

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

INSTITUTO DE INGENIERÍA
MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS E INGENIERÍA



Análisis de la simulación de espectrometría Raman

T E S I S

que presenta para obtener el grado de **MAESTRIA EN INGENIERÍA**

SHARON EZRRE GONZÁLEZ

DIRECTOR DE TESIS:

DR. MARCO ANTONIO REYNA CARRANZA

CODIRECTORA DE TESIS:

DRA. ROSA CITLALI ANGUIANO COTA

MEXICALI B.C.

JUNIO DEL 2018

Dedicatoria

A mi familia, que siempre ha iluminado mi camino.

Agradecimientos

A Dios por haberme dado la dicha de existir y ponerme en los brazos de una familia que me ama con todo su corazón. Por todas las cosas maravillosas que me ha brindado durante toda mi vida.

A mis padres por siempre apoyarme y guiarme en la toma de mis decisiones y siempre brindarme el impulso en los momentos más difíciles de mi carrera en forma de abrazos y muestras de cariño. Gracias por su confianza, apoyo incondicional y por quererme tanto aun cuando me enoja. Los quiero mucho.

A mi nana quien siempre ha estado ahí apoyándome y brindándome todo su amor incondicional. Te quiero mucho.

A mi hermano que aunque nuestra relación no ha sido la mejor, el verte salir adelante me llena de alegría el corazón. Te quiero mucho.

A Alejandro por apoyarme en mi decisión de iniciar mis estudios de posgrado, por siempre estar ahí para alentarme a seguir adelante con mis metas y por la creación de nuevos sueños juntos. Por tantos momentos pasados y futuros.

A Alexandra por todo el apoyo durante estos dos años y la nueva amistad que se generó entre nosotras.

A la Dra. Citlalli por permitirme trabajar con usted y brindarme todo su apoyo y sus consejos, por su amistad. Muchas gracias.

Al Dr. Reyna por darme la oportunidad de trabajar con usted y creer en mis capacidades. Muchas gracias.

Resumen

La siguiente investigación presenta la simulación y el análisis de dos sistemas de espectrómetros Raman constituidos con los elementos básicos descritos por la literatura a los que se les añadió dos diferentes sistemas colectores de luz: el primero, un reflector elíptico y el segundo, un reflector parabólico. El estudio se realizó por medio del software ZEMAX™, en el cual se analizó el trazo de rayos y el flujo de radiación a través de los componentes presentes en los sistemas. Problemas prácticos como la adición o eliminación de elementos ópticos se examinan para cada arreglo con el objetivo de aumentar al máximo la colección de radiación Raman. La aplicación propuesta para este sistema es el análisis de material particulado colectado por medio de filtros de membrana para el análisis de la calidad del aire. Los resultados demuestran la capacidad de colección de radiación para los sistemas presentados.

Palabras clave: contaminación ambiental, espectroscopía Raman, material particulado, simulación de sistema óptico.

Abstract

The following research presents the simulation and the analysis of two systems of Raman spectrometer constituted with the basic elements described by the literature, to which two different light collector systems were added: the first, an elliptical reflector and the second, a parabolic reflector. The study was carried out using the ZEMAX™ software, in which the ray tracing and the radiation flow through the components present in the systems were analyzed. Practical problems such as the addition or elimination of optical elements are examined for each arrangement in order to maximize the Raman signal collection. The proposed application for this system is the analysis of particulate matter collected by means of membrane filters for the air quality analysis. The results demonstrate the radiation collection capacity for the presented systems.

Key words: environmental pollution, particulate matter, Raman spectroscopy, simulation of optical system.

Tabla de Contenido

Resumen.....	IV
Abstract.....	IV
Índice de Figuras.....	VIII
Índice de Tablas	XIII
Simbología	XV
Objetivos	1
Objetivo General.....	1
Objetivos Específicos.....	1
Meta.....	1
CAPITULO I. Antecedentes	2
1.1. Introducción	2
1.2. Estado del Arte.....	3
CAPITULO II. Marco de Referencia.....	9
2.1. Material Particulado.....	9
2.1.1. Definición.....	9
2.1.2. Toxicología del Material Particulado	10
2.2. Métodos Instrumentales de Análisis Químico	11
2.2.1. Técnicas Instrumentales de Análisis Espectroscópico	12
2.3. Propiedades de la Radiación Electromagnética	12
2.3.1. Modelo Ondulatorio Sinusoidal Clásico.....	13
2.3.2. Modelo Corpuscular	14
2.3.3. Espectro Electromagnético.....	15
2.4. Determinación de la Radiación Electromagnética Como Señal.....	16
2.5. Sistemas Ópticos.....	22
2.5.1. Ley de Snell.....	23
2.5.2. Vidrios Ópticos.....	24
2.5.3. Revestimientos Ópticos	25
2.5.4. Aberraciones Ópticas en Sistemas Ópticos	26
2.5.4.1. Aberraciones Monocromáticas	27
2.5.4.2. Aberraciones Cromáticas.....	30

2.6. Espectroscopía Raman	31
2.6.1. Descripción del Fenómeno	32
2.6.1.1. Teoría Cuántica.....	32
2.6.1.2. Teoría Clásica	33
2.6.2. Tecnologías de Medición de Dispersión Raman	34
2.6.3. Instrumentos	36
2.6.3.1. Fuente de luz monocromática (L.A.S.E.R.).....	38
2.6.3.1.1. Tipos de Láseres	40
2.6.3.2. Monocromadores y Policromadores	44
2.6.3.2.1. Redes de Difracción.....	45
2.6.3.2.2. Diseño de un Monocromador y un Policromador	49
2.6.3.3. Detector	51
2.6.3.4. Arreglo Óptico.....	54
2.6.3.4.1. Lentes.....	55
2.6.3.4.2. Filtros Ópticos	58
2.6.3.4.3. Divisores de Haz.....	61
2.7. Colectores	63
2.7.1. Trazo de Rayos Para Cada Sección Cónica.....	65
2.7.2. Diseño de un Reflector Parabólico y un Reflector Elíptico.....	66
Capítulo III. Arreglos Ópticos y Simulaciones.....	68
3.1. Introducción	68
3.2. Sistema de Espectrómetro Raman sin Reflector	70
3.2.1. Descripción de los Elementos.....	70
3.2.1.1. Fuente de Luz Monocromática	70
3.2.1.2. Arreglo Óptico	71
B. Divisor de Haz	73
3.2.1.3. Espectrómetro	76
3.2.2. Descripción del Sistema de Espectrómetro Raman sin Reflector.....	78
3.2.2.1. Parámetros y Simulaciones para el Sistema de Espectrometría Raman sin Reflector con Divisor de Haz de Placa	78

3.2.2.2. Parámetros y Simulaciones para el Sistema de Espectrometría Raman sin Reflector con Divisor de Haz Cúbico	89
3.3. Sistema de Espectrometría Raman con Reflector Elíptico.....	94
3.3.1. Parámetros de Simulación Utilizados en el Sistema de Espectrómetro Raman con Reflector Elíptico.....	94
3.4. Sistema de Espectrómetro Raman con Reflector Parabólico	103
3.4.1. Descripción de los Elementos.....	104
3.4.1.1. Lente Reductora.....	104
3.4.2. Parámetros de Simulación Utilizados en el Sistema de Espectrometría Raman con Reflector Parabólico	104
Capítulo IV. Análisis de Resultados	113
4.1. Introducción	113
4.2. Comparación del Desempeño de un Espectrómetro Raman Simple con un Divisor de Haz de Placa y un Divisor de Haz Cúbico	114
4.3. Análisis del Tamaño de la Apertura.....	119
4.3.1 Sistema de Espectrómetro Raman sin Reflector.....	119
4.3.2 Sistema de Espectrómetro Raman con Reflector Elíptico	123
4.3.3. Sistema de Espectrómetro Raman con Reflector Parabólico	127
4.4. Análisis de Medianas Para los Tres Sistemas	131
Capítulo V. Conclusiones y Trabajo a Futuro	136
5.1. Conclusiones	136
5.2. Trabajo a Futuro.....	140
Referencias.....	141
Anexo A.....	A-1
Anexo B.....	B-1
Anexo C.....	C-1
Anexo D.....	D-1

Índice de Figuras

<i>Figura 2.1.</i> Diámetro aerodinámico de la fracción ultra-fina, fina y gruesa del material particulado en comparación con el diámetro de un cabello humano y un grano de arena. El diámetro se representa en micrómetros (μm).	10
<i>Figura 2.2.</i> Proceso global de una medición con métodos instrumentales.	12
<i>Figura 2.3.</i> Diagrama de una onda electromagnética polarizada en el plano que muestra el campo eléctrico en Y, el campo magnético en Z y su dirección de propagación en X, además de sus componentes.	13
<i>Figura 2.4.</i> Representación de las diferentes regiones presentes en el espectro electromagnético. ..	16
<i>Figura 2.5.</i> Método de excitación (1) y métodos de caracterización (2).	16
<i>Figura 2.6.</i> Diagrama de diferentes niveles de energía que muestra la absorción de un fotón.....	17
<i>Figura 2.7.</i> Diagrama de diferentes niveles de energía mostrando la emisión de un fotón.	17
<i>Figura 2.8.</i> Dispersión de la radiación por una molécula	18
<i>Figura 2.9.</i> Variación angular que presenta un haz de luz al pasar de un medio con un índice de refracción n_1 a un medio con un índice de refracción n_2	18
<i>Figura 2.10.</i> Análisis para métodos espectroscópicos basados en la difracción de la radiación electromagnética.	19
<i>Figura 2.11.</i> Sistema óptico compuesto por un emisor, óptica y un receptor.....	22
<i>Figura 2.12.</i> Rayo de luz que incide en forma oblicua en una interfase n_1 - n_2 cuyo comportamiento es representado por la Ley de Snell.....	23
<i>Figura 2.13.</i> Rayo de luz que incide en forma oblicua en una interfase n_1 - n_2 cuyo comportamiento es descrito por los modelos de reflexión y refracción.	24
<i>Figura 2.14.</i> Porcentaje de reflexión sobre la superficie S_1 y S_2 de un sustrato.....	24
<i>Figura 2.15.</i> Interferencia de ondas constructiva e interferencia de ondas destructiva.	26
<i>Figura 2.16.</i> Esquemas de a) imagen ideal punto a punto, b) imagen con aberraciones debido a la apertura de un haz de luz incidente monocromático y c) imagen con aberraciones debido a el haz incidente fuera de foco.....	27
<i>Figura 2.17.</i> Diagrama esquemático de la aberración monocromática conocida como astigmatismo. En la imagen se observa la diferencia en el punto de enfoque de los planos tangencial (T) y sagital (S).....	28
<i>Figura 2.18.</i> En la aberración comática, los rayos que inciden fuera del centro de la lente, enfocan a diferente altura de los rayos dentro del centro formando una imagen con forma de cometa.....	28
<i>Figura 2.19.</i> Esquema de la curvatura de campo presente en una lente donde el enfoque de la lente no es plano para aquellos rayos fuera de foco.	29

<i>Figura 2.20.</i> Al colocar un objeto sin distorsión a) fuera de foco cercano al eje óptico, el resultado es la aberración de barril y b) fuera de foco lejano al eje óptico, el resultado es la aberración de cojín.	29
<i>Figura 2.21.</i> Al colocar un objeto sin distorsión a) fuera de foco cercano al eje óptico, el resultado es la aberración de barril y b) fuera de foco lejano al eje óptico, el resultado es la aberración de cojín.	30
<i>Figura 2.22.</i> Diferentes puntos focales para cada color de un haz de luz blanca al atravesar una lente. Como resultado se observan una serie de imágenes superpuestas debido a la aberración cromática axial.	30
<i>Figura 2.23.</i> Diferentes puntos focales para cada color de un haz de luz blanca al atravesar una lente. Como resultado se observan una serie de imágenes superpuestas debido a la aberración cromática lateral.	31
<i>Figura 2.24.</i> Diagrama de los niveles de energía que muestra la línea Rayleigh y las líneas Raman Stokes y Anti-Stokes.	33
<i>Figura 2.25.</i> Arreglo de un espectrómetro de dispersión y transformada de Fourier	35
<i>Figura 2.26.</i> Diagramas esquemáticos de las modalidades básicas de espectroscopia Raman. Retroalimentación convencional Raman, SORS, transmisión Raman y SERS.	36
<i>Figura 2.27.</i> Gráfico de anchura a media altura.	37
<i>Figura 2.28.</i> Diagrama básico del arreglo de los instrumentos que componen un espectroscopio Raman de dispersión.	37
<i>Figura 2.29.</i> Ejemplo típico de dispositivo de emisión láser.	39
<i>Figura 2.30.</i> Operación básica de un láser.	40
<i>Figura 2.31.</i> Flujo de salida de un láser semiconductor en relación con la corriente.	42
<i>Figura 2.32.</i> Estructura de un láser de diodos.	42
<i>Figura 2.33.</i> Bosquejo de la geometría de difracción sobre una red de difracción.	45
<i>Figura 2.34.</i> Dispersión de los componentes de un haz de luz que incide sobre una red de difracción a un orden 1 y orden 2.	47
<i>Figura 2.35.</i> Representación de los componentes de un haz de luz que incide sobre una red de difracción a diferente longitud focal. Se observa que, a mayor distancia focal, mayor dispersión del espectro, con la cual se obtiene una mejor grafica del efecto Raman.	48
<i>Figura 2.36.</i> Comparación entre los tres tipos de redes de difracción más comúnmente utilizados ilustrando la diferencia en la calidad del punto.	49
<i>Figura 2.37.</i> Arreglos típicos para un monocromador	50
<i>Figura 2.38.</i> Arreglos típicos para un policromador.	50
<i>Figura 2.39.</i> Diseño de un CCD iluminado frontalmente y posteriormente.	52
<i>Figura 2.40.</i> Diagrama estructural de a) CCD y b) EMCCD.	54
<i>Figura 2.41.</i> Comparación entre la forma de la superficie de una lente asférica y una lente esférica.	55

<i>Figura 2.42. Tipos de lentes.</i>	<i>56</i>
<i>Figura 2.43. Factores que afectan la apertura angular.....</i>	<i>57</i>
<i>Figura 2.44. Capacidad angular de un objetivo para recolectar luz. En la figura se observa que para ángulos de apertura pequeños la distancia de trabajo es mayor que para ángulos de mayor apertura.</i>	<i>57</i>
<i>Figura 2.45. Gráficos de transmisión y bloqueo para los filtros a) línea laser, b) Edge y c) Notch..</i>	<i>61</i>
<i>Figura 2.46. Diagrama representativo de un divisor de haz cúbico.</i>	<i>62</i>
<i>Figura 2.47. Diagrama de un divisor de haz de placa.</i>	<i>63</i>
<i>Figura 2.48. Tipos de secciones cónicas.</i>	<i>64</i>
<i>Figura 2.49. Trazo de rayos para las diferentes secciones cónicas.....</i>	<i>65</i>
<i>Figura 2.50. Parámetros para la definición de la sección cónica a) elipse y b) parábola.</i>	<i>66</i>
<i>Figura 3.1. Diagrama de bloques del arreglo del sistema de espectrómetro Raman sin reflector</i>	<i>70</i>
<i>Figura 3.2. Sistema de colimación LTN330-B.....</i>	<i>71</i>
<i>Figura 3.3. Lente colectora 355230-B.....</i>	<i>72</i>
<i>Figura 3.4. Lente de enfoque 83-544.</i>	<i>73</i>
<i>Figura 3.5. Ventana de transmisión del divisor de haz de placa 47-025.</i>	<i>74</i>
<i>Figura 3.6. Divisor de haz de placa 47-025.....</i>	<i>74</i>
<i>Figura 3.7. Ventana de transmisión del divisor de haz cúbico BS011.</i>	<i>75</i>
<i>Figura 3.8. Divisor de haz cubico BS011.....</i>	<i>75</i>
<i>Figura 3.9. Ventana de transmisión del filtro Notch NF785-33.....</i>	<i>76</i>
<i>Figura 3.10. Superficie S1 del filtro Notch NF785-33.....</i>	<i>76</i>
<i>Figura 3.11. Espejo cóncavo (C1) CM508-100-E03.....</i>	<i>77</i>
<i>Figura 3.12. Espejo cóncavo (C2) CM750-200-E03.....</i>	<i>77</i>
<i>Figura 3.13. Red de difracción GR50-1208.</i>	<i>78</i>
<i>Figura 3.14. Apertura angular para la lente colectora 355230-B.</i>	<i>82</i>
<i>Figura 3.15. Apertura angular para la lente de enfoque 83-544.....</i>	<i>82</i>
<i>Figura 3.16. Desviación del haz causada por el divisor de haz de placa.....</i>	<i>83</i>
<i>Figura 3.17. Arreglo básico del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.</i>	<i>85</i>
<i>Figura 3.18. Diagrama del sistema en 2D arrojado por la simulación en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.</i>	<i>88</i>
<i>Figura 3.19. Diagrama del sistema en 3D arrojado por la simulación en Zemax™ para el sistema de espectrómetro con divisor de haz de placa. En a) se observa el arreglo óptico y en b) se observa el espectrómetro.....</i>	<i>88</i>
<i>Figura 3.20. Poligon object Prism45.POB.</i>	<i>89</i>
<i>Figura 3.21. Arreglo básico del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.....</i>	<i>90</i>

<i>Figura 3.22.</i> Diagrama de la colocación de los elementos, láser, lente colimadora, lente colectora y fuente puntual al utilizar un divisor de haz cúbico.	92
<i>Figura 3.23.</i> Diagrama del sistema en 2D arrojado por la simulación en Zemax™ para la simulación del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con un divisor de haz cúbico.	93
<i>Figura 3.24.</i> Diagrama del sistema en 3D arrojado por la simulación en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico. En a) se observa el arreglo óptico y en b) se observa el espectrómetro.	93
<i>Figura 3.25.</i> Diagrama de bloques del arreglo del sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.	94
<i>Figura 3.26.</i> Trazo de rayos en un reflector elíptico.	94
<i>Figura 3.27.</i> Representación de una elipse en coordenadas cartesianas.	95
<i>Figura 3.28.</i> Relación entre los parámetros a, b y c para el reflector elíptico diseñado en Zemax™.	96
<i>Figura 3.29.</i> Representación del reflector elíptico diseñado para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.	97
<i>Figura 3.30.</i> Imagen en 3D del reflector elíptico diseñado en Zemax™.	98
<i>Figura 3.31.</i> Arreglo del sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.	99
<i>Figura 3.32.</i> Diagrama del sistema en 2D arrojado por la simulación en Zemax™ para la simulación del sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.	102
<i>Figura 3.33.</i> Diagrama del sistema en 3D arrojado por la simulación en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico. En a) se observa el arreglo óptico y en b) se observa el arreglo del espectrómetro.	103
<i>Figura 3.34.</i> Diagrama de bloques del arreglo del sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.	103
<i>Figura 3.35.</i> Apertura angular para la lente reductora ACL3026U-B.	104
<i>Figura 3.36.</i> Trazo de rayos en un reflector parabólico.	105
<i>Figura 3.37.</i> Representación de una parábola en coordenadas cartesianas.	105
<i>Figura 3.38.</i> Representación del reflector parabólico diseñado para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.	106
<i>Figura 3.39.</i> Imagen en 3D del reflector parabólico diseñado en Zemax™.	107
<i>Figura 3.40.</i> Arreglo del sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.	108
<i>Figura 3.41.</i> Diagrama del sistema en 2D arrojado por la simulación en Zemax™ para la simulación del sistema de espectrómetro Raman simple con reflector parabólico.	111
<i>Figura 3.42.</i> Diagrama del sistema en 3D arrojado por la simulación en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico. En a) se observa el arreglo óptico y en b) se observa el arreglo del espectrómetro.	112

<i>Figura 4.1.</i> Manchas de luz para los detectores colocados en las superficies S1 de a) filtro Notch, b) espejo C1, c) red de difracción y d) espejo C2 del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa	115
<i>Figura 4.2.</i> Manchas de luz para los detectores colocados en las superficies S1 de a) filtro Notch, b) espejo C1, c) red de difracción y d) espejo C2 del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico	116
<i>Figura 4.3.</i> Manchas de luz en los detectores finales en a) sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa y b) sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.....	118
<i>Figura 4.4.</i> Manchas de luz en el detector final del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con diámetros de apertura en a) 5 μm , b) 10 μm , c) 25 μm , d) 50 μm , e) 75 μm y f) 100 μm	121
<i>Figura 4.5.</i> Gráfica de picos de intensidad a diferentes diámetros de apertura para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector	122
<i>Figura 4.6.</i> Gráfica de picos de intensidad para la longitud de onda de 740 nm a diferentes diámetros de apertura en el sistema de espectrómetro Raman sin reflector	123
<i>Figura 4.7.</i> Manchas de luz en el detector final del sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico con diámetros de apertura en a) 5 μm , b) 10 μm , c) 25 μm , d) 50 μm , e) 75 μm y f) 100 μm	125
<i>Figura 4.8.</i> Gráfica de picos de intensidad a diferentes diámetros de apertura para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.	126
<i>Figura 4.9.</i> Gráfica de picos de intensidad para la longitud de onda de 690 nm a diferentes diámetros de apertura en el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico	127
<i>Figura 4.10.</i> Manchas de luz en el detector final del sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico con diámetros de apertura en a) 5 μm , b) 10 μm , c) 25 μm , d) 50 μm , e) 75 μm y f) 100 μm	129
<i>Figura 4.11.</i> Gráfica de picos de intensidad a diferentes diámetro de apertura para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.	130
<i>Figura 4.12.</i> Gráfica de picos de intensidad para la longitud de onda de 740 nm a diferentes diámetros de apertura en el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.	131
<i>Figura 4.13.</i> Diagrama de caja de los datos del sistema de espectrómetro Raman sin reflector, espectrómetro Raman con reflector elíptico y espectrómetro Raman con reflector parabólico.	133
<i>Figura 4.14.</i> Diagrama de caja donde se parecía el intervalo de confianza para la mediana de los datos del sistema de espectrómetro Raman simple, espectrómetro Raman con reflector elíptico y espectrómetro Raman con reflector parabólico.	134

