden im Rahmen dieser Arbeit zwei Messaufbauten entwickelt, welche im Folgenden vorgestellt und verglichen werden.

4.3.1 Experimenteller Aufbau

Zunächst wurde ein experimenteller Aufbau für Transmissionsmessungen entwickelt, welcher für eine erste Validierung und Charakterisierung des Spektrometerkonzepts verwendet wurde. Dieser ist schematisch in Abb. 4.3 dargestellt.

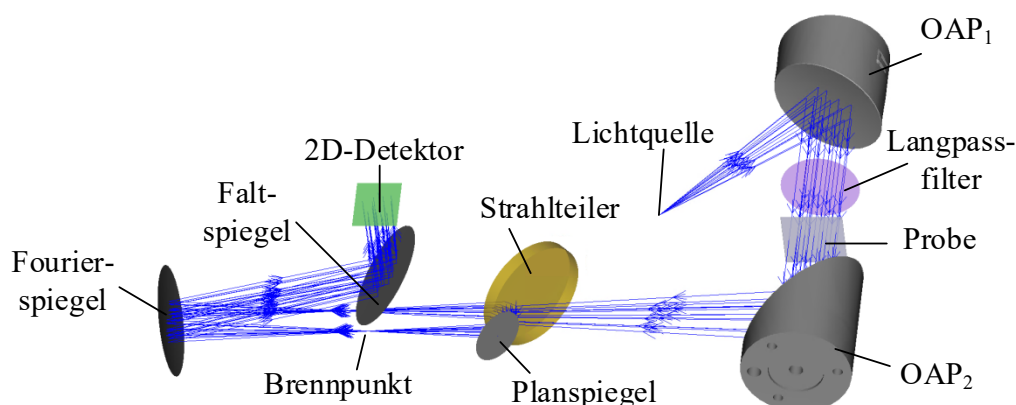


Abbildung 4.3: Ray-Tracing-Modell des entwickelten experimentellen bsFTS-Aufbaus für Transmissionsmessungen. [136]

Eine thermische Lichtquelle wird durch einen Off-Axis-Parabolspiegel OAP_1 mit Brennweite 50,8 mm und einem Off-Axis-Winkel von 45° kollimiert. Vor Durchlaufen der Probenkammer wird ein Langpassfilter mit einer Cut-On-Wellenlänge von $3,6 \mu\text{m}$ eingesetzt, um die Einhaltung des Nyquist-Kriteriums gemäß Gleichung (3.10) zu gewährleisten. Die virtuellen Lichtquellen werden von OAP_2 erzeugt, welcher die Strahlung mit einer Brennweite von 101,6 mm bei einem Off-Axis-Winkel von 90° refokussiert. Die exakte Position des Spiegels und somit des Brennpunktes wird hier im Gegensatz zu Abb. 3.1 und Abb. 4.1 so gewählt, dass der Brennpunkt und damit die virtuellen Lichtquellen hinter dem Strahlteiler, exakt unterhalb des Faltspiegels erzeugt werden.

In diesem Aufbau wird ein ZnSe-Strahlteiler mit einer Dicke von 3,1 mm sowie einem Durchmesser von 25 mm verwendet. Der Strahlteiler weist zudem eine Parallelität kleiner zehn Winkelsekunden auf. Der Planspiegel hat einen Durchmesser von 12,7 mm. Als Fourierspiegel wird ein sphärischer Konkavspiegel mit einer Brennweite von 75 mm und einem Durchmesser von 25 mm verwendet. Durch die Platzierung der Brennpunkte unterhalb des Faltspiegels kann der Off-Axis-Winkel des Fourierspiegels mit 16° relativ klein gewählt werden. Der Faltspiegel selbst hat einen Durchmesser von 20 mm und weist wie alle Spiegel in diesem Aufbau eine Goldbeschichtung auf, was eine hohe Reflektivität im relevanten Spektralbereich garantiert.

Als Detektor wird wie in allen im Zuge dieser Arbeit durchgeführten Messaufbauten ein Mikrobolometerarray (GUIDE Infrared – CUBE817) mit $800 \text{ px} \times 600 \text{ px}$ bei einem Pixelabstand von $17 \mu\text{m}$ verwendet. Dieses besitzt ein breitbandiges Germaniumfenster und ist somit über einen Großteil des mittleren Infrarotbereichs sensitiv (siehe Abb. 3.6). Prinzipiell wäre der Aufbau auch ohne zusätzlichen Faltspiegel möglich, allerdings zeigt sich diese Variante insbesondere im Hinblick auf eine spätere Prototypintegration als vorteilhaft, da der Detektor parallel zur x-y-Ebene platziert werden kann.

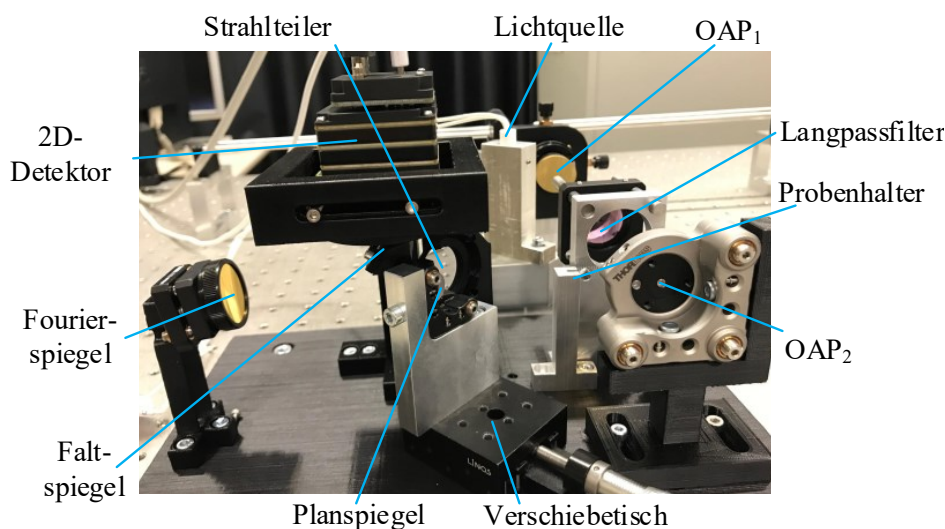


Abbildung 4.4: Bild des entwickelten experimentellen Aufbaus des bsFTS. [136]

Abbildung 4.4 zeigt den entsprechenden Laboraufbau. Während die meisten Halterungen mit einem 3D-Drucker hergestellt wurden, wurden für die Justage der optischen Elemente Komponenten von Thorlabs verwendet. Als Lichtquelle kommt in diesem Fall ein Siliziumkarbid-Global (Hawkeye Technologies – IR-Si207) zum Einsatz, die Off-Axis-Parabolspiegel sowie der sphärische Fourierspiegel können über entsprechende Halterungen justiert werden (Thorlabs – K6XS, Thorlabs – POLARIS-K1 und Thorlabs – KMSS/M). Die entscheidende Komponente für die Justierung des Prototypen stellt der Planspiegel

dar, welcher deshalb mithilfe einer Thorlabs – KM05FL/M Halterung so gekippt werden kann, dass die beiden Zentralstrahlen der Interferometerarme parallel verlaufen. Zudem kann der Planspiegel mit einem Verschiebetisch lateral bewegt werden, um die Distanz $d_{\text{ST-PS}}$ zum Strahlteiler zu variieren.

4.3.2 Laborprototyp

Zusätzlich zu dem experimentellen Aufbau wurde ein Prototyp als Vorstufe für eine industrielle Realisierung des bsFTS entwickelt. Das Hauptaugenmerk lag hier auf einem möglichst kompakten und praxistauglichen Design sowie einer für relevante Anwendungen ausreichenden spektralen Bandbreite bzw. Auflösung. Den entsprechenden Aufbau zeigt Abb. 4.5.

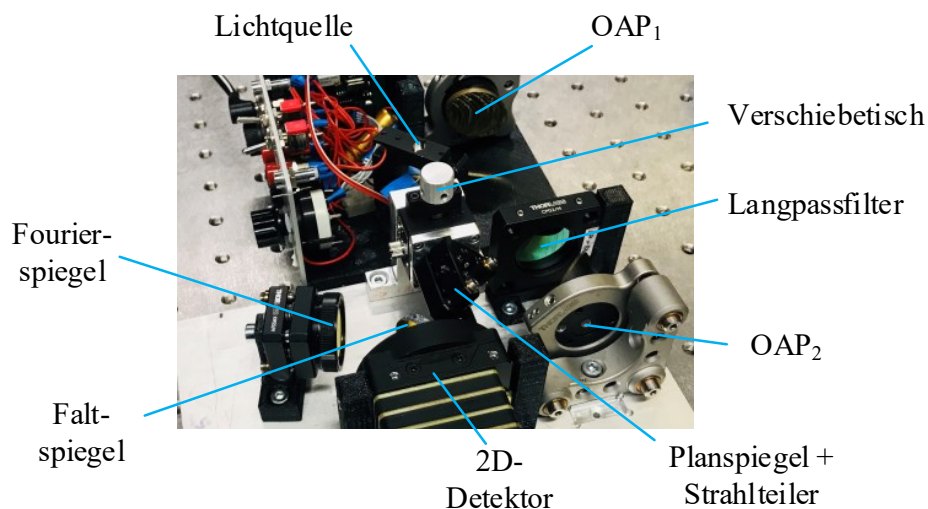


Abbildung 4.5: Bild des entwickelten Laborprototyps des bsFTS.

Hier wird eine Lichtquelle – in diesem Bild ein MEMS-Emitter (MicroHybrid – JSIR360) – über einen Off-Axis-Parabolspiegel OAP_1 mit Brennweite 50,4 mm und einem Off-Axis-Winkel von 45° kollimiert und in das Spektrometermodul geleitet. Hier sorgt ein Langpassfilter mit einer Cut-On-Wellenlänge von $4,5 \mu\text{m}$ (Edmund Optics – 68-655) für das Einhalten des Nyquist-Kriteriums. Dieser unterscheidet sich vom experimentellen Aufbau im vorhergehenden Abschnitt, da sowohl die Brennweite von OAP_2 , als auch die des Fourierspiegels in diesem Aufbau mit 50,8 mm bzw. 50 mm kleiner gewählt wurden, um den Aufbau kompakter gestalten und die spektrale Auflösung erhöhen zu können.

Ein weiterer großer Unterschied ist die Anordnung des Interferometerkerns, bestehend aus Planspiegel und Strahlteiler, welcher um 90° gedreht wurde. Dies bietet den Vorteil,

dass der Fourierspiegel seitlich gekippt (Off-Axis-Winkel 26°) und somit der 2D-Detektor ebenfalls seitlich platziert werden kann. Dieser ist entsprechend 90° um die optische Achse gedreht angebracht.

Abschließend erfolgt eine Gegenüberstellung der beiden Messaufbauten in Tabelle 4.1. Die Größenangaben beziehen sich dabei auf die Spektrometermodule ohne Lichtquellen und Probenaufnehmer.

Tabelle 4.1: Gegenüberstellung der entwickelten Messaufbauten.

	Experimenteller Aufbau	Laborprototyp
Spektrale Bandbreite	$2800 \text{ cm}^{-1} - 600 \text{ cm}^{-1}$ $3,6 \text{ }\mu\text{m} - 17 \text{ }\mu\text{m}$	$2220 \text{ cm}^{-1} - 700 \text{ cm}^{-1}$ $4,5 \text{ }\mu\text{m} - 14 \text{ }\mu\text{m}$
Spektrale Auflösung	12 cm^{-1}	8 cm^{-1}
Baugröße (L×B×H)	230 mm × 160 mm × 160 mm	160 mm × 120 mm × 60 mm

4.4 Spektrenberechnung und Kalibrierung

Die Berechnung des Lichtquellenspektrums aus dem gemessenen Detektorbild des bsFTS entspricht im Wesentlichen dem in [95] vorgestellten Verfahren und ist schematisch in Abb. 4.6 dargestellt. Zunächst wird das 2D-Interferogramm durch eine Mittelung entlang der Linien gleicher OPD in ein 1D-Interferogramm überführt. Da die Linien gleicher OPD, wie in Abschnitt 3.1 beschrieben, leicht um die y-Achse des Detektors gekrümmt sind, muss neben der Lage auch die Krümmung der Interferenzstreifen bekannt sein. Dies wurde in dieser Arbeit über ein iteratives Verfahren bestimmt, welches den Kontrast des 1D-Interferogramms maximiert. Resultat sind entsprechende Mittelungsparameter, die lediglich einmal nach Justage des bsFTS ermittelt werden müssen.

Um aus dem 1D-Interferogramm ein korrektes Spektrum berechnen zu können, muss die OPD für jeden Datenpunkt bekannt sein. Dies wurde für die meisten Messaufbauten in dieser Arbeit durch eine iterative Anpassung des Spektrums einer Polystyrol-Kalibrierfolie an ein Referenzspektrometer realisiert. Lediglich für das in Abschnitt 4.5 vorgestellte Stufenspiegelkonzept wurde ein Laser zur OPD-Kalibrierung eingesetzt.

Anschließend wird das Interferogramm wie in einem klassischen Michelson-FTIR-Spektrometer hochpassgefiltert und mittels Zero-Padding interpoliert [32]. Nach einer Apodisation des Interferogramms – typischerweise mit einem Dreiecksfenster – wird zunächst die Phase des Signals bestimmt und anschließend eine Phasenkorrektur nach Mertz [68] durchgeführt, um durch den Strahlteiler verursachte Phasenfehler zu beheben. Schließlich kann das Spektrum über eine nicht-uniforme Fourier-Transformation [31] berechnet werden,

welche den nicht-linearen Anteil der OPD-Achse nach Gleichung (3.4) berücksichtigt. Als letzter Schritt wird die dispersionsbedingte Verschiebung der Wellenzahlachse mithilfe der Wellenzahlparameter in Abb. 4.2(a) korrigiert.

Eine detailliertere Beschreibung der Spektrenberechnung eines statischen Einzelspiegel-Fourier-Spektrometers findet sich in [95].

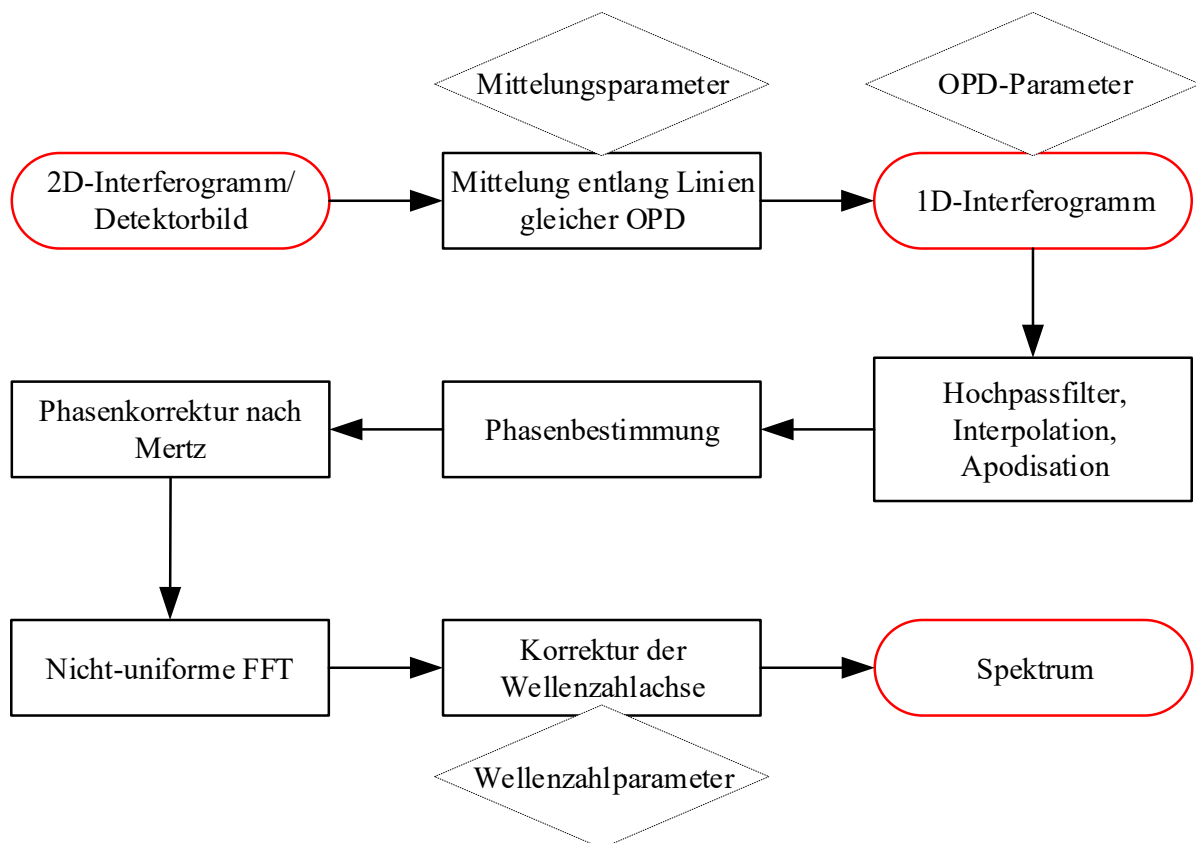


Abbildung 4.6: Schrittweise Berechnung des Spektrums aus dem Detektorbild nach [95].

4.5 Stufenspiegel-Variante zur Erhöhung der spektralen Auflösung

Wie in Abschnitt 3.2.2 dargelegt, besteht eine der grundlegenden Leistungseinschränkungen des bsFTS und im Prinzip von allen sFTS-Konzepten darin, dass das Auflösungsvermögen durch die Detektorgröße begrenzt ist. Dadurch lässt sich die spektrale Auflösung nur durch eine entsprechende Verringerung der spektralen Bandbreite erhöhen.

Um diese Limitierung zu umgehen, wurde in dieser Arbeit eine in [94] und [95] vorgeschlagene Stufenspiegel-Variante des bsFTS umgesetzt und evaluiert, welche eine näherungsweise Verdopplung der spektralen Auflösung bei gleichbleibendem Spektralbereich ermöglicht.

Schematisch ist der optische Aufbau in Abb. 4.7 dargestellt [141]. Die Konkavspiegel wurden für diesen Versuch durch Linsen ersetzt, um für eine erste Durchführbarkeitsstudie Aberrationseffekte zu minimieren und die Justage zu erleichtern.

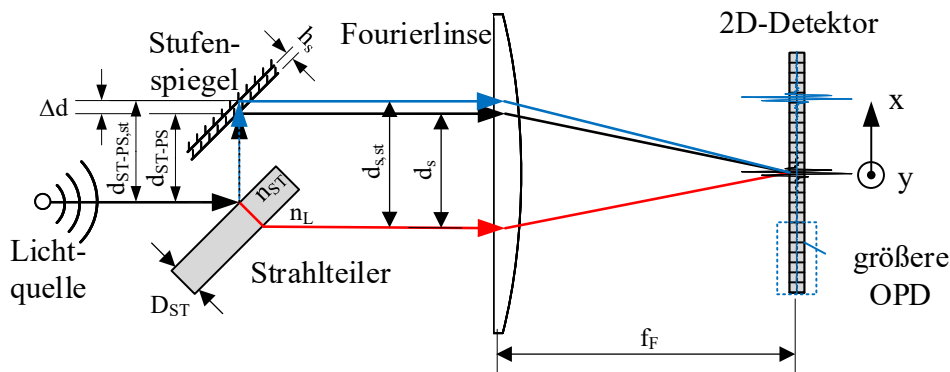


Abbildung 4.7: Schematischer Aufbau des bsFTS mit Stufenspiegel nach [135] und [141].

Prinzipiell gleicht der Aufbau dem in Abschnitt 3.1 beschriebenen sSMFTS, mit dem Unterschied, dass der Planspiegel durch einen Stufenspiegel mit einer Stufenhöhe von h_s in y -Richtung ersetzt wird. Die Stufenkante ist hierbei auf Höhe der optischen Achse ($y = 0$) angeordnet. Während also eine der Stufen ($y < 0$), nachfolgend als innere Stufe bezeichnet, noch immer einen Abstand von $d_{\text{ST-PS}}$ zum Strahlteiler aufweist, so ergibt sich für die zweite Stufe ($y > 0$), im weiteren Verlauf als äußere Stufe bezeichnet, eine größere Distanz $d_{\text{ST-PS, st}}$ [141]:

$$d_{\text{ST-PS, st}} = d_{\text{ST-PS}} + \Delta d = d_{\text{ST-PS}} + \sqrt{2}h_s. \quad (4.2)$$

Durch die Anordnung werden also zwei unterschiedliche Interferogramme auf dem Detektor erzeugt. Die innere Stufe wird in dieser Darstellung auf die untere Detektorhälfte abgebildet und erzeugt das gleiche Interferogramm wie der Standardaufbau eines bsFTS. Die äußere Stufe wird auf die obere Detektorhälfte abgebildet und erzeugt durch den Offset Δd nach Gleichung (3.4) größere optische Pfaddifferenzen.

Zur Veranschaulichung des Prinzips zeigt Abb. 4.8 den simulierten OPD-Verlauf für eine Punktlichtquelle und eine Stufe mit einer Stufenhöhe von $400 \mu\text{m}$. Dazu wurden die Geometrieparameter wie in Abschnitt 4.3.1 gewählt, um einen Vergleich zu ermöglichen.

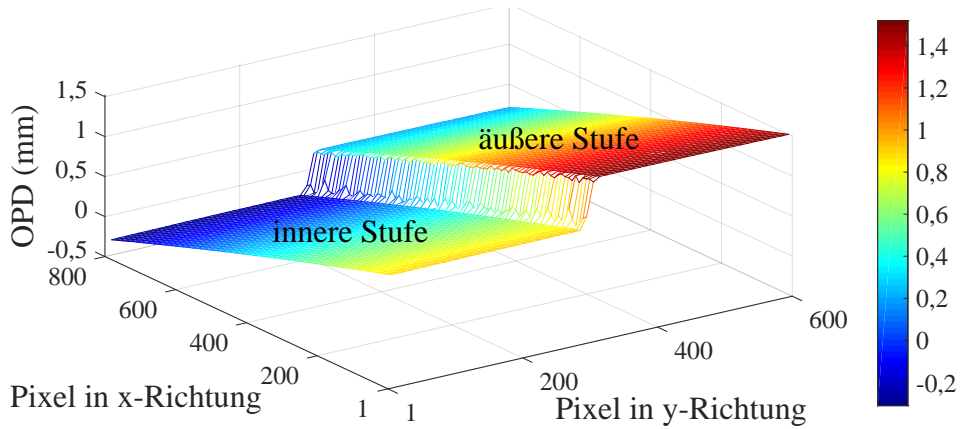


Abbildung 4.8: Simulierter optischer Pfaddifferenzverlauf des Stufenspiegel-Aufbaus bei einer Stufenhöhe von $400\ \mu\text{m}$. [141]

Klar zu erkennen sind zwei getrennte Bereiche auf dem Detektor. Ein Bereich enthält das durch die innere Stufe erzeugte Interferogramm, welches den Mid-Peak des Interferogramms enthält und eine maximale OPD von $0,9\ \text{mm}$ aufweist. Die äußere Stufe erzeugt eine maximale OPD von $1,5\ \text{mm}$, was nach Fusion der beiden Teilinterferogramme einer Erhöhung der spektralen Auflösung von etwa $12\ \text{cm}^{-1}$ auf etwa $7\ \text{cm}^{-1}$ entspricht. Zu erkennen ist zudem, dass die OPD-Bereiche einen überschneidenden Bereich aufweisen, was die Kalibrierung des Messaufbaus erleichtert. Allerdings könnte die spektrale Auflösung durch die Wahl einer größeren Stufenhöhe und damit einer Verkleinerung des Überschneidungsbereichs nochmals erhöht werden. Simulationen zeigten, dass bei einer Stufenhöhe von $920\ \mu\text{m}$ die beiden OPD-Verläufe genau ineinander übergehen, was einer maximalen OPD von etwa $2,4\ \text{mm}$ auf der äußeren Stufe entspricht. Die entsprechende spektrale Auflösung beträgt dann etwa $4\ \text{cm}^{-1}$.

Diese im Extremfall Verdreifachung der spektralen Auflösung wird durch einen steileren OPD-Verlauf auf der äußeren Stufe ermöglicht, welcher durch den höheren Abstand der virtuellen Quellen $d_{s,st}$ der äußeren Stufe erzeugt wird [141]:

$$d_{s,st} = d_s + \sqrt{2}h_s. \quad (4.3)$$

Daraus ergibt sich nach Gleichung (3.4) ein steilerer Anstieg der OPD, welcher sich auch als eine erhöhte Raumfrequenz $k_{s,st} > k_s$ bei gleicher Wellenlänge λ auf der entsprechenden Detektorhälfte ausdrücken lässt. Diese lässt sich mithilfe von Gleichung (2.13) und Gleichung (2.42) wie folgt berechnen [141]:

$$k_s = \frac{d_s}{f_F \cdot \lambda} < k_{s,st} = \frac{d_{s,st}}{f_F \cdot \lambda} = k_s + \frac{\sqrt{2}h_s}{f_F \cdot \lambda}. \quad (4.4)$$

Die Abweichung der Raumfrequenz und damit der Abtastfrequenz zwischen den beiden Stufen erschwert die Interferogrammfusion und wird im experimentellen Teil in Abschnitt 6.1.3 näher betrachtet.

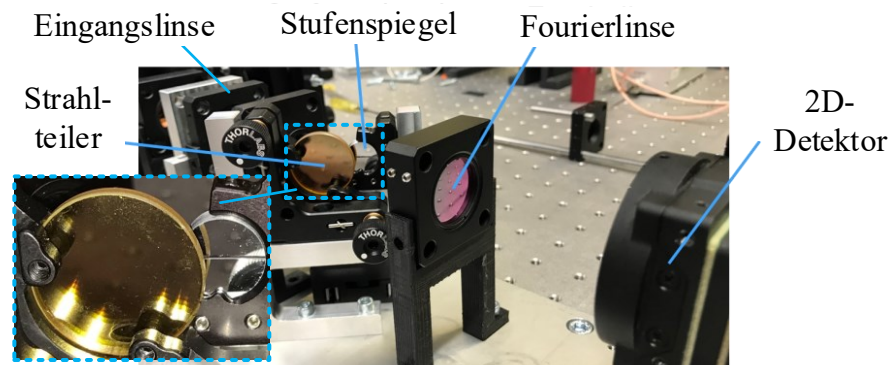


Abbildung 4.9: Bild des entwickelten Laborprototyps eines sSMFTS mit Stufenspiegel. [141]

Der experimentelle Aufbau zur Evaluierung der Stufenspiegelvariante ist in Abb. 4.9 dargestellt. Der Stufenspiegel wurde von der Firma *Simons Mirror Technology Ltd* per Schlagfräsverfahren aus Aluminium hergestellt. Dadurch ist die Stufe nicht ideal, sondern weist eine Krümmung von $110\ \mu\text{m}$ über den Spiegeldurchmesser von $12,7\ \text{mm}$ auf. Die Stufenhöhe h_s wurde wie in der Simulation in Abb. 4.8 zu $400\ \mu\text{m}$ gewählt, um einen gewissen Überlappungsbereich der einzelnen Stufen zu gewährleisten, was die Interferogrammfusion erleichtert. Der Strahlteiler besteht aus ZnSe mit einer Dicke von $3\ \text{mm}$, beide Linsen bestehen aus Germanium und weisen jeweils eine Brennweite von $75\ \text{mm}$ auf, um die spektrale Auflösung und Bandbreite dem experimentellen bsFTS-Aufbau aus Abschnitt 4.3.1 anzugleichen. Die Eingangslinse dient dazu, einen Brennpunkt bzw. die divergente Lichtquelle (vgl. Abb. 4.7) im Interferometer zu erzeugen.

4.6 Kontinuierliche Background-Korrektur

Da das bsFTS, wie in Abschnitt 2.2.3.1 beschrieben, wie jedes FTIR-Spektrometer stets relative, auf ein Background-Spektrum bezogene Ergebnisse liefert, führt eine zeitliche Änderung des Background-Spektrums potentiell zu signifikanten Messfehlern. Dies kann beispielsweise durch eine schwankende Lichtquellenleistung oder durch die in Abschnitt 3.2.3.3 aufgezeigten Drifteffekte der verwendeten Mikrobolometerkamera verursacht werden.

Um diese Messfehler auszugleichen, wurde in dieser Arbeit eine kontinuierliche Background-Korrekturmethode (KBKM) implementiert und evaluiert. Da die optische Pfaddifferenz hauptsächlich entlang der x-Achse des Detektorarrays moduliert wird, lässt sich die y-Achse dazu nutzen, räumliche Information der Probe aufzuzeichnen. Während diese Möglichkeit in Kapitel 5 verwendet wird, um eine abbildende Variante des bsFTS zu realisieren, wird hier sowohl das aktuelle Proben-Spektrum, als auch das Background-Spektrum auf unterschiedliche Detektorbereiche abgebildet. Dadurch können beide Spektren zeitgleich aufgenommen werden und Veränderungen der Backgroundintensität in Echtzeit korrigiert werden. Das Grundprinzip kann anhand von Abb. 4.10(a) nachvollzogen werden.

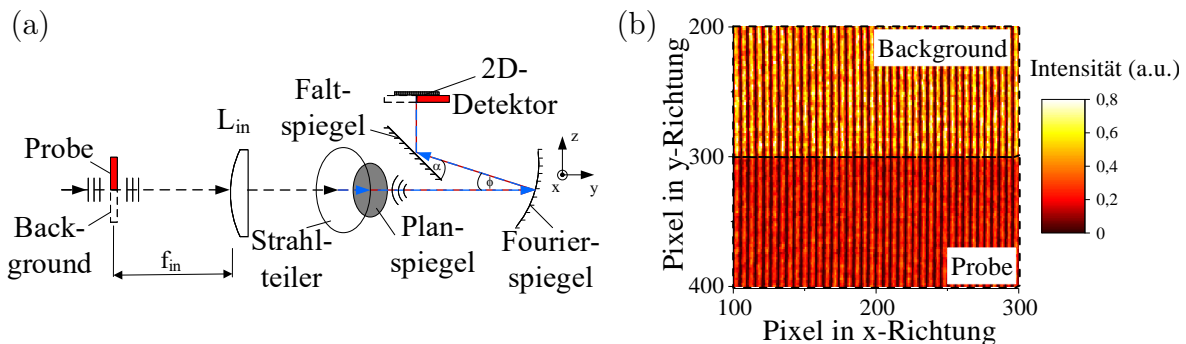


Abbildung 4.10: (a) Prinzip der kontinuierlichen Background-Korrekturmethode. Probe und Background werden auf unterschiedliche Bereiche des Detektors abgebildet. (b) Simuliertes Interferenzmuster für eine monochromatische Punktlichtquelle bei einer Wellenlänge von $10,6 \mu\text{m}$. [140]

Die Probe wird dabei in der vorderen Brennebene der Eingangsoptik L_{in} platziert und kollimiert bestrahlt. Die Eingangsoptik wird hier lediglich zur Vereinfachung der Darstellung als Konvexlinse angenommen und im experimentellen Aufbau durch einen entsprechenden Off-Axis-Parabolspiegel ersetzt.