Índice de Tablas

<i>Tabla 2.1.</i> Área de penetrabilidad del material particulado en el tracto respiratorio según su diámetro aerodinámico en micrómetros.....	11
<i>Tabla 2.2.</i> Clasificación de los métodos espectroscópicos más comúnmente utilizados por su característica física en la cual también se observa la región del espectro electromagnético de trabajo de cada método, su tipo de transición cuántica y su principal aplicación.	20
<i>Tabla 2.3.</i> Tipos de laser utilizados en espectroscopia Raman.	38
<i>Tabla 2.4.</i> Constantes k , ρ y ε para cada sección cónica.....	65
<i>Tabla 3.1.</i> Coeficientes asféricos de la lente LTN330-B.	71
<i>Tabla 3.2.</i> Coeficientes asféricos de la lente 355230-B.....	72
<i>Tabla 3.3.</i> Coeficientes asféricos de la lente 83-544.	73
<i>Tabla 3.4.</i> Tipos de objetos utilizados para definir a los elementos ópticos en el editor de componentes.	79
<i>Tabla 3.5.</i> Espectro de emisión de la fuente puntual.	79
<i>Tabla 3.6.</i> Características de los detectores utilizados para analizar el desempeño del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.	84
<i>Tabla 3.7.</i> Listado de los elementos utilizados para la simulación del sistema de espectrómetro Raman simple con divisor de haz de placa.....	86
<i>Tabla 3.8.</i> Distancias entre elementos para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.	86
<i>Tabla 3.9.</i> Diámetros definidos para las ventanas de transmisión.	87
<i>Tabla 3.10.</i> Listado de los elementos utilizados para la simulación del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.	91
<i>Tabla 3.11.</i> Distancias entre elementos para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.	91
<i>Tabla 3.12.</i> Listado de los elementos utilizados para la simulación del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.	100
<i>Tabla 3.13.</i> Distancias entre elementos para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.	100
<i>Tabla 3.14.</i> Coeficientes asféricos de la lente ACL3026U-B.	104
<i>Tabla 3.15.</i> Listado de los elementos utilizados para la simulación del sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.	109
<i>Tabla 3.16.</i> Distancias entre elementos para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.....	109
<i>Tabla 4.1.</i> Potencia de salida de los detectores finales en el sistema de espectrómetro Raman con divisor de haz de placa y sistema de espectrómetro Raman con divisor de haz cúbico.....	117

<i>Tabla 4.2.</i> Potencias de salida en el sistema de espectrómetro Raman sin reflector a diferentes diámetros de apertura.....	119
<i>Tabla 4.3.</i> Potencias de salida en el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico a diferentes diámetros de apertura.....	124
<i>Tabla 4.4.</i> Potencias de salida en el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico a diferentes diámetros de apertura.....	128
<i>Tabla 4.5.</i> Potencia de salida para los tres sistemas.....	132
<i>Tabla 4.6.</i> Datos iniciales, atípicos y finales para cada uno de los sistemas.....	132
<i>Tabla 4.7.</i> Valor mínimo, primer cuartil, mediana, tercer cuartil y valor máximo para las gráficas de caja para cada uno de los sistemas.....	134
<i>Tabla A.1.</i> Tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.....	A-1
<i>Tabla A.2.</i> Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.....	A-2
<i>Tabla A.3.</i> Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.....	A-3
<i>Tabla B.1.</i> Tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.....	B-1
<i>Tabla B.2.</i> Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.....	B-2
<i>Tabla B.3.</i> Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.....	B-3
<i>Tabla C.1.</i> Tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.....	C-1
<i>Tabla C.2.</i> Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.....	C-2
<i>Tabla C.3.</i> Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.....	C-3
<i>Tabla D.1.</i> Tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.....	D-1
<i>Tabla D.2.</i> Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.....	D-2
<i>Tabla D.3.</i> Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.....	D-3

Simbología

A	Amplitud
v	Frecuencia
λ	Longitud de onda
v_i	Velocidad de propagación de la luz
C	Velocidad de propagación de la luz en el vacío
K	Constante de proporcionalidad
$\tilde{\nu}$	Numero de onda
E	Campo eléctrico
M	Campo magnético
ϕ	Ángulo de fase
w	Velocidad angular
A_E	Amplitud del campo eléctrico
A_M	Amplitud del campo magnético
E_1	Estado fundamental
E_0	Estado basal
h	Constante de Planck
P_0	Potencia del haz incidente
P_1	Potencia del haz posterior a la muestra
A_λ	Absorbancia
n	Índice de refracción
p	Polarización
α	Constante de proporcionalidad
q	Coordenada normal
t	Tiempo
R	Resolución espectral
σ_s	Ruido Shot
σ_T	Ruido termal
σ_R	Ruido de lectura
S/N	Relación señal a ruido

z	Distancia entre la superficie y la curvatura de la lente
s	Distancia radial
ζ	Curvatura
k	Constate cónica
A4, A6,...,An	Ordenes de los coeficientes esféricos
N.A.	Apertura numérica
$\alpha/2$	Apertura angular
f	Distancia focal
D	Diámetro
d	Desplazamiento
T	Grosor
r	Radio
ϵ	Excentricidad
ρ	Semi-latus rectum
H	Altura radial
a	Eje mayor
b	Eje menor
c	Excentricidad lineal
R_c	Radio de curvatura
W	Watts
W/mm²	Irradiancia por unidad de área

Objetivos

Objetivo General

Simular y analizar un sistema de espectroscopía Raman adaptado con un reflector elíptico y un reflector parabólico para aumentar la colección de radiación Raman dispersada en el análisis de material particulado.

Objetivos Específicos

- Definir los elementos ópticos y el arreglo fundamental de un espectroscopio Raman.
- Realizar la simulación del arreglo básico sin reflector.
- Diseñar el colector elíptico y el colector parabólico.
- Añadir a la simulación el colector elíptico y el colector parabólico.
- Analizar el trazo de rayos y el flujo de radiación a través de los elementos en las simulaciones ejecutadas.
- Comparar la colección de radiación dada por cada sistema.
- Concluir cuál es el sistema más adecuado para cumplir con el objetivo.

Meta

Analizar la simulación de un sistema de espectrómetro Raman que colecte toda la radiación Raman dispersada por la muestra sin que se requiera la manipulación de la muestra por el usuario.

CAPITULO I

Antecedentes

1.1. Introducción

Hoy en día existen muchas técnicas instrumentales espectroscópicas para el análisis químico de muestras orgánicas, inorgánicas o una combinación de ambas, de las cuales podemos obtener información elemental y molecular. Los instrumentos para el análisis de PM más utilizados son: la microscopia electrónica de barrido, la espectroscopía de rayos X, Raman, resonancia magnética nuclear, de masas, e infrarroja, donde, la combinación de algunos o todos los métodos, permite lograr una caracterización de las partículas (Elmes et al. 2017). La espectroscopía Raman sobresale de las demás tecnologías ya que se le considera una técnica no destructiva que tiene potencial para convertirse en una herramienta para el análisis de rutina. No obstante, la información proporcionada por este método es muy pequeña, por lo que su detección a veces es complicada (Skoog et al. 2008). Diferentes técnicas Raman han sido desarrolladas para enfrentar el problema, sin embargo, algunas de ellas son específicas para ciertas aplicaciones (Rae et al. 2014, Bumrah et al. 2016, Matousek et al. 2016), requieren de una preparación previa de la muestra (Wahadoszamen et al. 2015) o es necesaria su manipulación durante el proceso de análisis, por lo que el desarrollo de sistemas simples de colección de radiación que puedan ser añadidos a sistemas Raman para aumentar la capacidad de adquisición de información del instrumento es factible, considerándolos como “alternativas de instrumentación científica” (Montoya et al. 2015).

1.2. Estado del Arte

El físico hindú C. V. Raman (1928), descubrió un nuevo tipo de radiación secundaria con líneas de frecuencia que difieren de la radiación dispersada clásica o fluorescente emitida por una muestra de benceno, al exponerla bajo la luz de una lámpara de vapor de mercurio analizada espectroscópicamente. Raman descubrió que la longitud de onda visible de una pequeña fracción de la radiación dispersada por ciertas moléculas, difiere de la del haz incidente y además, que los desplazamientos de la longitud de onda dependen de la estructura química de las moléculas causantes de la dispersión. Aunque el hallazgo introdujo un nuevo tipo de instrumentación para el análisis químico de especímenes, no fue hasta la introducción de la tecnología de rayos laser en la década de los años 60, que el auge del desarrollo de equipos de espectroscopía Raman tuvo comienzo.

En años recientes la espectroscopía Raman se ha vuelto una herramienta de estudio en los laboratorios de análisis de diferentes ramas de la ciencia como la química, biología y geología, por mencionar algunas, ya que ofrece información detallada de la composición química de la muestra bajo análisis sin causar cambios físicos o químicos en esta. No obstante es de importancia mencionar que para lograr la caracterización innegable de la muestra es necesario el análisis bajo diferentes métodos analíticos (Thermo Scientific 2008, Cardell et al. 2016, Elmes et al. 2017). En el área de las ciencias ambientales, los estudios que buscan la caracterización de partículas atmosféricas, tanto de forma física como química, aumentan en número para poder comprender mejor los impactos ambientales, generados por la contaminación ambiental por partículas suspendidas (Elmes et al. 2017, Kelly et al. 2012).

Sobanska et al. (2012), analizaron partículas PM_{10} de una tormenta de polvo en Incheon, Corea del sur, al combinar los métodos de microanálisis de sonda dispersiva de rayos X (i.e. EPMA) y espectroscopía Raman confocal (i.e. RMS), donde con EPMA caracterizaron elementos con números atómicos bajos como el carbono, nitrógeno y oxígeno, mientras que la RMS permitió la caracterización molecular de partículas bajo condiciones ambientales. La combinación de ambas técnicas proporcionó la comprobación de las especies moleculares determinadas por Raman, al corroborar con la información elemental obtenida por EPMA, con lo que se determinó que el 53 % de las partículas analizadas estaban formadas por una mezcla de dos o más especies químicas.

Catelani et al. (2014), utilizaron la técnica RMS para caracterizar muestras de PM_{10} y $PM_{2.5}$ en la ciudad de Roma, Italia con lo que obtuvieron el espectro Raman característico del hollín, al cual aplico el modelo de deconvolución de cinco curvas para el análisis de

espectros Raman de este tipo, ya que el espectro del hollín presenta dos picos anchos que se superponen entre sí.

Ji et al. (2015), caracterizaron el material particulado fino presente en varias locaciones de la ciudad de Beijing, China combinando cuatro técnicas espectroscópicas. Un microscopio electrónico de transmisión (i.e. TEM), identificó las sustancias orgánicas y metales traza absorbidos, un espectroscopio de resonancia magnética nuclear (i.e. RMN), dio a conocer el porcentaje preciso de diferentes especies de carbono, un espectrómetro Raman (i.e. RS), proporcionó información acerca de la existencia de material inorgánico y clasificación de posibles fuentes de carbono y por último un espectrómetro infrarrojo de transformada de Fourier (i.e. FTIR), identificó partículas secundarias y los principales enlaces de carbono, demostrando que al combinar diferentes técnicas espectroscópicas, es posible conocer y corroborar la composición química de partículas atmosféricas.

El conocimiento actual de la estructura interna de partículas atmosféricas recolectadas bajo condiciones ambientales, presenta un desafío analítico significativo debido al tamaño de partícula así como a la complejidad física y química. El muestreo selectivo por tamaño en medios filtrantes, es el método más ampliamente utilizado en la caracterización de PM's para lo que, tanto la tasa de flujo del sistema del filtrado, el tipo de sustrato del filtro y el método de análisis químico y/o físico, deben considerarse como complementarios entre sí (Elmes et al. 2017). La selección del tipo de sustrato es una cuestión clave que se debe tener en cuenta al seleccionar el instrumento analítico ya que no existe un filtro ideal que cumpla con todos los requerimientos de todos los instrumentos para el análisis individual de partículas.

Nelson et al. (2001) tomaron imágenes con un microscopio electrónico de barrido (i.e. SEM), al igual que los espectros característicos Raman de filtros de teflón, policarbonato y cuarzo, con lo cual determinó que el filtro ideal para el análisis individual de partículas es el de policarbonato debido a la planitud de su superficie pero, dadas sus características físicas, el filtro de policarbonato fue susceptible a expansión térmica, sufriendo daños por la incidencia tanto del haz de electrones como del haz de láser de los sistemas SEM y Raman respectivamente, por lo que se recomendó la utilización de filtros de cuarzo, ya que estos poseen un umbral de daño más alto. Aun así la localización de partículas es más difícil debido al tipo de estructura filamentosa del filtro.

Moreton et al. (2006), analizaron la contribución a una señal de espectrometría de dispersión de Rayos X (i.e. EDX) de la rugosidad y la estabilidad bajo un haz de electrones de varios sustratos como láminas de plata y aluminio, wafer de silicio, discos de berilio, mallas TEM y cintas de carbono. De los sustratos obtuvieron tanto la imagen microscópica de una partícula de carbonato de calcio (CaCO_3), así como su señal EDX, donde observaron

que el perfil de la malla TEM proporciona un fondo plano con una señal nítida. Sin embargo, al analizar la misma muestra sobre la malla TEM utilizando un RMS, observaron un aumento en la línea del carbono dada la carbonización esperada de la malla por la incidencia de luz láser. El sustrato más estable al utilizar la técnica RMS fue el wafer de silicio, seguido de la malla TEM, lámina de plata, membrana de teflón y por último el filtro de policarbonato.

Otro aspecto importante a cuidar al utilizar diferentes métodos espectrométricos, es el traspaso de la muestra bajo análisis de una plataforma instrumental a otra, ya que al analizar individualmente cada partícula, su relocalización puede ser muy difícil e incluso, puede llegar a ser imposible dadas las diferencias entre las apariencias de la imagen debido a la resolución espectral, que siendo diferente en cada equipo, puede aparentar diferencias en la morfología de la partícula haciéndole difícil la identificación al investigador (Nelson et al. 2001).

Stefaniak et al. (2006), colocaron muestras de partículas ricas en Uranio en mallas TEM con tres diferentes métodos de preparación de la muestra. Las partículas fueron suspendidas en soluciones de agua y hexano y depositadas en láminas de plata sobre una malla TEM. Teniendo en cuenta que las soluciones pueden cambiar algunas propiedades, colocaron partículas directamente en discos de carbono colocados posteriormente en una malla TEM. Su relocalización por un MRS teniendo como guía su imagen TEM, fue posible, exceptuando las veces donde ocurrió el amontonamiento de partículas sobre el sustrato.

La labor de caracterizar morfológica, química y molecularmente materiales micro y nano particulados, es un desafío analítico debido a las diferentes características y requerimientos de los diferentes equipos espectroscópicos que se precisan para dicha labor. La necesidad de fusionar equipos de esta índole, llevo a la compañía Renishaw's a diseñar un equipo que combina tres técnicas de espectroscopia mejor conocido como SCA (Structural and Chemical Analyzer, por sus siglas en inglés). Las técnicas combinadas son: SEM para la obtención de información morfológica, EDX para la obtención de información elemental y RS para la obtención de información molecular; todas trabajando en la misma región de interés bajo análisis (Cardel et al. 2016).

Goienaga et al. (2013), utilizaron el sistema SCA para analizar muestras de material fino ($\varnothing < 75 \mu\text{m}$) colectadas de una mina de Zn – Pb abandonada. Las imágenes SEM permitieron la visualización y localización de las diferentes especies de PM's de acuerdo a su diámetro aerodinámico, posteriormente la obtención de información elemental semi – cuantitativa de partículas específicas por medio de EDX y para finalizar recolectaron espectros Raman bajo los mismos puntos de análisis de los cuales obtuvieron información molecular presente en las PM de interés, donde, con la información obtenida, realizaron una

simulación termodinámica del comportamiento de las PM bajo las condiciones químicas presentes en el tejido pulmonar, con lo cual probaron que la combinación de los tres métodos de espectroscopia, no solo permite la reducción del tiempo de análisis y los errores al relocalizar el punto de interés, sino que también, permite descifrar los vínculos existentes entre la presencia de partículas atmosféricas y la salud humana al ser combinada con modelos de equilibrio químicos.

Aunque el avance tecnológico en equipamiento espectroscópico ha avanzado con gran rapidez, los costos de adquisición pueden llegar a ser muy altos y en ocasiones inaccesibles para los investigadores, sin embargo, el desarrollo de componentes ópticos de alta tecnología permite hoy en día, la construcción de equipos analíticos de bajo costo, fácil construcción, operación de calidad y buen funcionamiento tanto para aplicaciones generales como específicas (Mohr et al. 2010, Montoya et al. 2015).

Somerville et al. (2010), experimentaron con dos configuraciones de espectrómetros Raman. El primero de dispersión a 90 grados y el segundo de retro-dispersión, ambos basados en el arreglo de elementos más simples utilizando un espectrómetro basado en tecnología CCD, dos lentes, un láser portable de Helio – Neón (HeNe), un divisor de haz y un filtro de color, con los cuales lograron observar la dispersión Raman de muestras en forma líquida y gaseosa, siendo estas últimas consideradas desafiantes ya que requirieron de tiempos de integración más largos para poder obtener una buena medición.

Montoya et al. (2015), utilizaron un apuntador láser color verde, un filtro de línea láser, un filtro Edge paso-largas, un colimador, una fibra óptica, y, como espectrómetro, una red de difracción, un espejo plano y una cámara CANON con detector CCD. Con esta configuración lograron observar espectros Raman de buena calidad de líquidos puros y mezclas de estos, siendo la presencia de fluorescencia su principal desafío el cual fue superado con la aplicación de sustracción de fondo.

Sistemas para aplicaciones específicas también son desarrollados, como el de Desroches et al. (2015), quienes construyeron y caracterizaron un espectroscopio Raman utilizando una sonda Raman de mano, un láser que emite en la región del cercano al infrarrojo, un sistema de navegación para neurocirugía guiado por imágenes y un espectrómetro CCD de alta velocidad y alta resolución, con el que demostraron que es posible la detección in vivo de tejido cancerígeno en pacientes con glioma bajo condiciones experimentales de luz ambiental, determinadas como óptimas para obtener la mejor relación señal/ruido posible, así como un pre-procesamiento de la señal obtenida a la que se le aplicó sustracción de recuento oscuro, eliminación de fondo mediante un método polinomial iterativo y, filtrado y normalización de la señal.

Dado que la intensidad de la señal de dispersión Raman equivale a aproximadamente a un 0.001 % de la intensidad de la fuente, en ocasiones la detección de la señal se convierte en una tarea difícil debido a factores como: el estado de la materia, el tamaño de las partículas, la cantidad de muestra, su forma física, la presencia de fluorescencia y la presencia de ruido ambiental. Diferentes técnicas de análisis de dispersión Raman se han desarrollado con el fin de aumentar la cantidad de información Raman entrante al espectrómetro, pero estas requieren de una preparación previa de la muestra, o su manipulación durante la medición, lo cual añade más tiempo al periodo de análisis y pueden ser más costosos, por lo que diferentes investigadores han desarrollado sistemas con celdas basadas en el diseño de colectores de luz para aumentar la entrada de la señal evitando su manipulación.

Yamamoto et al. (1998), diseñaron un soporte de celda de integración elíptica – esférica modificada a partir del diseño propuesto por Dou et al. (1996). El diseño del porta celdas creado por Dou et al., presentaron una forma esférica recubierta con una película delgada rugosa de oro, mientras que el porta celdas diseñado por Yamamoto et al., presentó una forma parcialmente elíptica y parcialmente esférica recubierta con una película delgada de oro sobre una superficie lisa con la cual analizaron diferentes tipos de muestras gaseosas, obteniendo sus espectros Raman característicos con una alta relación señal a ruido. El sistema Raman utilizado consistió en un láser de Argón, elementos ópticos de enfoque, una celda de gas de cuarzo, elementos ópticos de colección de dispersión Raman, un monocromador y un CCD enfriado con nitrógeno. Para conocer la capacidad de colección de dispersión Raman del porta-celdas, obtuvieron el espectro Raman de la muestra de acetona en el aire bajo presión atmosférica; primero sobre la celda de cuarzo sin el porta-celda, y posteriormente sobre la celda de cuarzo con el porta-celda. El resultado presento un aumento en intensidad de aproximadamente 50 veces más fuerte con el porta-celda en comparación a la medición sin el porta-celda, incluso para gases de solo 2 ppm con un tiempo de integración de 30 segundos, lo que demostró que es posible obtener espectros Raman de muestras gaseosas de alta calidad, sin tener que utilizar tanto instrumentación como técnicas muy sofisticadas. Posteriormente, analizaron la capacidad del sistema para la medición de una mezcla de gases, la cual consistió en una mezcla de acetona, amónico, nitrógeno y oxígeno de las cuales observaron la bandas Raman características de cada componente por separado, ya que no existió interferencia entre ellas, con lo que comprobaron la capacidad del sistema para la estimación independiente de los componentes presentes en una mezcla como lo son los gases espirados por el sistema respiratorio humano, aunque para lograr la medición de estos el límite de detección del instrumento debía ser de aproximadamente 0.1 ppm.