Da die Probe oberhalb der optischen Achse platziert wird, wird das entsprechende Interferenzmuster lediglich auf eine Detektorhälfte abgebildet, während auf der anderen Detektorhälfte weiterhin das Background-Spektrum aufgenommen werden kann. Das Ergebnis einer beispielhaften Ray-Tracing-Simulation kann Abb. 4.10(b) entnommen werden. Während die obere Detektorhälfte das Interferenzmuster des Backgrounds beinhaltet, zeigt die untere Hälfte ein deutlich gedämpftes Signal. Hier wurde eine monochromatische Punktlichtquelle mit einer Wellenlänge von $10,6 \mu\text{m}$ verwendet. Die Probe absorbiert in diesem Fall 50 % der einfallenden Strahlung.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das KBKM-Konzept mithilfe des in Abb. 4.11 als Ray-Tracing-Modell dargestellten Messaufbaus evaluiert. Die kollimierte Eingangsstrahlung wird mithilfe eines rechtwinkligen Prismenspiegels RM_1 räumlich in einen Background-

Pfad und einen Proben-Pfad aufgeteilt. Während die Background-Strahlung direkt zu einem zweiten Prismenspiegel RM_2 und daraufhin in das bsFTS geleitet wird, wird der Proben-Pfad mithilfe zweier Off-Axis-Parabolspiegel OAP_1 und OAP_2 zunächst auf die Probe fokussiert und anschließend rekollimiert.

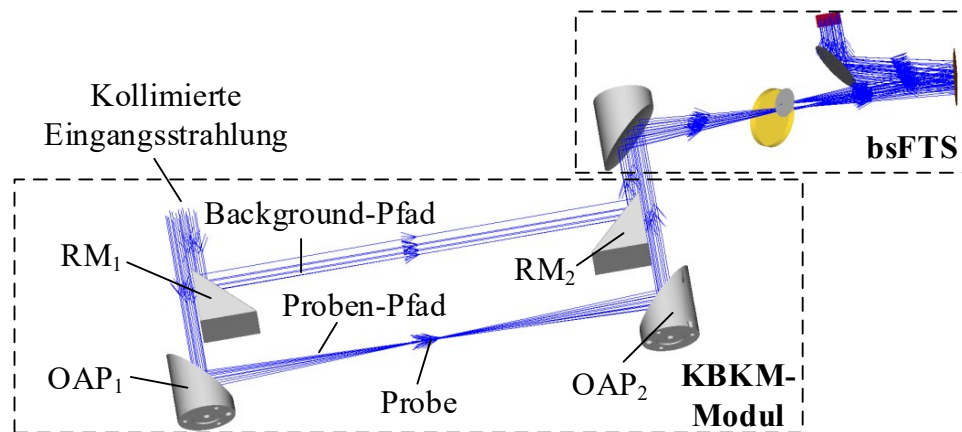


Abbildung 4.11: Praktische Implementierung der KBKM-Methode. Dieses Design kann prinzipiell mit jedem Standard-FTIR-Probenhalter verwendet werden. [140]

Den zugehörigen praktischen Messaufbau zeigt Abb. 4.12. Als Lichtquelle kommt ein Globar (Hawkeye-Technologies – IR-Si207) zum Einsatz, welcher mit einem 45° -Off-Axis-Parabolspiegel mit Brennweite 50,8 mm kollimiert wird. Die beiden 90° -Off-Axis-Parabolspiegel OAP_1 und OAP_2 weisen jeweils Brennweiten von 101,6 mm auf, die Küvettenhalterung wurde mit einem 3D-Drucker gefertigt und ist kompatibel zu Standard-FTIR-Transmissionsküvetten. Die beiden Prismenspiegel RM_1 und RM_2 (Thorlabs - MRA20-F01) weisen Kantenlängen von 20 mm auf.

Die Konfiguration des bsFTS entspricht hier im Wesentlichen dem in Abschnitt 4.3.1 beschriebenen experimentellen Aufbau. Lediglich die Brennweite des Einkoppelspiegels wurde mit 76,2 mm kürzer gewählt. Zudem wurde der Interferometerkern, bestehend aus Strahlteiler und Planspiegel, wie zuvor in Abschnitt 4.3.2 beschrieben, um 90° gedreht, um den 2D-Detektor seitlich platzieren zu können.

Dieser Aufbau kann prinzipiell auch mit weiteren FTIR-Standard-Probenaufnahmen, wie beispielsweise Gasmesszellen sowie ATR-Kristallen, verwendet werden. Auch kann die Gesamtanordnung durch eine Rotation des KBKM-Moduls um 180° oder die Verwendung von OAPs mit kürzeren Brennweiten wesentlich kompakter gestaltet werden.

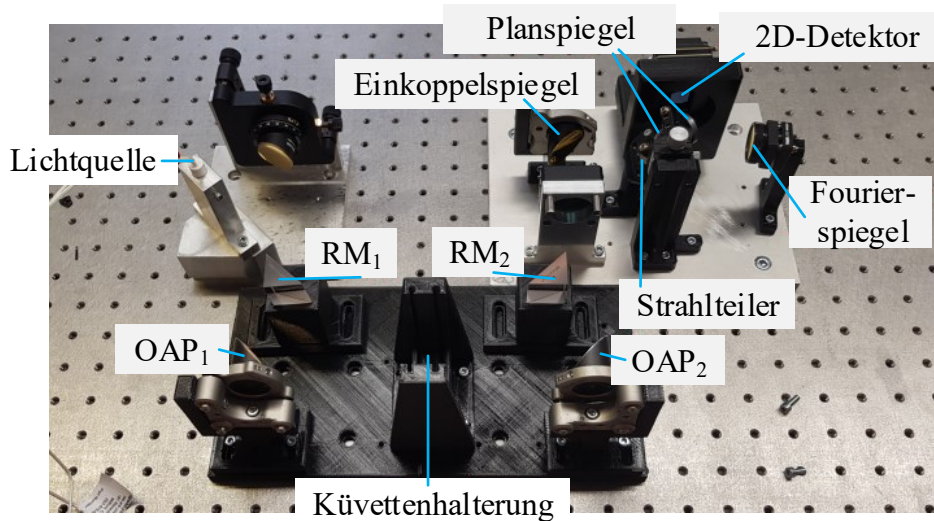


Abbildung 4.12: Praktische Umsetzung des bsFTS mit kontinuierlicher Background-Korrektur.

4.7 Designvarianten und Optimierungsmöglichkeiten

In diesem Abschnitt werden nun einige mögliche Designvarianten des bsFTS vorgestellt, welche für zukünftige Arbeiten von Interesse sein könnten. Dazu zählt neben einer Erweiterung des bsFTS zu einem Spektropolarimeter eine Methode, um die Abtastfrequenz und damit die Bandbreite des Spektrometers mithilfe eines rotierten Detektorarrays zu erhöhen.

4.7.1 Spektropolarimeter

Das in dieser Arbeit vorgestellte bsFTS kann so erweitert werden, dass neben den spektralen Eigenschaften der Probe auch der Polarisierungszustand (engl.: State of Polarization - SOP) der gemessenen Strahlung analysiert werden kann. Der SOP wird dabei durch den wellenzahlabhängigen Stokes-Vektor $S(\tilde{\nu}) = (S_0(\tilde{\nu}), S_1(\tilde{\nu}), S_2(\tilde{\nu}), S_3(\tilde{\nu}))^T$ angegeben.

Diese Technik wurde erstmalig in [74] vorgestellt und in [56] mit einem klassischen FTIR-Spektrometer für den MIR umgesetzt. Publierte Varianten mit sFTS nutzen beispielsweise Common-Path-Interferometer [67] oder doppelbrechende Interferometer [11, 61, 121], allerdings verspricht der Einsatz eines Einzelspiegel-Interferometers zur Modulation der optischen Pfaddifferenzen aufgrund der bereits genannten Vorteile eine verbesserte Performance vor allem im MIR. Zur Umsetzung dieser Technik muss das bsFTS

gemäß Abb. 4.13 um ein Polarisationsmodul erweitert werden, wodurch das Interferogramm in Abhängigkeit des SOP moduliert wird.

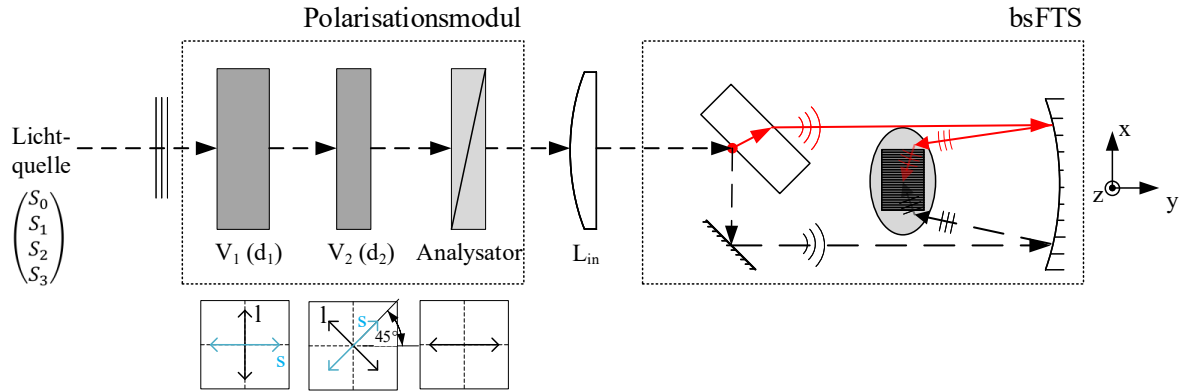


Abbildung 4.13: Schematische Darstellung eines Spektropolarimeters basierend auf dem vorgestellten bsFTS-Konzept.

Kollimierte Strahlung einer Lichtquelle mit unbekanntem SOP durchläuft also vor Einkopplung in das bsFTS zwei doppelbrechende Verzögerungsplatten V_1 und V_2 mit Dicke d_1 bzw. d_2 sowie einen Analysator.

Dabei sind die beiden schnellen Achsen der Verzögerungsplatten zueinander in einem Winkel von 45° angeordnet und die Achse des Analysators stimmt mit der schnellen Achse von V_1 überein. Das resultierende Interferogramm $I(\text{OPD})$ lässt sich dann unter Vernachlässigung von Konstanten über Gleichung (4.5) bestimmen [56].

$$I(\text{OPD}) = \frac{(1 + \cos(\varphi_{\text{bsFTS}}))}{2} \cdot [S_0(\tilde{\nu}) + S_1(\tilde{\nu}) \cos(\varphi_2) + S_2(\tilde{\nu}) \sin(\varphi_1) \sin(\varphi_2) - S_3(\tilde{\nu}) \cos(\varphi_1) \sin(\varphi_2)] \quad (4.5)$$

Daraus wird ersichtlich, dass die Stokes-Parameter $S_0(\tilde{\nu})$, $S_1(\tilde{\nu})$, $S_2(\tilde{\nu})$ und $S_3(\tilde{\nu})$ direkt in das Interferogramm codiert sind. Somit lässt sich der wellenzahlabhängige Polarisationszustand der Lichtquelle vollständig rekonstruieren. Die Phasenterme φ_{bsFTS} , φ_1 und φ_2 des Interferogramms sind ebenfalls wellenzahlabhängig und lassen sich mithilfe der Gleichungen (4.6)-(4.8) ausdrücken [56].

$$\varphi_{\text{bsFTS}}(x, y, \tilde{\nu}) = 2\pi\tilde{\nu} \left(\frac{d_s}{f_F} x + \text{OPD}_{\text{nlín}}(x, y) \right) \quad (4.6)$$

$$\varphi_1(\tilde{\nu}) = 2\pi B(\tilde{\nu})d_1\tilde{\nu} \quad (4.7)$$

$$\varphi_2(\tilde{\nu}) = 2\pi B(\tilde{\nu})d_2\tilde{\nu} \quad (4.8)$$

Hier bezeichnen d_s und f_F wiederum den Abstand der virtuellen Quellen im bsFTS, bzw. die Brennweite des Fourierspiegels. Die Doppelbrechung der verwendeten Verzögerungsplatten wird mit $B(\tilde{\nu})$ beschrieben.

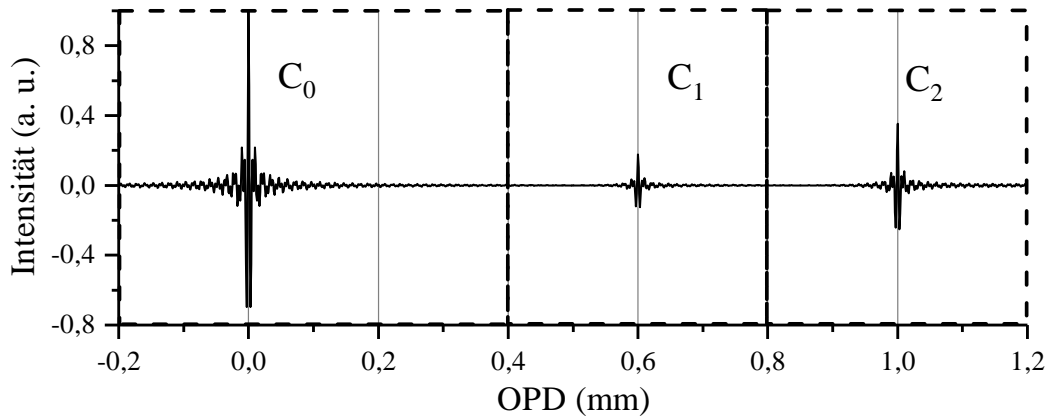


Abbildung 4.14: Simulation eines idealen Interferogramms der Spektropolarimetervariante basierend auf dem vorgestellten bsFTS-Konzept.

Abbildung 4.14 zeigt nun die Simulation eines idealen Interferogramms, welches mit einer typischen bsFTS-Konfiguration erzeugt werden kann. Effekte wie Phasenfehler durch den Strahlteiler sowie Kontrastverläufe wurden hier nicht berücksichtigt. Die verwendeten Verzögerungsplatten bestehen aus Cadmium-Germanium-Arsenid (CdGeAs_2) und weisen bei einer Doppelbrechung von etwa 0,1 Dicken von 4 mm bzw. 10 mm auf. Die Dimensionen und Kenndaten des bsFTS wurden analog zum in Abschnitt 4.3.2 vorgestellten Prototypen gewählt. Die Lichtquelle ist linear polarisiert, der Winkel zur schnellen Achse von V_1 beträgt $22,5^\circ$.

Klar zu erkennen sind drei Teilinterferogramme, welche als C_0 , C_1 und C_2 gekennzeichnet sind. Während C_0 dem klassischen Interferogramm entspricht, aus dem das Spektrum der Lichtquelle $S_0(\tilde{\nu})$ rekonstruiert werden kann, können die restlichen Stokes-Parameter aus C_1 und C_2 berechnet werden [11].

Die Schwierigkeit zur Umsetzung dieses Konzepts liegt zum jetzigen Zeitpunkt hauptsächlich in einer eingeschränkten Verfügbarkeit von doppelbrechenden Materialien im mittleren

Infrarotbereich. Neben dem hier verwendeten CdGeAs₂ erscheint das kürzlich vorgestellte Barium-Titan-Sulfid (BaTiS₃) mit einer Doppelbrechung von bis zu 0,76 vielversprechend [72].

Sollen lediglich die linearen Polarisationskoeffizienten $S_0(\tilde{\nu})$, $S_1(\tilde{\nu})$ und $S_2(\tilde{\nu})$ untersucht werden, so kann das Design vereinfacht und V_1 durch eine achromatische $\lambda/4$ -Platte oder einen entsprechenden Fresnelschen Rhomboeder ersetzt werden [104].

4.7.2 Rotiertes Detektorarray

Wie aus Gleichung (3.10) ersichtlich, lässt sich die spektrale Bandbreite eines sFTS durch die Verwendung eines Detektors mit kleinerem Pixelabstand p_{pix} erhöhen. Dies führt zu einem kleineren Abtastintervall Δx_s und damit zu einer höheren Abtastfrequenz des Interferogramms. Wird gleichzeitig die Pixelanzahl des Detektors entsprechend erhöht, so kann die ursprüngliche spektrale Auflösung trotz größerem Spektralbereich beibehalten werden. Alternativ kann die spektrale Auflösung in diesem Fall erhöht werden, ohne den Spektralbereich einschränken zu müssen.

Bei Verwendung eines Detektors mit gegebenen Dimensionen lässt sich dieser Effekt durch eine Drehung des Detektors um die optische Achse erzeugen. Diese Methode wurde für sFTS erstmals in [44] und [112] gezeigt und ist der klassischen Bildverarbeitung entlehnt [7].

In Abb. 4.15(a) ist die klassische Herangehensweise illustriert. Das Interferogramm wird entlang der x-Dimension, also entlang der Detektorzeilen ausgewertet. Das lineare Abtastintervall Δx_s ergibt sich dann mit Gleichung (2.43) zu:

$$\Delta x_s = \frac{d_s}{f_F} \cdot p_{\text{pix}}. \quad (4.9)$$

Da der Abstand der virtuellen Quellen d_s und die Brennweite der Fourieroptik f_F typischerweise durch Geometrie und Auslegung des Spektrometers bestimmt werden, lässt sich Δx_s lediglich durch eine Verkleinerung von p_{pix} verringern.

Dazu wird der Detektor gemäß Abb. 4.15(b) um einen Winkel β um die optische Achse rotiert. Wird das Interferogramm nun nicht mehr entlang der Detektorzeilen, sondern, wie hier in rot gekennzeichnet, entlang der Detektorspalten ausgewertet, so wird ein kleineres Abtastintervall $\Delta x_{s,\text{neu}}$ erzielt, welches sich über geometrische Überlegungen bestimmen lässt:

$$\Delta x_{s,\text{neu}} = \frac{p_{\text{eff}}}{p_{\text{pix}}} \cdot \Delta x_s = \cos(90^\circ - \beta) \cdot \Delta x_s \quad (4.10)$$

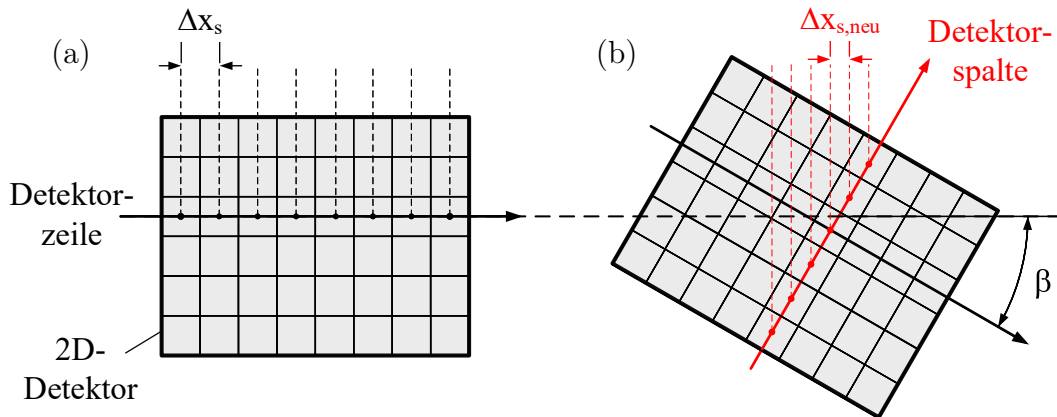


Abbildung 4.15: Veranschaulichung der Verkleinerung des Abtastintervalls durch eine Rotation des 2D-Detektors. (a) Standardauswertung entlang der Detektorzeile.; (b) Auswertung entlang der Detektorspalten bei rotiertem Detektor.

Dabei kann der effektive Pixelabstand p_{eff} durch Gleichung (4.11) berechnet werden.

$$p_{eff} = \cos(90^\circ - \beta) \cdot p_{pix} \quad (4.11)$$

So kann das Abtastintervall theoretisch beispielsweise durch eine Drehung von 30° halbiert werden, was zu einer Verdopplung der spektralen Bandbreite führt.

Bietet diese Methode auf den ersten Blick eine einfache Lösung zur Annäherung der Kenndaten des bsFTS an Labor-FTIR-Geräte, so gilt es in zukünftigen Arbeiten dieses Konzept auf seine Praxistauglichkeit zu überprüfen. Zum einen stehen in dieser bsFTS-Variante weniger Pixel pro Abtastpunkt zur Mittelung zur Verfügung, d.h. das SNR sinkt mit steigender Abtastfrequenz. Zum anderen gilt es, den nicht-linearen OPD-Verlauf des bsFTS zu berücksichtigen und davon abhängig den idealen Rotationswinkel des Detektors zu bestimmen. Zudem müssen die Effekte einer starken Überlagerung der Pixel auf das Spektrum evaluiert werden.

Kapitel 5

Abbildendes statisches Fourier-Transformations-Spektrometer

Dieses Kapitel beschreibt das im Laufe dieser Arbeit entwickelte abbildende statische Fourier-Transformations-Spektrometer (engl.: static imaging Fourier transform spectrometer - sIFTS) für den mittleren Infrarotbereich. Als Grundlage diente wiederum das in Kapitel 3 im Detail beschriebene sSMFTS, bzw. Einzelspiegel-Interferometer, welches durch eine geeignete Abbildungsoptik sowie eine mechanische Verfahreinheit ergänzt wurde. Nach einer Einführung in das grundlegende Funktionsprinzip sowie das verwendete Windowing-Verfahren zur Aufnahme des hyperspektralen Datenwürfels, wird der experimentelle Aufbau des sIFTS vorgestellt.

Zudem werden Designvarianten des Messsystems diskutiert, welche einen Pushbroom-Aufbau, ein Setup zur Messung in Reflexion sowie ein sIFTS für den sichtbaren Spektralbereich beinhalten.

5.1 Grundlegender Aufbau und Funktionsprinzip

In diesem Abschnitt wird zunächst die Funktionsweise eines abbildenden Einzelspiegel-Interferometers erläutert und im Anschluss detailliert auf das eingesetzte Windowing-Verfahren eingegangen.

5.1.1 Abbildendes Einzelspiegel-Interferometer

Prinzipiell ist ein statisches Einzelspiegel-Fourier-Transformations-Spektrometer von Grund auf ein abbildendes Spektrometer, sofern eine Sammeloptik als Eingangsoptik verwendet wird und die Probe in deren vorderer Brennebene platziert wird.

Dies wurde in dieser Arbeit beispielsweise bereits in Abschnitt 4.6 genutzt, um zeitgleich das Background- und das Proben-Spektrum zu messen.

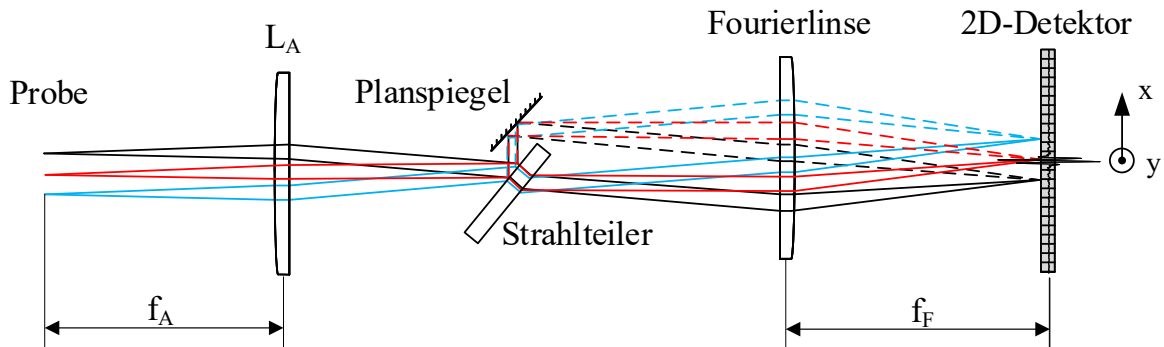


Abbildung 5.1: Abbildendes Einzelspiegel-Interferometer. Zusätzlich zum Interferogramm wird ein zweidimensionales Bild der Probe aufgenommen.

Abbildung 5.1 zeigt schematisch den Strahlengang durch das abbildende Spektrometer. Dabei ist die Probe als drei Punktquellen in der vorderen Brennebene der Eingangslinse L_A dargestellt, welche zunächst durch die Eingangslinse mit Brennweite f_A kollimiert werden. Nach Durchlaufen des Interferometers werden die entsprechenden Strahlbündel durch die Fourierlinse mit Brennweite f_F wieder auf das Detektorarray refokussiert. Zusätzlich zum Interferogramm wird also mit einer Vergrößerung von $M = f_F/f_A$ auch ein zweidimensionales Bild der Probe aufgenommen.

Betrachtet man nochmals den typischen OPD-Verlauf eines Einzelspiegel-Interferometers in Abb. 5.2, so wird klar, dass sich mit diesem Aufbau direkt eine spektrale Achse in x-Richtung und eine räumliche Achse in y-Richtung erfassen lassen. Dies liegt darin begründet, dass die OPD prinzipiell nur in x-Richtung moduliert wird, und somit für jede Detektorzeile ein Spektrum berechnet werden kann. Beispielhaft sind hier drei Bereiche eingezeichnet, aus denen jeweils ein Spektrum berechnet werden kann. Dies entspricht der vermessenen Probe in Abschnitt 6.2.2, welche ebenfalls aus drei verschiedenen Materialien bzw. Abschnitten besteht.

Die entsprechende Datenverarbeitung für eine solche eindimensionale Abbildung wird nun anhand von Abb. 5.3 verdeutlicht. Zunächst wird das 2D-Detektorbild in k Abschnitte entlang der y-Achse aufgeteilt. Da mindestens eine komplette Detektorzeile zur Berechnung eines Spektrums benötigt wird, gilt hier $k \leq M$, wobei M die Pixelanzahl in y-Richtung beschreibt. Aus den einzelnen Abschnitten bzw. 2D-Interferogrammen können dann die jeweiligen Spektren berechnet werden. Zunächst wird jeweils entlang der Linien gleicher OPD gemittelt, um 1D-Interferogramme zu erhalten. Aus diesen lässt sich dann über eine nicht-uniforme FFT die spektrale Information ermitteln. Datenverarbeitungsschritte wie

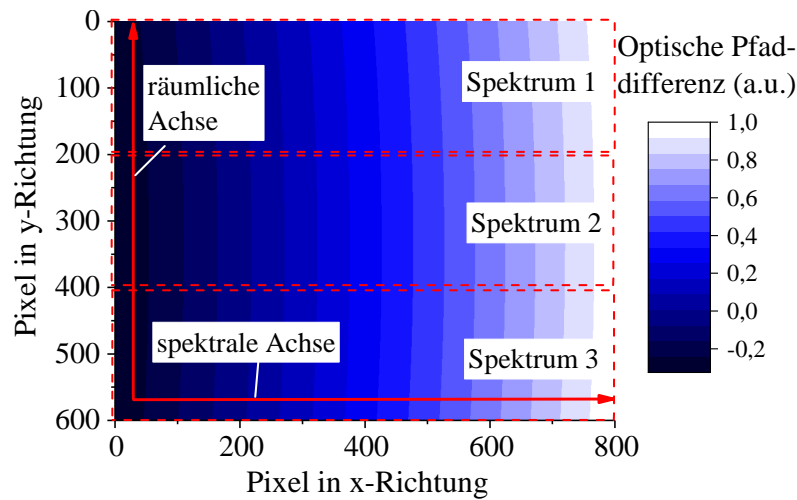


Abbildung 5.2: Typischer OPD-Verlauf eines Einzelspiegel-Interferometers mit eingezeichneter räumlicher und spektraler Achse. [138]

Filterung, Fensterung und Phasenkorrektur sind hier der Übersichtlichkeit halber nicht eingezeichnet, können aber nochmals im Detail Abschnitt 4.4, und insbesondere Abb. 4.6, entnommen werden.

Mit dem Aufbau können also ohne weitere Modifikation beispielsweise Proben vermessen werden, welche sich nur in y -Richtung signifikant ändern, was in Abschnitt 6.2.2 demonstriert wird. Für komplexere Proben wäre zudem der Einsatz eines Pushbroom-Ansatzes, wie in Abschnitt 2.4.3.4 beschrieben, denkbar. Dazu müsste das System um eine Zylinderlinse zwischen Fourierlinse und Detektor ergänzt werden, welche eine Probenlinie über die gesamte Detektorbreite abbildet.

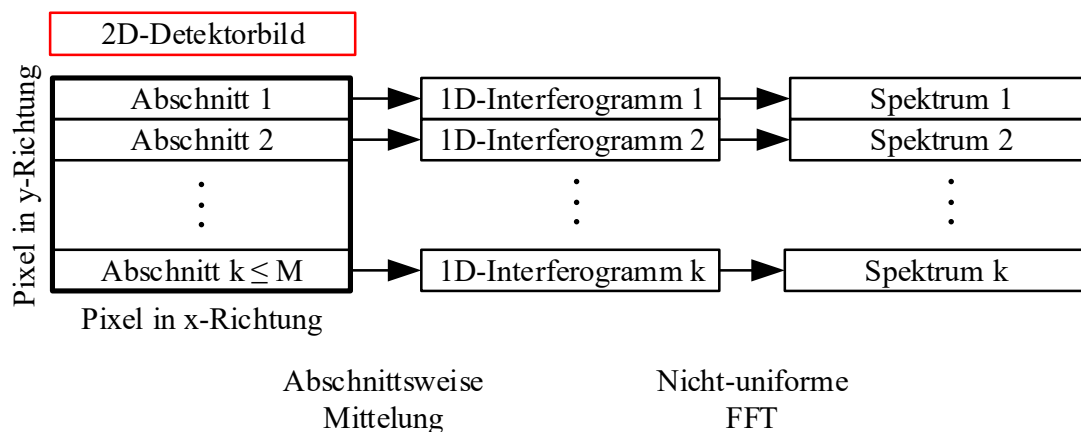


Abbildung 5.3: Datenverarbeitung für die hyperspektrale Abbildung in eine Dimension.

5.1.2 Windowing-Verfahren

Statt des Pushbroom-Verfahrens wurde in dieser Arbeit ein Windowing-Verfahren zur Aufnahme des hyperspektralen Datenwürfels verwendet. Auf diese Weise kann das komplette zweidimensionale Field of View (FOV) des sIFTS genutzt werden, was einen vergleichsweise hohen Lichtdurchsatz erlaubt. Zudem ist keine zusätzliche Zylinderoptik notwendig, was das optische Setup vereinfacht und die Kosten senkt.

Wie zuvor in Abschnitt 2.4.2.4 bereits kurz erwähnt, wird jedes Raumelement der Probe im Zuge des Windowing-Verfahrens einmal entlang der x-Achse durch das komplette FOV des sIFTS gefahren. Im Zuge dessen wird für jedes Raumelement ein Intensitätswert für jede vom Interferometer erzeugte OPD ermittelt. Dies entspricht also der Aufnahme des Interferogramms und damit des Spektrums für jedes Raumelement. Soll dies für N Raumelemente in x-Richtung durchgeführt werden, müssen also mindestens $2N - 1$ Einzelbilder während der Messung aufgenommen werden.

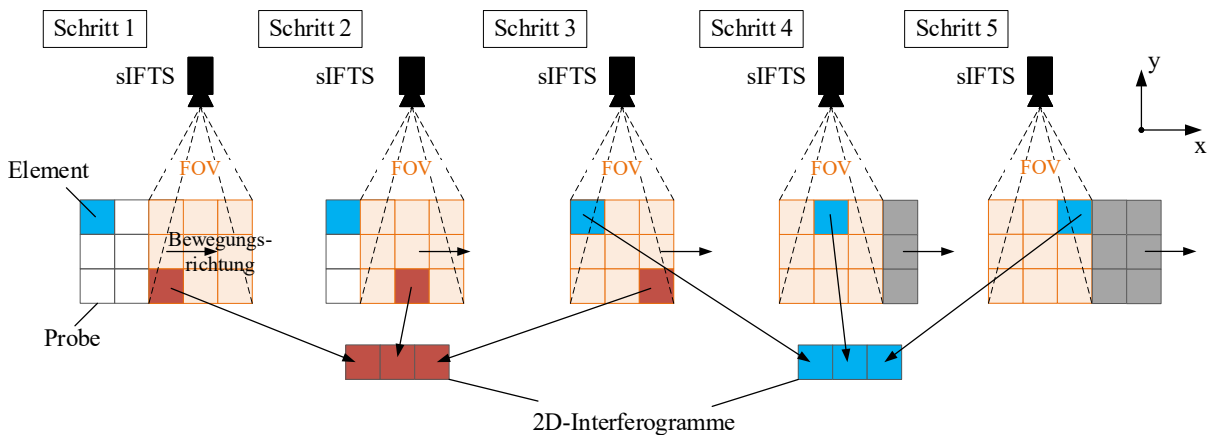


Abbildung 5.4: Schematische Darstellung des Windowing-Verfahrens zur Erfassung des hyperspektralen Datenwürfels einer Probe mit 3 x 3 räumlichen Elementen. Die 2D-Interferogramme werden nachträglich zusammengefügt. [139]

Ein einfaches Beispiel hierfür zeigt Abb. 5.4. Die Probe weist hier, wie die später in Abschnitt 6.2.3 vermessene Probe, jeweils $N = 3$ räumliche Elemente in x- und y-Richtung auf. In Schritt 1 befindet sich nur die rechte Spalte der Probe im FOV des sIFTS. Anschließend wird die Probe Spalte für Spalte bewegt, bis jedes räumliche Element einmal jede Spalte des FOV passiert hat.

Anschließend werden die aufgenommenen Detektorbilder so umsortiert, dass für jedes Raumelement ein komplettes 2D-Interferogramm vorliegt, welches dann gemäß der in Abschnitt 4.4 beschriebenen Methode wiederum zunächst in ein 1D-Interferogramm und dann

in ein Spektrum umgerechnet werden kann. Diese Interferogrammfusion ist beispielhaft für zwei unterschiedliche Raumelemente in Abb. 5.4 dargestellt.

Während die räumliche Auflösung in x-Richtung also von der Anzahl der aufgenommenen Bilder abhängt, könnte die Auflösung in y-Richtung in diesem Fall, wie im vorherigen Abschnitt 5.1.1 aufgezeigt, wesentlich feiner gewählt werden, da prinzipiell für jede Detektorzeile ein Spektrum berechnet werden kann. Daher ist die räumliche Auflösung in y-Richtung lediglich durch die Abbildungsoptik sowie die Anzahl der Pixel in dieser Dimension eingeschränkt.

5.2 Experimenteller Aufbau

Um das vorgeschlagene sIFTS-Konzept zu validieren, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Transmissionsaufbau gemäß Abbildung 5.5 entworfen. Hier wird eine Global-Lichtquelle, die eine Temperatur von 1375 °C erreicht, mithilfe zweier Germaniumlinsen L_C und L_1 auf eine Blende mit variablem Durchmesser d_a vergrößert. Die Brennweiten f_C und f_1 wurden hier zu 40 mm bzw. 75 mm gewählt. Die Blende befindet sich in der vorderen Brennebene einer weiteren Linse L_2 mit einer Brennweite f_2 von 75 mm , wodurch die Probe annähernd kollimiert beleuchtet wird.

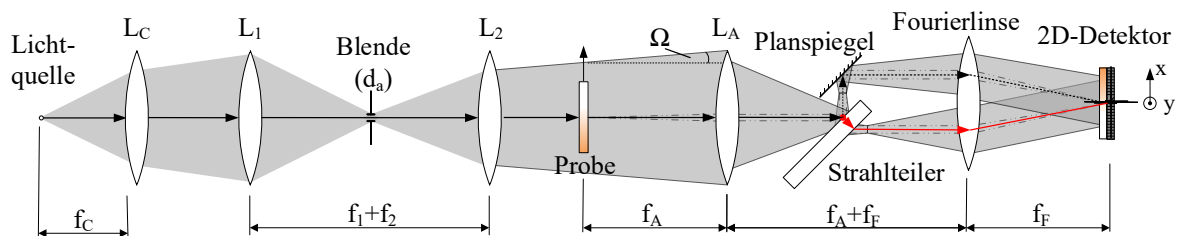


Abbildung 5.5: Schematische Übersicht des experimentellen Aufbaus zur Validierung des sIFTS. [139]

Um trotz Beugungs- und Streuungseffekten an der Probe sowie relativ großen Kollimierungsfehlerwinkeln Ω eine möglichst exakte Abbildung zu erhalten, wird die Probe in der vorderen Brennebene der Spektrometereingangslinse L_A angeordnet. Zur Umsetzung des Windowing-Verfahrens kann die Probe mithilfe eines motorisierten Lineartisches (Thorlabs – NRT150/M) mit einer Maximalgeschwindigkeit von 30 mm s^{-1} entlang der x-Achse verfahren werden.

Die Abbildung eines Punktes der Probe ist ebenfalls gestrichelt in Abb. 5.5 gekennzeichnet. Die einzelnen Strahlen werden in diesem Fall mit Linse L_A kollimiert und anschließend

von der Fourierlinse analog zu Abb. 5.1 auf das Mikrobolometerarray refokussiert. Dabei ist zu beachten, dass nur Strahlen innerhalb des Akzeptanzwinkels des Spektrometers, welcher $1,1^\circ$ beträgt, den Detektor erreichen.

Der ZnSe-Strahlteiler (Spectral Systems) hat einen Durchmesser von 25,4 mm und eine Dicke von 3,1 mm, der Planspiegel ist goldbeschichtet und weist einen Durchmesser von 12,7 mm auf. Da sowohl die Abbildungslinse L_A , als auch die Fourierlinse eine Brennweite von 75 mm aufweisen, ergibt sich in dieser Konfiguration eine Vergrößerung $M = 1$.

Alle Linsen bestehen aus Germanium und sind mit einer Antireflexionsbeschichtung für einen Spektralbereich von $3\ \mu\text{m}$ bis $12\ \mu\text{m}$ versehen. Als Detektor wurde wiederum ein $800\ \text{px} \times 600\ \text{px}$ Mikrobolometerarray (GUIDE Infrared – CUBE 817) verwendet, welches ein breitbandiges MIR-Fenster sowie einen Pixel-Pitch von $17\ \mu\text{m}$ aufweist. Die Detektorgröße beträgt also $13,6\ \text{mm} \times 10,2\ \text{mm}$ und das FOV beträgt $10,36^\circ \times 7,78^\circ$.

Die erzielbare räumliche Auflösung hängt entscheidend vom Divergenzwinkel Ω ab, mit dem die Probe bestrahlt wird. Dieser Winkel kann hier über eine einstellbare Blende kontrolliert werden. Je kleiner der Blendendurchmesser d_a und je größer die Brennweite f_2 , desto kleiner ist der Divergenzwinkel gemäß Gleichung (5.1) und desto besser ist die räumliche Auflösung des abbildenden Spektrometers.

$$\Omega = \arctan\left(\frac{d_a}{2f_2}\right) \quad (5.1)$$

In der Praxis gilt es zwischen Lichtdurchsatz und räumlicher Auflösung abzuwägen, da die Blende den Lichtdurchsatz einschränkt und unter Umständen Beugungseffekte in Betracht gezogen werden müssen.

5.3 Designvarianten und Optimierungsmöglichkeiten

In diesem Abschnitt werden nun abschließend Varianten des sIFTS vorgestellt, welche Möglichkeiten für weiterführende Forschung und Entwicklung bieten. Neben einer Pushbroom-Variante wird auf einen Aufbau zur Messung in Reflexion sowie ein sIFTS für den sichtbaren Spektralbereich eingegangen.

5.3.1 Pushbroom-Variante

Durch die Ergänzung des sIFTS um eine Zylinderlinse L_c zwischen Fourierlinse und Detektorarray lässt sich eine Pushbroom-Variante umsetzen (vgl. Abschnitt 2.4.3.4). Diese bietet zwar unter Umständen eine geringere Lichtausbeute als die zuvor vorgestellte

Windowing-Variante, jedoch ist die Datenauswertung vergleichsweise einfach, was eine Überführung des Konzepts in das industrielle Umfeld erleichtern könnte. Abbildung 5.6 zeigt die Ray-Tracing-Simulation einer möglichen Umsetzung.

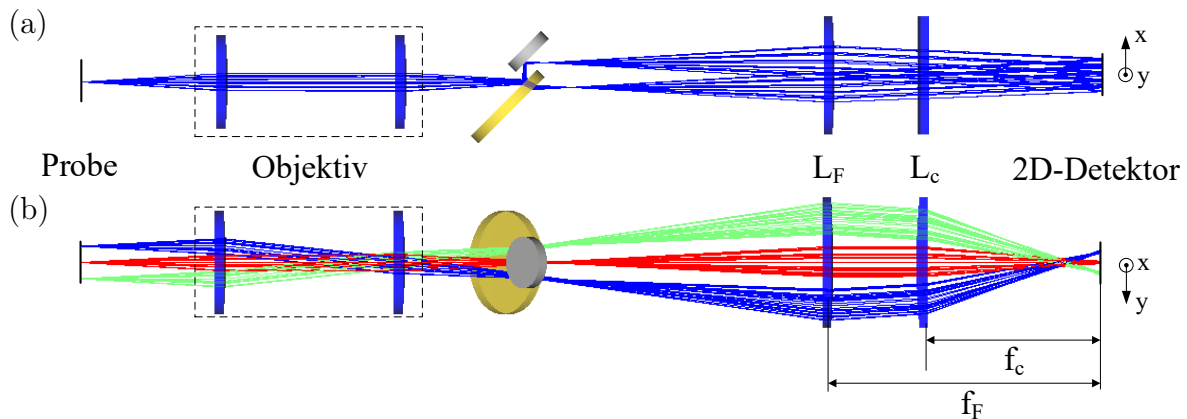


Abbildung 5.6: Ray-Tracing-Simulation einer Pushbroom-Variante des sIFTS. Eine Linie in y-Richtung wird auf den Detektor abgebildet. (a) Abbildung der Linie über gesamte Detektorbreite in x-Richtung; (b) Abbildung einzelner Punkte in y-Richtung.

Dabei wird eine Linie der Probe in y-Richtung zunächst über zwei plano-konvexe Germaniumlinsen in das Interferometer abgebildet. Aus der Ansicht von oben in Abb. 5.6(a) ist ersichtlich, dass die Linienquelle anschließend von der Fourierlinse kollimiert und somit auf die gesamte Detektorbreite abgebildet wird. Die Zylinderlinse hat in dieser Dimension keinen Einfluss. Auf diese Weise wird für jeden Punkt der Linie ein vollständiges Interferogramm in x-Richtung aufgezeichnet.

Aus der Ansicht in Abb. 5.6(b) geht nun hervor, dass jeder Punkt der Linienquelle durch die Zylinderlinse jeweils entlang der y-Richtung abgebildet wird. Dazu wird der Detektor in dieser Dimension sowohl in der hinteren Brennebene der Fourierlinse, als auch in der hinteren Brennebene der Zylinderlinse platziert.

Um einen vollständigen hyperspektralen Datenwürfel aufzunehmen, muss die Probe dann lediglich schrittweise oder kontinuierlich in x-Richtung verschoben werden. Denkbar wäre zudem der Einsatz einer einzelnen toroidalen Optik statt der Kombination aus Fourier- und Zylinderlinse [101].

5.3.2 Aufbau zur Messung in Reflexion

Für viele Anwendungen in der Prozessmesstechnik, wie beispielsweise zur Plastiksartierung in Recyclinganlagen [5], müssen aus praktischen Gründen Messungen in Reflexion durchgeführt werden. Mögliche Umsetzungen eines entsprechenden sIFTS-Aufbaus zeigt Abb. 5.7.

Eine Möglichkeit besteht darin, die Probe, wie in Abb. 5.7(a) schematisch dargestellt, direkt über eine oder mehrere Lichtquellen unter einem bestimmten Winkel zu beleuchten. Die reflektierte Strahlung wird daraufhin vom sIFTS analysiert. Vorteile ergeben sich hier im Hinblick auf den Lichtdurchsatz, jedoch können durch den schrägen Einfall des Lichts Abbildungsfehler entstehen.

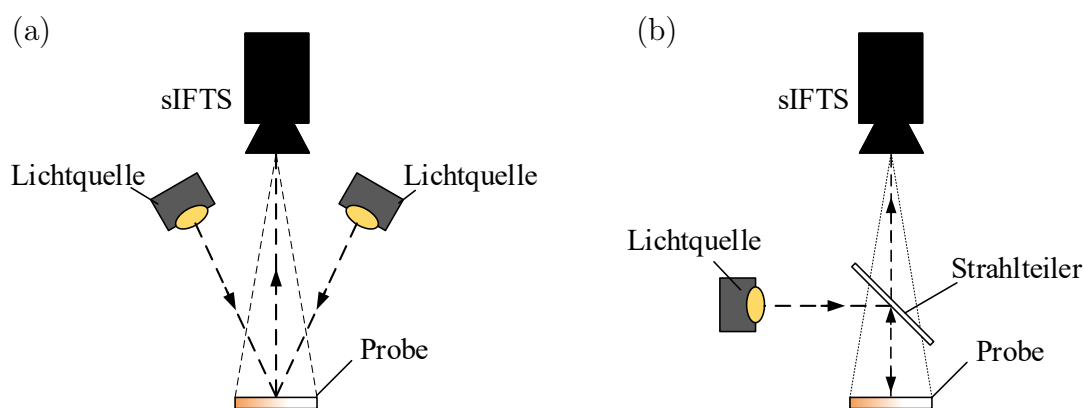


Abbildung 5.7: Mögliche Varianten zur Reflexionsmessung mit dem sIFTS. (a) Direkte Beleuchtung der Probe; (b) Indirekte, senkrechte Beleuchtung der Probe über einen Strahlteiler.

Um eine senkrechte, gleichmäßige Beleuchtung zu gewährleisten, kann auf den in Abb. 5.7(b) gezeigten Aufbau zurückgegriffen werden. Hier wird ein Strahlteiler genutzt, um einen Teil der Lichtquellenleistung auf die Probe und anschließend in das sIFTS zu leiten. Aufgrund des Funktionsprinzips gehen hier allerdings mindestens 75 % der Strahlung verloren.

Allgemein ist für viele Anwendungen zur Reflexionsmessung eine vergleichsweise geringe Lichtmenge am Detektor zu erwarten, insbesondere wenn stark absorbierende oder streuende Proben vermessen werden sollen. Hier bietet sich der Einsatz eines gekühlten Infrarotdetektors mit erhöhter Sensitivität an, was jedoch gleichzeitig die Gesamtkosten für das sIFTS signifikant erhöht.

5.3.3 Variante für den sichtbaren Bereich

Grundsätzlich lässt sich das sIFTS-Prinzip auch im sichtbaren Bereich anwenden. Im Vergleich zu dispersiven Spektrometern, die standardmäßig in diesem Spektralbereich eingesetzt werden, könnten damit auch sehr schwache Lichtquellen, beispielsweise für fluoreszenzbasierte Spektroskopie, mit einem hohen SNR analysiert werden [79]. Beispielhaft wird hier eine mögliche Spektrometerkonfiguration für einen Spektralbereich von 350 nm bis 900 nm betrachtet. Dazu wird eine handelsübliche CMOS-Kamera (Kiralux – CS895MU) mit $4096 \text{ px} \times 2160 \text{ px}$ und einem Pixel-Pitch von $3,45 \mu\text{m}$ angenommen. Der Strahlteiler

besteht aus Quarzglas. Da dieses mit etwa 1,5 einen geringeren Brechungsindex als die im Infrarotbereich eingesetzten Materialien besitzt, wird eine Dicke von 5 mm genutzt, um die optischen Pfadlängen der beiden Interferometerarme angleichen zu können. Der Abstand d_s zwischen den virtuellen Quellen beträgt dann etwa 7 mm.

Aus Gleichung (3.10) ergibt sich für eine minimale Wellenlänge λ_{\min} von 350 nm eine Brennweite von 150 mm für die Fourieroptik. Die erzielbare Auflösung beträgt nach Gleichung (3.9) dann etwa 17 cm^{-1} . Dies entspricht einer Auflösung von 0,2 nm bei einer Wellenlänge von 350 nm sowie 1,37 nm bei einer Wellenlänge von 900 nm.

Die Kenndaten der sIFTS-Variante für den sichtbaren Bereich sind nochmals in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

Tabelle 5.1: Beispielhafte Konfiguration eines sIFTS für den sichtbaren Spektralbereich.

Spektrale Bandbreite	350 nm - 900 nm
Spektrale Auflösung	17 cm^{-1}
Strahlteiler	Quarzglas; Dicke 5 mm
Kamera	CMOS; $4096 \text{ px} \times 2160 \text{ px}$; $p_{\text{pix}}=3,45 \text{ }\mu\text{m}$

Kapitel 6

Ergebnisse und Diskussion

In diesem Kapitel werden abschließend ausgewählte Messergebnisse vorgestellt, um die in den vorangegangenen Kapiteln vorgestellten sFTS-Konzepte zu validieren. Dazu wird zunächst die Funktionalität des in Kapitel 4 vorgestellten breitbandigen statischen Fourier-Transformations-Spektrometers (bsFTS) überprüft, im Anschluss wird das in Kapitel 5 diskutierte abbildende Fourier-Transformations-Spektrometer (sIFTS) evaluiert.

6.1 Breitbandiges statisches Fourier-Transformations-Spektrometer

Zur Evaluierung des bsFTS wurden zunächst einige grundsätzliche Eigenschaften wie Background-Spektrum, Signal-Rausch-Verhältnis und Wellenzahlgenauigkeit überprüft. Zudem wurden das Stufenspiegel-Konzept zur Erhöhung der spektralen Auflösung sowie die kontinuierliche Background-Korrektur validiert. Abschließend wurden einige ausgewählte Anwendungen zur Fluid- und Gasanalyse in abgeschwächter Totalreflexion bzw. Transmission durchgeführt.

6.1.1 Background-Spektrum

Zunächst wurde das Background-Spektrum und damit die spektrale Bandbreite des experimentellen Aufbaus aus Abschnitt 4.3.1 untersucht. Das entsprechende Detektorbild zeigt Abb. 6.1(a). Für eine bessere Sichtbarkeit des Interferenzmusters wurde das Bild hochpassgefiltert und um den Mid-Peak des Interferogramms vergrößert.

Wie anhand der Simulation der OPD-Standardabweichung aus Abb. 4.2(b) zu erwarten, kann ein Detektorbereich von etwa 350 Pixeln identifiziert werden, in dem der Interfe-

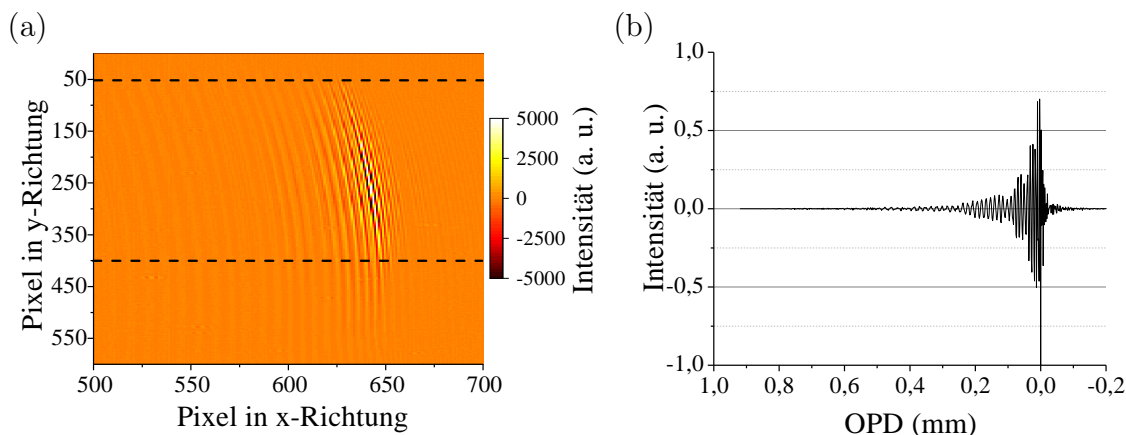


Abbildung 6.1: (a) Hochpassgefiltertes Detektorbild einer Background-Messung mit dem bsFTS. Das Bild ist um den Bereich des Mid-Peaks vergrößert; (b) Hochpassgefiltertes, gefensteretes 1D-Interferogramm der Background-Messung. [136]

rogrammkontrast ausreichend hoch ist. Dieser Bereich ist in Abb. 6.1(a) gekennzeichnet. Außerhalb dieses Bereichs nimmt der Kontrast in y-Richtung stark ab. Das erreichbare Signal-Rausch-Verhältnis ist also stark vom ausgewerteten Detektorbereich abhängig. Dies könnte in Zukunft durch das Verwenden einer Freiformoptik als Fourierelement optimiert werden.

Anschließend wird gemäß Abschnitt 4.4 das zugehörige Background-Spektrum Schritt für Schritt berechnet. Zunächst wird das Detektorbild entlang der kalibrierten Linien identischer OPD gemittelt und auf den Maximalwert normiert, um das in Abb. 6.1(b) gezeigte 1D-Interferogramm zu erhalten. Zur Apodisierung wurde hier ein Dreiecksfenster verwendet. Der Mid-Peak des Interferogramms wurde durch ein Anpassen der Distanz $d_{\text{ST-PS}}$ zwischen Strahlteiler und Planspiegel aus der Zentralposition verschoben. Dadurch ergibt sich eine größere maximale OPD auf dem Detektor, was gemäß Gleichung (2.39) zu einer höheren spektralen Auflösung führt. In diesem Aufbau beträgt die maximale OPD etwa 0,9 mm, was einer spektralen Auflösung von etwa 12 cm^{-1} entspricht.

Das Background-Spektrum, welches abschließend mit einer nicht-uniformen Fourier-Transformation [31] aus dem 1D-Interferogramm berechnet wird, ist in Abb. 6.2(a) abgebildet. Die Hüllkurve des Spektrums wird maßgeblich durch drei Einflussfaktoren bestimmt, welche ebenfalls eingezeichnet sind. Ein Ende des messbaren Spektralbereichs wird über die Transmissionskurve des verwendeten Langpassfilters definiert, welcher eine Cut-On-Wellenzahl von etwa 2770 cm^{-1} aufweist. Durch diese Beschränkung des Spektralbereichs wird sichergestellt, dass das Nyquist-Kriterium nach Gleichung (3.10) eingehalten wird. Allerdings führt der Langpassfilter durch nicht-ideale Transmissionseigenschaften auch zu deutlichen Signaleinbußen bei etwa 1225 cm^{-1} und 900 cm^{-1} . Die vergleichsweise niedrige

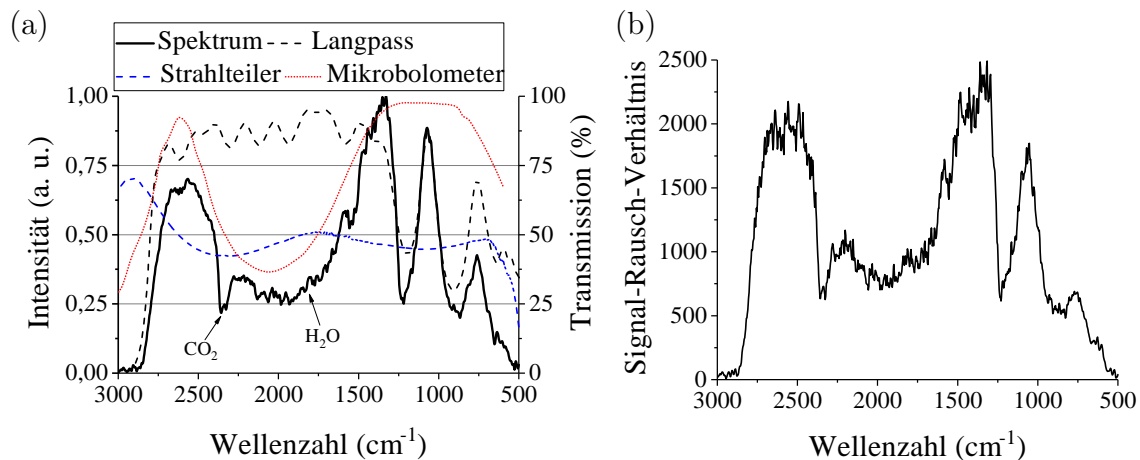


Abbildung 6.2: (a) Mit dem bsFTS gemessenes Background-Spektrum. Zusätzlich sind mit den Transmissionskurven des Langpassfilters, des Strahlteilers und des Mikrobolometers entscheidende Einflussfaktoren gekennzeichnet; (b) Signal-Rausch-Verhältnis des Background-Spektrums ohne zeitliche Mittelung. [136]

Signalstärke zwischen 2375 cm^{-1} und 1800 cm^{-1} ist auf die bereits in Abschnitt 3.2.3 diskutierte Übertragungsfunktion des verwendeten Mikrobolometerarrays zurückzuführen. Diese zeigt das typische Verhalten eines optischen Resonators mit Dicke $2,5\text{ }\mu\text{m}$ [107]. Zudem wird die Sensitivität durch das integrierte Germaniumfenster des Detektors beeinflusst.

Am unteren Ende des Wellenzahlbereichs zeigen alle drei betrachteten Komponenten niedrige Transmissionseigenschaften. Der Haupteinflussfaktor ist hier der Strahlteiler, dessen Beschichtung nicht für Wellenzahlen unterhalb 650 cm^{-1} ausgelegt ist. Auffallend sind zudem typische Absorptionspeaks aufgrund von CO_2 - und H_2O -Molekülen in der Umgebungsluft.

Abbildung 6.2(b) zeigt schließlich das Signal-Rausch-Verhältnis des Aufbaus ohne zeitliche Mittelung. Dazu wurden 500 Detektorbilder aufgenommen und das Rauschen als einfache Standardabweichung des Signals berechnet. Das SNR folgt der Hüllkurve des Background-Spektrums mit Maximalwerten bei etwa 1350 cm^{-1} und 2560 cm^{-1} .

6.1.2 Wellenzahlgenauigkeit

Um die Wellenzahlgenauigkeit des bsFTS zu evaluieren, wurde zunächst eine Polystyrolkalibrierfolie mit einer Dicke von 3 mil, bzw. $76,2\text{ }\mu\text{m}$ vermessen und mit einem Referenz-FTIR-Spektrometer (Thermo Fisher – Avatar 300) verglichen.

Analog zu Abb. 6.1 zeigt Abb. 6.3 das entsprechende Detektorbild sowie das zugehörige 1D-Interferogramm. Für eine bessere Vergleichbarkeit mit der Background-Messung wurde das Interferogramm in Abb. 6.3(b) wiederum auf den Maximalwert des Background-

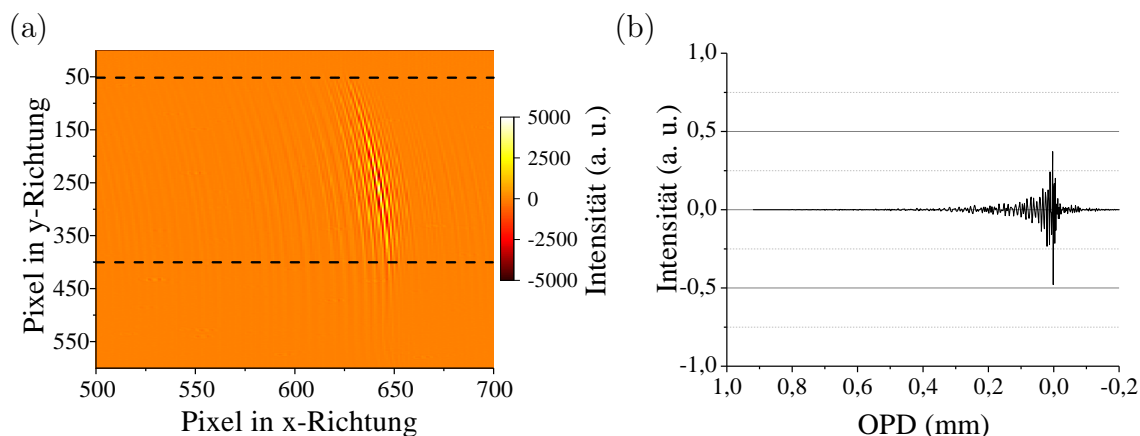


Abbildung 6.3: (a) Hochpassgefiltertes Detektorbild der Polystyrol-Messung mit dem bsFTS. Das Bild ist um den Bereich des Mid-Peaks vergrößert; (b) Hochpassgefiltertes, gefensteretes 1D-Interferogramm der Polystyrol-Messung. [136]

Interferogramms normiert. Der Mid-Peak ist vergleichsweise schwach ausgeprägt und das Signal erscheint leicht verbreitert, da die Polystyrolprobe einen signifikanten Teil der einfallenden Strahlung absorbiert.

Abbildung 6.4 zeigt schließlich den Vergleich des ermittelten Transmissionsspektrums mit dem Labor-FTIR-Spektrometer. Nach Korrektur der Wellenzahlachse des bsFTS mithilfe der Ergebnisse aus Abb. 4.2(a) lässt sich eine hohe Übereinstimmung der gemessenen Spektren feststellen.

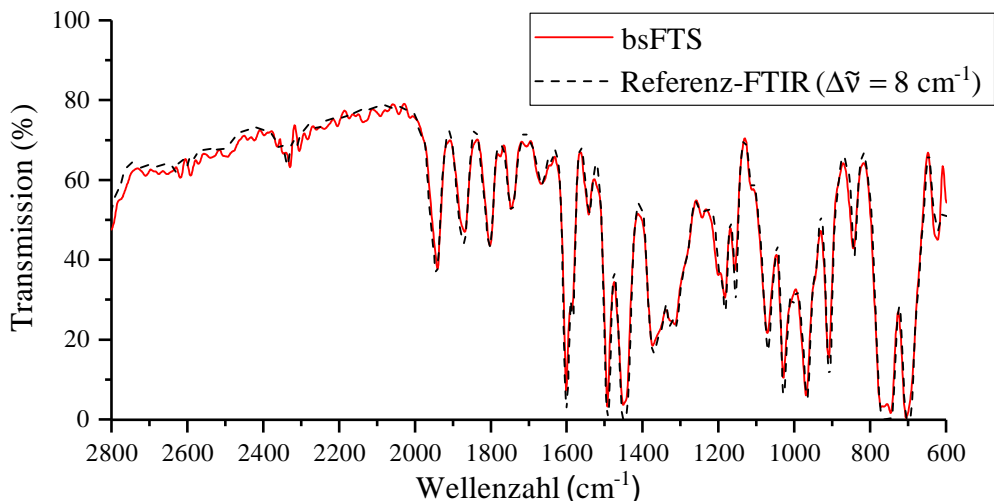


Abbildung 6.4: Messung eines 3 mil Polystyrol-Kalibrierstandards mit dem bsFTS im Vergleich zu einem Labor-FTIR-Spektrometer. [136]

Da das Laborgerät mit 8 cm^{-1} eine leicht höhere spektrale Auflösung aufweist, erscheinen

die Absorptionsbanden des bsFTS jedoch schwächer ausgeprägt. Die leichte Abweichung der Transmissionswerte im Bereich von 2100 cm^{-1} bis 2800 cm^{-1} kann durch eine unterschiedliche Platzierung der Polystyrolprobe erklärt werden. Während diese im Referenz-FTIR in einem Brennpunkt platziert wird, wird sie im bsFTS kollimiert bestrahlt.