Por su parte Yu et al. (2016), desarrollaron un sistema Raman compacto para una celda parabólica para analizar muestras gaseosas, cuyo rendimiento fue comparado con el de un sistema Raman basado en una línea capilar. El primer sistema, consistió en un láser de estado sólido de 532 nm, una celda de muestra parabólica, un divisor de haz dicróico y un filtro pasa altas acoplado por una apertura ajustable a un sistema de espectroscopia, el cual consistió en dos lentes de cámara comercial, una red de transmisión holográfica y un detector CCD. El sistema basado en una línea capilar de metal, presentó un sistema muy parecido al primero solo que la celda de muestra parabólica, fue reemplazada por una línea capilar metálica y posterior a esta se le agregó una lente de enfoque doble acromática. Con ambos sistemas, analizaron muestras de aire ambiental, donde observaron su capacidad de intensificar la señal Raman y comprimir el ruido de fondo con una apertura de 10 μm y un tiempo de exposición de 1 seg. Con el sistema capilar, observaron una intensificación de la señal de 20 veces, mientras que la celda parabólica, intensificó la señal aproximadamente 14 veces, ambas en comparación con la medición de aire ambiental por el sistema Raman sin ningún tipo de celda. Aunque la intensificación de la señal fue mayor para el sistema capilar, el sistema parabólico demostró ser mejor al reducir el ruido de fondo. Posteriormente, para analizar la capacidad de medición del sistema con celda parabólica, analizaron una mezcla de gases de H_2 , CO_2 y CO cada uno a concentraciones de 1000 ppm bajo un tiempo de exposición de 200 seg., con lo cual calcularon los límites de detección para cada uno de los gases siendo para el H_2 , 68 ± 5 ppm, para el CO_2 , 54 ± 4 ppm y para el CO , 116 ± 7 ppm.

Tian et al. (2017), propusieron la adición de un reflector parabólico comercial a un microscopio Raman con el cual analizaron cinco diferentes tipos de muestras: cristal de silicio, una tableta de hidrotalcita, Rodamina 6G mezclada con agentes de mejora de la superficie, un pedazo de papel y un trozo de grasa de tocino. Debido a que el haz generado por el reflector presento un diámetro de aproximadamente 90 mm, se diseñó un expansor de haz para poder enfocar el haz del láser en un área desde 45 a 90 grados, y al mismo, tiempo coleccionar la dispersión Raman generada en ese mismo ángulo y enfocarla en los elementos ópticos pertenecientes al sistema Raman de una pulgada de diámetro. Al analizar las muestras, observaron que cada una tenía un factor de aumento diferente. Para el pedazo de papel de imprenta su factor de aumento fue de 6 veces, para la tableta de Rodamina 6G fue de 3.3 veces, para la tableta de hidrotalcita fue de 5 veces, para la pieza de grasa de tocino fue de 2.3 y por ultimo para la muestra de silicón fue de 1.34 veces. La desigualdad entre los valores de cada muestra fue atribuida a la diferencia en los ángulos de emisión de la dispersión Raman, así como en la cantidad de emisión de fotones Raman y de fluorescencia.

CAPITULO II

Marco de Referencia

En el siguiente capítulo se presenta la teoría base utilizada como referencia para el desarrollo de esta investigación.

2.1. Material Particulado

2.1.1. Definición

El material particulado (i.e. PM) también conocido como partículas suspendidas totales (i.e. TSP), material particulado suspendido o humo negro, es una mezcla heterogénea compleja de sustancias orgánicas e inorgánicas de cuerpos solidos/líquidos o sólidos y líquidos en la atmósfera cuyo tamaño puede ir desde los 50 μm hasta diámetros menores a 0.1 μm (Samet et al. 2005). Las PM engloban emisiones que pueden ser por fuentes naturales o fuentes antropogénicas. Dentro de las fuentes naturales podemos mencionar algunas como el polen, esporas de hongos, partículas de suelo, incendios forestales, ceniza volcánica, polvo, sal de mar y bioaerosoles. Las fuentes antropogénicas, por su parte, pueden incluir la combustión por combustibles fósiles, fuentes de carbono, procesos industriales, actividades mineras, utilización de aires acondicionados, entre otras.

Su clasificación puede ser de dos tipos: por el modo de introducción a la atmósfera o por su diámetro aerodinámico. El primero divide a las PM en fuentes primarias y fuentes secundarias. Las fuentes primarias, son partículas liberadas directamente de su fuente, mientras que las fuentes secundarias, son partículas que se forman posteriormente en la atmósfera como resultado de reacciones químicas. La segunda categorización es la más

conveniente a ser utilizada ya que esta nos permite estudiar el comportamiento que las PM presentan al viajar por el aire, su desplazamiento a través del tracto respiratorio, así como su composición química y su fuente de emisión. Por su diámetro aerodinámico, suelen dividirse en tres grupos: partículas gruesas con diámetros que pueden ir desde los 10 μm hasta los 2.5 μm (i.e. PM_{10}), partículas finas cuyo diámetro es menor a 2.5 μm (i.e. $\text{PM}_{2.5}$) y partículas ultra-finas con diámetros menores a 0.1 μm (i.e. $\text{PM}_{0.1}$) (INNEC, 2012). La fracción gruesa se forma por la fractura de partículas grandes, la cual puede suceder por cambios drásticos de sequedad y humedad de los suelos mientras que, la fracción fina se forma a partir de los gases o por procesos de coagulación y finalmente, la fracción ultra-fina por procesos de nucleación. A estos grupos, se les conoce como partículas inhalables o partículas torácicas ya que pueden llegar a penetrar más allá de la laringe y depositarse a lo largo de las vías respiratorias (Kelly et al. 2012). La *figura 2.1* hace una comparación entre el tamaño de diferentes objetos con respecto al del material particulado según su diámetro aerodinámico.

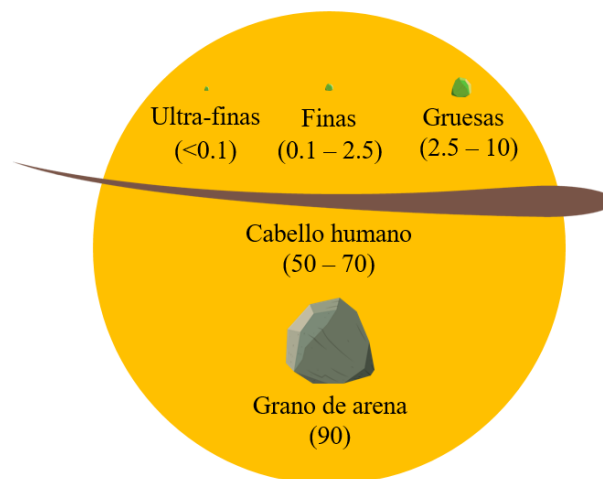


Figura 2.1. Diámetro aerodinámico de la fracción ultra-fina, fina y gruesa del material particulado en comparación con el diámetro de un cabello humano y un grano de arena. El diámetro se representa en micrómetros (μm).

Fuente: propia del autor.

2.1.2. Toxicología del Material Particulado

La contaminación del aire se genera cuando se presentan sustancias o elementos en la atmósfera en concentraciones, tiempo y circunstancias tales que pueden afectar significativamente la salud de las personas.

La exposición de la población a las PM es un problema de salud pública. Cuando estas son inhaladas, dependiendo de varios factores como su composición y su tamaño, las PM pueden viajar a través del sistema respiratorio como se indica en la *tabla 2.1*, llegando

hasta los alveolos donde por difusión pueden atravesar las paredes alveolares y llegar hasta el sistema sanguíneo pudiendo causar o agravar enfermedades pulmonares o del corazón. Los efectos a corto plazo pueden ir desde tos, falta de aliento, sensación de presión en el pecho, arritmias, ataques cardiacos no fatales e irritación de los ojos; mientras que los efectos a largo plazo pueden llegar a reducir la función pulmonar, desarrollar o agravar enfermedades respiratorias o cardiacas hasta provocar la muerte prematura de personas con enfermedades de este tipo (Manzanares et al. 2011).

Tabla 2.1. Área de penetrabilidad del material particulado en el tracto respiratorio según su diámetro aerodinámico en micrómetros.

Tamaño de partícula (μm)	Región de penetración
10 – 2.5	Capturadas desde orificios nasales hasta la tráquea y región primaria bronquial.
2.5 – 0.1	Desde la región bronquial secundaria hasta bronquiolos.
> 0.1	Desde alveolos hasta torrente sanguíneo (dependiendo de su solubilidad).

Fuente: propia del autor.

El establecer asociaciones entre las PM y los efectos adversos a la salud, es una herramienta que nos brinda información con la cual la sociedad es capaz de desarrollar o rediseñar estrategias para reducir la contaminación ambiental y mejorar la salud pública (Rojas et al. 2003). No obstante la identificación de los componentes tóxicos de las PM es una tarea difícil dado que sus constituyentes varían de forma compleja en masa, tamaño, composición química y física, reactividad, acidez, solubilidad y origen dando lugar a diferentes efectos que dependen de diferentes características. Así mismo, las PM pueden variar en tiempo y espacio a consecuencia de las reacciones químicas ente las mismas y/o las condiciones climáticas (Kelly et al. 2012).

2.2. Métodos Instrumentales de Análisis Químico

La química analítica trata de los métodos para determinar la composición química de muestras de materia. Un método cualitativo proporciona información relacionada con la identidad de la especie atómica o molecular o de los grupos funcionales que están en la muestra. En cambio, un método cuantitativo, proporciona información numérica como la cantidad relativa de uno o más de estos componentes (Skoog D. et al. 2008).

Los métodos analíticos se clasifican con frecuencia en: métodos clásicos o instrumentales. Los métodos clásicos utilizan separaciones como lo son la precipitación,

extracción y destilación y análisis cualitativo por color, olor o punto de fusión y se concentran en las características químicas del analito; mientras que los métodos instrumentales, utilizan un aparato para medir cantidades físicas del analito, en los cuales se requiere una fuente de energía para estimular una respuesta medible sobre el analito como se ilustra en la *figura 2.2*. Esta fuente de energía puede tener la forma de energía electromagnética, eléctrica, mecánica o nuclear. El estímulo extrae una respuesta del sistema en estudio cuya naturaleza y magnitud están regidas por las leyes fundamentales de la química y la física (Harvey D. 2000).

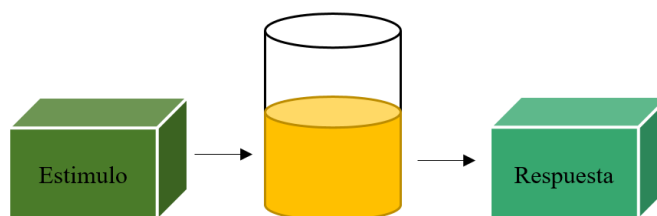


Figura 2.2. Proceso global de una medición con métodos instrumentales.

Fuente: propia del autor.

2.2.1. Técnicas Instrumentales de Análisis Espectroscópico

La espectroscopía es la técnica utilizada para evaluar diferentes propiedades de la materia a través del espectro de luz emitido o absorbido, al interactuar con diferentes frecuencias del espectro electromagnético siendo las más utilizadas la radiación ultravioleta, visible e infrarroja. El tipo de espectroscopía varía según la frecuencia de la luz a la que la materia es expuesta y la propiedad física que se busca medir (Skoog D. et al. 2008, Harvey D. 2000).

2.3. Propiedades de la Radiación Electromagnética

La radiación electromagnética o luz, es una forma de energía cuyo comportamiento es descrito por la dualidad onda-partícula entre el modelo ondulatorio sinusoidal clásico presentado por James Maxwell a mediados del siglo XVIII y el modelo corpuscular presentado por Max Planck a principios del siglo XIX. La dualidad onda-partícula proporciona una buena descripción de las propiedades electromagnéticas, como la difracción, que solo puede ser descrita al describir a la luz como una onda, mientras que, propiedades como la absorción o emisión de luz, son descritas al tratar a la luz como un conjunto de partículas (Serway et al. 2009, Montiel et al. 2006).

2.3.1. Modelo Ondulatorio Sinusoidal Clásico

El modelo ondulatorio de propagación de la luz, aunque gobernado por las ecuaciones de Maxwell, fue descrito empíricamente por el Principio de Huygens y el Principio de Fermat a mediados de siglo XVI y el experimento de la doble rendija de Young a principios del siglo XVIII. Todos estos describen a la luz como un fenómeno ondulatorio que se extiende en todas direcciones con la misma velocidad, frecuencia y longitud de onda. Hoy en día, gracias a la síntesis electromagnética realizada por Maxwell, la luz se caracteriza como una onda sinusoidal la cual permite la explicación de fenómenos ópticos que tratan con la transmisión de radiación electromagnética a través de la materia. Una onda electromagnética es representada de la forma mostrada en la *figura 2.3* (Serway et al. 2009, Skoog et al. 2008).

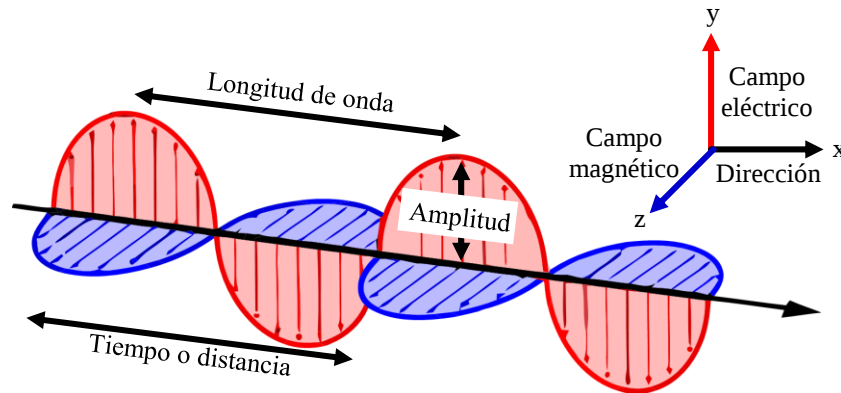


Figura 2.3. Diagrama de una onda electromagnética polarizada en el plano que muestra el campo eléctrico en Y, el campo magnético en Z y su dirección de propagación en X, además de sus componentes.

Fuente: propia del autor.

Una onda electromagnética se caracteriza por un campo eléctrico y un campo magnético en fase, con una orientación de 90° entre sí respecto a la dirección de propagación, con igual amplitud (A), una frecuencia (ν), longitud de onda (λ) y una velocidad de propagación (v_i) dependiente del medio por el que pasa, la cual es obtenida al multiplicar la frecuencia de oscilación (ν) y la longitud de onda (λ).

$$v_i \left(\frac{m}{seg} \right) = \nu \left(\frac{ciclos}{seg} \right) \cdot \lambda_i \left(\frac{m}{ciclos} \right) \quad (1)$$

La velocidad de propagación en el vacío (C), es independiente de la longitud de onda y está en su máximo con un valor $C = 2.999 \times 10^8$ m/s. mientras que por su parte, la longitud de onda depende de la velocidad electromagnética de la onda (2).

$$\lambda = \frac{c}{v} \quad (2)$$

Otra forma de describir a la radiación electromagnética, es con el número de onda ($\tilde{\nu}$), el cual se define como el recíproco de la longitud de onda en cm^{-1} , es directamente proporcional a la frecuencia y a la constante de proporcionalidad (K), depende del medio y es recíproco a la velocidad (v_i) (3).

$$\tilde{\nu}(\text{cm}^{-1}) = K \cdot v = \frac{1}{\lambda} \quad (3)$$

Al agregar el tiempo como variable, una onda sinusoidal puede ser descrita por la ecuación para una onda seno, la cual se utiliza para describir al campo eléctrico (E) y al campo magnético (M) (4) y (5).

$$E = A_E \sin(\omega t + \Phi) \quad (4)$$

$$M = A_M \sin(\omega t + \Phi) \quad (5)$$

Donde:

- A_E y A_M , son la amplitud máxima del campo correspondiente.
- Φ , es el ángulo de fase.
- ω , es la velocidad angular y se relaciona con la frecuencia mediante el valor $2\pi v$ donde v es la frecuencia.

2.3.2. Modelo Corpuscular

El modelo corpuscular permite la explicación de los fenómenos ópticos que tratan con la transferencia permanente de energía entre la materia y la radiación electromagnética, donde, para definir estos fenómenos, se trata a la radiación electromagnética como un haz de partículas energéticas llamadas fotones o cuantos (Montiel H. 2006). El fenómeno más notorio es el efecto fotoeléctrico descubierto por Hertz a finales del siglo XVIII, cuya explicación teórica fue descrita por Albert Einstein a principios del siglo XIX basando su formulación en el modelo de cuantización de Max Planck para la radiación de un cuerpo negro (Serway et al. 2009).

La teoría presentada por Max Planck, que explica las propiedades de la radiación de los cuerpos calientes, se extendió para posteriormente explicar otros tipos de procesos de emisión

y absorción de energía en átomos, iones o moléculas los cuales emiten o absorben energía al pasar de un estado fundamental a otro cuya diferencia de energía está dada por la ecuación (6).

$$E_1 - E_0 = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc\bar{\nu} \quad (6)$$

Donde E_1 es el estado de energía más bajo al que se le conoce como estado excitado o fundamental y E_0 es la energía del estado más bajo, conocido como estado basal, h es la constante de plank cuyo valor es igual a $6.62 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ y hc relaciona la energía del fotón con su longitud de onda con un valor igual a $1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}$.

En las moléculas se observan estados vibracionales y rotacionales generados en los enlaces intermoleculares. Estos cambios de energía de un estado fundamental a otro nos permiten analizar las interacciones de la radiación con la materia, lo que nos proporciona información del analito, al medir la radiación electromagnética emitida cuando partículas excitadas se relajan y regresan a su estado fundamental (emisión) o al medir la cantidad de radiación absorbida o difundida por la excitación (absorción) (Skoog et al. 2008).

2.3.3. Espectro Electromagnético

Todas las radiaciones electromagnéticas posibles son representadas por una escala logarítmica conocida como espectro electromagnético (*figura 2.4*), el cual abarca longitudes de onda desde 10^{-13} hasta 10^1 metros y frecuencias desde 10^{21} hasta 10^7 Hz, las cuales son divididas en regiones espectrales determinadas por su generación y detección entre los cuales pueden existir traslapes entre ellos (Skoog et al. 2008, Smith W. J. 2000). De este modo, se pueden hacer las siguientes relaciones:

A baja frecuencia $\rightarrow$ se tiene una baja energía $\rightarrow$ y una longitud de onda alta

A alta frecuencia $\rightarrow$ se tiene una alta energía $\rightarrow$ y una longitud de onda baja

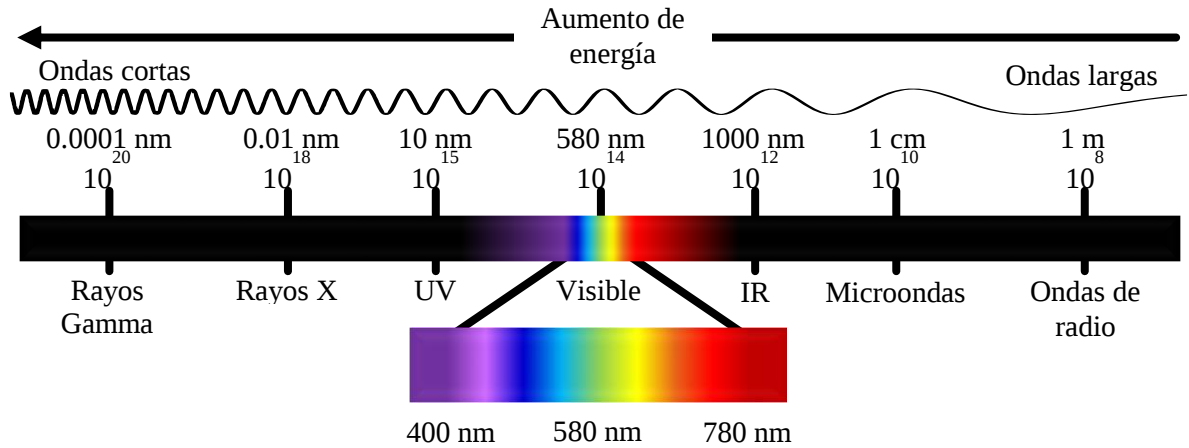


Figura 2.4. Representación de las diferentes regiones presentes en el espectro electromagnético.
Fuente: propia del autor.

2.4. Determinación de la Radiación Electromagnética Como Señal

La interacción entre la radiación electromagnética y la materia influye a cambios medibles ya sea en las propiedades características de la materia o de la luz (figura 2.5). Las técnicas instrumentales basadas en el principio de interacción radiación-materia, son conocidas como técnicas espectroscópicas.

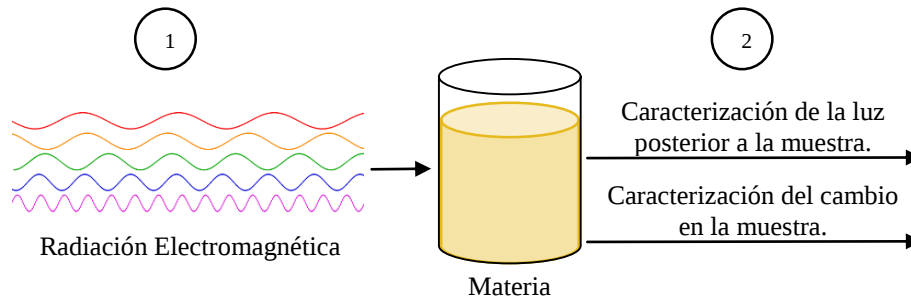


Figura 2.5. Método de excitación (1) y métodos de caracterización (2).
Fuente: propia del autor.

Las técnicas espectroscópicas se dividen en dos clases: aquella en la que existe una transferencia de energía entre un fotón y la materia ya sea por absorción o emisión y aquella en la que una onda electromagnética se somete a un cambio en una o más de sus propiedades características como resultado de su interacción con la muestra (Harvey D. 2000).

Las técnicas espectroscópicas asimismo, son clasificadas de acuerdo a la naturaleza de su interacción con la materia.

→ *Espectroscopia de absorción*: la energía transportada por un fotón es absorbida por el analito, lo cual solo ocurre cuando la energía del fotón es igual a la diferencia de energía entre dos niveles de energía como se observa en la *figura 2.6* (Harvey D. 2000). La intensidad del fotón pasando a través de la muestra es atenuada debido a la absorción (A_λ). A la medición de esta atenuación se le conoce como absorbancia y se calcula con base en la Ley de Beer (7).

$$A_\lambda = -\log_{10} \left(\frac{P_0}{P} \right) \quad (7)$$

Donde:

→ P_0 , es la potencia del haz incidente.

→ P , es la potencia del haz posterior a la muestra.

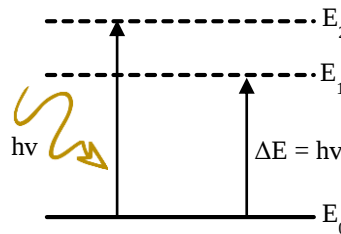


Figura 2.6. Diagrama de diferentes niveles de energía que muestra la absorción de un fotón.

Fuente: propia del autor.

→ *Espectroscopía de emisión*: ocurre cuando el analito, en un estado de energía superior, regresa a un estado inferior (*figura 2.7*). Este estado superior se puede lograr de varias maneras, incluyendo la energía térmica, la energía radiante de un fotón o por reacción química. La emisión seguida de la absorción de un fotón, es llamada fotoluminiscencia, y después de una reacción química se le denomina quimioluminiscencia (Skoog et al. 2008).

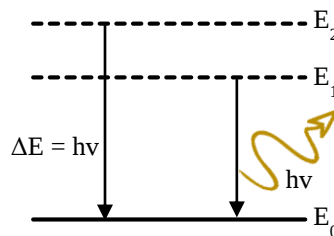


Figura 2.7. Diagrama de diferentes niveles de energía mostrando la emisión de un fotón.

Fuente: propia del autor.

→ *Espectroscopía de dispersión*: mide la cantidad de luz que una sustancia dispersa en todas direcciones a ciertas longitudes de onda, ángulos de incidencia y polarización (figura 2.8). El proceso de dispersión es mucho más rápido que el de absorción o emisión.

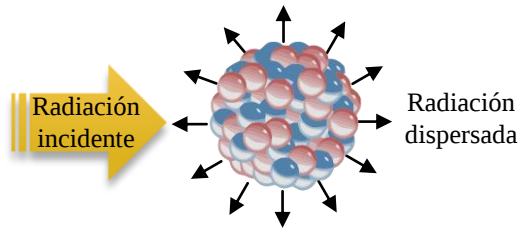


Figura 2.8. Dispersión de radiación por una molécula.

Fuente: propia del autor.

→ *Espectroscopía de refracción*: mide el cambio de dirección angular de un haz de luz al atravesar la materia, el cual se da por la disminución de la velocidad de la luz al pasar de un medio a otro como se observa en la figura 2.9 (Braun R. D. 2016).

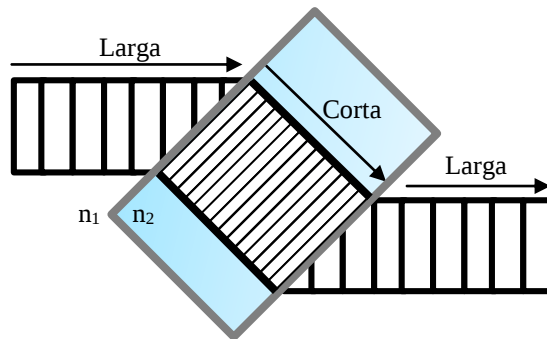


Figura 2.9. Variación angular que presenta un haz de luz al pasar de un medio con un índice de refracción n_1 a un medio con un índice de refracción n_2 .

Fuente: propia del autor.

→ *Espectroscopía de difracción*: se basa en la difracción de rayos de luz monocromáticos, la cual sucede debido a la interacción entre los rayos incidentes y la muestra, generando un patrón de interferencia constructiva como se muestra en la figura 2.10 (Skoog et al. 2008).

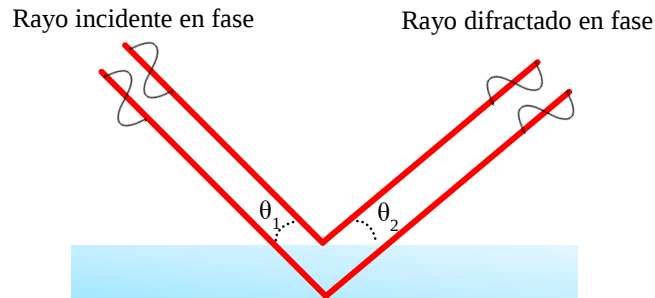


Figura 2.10. Análisis para métodos espectroscópicos basados en la difracción de la radiación electromagnética.

Fuente: propia del autor.

Otra forma de clasificar a las técnicas espectroscópicas está basado en el tipo de materia con el que interactúan (Hurts et al. 2017):

- *Espectroscopía atómica*: la cual se concentra solo en las propiedades de los átomos; con este tipo de espectroscopía se puede obtener información acerca de la naturaleza y la cantidad de algún elemento dado que conforma la muestra.
- *Espectroscopía molecular*: se concentra en las moléculas, las cuales son más numerosas debido a que estas están compuestas por átomos, obteniendo información acerca de la composición química, funcional y estructural de los componentes.
- *Espectroscopía nuclear*: se concentra en las reacciones que tienen lugar en los núcleos atómicos excitados, es una técnica muy sensitiva debido a que puede detectar la presencia de elementos en una sustancia que pueden estar presentes en el orden de partes por millón.

La *tabla 2.2* resume los métodos espectroscópicos comunes basados en su característica física. Las 5 entradas se relacionan con interacciones del analito con la radiación electromagnética, donde la primera entrada se relaciona con la producción de energía radiante por el analito al ser excitado por una fuente de radiación, mientras que las siguientes 4 propiedades, se relacionan con cambios en la radiación electromagnética provocados por su interacción con la muestra. En la tabla también se hace mención a la región de trabajo del espectro electromagnético para cada método, así como también su tipo de transición cuántica y su principal aplicación (Harvey D. 2000, Skoog et al. 2008, Braun R. D. 2016 y Hurts et al. 2017).

Tabla 2.2. Clasificación de los métodos espectroscópicos más comúnmente utilizados por su característica física en la cual también se observa la región del espectro electromagnético de trabajo de cada método, su tipo de transición cuántica y su principal aplicación.

Característica Física	Técnica Espectroscópica	Región del Espectro Electromagnético	Tipo de Transición cuántica	Aplicación
Absorción	Mössbauer	Rayos Gamma	Nuclear	Identificación de especímenes que contienen hierro.
	Rayos X	Rayos X	Electrón interno	Determina la estructura geométrica y electrónica de la materia.
	UV/visible	Ultravioleta/visible	Electrones de enlace	Determinación cuantitativa de especies inorgánicas, orgánicas y biológicas.
	Atómica			Concentraciones específicas y determinación de una gran variedad de elementos.
	Infrarroja	Infrarrojo	Rotación/vibración de moléculas	Determinación cualitativa y cuantitativa de especies moleculares.
	De microondas	Microondas	Rotación de moléculas	Determinación de estructuras en fase gaseosa.
	Resonancia de Espín Electrónico		Espín de electrones en un campo magnético	Identificación y cuantificación de radicales libres.
	Resonancia de Magnética Nuclear	Ondas de Radio	Espín de núcleos en un campo magnético	Detecta la presencia de elementos en sustancias que pueden estar presentes en el orden de partes por millón.
Emisión	Rayos X	Rayos X	Electrón interno	Determina la estructura geométrica y electrónica de la materia.
	De Auger			Utilizada en la ciencia de superficies y materiales.
	UV/visible	Ultravioleta/visible	Electrones de enlace	Determinación cuantitativa de especies inorgánicas, orgánicas y biológicas.
	Atómica			Análisis elemental cualitativo y cuantitativo.
	Fluorescencia		Electrones de enlace	Análisis de compuestos orgánicos.
	Fosforescencia			Análisis en el campo de la farmacéutica.
Dispersión	Nefelometría	Ultravioleta/visible		

	Turbidimetría			Análisis de la calidad química del agua para determinar la claridad y para el control de los procesos de tratamiento.
	Raman	Visible/infrarrojo	Rotación/vibración de moléculas	Análisis cualitativo y cuantitativo de sistemas orgánicos, inorgánicos y biológicos.
Refracción	Refractometría	Ultravioleta/visible		Determinación del índice de refracción de muestras líquidas.
	Interferometría			Determinación de cambios en el índice de refracción e irregularidades superficiales.
Difracción	Rayos X	Rayos X	Electrón interno	Determinación estructural en cristales.

Fuente: propia del autor.

2.5. Sistemas Ópticos

Dado que las técnicas espectroscópicas utilizan materiales ópticos para dispersar, coleccionar y enfocar radiación, son considerados sistemas ópticos.

Los sistemas ópticos son divididos en sistemas formadores de imagen y sistemas no formadores de imagen o anidólicos. Un sistema óptico formador de imagen se define como un conjunto de elementos ópticos que producen una imagen del tamaño deseado, en la locación deseada y con la orientación deseada (Chaves J. et al. 2008, Hecht E. et al. 2002). Mientras que un sistema anidólico se define como un conjunto de elementos ópticos que, en vez de producir la imagen de un objeto, produce un patrón de iluminancia o radiancia sobre un receptor por un emisor. Este último está conformado por 3 elementos principales (*figura 2.11*):

- *Emisor*: elemento del sistema que emite luz en una dirección o todas direcciones.
- *Óptica*: conjunto de elementos ópticos que se encargan de dirigir el trayecto de la luz hacia uno o varios puntos determinados al transmitir y/o desviar el haz de luz que pasa a través de ellos.
- *Receptor*: encargado de coleccionar y/o extraer la información de la imagen formada por los rayos de luz que inciden sobre él.

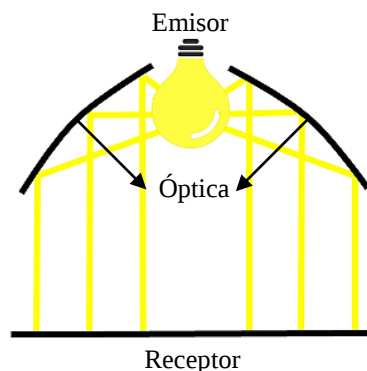


Figura 2.11. Sistema óptico compuesto por un emisor, óptica y un receptor.

Fuente: propia del autor.

Analizando un sistema óptico ya sea formador o no formador de imagen desde la perspectiva general de la óptica geometría la cual parte de la Ley de Snell, teóricamente propone, que la luz proveniente de cada punto, ya sea del objeto o del emisor, es capturada por el sistema óptico por superficies que separan medios con distintos índices de refracción y concentrada sobre un punto en la imagen o el receptor (Viera P. M. 2014).

2.5.1. Ley de Snell

Cuando un haz de luz pasa de un medio denso a otro más denso, se observa un cambio de dirección angular con respecto a la normal, como se observa en la *figura 2.12*. Así mismo, la velocidad de este haz disminuirá durante su trayecto a través del medio más denso y volverá a su velocidad inicial al salir de este (Serway et al. 2009).

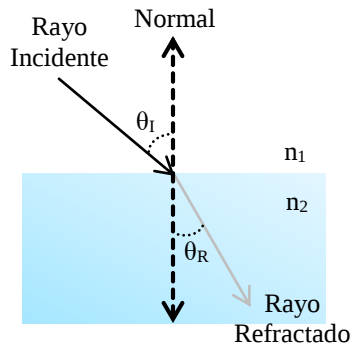


Figura 2.12. Rayo de luz que incide en forma oblicua en una interfase n_1 - n_2 cuyo comportamiento es representado por la Ley de Snell.

Fuente: propia del autor.

A este fenómeno se le conoce como refracción el cual está gobernado por la Ley de Snell (8).

$$\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} = \frac{n_2}{n_1} = \frac{v_2}{v_1} \quad (8)$$

La Ley de Snell relaciona el paso de los rayos de luz a través de los sistemas ópticos por medio de los senos de los ángulos entre un rayo de luz y la normal a la superficie de separación entre dos medios con distintos índices de refracción (n), el cual es una medida de la interacción entre el medio y la radiación y se define como (9):

$$n = \frac{c}{v_i} \quad (9)$$

Toda la luz proveniente de un medio que incide sobre una superficie de separación especular o plana no se transmite en su totalidad al otro medio, parte de esa luz se transmite y se refracta, mientras que la parte restante es reflejada de nuevo en el medio del que proviene al mismo ángulo de incidencia con respecto a la normal pero en forma negativa (10).

$$\theta_I = -\theta_R \quad (10)$$

Es importante mencionar que el rayo incidente, la normal, el rayo reflejado, y el rayo refractado yacen sobre el mismo plano de incidencia (*figura 2.13*).

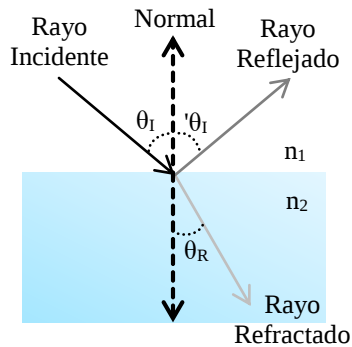


Figura 2.13. Rayo de luz que incide en forma oblicua en una interfase n_1 - n_2 cuyo comportamiento es descrito por los modelos de reflexión y refracción.

Fuente: propia del autor.

2.5.2. Vidrios Ópticos

Los vidrios ópticos o sustratos, son los materiales utilizados para la construcción de elementos ópticos como lentes, prismas y espejos casi ideales para su uso en las diferentes regiones espectrales. Cada sustrato tiene propiedades químicas, térmicas y mecánicas que varían dependiendo de factores externos a los que están expuestos. Sus características principales son la transmisión e índice de refracción, las cuales varían por color (Smith W. 2008, Bass M. et al. 2010). La transmisión se considera como dos efectos por separado entre dos superficies de un medio óptico en el en el cual, una fracción de la luz incidente se refleja sobre cada superficie resultando en una pérdida de un 4 % por superficie, con una pérdida total de 8 % (*figura 2.14*).

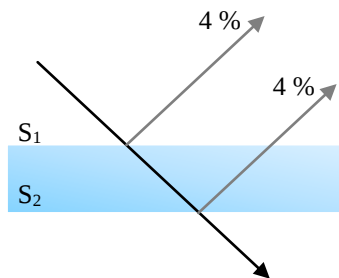


Figura 2.14. Porcentaje de reflexión sobre la superficie S_1 y S_2 de un sustrato.

Fuente: propia del autor.

Estos vidrios son divididos de manera algo arbitraria en dos grupos:

- sustratos Crown: los cuales presentan un índice de refracción inferior a 1.60.
- sustratos Flint: los cuales presentan un índice de refracción superior a 1.60.

Los sistemas ópticos tienen que ser optimizados para un conjunto total de características funcionales. Las aberraciones geométricas e inducidas por color pueden ser compensadas sólo por el uso de más de un tipo de sustrato (Smith W. 2008).

2.5.3. Revestimientos Ópticos

Un revestimiento óptico es una o más capas delgadas de material depositado sobre un componente óptico, que altera la forma en que se refleja y transmite la luz.

Los materiales utilizados son: materiales metálicos y materiales dieléctricos. Los revestimientos metálicos son depositados sobre sustratos para lograr superficies reflectoras como los espejos, para los cuales el metal utilizado determina la reflexión característica del espejo según la longitud de onda que incida sobre su superficie. El otro tipo de recubrimiento óptico es el revestimiento dieléctrico, los cuales son contruidos a partir de capas delgadas de diversos materiales, depositados sobre el sustrato. Mediante una cuidadosa selección de la composición exacta, espesor, número de estas capas e índice de refracción del material, es posible adaptar la reflectividad y la transmitividad del revestimiento por interferencia de ondas para producir casi cualquier característica deseada (Smith W. 2008).

La interferencia de ondas se define como la superposición entre dos o más ondas cuya sumatoria resulta en interferencia constructiva, si las ondas se encuentran en fase (0° o 360°) o en interferencia destructiva, si las ondas están desfasadas una de la otra (180°). Según el grado de desfasamiento, la onda resultante puede disminuir o aumentar su amplitud como se muestra en la *figura 2.15*, por lo que los revestimientos dieléctricos manejan un espesor óptico a una fracción de una longitud de onda, comúnmente $\lambda/4$ (Macleod H. 2010).

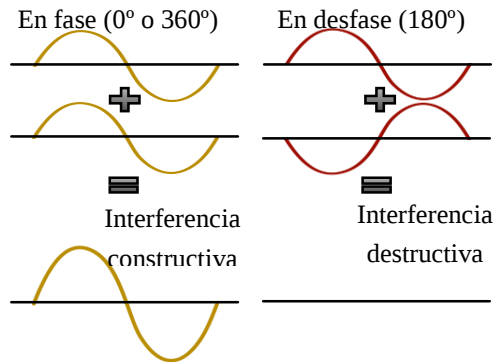


Figura 2.15. Interferencia de ondas constructiva e interferencia de ondas destructiva.
Fuente: propia del autor.

Los revestimientos ópticos pueden dividirse en dos clases, los anti-reflexivos y los de alta-reflexión. Un revestimiento antirreflector, reduce los reflejos no deseados de las superficies; mientras que los revestimientos de alta-reflexión pueden llegar a reflejar más del 99,99% de la luz (Smith W. 2008).

2.5.4. Aberraciones Ópticas en Sistemas Ópticos

Generalmente es común la presencia de irregularidades en las superficies de los elementos ópticos, así como también la generación de imperfecciones sobre la imagen o patrón dado, debido a la dependencia del índice de refracción con respecto a la longitud de onda de la luz incidente, lo que conlleva a una degradación de la imagen generada por aberraciones ópticas (Smith et al. 2008).

Las aberraciones ópticas ocurren cuando un haz de radiación proveniente de un punto no diverge desde o no converge hacia un solo punto luego de transmitirse por el sistema. Esto se debe a que en general, la imagen es perfecta en las superficies esféricas solo cuando los rayos atraviesan el elemento dentro de la región paraxial sobre el eje óptico central (figura 2.16). Existen diferentes tipos de aberraciones pero estas se pueden clasificar en: aberraciones monocromáticas o aberraciones cromáticas (Hetch E. 2002, Smith W. 2008).

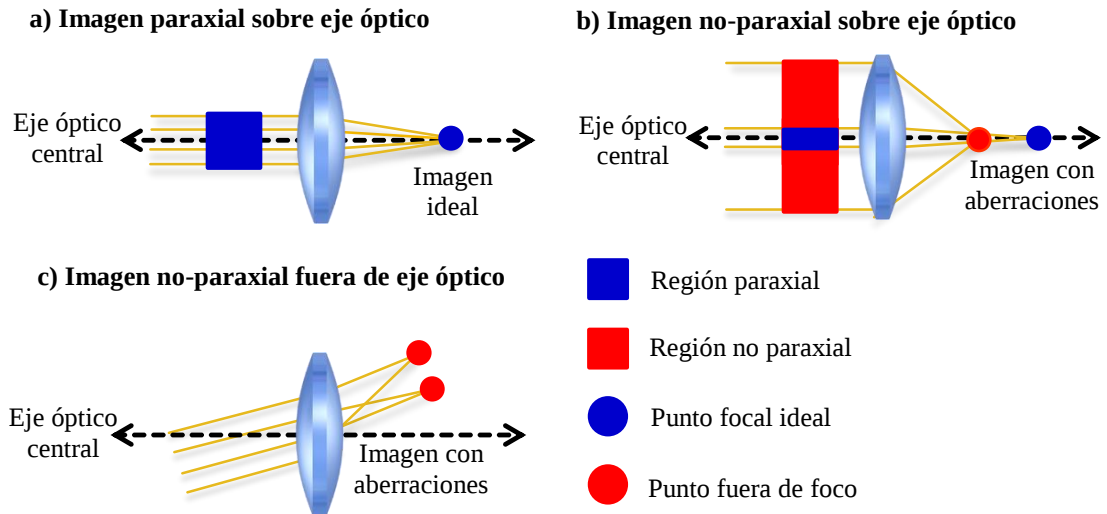


Figura 2.16. Esquemas de a) imagen ideal punto a punto, b) imagen con aberraciones debido a la apertura de un haz de luz incidente monocromático y c) imagen con aberraciones debido a el haz incidente fuera de foco.

Fuente: propia del autor.