Zur weiteren Charakterisierung des bsFTS wurden zwei Bandpassfilter vermessen. Diese weisen Zentralwellenlängen λ_z von $9,85\text{ }\mu\text{m}$ und $10,5\text{ }\mu\text{m}$ bei Halbwertsbreiten von $140\text{ nm} \pm 20\text{ nm}$ bzw. $150\text{ nm} \pm 20\text{ nm}$ auf. Die entsprechenden Interferogramme zeigt Abb. 6.5(a).

Hier wurde die Nullposition der OPD leicht in Richtung Detektormitte verschoben, um die gesamte Hüllkurve der Signale auf dem Detektor abbilden zu können. Da die Bandpässe nur einen sehr schmalbandigen Bereich des Spektrums passieren lassen, ergeben sich vergleichsweise schwach abklingende Interferogramme. Obwohl beide Bandpassfilter annähernd gleiche Transmissionseigenschaften aufweisen, ergibt sich ein stärkeres Signal für den Filter mit Zentralwellenlänge $9,85\text{ }\mu\text{m}$ bzw. Zentralwellenzahl 1015 cm^{-1} , da das Spektrometer hier gemäß Abb. 6.2 eine höhere Sensitivität aufweist.

Die zugehörigen Spektren finden sich in Abb. 6.5(b). Die Maxima der beiden bandpassgefilterten Spektren werden an den korrekten Stützstellen verortet, die gemessenen Halbwertsbreiten von 143 nm und 147 nm liegen im Toleranzbereich der Filterspezifikation.

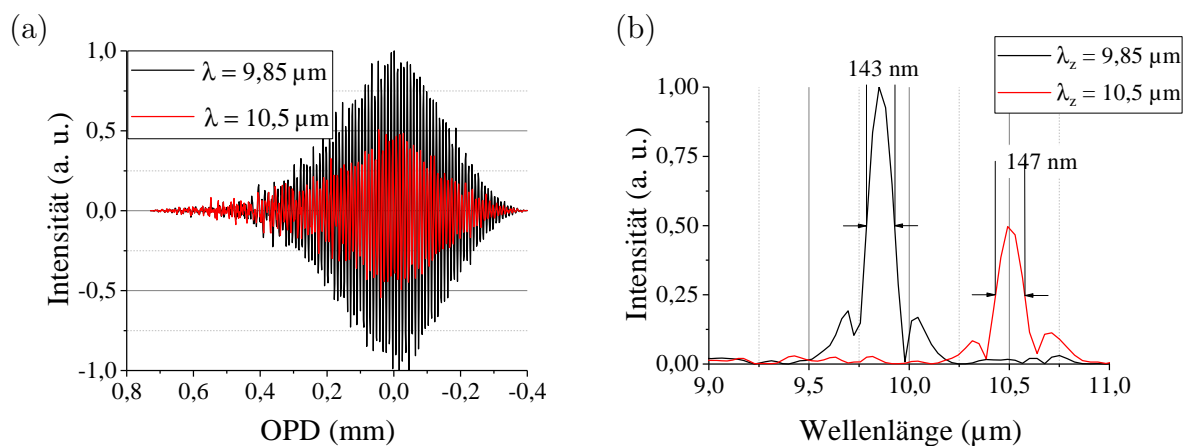


Abbildung 6.5: (a) Interferogramme von zwei Bandpassfiltern; (b) Zugehörige Spektren mit gekennzeichneten Halbwertsbreiten.

6.1.3 Stufenspiegel-Variante

Um die grundsätzliche Funktionsweise des in Abschnitt 4.5 vorgestellten Stufenspiegel-Designs zu validieren, wurde ein CO_2 -Laser (Access Laser – L4G) mit einer Wellenlänge von $9,4\text{ }\mu\text{m}$ gemessen. Vor Einkopplung in den Spektrometernaufbau wurde der Laser zunächst aufgeweitet, um den gesamten Detektor auszuleuchten. Einen Ausschnitt des

entsprechenden Detektorbildes zeigt Abb. 6.6. Zu erkennen sind zwei räumlich getrennte Interferenzbereiche, welche den beiden Spiegelstufen entsprechen. In der Mitte des Detektors findet sich ein Bereich ohne erkennbare Interferenzeffekte, welcher vor allem durch die nicht-ideale Stufenkante verursacht wird.

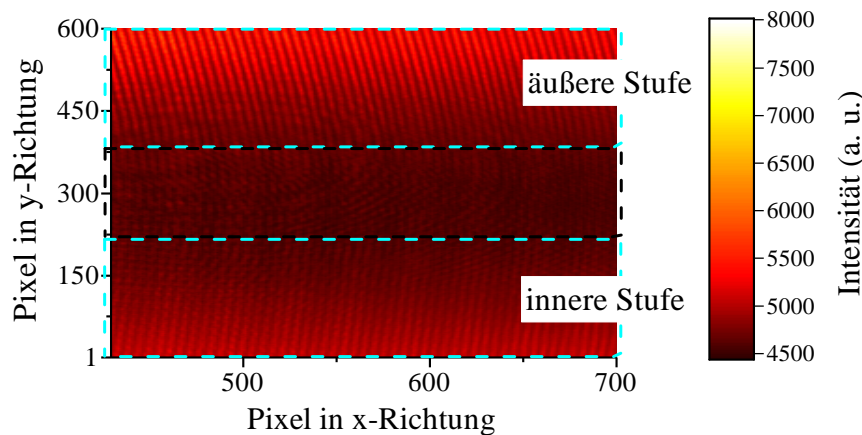


Abbildung 6.6: Detektorbild bei Aufnahme eines CO_2 -Lasers der Wellenlänge $9,4\ \mu\text{m}$ mit dem Stufenspiegel Aufbau. [141]

Abbildung 6.7 zeigt die durch Mittelung des Detektorbildes ermittelten Interferogramme. Wird nach Standardverfahren über die gesamte Detektorhöhe in y-Richtung gemittelt, so ergibt sich die in Abb. 6.7(a) gezeigte Schwebung im Interferogramm. Dies weist darauf hin, dass auf dem Detektor, wie nach Gleichung (4.4) zu erwarten, durch den Stufenspiegel tatsächlich zwei unterschiedliche Raumfrequenzen erzeugt werden.

Werden die beiden in Abb. 6.6 gekennzeichneten Detektorbereiche einzeln ausgewertet, so lassen sich die beiden Raumfrequenzen trennen und jede Spiegelstufe liefert ein kosinusförmiges Interferogramm. Abbildung 6.7(b) zeigt einen Ausschnitt der entsprechenden Signale. Zu erkennen ist, dass das Interferogramm der äußeren Stufe erwartungsgemäß eine leicht höhere Raumfrequenz aufweist, was durch den höheren vertikalen Abstand der virtuellen Quellen zu erklären ist.

Im nächsten Schritt wurde die OPD für jedes Pixel, bzw. jeden Datenpunkt der Teilinterferogramme bestimmt, um diese im Anschluss korrekt zu einem Gesamtinterferogramm fusionieren zu können. Dazu wurde ein ähnlicher Ansatz wie der in [60] beschriebene gewählt. Zunächst wurde eine breitbandige Lichtquelle (Hawkeye Technologies – IR-Si207) gemessen, um den Mid-Peak des Interferogramms und damit den Ursprung der OPD-Achse zu ermitteln. Anschließend wurde das Laserinterferogramm genutzt, um mit Gleichung (3.3) und Gleichung (3.4) die OPD-Achse zu kalibrieren.

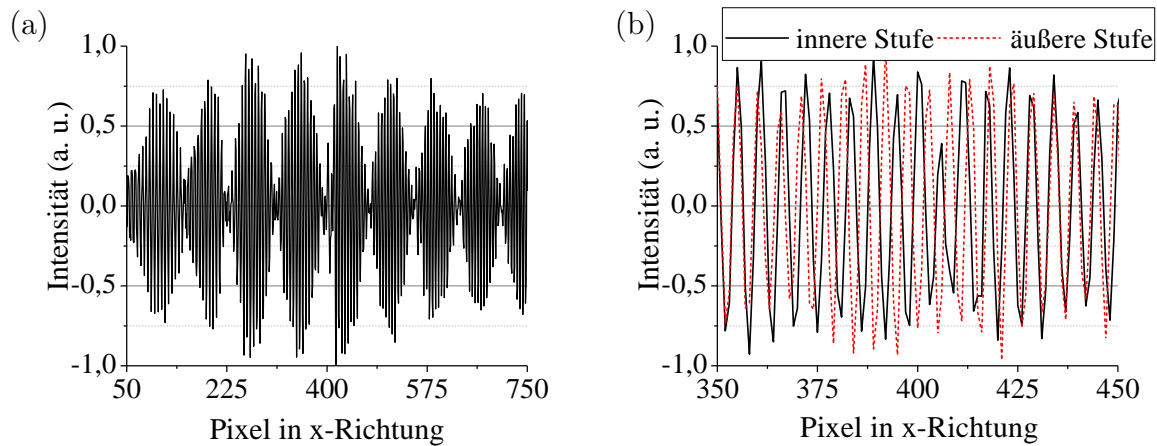


Abbildung 6.7: (a) 1D-Interferogramm bei Standardauswertung bzw. Mittelung über die gesamte y-Dimension des Detektors; (b) Teilinterferogramme bei getrennter Auswertung der beiden Detektorhälften. [135, 141]

Abbildung 6.8 zeigt die entsprechenden Teilinterferogramme. Im Überlappbereich ist eine perfekte Übereinstimmung der Phasenlagen zu beobachten, was auf die Eignung des verwendeten Kalibrierverfahrens schließen lässt.

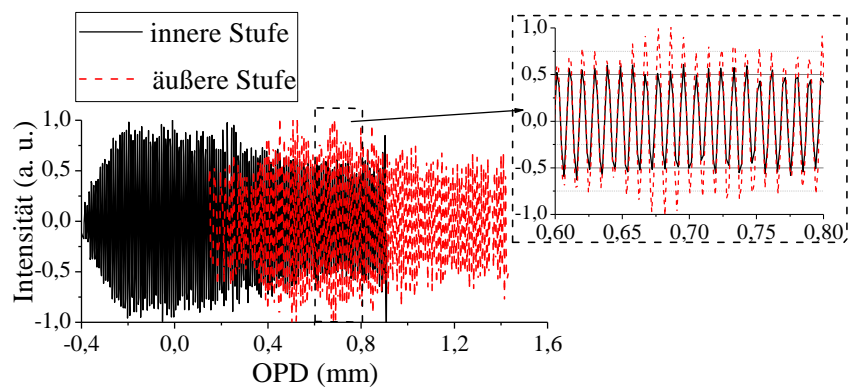


Abbildung 6.8: Kalibrierte Teilinterferogramme der beiden Spiegelstufen. [141]

Anschließend konnten die beiden Teilinterferogramme, wie in Abb. 6.9 zu sehen, zu einem Gesamtinterferogramm zusammengesetzt werden. Prinzipiell kann dazu jeder Punkt im Überschneidungsbereich der Teilinterferogramme gewählt werden. Hier wurde das komplette Interferogramm der inneren Stufe genutzt und lediglich die Punkte der äußeren Stufe angehängt, welche eine höhere OPD aufweisen.

Abbildung 6.10 zeigt schließlich den Vergleich der berechneten Spektren. Zunächst wurde lediglich das Teilinterferogramm der inneren Stufe betrachtet, was dem Standardaufbau des bsFTS entspricht. Mit einer maximalen OPD von etwa 0,9 mm ergibt sich nach Gleichung (2.39) wiederum eine spektrale Auflösung von etwa 12 cm^{-1} . Das fusionierte

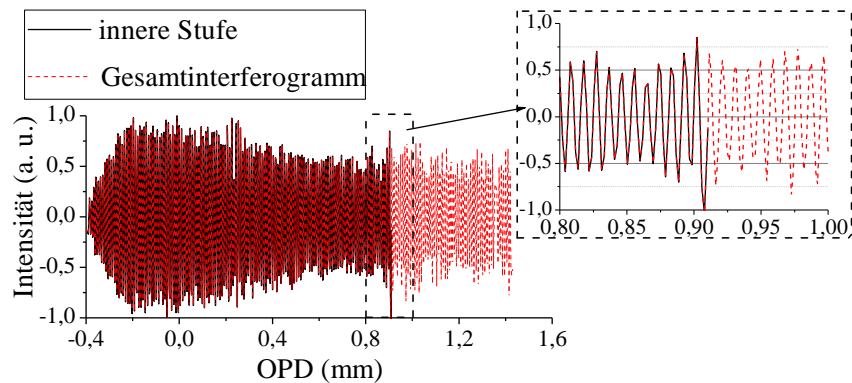


Abbildung 6.9: Fusioniertes Gesamtinterferogramm mit erhöhter maximaler optischer Pfaddifferenz. [141]

Gesamtinterferogramm dagegen liefert bei einer maximalen OPD von etwa 1,5 mm eine verbesserte spektrale Auflösung von 7 cm^{-1} , was die Simulationsergebnisse in Abschnitt 4.5 bestätigt.

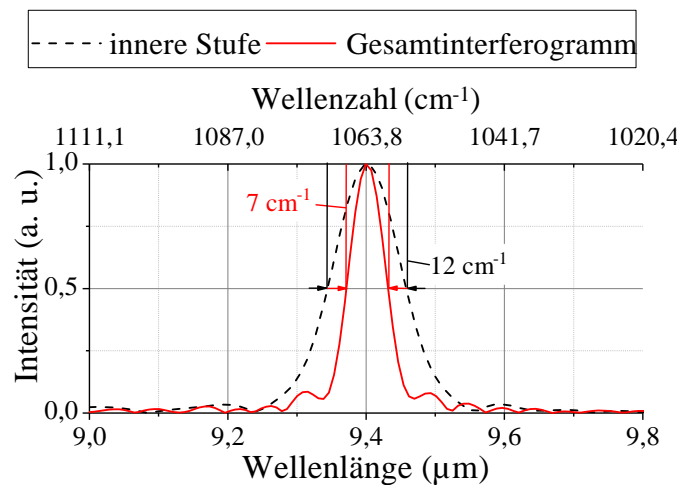


Abbildung 6.10: Gemessenes Laserspektrum bei Auswertung des Teilinterferogramms der inneren Stufe und bei Betrachtung des fusionierten Gesamtinterferogramms mit erhöhter spektraler Auflösung. [141]

Während das Stufenspiegel-Konzept sowie das Kalibrierverfahren also mit einem Laser validiert werden konnten, ergeben sich bei Verwendung einer ausgedehnten Lichtquelle einige zusätzliche Herausforderungen. Diese wurden im Rahmen dieser Arbeit anhand von Zemax-Simulationen untersucht.

Die entsprechenden OPD-Verläufe für unterschiedliche Lichtquellendurchmesser d_{LQ} sind in Abb. 6.11 dargestellt. Zu erkennen ist ein Verschwimmen der Stufenkante bei steigender Lichtquellengröße, d.h. den Pixeln können keine festen OPD-Werte mehr zugeordnet

werden. Dies führt zu einer räumlichen Überschneidung der beiden Teilinterferogramme auf dem Detektorarray, was eine Trennung erschwert oder im Extremfall unmöglich macht.

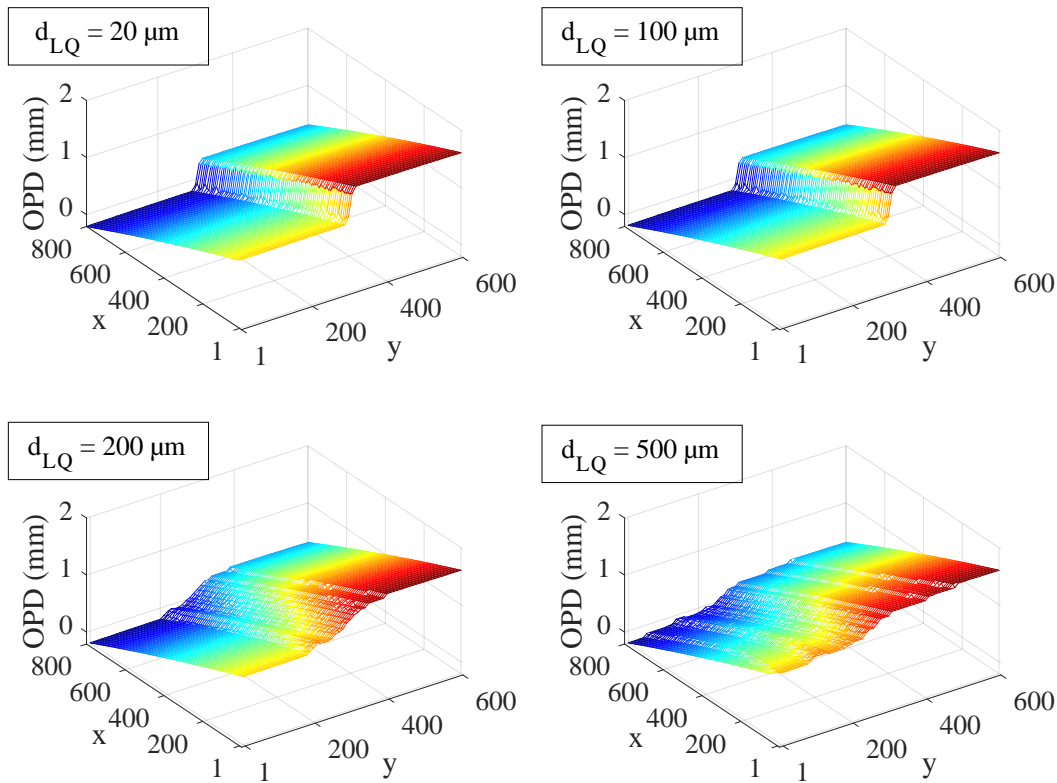


Abbildung 6.11: Simulation des Einflusses des Lichtquellendurchmessers d_{LQ} auf den OPD-Verlauf der Stufenspiegel-Variante.

Um diesen Effekt messtechnisch zu untersuchen, wurde ein Globar mit dem Stufenspiegel-Aufbau gemessen. Die Lichtquelle hat einen Durchmesser von etwa 4 mm und erzeugt das in Abb. 6.12(a) gezeigte Detektorbild. Hier wurde ein Hochpassfilter angewendet, um die Interferenzerscheinungen hervorzuheben. Das Spektrometer wurde dabei so justiert, dass beide Spiegelstufen einen Mid-Peak auf dem Detektor erzeugen. Zu erkennen ist, dass aufgrund der großen Lichtquellenausdehnung beide Teilinterferogramme, wie aus der Simulation zu erwarten, über die gesamte Detektorhöhe erzeugt werden und somit nicht räumlich getrennt werden können. Verdeutlicht wird dies in Abb. 6.12(b). Hier wird lediglich die Detektorzeile 350 gezeigt, welche ebenfalls zweimal den Mid-Peak enthält.

In zukünftigen Arbeiten gilt es einen Lösungsansatz zu finden, um dieses Konzept auch mit ausgedehnten, breitbandigen Lichtquellen nutzen zu können. Eine Möglichkeit besteht darin, den Stufenspiegel, ähnlich wie in Abschnitt 5.3.1 beschrieben, mithilfe einer zusätzlichen Zylinderlinse zwischen Fourierlinse und Detektor in y-Richtung abzubilden.

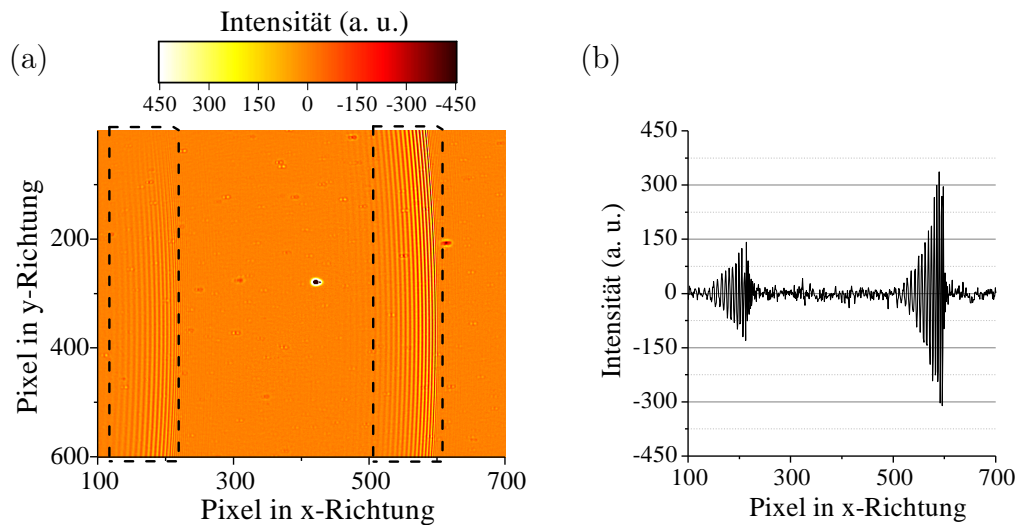


Abbildung 6.12: Aufnahme eines Globars mit dem Stufenspiegel-Aufbau. (a) Detektorbild mit markierten Interferenzerscheinungen über die gesamte Detektorhöhe.; (b) Detektorzeile 350 mit zwei zu erkennenden Mid-Peaks.

6.1.4 Kontinuierliche Background-Korrektur

Um die kontinuierliche Background-Korrekturmethode (KBKM) zu evaluieren, wurde der in Abschnitt 4.6 beschriebene Aufbau verwendet. Um mit diesem nun korrekte Transmissionsspektren aufnehmen zu können, ist zunächst ein Kalibrierschritt notwendig. Dazu wird das Background-Spektrum sowohl für den eigentlichen Background- als auch für den Proben-Pfad aufgenommen. Dies ist notwendig, da sich diese beiden Signale, wie in Abb. 6.13(a) zu erkennen, hinsichtlich ihrer spektralen Intensität leicht unterscheiden.

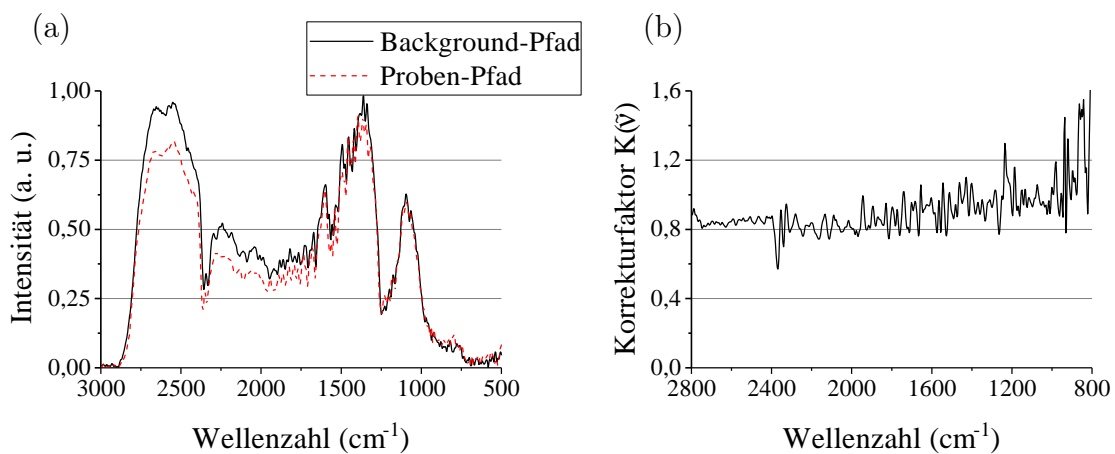


Abbildung 6.13: (a) Background-Spektren des Background- und des Proben-Pfads; (b) Entsprechender Korrekturfaktor $K(\tilde{\nu})$ zum Ausgleich der Intensitätsunterschiede. [140]

Dies ist auf eine nicht-ideal gleichförmige Ausleuchtung des Detektors, Defekte und Unrein-

heiten der Optiken sowie vor allem auf die winkelabhängigen Aberrationen zurückzuführen, welche durch den gekippten sphärischen Fourierspiegel erzeugt werden (siehe Abb. 4.2). Diese Abweichungen müssen vor der Durchführung von Messreihen kompensiert werden.

Dazu wird nach Gleichung (6.1) ein Korrekturfaktor $K(\tilde{\nu})$ für jede Wellenzahl bestimmt. Dabei ist N die Anzahl der aufgenommenen Kalibrierspektren und $b(\tilde{\nu})$ sowie $s(\tilde{\nu})$ sind die Background-Spektren des Background- bzw. des Proben-Pfades. Der entsprechende ermittelte Korrekturfaktor ist in Abb. 6.13(b) dargestellt, wobei hier $N = 50$ gewählt wurde. Das korrigierte Spektrum des Background-Pfades $b_{\text{cor}}(\tilde{\nu})$ kann dann über Gleichung (6.2) ermittelt werden [140].

$$K(\tilde{\nu}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{s(\tilde{\nu})}{b(\tilde{\nu})} \quad (6.1)$$

$$b_{\text{cor}}(\tilde{\nu}) = \frac{b(\tilde{\nu})}{K(\tilde{\nu})} \quad (6.2)$$

Nach dieser Kalibrierung wurde das Transmissionsspektrum einer Polystyrol-Kalibrierfolie mit Dicke 3 mil aufgenommen. Das entsprechende Detektorbild zeigt Abb. 6.14. Wie zu erwarten, sind auf dem Detektor zwei klar getrennte Bereiche zu erkennen. Dabei wurde der Bereich, auf den die Probe abgebildet wird, bewusst leicht größer gewählt, da sich das Background-Spektrum in der Anwendung typischerweise wesentlich langsamer ändert als das der Probe. Zudem kann ein kleiner Bereich des Detektors identifiziert werden,

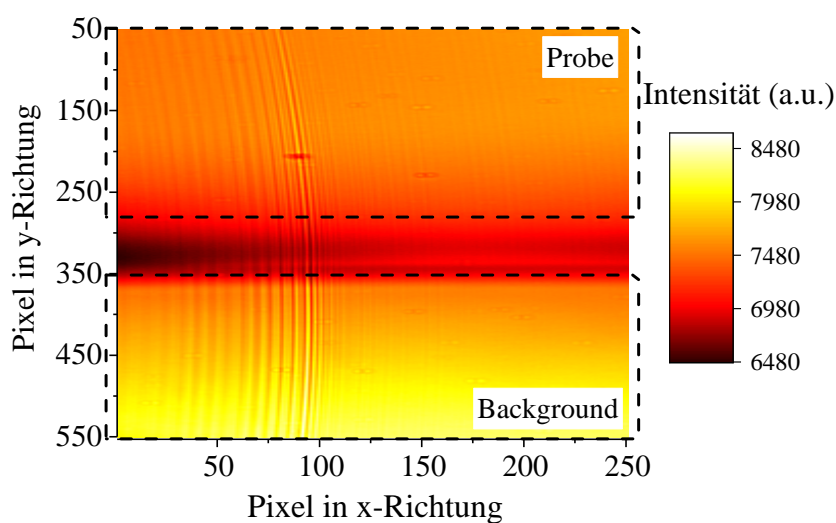


Abbildung 6.14: Detektorbild bei Messung einer Polystyrol-Kalibrierfolie mit Dicke 3 mil unter Verwendung der kontinuierlichen Background-Korrektur. Das Bild wurde um den Mid-Peak des Interferogramms vergrößert.

der nicht eindeutig einem Pfad zugeordnet werden kann. Dies wird durch die nicht-ideale Kollimierung der ausgedehnten Lichtquelle verursacht. Für eine bessere Darstellung wurde das Detektorbild auf den Bereich um den Mid-Peak des Interferogramms vergrößert.

Abbildung 6.15 zeigt nun das resultierende Transmissionsspektrum der Polystyrol-Folie im Vergleich mit einem Referenzspektrometer. Auch hier zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit der Referenzmessung, was auf die grundsätzliche Funktionalität des Aufbaus schließen lässt.

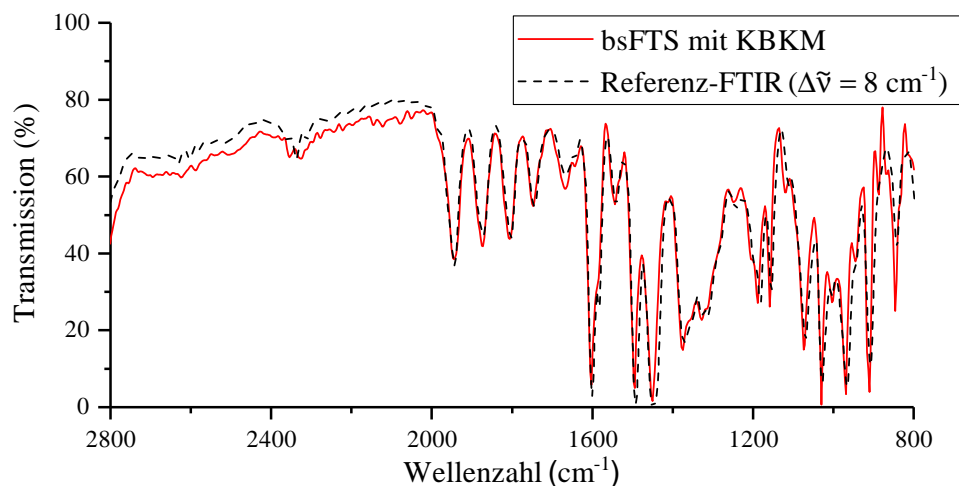


Abbildung 6.15: Messung eines 3 mil Polystyrol-Kalibrierstandards mit KBKM-Aufbau im Vergleich zu einem Labor-FTIR-Spektrometer.

Um die Funktionsweise der Methode bei schwankender Background-Intensität zu illustrieren, wurden abschließend Transmissionsmessungen derselben Kalibrierfolie mit unterschiedlichen Lichtquellenleistungen durchgeführt, was in der Praxis beispielsweise durch eine Lichtquellenalterung hervorgerufen werden kann. Die Ergebnisse zeigt Abb. 6.16. Die Leistung der Lichtquelle wurde hier über die angelegte Spannung gesteuert. Die ohne KBKM gemessenen, in blau dargestellten Transmissionsspektren wurden jeweils auf ein Background-Spektrum bezogen, welches einmalig vor der Messreihe mit einer Spannung U_{LQ} von 14 V aufgenommen wurde. Wird nun das Proben-Spektrum bei unterschiedlichen, geringeren Spannungen aufgenommen, so ergibt sich erwartungsgemäß ein deutlicher Messfehler. Die jeweilige Lichtquellenleistung für die Probenmessungen ist in der Abbildung angegeben.

Dagegen gelingt es mithilfe der KBKM, bei der Background- und Proben-Spektren jeweils gleichzeitig aufgenommen wurden, die sinkende Lichtquellenleistung zu kompensieren und auch bei einem U_{LQ} von 10 V ist eine gute Übereinstimmung zwischen den in rot gekennzeichneten Spektren und dem Referenzspektrometer zu beobachten.