2.5.4.1. Aberraciones Monocromáticas

Las aberraciones monocromáticas, existen aun cuando la luz es cuasi-monocromática debido a imperfecciones en los elementos ópticos. Las más comunes son:

- *Astigmatismo*: este tipo de aberración ocurre cuando el punto focal del plano sagital difiere del punto focal del plano transversal, generando una imagen primaria y una imagen secundaria respectivamente, cuyo mejor enfoque se da en el punto donde ambos planos coinciden, mejor conocido como el punto de menor confusión (Figura 2.17).

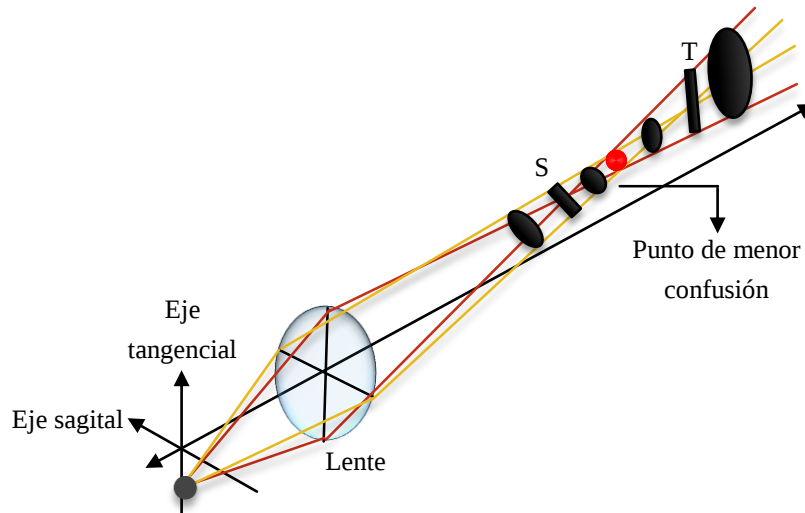


Figura 2.17. Diagrama esquemático de la aberración monocromática conocida como astigmatismo. En la imagen se observa la diferencia en el punto de enfoque de los planos tangencial (T) y sagital (S).

Fuente: propia del autor.

→ *Coma*: el coma se define como la variación de la magnificación de la imagen con la apertura. Cuando un haz de luz fuera de foco incide sobre la lente, los rayos que caen fuera de la región paraxial, enfocan a diferente altura sobre el mismo eje (sagital o tangencial), que aquellos que se encuentren dentro de la región paraxial, donde la imagen creada tendrá una forma de cometa (figura 2.18).

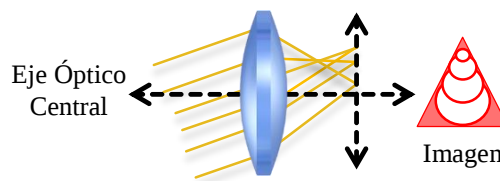


Figura 2.18. En la aberración cromática, los rayos que inciden fuera del centro de la lente, enfocan a diferente altura de los rayos dentro del centro formando una imagen con forma de cometa.

Fuente: propia del autor.

→ *Curvatura de campo*: teniendo un sistema ideal, sin la presencia de algún tipo de aberración, todos los rayos que atravesasen a la lente siguiendo la dirección del eje óptico central caerán perfectamente sobre el punto focal real de la lente, pero aquellos rayos fuera de foco, crearán un punto focal fuera de la dirección del eje óptico a una distancia menor que el punto focal real (figura 2.19).

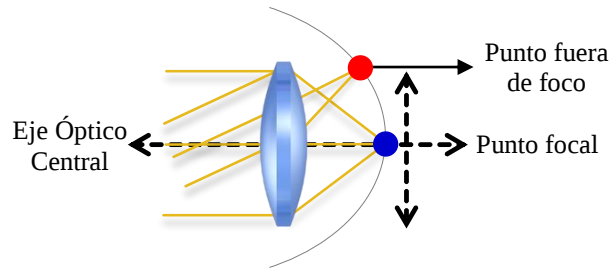


Figura 2.19. Esquema de la curvatura de campo presente en una lente donde el enfoque de la lente no es plano para aquellos rayos fuera de foco.

Fuente: propia del autor.

→ *Distorsión*: la distorsión sucede cuando el objeto se encuentra fuera de foco. Existen dos tipos de fenómenos de distorsión: la distorsión de barril o distorsión negativa y la distorsión de cojín o distorsión positiva. La primera, ocurre cuando el objeto fuera de foco se encuentra cercano al eje central generando una imagen donde sus cuatro lados presentan una curvatura positiva, mientras que la segunda, ocurre cuando el objeto fuera de foco se encuentra lejano al eje central ocasionando una curvatura negativa de los lados de la imagen (figura 2.20).

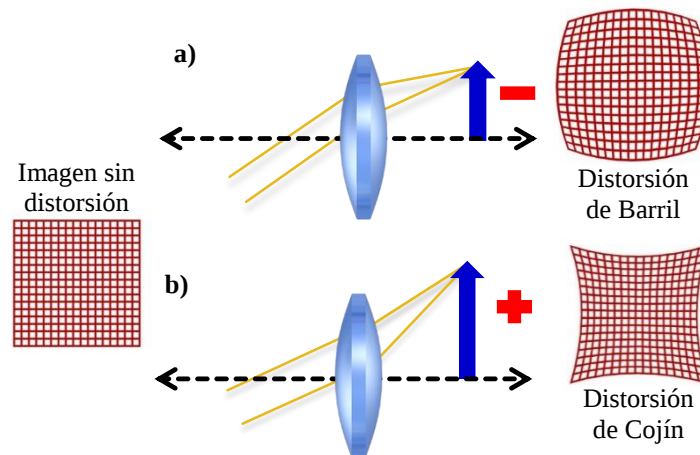


Figura 2.20. Al colocar un objeto sin distorsión a) fuera de foco cercano al eje óptico, el resultado es la aberración de barril y b) fuera de foco lejano al eje óptico, el resultado es la aberración de cojín.

Fuente: propia del autor.

→ *Esférica*: se define como la variación del foco con la apertura sobre el eje óptico central. En este caso existe una variación en la posición del foco conforme los rayos

cae fuera de la región paraxial de la lente; mientras más se alejen del área paraxial, más disminuye la distancia focal (*figura 2.21*).

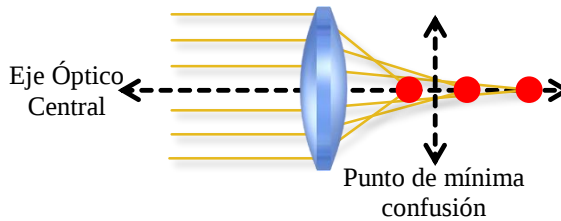


Figura 2.21. Al colocar un objeto sin distorsión a) fuera de foco cercano al eje óptico, el resultado es la aberración de barril y b) fuera de foco lejano al eje óptico, el resultado es la aberración de cojín.

Fuente: propia del autor.

2.5.4.2. Aberraciones Cromáticas

Las aberraciones cromáticas surgen dado que el índice de refracción difiere para cada frecuencia de color del espectro. Este tipo de aberraciones es aplicable aun cuando el sistema maneja fuentes de luz monocromáticas, ya que estas siempre manejan un rango de frecuencia. Existen dos tipos de aberración cromática:

→ *Axial*: al pasar un haz de luz blanca por un elemento óptico, da como resultado una distancia focal más corta para la luz violeta y una distancia focal más larga para la luz roja, dada la diferencia del valor del índice de refracción para cada color. El resultado en el punto de mínima confusión en una serie de imágenes superpuestas que difieren en color (*figura 2.22*).

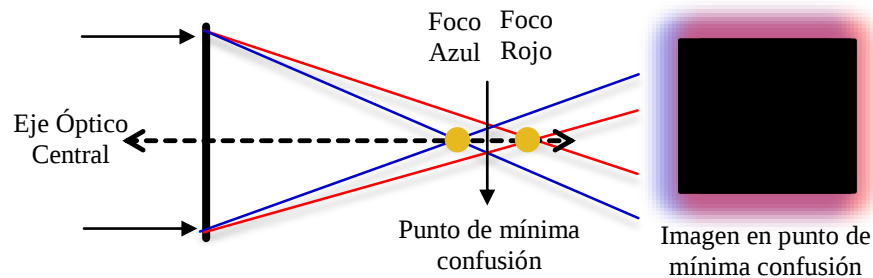


Figura 2.22. Diferentes puntos focales para cada color de un haz de luz blanca al atravesar una lente. Como resultado se observan una serie de imágenes superpuestas debido a la aberración cromática axial.

Fuente: propia del autor.

→ *Lateral*: la aberración lateral, describe la aberración por longitud de onda causada por un haz de luz fuera de foco, lo que conlleva a un aumento lateral de los puntos focales dependiente de la frecuencia (*figura 2.23*).

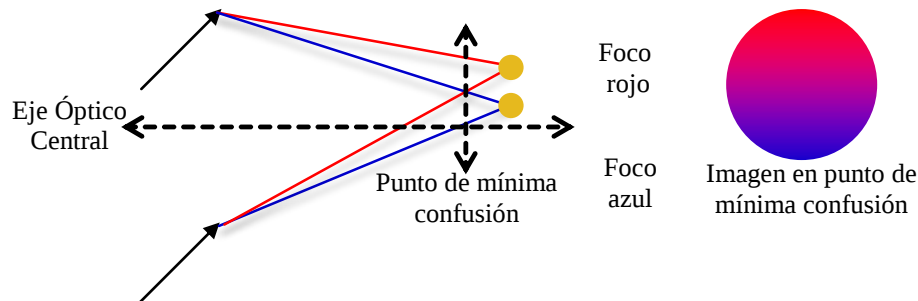


Figura 2.23. Diferentes puntos focales para cada color de un haz de luz blanca al atravesar una lente. Como resultado se observan una serie de imágenes superpuestas debido a la aberración cromática lateral.

Fuente: propia del autor.

2.6. Espectroscopía Raman

En 1928, el físico hindú C. V. Raman descubrió un tipo de radiación secundaria dispersada cuya medición difiere de la radiación dispersada por ciertas moléculas al ser excitadas con un haz de longitud de onda monocromática y además, que los desplazamientos de la longitud de onda de este nuevo tipo de radiación depende del arreglo estructural químico de las moléculas. A este nuevo tipo de radiación se le dio el nombre de radiación Raman, quien fue galardonado con el premio Nobel de física en 1931 por su descubrimiento y por el estudio de este fenómeno (Raman et al. 1928, Skoog et al. 2008). Aunque el fenómeno Raman fuera descrito en la década de los años 20, no fue hasta el desarrollo de tecnologías LASER en la década de los años 60, que la espectroscopia Raman comenzó a tener un auge dentro del área de análisis químico.

El espectro Raman se puede describir como una “huella digital” de los enlaces químicos entre moléculas o enlaces atómicos en cierta sustancia o materiales complejos, lo que permite la identificación fidedigna de las especies químicas que conforman la muestra analizada debido a que no existen dos moléculas que presenten el mismo espectro Raman, al igual que la intensidad de la luz dispersada, es proporcional a la cantidad de material presente (Thermo Scientific, 2008).

Otra ventaja adicional sobre las diferentes técnicas espectroscópicas, es la independencia de la longitud de onda de operación de la fuente de excitación sobre los modos vibraciones estudiados, lo que permite que el rango de la fuente pueda variar desde el

ultravioleta al infrarrojo cercano, pudiendo así, analizar muestras tanto orgánicas como inorgánicas (Skoog et al. 2008).

Las técnicas de espectroscopía Raman e infrarroja se consideran complementarias entre sí ya que, aunque ambas dependen de los modos de vibración molecular, la primera se genera por los modos vibraciones simétricos mientras que la segunda se genera por los modos vibraciones asimétricos, por lo que cada uno de estos métodos examina diferentes aspectos de una muestra dada (Skoog et al. 2008). La ventaja que posee la técnica Raman sobre la técnica infrarroja es el análisis de muestras líquidas a través de contenedores transparentes ya que la radiación Raman de sustancias transparentes (vidrio, agua, algunos plásticos, etc.) es muy escasa y en ocasiones nula.

2.6.1. Descripción del Fenómeno

El efecto Raman puede ser descrito por la teoría cuántica así como por la teoría clásica (Chandra S. 2009, Dieing et al. 2010).

2.6.1.1. Teoría Cuántica

De acuerdo con la mecánica cuántica, el fenómeno de la radiación es la propagación de energía en forma de ondas electromagnéticas o partículas subatómicas (fotones) a través del vacío o de un medio material. Para entender la dispersión Raman, la radiación incidente de frecuencia V_0 y energía $h\nu_0$ se considera como una corriente de partículas (fotones) colisionando con las moléculas que conforman una partícula. Cuando la colisión es elástica, la radiación dispersada será de la misma frecuencia que la fuente de excitación, este fenómeno recibe el nombre de *dispersión Rayleigh*. Cuando la colisión es inelástica, hay un cambio de energía entre el fotón incidente y la molécula, esta misma puede perder energía si la molécula se encontraba en un estado vibracional fundamental ($v=0$) absorbiendo un fotón de energía $h\nu_0$ y volver a emitir un fotón de menor energía que el fotón de excitación $h(\nu_0 - \nu_m)$, a esta dispersión se le conoce como *dispersión Raman Stokes*. Al mismo tiempo, la molécula puede también ganar energía si está antes de ser excitada por el fotón incidente ya que se encuentra en un estado vibracionalmente excitado ($v=1$) produciendo así una señal Raman de energía $h(\nu_0 + \nu_m)$ llamada *dispersión Raman anti-Stokes* emitiendo un fotón de mayor energía que el fotón incidente. La *figura 2.24* representa los estados niveles de energía representativos para la dispersión Rayleigh, dispersión Raman Stokes y dispersión Raman anti-Stokes.

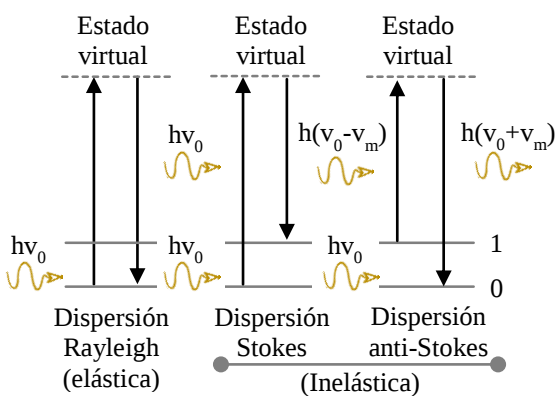


Figura 2.24. Diagrama de los niveles de energía que muestra la línea Rayleigh y las líneas Raman Stokes y Anti-Stokes.

Fuente: propia del autor.

2.6.1.2. Teoría Clásica

La *polarización inducida* P es proporcional a la energía aplicada del campo eléctrico (11).

$$P = \alpha E \quad (11)$$

Donde la constante de proporcionalidad α es conocida como la polarizabilidad de la molécula. Cuando una radiación de frecuencia V_0 cae sobre moléculas, cada molécula experimenta una variación en su campo eléctrico E , expresándose como (12).

$$E = E_0 \cos(2\pi\nu_0 t) \quad (12)$$

Donde E_0 es la magnitud del campo. Considere el movimiento vibracional de la molécula. Suponiendo q , siendo la coordenada normal asociada con un modo de vibración particular de frecuencia ν_m de la molécula. En la aproximación armónica, q puede ser expresado como (13).

$$q = q_0 \cos(2\pi\nu_m t) \quad (13)$$

La polarizabilidad α puede ser expresada como una serie de Taylor en la coordenada normal q como (14).

$$(14)$$

$$\alpha = \alpha_0 + \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q}\right)_0 q + \dots$$

Ordenando los términos (11), (12) y (13) en (14) se tiene (15).

$$\begin{aligned} P &= \left[\alpha_0 + \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q}\right)_0 q \cos(2\pi v_m t) \right] E_0 \cos(2\pi v_0 t) \\ &= \alpha_0 E_0 \cos(2\pi v_0 t) + \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q}\right)_0 q E_0 \cos(2\pi v_0 t) \cos(2\pi v_m t) \\ &= \alpha_0 E_0 \cos(2\pi v_0 t) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q}\right)_0 q E_0 \cos[(2\pi(v_0 + v_m)t)] \\ &\quad + \cos[2\pi(v_0 - v_m)t] \end{aligned} \quad (15)$$

Como se muestra, cuando $\left(\frac{\partial \alpha}{\partial q}\right)$ es cero, no se observan bandas Raman. Una regla importante es que la vibración molecular Raman solo se activa cuando hay un cambio en su componente de polarizabilidad.

La gráfica del espectro Raman puede ser descrita tanto por la teoría cuántica como la teoría clásica. Ambas teorías nos describen el fenómeno Raman como una representación de la diferencia entre la luz incidente y la luz dispersada, la cual se presenta en el eje de las abscisas. Mientras que la intensidad del espectro Raman depende de forma compleja de varios factores como la polarización de la molécula, la intensidad de la fuente y la concentración del grupo activo, además de otros factores como las masas de los átomos involucrados y de la fuerza de los enlaces entre ellos. La intensidad del efecto Raman se presenta en el eje de las ordenadas.

2.6.2. Tecnologías de Medición de Dispersión Raman

La huella digital espectral de dispersión Raman es medida por dos clases de tecnologías espectroscópicas, de dispersión y de transformada de Fourier (*figura 2.25*). Cada una de estas técnicas tiene ventajas únicas y son ideales para tipos específicos de análisis (Skoog et al. 2008 Thermo Scientific, 2008, Settle F. 1997).

→ *Espectrómetro de dispersión Raman*: un espectrómetro de dispersión Raman separa la luz dispersada Raman colectada en sus longitudes de onda por las que está compuesto, al enfocar la luz dispersada sobre una red de difracción, la cual divide el haz de luz en sus longitudes de onda constituyentes. Posteriormente estas son dirigidas hacia un detector, generalmente un CCD. La técnica de dispersión utiliza

radiación láser en la región visible desde 532nm, 633nm hasta 785 nm. En estos tipos de espectrómetros la resolución espectral determina la cantidad de detalle que puede ser visto en el espectro.

- *Espectrómetro de transformada de Fourier*: está conformado por un interferómetro de Michelson y tecnología láser cercana al infrarrojo, usualmente 1064nm ya que al utilizar esta longitud de onda la fluorescencia es casi completamente nula, aunque la intensidad de la señal es débil. La señal Raman se convierte en un interferograma el cual es detectado por un detector sensible cercano al infrarrojo tal como los detectores de Indio-Galio-Arsénico o Germanio refrigerado con Nitrógeno líquido ya que al utilizar longitudes de onda de excitación tan altas, se hace imposible el uso de detectores CCD. Posteriormente se aplica un algoritmo de transformada de Fourier al interferograma para convertir la señal obtenida en un espectro Raman convencional.

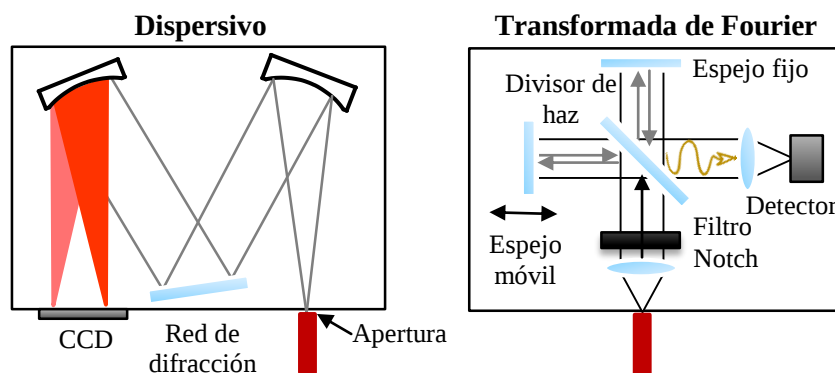


Figura 2.25. Arreglo de un espectrómetro Raman de dispersión y transformada de Fourier.

Fuente: propia del autor.

En un espectrómetro de dispersión Raman, la dispersión de la luz por parte de la muestra puede ser obtenida por medio de 4 diferentes técnicas (figura 3.3). La selección de la técnica dependerá de la aplicación e índole de la muestra (Schrader et al. 1995, Skoog et al. 2008, Matousek et al. 2010).

- *Retroalimentación Raman*: es la reflexión de ondas, partículas o señales en dirección hacia el lugar de donde provienen.
- *Spatially offset Raman (SORS)*: el método SORS se basa en la separación espacial entre la zona de colección del espectro Raman y la zona de iluminación sobre la que incide el láser sobre la superficie de la muestra.
- *Transmisión Raman*: la técnica puede considerarse un caso especial de SORS, donde el rayo láser y la zona de recolección de la señal Raman están separados al extremo, estando en los lados opuestos de la muestra.

→ *Surface enhanced Raman (SERS)*: es una técnica sensible a la superficie que da como resultado el aumento de la dispersión Raman por adsorción de moléculas sobre superficies de metal áspero o sobre la superficie de nano-clusters coloidales de cierta dimensión. El factor de realce puede ser tanto como 10^4 - 10^5 , lo que permite que la técnica sea lo suficientemente sensible para detectar una sola molécula.

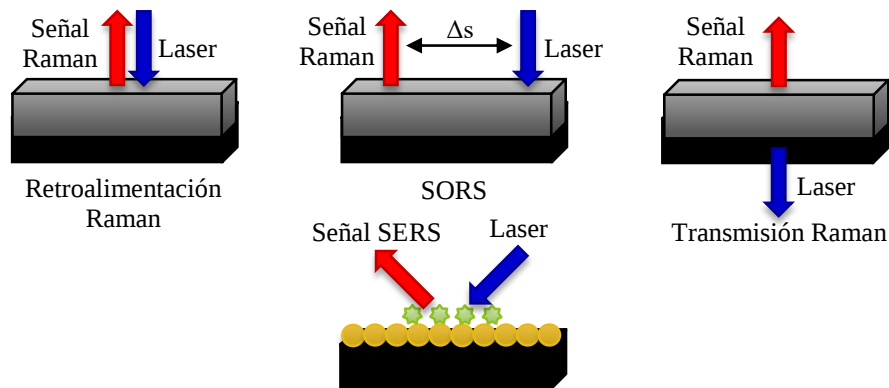


Figura 2.26. Diagramas esquemáticos de las modalidades básicas de espectroscopia Raman. Retroalimentación convencional Raman, SORS, transmisión Raman y SERS.

Fuente: propia del autor.

2.6.3. Instrumentos

Ya que la señal Raman es muy pequeña en términos de intensidad, es importante la selección de los elementos ópticos así como del detector que conformarán el espectrómetro para poder obtener bandas Raman bien definidas. Uno de los factores más importantes es la resolución espectral del espectrómetro, la cual se define como la capacidad del espectrómetro de distinguir entre dos líneas muy cercanas entre si y está determinada por 4 factores principales (Liu C. et al. 2012):

- *El diseño del espectrómetro* (efecto de difracción por la red de difracción y los espejos cóncavos, el número de líneas/mm en la red, el ancho de la apertura de entrada).
- *Longitud de onda de la fuente de luz de excitación.*
- *Las aberraciones causadas por los elementos en el sistema.*
- *El tipo de detector y sus pixeles.*

Es importante mencionar que estos factores dependen entre ellos, si se tiene una red de difracción con una baja resolución, la resolución espectral puede aumentar al aumentar la longitud focal del espectrómetro, variando la longitud de onda de la fuente de luz o seleccionando un detector con pixeles pequeños. Entre todos estos factores son dos los que

resaltan, la habilidad de dispersión del espectrómetro y la anchura a media altura (FWHM, del inglés Full Width at Half Maximum) de la apertura de entrada, el cual se define como la banda de paso del espectrómetro, y es representado en la *figura 2.27* (Lerner J. 2006).

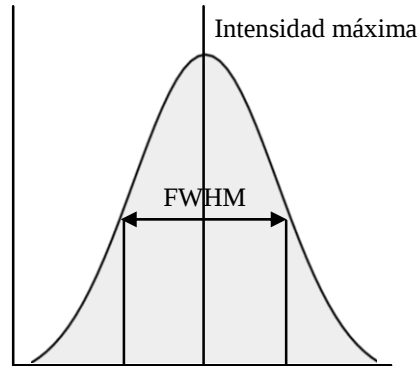


Figura 2.27. Gráfico de anchura a media altura.

Fuente: propia del autor.

Los instrumentos básicos de un espectroscopio Raman los cuales se pueden observar en la *figura 2.28* son:

- 1) Fuente de luz monocromática
- 2) Espectrómetro
- 3) Detector
- 4) Arreglo óptico
 - a. Lentes colectoras
 - b. Filtros ópticos
 - c. Divisor de haz

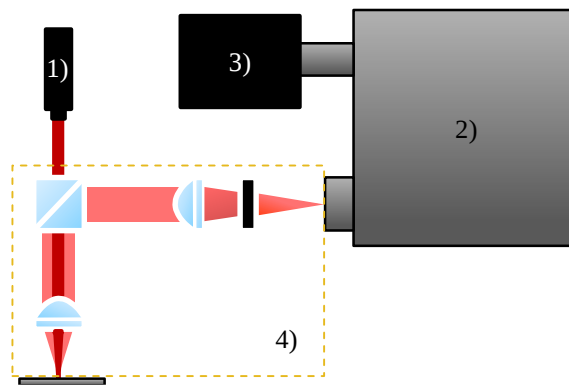


Figura 2.28. Diagrama básico del arreglo de los instrumentos que componen un espectroscopio Raman de dispersión.

Fuente: propia del autor.

2.6.3.1. Fuente de luz monocromática (L.A.S.E.R.)

En la *tabla 2.3* se enumeran cinco de los rayos laser más utilizados en la espectroscopia Raman.

Tabla 2.3. Tipos de laser utilizados en espectroscopia Raman.

Tipo de laser	Longitud de onda (nm)
Ion Argón	488.0 o 514.5
Ion Criptón	530.9 o 647.1
Helio-Neón	632.8
De diodos	785 o 830
Nd:YAG	1064

Fuente: Skoog et al. 2008.

La intensidad de la dispersión Raman varía con la cuarta potencia de la frecuencia de la fuente de luz monocromática (eficiencia de excitación λ^{-4}). Por ejemplo, la dispersión Raman a 532 nm tiene un factor de 4.7 veces más eficiente que a una longitud de onda de 785 nm (Zhou P. 2015). Por otra parte, muchas muestras pueden generar fluorescencia la cual puede ser 10^6 - 10^8 veces más fuerte que la dispersión Raman; al mismo tiempo las muestras pueden ser fotodescompuestas cuando son excitadas en la región UV o azul del espectro; al utilizar láseres de longitud de onda en el infrarrojo cercano la fluorescencia es menos intensa o inexistente debido a que carecen de energía suficiente para poblar una cantidad importante de estados electrónicos energéticos capaces de producir fluorescencia en la mayoría de las moléculas, pudiendo trabajar con potencias muy superiores sin ocasionar fotodescomposición y generando bandas Raman con buena definición aunque la potencia de excitación para este tipo de láseres necesita ser de alta intensidad para generar un aumento en la intensidad de la dispersión Raman lo suficiente para poder ser medida (Dieing et al. 2010, Matousek et al. 2010).

Un L.A.S.E.R. (del acrónimo en inglés LASER, Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) hace uso de procesos para amplificar señales de luz después de la generación de esas señales por diferentes medios (Dorronsoro M. 1995). Un láser emite ondas de luz planas, coherentes, monocromáticas las cuales pueden ir desde potencias muy pequeñas por debajo de los miliWatts (mW), hasta potencias que alcanzan los millones de Watts (W), pudiendo alcanzar altos niveles de colimación y pulsos de duración muy pequeños a diferencia que muchas otras diferentes fuentes de luz (Hernández M. 2007).

Aunque hoy en día haya una gran cantidad de láseres, todos ellos presentan algunas características en común (*figura 2.29*):

- 1) *Un medio excitable.* El cual puede ser un sólido, líquido, gas o algún material semiconductor que pueda ser bombeado a un estado de energía más alto.
- 2) *Un medio que permita bombear energía en el medio excitable.* Este puede ser óptico, químico, electrónico, etc. Con la energía suficiente para llevar la mayor parte del medio excitable a una inversión de población.
- 3) *Un resonador.* en la mayoría de los casos la cavidad de resonancia es del tipo Fabry-Perot, el cual está conformado por un par de espejos, uno a cada lado del láser, uno reflectivo y otro parcialmente transparente, los cuales permiten que la luz estimulada rebote de un lado a otro a través del medio excitable para la amplificación del haz.

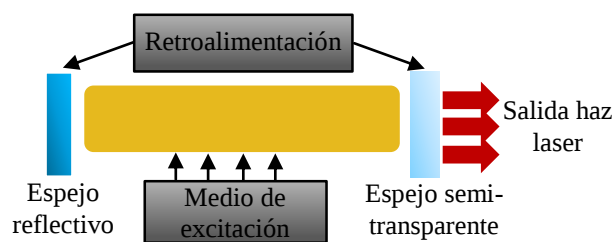


Figura 2.29. Diagrama ejemplo de dispositivo de emisión de láser típico.

Fuente: propia del autor.

A continuación, se explican los pasos para producir luz láser, los cuales son esquematizados en la figura 2.30.

- 1) En su estado básico los átomos, moléculas o iones del medio excitable se encuentran en *estado basal*.
- 2) Al *bombeo* con energía el medio excitable, sus átomos, moléculas o iones se ubican en un nivel de energía virtual superior creando una inversión de población dentro del medio excitable.
- 3) De forma aleatoria, algunos de los átomos, iones, moléculas excitados caen a un nivel de energía inferior emitiendo un fotón en dirección aleatoria. A este proceso se le conoce como *emisión espontánea*.
- 4) Estos fotones aleatorios chocan en su camino con un átomo, a una molécula o a un ion excitado, logrando que el átomo, molécula o ion respectivamente se relajen y caigan a un nivel de energía inferior, produciendo un fotón el cual presentara las mismas características, la misma longitud de onda, fase, dirección y polarización que el fotón por el que fue golpeado. A este proceso se le conoce como *emisión estimulada*.
- 5) Algunos de los fotones generados por emisión espontanea se mueven de forma paralela dentro del tubo de resonancia chocando con alguno de los espejos

repitiéndose el proceso varias veces. Así, estos fotones reforzaran la producción de más fotones teniendo así una avalancha de estos a través del proceso de emisión estimulada.

- 6) El haz producido será altamente monocromático y coherente. De igual forma el haz estará colimado, o por lo menos se observara que surge a partir de un punto.

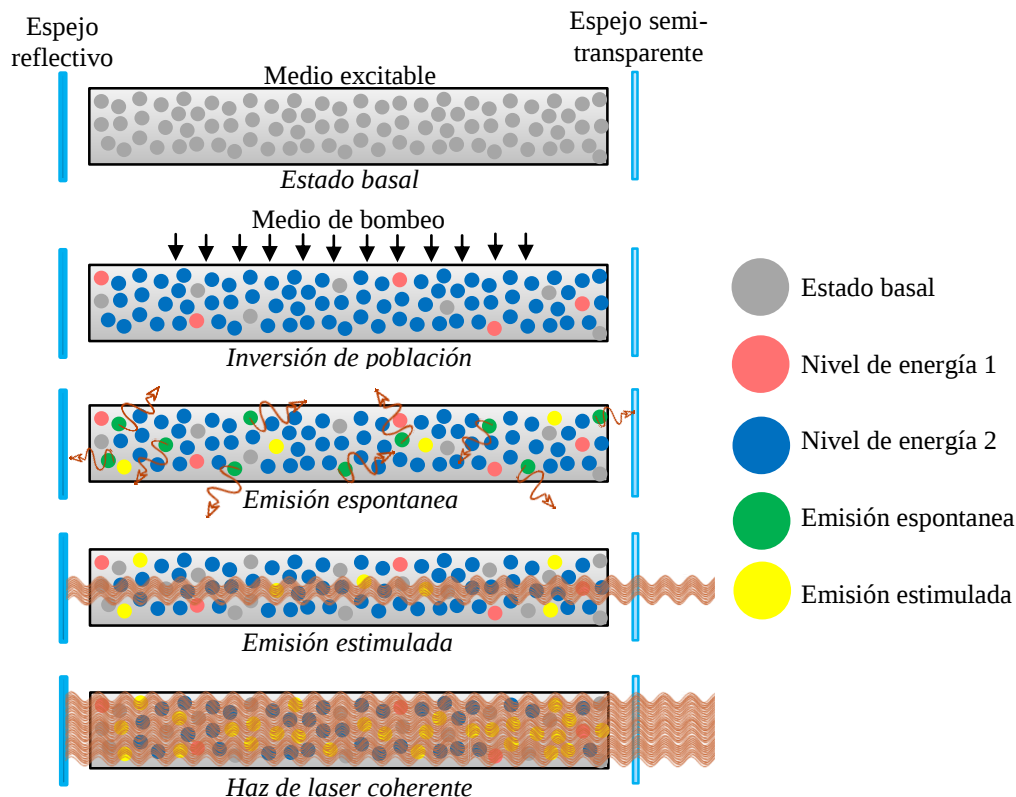


Figura 2.30. Operación básica de un láser.

Fuente: propia del autor.

2.6.3.1.1. Tipos de Láseres

Existen muchos tipos de láseres disponibles para diferentes tipos de aplicaciones así como diferentes áreas como la de investigación, medica, industrial hasta para su uso comercial. Científicos e investigadores han encontrado una amplia variedad de materiales láser como medios activos en cada categoría desde 1958, cuando se observó la acción láser en el cristal de rubí. Existen muchas maneras de clasificar los diferentes tipos de láser, estos se pueden clasificar como continuos o pulsados, de baja o alta potencia y/o según el color que emiten. La clasificación más común es según la naturaleza del medio activo la cual puede tener forma gaseosa, liquida o solida (Skoog et al. 2008, Chandra et al. 2012, Davis C. 1996).

- *Láseres de gas*: Un láser de gas es un láser en el que una corriente eléctrica se descarga a través de un gas para la producción de fotones. Los láseres de gas están ampliamente disponibles en casi todas las potencias (miliWatts a megaWatts) y longitudes de onda (UV-IR) y pueden ser operados en modos pulsado y continuo.
- *Láseres de líquido*: Los líquidos son más homogéneos en comparación con los sólidos y tienen una mayor densidad de átomos activos en comparación con los gases. Este tipo de láseres son de cuatro niveles y utilizan soluciones colorantes como medio activo, que para poder ser excitados requieren de una fuente laser externa (Nd:YAG, de diodos, de exímeros). Su salida es un pulso corto que contiene un amplio espectro con una salida de potencia que puede llegar hasta los 1.4 kW. Los materiales activos son disoluciones de compuestos orgánicos capaces de manifestar fluorescencia en las regiones del UV, visible e infrarrojo
- *Láseres sólidos*: Los láseres sólidos tienen como medio activo una barra de cristal dopado con algún ion metálico, y actínidos en huéspedes que aíslan el medio activo. Son láseres de 3 niveles cuya potencia varía desde los miliWatts hasta los kiloWatts, trabajan dentro del área del espectro infrarrojo cercano e infrarrojo medio. Hoy en día se pueden encontrar láseres tanto de pulso como continuos. El arreglo de los átomos del anfitrión alrededor del ion dopado modifica sus niveles de energía. Se obtiene una longitud de onda de láser diferente en los medios activos por dopado de diferentes materiales huésped con el mismo ion activo.

2.6.3.1.2. Diodo Laser Semiconductor

Los láseres de semiconductores también conocidos como láseres cuánticos de pozo son más pequeños, más baratos, se pueden producir en masa y son fácilmente escalables. Son básicamente un diodo de unión p-n fuertemente dopado, que produce luz de cierta longitud de onda por recombinación del portador de carga cuando se polariza hacia delante, muy similar a los diodos emisores de luz (LEDs). Los LEDs poseen emisión espontánea, mientras que los diodos láser emiten radiación por emisión estimulada con energía eléctrica como fuente de energía (Chandra et al. 2012, Davis C. 1996). La corriente operativa debe ser superior al valor umbral para alcanzar la condición de inversión de la población (*figura 2.31*). No se requiere espejo externo para la retroalimentación óptica con el fin de mantener la oscilación del láser, la reflectividad debida a las diferencias del índice de refracción entre dos capas o la reflexión interna total al medio activo es suficiente para este propósito.

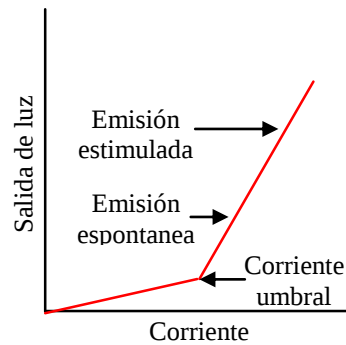


Figura 2.31. Flujo de salida de un láser semiconductor en relación con la corriente.

Fuente: propia del autor.

Dentro de los diodos laser existen diversas configuraciones del material N-P. Los diodos laser de homounión constan de una sola unión P-N. Actualmente los diodos laser fabricados no presentan una sola unión P-N sino varias uniones (heterounión), lo que permite que se genere una barrera de potencial mayor comparada con los diodos de homounión, incrementando de esta forma la acumulación de cargas en esta barrera para la producción de una región de inversión que disminuirá la corriente de umbral para la operación del diodo laser (Dorronsoro M. 1995).

El tamaño típico del empaque de un diodo laser es de 5 a 10 mm de tamaño, mientras que el tamaño del chip semiconductor es menor a 1 mm. Conforme el haz principal emerge del diodo laser este presentara una forma altamente divergente de forma cuasi-gaussiana en el cual difiere FWHM sobre el eje X y el eje Y, por lo que es necesaria un sistema óptico externo para producir haces paralelos (Davis C. 1995, Sun H. 2012). La figura 2.32 representa la forma típica de un laser de diodos y la divergencia que presenta el haz.

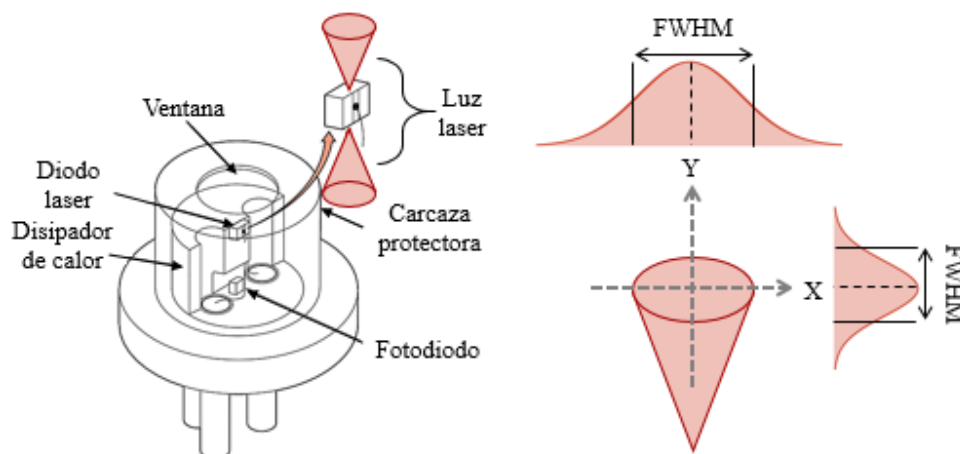


Figura 2.32. Estructura de un láser de diodos.

Fuente: propia del autor.

Debido a la naturaleza de la unión que produce un haz con forma de cuña elíptica o rectangular y una divergencia no proporcional al igual que se da la presencia de astigmatismo, es necesario el uso de una lente cilíndrica o de una lente con una curvatura astigmática para compensar estas características. Sin embargo la cantidad de astigmatismo es pequeña por lo que en general es ignorada.

Todos los diodos láser son susceptibles a cambios de temperatura. A medida que aumenta la temperatura de un láser semiconductor, el dispositivo se vuelve menos eficiente y su salida de luz cae. Si la temperatura disminuye, el láser se vuelve mucho más eficiente (Sun H. 2012). Con el aumento de la potencia de salida, existe el riesgo de dañar el láser, por lo que la mayoría de los circuitos de accionamiento de corriente continua incorporan un bucle de realimentación para controlar la temperatura o potencia de salida del dispositivo y ajustar su corriente de funcionamiento.

Para facilitar el sistema de retroalimentación, la mayoría de los diodos láser ahora incorporan un monitor de fotodiodo incorporado. Este fotodiodo está situado en el extremo opuesto del chip de diodo, y muestra una pequeña porción de la potencia de salida. El fotodiodo está conectado a un comparador relativamente simple o circuito de amplificador operacional. Como la salida de potencia del láser varía, la corriente (y voltaje) del monitor de fotodiodo cambia (Hernández M. 2007).

Los láseres semiconductores están basados en 4 diferentes tipos de materiales, su selección depende de la región de longitud de onda de interés (Silfvast W. 2004).

- *Láseres con base- GaAs*. Un láser con base GaAs opera en la región del espectro rojo y cercano a infrarrojo. Estos láseres operan en longitudes de onda entre los 635nm hasta los 870nm.
- *Láseres con base-In-P*. Este tipo de diodos laser operan en la región de 1.55nm.
- *Láseres con base Zn-Se*. Los láseres con base Zn-Se fueron los primeros láseres semiconductores que permitieron una salida dentro del espectro azul-verde operando dentro de la región desde 460-520nm.
- *Láseres con base-GaN*. Su desarrollo ha sido el más reciente con longitudes de onda por debajo de los 410nm.

2.6.3.2. Monocromadores y Policromadores

En la mayoría de los métodos espectroscópicos la medición requiere de un barrido del espectro en un intervalo amplio del espectro ya sea ultravioleta, visible o infrarrojo donde la variable dependiente es la intensidad de la luz, mientras que la variable independiente es normalmente la variación en longitud de onda dentro de un intervalo en el espectro, o una unidad directamente proporcional a la energía del fotón que tiene una relación recíproca con la longitud de onda (Skoog et al. 2008).

En su forma más simple, se utilizan ranuras, lentes, espejos y/o ventanas para dirigir un haz colimado hacia una red de difracción o prisma que difracta cada longitud de onda a cierto ángulo para posteriormente enfocar el espectro dispersado sobre un detector o un arreglo de estos (Lucatorio T. et al. 2014). Existen dos clases de sistemas:

- *Monocromador*: el cual cuenta con una rendija de salida y un elemento dispersivo rotatorio para realizar una medición del barrido del espectro por longitud de onda secuencialmente.
- *Policromador*: por su parte, un policromador cuenta con un detector multicanal que captura todo el espectro a la vez, por lo cual no requiere de una rendija de salida y su elemento dispersor se encuentra en una posición fija.

El rendimiento de un espectrómetro dependerá, entre otras cosas, de su sensibilidad y resolución espectral. La sensibilidad determinará cuánto tiempo tomará registrar un espectro con cierta relación señal-ruido mientras que la resolución espectral determinará cuán fácil será extraer información sutil de un espectro (Margaritondo G. et al. 2007, Liu C. et al. 2012). Ambos aspectos varían según los componentes que separan y miden donde el elemento más importante en el análisis espectral es elemento dispersivo ya sea un red de difracción o un prisma (Lucatorio T. et al. 2014).