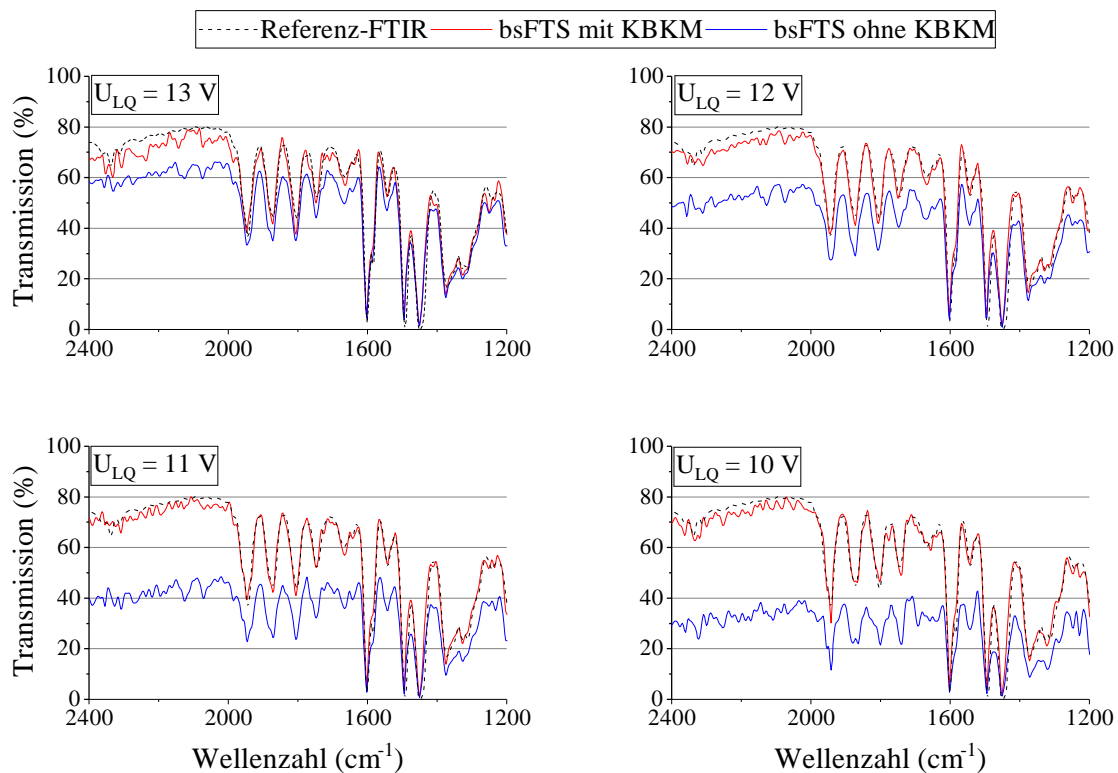


Abbildung 6.16: Messung des 3 mil Polystyrol-Kalibrierstandards bei unterschiedlichen Lichtquellenleistungen. Das Background-Spektrum für die Transmissionsspektren ohne KBKM wurde einmalig vor der Messreihe mit $U_{LQ} = 14$ V aufgenommen.

Auffallend sind vergleichsweise starke Rauscheffekte in den gemessenen Spektren. Diese sind vor allem auf die Berechnung des Korrekturfaktors $K(\tilde{\nu})$ zurückzuführen. Hier sollte die Kalibrieroutine zukünftig beispielsweise unter Verwendung eines schwarzen Hohlkörperstrahlers sowie eines durchstimmbaren Lasers optimiert werden, um genauere Ergebnisse zu erzielen.

6.1.5 Ausgewählte Anwendungen

Um das Potential des bsFTS im Hinblick auf einen industriellen Einsatz zu evaluieren, werden in diesem Abschnitt einige ausgewählte Anwendungsszenarien, die im Laufe dieser Arbeit durchgeführt wurden, vorgestellt. So wurden Flüssigkeiten und Gase quantitativ analysiert sowie einige zeitaufgelöste Messungen durchgeführt, um die Messgeschwindigkeit des Spektrometers zu unterstreichen. Für alle im Folgenden vorgestellten Versuche wurde der in Abschnitt 4.3.2 beschriebene Laborprototyp des bsFTS verwendet.

6.1.5.1 Flüssigkeitsanalyse in abgeschwächter Totalreflexion

Um die Eignung des bsFTS zur Flüssigkeitsanalyse zu evaluieren, wurde das System um einen Probenaufnehmer zur Messung in abgeschwächter Totalreflexion (ATR) erweitert. Der entsprechende Aufbau ist schematisch in Abb. 6.17 dargestellt. Als Lichtquelle wurde wiederum ein kollimierter Globar (Hawkeye Technologies – IR-Si207) verwendet. Die kollimierte Strahlung wird durch einen Off-Axis-Parabolspiegel OAP_1 mit Brennweite 101,6 mm fokussiert und mithilfe eines Planspiegels in den ATR-Kristall gekoppelt. Nach Durchlaufen des ATR-Kristalls wird die Strahlung schließlich über einen Planspiegel und einen weiteren Off-Axis-Parabolspiegel OAP_2 mit Brennweite 101,6 mm rekollimiert und zur spektralen Analyse in das bsFTS gelenkt. Wie in der vergrößerten Darstellung des ATR-Moduls zu erkennen, sind die optischen Komponenten so angeordnet, dass der Brennpunkt exakt auf der Einkoppelfläche des ATR-Kristalls liegt, um einen ausreichenden Lichtdurchsatz zu ermöglichen. Hier wurde ein Zinksulfid-Kristall verwendet, welcher insgesamt 9 Totalreflexionen an der Kristalloberfläche erzeugt.

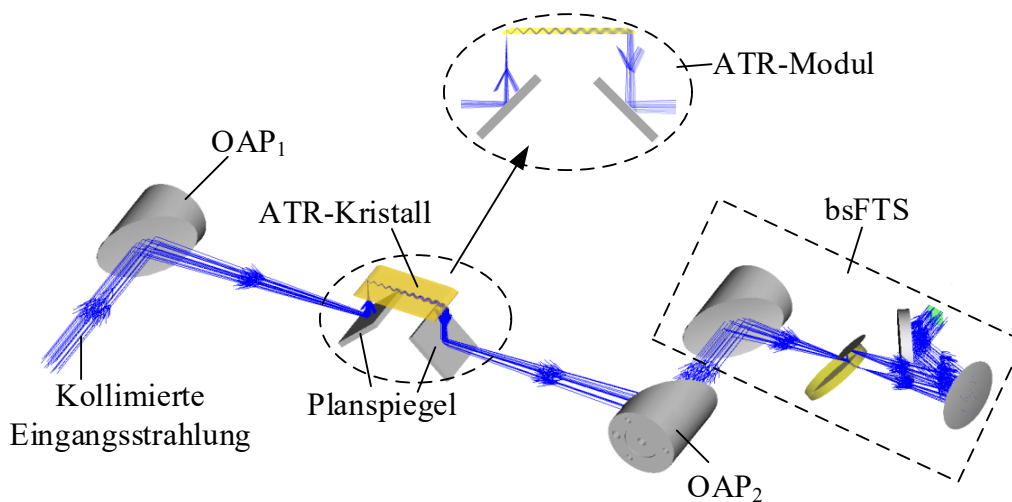


Abbildung 6.17: Ray-Tracing-Modell des entwickelten ATR-Messsystems. [143]

Die analysierten Proben bestanden aus unterschiedlichen Mischungen von Wasser (H_2O), Isopropanol (IPA), Methanol (MeOH) und Ethanol (EtOH). Alle Absorptionsspektren wurden über 25 Einzelmessungen bzw. 1 s gemittelt und anschließend mit einem Savitzky-Golay-Filter mit einer Fensterbreite von 11 Datenpunkten und einem Polynom zweiter Ordnung geglättet, um unerwünschte Rauscheffekte zu unterdrücken.

Um die Selektivität des Messsystems zu illustrieren, wurden zunächst Proben der einzelnen, reinen Flüssigkeiten gemessen. Wie anhand der entsprechenden Absorptionsspektren in Abb. 6.18(a) zu erkennen, lassen sich die unterschiedlichen Flüssigkeiten spektral klar unterscheiden. Während H_2O über den gesamten Spektralbereich mit einem Maximum bei

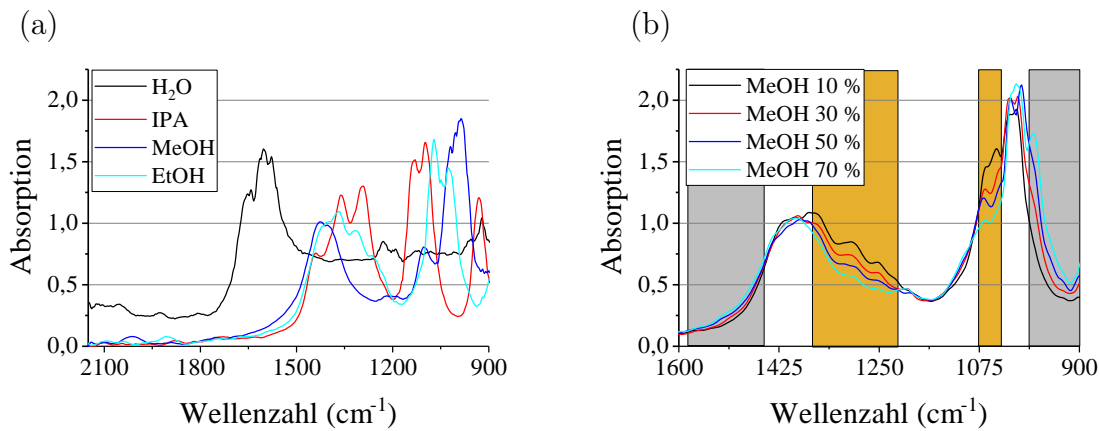


Abbildung 6.18: (a) Absorptionsspektren der einzelnen, reinen Flüssigkeiten.; (b) Absorptionsspektren von Methanol-Ethanol-Gemischen mit steigendem Methanol-Gehalt. [143]

etwa 1600 cm^{-1} absorbiert, lassen sich die restlichen Proben vor allem zwischen 900 cm^{-1} und 1600 cm^{-1} gut trennen.

Anschließend wurden Gemische aus jeweils zwei unterschiedlichen Fluiden hergestellt und analysiert. Abbildung 6.18(b) zeigt beispielhaft die Absorptionsspektren einer Mischung von Methanol und Ethanol bei steigendem Methanolgehalt. Wie zu erwarten, steigt die gemessene Absorption in den grau hinterlegten Bereichen des Spektrums, in denen die Absorption von Methanol überwiegt. Gleichzeitig fällt die Absorption in den ethanoldominierten spektralen Banden, die orange hinterlegt sind.

Mithilfe der aufgenommenen Absorptionsspektren bei bekannter Konzentration der einzelnen Bestandteile lässt sich nun ein lineares Regressionsmodell gemäß Abschnitt 2.2.3 erstellen. Hier wurde eine PLS-Regression durchgeführt, um die entsprechenden Regressionskoeffizienten zu bestimmen. Abbildung 6.19(a) zeigt die so ermittelten Methanolkonzentrationen in Ethanol, aufgetragen über den Referenzwerten. Wie nach dem Lambert-Beer-Gesetz zu erwarten, zeigt sich eine hohe Linearität des Modells. Ein Bestimmtheitsmaß von 0,99 und ein RMSE von 0,5 % indizieren zudem eine hohe Modellgüte. Ein ähnliches Resultat zeigt sich bei der Betrachtung von Isopropanol in Wasser. Das in Abb. 6.19(b) dargestellte Modell lässt ebenfalls auf die Eignung des bsFTS zur Flüssigkeitsanalyse schließen.

Um die Selektivität des Messsystems auch mit stärker überlappenden Absorptionsbanden zu evaluieren, wurden zudem Messungen von Mischungen aus H₂O, MeOH und EtOH vermessen. Auch hier ist eine zufriedenstellende Modellgüte festzustellen. Die entsprechenden Ergebnisse der PLS-Regression für den Methanol-Gehalt zeigt Abb. 6.20(a). Analog

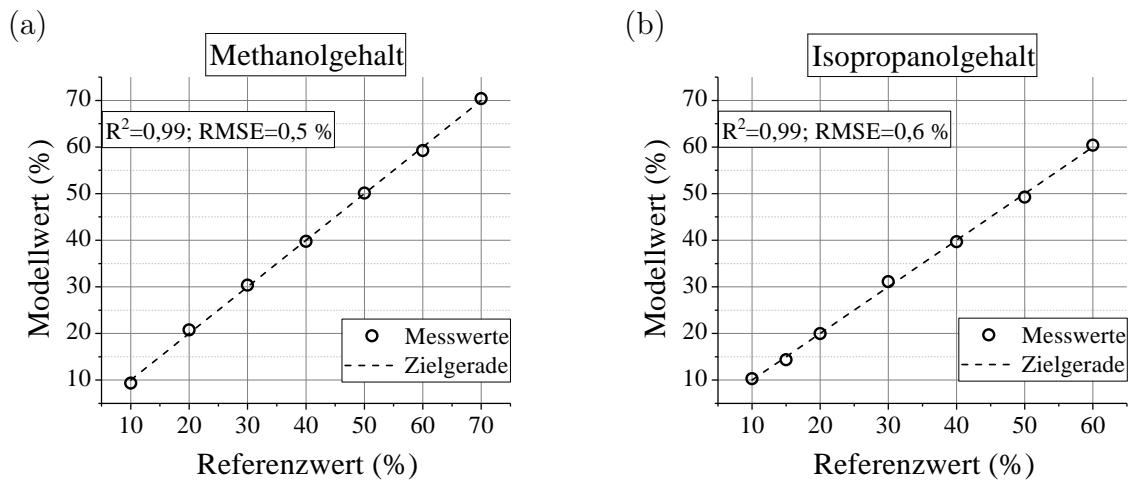


Abbildung 6.19: Verifizierung der PLS-Modelle für Gemische aus zwei Flüssigkeiten; (a) Methanol in Ethanol; (b) Isopropanol in Wasser. [143]

dazu sind die Ergebnisse für den Ethanol-Gehalt in Abb. 6.20(b) dargestellt. Zwar sind aufgrund der komplexeren Gemische leicht erhöhte RMSE-Werte festzustellen, allerdings zeigt sich dennoch ein linearer Zusammenhang bei jeweils hohem Bestimmtheitsmaß.

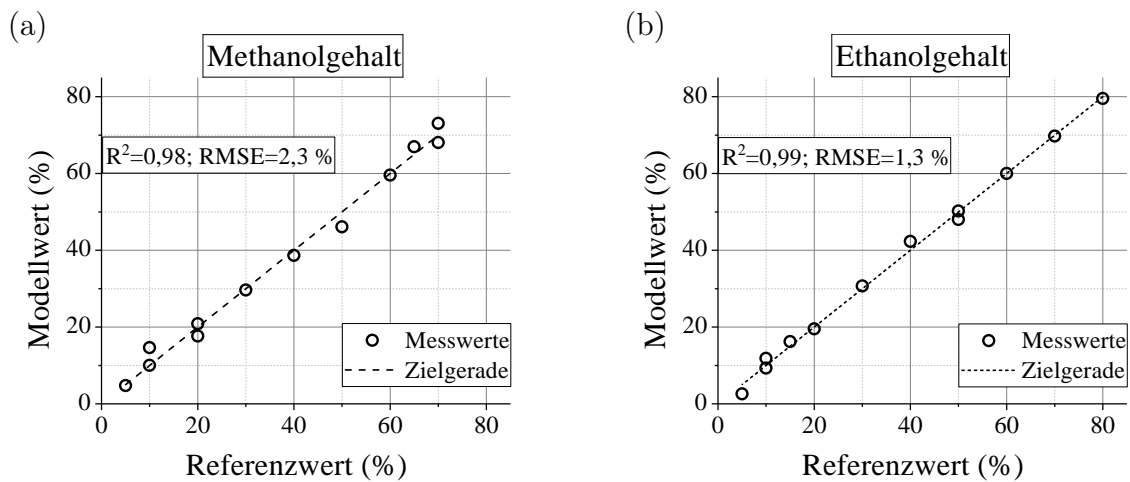


Abbildung 6.20: Verifizierung der PLS-Modelle für Gemische aus drei Flüssigkeiten; (a) Ethanol in Methanol und Wasser; (b) Methanol in Ethanol und Wasser. [143]

6.1.5.2 Zeitaufgelöste Gasanalyse

Um das Potential des bsFTS im Hinblick auf spektroskopische Untersuchungen mit hoher Zeitaufösung zu illustrieren, wurden Gasanalysen mit verschiedenen Messzellen durchgeführt. Zunächst wurde eine Single-Pass-Zelle, wie in Abb. 6.21 schematisch dargestellt, eingesetzt.

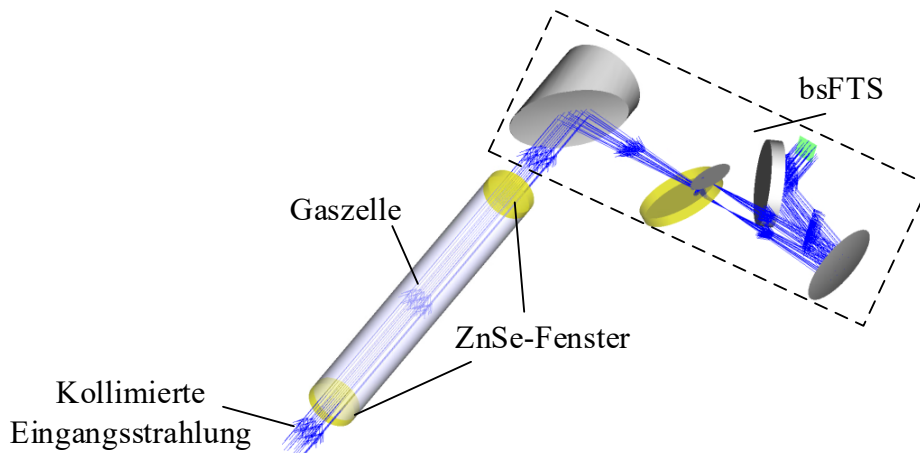


Abbildung 6.21: Messsystem mit Single-Pass-Gaszelle für zeitaufgelöste Gasanalysen. [143]

Diese weist mit einer optischen Pfadlänge von 100 mm und einem Zellvolumen von lediglich 20 ml eine relativ geringe Zeitkonstante τ auf und ermöglicht somit eine fein aufgelöste Detektion von Konzentrationsänderungen. Die Messzelle wird kollimiert durchstrahlt und ist beidseitig mit jeweils einem ZnSe-Fenster sowie einem O-Ring abgedichtet.

Das Ergebnis einer Messung eines R134a-Testgases mit einer Konzentration von 2000 ppm ist in Abb. 6.22 dargestellt. Dabei wurde zum Zeitpunkt $t = 0$ s das Gasventil aufgedreht. Während die gemessenen Absorptionsspektren bei ausgewählten Zeitpunkten in Abb. 6.22(a) aufgezeigt werden, beinhaltet Abb. 6.22(b) die entsprechende mit einem PLS-Modell berechnete Gaskonzentration in der Messzelle.

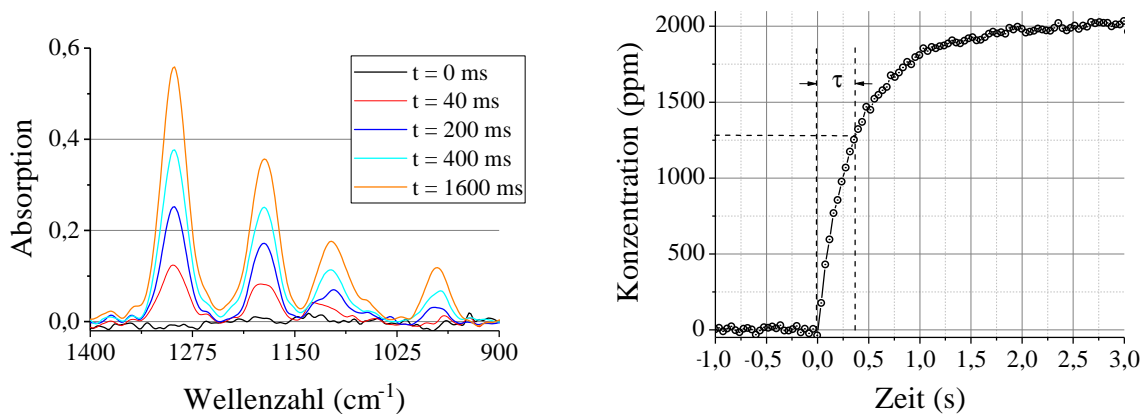


Abbildung 6.22: (a) Absorptionsspektren des R134-Testgases bei ausgewählten Zeitpunkten; (b) Entsprechende über ein PLS-Modell berechnete Gaskonzentration in der Zelle. [143]

Wie aus der Abbildung zu erkennen, weist das Messsystem eine Zeitkonstante τ von etwa 370 ms auf. Eine Konzentrationsänderung kann innerhalb eines Messzyklus, also innerhalb von 40 ms detektiert werden, die Detektionsschwelle beträgt 40,3 ppm.

Die Messgeschwindigkeit ist hier also hauptsächlich durch die Auslesegeschwindigkeit der Kamera begrenzt. Frühere Untersuchungen, die bereits in [142] vorgestellt wurden, zeigten, dass mit schnelleren Kameras Messraten von bis zu 200 Hz mit statischen Fourier-Spektrometern im MIR möglich sind.

Um mit Kohlenstoffmonoxid (CO) nun ein Gas mit niedrigerem Absorptionskoeffizienten messen zu können, wurde die Single-Pass-Zelle durch die in Abb. 6.23(a) gezeigte White-Zelle [8, 114] ersetzt. Diese wurde in [142] bereits ausführlich beschrieben. Kollimierte Eingangsstrahlung wird hier mithilfe einer Germanium-Einkoppellinse mit Brennweite 75 mm auf die Feldspiegelebene fokussiert und durchläuft anschließend die Messzelle achtmal, was einer optischen Pfadlänge von etwa 80 cm durch das Gas entspricht. Da der Feldspiegel und die Objektspiegel jeweils $2f$ voneinander entfernt platziert sind, wird der Brennpunkt immer wieder auf die Ebene des Feldspiegels abgebildet, wodurch kein systematischer Lichtverlust zu verzeichnen ist. Abgedichtet ist die Zelle mit einem Glaszylinder und O-Ringen, ein- und ausgekoppelt wird das Licht über zwei Kaliumbromid-Fenster.

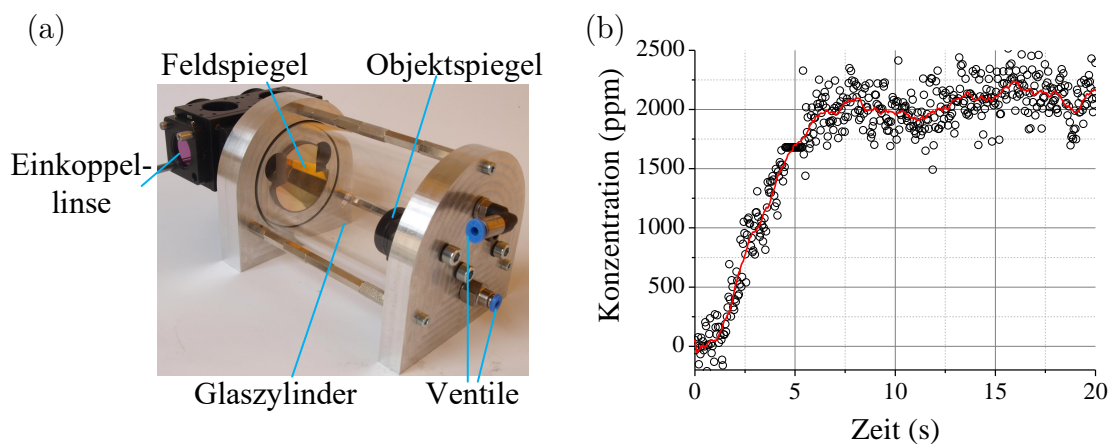


Abbildung 6.23: (a) Verwendete White-Zelle für die CO-Messung. Eine detaillierte Beschreibung findet sich in [142].; (b) Zeit aufgelöste Messung einer 2000 ppm CO-Probe. Neben den einzelnen Messpunkten ist ein gleitender Mittelwert über jeweils 1 s in rot gekennzeichnet. Detektionslimit mit zweifachem Sicherheitsintervall ist 276,5 ppm. [143]

Abbildung 6.23(b) zeigt schließlich die Messung eines 2000 ppm CO-Testgases. Gekennzeichnet sind sowohl die einzelnen Messpunkte, als auch der gleitende Mittelwert über jeweils 1 s in rot. Das Ventil wurde wiederum bei $t = 0$ s geöffnet und die Konzentration wurde mithilfe eines PLS-Modells bestimmt. Zu erkennen ist ein vergleichsweise starkes Rauschen

des Signals. Dies ist vor allem darauf zurückzuführen, dass die CO-Absorptionsbande mit einer Zentralwellenzahl von etwa 2150 cm^{-1} in einem Spektralbereich mit kamerabedingt niedrigem SNR liegt (siehe Abschnitt 6.1.1). Das Detektionslimit liegt dementsprechend bei 276,5 ppm.

6.2 Abbildendes statisches Fourier-Transformations-Spektrometer

Um das grundlegende Funktionsprinzip des in dieser Arbeit entwickelten abbildenden statischen Fourier-Transformations-Spektrometers (sIFTS) zu illustrieren, wurde zunächst das Logo der Technischen Universität München (TUM) mit einem Laserdrucker auf eine Polyesterfolie mit einer Dicke von 0,1 mm gedruckt und mit dem Messsystem abgebildet. Das resultierende Detektorbild ist in Abb. 6.24 dargestellt.

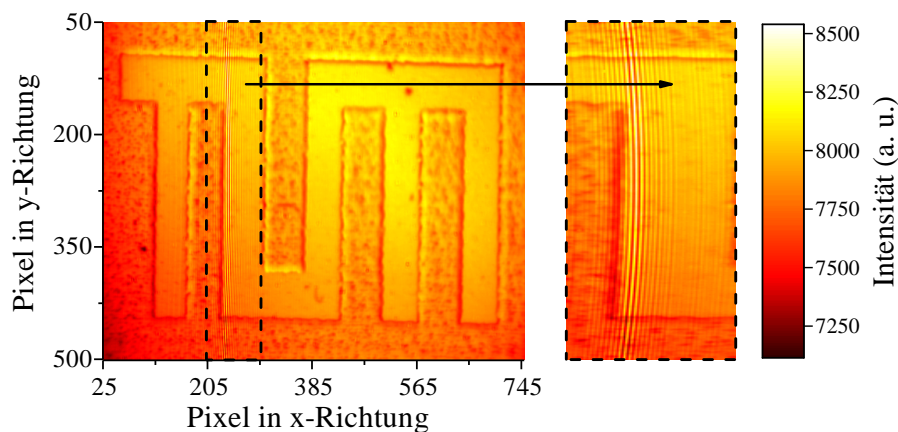


Abbildung 6.24: Mit dem sIFTS aufgenommene Abbildung des TUM-Logos mit überlagerten Interferenzstreifen. [139]

Es ergibt sich ein klares zweidimensionales Bild des TUM-Logos mit überlagerten, leicht gekrümmten Interferenzstreifen. Zu beachten ist, dass der Mid-Peak des Interferogramms wiederum leicht in Richtung des linken Detektorrandes verschoben ist, um eine höhere maximale OPD und damit eine höhere spektrale Auflösung zu gewährleisten.

Das Background-Spektrum des sIFTS zeigt Abb. 6.25. Dieses weist eine ähnliche Hüllkurve wie das in Abschnitt 6.1.1 gezeigte Background-Spektrum des bsFTS auf, welche wiederum hauptsächlich von der Mikrobolometer-Übertragungsfunktion bestimmt wird. Zudem sind auch hier Absorptionsbanden von H_2O und CO_2 zu erkennen. Der hier verwendete Langpassfilter zeigt im Vergleich zu Abschnitt 6.1.1 eine konstantere Transmission, wodurch hier keine Signaleinbrüche zwischen 1225 cm^{-1} und 900 cm^{-1} zu beobachten sind.

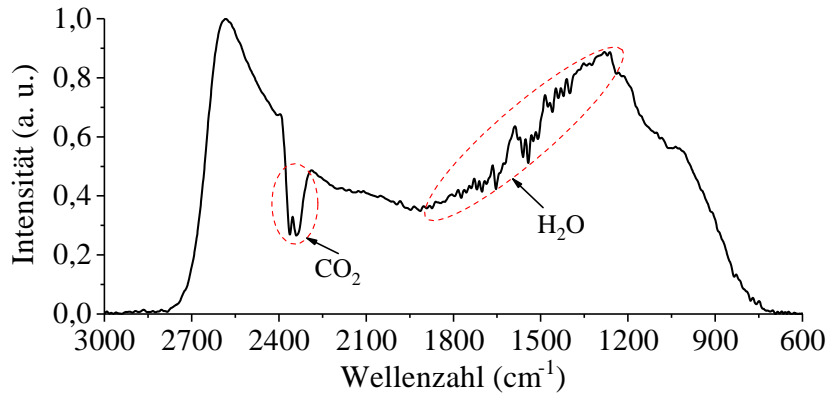
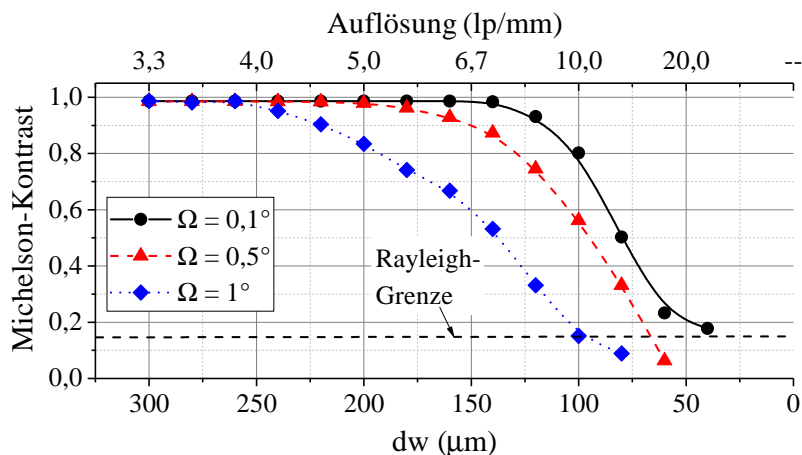


Abbildung 6.25: Background-Spektrum des sIFTS. [139]

6.2.1 Räumliche Auflösung

Der Zusammenhang zwischen räumlicher Auflösung und Divergenzwinkel Ω wurde mithilfe einer Simulation der entsprechenden Modulationsübertragungsfunktion (engl.: modulation transfer function - MTF) mit Zemax OpticStudio untersucht. Die Simulationen wurden dabei für die Designwellenlänge des sIFTS durchgeführt, welche $10,6 \mu\text{m}$ beträgt. Dabei wurde Ω variiert, um unterschiedliche Lichtquellen- bzw. Aperturgrößen zu evaluieren. Wie aus Abb. 6.26 ersichtlich, lässt sich die räumliche Auflösung durch ein Verringern von Ω erhöhen.

Abbildung 6.26: Ray-Tracing Simulation der Modulationsübertragungsfunktion des sIFTS mit unterschiedlichen Divergenzwinkeln Ω . [139]

Während bei einem Divergenzwinkel von 1° , welcher etwa dem Akzeptanzwinkel des sIFTS entspricht, die Auflösungsgrenze bei etwa 10 lp/mm , bzw. $100 \mu\text{m}$ liegt, können

räumliche Auflösungen von bis zu 20 lp/mm, bzw. 50 μm durch eine Reduktion des Blendendurchmessers erreicht werden. Die Variable dw bezeichnet dabei die entsprechenden Linienabstände.

Als Auflösungsgrenze wurde hier das Rayleigh-Kriterium herangezogen, welches einen minimalen Michelson-Kontrast von 0,15 fordert, um zwei benachbarte Linien unterscheiden zu können [34].

Tabelle 6.1: Relevante Maße des USAF 1951 Auflösungstestbildes.

Gruppe	Elemente (lp/mm)					
	1	2	3	4	5	6
2	4.00	4.49	5.04	5.66	6.35	7.13
3	8.00	8.98	10.10	11.30	12.70	14.30
4	16.00	17.95	20.16	22.62	25.39	28.50

Um diese Simulationsergebnisse mit dem experimentellen Aufbau des sIFTS zu validieren, wurde ein USAF 1951 Auflösungstestbild (Thorlabs – R3L3S1N) vermessen. Die relevanten Dimensionen des Testbilds sind in Tabelle 6.1 angegeben. Für die Messung wurde der Blendendurchmesser manuell angepasst, um sowohl eine ausreichende räumliche Auflösung, als auch eine hohe Lichtintensität auf dem Detektor zu erreichen. Hier wurde der Blendendurchmesser d_a zu etwa 1,3 mm gewählt, was einem Divergenzwinkel von $0,5^\circ$ entspricht.

Wie in Abb. 6.27 gezeigt, können alle Elemente von Gruppe 3 sowie das erste Element von Gruppe 4 klar erkannt werden. Dies entspricht einer räumlichen Auflösung von 16 lp/mm, bzw. 62,5 μm , was die Simulationsergebnisse bestätigt.

Die räumliche Auflösung ist hier hauptsächlich durch die sphärische Aberration der verwendeten sphärischen Standardlinsen begrenzt. Zukünftige Arbeiten sollten sich mit dem Entwurf einer optimierten Abbildungsoptik für das sIFTS beschäftigen. Zudem bietet sich eine Analyse des räumlichen Auflösungsvermögens für unterschiedliche Wellenlängen an.

6.2.2 Eindimensionale hyperspektrale Abbildung

Wie bereits in Abschnitt 5.1.1 dargelegt, lässt sich eine Probe, die lediglich entlang der y-Richtung des Detektorarrays variiert, mit dem experimentellen Aufbau analysieren ohne die Probe zu bewegen. Dazu wurden Messungen an einer aus drei unterschiedlichen Polymerfolien bestehenden Probe durchgeführt, welche in y-Richtung angeordnet sind.

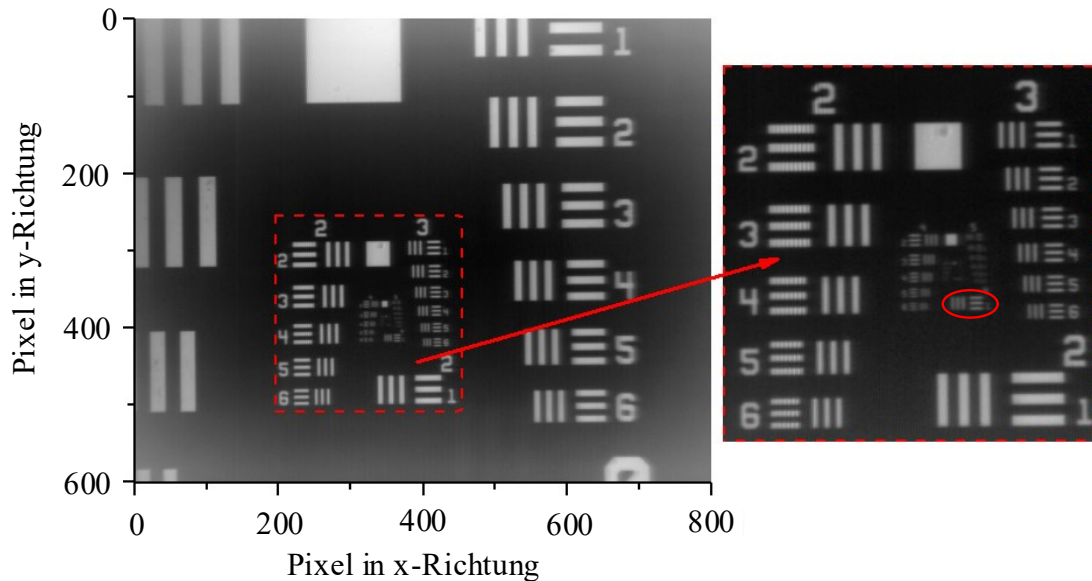


Abbildung 6.27: Aufgenommenes Bild eines USAF 1951 Auflösungsstestbilds bei einem Divergenzwinkel Ω von etwa $0,5^\circ$. [139]

Abbildung 6.28(a) zeigt das Detektorbild der entsprechenden Probe. Diese besteht von oben nach unten aus jeweils einem Teil Polyvinylchlorid (PVC), Polycarbonat (PC) und Polyethylterephthalat (PET). Ebenfalls zu erkennen sind herstellungsbedingte Zwischenräume zwischen den einzelnen Materialien.

Um einen Vergleich mit einem Referenzspektrometer zu ermöglichen, wurden zunächst, wie in Abb. 6.28(a) gekennzeichnet, einzelne Abschnitte der Probe analysiert. Dazu wurden die entsprechenden Interferogramme in y-Richtung gemittelt und anschließend das jeweilige Transmissionsspektrum berechnet. Abbildung 6.28(b) zeigt den Vergleich der so ermittelten Spektren der einzelnen Detektorbereiche bzw. Materialien mit einem Referenz-FTIR-Spektrometer bei einer spektralen Auflösung von 8 cm^{-1} . Es ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung der Messungen, was auf eine grundsätzliche Eignung des sIFTS für die eindimensionale hyperspektrale Bildgebung schließen lässt.

Zusätzlich wurde die Probe zeilenweise analysiert. Dazu wurde das Transmissionsspektrum für jede Detektorzeile ermittelt, woraufhin die Probe bei unterschiedlichen Wellenzahlen betrachtet werden kann. Wählt man nun geeignete Stützstellen, an denen sich die Materialien spektral unterscheiden, so lassen sich die einzelnen Bestandteile der Probe rekonstruieren. Abbildung 6.29 zeigt die Probe bei Wellenzahlen von 1904 cm^{-1} bzw. 2340 cm^{-1} .

Während PVC in beiden Bildern die höchste Transmission zeigt, weist PET bei 1904 cm^{-1} eine höhere Transmission als PC auf. Im Gegensatz dazu passiert bei 2340 cm^{-1} mehr Infrarotstrahlung durch die PC-Probe. Zudem sind die Zwischenräume mit einer Transmission

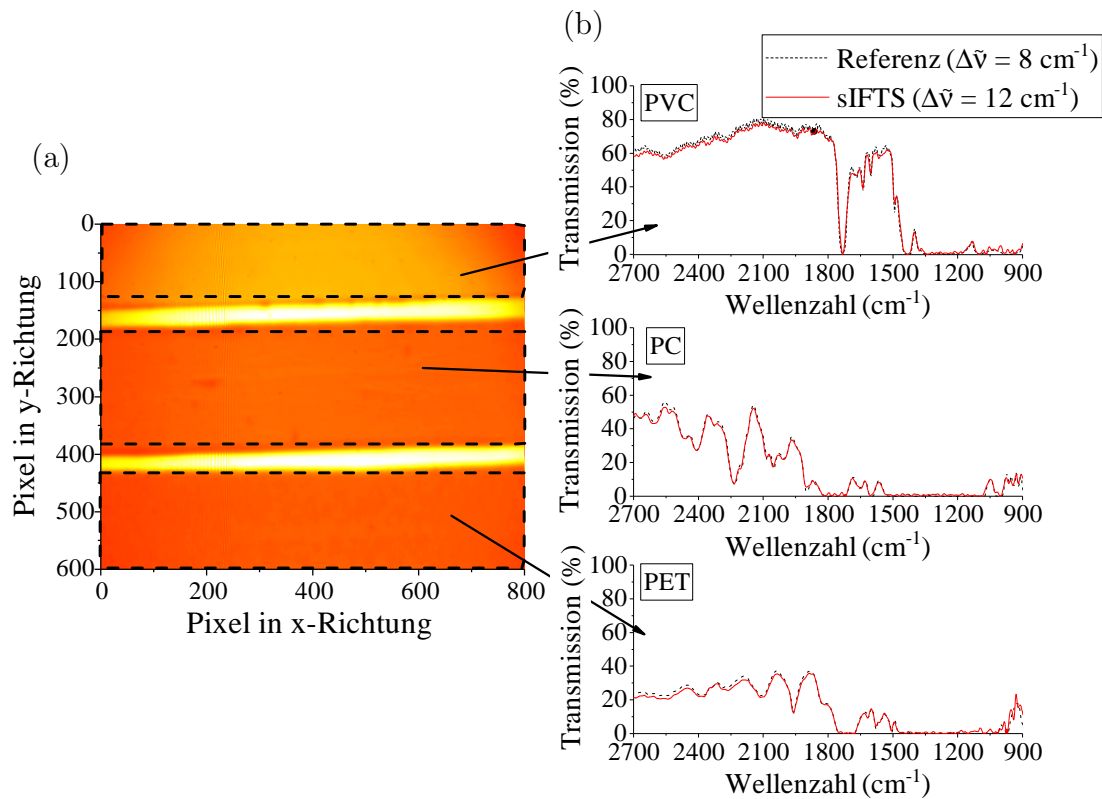


Abbildung 6.28: Messergebnisse für eine Probe bestehend aus drei verschiedenen Polymerfolien entlang der y-Achse. (a) Detektorbild der Probe. Die Bereiche, aus denen die nebenstehenden Transmissionsspektren berechnet wurden, sind gekennzeichnet. (b) Entsprechende Transmissionsspektren im Vergleich mit einem Referenz-FTIR-Spektrometer. Die Referenzmessung wurde mit einer Auflösung von 8 cm^{-1} durchgeführt. [138]

von 100 % klar zu erkennen. Da bei dieser Auswertung keinerlei Mittelung entlang der y-Achse durchgeführt wurde, sind verhältnismäßig starke Rauscheffekte vorhanden, wodurch die Transmissionswerte der einzelnen Materialien nicht ideal homogen erscheinen. Dennoch ist eine Unterscheidung der Materialien auf Grundlage der ermittelten hyperspektralen Daten problemlos möglich.

6.2.3 Zweidimensionale hyperspektrale Abbildung

Zur Umsetzung einer zweidimensionalen hyperspektralen Abbildung und damit zur Aufnahme eines kompletten hyperspektralen Datenwürfels, wurde das Windowing-Verfahren gemäß Abschnitt 5.1.2 verwendet.

Um zu demonstrieren, dass mit diesem Ansatz räumliche Information von Proben, die größer sind als die Detektorbreite, rekonstruiert werden kann, wurde zunächst ein Banner der Stadt München abgebildet (siehe Abb. 6.30). Dazu wurden pro Aufnahme jeweils nur

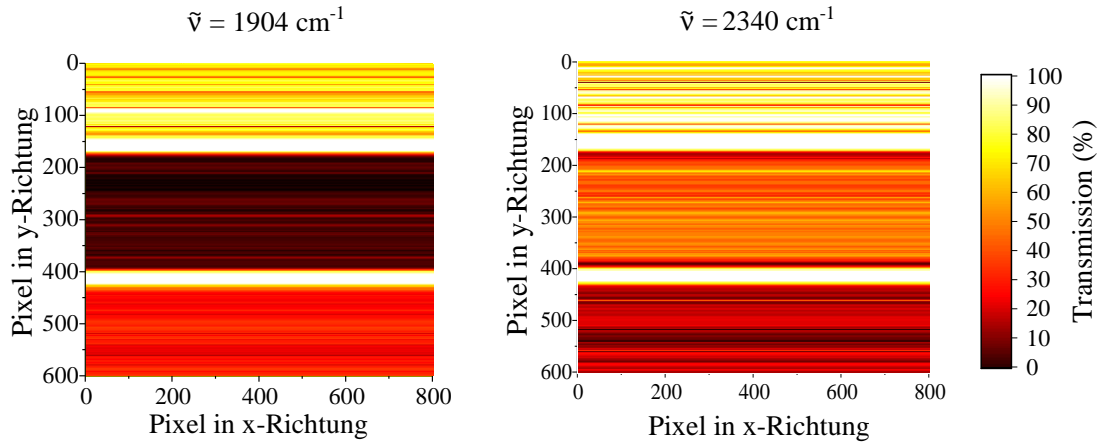


Abbildung 6.29: Betrachtung der Probe aus Abb. 6.28 bei zwei ausgewählten Wellenzahlen. Die drei Materialien sowie die Zwischenräume sind klar durch ihr charakteristisches Transmissionsverhalten zu unterscheiden.

die ersten 200 Detektorspalten in x-Richtung verwendet, um im Anschluss das gesamte Bild zu rekonstruieren. Dadurch ist auf jedem Abschnitt der Mid-Peak des überlagerten Interferogramms zu sehen. Wie in der Abbildung zu erkennen, gelingt es auf diese Weise, das Bild komplett wiederherzustellen, allerdings ergeben sich deutliche Sprungstellen sowie unterschiedliche Intensitäten vor allem zum Rand der Probe. Dies wird hauptsächlich durch die fest im verwendeten Detektorarray implementierten Korrekturalgorithmen hervorgerufen, welche auftretende Intensitätssprünge teilweise überkorrigieren.

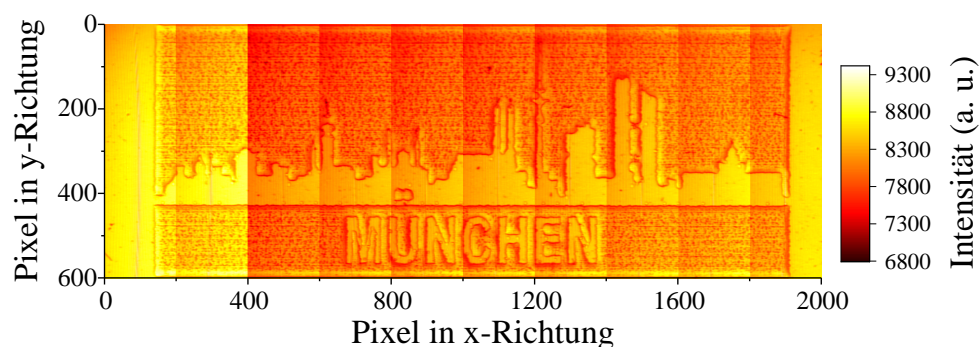


Abbildung 6.30: Rekonstruktion eines Banners der Stadt München mit Windowing-Verfahren bei Nutzung von jeweils 200 Detektorspalten in x-Richtung.

Die spektrale Genauigkeit des sIFTS mit Windowing-Verfahren wurde nun mithilfe einer Probe bestehend aus unterschiedlichen Polymerfolien untersucht. Dazu wurden jeweils

drei Stücke Polyvinylchlorid (PVC), Polyester (PP) und Polycarbonat (PC) in einem 3×3 -Muster angeordnet. Die Probengröße beträgt insgesamt etwa 15 mm x 10 mm.

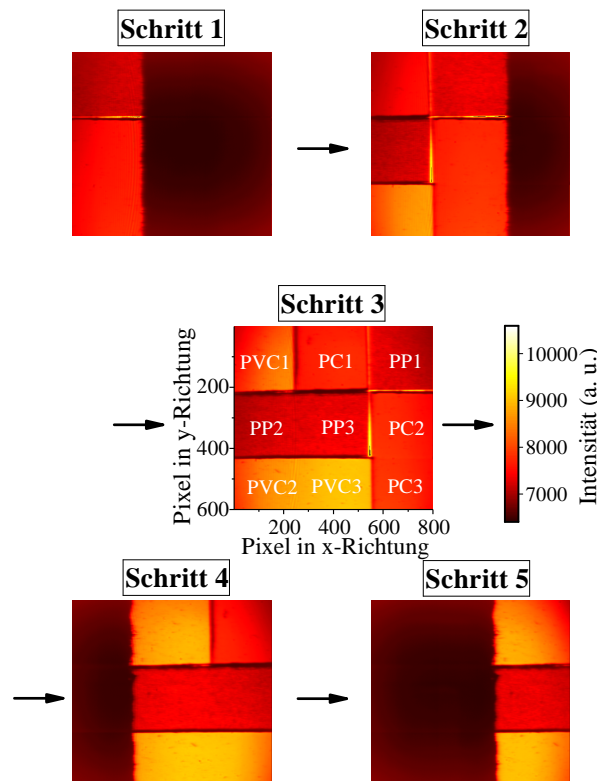


Abbildung 6.31: Verschiebung der Probe entlang der x-Achse des Detektorarrays. Die gezeigten Bilder wurden zu fünf aufeinanderfolgenden Zeitpunkten aufgenommen. Die Probe besteht aus drei unterschiedlichen Materialien in einem 3×3 -Muster. [139]

Gemäß Abschnitt 5.1.2 müssen also mindestens 5 Bilder aufgenommen werden, um das Spektrum für jeden Teil der Probe zu ermitteln. Dazu wurde die Probe mithilfe des Linear-tisches einmal mit einer Geschwindigkeit von 5 mm s^{-1} durch das FOV des sIFTS bewegt. Abbildung 6.31 zeigt die dabei aufgenommenen Bilder. In Schritt 3 ist die komplette Probe auf dem Detektor zu sehen und alle einzelnen Materialien sind gekennzeichnet.

Um die Erzeugung der 2D-Interferogramme für jeden Probenbereich zu erleichtern, ist jedes Element etwas breiter als ein Drittel des verwendeten Detektorarrays. Zudem wurden insgesamt 12 Bilder in Betracht gezogen, um geeignete Bilder für jedes Element selektieren zu können. Dies wurde im Rahmen dieser Arbeit manuell durchgeführt, eine Automatisierung des Verfahrens bietet sich für zukünftige Arbeiten an.

Abbildung 6.32 zeigt schließlich die rekonstruierten Spektren einzelner Probenelemente. Dabei wurden bewusst Elemente aus unterschiedlichen vertikalen Detektorbereichen ausgewählt. Die rekonstruierten 2D-Interferogramme sind in Abb. 6.32(a) dargestellt. Die entsprechenden 1D-Interferogramme wurden durch eine Mittelung entlang der Linien identischer OPD berechnet und sind in Abb. 6.32(b) aufgeführt. Alle Interferogramme wurden zudem mit einer Cut-On-Wellenzahl von 500 cm^{-1} hochpassgefiltert. Die maximale optische Pfaddifferenz beträgt hier $0,78\text{ mm}$, was zu einer spektralen Auflösung von etwa 12 cm^{-1} führt.

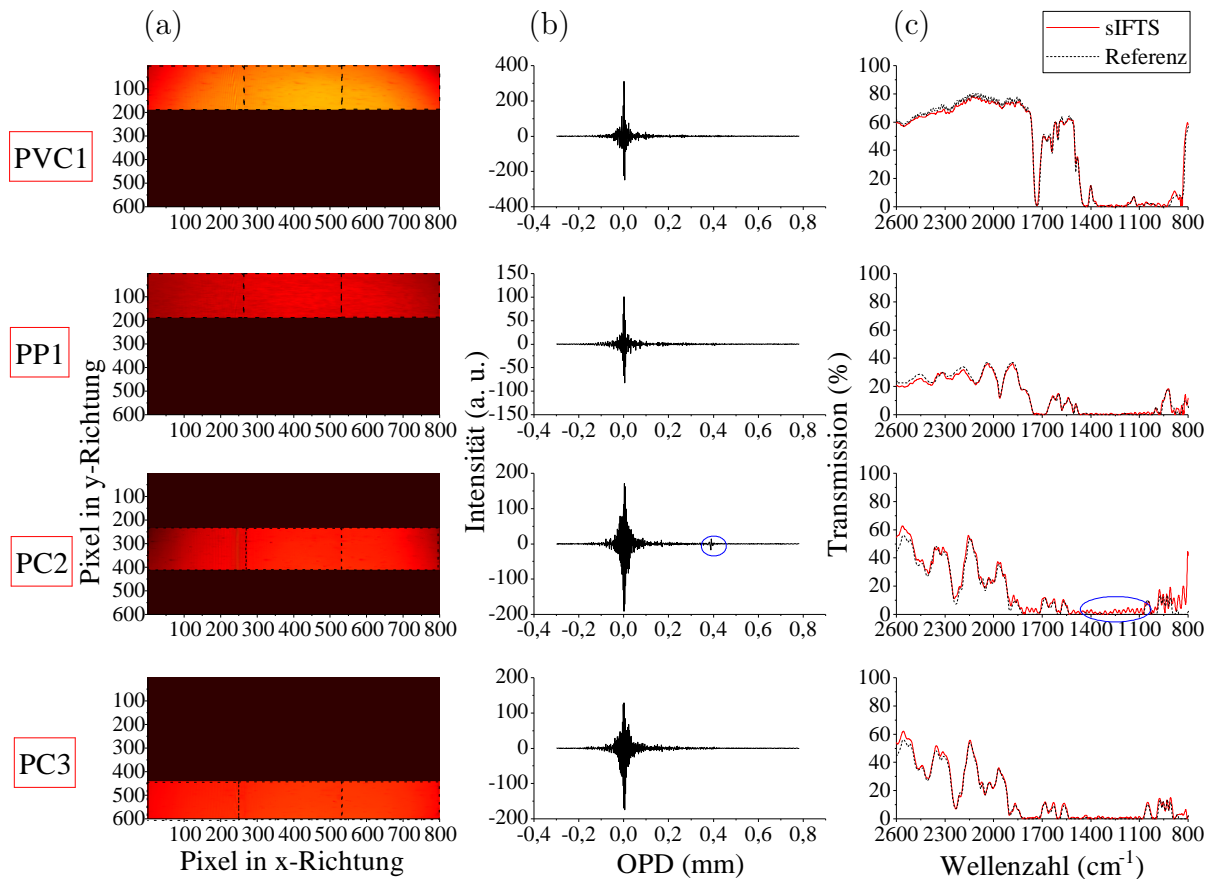


Abbildung 6.32: (a) 2D-Interferogramme von ausgewählten Proben; (b) Entsprechende 1D-Interferogramme durch Mittelung entlang Linien gleicher optischer Pfaddifferenz; (c) Transmissionsspektren im Vergleich zu einem Labor-FTIR-Spektrometer. [139]

Die Transmissionsspektren sind schließlich in Abb. 6.32(c) aufgeführt. Dazu wurden die Proben-Spektren nach einer Dreiecksfensterung mittels einer nicht-uniformen Fourier-Transformation aus den 1D-Interferogrammen in Abb. 6.32(b) berechnet. Als Background-Spektrum diente das Spektrum aus Abb. 6.25.

Als Referenz wurde wiederum ein klassisches FTIR-Spektrometer (Thermo Fisher – Avatar 330) genutzt, welches eine Auflösung von 8 cm^{-1} aufweist. Da das Referenzsystem also eine leicht höhere Auflösung bietet, sind die Absorptionspeaks etwas feiner. Dies lässt sich vor allem bei Probe PVC1 beobachten. Der betrachtete Spektralbereich wurde hier auf 800 cm^{-1} bis 2600 cm^{-1} eingeschränkt, da das SNR des sIFTS außerhalb dieses Bereichs zu gering ist.

Wie bereits bei Abb. 6.30 erwähnt, wurde in diesem Aufbau ein kommerziell erhältliches Mikrobolometerarray mit fest implementierten Korrekturalgorithmen verwendet. Dies führt zu einigen unerwünschten Rauscheffekten, da Intensitätsunterschiede zwischen einzelnen Aufnahmen, die durch eine Bewegung der Probe verursacht werden, überkorrigiert werden. So treten in den zusammengesetzten Interferogrammen und in den entsprechenden Spektren teilweise zusätzliche Peaks auf, wie bei Probe PC2 im blau markierten Teil zu erkennen ist. Während die charakteristischen Absorptionseigenschaften des Materials weiterhin klar zugeordnet werden können, ist dem Spektrum ein relativ stark ausgeprägtes Rauschen überlagert. Diese Effekte sollten sich in Zukunft durch die Verwendung eines speziell angepassten Detektors und durch eine Optimierung der Datenverarbeitung minimieren lassen.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Abschließend fasst dieses Kapitel nochmals relevante Ergebnisse dieser Dissertation zusammen und gibt zudem einen Ausblick auf mögliche zukünftige wissenschaftliche Themen im Hinblick auf statische Fourier-Transformations-Spektrometer für den mittleren Infrarotbereich.

Breitbandiges statisches Fourier-Transformations-Spektrometer Zunächst wurde in dieser Arbeit ein breitbandiges statisches Fourier-Transformations-Spektrometer (bsFTS) auf Grundlage eines Einzelspiegel-Interferometers entwickelt. Durch den Einsatz von Konkavspiegeln anstelle von Linsen gelang es dabei, Dispersionseffekte und Temperatureinflüsse zu minimieren und mithilfe eines breitbandigen, ungekühlten Mikrobolometerarrays eine spektrale Bandbreite von etwa 2800 cm^{-1} bis 600 cm^{-1} , bzw. $3,6\text{ }\mu\text{m}$ bis $17\text{ }\mu\text{m}$ bei einer spektralen Auflösung von 12 cm^{-1} zu erreichen. Neben einer simulativen Untersuchung der Dispersions- und Aberrationseigenschaften des bsFTS wurden Messungen durchgeführt, um das Background-Spektrum sowie die Wellenzahlgenauigkeit des Spektrometers zu evaluieren. Hier zeigte sich ein Signal-Rausch-Verhältnis von bis zu 2500:1 ohne zeitliche Mittelung sowie eine hohe Übereinstimmung mit einem Referenz-FTIR-Spektrometer. Zudem wurden mit der Flüssigkeitsanalyse in abgeschwächter Totalreflexion sowie der zeitaufgelösten Gasanalyse mögliche Anwendungsgebiete des bsFTS evaluiert. Hier zeigte das Spektrometer ein lineares Verhalten über einen großen Konzentrationsbereich sowie eine zufriedenstellende Messgenauigkeit bei einer Messgeschwindigkeit von bis zu 25 Hz.

Zur weiteren Optimierung des bsFTS in zukünftigen Arbeiten bietet sich zunächst der Einsatz eines Freiformspiegels als Fourieroptik an, um Aberrationseffekte durch die Spiegelkippung zu minimieren. Dies würde die Möglichkeit eröffnen, über einen größeren Detektorbereich zu mitteln und so das SNR weiter zu erhöhen.

Zudem gilt es, das Konzept in einen temperaturstabilen industriellen Prototypen zu überführen, um das bsFTS in weiteren Anwendungsszenarien testen zu können. In Zusammenarbeit mit dem Projektpartner wurde bereits ein entsprechend optimiertes Design für das bsFTS entworfen. Ein CAD-Modell davon zeigt Abb. 7.1. Zur Veranschaulichung des optomechanischen Aufbaus ist das Gehäuse hier transparent dargestellt. Das Spektrometer ist mit Abmessungen von $180\text{ mm} \times 117\text{ mm} \times 76\text{ mm}$ äußerst kompakt und wird in Nachfolgeprojekten zur Flüssigkeits- und Gasanalyse eingesetzt.

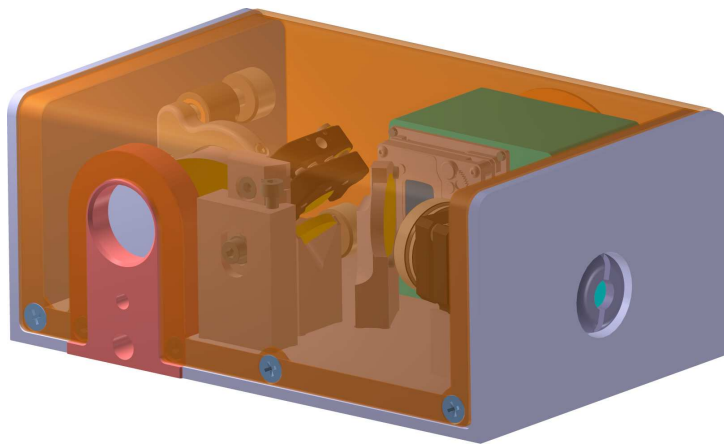


Abbildung 7.1: CAD-Modell des auf Grundlage der Ergebnisse dieser Arbeit entwickelten industriellen Prototyps.

Auch der Einsatz einer stabileren, auf den breitbandigen Spektralbereich optimierten Kamera bietet sich an. Hier muss auch ein Eingriff in die implementierten Korrekturalgorithmen möglich sein, um diese gemäß der Anwendung anpassen zu können.

Schließlich bietet sich eine Umsetzung der in Abschnitt 4.7 vorgestellten Varianten an. So kann das bsFTS zu einem Spektropolarimeter erweitert werden und die spektrale Bandbreite kann durch eine Rotation des Detektors erhöht werden.

Stufenspiegel-Variante Um die spektrale Auflösung des bsFTS zu erhöhen, wurde eine Stufenspiegel-Variante vorgestellt und evaluiert. Dazu wurde zunächst eine Simulation des Systems durchgeführt und anschließend das Konzept durch die Messung eines CO_2 -Lasers validiert. Sowohl in der Simulation, als auch in der Messung konnte die spektrale Auflösung von 12 cm^{-1} auf 7 cm^{-1} gesteigert werden, ohne grundsätzlich die spektrale Bandbreite des bsFTS einzuschränken. Zudem wurde die Auswirkung von ausgedehnten Lichtquellen simulativ untersucht. Hier zeigte sich, dass mit zunehmendem Lichtquellendurchmesser eine größere Überlappung der Teilinterferogramme einhergeht und diese somit nicht mehr auf dem Detektor getrennt werden können.

Für weiterführende Arbeiten bietet sich zunächst der Einsatz von größeren Stufenhöhen oder von Spiegeln mit mehreren Stufen an. Eine Steigerung auf eine Auflösung von etwa 4 cm^{-1} erscheint hier realistisch. Zudem gilt es eine Lösung zur Messung von ausgedehnten, breitbandigen Lichtquellen zu finden. Eine Möglichkeit wäre es, den Stufenspiegel mithilfe einer zusätzlichen Zylinderlinse zwischen Fourierlinse und Detektor entlang der y -Dimension des Detektors abzubilden.

Kontinuierliche Background-Korrektur Zur Verbesserung der Langzeitstabilität wurde eine Methode zur kontinuierlichen Background-Korrektur vorgestellt, welche das Background- sowie das Proben-Spektrum zeitgleich auf unterschiedlichen Detektorbereichen aufnimmt. Dadurch lässt sich ein schwankendes Backgroundsignal durch Drift- und Alterungseffekte der Lichtquelle oder des Detektors quasi in Echtzeit ausgleichen. Dazu wurde ein optischer Aufbau konzipiert, welcher mit Standardmessaufnehmern wie ATR-Modulen oder Transmissionsküvetten verwendet werden kann. Erste Messungen zeigten vielversprechende Ergebnisse und das Transmissionspektrum einer Polystyrolfolie konnte trotz stark unterschiedlicher Lichtquellenleistung erfolgreich rekonstruiert werden.

Hier sollte vor allem das Kalibrierverfahren in Zukunft mithilfe eines durchstimmbaren Lasers und eines schwarzen Hohlkörperstrahlers optimiert werden, um Ausleuchtungsunterschiede und unterschiedliche Sensitivität der Detektorbereiche auszugleichen. Zudem kann der optische Aufbau weiter verkleinert werden und für praktische Anwendungen evaluiert werden.