La resolución espectral (R) se define como la habilidad del instrumento para separar dos líneas espectrales (considerando ideal al sistema cuando el máximo de uno cae en el primer mínimo del otro) y teóricamente se determina con el criterio de Rayleigh (16).

$$R = \frac{hv}{\Delta hv} = \frac{\lambda}{\Delta \lambda} \quad (16)$$

Donde:

- hv (λ), es la energía (longitud de onda) del fotón.

→ $\Delta h\nu$ ($\Delta\lambda$), es la distancia mínima entre dos puntos del espectro separados por el monocromador o policromador.

En el pasado los espectrómetros solo utilizaban monocromadores de prisma. Hoy en día la mayoría de estos instrumentos utilizan monocromadores o policromadores basados en redes de reflexión ya que facilitan la separación entre longitudes de onda de forma lineal (Skoog et al. 2008).

2.6.3.2.1. Redes de Difracción

La función de la red de difracción en un espectrómetro es dispersar la señal que entra al detector al desviar cada longitud de onda a diferentes ángulos. Su diseño se basa en una serie de ranuras periódicas micrométricas precisas sobre una superficie reflectora o transmisora como se observa en la *figura 2.33*. El número de ranuras/mm determina las características de dispersión; entre las líneas/mm, se produce una mejor dispersión y una más alta resolución, pero al mismo tiempo distribuye la señal sobre un mayor número de píxeles (Smith W. 2008, Palmer C. et al. 2005). La propiedad más importante de una red de difracción es su poder de resolución, la habilidad de distinguir entre longitudes de onda muy cercanas (Skoog et al. 2008).

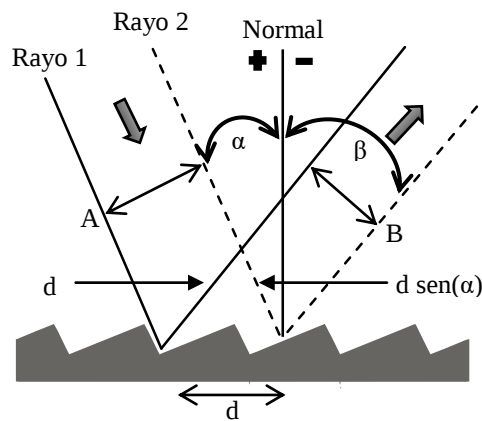


Figura 2.33. Bosquejo de la geometría de difracción sobre una red de difracción.

Fuente: propia del autor.

La fórmula (17) nos da la ubicación de la intensidad máxima cuando la luz de longitud de onda λ es difractada a un ángulo seno (α) al incidir a un ángulo seno (β) sobre la red de difracción con ranuras de anchura d . los ángulos α y β son determinados de acuerdo a la normal de la superficie de la red (Palmer C. 2005, Smith et al. 2008, Lucatorto T. et al. 2014).

$$m\lambda = d(\sin\alpha + \sin\beta) \quad (17)$$

Para una red de difracción de líneas con anchura d , hay una relación matemática entre la longitud de onda y los ángulos de incidencia y difracción (Palmer C. 2005, ZEMAX 2011). En un orden espectral m , las diferentes longitudes de onda de frentes incidentes de onda policromáticos en un ángulo α están separados en ángulo (18).

$$\beta(\lambda) = \sin^{-1} \left[\left(\frac{m\lambda}{d} \right) - \sin(\alpha) \right] = m\lambda T \quad (18)$$

Donde T (19) es la frecuencia de líneas en líneas/milímetro y se define como el recíproco de d en milímetros/línea (20).

$$T = \frac{1}{d} \quad (19)$$

$$d = \frac{1}{\frac{\text{No. líneas}}{\text{mm}}} \cdot \frac{0.001\text{m}}{1\text{mm}} \quad (20)$$

Por otra parte, a m se le conoce como orden de difracción, el cual es un integral múltiple de la longitud de onda el cual puede ser positivo o negativo satisfaciendo a la ecuación de difracción para más de un ángulo de difracción β (Palmer C. 2005). Para distinguir entre un orden positivo y negativo se dice que:

- $\beta > -\alpha$ para ordenes positivos ($m > 0$)
- $\beta < -\alpha$ para ordenes negativos ($m < 0$)
- $\beta = -\alpha$ reflexión especular ($m = 0$)

En la reflexión especular la red de difracción actúa como un espejo y las longitudes de onda no son separadas.

Dado que m es un integrado, cuanto mayor sea el orden de difracción mayor será la separación entre las diferentes líneas del espectro, por lo que las mediciones en órdenes altos serían preferibles. El aspecto problemático de trabajar con órdenes múltiples es el solapamiento entre órdenes, es decir, que algunas líneas de un cierto orden invadan parte del espectro del orden siguiente como se demuestra en la *figura 2.34* (Palmer C. 2005).

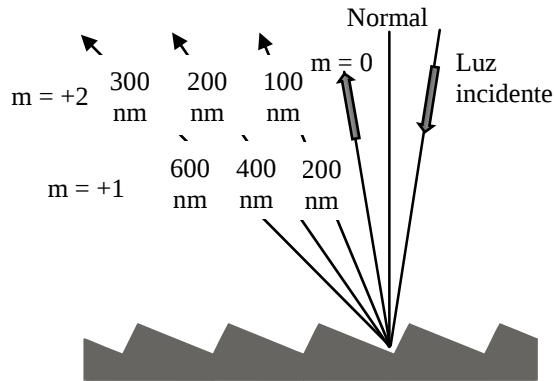


Figura 2.34. Dispersión de los componentes de un haz de luz que incide sobre una red de difracción a un orden 1 y orden 2.

Fuente: propia del autor.

Para poder conocer la distancia que hay entre la normal y el máximo a un orden x podemos utilizar la fórmula de la tangente (21).

$$\tan(\theta) = \frac{y}{L} \rightarrow y = L \tan(\theta) \quad (21)$$

Donde:

→ L es la distancia entre la red de difracción y el siguiente elemento óptico.

La dispersión de la red de difracción es resultado de la frecuencia de líneas/milímetro y de la distancia focal medida desde la red de difracción hasta el siguiente elemento óptico, por lo que, al tener una red de difracción con un alto número de líneas/milímetro y aumentar L a $2L$ a un orden x , la dispersión del espectro aumenta mejorando la resolución espectral (Palmer C. et al. 2005, Adar F. 2013). La figura 2.35 demuestra como el espectro de dispersión puede mejorar al aumentar ambos factores.

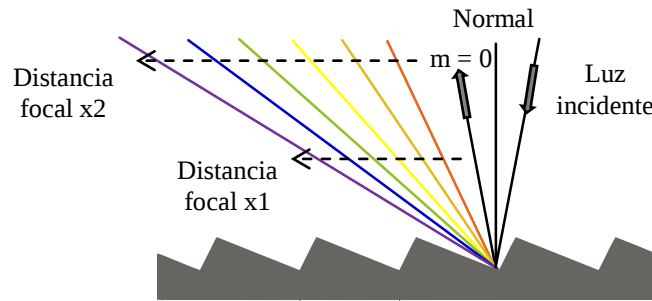


Figura 2.35. Representación de los componentes de un haz de luz que incide sobre una red de difracción a diferente longitud focal. Se observa que, a mayor distancia focal, mayor dispersión del espectro, con la cual se obtiene una mejor gráfica del efecto Raman.

Fuente: propia del autor.

Las redes de difracción pueden ser clasificadas de acuerdo al tipo de superficie (Morou G. et al. 2006, Palmer C. 2005):

- *Redes de difracción de rejilla*: las redes de difracción de rejilla se generan al realizar hendiduras en forma de diente de sierra relativamente anchas con caras angostas. El ángulo entre el lado más ancho y la superficie del elemento se le conoce como ángulo de sierra y al cambiar su valor la región del espectro difractada cambia, aumentando la eficiencia de la red en esa región específica espectral. Dado que el diseño de diente de sierra difiere de la forma sinodal, esta presenta un desfaseamiento entre líneas lo que lleva a la generación de imágenes fantasma.
- *Redes de difracción holográficas*: a diferencia de las redes de difracción de rejilla, las redes de difracción holográficas se producen al generar un patrón de interferencia a cierta longitud de onda sobre la superficie. Dado el tipo de superficie con forma sinodal las aberraciones presentadas sobre las redes de difracción de rejilla desaparecen.
- *Redes de difracción cóncavas*: las redes de difracción cóncavas son modeladas como un espejo cóncavo con la superficie de una red de difracción con lo cual es posible la dispersión por longitud de onda y el enfoque en un punto dado simultáneamente sin la necesidad de otro elemento convergente en el monocromador o policromador. La desventaja de este tipo de red es la presencia de las diferentes aberraciones presentes en las superficies cóncavas cuando estas se encuentran fuera de foco.

La figura 2.36 muestra la diferencia en el tipo de superficie para las redes de difracción de rejilla, holográfica y cóncava. Así mismo, ilustra la diferencia en la calidad del punto focal para cada tipo de red.

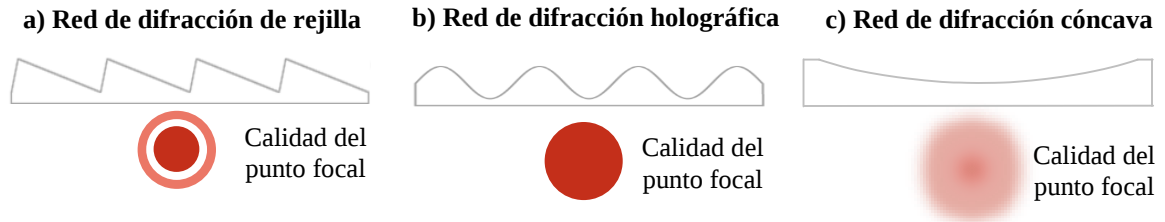


Figura 2.36. Comparación entre los tres tipos de redes de difracción más comúnmente utilizados ilustrando la diferencia en la calidad del punto.

Fuente: propia del autor.

2.6.3.2.2. Diseño de un Monocromador y un Policromador

Los arreglos más comúnmente utilizados en el diseño de un monocromador son muy parecidos entre sí, lo único que cambia es el elemento dispersor, ya sea un prisma o una red de difracción. Un monocromador está conformado por dos aperturas fijas, una de entrada y otra de salida. La entrada de radiación al sistema está dada por un elemento de enfoque el cual converge el haz hacia la apertura de entrada, mientras que la selección de la longitud de onda enfocada sobre la apertura de salida es seleccionada por el movimiento giratorio del elemento dispersor (Lucatorio T. et al. 2014).

Existen 3 arreglos típicos para un monocromador los cuales son representados en la figura 2.37:

- *Monocromador Czerny-Turner*: utiliza dos espejos cóncavos, el primero para colimar el haz de entrada hacia el elemento dispersor y el segundo para enfocar la radiación por longitud de onda sobre la apertura de salida.
- *Monocromador Ebert-Fastie*: por su parte, el monocromador Ebert-Fastie utiliza un solo espejo cóncavo de gran tamaño para colimar y enfocar el haz de radiación.
- *Monocromador Littrow*: esta configuración al igual que la configuración Ebert-Fastie, utiliza un solo espejo para colimar y enfocar la luz. La diferencia radica en que las aperturas de entrada y salida se encuentran muy cercanas entre si ya que el trayecto de entrada y salida es el mismo.

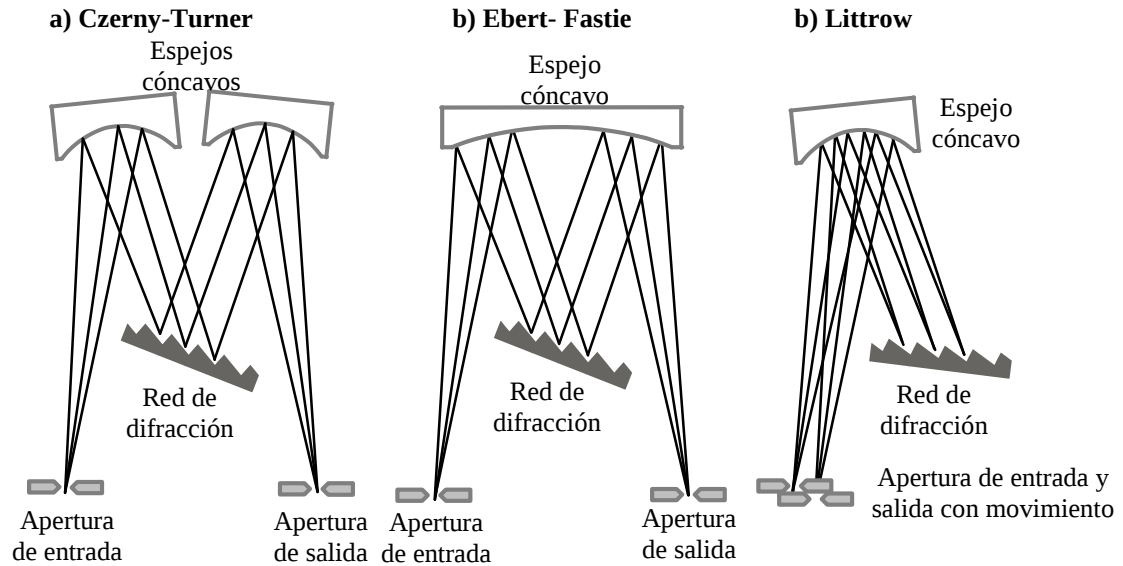
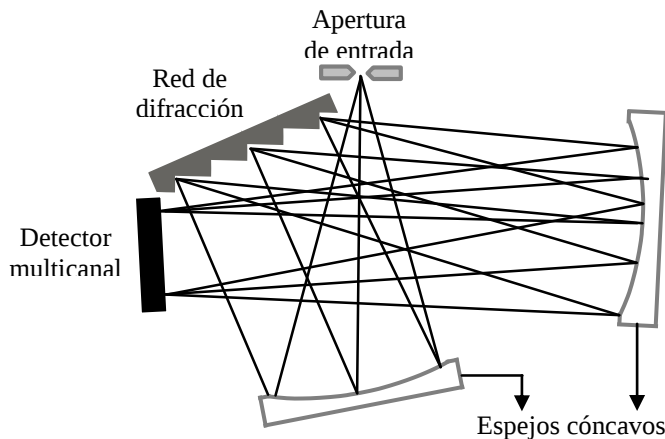


Figura 2.37. Arreglos típicos para un monocromador.

Fuente: propia del autor.

A diferencia de los monocromadores, los policromadores utilizan solo una apertura de entrada ya que las diferentes longitudes de onda dispersadas por el elemento dispersor son enfocadas simultáneamente sobre un detector multicanal, por lo cual elemento dispersor se encuentra en una posición fija. Existen dos arreglos de policromadores, ambos basados en el diseño Czerny-Turner el cual puede ser cruzado o no cruzado. Estos diseños son representados en la figura 2.38.

a) Czerny-Turner cruzado



b) Czerny-Turner no cruzado

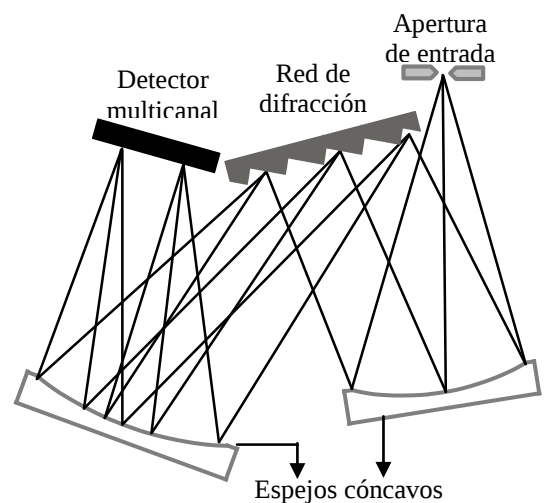


Figura 2.38. Arreglos típicos para un policromador.

Fuente: propia del autor.

2.6.3.3. Detector

El detector es uno de los componentes clave de un espectrómetro Raman, el cual es un dispositivo que, como su nombre lo dice, detecta y captura la información que compone una imagen al convertir la atenuación de las ondas de luz en señales eléctricas. Se trata de un chip formado por millones de componentes sensibles a la luz, que al ser expuestos, capturan las ondas proyectadas de un objetivo, que compone la imagen (Serway et al. 2009). Existen 3 tipos, CMOS, CCD y más recientemente los EMCCD's. Debido a su sensibilidad para efectos de detección de la dispersión Raman se utiliza la tecnología CCD o EMCCD, las cuales son descritas a continuación (Holst, Gerald et al. 2007, Dieing et al, 2010).

Un detector CCD (Charge Couple Device, por sus siglas en inglés) consiste en un arreglo de fotodiodos de silicio sensitivos a la luz, cada uno conectado a un capacitor. Su estructura tiene tres funciones básicas (Holst, Gerald et al. 2007):

- 1) Generación de carga.
- 2) Colección de carga.
- 3) Transferencia de carga.
- 4) Conversión de carga a voltaje.

En un CCD, cada fotodiodo de silicio absorbe un fotón creando un par electrón-agujero que es separado por el campo eléctrico interno y los electrones son guardados en el capacitor (Janesick J. 2001).

Una de las principales características del detector es su eficiencia cuántica (QE, por sus siglas en ingles), que es el porcentaje de fotones detectados del total de los fotones dispersados por la red de difracción; determina el porcentaje de la señal que es detectada. La QE puede variar dependiendo si el detector es de iluminación frontal o retroiluminado (*figura 2.39*). Esto debido a que al incidir un haz de fotones en un detector de iluminación frontal la luz puede ser parcialmente bloqueada por las interconexiones eléctricas; mientras que al utilizar un CCD retroiluminado, la luz incide por la parte trasera del detector, el cual tiene un espesor mucho menor que un CCD de iluminación frontal (Dieing et al. 2010, Holst G. et al. 2007).



Figura 2.39. Diseño de un CCD iluminado frontalmente y posteriormente.

Fuente: propia del autor.

Igualmente importante es el ruido en la señal u otros ruidos creados por el mismo detector; la relación señal/ruido determina la calidad de la medición. Las principales fuentes de ruido para una señal ideal son (Dieing et al, 2010, Ferrero A. et al. 2003, Janesick, James R. 2001):

1. *Ruido shot*: es causado por la llegada aleatoria de fotones, el cual es un rasgo fundamental de la luz. Dado que cada fotón es un evento independiente, la llegada de cualquiera de ellos no se puede predecir con precisión; en su lugar, la probabilidad de su llegada en cierto periodo de tiempo está definido por la distribución de Poisson, y tiene una relación de raíz cuadrada entre la señal y el ruido. Con una muestra lo suficientemente grande, se puede llegar a una gráfica en forma de campana que describa la llegada de estos. Este ruido es más aparente cuando se colecta una cantidad relativamente pequeña de fotones, pudiendo ser reducido al colectar una mayor cantidad de fotones acercándose a una distribución normal con exposiciones más largas o mediante la combinación de múltiples cuadros. Tanto los fotoelectrones como los electrones generados térmicamente (señal oscura, la cual solo es apreciada cuando el tiempo de integración es largo debido a que a largos tiempos de integración la capacidad de carga de cada pixel individual puede ser saturada) contribuyen a este ruido (22).

$$\sigma_s = \sqrt{\text{señal } e^-} \quad (22)$$

2. *Ruido térmico*: es creado por cargas excitadas térmicamente en el detector y puede ser reducido al enfriar el detector. Tal como el ruido shot, el ruido térmico exhibe una distribución de Poisson, el cual es la raíz cuadrada del número de electrones

generados térmicamente generados en un dado tiempo de integración (23). Este tipo de ruido puede no tomarse en cuenta a tiempos de integración de pocos minutos mientras el CCD se mantenga a -60°C .

$$\sigma_T = \sqrt{\#de\ electrones\ creados\ termicamente \cdot t\ de\ integración} \quad (23)$$

3. *Ruido de lectura*: es el ruido creado por el amplificador de salida durante el proceso de amplificación y digitalización. Este depende de la calidad del amplificador y su velocidad de lectura (se expresa en electrones). Para poder reducir el tiempo de integración, es necesario utilizar un amplificador de alta frecuencia de lectura (kHz-MHz).

Al tener un amplificador con alta velocidad de lectura y tiempos de integración cortos con lo cual se puede no tomar en cuenta el ruido térmico, se dice que el ruido de lectura comienza a dominar todas las demás fuentes de ruido y la señal no es más limitada por el ruido shot.

La relación señal ruido, la cual determina la calidad de la medición, es calculada con la siguiente fórmula (24).

$$\frac{S}{N} = \frac{\text{señal}}{\sqrt{\text{señal} + \sigma_R^2 + \sigma_T^2}} \quad (24)$$

Donde σ_R es el ruido de lectura y σ_T es el ruido termal. Al disminuir el tiempo de integración la detección de electrones/pixel disminuye, lo que significa una señal de bajo de nivel. Debido a esto es recomendable que la limitación que domine la selección del detector sea el ruido shot, ya que así, es posible elegir el detector "ideal" con un tiempo de integración favorable para una alta detección de electrones/pixel y una buena relación señal ruido basándonos en la capacidad de saturación del detector (Dieing et al. 2010).