Abbildendes statisches Fourier-Transformations-Spektrometer Schließlich wurde, ebenfalls auf Grundlage eines Einzelspiegel-Interferometers, ein abbildendes Spektrometer (sIFTS) entwickelt, welches in einem Spektralbereich von etwa 2600 cm^{-1} bis 800 cm^{-1} , bzw. $3,8\text{ }\mu\text{m}$ bis $13\text{ }\mu\text{m}$, wiederum eine spektrale Auflösung von 12 cm^{-1} aufweist. Durch die Verwendung eines Windowing-Verfahrens zur Aufnahme des hyperspektralen Datenwürfels wird ein hoher Lichtdurchsatz gewährleistet. Zudem werden keine zusätzlichen Spezialoptiken benötigt. Die räumliche Auflösung des sIFTS wurde anhand eines Auflösungsstestziels evaluiert und beträgt etwa 16 lp/mm bzw. $62,5\text{ }\mu\text{m}$ bei einer Designwellenlänge von $10,6\text{ }\mu\text{m}$. Die Funktionalität des Windowing-Verfahrens und die spektrale Genauigkeit des sIFTS wurde anhand einer Transmissionsmessung unterschiedlich zusammengesetzter Kunststoffproben evaluiert, wobei sich wiederum eine hohe Übereinstimmung mit einem Referenz-FTIR-Spektrometer zeigte.

Um die Anwendbarkeit des sIFTS zu erhöhen, gilt es in Zukunft eine Variante für Reflexionsmessungen zu entwickeln. Dazu wird aufgrund der geringen reflektierten Lichtleistung im MIR ein aktiv gekühlter Detektor benötigt. Zudem sollte die Abbildungsoptik optimiert

werden, um eine bessere räumliche Auflösung zu gewährleisten. Eine Pushbroom-Variante des sIFTS würde zwar den Lichtdurchsatz zu einem gewissen Grad einschränken, jedoch würde sich die Datennachverarbeitung stark vereinfachen, was für eine mittelfristige industrielle Umsetzung des Konzepts unter Umständen von Vorteil wäre. Schließlich wäre ähnlich wie für die kontinuierliche Background-Korrektur eine Optimierung des Kalibrierverfahrens wünschenswert und das Auswerteverfahren sollte automatisiert werden, um Fehler wie eine Überkorrektur des Detektorbilds oder andere Artefakte zu vermeiden.

Symbolverzeichnis

$a(\tilde{\nu})$	Absorptionsgrad
$A(\tilde{\nu})$	Absorptionsspektrum
$\alpha(\tilde{\nu})$	linearer Absorptionskoeffizient
b	Probendicke
b_0, \vec{b}	Regressionskoeffizienten
$B(\tilde{\nu})$	Doppelbrechung
c_0	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum
c_M	Phasengeschwindigkeit in Materie
c_{mol}	Stoffmengenkonzentration
C_{mb}	Wärmekapazität
Δd	Offset des Planspiegels bzw. der OPD
d_a	Blendendurchmesser
d_{LQ}	Lichtquellendurchmesser
d_s	vertikaler Abstand der virtuellen Quellen
$d_{\text{ST-PS}}$	Distanz zwischen Strahlteiler und Planspiegel
d_w	Linienabstand
D_{ST}	Dicke des Strahlteilers
δ	Phasendifferenz
E	Amplitude des elektrischen Feldes
E_{rad}	Strahlungsenergie
\vec{E}	elektrischer Feldvektor
ϵ	Permittivität
$\epsilon(\lambda)$	Emissionskoeffizient
ϵ_0	elektrische Feldkonstante
ϵ_r	relative Permittivität
f_C	Brennweite einer zylindrischen Optik
f_F	Brennweite der Fourieroptik
ϕ_i	initiale Phasendifferenz
G_{mb}	Wärmeleitwert

h	Planck'sches Wirkungsquantum
\bar{h}_s	Stufenhöhe des Stufenspiegels
I	Intensität
$I_0(\tilde{\nu})$	Background-Spektrum
$I_{\text{probe}}(\tilde{\nu})$	Proben-Spektrum
k_B	Boltzmann-Konstante
k_s	Raumfrequenz
$K(\tilde{\nu})$	Korrekturfaktor
\vec{k}	Wellenvektor
lp	Linienpaare
λ	Wellenlänge
$\Delta\lambda$	spektrale Bandbreite einer Lichtquelle
$M_{e\lambda}$	spezifische spektrale Ausstrahlung
μ_0	magnetische Feldkonstante
μ_r	relative Permeabilität
n	Brechungsindex
n_L	Brechungsindex der Luft
n_{ST}	Brechungsindex des Strahlteilers
N_x	Pixelanzahl in x-Richtung
ν	Strahlungsfrequenz
ν_s	lineare Abtastfrequenz
$\tilde{\nu}$	Wellenzahl
$\tilde{\nu}_{\text{max}}$	maximal auslösbare Wellenzahl
$\Delta\tilde{\nu}$	spektrale Auflösung
OPD	optische Pfaddifferenz
OPD _{nl}	nicht-lineare optische Pfaddifferenz
p_{pix}	Pixelabstand
\vec{r}	Ortsvektor
R^2	Bestimmtheitsmaß
$S_0(\tilde{\nu})$	Lichtquellenspektrum
t	Zeit
T	Temperatur
$T(\tilde{\nu})$	Transmissionsspektrum
τ	Zeitkonstante
τ_{mb}	thermische Zeitkonstante
U_{LQ}	Lichtquellenspannung
v	Ausbreitungsgeschwindigkeit
V	Sichtbarkeit bzw. Michelson-Kontrast

w_{det}	Detektorbreite
x	Position in x-Richtung
Δx	Spiegelverschiebeweg
Δx_s	lineares Abtastintervall
y	Position in y-Richtung
z	Position in z-Richtung
ω	Kreisfrequenz
Ω	Divergenzwinkel

Abkürzungsverzeichnis

a-Si	Amorphes Silizium
a.u.	arbitrary unit
ATR	Abgeschwächte Totalreflexion
bsFTS	Breitbandiges statisches Fourier-Transformations-Spektrometer
CdGeAs ₂	Kadmium-Germanium-Arsenid
CMOS	Complementary Metal Oxid Semiconductor
CO	Kohlenstoffmonoxid
CO ₂	Kohlenstoffdioxid
EtOH	Ethanol
FIR	Ferner Infrarotbereich
FOV	Field of View
FTIR-Spektrometer	Fourier-Transformations-Infrarot-Spektrometer
IR-Spektroskopie	Infrarotspektroskopie
H ₂ O	Wasser
HeNe	Helium-Neon
IPA	Isopropanol
KBKM	Kontinuierliche Background-Korrekturmethode
MEMS	Mikroelektromechanisches System
MeOH	Methanol
MIR	Mittlerer Infrarotbereich
MTF	Modulationsübertragungsfunktion
NDIR-Sensoren	Nicht-dispersive Infrarotsensoren
NETD	Noise Equivalent Temperature Difference
NIR	Naher Infrarotbereich
HSI	Hyperspectral Imager
OAP	Off-Axis-Parabolspiegel
OPD	Optische Pfaddifferenz
PC	Polycarbonat
PET	Polyethylenterephthalat

PLS	Partial-Least-Squares
PP	Polyester
PVC	Polyvinylchlorid
R134a	1,1,1,2-Tetrafluorethan
RMSE	Root Mean Square Error
sFTS	Statisches Fourier-Transformations-Spektrometer
sIFTS	Abbildendes statisches Fourier-Transformations-Spektrometer
SNR	Signal-Rausch-Verhältnis
SOP	State of Polarization
sSMFTS	Static Single-Mirror Fourier Transform Spectrometer
TUM	Technische Universität München
VOx	Vanadiumoxid
ZnSe	Zinkselenid

Abbildungsverzeichnis

2.1	Beispielhafte Darstellung von Zweistrahl-Interferenz anhand einer monochromatischen Lichtquelle mit einer Wellenlänge von $10\ \mu\text{m}$ und Ausbreitung in z-Richtung. (a) konstruktive Interferenz; (b) destruktive Interferenz.	9
2.2	Interferenz zweier zueinander verkippter ebener Wellenfronten [82].	10
2.3	Interferenzsignale mit unterschiedlichen Michelson-Kontrasten bzw. Sichtbarkeiten.	12
2.4	Brechung und Reflexion von Lichtstrahlen an optischen Grenzflächen [38].	13
2.5	Einordnung des Infrarotbereichs im elektromagnetischen Spektrum nach [12].	15
2.6	Linearer Absorptionskoeffizient verschiedener Gasmoleküle im mittleren Infrarotbereich [42].	16
2.7	Schwingungsarten eines dreiatomigen Moleküls nach [41]. Schwingungen aus der Zeichenebene heraus sind mit + gekennzeichnet, Schwingungen in die Zeichenebene hinein mit -.	17
2.8	Bestimmung des Transmissionsspektrums einer Probe. (a) Background-Messung; (b) Proben-Messung.	18
2.9	Verwendete thermische Lichtquellen. (a) Globare von Hawkeye Technologies [37]; (b) MEMS-Emitter von Micro-Hybrid [69].	21
2.10	Spezifische spektrale Abstrahlung eines idealen schwarzen Strahlers bei unterschiedlichen Temperaturen im Infrarotbereich.	22
2.11	Funktionsprinzip von ungekühlten Mikrobolometerdetektoren nach [117].	23
2.12	Dispersives Czerny-Turner Spektrometer mit Reflexionsbeugungsgitter und Konkavspiegeln nach [47].	25
2.13	Filterbasierte NDIR-Sensoren. (a) Einkanal-detektor mit individuellem Bandpassfilter; (b) Mehrkanal-detektor mit mehreren Bandpassfiltern.	26
2.14	Veranschaulichung des FTIR-Grundprinzips nach [32].	27
2.15	(a) Reales Interferogramm einer breitbandigen thermischen Lichtquelle, gemessen mit einem Labor-FTIR-Spektrometer; (b) Entsprechendes Spektrum der Lichtquelle, die Absorption durch H_2O und CO_2 ist klar erkennbar.	28
2.16	Veranschaulichung des sFTS-Grundprinzips nach [70].	30

2.17	Schematische Darstellung eines sFTS basierend auf einem Wollaston-Prisma nach [81].	31
2.18	Schematische Darstellung des Source-Doubling-Prinzips nach [75, 95].	32
2.19	Schematische Darstellung eines sFTS basierend auf einem verstimmtten Sagnac-Interferometer nach [75].	33
2.20	Schematische Darstellung eines hyperspektralen Datenwürfels nach [93].	35
2.21	Schematische Darstellung verschiedener Aufnahmetechniken zur Erzeugung hyperspektraler Datenwürfel nach [93].	36
2.22	(a) Whiskbroom-Scanner. Die Probe wird durch ein Schwenken und eine Vorwärtsbewegung des Spektrometers Punkt für Punkt analysiert.; (b) Pushbroom-Scanner. Die Probe wird linienweise in Bewegungsrichtung analysiert.	36
2.23	(a) Staring-Verfahren. Die Probe wird schrittweise spektral vermessen.; (b) Windowing-Verfahren. Die Probe durchläuft schrittweise das zweidimensionale FOV des HSI.	37
2.24	Schematische Darstellung von abbildenden Infrarotspektrometern auf Grundlage (a) eines durchstimmbaren Filters und (b) eines durchstimmbaren Lasers.	39
2.25	Schematische Darstellung eines abbildenden Michelson-FTIR-Spektrometers nach [58].	40
2.26	Schematische Darstellung eines abbildenden sFTS basierend auf einem Sagnac-Interferometer nach [64].	41
3.1	Grundlegendes Funktionsprinzip eines sSMFTS nach [96] und [136].	44
3.2	Typischer zweidimensionaler OPD-Verlauf eines Einzelspiegel-Interferometers nach [136].	46
3.3	Temperatur- und wellenlängenabhängiges virtuelles Quellenmodell eines statischen Einzelspiegel-Fourier-Transformations-Spektrometers. [136]	47
3.4	(a) Simulation des Michelson-Kontrasts für eine typische linsenbasierte sSMFTS-Konfiguration. Durchgezogene Linien entsprechen einer Brennweite von 75 mm, gestrichelte Linien einer Brennweite von 40 mm.; (b) Simulation der Wellenzahlverschiebung durch eine variierende vertikale Distanz zwischen den virtuellen Quellen sowie einer Brennweitenverschiebung der Fourierlinse. [136]	48
3.5	Graphische Darstellung des Zusammenhangs zwischen spektraler Auflösung und maximal auflösbarer Wellenzahl eines statischen Einzelspiegel-Fourier-Transformations-Spektrometers. (a) Abhängigkeit von Pixelanzahl N_x des Detektors; (b) Abhängigkeit von Brennweite f_F der verwendeten Fourieroptik.	50

3.6	Sensitivitätsfunktion des in dieser Arbeit verwendeten Mikrobolometerarrays CUBE817 von GUIDE Infrared.	51
4.1	Schematische Ansicht des bsFTS. (a) Schnitt der x-y-Ebene; (b) Schnitt der y-z-Ebene. [136]	56
4.2	(a) Simulation der Wellenzahlverschiebung aufgrund des variablen Abstandes der virtuellen Quellen bei konstanter Brennweite des Fourierspiegels; (b) Simulation der Standardabweichung der optischen Pfaddifferenz auf einem 2D-Detektorarray. Der Off-Axis-Winkel des sphärischen Konkavspiegels beträgt 16°. [136]	57
4.3	Ray-Tracing-Modell des entwickelten experimentellen bsFTS-Aufbaus für Transmissionsmessungen. [136]	58
4.4	Bild des entwickelten experimentellen Aufbaus des bsFTS. [136]	59
4.5	Bild des entwickelten Laborprototyps des bsFTS.	60
4.6	Schrittweise Berechnung des Spektrums aus dem Detektorbild nach [95].	62
4.7	Schematischer Aufbau des bsFTS mit Stufenspiegel nach [135] und [141].	63
4.8	Simulierter optischer Pfaddifferenzverlauf des Stufenspiegel-Aufbaus bei einer Stufenhöhe von 400 μm . [141]	64
4.9	Bild des entwickelten Laborprototyps eines sSMFTS mit Stufenspiegel [141].	65
4.10	(a) Prinzip der kontinuierlichen Background-Korrekturmethode. Probe und Background werden auf unterschiedliche Bereiche des Detektors abgebildet. (b) Simuliertes Interferenzmuster für eine monochromatische Punktlichtquelle bei einer Wellenlänge von 10,6 μm . [140]	66
4.11	Praktische Implementierung der KBKM-Methode. Dieses Design kann prinzipiell mit jedem Standard-FTIR-Probenhalter verwendet werden. [140]	67
4.12	Praktische Umsetzung des bsFTS mit kontinuierlicher Background-Korrektur.	68
4.13	Schematische Darstellung eines Spektropolarimeters basierend auf dem vorgestellten bsFTS-Konzept.	69
4.14	Simulation eines idealen Interferogramms der Spektropolarimetervariante basierend auf dem vorgestellten bsFTS-Konzept.	70
4.15	Veranschaulichung der Verkleinerung des Abtastintervalls durch eine Rotation des 2D-Detektors. (a) Standardauswertung entlang der Detektorzeilen; (b) Auswertung entlang der Detektorspalten bei rotiertem Detektor.	72
5.1	Abbildendes Einzelspiegel-Interferometer. Zusätzlich zum Interferogramm wird ein zweidimensionales Bild der Probe aufgenommen.	74
5.2	Typischer OPD-Verlauf eines Einzelspiegel-Interferometers mit eingezeichneter räumlicher und spektraler Achse. [138]	75
5.3	Datenverarbeitung für die hyperspektrale Abbildung in eine Dimension.	75

5.4	Schematische Darstellung des Windowing-Verfahrens zur Erfassung des hyperspektralen Datenwürfels einer Probe mit 3 x 3 räumlichen Elementen. Die 2D-Interferogramme werden nachträglich zusammengefügt. [139]	76
5.5	Schematische Übersicht des experimentellen Aufbaus zur Validierung des sIFTS. [139]	77
5.6	Ray-Tracing-Simulation einer Pushbroom-Variante des sIFTS. Eine Linie in y-Richtung wird auf den Detektor abgebildet. (a) Abbildung der Linie über gesamte Detektorbreite in x-Richtung; (b) Abbildung einzelner Punkte in y-Richtung.	79
5.7	Mögliche Varianten zur Reflexionsmessung mit dem sIFTS. (a) Direkte Beleuchtung der Probe; (b) Indirekte, senkrechte Beleuchtung der Probe über einen Strahlteiler.	80
6.1	(a) Hochpassgefiltertes Detektorbild einer Background-Messung mit dem bsFTS. Das Bild ist um den Bereich des Mid-Peaks vergrößert; (b) Hochpassgefiltertes, gefenstertertes 1D-Interferogramm der Background-Messung. [136]	84
6.2	(a) Mit dem bsFTS gemessenes Background-Spektrum. Zusätzlich sind mit den Transmissionskurven des Langpassfilters, des Strahlteilers und des Mikrobolometers entscheidende Einflussfaktoren gekennzeichnet; (b) Signal-Rausch-Verhältnis des Background-Spektrums ohne zeitliche Mittelung. [136]	85
6.3	(a) Hochpassgefiltertes Detektorbild der Polystyrol-Messung mit dem bsFTS. Das Bild ist um den Bereich des Mid-Peaks vergrößert; (b) Hochpassgefiltertes, gefenstertertes 1D-Interferogramm der Polystyrol-Messung. [136]	86
6.4	Messung eines 3 mil Polystyrol-Kalibrierstandards mit dem bsFTS im Vergleich zu einem Labor-FTIR-Spektrometer. [136]	86
6.5	(a) Interferogramme von zwei Bandpassfiltern; (b) Zugehörige Spektren mit gekennzeichneten Halbwertsbreiten.	87
6.6	Detektorbild bei Aufnahme eines CO ₂ -Lasers der Wellenlänge 9,4 µm mit dem Stufenspiegelaufbau. [141]	88
6.7	(a) 1D-Interferogramm bei Standardauswertung bzw. Mittelung über die gesamte y-Dimension des Detektors; (b) Teilinterferogramme bei getrennter Auswertung der beiden Detektorhälften. [135, 141]	89
6.8	Kalibrierte Teilinterferogramme der beiden Spiegelstufen. [141]	89
6.9	Fusioniertes Gesamtinterferogramm mit erhöhter maximaler optischer Pfad-differenz. [141]	90

6.10	Gemessenes Laserspektrum bei Auswertung des Teilinterferogramms der inneren Stufe und bei Betrachtung des fusionierten Gesamtinterferogramms mit erhöhter spektraler Auflösung. [141]	90
6.11	Simulation des Einflusses des Lichtquellendurchmessers auf den OPD-Verlauf der Stufenspiegel-Variante.	91
6.12	Aufnahme eines Globars mit dem Stufenspiegel-Aufbau. (a) Detektorbild mit markierten Interferenzerscheinungen über die gesamte Detektorhöhe.; (b) Detektorzeile 350 mit zwei zu erkennenden Mid-Peaks.	92
6.13	(a) Background-Spektren des Background- und des Proben-Pfads; (b) Entsprechender Korrekturfaktor $K(\tilde{\nu})$ zum Ausgleich der Intensitätsunterschiede. [140]	92
6.14	Detektorbild bei Messung einer Polystyrol-Kalibrierfolie mit Dicke 3 mil unter Verwendung der kontinuierlichen Background-Korrektur. Das Bild wurde um den Mid-Peak des Interferogramms vergrößert.	93
6.15	Messung eines 3 mil Polystyrol-Kalibrierstandards mit KBKM-Aufbau im Vergleich zu einem Labor-FTIR-Spektrometer. [140]	94
6.16	Messung des 3 mil Polystyrol-Kalibrierstandards bei unterschiedlichen Lichtquellenleistungen. Das Background-Spektrum für die Transmissionsspektren ohne KBKM wurde einmalig vor der Messreihe mit $U_{LQ} = 14$ V aufgenommen.	95
6.17	Ray-Tracing-Modell des entwickelten ATR-Messsystems. [143]	96
6.18	(a) Absorptionsspektren der einzelnen, reinen Flüssigkeiten.; (b) Absorptionsspektren von Methanol-Ethanol-Gemischen mit steigendem Methanol-Gehalt. [143]	97
6.19	Verifizierung der PLS-Modelle für Gemische aus zwei Flüssigkeiten; (a) Methanol in Ethanol; (b) Isopropanol in Wasser. [143]	98
6.20	Verifizierung der PLS-Modelle für Gemische aus drei Flüssigkeiten; (a) Ethanol in Methanol und Wasser; (b) Methanol in Ethanol und Wasser. [143]	98
6.21	Messsystem mit Single-Pass-Gaszelle für zeitaufgelöste Gasanalysen. [143]	99
6.22	(a) Absorptionsspektren des R134-Testgases bei ausgewählten Zeitpunkten; (b) Entsprechende über ein PLS-Modell berechnete Gaskonzentration in der Zelle. [143]	99
6.23	(a) Verwendete White-Zelle für die CO-Messung. Eine detaillierte Beschreibung findet sich in [142]. ; (b) Zeitaufgelöste Messung einer 2000 ppm CO-Probe. Neben den einzelnen Messpunkten ist ein gleitender Mittelwert über jeweils 1 s in rot gekennzeichnet. Detektionslimit mit zweifachem Sicherheitsintervall ist 276,5 ppm.	100
6.24	Mit dem sIFTS aufgenommene Abbildung des TUM-Logos mit überlagerten Interferenzstreifen. [139]	101

6.25	Background-Spektrum des sIFTS. [139]	102
6.26	Ray-Tracing Simulation der Modulationsübertragungsfunktion des sIFTS mit unterschiedlichen Divergenzwinkeln Ω . [139]	102
6.27	Aufgenommenes Bild eines USAF 1951 Auflösungstestbilds bei einem Divergenzwinkel Ω von etwa $0,5^\circ$. [139]	104
6.28	Messergebnisse für eine Probe bestehend aus drei verschiedenen Polymerfolien entlang der y-Achse. (a) Detektorbild der Probe. Die Bereiche, aus denen die nebenstehenden Transmissionsspektren berechnet wurden, sind gekennzeichnet. (b) Entsprechende Transmissionsspektren im Vergleich mit einem Referenz-FTIR-Spektrometer. Die Referenzmessung wurde mit einer Auflösung von 8 cm^{-1} durchgeführt. [138]	105
6.29	Betrachtung der Probe aus Abb. 6.28 bei zwei ausgewählten Wellenzahlen. Die drei Materialien sowie die Zwischenräume sind klar durch ihr charakteristisches Transmissionsverhalten zu unterscheiden.	106
6.30	Rekonstruktion eines Banners der Stadt München mit Windowing-Verfahren bei Nutzung von jeweils 200 Detektorspalten in x-Richtung.	106
6.31	Verschiebung der Probe entlang der x-Achse des Detektorarrays. Die gezeigten Bilder wurden zu fünf aufeinanderfolgenden Zeitpunkten aufgenommen. Die Probe besteht aus drei unterschiedlichen Materialien in einem 3×3 -Muster. [139]	107
6.32	(a) 2D-Interferogramme von ausgewählten Proben; (b) Entsprechende 1D-Interferogramme durch Mittelung entlang Linien gleicher optischer Pfaddifferenz; (c) Transmissionsspektren im Vergleich zu einem Labor-FTIR-Spektrometer. [139]	108
7.1	CAD-Modell des auf Grundlage der Ergebnisse dieser Arbeit entwickelten industriellen Prototyps.	112

Literaturverzeichnis

- [1] H. Akbari, L. V. Halig, D. M. Schuster, A. Osunkoya, V. Master, P. T. Nieh, G. Z. Chen et al. „Hyperspectral imaging and quantitative analysis for prostate cancer detection“. In: *Journal of Biomedical Optics* 17.7 (2012), S. 076005.
- [2] J. K. Amamcharla, S. Panigrahi, C. M. Logue, M. Marchello und J. S. Sherwood. „Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) as a tool for discriminating *Salmonella typhimurium* contaminated beef“. In: *Sensing and Instrumentation for Food Quality and Safety* 4.1 (2010), S. 1–12.
- [3] N. P. Barnes und M. S. Piltch. „Temperature-dependent Sellmeier coefficients and nonlinear optics average power limit for germanium“. In: *J. Opt. Soc. Am.* 69.1 (1979), S. 178–180.
- [4] T. H. Barnes. „Photodiode array Fourier transform spectrometer with improved dynamic range“. In: *Applied Optics* 24.22 (1985), S. 3702–3706.
- [5] W. Becker, K. Sachsenheimer und M. Klemenz. „Detection of black plastics in the middle infrared spectrum (MIR) using photon up-conversion technique for polymer recycling purposes“. In: *Polymers* 9.9 (2017), S. 435.
- [6] A. Beil, R. Daum, R. Harig und G. Matz. „Remote sensing of atmospheric pollution by passive FTIR spectrometry“. In: *Spectroscopic Atmospheric Environmental Monitoring Techniques*. Proc. SPIE 3493. 1998.
- [7] M. Ben-Ezra, A. Zomet und S. K. Nayar. „Video super-resolution using controlled subpixel detector shifts“. In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 27.6 (2005), S. 977–987.
- [8] H. J. Bernstein und G. Herzberg. „Rotation-vibration spectra of diatomic and simple polyatomic molecules with long absorbing paths. I. The spectrum of fluoroform (CHF₃) from 2.4 to 0.7“. In: *The Journal of Chemical Physics* 16.1 (1948), S. 30–39.
- [9] F. Borondics, M. Jossent, C. Sandt, L. Lavoute, D. Gaponov, A. Hideur, P. Dumas et al. „Supercontinuum-based Fourier transform infrared spectromicroscopy“. In: *Optica* 5.4 (2018), S. 378–381.

- [10] O. Buse, G. Beichert, A. Kraft und E. Reithmeier. „Miniaturisiertes low-cost Fourierspektrometer für ein mikrooptisches Blutanalyzesystem“. In: *DGaO Proceedings* (2006).
- [11] J. Craven-Jones, M. W. Kudenov, M. G. Stapelbroek und E. L. Dereniak. „Infrared hyperspectral imaging polarimeter using birefringent prisms“. In: *Applied Optics* 50.8 (2011), S. 1170–1185.
- [12] *DIN 5031: Teil 7: Strahlungsphysik im optischen Bereich und Lichttechnik; Benennung der Wellenlängenbereiche (IR, VIS und UV)*. 1984.
- [13] A. De Luca, S. Z. Ali, R. Hopper, S. Boual, J. W. Gardner und F. Udrea. „Filterless non-dispersive infra-red gas detection: A proof of concept“. In: *2017 IEEE 30th International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS)*. 2017, S. 1220–1223.
- [14] W. Demtröder. *Laser Spectroscopy - Volume 1: Basic Principles*. 4. Aufl. Springer, 2008.
- [15] M. P. Dierking und M. A. Karim. „Solid-block stationary Fourier-transform spectrometer“. In: *Applied Optics* 35.1 (1996), S. 84–89.
- [16] G. Druart, S. Rommeluere, T. Viale, N. Guerineau, I. Ribet-Mohamed, A. Crastes, A. Durand et al. „Modulation transfer function measurement of microbolometer focal plane array by Lloyd’s mirror method“. In: *Infrared Imaging Systems: Design, Analysis, Modeling, and Testing XXV*. Proc. SPIE 9071. 2014.
- [17] I. F. Duarte, A. Barros, C. Almeida, M. Spraul und A. M. Gil. „Multivariate analysis of NMR and FTIR data as a potential tool for the quality control of beer“. In: *Journal of agricultural and food chemistry* 52.5 (2004), S. 1031–1038.
- [18] N. Ebizuka, M. Wakaki, Y. Kobayashi und S. Sato. „Development of a multichannel Fourier transform spectrometer“. In: *Applied Optics* 34.34 (1995), S. 7899–7906.
- [19] C. Fernandez, B. D. Guenther, M. E. Gehm, D. J. Brady und M. E. Sullivan. „Longwave infrared (LWIR) coded aperture dispersive spectrometer“. In: *Optics Express* 15.9 (2007), S. 5742–5753.
- [20] Y. Ferrec und J. Primot. „Spaceborne hyperspectral imaging with a static Fourier transform spectrometer“. In: *SPIE Newsroom* 1 (2013).
- [21] R. E. Fischer, B. Tadic-Galeb und P. R. Yoder Jr. *Optical System Design*. 2. Aufl. MacGraw-Hill, 2008.

- [22] P. B. Garcia-Allende, O. M. Conde, J. Mirapeix, A. Cobo und J. M. Lopez-Higuera. „Quality control of industrial processes by combining a hyperspectral sensor and Fisher’s linear discriminant analysis“. In: *Sensors and Actuators B: Chemical* 129.2 (2008), S. 977–984.
- [23] N. Gat. „Imaging spectroscopy using tunable filters: a review“. In: *Wavelet Applications VII*. Proc. SPIE 4056. 2000.
- [24] N. Gat, S. Subramanian, S. Ross, C. C. LaBaw und J. Bond. „Thermal infrared imaging spectrometer (TIRIS) status report“. In: *Infrared Technology and Applications XXIII*. Proc. SPIE 3061. 1997.
- [25] G. Gauglitz und T. Vo-Dinh. *Handbook of Spectroscopy*. 1. Aufl. Wiley-VCH, 2003.
- [26] J. Genest, P. Tremblay und A. Villemaire. „Throughput of tilted interferometers“. In: *Applied Optics* 37.21 (1998), S. 4819–4822.
- [27] A. Genner, C. Gasser, H. Moser, J. Ofner, J. Schreiber und B. Lendl. „On-line monitoring of methanol and methyl formate in the exhaust gas of an industrial formaldehyde production plant by a mid-IR gas sensor based on tunable Fabry-Pérot filter technology“. In: *Analytical and bioanalytical chemistry* 409.3 (2017), S. 753–761.
- [28] D. T. Gillespie, A. L. Olsen und L. W. Nichols. „Transmittance of optical materials at high temperatures in the 1- μ to 12- μ range,“ in: *Applied Optics* 4.11 (1965), S. 1488–1493.
- [29] H. González-Núñez, C. Vázquez-Vázquez, E. L. Lago, M. D. Mouriz, C. Montero-Orille, X. Prieto-Blanco und R. de La Fuente. „Design, calibration and assembly of an Offner imaging spectrometer“. In: *Journal of Physics: Conference Series* 274 (2011).
- [30] A.A. Gowen, C.P. O’Donnell, P.J. Cullen, G. Downey und J.M. Frias. „Hyperspectral imaging - an emerging process analytical tool for food quality and safety control“. In: *Trends in Food Science & Technology* 18.12 (2007), S. 590–598.
- [31] L. Greengard und J.-Y. Lee. „Accelerating the nonuniform fast Fourier transform“. In: *SIAM Review* 46.3 (2004), S. 443–454.
- [32] P. R. Griffiths und J. A. de Haseth. *Fourier Transform Infrared Spectrometry*. 2. Aufl. John Wiley & Sons Inc., 2007.
- [33] P. R. Griffiths, Sloane, H. J. und Hannah, R. W. „Interferometers vs monochromators: separating the optical and digital advantages“. In: *Applied Spectroscopy* 31 (1977), S. 485–495.

- [34] H. Gross. *Handbook of Optical Systems, Vol. 2: Physical Image Formation*. 1. Aufl. Wiley-VCH, 2005.
- [35] H. Günzler und H.U. Gremlich. *IR-Spektroskopie: Eine Einführung*. 3. Aufl. Wiley-VCH, 1996.
- [36] M. Hashimoto und S. Kawata. „Multichannel Fourier-transform infrared spectrometer“. In: *Applied Optics* 31.28 (1992), S. 6096–6101.
- [37] *Hawkeye Technologies*. <http://www.hawkeyetechnologies.com>. Abgerufen am 10.09.2020.
- [38] E. Hecht. *Optics*. 4. Aufl. WILEY-VCH, 2007.
- [39] J. Heland, K. Schaefer und R. Haus. „Hot exhaust gases with passive FTIR emission spectroscopy“. In: *Spectroscopic Atmospheric Environmental Monitoring Techniques*. Proc. SPIE 3493. 1998.
- [40] M. Herring, T. G. Chrien, V. G. Duval und T. N. Krabach. „Imaging spectrometry: concepts and system trade-offs“. In: *Infrared and Millimeter-Wave Engineering*. Proc. SPIE 1874. 1993.
- [41] M. Hesse, H. Meier und B. Zeeh. *Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie*. Georg Thieme Verlag, 2005.
- [42] J. Hodgkinson und R. P. Tatam. „Optical gas sensing: a review“. In: *Measurement Science and Technology* 24.012004 (2013).
- [43] R. F. Horton. „Optical design for a high-étendue imaging Fourier-transform spectrometer“. In: *Imaging Spectrometry II*. Proc. SPIE 2819. 1996.
- [44] M. Huang, Q.-S. Cai und L.-X. Cong. „Spectral resolution enhancement of Fourier transform spectrometer based on orthogonal shear interference using Wollaston prism“. In: *AOPC 2017: Optical Spectroscopy and Imaging*. Proc. SPIE 10461. 2017.
- [45] F. A. Iñón, S. Garrigues und M. de La Guardia. „Nutritional parameters of commercially available milk samples by FTIR and chemometric techniques“. In: *Analytica Chimica Acta* 513.2 (2004), S. 401–412.
- [46] J. Chen, C. Viatte, J. K. Hedelius, T. Jones, J. E. Franklin, H. Parker, E. W. Gottlieb, P. O. Wennberg, M. K. Dubey und S. C. Wofsy. „Differential column measurements using compact solar-tracking spectrometers“. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 16.13 (2016), S. 8479–8498.
- [47] J. F. James. „On the design of Czerny-Turner charge-coupled device spectrographs“. In: *Journal of Modern Optics* 41.10 (1994), S. 2033–2042.
- [48] R. G. Jaacks und H. Rippel. „Double pendulum Michelson interferometer with extended spectral resolution“. In: *Applied Optics* 28.1 (1989), S. 29–30.

- [49] J. W. Jeter und K. R. Blasius. „Wedge spectrometer concepts for space IR remote sensing“. In: *Optical Spectroscopic Techniques and Instrumentation for Atmospheric and Space Research III*. Proc. SPIE 3756. 1999.
- [50] M. L. Junttila. „Stationary Fourier-transform spectrometer“. In: *Applied Optics* 31.21 (1992), S. 4106–4112.
- [51] M. Kastek, T. Piatkowski, M. Zyczkowski, M. Chamberland, P. Lagueux und V. Farley. „Hyperspectral imaging infrared sensor used for enviromental monitoring“. In: *Acta Physica Polonica A* 124.3 (2013), S. 463–467.
- [52] W. Kessler. *Multivariate Datenanalyse*. 1. Aufl. WILEY-VCH, 2006.
- [53] J. Kilgus, G. Langer, K. Duswald, R. Zimmerleiter, I. Zorin, T. Berer und M. Brandstetter. „Diffraction limited mid-infrared reflectance microspectroscopy with a supercontinuum laser“. In: *Optics Express* 26.23 (2018), S. 30644–30654.
- [54] C. Krafft, D. Codrich, G. Pelizzo und V. Sergo. „Raman and FTIR microscopic imaging of colon tissue: a comparative study“. In: *Journal of Biophotonics* 1.2 (2008), S. 154–169.
- [55] P. W. Kruse. „Uncooled IR focal plane arrays“. In: *Infrared Technology XXI*. Proc. SPIE 2552. 1995.
- [56] M. W. Kudenov, N. A. Hagen, E. L. Dereniak und G. R. Gerhart. „Fourier transform channeled spectropolarimetry in the MWIR“. In: *Optics Express* 15.20 (2007), S. 12792–12805.
- [57] A. Lacan, F.-M. Breon, A. Rosak, F. Brachet, L. Roucayrol, P. Etcheto, C. Casteras et al. „A static Fourier transform spectrometer for atmospheric sounding: concept and experimental implementation“. In: *Optics Express* 18.8 (2010), S. 121069.
- [58] E. N. Lewis, P. J. Treado, R. C. Reeder, G. M. Story, A. E. Dowrey, C. Marcott und I. W. Levin. „Fourier transform spectroscopic imaging using an infrared focal-plane array detector“. In: *Analytical Chemistry* 67.19 (1995), S. 3377–3381.
- [59] H. H. Li. „Refractive index of ZnS, ZnSe, and ZnTe and its wavelength and temperature derivatives“. In: *J. Phys. Chem. Ref. Data* 13.103 (1994), S. 103–150.
- [60] J. Li, C. Qu, H. Wu und C. Qi. „Spectral resolution enhanced static Fourier transform spectrometer based on a birefringent retarder array“. In: *Optics express* 27.11 (2019), S. 15505–15517.
- [61] J. Li, J. Zhu und H. Wu. „Compact static Fourier transform imaging spectropolarimeter based on channeled polarimetry“. In: *Optics Letters* 35.22 (2010), S. 3784–3786.

- [62] Y. Li, J.-D. Wang, Z.-H. Huang, H.-Q. Xu und X.-T. Zhou. „Monitoring leaking gases by OP-FTIR remote sensing“. In: *Journal of Environmental Science and Health, Part A* 37.8 (2002), S. 1453–1462.
- [63] G. Lu und B. Fei. „Medical hyperspectral imaging: a review“. In: *Journal of Biomedical Optics* 19.1 (2014), S. 10901.
- [64] P. G. Lucey, K. A. Horton, T. J. Williams, K. Hinck, C. Budney, B. Rafert und T. B. Rusk. „SMIFTS: a cryogenically cooled, spatially modulated imaging infrared interferometer spectrometer“. In: *Imaging Spectrometry of the Terrestrial Environment*. Proc. SPIE 1937. 1993.
- [65] P. G. Lucey und B. B. Wilcox. „Mini-SMIFTS: an uncooled LWIR hyperspectral sensor“. In: *Imaging Spectrometry IX*. Proc. SPIE 5159. 2004.
- [66] M. Czerny and A. F. Turner. „Über den Astigmatismus bei Spiegelspektrometern“. In: *Zeitschrift für Physik* 61 (1930), S. 792–797.
- [67] X. Meng, J. Li, H. Song und R. Zhu. „Full-Stokes Fourier-transform imaging spectropolarimeter using a time-division polarization modulator“. In: *Applied Optics* 53.24 (2014), S. 5275–5282.
- [68] L. Mertz. „Auxiliary computation for Fourier spectrometry“. In: *Infrared Physics* 7.1 (1967), S. 17–23.
- [69] *Micro-Hybrid Electronics GmbH*. <https://www.microhybrid.com>. Abgerufen am 10.09.2020.
- [70] K. D. Möller. „Wave-front-dividing array interferometers without moving parts for real-time spectroscopy from the IR to the UV“. In: *Applied Optics* 34.9 (1995), S. 1493–1501.
- [71] H. Mortimer. *Compact Interferometer Spectrometer*. U.S. Patent 9046412B2, Jun. 2015.
- [72] S. Niu, G. Joe, H. Zhao, Y. Zhou, T. Orvis, H. Huyan, J. Salman et al. „Giant optical anisotropy in a quasi-one-dimensional crystal“. In: *Nature Photonics* 12 (2018), S. 392–396.
- [73] P. W. Nugent, J. A. Shaw und N. J. Pust. „Correcting for focal-plane-array temperature dependence in microbolometer infrared cameras lacking thermal stabilization“. In: *Optical Engineering* 52.6 (2013), S. 061304.
- [74] K. Oka und T. Kato. „Spectroscopic polarimetry with a channeled spectrum“. In: *Optics Letters* 24.21 (1999), S. 1475–1477.
- [75] T. Okamoto, S. Kawata und S. Minami. „Fourier transform spectrometer with a self-scanning photodiode array“. In: *Applied Optics* 23.2 (1984), S. 269–273.

- [76] R. Olbrycht und B. Wiecek. „New approach to thermal drift correction in microbolometer thermal cameras“. In: *Quantitative InfraRed Thermography Journal* 12.2 (2015), S. 184–195.
- [77] R. Olbrycht, B. Wiecek und G. De Mey. „Thermal drift compensation method for microbolometer thermal cameras“. In: *Applied Optics* 51.11 (2012), S. 1788–1794.
- [78] J. Ollesch, M. Heinze, H. M. Heise, T. Behrens, T. Brüning und K. Gerwert. „It’s in your blood: spectral biomarker candidates for urinary bladder cancer from automated FTIR spectroscopy“. In: *Journal of Biophotonics* 7.3-4 (2014), S. 210–221.
- [79] A. Oriana, J. Réhault, F. Preda, D. Polli und G. Cerullo. „Scanning Fourier transform spectrometer in the visible range based on birefringent wedges“. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 33.7 (2016), S. 1415–1420.
- [80] M. J. Padgett und A. R. Harvey. „A static Fourier–transform spectrometer based on Wollaston prisms“. In: *Review of Scientific Instruments* 66.4 (1995), S. 2807–2811.
- [81] M. J. Padgett, A. R. Harvey, A. J. Duncan und W. Sibbett. „Single-pulse, Fourier-transform spectrometer having no moving parts“. In: *Applied Optics* 33.25 (1994), S. 6035–6040.
- [82] F. L. Pedrotti. *Optik für Ingenieure: Grundlagen*. 3. Aufl. Springer, 2005.
- [83] M. C. Phillips und N. Hô. „Infrared hyperspectral imaging using a broadly tunable external cavity quantum cascade laser and microbolometer focal plane array“. In: *Optics Express* 16.3 (2008), S. 1836–1845.
- [84] S. G. Porter. „A brief guide to pyroelectric detectors“. In: *Ferroelectrics* 33.1 (1981), S. 193–206.
- [85] J. B. Rafert, R. G. Sellar und J. H. Blatt. „Monolithic Fourier-transform imaging spectrometer“. In: *Applied Optics* 34.31 (1995), S. 7228–7230.
- [86] L. Ravikanth, D. S. Jayas, N. D. G. White, P. G. Fields und D.-W. Sun. „Extraction of spectral information from hyperspectral data and application of hyperspectral imaging for food and agricultural products“. In: *Food and Bioprocess Technology* 10 (2017), S. 1–33.
- [87] F. M. Reininger. „The application of large format, broadband quantum well infrared photodetector arrays to spatially modulated prism interferometers“. In: *Infrared Physics & Technology* 42.3-5 (2001), S. 345–362.
- [88] D. C. Reuter, A. A. Simon, J. Hair, A. Lunsford, S. Manthripragada, V. Bly, B. Bos et al. „The OSIRIS-REx visible and infrared spectrometer (OVIRS): spectral maps of the asteroid Bennu“. In: *Space Science Reviews* 214 (2018), S. 54.

- [89] L. E. Rodriguez-Saona und M. E. Allendorf. „Use of FTIR for rapid authentication and detection of adulteration of food“. In: *Annual Review of Food Science and Technology* 2.1 (2011), S. 467–483.
- [90] A. Rogalski. „Infrared Detectors for the Future“. In: *Acta Physica Polonica A* 116.3 (2009), S. 389–406.
- [91] A. Rogalski und J. Piotrowski. „Intrinsic Infrared Detectors“. In: *Progress in Quantum Electronics* 12.2-3 (1988), S. 87–289.
- [92] Y. Roggo, A. Edmond, P. Chalus und M. Ulmschneider. „Infrared hyperspectral imaging for qualitative analysis of pharmaceutical solid forms“. In: *Analytica Chimica Acta* 535.1 (2005), S. 79–87.
- [93] M. E. Schaepman. „Imaging spectrometers“. In: *The SAGE handbook of remote sensing*. Hrsg. von T. A. Warner, M. D. Nellis und G. M. Foody. SAGE Publishing, 2009. Kap. 12.
- [94] M. Schardt. *Static Fourier transform spectrometer*. U.S. Patent US2018 / 0066990 A1, Mar. 2018.
- [95] M. Schardt. „Statisches Einzelspiegel-Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer“. Dissertation. Technische Universität München, 2018.
- [96] M. Schardt, P. J. Murr, M. S. Rauscher, A. J. Tremmel, B. R. Wiesent und A. W. Koch. „Static Fourier transform infrared spectrometer“. In: *Optics Express* 24.7 (2016), S. 7767–7776.
- [97] M. Schardt, M. S. Rauscher, P. J. Murr, A. J. Tremmel und A. W. Koch. „Messraten statischer Einzelspiegel-Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer bei Verwendung von Mikrobolometerdetektoren“. In: *tm - Technisches Messen* 84.3 (2017).
- [98] M. Schardt, C. Schwaller, A. J. Tremmel und A. W. Koch. „Thermal stabilization of static single-mirror Fourier transform spectrometers“. In: *Next-Generation Spectroscopic Technologies X*. Proc. SPIE 10210. 2017.
- [99] M. Schardt, A. J. Tremmel, M. S. Rauscher, P. J. Murr und A. W. Koch. „Spectral bandwidth limitations of static common-path and single-mirror Fourier transform infrared spectrometers“. In: *Light, Energy and the Environment*. OSA. 2016.
- [100] R. G. Sellar und G. D. Boreman. „Classification of imaging spectrometers for remote sensing applications“. In: *Optical Engineering* 44.1 (2005).
- [101] R. G. Sellar und J. B. Rafert. „Fourier-transform imaging spectrometer with a single toroidal optic“. In: *Applied Optics* 34.16 (1995), S. 2931–2933.

- [102] A. Sémary, J.-M. Réess, F. Lemarquis, P. Drossart, D. Laubier und P. Bernardi. „Wedge filter imaging spectrometer“. In: *International Conference on Space Optics*. Proc. SPIE 10563. 2017.
- [103] G. A. Shaw und H. K. Burke. „Spectral Imaging for Remote Sensing“. In: *Lincoln Laboratory Journal* 14.1 (2003), S. 3–28.
- [104] F. Snik, T. Karalidi und C. U. Keller. „Spectral modulation for full linear polarimetry“. In: *Applied Optics* 48.7 (2009), S. 1337–1346.
- [105] D.W. Sun, Hrsg. *Hyperspectral Imaging for Food Quality Analysis and Control*. 1. Aufl. Elsevier, 2010.
- [106] J. V. Sweedler und M. B. Denton. „Spatially encoded Fourier transform spectroscopy in the ultraviolet to near-infrared“. In: *Applied Spectroscopy* 43.8 (2016), S. 1378–1384.
- [107] J. L. Tissot, C. Trouilleau, B. Fieque, A. Crastes und O. Legras. „Uncooled microbolometer detector: recent developments at ULIS“. In: *Opto-Electronics Review* 14.1 (2006), S. 25–32.
- [108] G. Totschnig, F. Winter, V. Pustogov, J. Faist und A. Müller. „Mid-infrared external-cavity quantum-cascade laser“. In: *Optics Letters* 27.20 (2002), S. 1788–1790.
- [109] S. Venck, F. St-Hilaire, L. Brilland, A. N. Ghosh, R. Chahal, C. Caillaud, M. Meneghetti et al. „2-10 μm mid-infrared supercontinuum generation in cascaded optical fibers: experiment and modelling“. In: *Nonlinear Frequency Generation and Conversion: Materials and Devices XIX*. Proc. SPIE 11264. 2020.
- [110] W. Wang und J. Paliwal. „Near-infrared spectroscopy and imaging in food quality and safety“. In: *Sensing and Instrumentation for Food Quality and Safety* 1 (2007), S. 193–207.
- [111] S. Wartewig. *IR and Raman spectroscopy: fundamental processing*. 1. Aufl. John Wiley & Sons, 2003.
- [112] A. Watanabe und H. Furukawa. „Super-resolution technique for high-resolution multichannel Fourier transform spectrometer“. In: *Optics Express* 26.21 (2018), S. 27787–27797.
- [113] S. Weise, B. Steinbach und S. Biermann. „MEMS-based IR-sources“. In: *Silicon Photonics XI*. Proc. SPIE 9752. 2016.
- [114] J. U. White. „Long optical paths of large aperture“. In: *J. Opt. Soc. Am.* 32.5 (1942), S. 285–288.

- [115] B. R. Wiesent. „Miniaturisiertes Infrarot-Spektrometer zur Online-Ölzustandsüberwachung in Offshore-Windkraftgetrieben“. Dissertation. Technische Universität München, 2014.
- [116] C. T. Willoughby, M. A. Folkman und M. A. Figueroa. „Application of hyperspectral-imaging spectrometer systems to industrial inspection“. In: *Three-Dimensional and Unconventional Imaging for Industrial Inspection and Metrology*. Proc. SPIE 2599. 1996.
- [117] J.-J. Yon, E. Mottin und J.-L. Tissot. „Latest amorphous silicon microbolometer developments at LETI-LIR“. In: *Infrared Technology and Applications XXXIV*. SPIE 6940. 2008.
- [118] K. Yoshihara, K. Nakashima und M. Higuchi. „Holographic spectroscopy using a Mach-Zehnder interferometer“. In: *Japan J. Appl. Phys.* 15.6 (1976), S. 1169–1170.
- [119] L. Yu, Y. Guo, H. Zhu, M. Luo, P. Han und X. Ji. „Low-cost microbolometer type infrared detectors“. In: *Micromachines* 11.9 (2020), S. 800.
- [120] G. Zhan. „Static Fourier-transform spectrometer with spherical reflectors“. In: *Applied Optics* 41.3 (2002), S. 560–563.
- [121] C. Zhang, Q. Li, T. Yan, T. Mu und Y. Wei. „High throughput static channeled interference imaging spectropolarimeter based on a Savart polariscope“. In: *Optics Express* 24.20 (2016), S. 23314–23332.

Eigene Veröffentlichungen

- [122] X. Dong, J. Dong, A. K. Yetisen, M. H. Köhler, S. Wang, M. Jakobi und A. W. Koch. „Characterization and layer thickness mapping of two-dimensional MoS₂ flakes via hyperspectral line-scanning microscopy“. In: *Applied Physics Express* 12.10 (2019), S. 3393–3400. DOI: 10.1364/AO.58.003393.
- [123] X. Dong, M. Jakobi, S. Wang, M. H. Köhler, X. Zhang und A. W. Koch. „A review of hyperspectral imaging for nanoscale materials research“. In: *Appl. Spectrosc. Rev.* (2018). DOI: 10.1080/05704928.2018.1463235.
- [124] X. Dong, M. H. Köhler, M. Jakobi und A. W. Koch. „Hyperspectral imaging microscopy for thickness measurement and surface characterization of layered MoS₂“. In: *Optical Measurement Systems for Industrial Inspection XI*. Proc. SPIE 11056. 2019. DOI: 10.1117/12.2530384.

- [125] X. Dong, M. H. Köhler, K. Wang, M. Jakobi und A. W. Koch. „Mapping the optical dielectric response of isolated monolayer MoS₂ by push-broom microspectroscopy“. In: *Unconventional Optical Imaging II*. Proc. SPIE 11351. 2020. DOI: 10.1117/12.2540501.
- [126] X. Dong, Z. Li, J. Dong, K. Wang, M. H. Köhler, Martin Jakobi und Alexander W. Koch. „Line-scan hyperspectral imaging microscopy with structured illumination“. In: *Unconventional Imaging and Adaptive Optics*. Proc. SPIE 11508. 2020. DOI: 10.1117/12.2565944.
- [127] X. Dong, K. Wang, J. Dong, M. H. Köhler, M. Jakobi, und A. W. Koch. „Hyperspectral imaging microscopy and nanoscopy: theory and practice“. In: Doktorandenkonferenz zur Diskussion optischer Konzepte (2019).
- [128] X. Dong, A. K. Yetisen, M. H. Köhler, J. Dong, S. Wang, M. Jakobi, X. Zhang et al. „Microscale spectroscopic mapping of 2D optical materials“. In: *Advanced Optical Materials* 7 (2019). DOI: 10.1002/adom.201900324.
- [129] X. Dong, A. K. Yetisen, H. Tian, J. Dong, M. H. Köhler, M. Jakobi und A. W. Koch. „Analyses of hyperspectral imaging microscopy data sets of semiconducting 2D materials“. In: *Applied Physics Express* 13.5 (2020). DOI: 10.35848/1882-0786/ab88c7.
- [130] X. Dong, A. K. Yetisen, H. Tian, I. Güler, A. V. Stier, Z. Li, M. H. Köhler et al. „Line-scan hyperspectral imaging microscopy with linear unmixing for automated two-dimensional crystals identification“. In: *ACS Photonics* 7.5 (2020), S. 1216–1225. DOI: 10.1021/acsp Photonics.0c00050.
- [131] M. A. Graf, C. Eisermann, F. Ehmer, M. H. Köhler, M. Jakobi und A. W. Koch. „Damage detection in cable braidings using integrated fiber-optic reflectors“. In: *Photonic Fiber and Crystal Devices: Advances in Materials and Innovations in Device Applications XII*. Proc. SPIE 10755. 2018. DOI: 10.1117/12.2319283.
- [132] P. Kienle, L. Batarilo, M. Akgül, M. H. Köhler, K. Wang, M. Jakobi und Alexander W. Koch. „Optical setup for error compensation in a laser triangulation system“. In: *Sensors* 20.17 (2020), S. 4949. DOI: 10.3390/s20174949.
- [133] P. Kienle, M. H. Köhler, K. Wang, Martin Jakobi und Alexander W. Koch. „Increasing the sensitivity of laser triangulation systems using structured optical surfaces“. In: *ODS 2020: Industrial Optical Devices and Systems*. Proc. SPIE 11500. 2020. DOI: 10.1117/12.2566094.
- [134] P. Kienle, E. Nallar, M. H. Köhler, M. Jakobi und A. W. Koch. „Analysis of sub-pixel laser spot detection in laser triangulation systems“. In: *Optical Measurement Systems for Industrial Inspection XI*. Proc. SPIE 11056. 2019. DOI: 10.1117/12.2525669.

- [135] M. H. Köhler, M. Müller, M. Schardt, P. Kienle, X. Dong und A. W. Koch. „Statisches Fourier-Transformationsspektrometer für den mittleren Infrarotbereich mit erhöhter spektraler Auflösung“. In: *DGaO Proceedings* (2019).
- [136] M. H. Köhler, S. S. Naßl, P. Kienle, X. Dong und A. W. Koch. „Broadband static Fourier transform mid-infrared spectrometer“. In: *Applied Optics* 58.13 (2019), S. 3393–3400. DOI: 10.1364/AO.58.003393.
- [137] M. H. Köhler, S. S. Naßl, M.S. Rauscher, M. A. Graf und A. W. Koch. „ATR-Messsystem zur Fluidanalyse mit statischen Fourier-Transformations-Infrarotspektrometern“. In: *DGaO Proceedings* (2018).
- [138] M. H. Köhler, T. T. Nguyen, P. Kienle, X. Dong und A. W. Koch. „Setup and evaluation of a static imaging Fourier transform spectrometer for the mid-infrared spectral range“. In: *Optical Measurement Systems for Industrial Inspection XI*. Proc. SPIE 11056. 2019. DOI: 10.1117/12.2525600.
- [139] M. H. Köhler, T. T. Nguyen, P. Kienle, X. Dong, M. Schardt, M. Jakobi und A. W. Koch. „Hyperspectral imager for the mid-infrared spectral range using a single-mirror interferometer and a windowing method“. In: *OSA Continuum* 2.11 (2019), S. 3212–3222. DOI: 10.1364/OSAC.2.003212.
- [140] M. H. Köhler, M. Schardt, H. B. Ghazala, E. Colicchia, P. Kienle, X. Dong, K. Wang et al. „Static Fourier transform mid-infrared spectrometer with continuous background correction“. In: *Applied Optical Metrology III*. Proc. SPIE 11102. 2019. DOI: 10.1117/12.2528404.
- [141] M. H. Köhler, M. Schardt, M. Müller, P. Kienle, K. Wang, X. Dong, C. Giebeler et al. „Static Fourier transform mid-infrared spectrometer with increased spectral resolution using a stepped mirror“. In: *OSA Continuum* 3.8 (2020), S. 2134–2142. DOI: 10.1364/OSAC.397095.
- [142] M. H. Köhler, M. Schardt, M. S. Rauscher und A. W. Koch. „Gas measurement using static Fourier transform infrared spectrometers“. In: *Sensors* 17.11 (2017). DOI: 10.3390/s17112612.
- [143] M. H. Köhler, B. C. Vauth, C. J. Kiesselbach, X. Dong, K. Wang, P. Kienle, M. Schardt et al. „Compact static Fourier transform spectrometer for time-resolved mid-infrared spectroscopy“. In: *Electro-optical and Infrared Systems: Technology and Applications XVII*. Proc. SPIE 11537. 2020. DOI: 10.1117/12.2571489.
- [144] M. S. Rauscher, M. Krump, M. Schardt, M. H. Köhler und A. W. Koch. „Multivariate Kalibrationsverfahren für einen nicht-dispersiven Infrarotsensor zur Ölzustandsüberwachung in Verbrennungsmotoren“. In: *tm - Technisches Messen* 85.6 (2018), S. 395–409. DOI: 10.1515/teme-2018-0001.

- [145] M. S. Rauscher, M. Schardt, M. H. Köhler und A. W. Koch. „Dual-channel mid-infrared sensor based on tunable Fabry-Pérot filters for fluid monitoring applications“. In: *Sensors and Actuators B: Chemical* 259 (2018), S. 420–427. DOI: 10.1016/j.snb.2017.12.032.
- [146] M. S. Rauscher, M. Schardt, A. J. Tremmel, M. H. Köhler und A. W. Koch. „Nicht-dispersiver Infrarotsensor für die Ölzustandsüberwachung in Verbrennungsmotoren“. In: *tm - Technisches Messen* 84.s1 (2017). DOI: 10.1515/teme-2017-0027.
- [147] K. Wang, X. Dong, M. H. Köhler, P. Kienle, Q. Bian, M. Jakobi und Alexander W. Koch. „Advances in optical fiber sensors based on multimode interference (MMI): a review“. In: *IEEE Sensors* (2020). DOI: 10.1109/JSEN.2020.3015086.

Betreute studentische Arbeiten

- [148] Johannes Apfelböck. *Structure, Functionality, Parameters and Challenges of Uncooled Microbolometers*. Hauptseminar. Nov. 2017.
- [149] Hamza Ben Ghazala. *Entwicklung und Evaluierung eines breitbandigen statischen Fourier-Transformations-Spektrometers mit kontinuierlicher Backgroundkorrektur*. Masterarbeit. März 2019.
- [150] Ennio Colicchia. *Entwicklung und Auswertung einer kontinuierlichen Backgroundkorrektur für ein statisches FTIR-Spektrometer*. Bachelorarbeit. Sep. 2019.
- [151] Feryanto. *Development of a Transmission Measurement Setup Using a Static FTIR Spectrometer*. Bachelorarbeit. Dez. 2017.
- [152] Maximilian Fink. *Hyperspektral-Imager für den mittleren Infrarotbereich*. Hauptseminar. Feb. 2019.
- [153] Johann Grabichler. *Online-Prozessüberwachung von hochwertigen Schmierfetten*. Hauptseminar. Jan. 2018.
- [154] Johannes Greil. *Evaluation der messtechnischen Eigenschaften eines kapazitiven Einkanal-Abstandssensors*. Ingenieurspraxis. Mai 2019.
- [155] Martin Hackl. *Labor-Prüfverfahren für hochwertige Schmierfette*. Hauptseminar. März 2018.
- [156] Thomas Hilscher. *Erweiterung eines abbildenden Infrarotspektrometers zur Fluidanalyse in Transflektaanz*. Bachelorarbeit. Aug. 2019.
- [157] Zhazhan Huang. *Design eines statischen FTIR-Spektrometers mit einem Common-Path-Interferometer*. Bachelorarbeit. Okt. 2018.

- [158] Nirvana Husadzic. *Inbetriebnahme eines kompakten statischen FTIR-Spektrometers*. Bachelorarbeit. Sep. 2020.
- [159] Clara Kiesselbach. *Optimierung und Evaluierung eines statischen FTIR-Spektrometers zur Fluidmessung mit hohen Messraten*. Bachelorarbeit. März 2020.
- [160] Johannes Kirmayr. *Simulation der solaren Einstrahlung in eine Kreuzfahrtschiffskabine*. Ingenieurspraxis. Mai 2020.
- [161] Sebastian Knoll. *Auswahl von Leuchtmitteln für eine Kalibrierlampe*. Forschungspraxis. Feb. 2020.
- [162] Sebastian Knoll. *Methoden zur Kamerakalibrierung für statische Fourier-Transformations-Spektrometer*. Hauptseminar. März 2020.
- [163] Matthias Lederle. *Kalibrierungsoptimierung für ein statisches FTIR-Spektrometer*. Forschungspraxis. Nov. 2019.
- [164] Marcel Leitenberger. *Konzepte und Techniken zur Kanten- und Oberflächenerkennung von Glas- und Silizium-Wafern*. Forschungspraxis. Juli 2019.
- [165] Martin Lindermayr. *pH-Wert-Erfassung für die Online-Prozessüberwachung von Schmierölen und Schmierfetten*. Hauptseminar. Sep. 2018.
- [166] Michael Müller. *Increasing the spectral resolution and bandwidth of static Fourier transform spectrometers*. Hauptseminar. Feb. 2019.
- [167] Michael Müller. *Verbesserung der spektralen Auflösung eines statischen Einzelspiegel-Spektrometers durch Verwendung eines Stufenspiegels*. Forschungspraxis. Okt. 2019.
- [168] Tobias Möller. *Programmierung einer Kalibrieroutine zur Bestimmung der geometrischen Parameter eines statischen FTIR-Spektrometers*. Projektpraktikum. Jan. 2018.
- [169] Stefan Naßl. *Design und Optimierung eines ATR-Moduls für ein statisches Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer*. Masterarbeit. Nov. 2018.
- [170] Stefan Naßl. *Infrarotspektroskopie mittels abgeschwächter Totalreflexion*. Hauptseminar. Jan. 2018.
- [171] Stefan Naßl. *Konzeptprüfung eines statischen Spektrometeraufbaus mit Konkavspiegel*. Projektpraktikum. Dez. 2018.
- [172] The Thien Nguyen. *Entwicklung eines abbildenden Spektrometers für den mittleren Infrarotbereich*. Masterarbeit. März 2019.
- [173] Gerrit Noske. *Marktanalyse zu Sensoren für die Online-Qualitätsüberwachung in der Schmierfetherstellung*. Hauptseminar. Juli 2018.

-
- [174] Arber Salihu. *Entwicklung eines Lichtquellenmoduls für ein statisches single-mirror Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer*. Bachelorarbeit. Jan. 2018.
- [175] Jonas Tingaud. *Entwicklung einer C-Sharp Dynamic Link Library zur Echtzeitberechnung von Infrarotspektren*. Bachelorarbeit. Dez. 2017.
- [176] Bastian Vauth. *Entwicklung und Evaluierung eines kompakten statischen FTIR-Spektrometers zur Fluidanalyse*. Bachelorarbeit. März 2020.