Por su parte, el EMCC (Electron Multiplying CCD) está diseñado para niveles de luz muy bajos con el cual el espectro de la imagen puede ser mantenido limitando al ruido shot, incluso la tecnología de un EMCCD, es capaz de detectar un solo fotón manteniendo una alta QE, sin ser limitado por el ruido de lectura aun trabajando a altas velocidades de lectura ya su diseño difiere en el agregado de un registro multiplicador de electrones al final del registro serial de un CCD, lo cual permite que una señal débil pueda ser multiplicada antes de que esta señal pase hacia el amplificador de salida, pudiendo así despreocuparse el ruido de lectura

(Dieing T. et al. 2010, Holst G. et al. 2007). La *figura 2.40* muestra el diagrama estructural para un CCD y un EMCC.

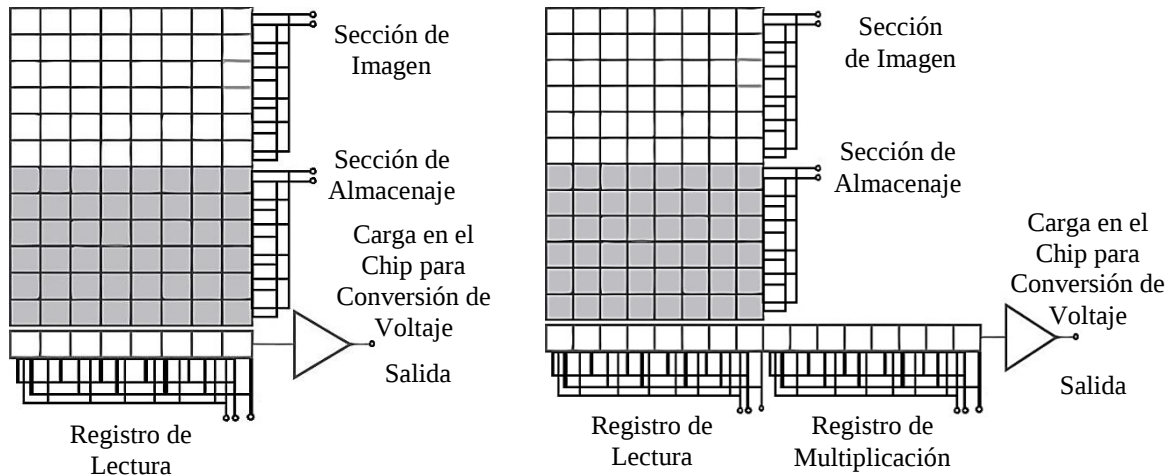


Figura 2.40. Diagrama estructural de a) CCD y b) EMCCD.

Fuente: propia del autor.

2.6.3.4. Arreglo Óptico

El arreglo óptico está conformado por elementos ópticos que se utilizan para coleccionar y dirigir la luz hacia la entrada del espectrómetro eliminando la dispersión elástica y dejando entrar al espectrómetro solo la dispersión inelástica.

El arreglo más sencillo está constituido por una lente colectora que colecciona la luz dispersada por la muestra, un divisor de haz que redirige la luz a la entrada del espectrómetro y anterior a la entrada, un filtro óptico encargado de eliminar la dispersión Rayleigh.

Estos elementos tienen características de reflexión, absorción y transmisión de la luz que varían dependiendo el tipo de vidrio del que están hechos y de si sus caras están recubiertas o no por películas delgadas. Dependiendo el arreglo de los recubrimientos sobre los vidrios es posible lograr características muy específicas sobre regiones espectrales de bandas muy estrechas o muy amplias dependiendo la aplicación que se le desee dar al elemento óptico.

2.6.3.4.1. Lentes

Una lente es un elemento óptico refractivo simple que colecta luz y reconfigura la distribución de la luz transmitida a través de él. Según el tipo de sustrato con el que estén fabricados, pueden transmitir espectros desde el UV hasta el infrarrojo. Su porcentaje de transmisión y reflexión por longitud de onda está controlado por el recubrimiento del elemento por películas delgadas. A las lentes formadas por 2 o más elementos se les conoce como lentes compuestas.

Las lentes se clasifican en dos categorías según el tipo de curvatura que presentan en ambas superficies.

- *Lentes esféricas*: una lente esférica es aquella que su superficie presenta la forma o parte de la forma de una esfera. Estas superficies pueden ser convexas o positivas (curvatura exterior), cóncavas o negativas (curvatura interior), o planas.
- *Lentes asféricas*: por su parte las superficies de una lente asférica difieren de la forma esférica y su diseño está representado por la ecuación (25).

$$z = f(x, y) = \frac{\zeta s^2}{[1 + \sqrt{1 - (1 + k)\zeta^2 s^2}]} + A_4 s^4 + A_6 s^6 + \dots + A_n s^n \quad (25)$$

Donde:

- z , es la distancia entre la superficie y la curvatura paralela al eje óptico.
- s , es la distancia radial desde el eje óptico.
- ζ , es la curvatura, la cual se define como el inverso del radio de la lente.
- k , es la constante cónica.
- $A_4, A_6, \dots, A_n$, son el 4to, 6to y n orden de los coeficientes asféricos.

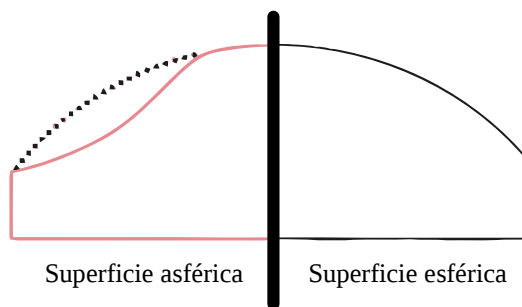


Figura 2.41. Comparación entre la forma de la superficie de una lente asférica y una lente esférica.

Fuente: propia del autor.

Las lentes asféricas son utilizadas en aplicaciones de precisión ya que gracias a su forma no esférica, eliminan las aberraciones que comúnmente afectan a las lentes esféricas. Generalmente son utilizadas como lentes colimadoras o lentes convergentes.

Las diferentes combinaciones entre el tipo de superficie generan 3 tipos de haces: haces colimados, haces divergentes y haces convergentes. Un haz colimado es aquel cuyos componentes viajan paralelos entre sí. Un haz divergente es aquel que al atravesar una lente, sus componentes se propagan en direcciones diferentes. Por último, un haz convergente es aquel que al atravesar una lente, se propagan en dirección hacia un mismo punto. La figura 2.42 presenta las diferentes combinaciones de superficies esféricas, y el efecto que se genera al pasar un haz de luz a través del elemento.

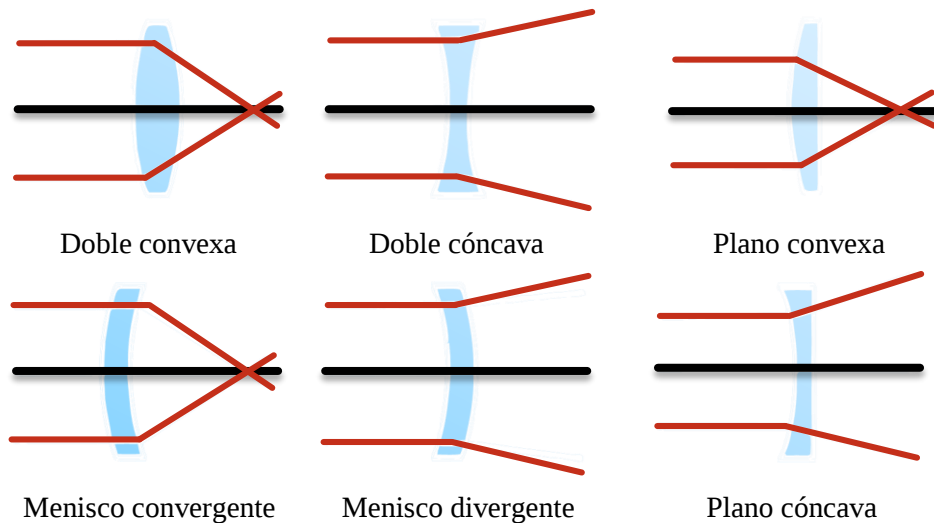


Figura 2.42. Tipos de lentes.

Fuente: propia del autor.

La capacidad de una lente para captar los rayos provenientes de un punto en el espacio está determinada por la apertura numérica (Numerical Aperture, por sus siglas en inglés), la cual guarda una relación directamente proporcional con el aumento propio de la lente y el índice de refracción de la interface entre el objeto y la lente (Figura 2.43). Se calcula empleando la fórmula (26) (Montalvo C. 2009):

$$N.A. = n * \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \quad (26)$$

Donde:

- n es el índice de refracción de la interface.
- α es la apertura angular.

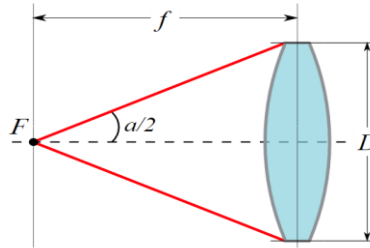


Figura 2.43. Factores que afectan la apertura angular.

Fuente: Wikipedia.

La apertura angular es la capacidad de la lente de captar los rayos luminosos refractados cuando estos atraviesan un medio transparente. Cuanto mayor sea este ángulo, la lente aceptará una mayor cantidad de ellos y se calcula empleando la fórmula (27).

$$\frac{\alpha}{2} = \arctan \frac{D}{2f} \quad (27)$$

Donde:

- f es la distancia focal.
- D es la apertura de la lente vista desde el punto focal.

Para obtener la mayor eficiencia en la colección de la señal en combinación con el mejor poder de resolución, se recomienda utilizar una lente con la mayor apertura numérica posible según las condiciones de medición (figura 2.44).

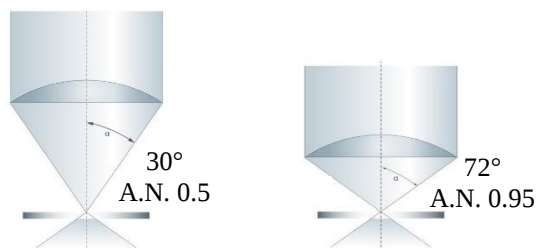


Figura 2.44. Capacidad angular de un objetivo para recolectar luz. En la figura se observa que para ángulos de apertura pequeños la distancia de trabajo es mayor que para ángulos de mayor apertura.

Fuente: propia del autor.

2.6.3.4.2. Filtros Ópticos

Dentro de la espectroscopia Raman, los filtros ópticos son una herramienta crítica para la adquisición de un espectro Raman puro sin la presencia de ruido de fondo proveniente de longitudes de onda no pertenecientes a la señal pura (erdogan T. et al. 2004). Los filtros ópticos tienen la función de reconocer una banda espectral de frecuencias eléctricas y dependiendo su principio, transmitirla o reflejarla. Estos filtros son componentes clave en los sistemas de transmisión ópticos. Su principio se basa en materias de interferencia, difracción y/o absorción y pueden ser fijos o sintonizables (Macleod H. 2010).

Los filtros ópticos pueden ser clasificados de acuerdo al tipo de material o materiales utilizados para su manufacturación (Reichman J. 2017, Rietdorf J. et al. 2006):

- *Filtros de sustrato de color*: este tipo de filtros ópticos son fabricados con sustratos que presentan diferentes coloraciones por lo que varían su porcentaje de absorción y transmisión a lo largo de una región específica del espectro.
- *Filtros dicroicos*: son un tipo especial de filtros de interferencia que reflejan luz en cierta región espectral mientras que transmiten luz en otra cierta región espectral. Este tipo de filtros dependen meramente del ángulo de incidencia, los cuales son diseñados generalmente para un ángulo de 45°.
- *Filtros de interferencia*: los filtros de interferencia se basan en los principios de reflexión y refracción de la luz al pasar de un medio con n_1 a un medio con n_2 , por lo que al colocar una o varias capas delgadas de materiales metálicos o dieléctricos reflejaran o transmitirán luz a diferentes regiones del espectro por interferencia destructiva e interferencia constructiva.

Idealmente un filtro óptico eliminara y/o transmitirá toda la radiación por debajo o por encima de cierta longitud de onda pero en la realidad los filtros ópticos presentan una pendiente de transición hasta llegar a la longitud de onda de corte especificada para la región de transmisión o rechazo (Dobrowolsky J. A. 2010).

Hoy en día existen una gran cantidad de diferentes tipos de filtros ópticos. Independientemente de su proceso de fabricación, todos ellos eliminan, absorben y/o transmiten una porción de la luz que incide sobre ellos, y comparten parámetros ópticos comunes que se deben de tener presentes al seleccionar el filtro óptico para cierta aplicación deseada (Dobrowolsky J. A. 2010).

- *Longitud de onda central*: longitud de onda de una fuente óptica que se podría considerar su FWHM donde la transmitancia es el 50 % de la transmisión mínima especificada.
- *Ancho de banda*: rango de longitudes de onda usado para denotar una parte específica del espectro que puede ser transmitida a través de un filtro. También referido como FWHM.
- *Rango de bloqueo*: siendo lo contrario al ancho de banda, es un rango de longitudes de onda que denotan una región espectral que es atenuada por el filtro. El grado de bloqueo es especificado en términos de densidad óptica.
- *Densidad óptica*: describe las especificaciones de bloqueo de un filtro y se relaciona a la cantidad de energía transmitida a través de él. Un valor alto de densidad óptica se refiere a un valor bajo de transmisión, mientras que un valor bajo indica una alta transmisión.
- *Angulo de incidencia*: es el ángulo entre el eje óptico de la luz incidente y el eje normal a la superficie del filtro. La mayoría de los filtros están diseñados para ser utilizados a un ángulo de incidencia sobre la normal de la superficie del filtro. Generalmente solo los filtros con que estén diseñados a partir de películas delgadas son angularmente sensitivas, lo que significa que las características de su funcionamiento cambian con el ángulo de incidencia.

Existe una gran variedad de diferentes tipos de filtros, por lo cual en veces es difícil distinguir entre sus similitudes y diferencias. Estos son clasificados de la siguiente manera (Dobrowolsky J. A. 2010, Macleod H. 2010):

- *Filtros de corte*: los filtros de corte están diseñados para bloquear todas las longitudes de onda que se encuentren por encima (paso-largo) o por debajo (paso-corto) de cierta longitud de onda de corte. Existen diferentes filtros ópticos de este tipo específicos:
 - *Espejos fríos y los espejos calientes*: son un tipo de filtro dieléctrico diseñados para reflejar en el rango del espectro visible y transmitir en el rango del espectro infrarrojo y viceversa respectivamente.
 - *Filtros absorbentes de calor*: estos filtros están diseñados para absorber radiación infrarroja y transmitir radiación visible en los cuales la radiación infrarroja es disipada en forma de calor.
 - *Filtros Edge*: son filtros paso-largo o paso-corto que presentan una pendiente muy aguda en la frecuencia de corte.

- *Filtros pasa-banda*: la función de los filtros pasa-banda es la transmisión de toda la radiación que se encuentra dentro de una región espectral específica y su rendimiento se define por su longitud de onda central y su ancho de banda a FWHM.
- *Ancho de banda amplio*: los filtros paso banda con un ancho de banda amplio son utilizados para eliminar ruido de fondo.
 - *Ancho de banda angostos*: por su parte los anchos de banda angostos son ideales para reducir al máximo el ancho de banda en un láser creado por emisión espontanea.
- *Filtro Notch*: contrario al filtro pasa-banda, los filtros Notch están diseñados para bloquear un cierto ancho de banda deseado mientras que transmite todas las demás longitudes de onda del espectro.
- *Filtros de densidad neutral*: estos filtros se utilizan cuando lo que se busca es reducir la intensidad de la radiación incidente uniformemente en un rango amplio del espectro. Existen dos tipos:
- *Absorbente*: absorbe la luz que no se transmite a través del filtro.
 - *Reflejante*: refleja la luz de nuevo hacia la dirección desde la cual incidió.

Para los sistemas de espectroscopia Raman se utilizan dos tipos de filtro básicos (Rietdorf J. et al. 2006, erdogan T. et al. 2004):

- *filtro de transmisión*: del tipo filtro pasa-banda de línea laser diseñado para la longitud de onda de excitación colocado entre el láser y la muestra para eliminar las longitudes de onda creadas por emisión espontanea en un láser.
- *Filtro de bloqueo*: el cual puede ser del tipo Edge o Notch colocado entre la muestra y el detector para eliminar la longitud de onda de la línea laser la cual equivale al 99 % de la luz dispersada por la muestra.

La selección del filtro depende de las características de desempeño del sistema, un filtro Notch proporcionara la observación de ambas bandas Raman (Stokes y anti-Stokes) mientras que, en filtro Edge solo permite la observación de una sola banda dependiendo si es paso-largo o paso-corto aunque con un mejor desempeño debido a la pendiente aguda presente a la frecuencia de corte. La *figura 2.45* presenta los gráficos de transmisión y bloqueo para los filtros de línea laser, Edge y Notch.

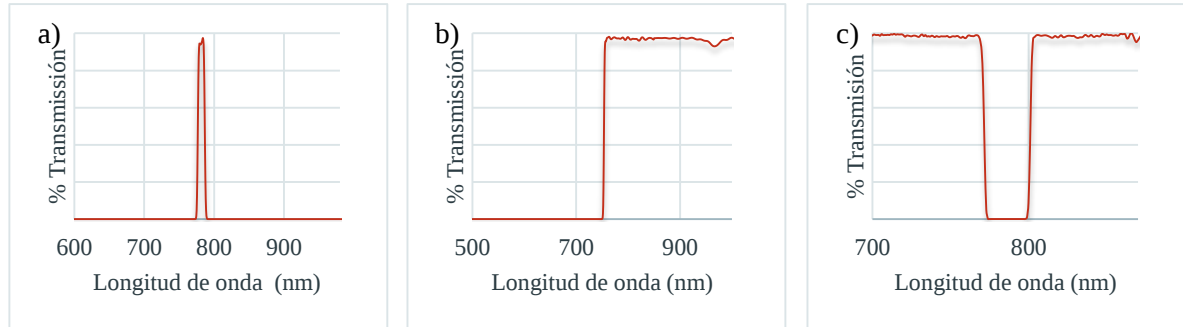


Figura 2.45. Gráficos de transmisión y bloqueo para los filtros a) línea laser, b) Edge y c) Notch.

Fuente: propia del autor.

2.6.3.4.3. Divisores de Haz

Los divisores de haz son un tipo de filtro óptico dicróico que dividen a la luz incidente por longitud de onda. Todos son fabricados con un revestimiento óptico parcialmente reflector, parcialmente transmisor a cierta región espectral, pero dadas las diferencias en construcción, difieren en el manejo de potencia o polarización. Para obtener el mejor rendimiento espectral y frente de onda transmitido, deben ser incididos con luz colimada, ya que los rayos convergentes o divergentes contribuyen a la presencia de aberraciones. Existen muchas formas físicas diferentes para diferentes tipos de aplicación pero los más comúnmente utilizados en aplicaciones espectroscópicas se presentan en dos formas básicas:

→ *Divisores de haz cubico*: consisten en dos prismas de ángulo recto (45° – 90° – 45°) unidos generalmente por un material epóxico que cambian la dirección de propagación de la luz al doblar el eje óptico a un ángulo de 45° sobre una superficie recubierta parcialmente reflectora, parcialmente transmisora. Dada su forma cubica, la incidencia del haz se realiza en dirección al eje óptico de la primera superficie por lo que no existen un desplazamiento en el haz de salida con respecto al haz de entrada (figura 2.46). Los revestimientos antirreflectantes en las caras de entrada y salida del cubo minimizan las pérdidas, son fáciles de montar y duraderas mecánicamente, aunque la presencia de la interfaz (prisma-epóxico-prisma) puede limitar el manejo de potencia según el material utilizado para la unión.

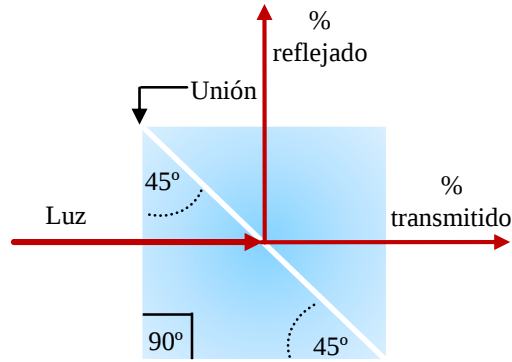


Figura 2.46. Diagrama representativo de un divisor de haz cubico.
Fuente: propia del autor.

→ *Divisores de haz de placa*: consisten en un sustrato plano delgado diseñados para un ángulo de incidencia de 45° . Generalmente la superficie de la primera cara está revestida con una película completamente dieléctrica que tiene propiedades de reflexión parcial sobre el espectro visible o el infrarrojo cercano. El beneficio de este tipo de revestimiento es que tiene baja absorción, típicamente 0.5 por ciento para un divisor 50R/50T a 45° . Debido a su diseño, una pequeña porción de la luz se refleja de nuevo sobre la segunda cara a lo largo del trayecto del haz reflejado, creando un haz fantasma con un desplazamiento (d) de aproximadamente 0.3 veces el grosor del sustrato como se observa en la figura 2.47. Un revestimiento anti-reflejante optimizado para 45° en la superficie trasera del sustrato minimiza este efecto, y también maximiza la transmisión del divisor de haz. Este desplazamiento puede ser aproximado de la forma (28).

$$d \approx 0.329 \cdot T \quad (28)$$

O calculado de la forma (29).

$$d = T \sin(\theta) \left[1 - \left(\frac{\cos(\theta)}{\sqrt{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 - \sin^2(\theta)}} \right) \right] \quad (29)$$

Donde:

- T , es el grosor de la placa en milímetros (mm).
- θ , es el ángulo de incidencia del haz de luz con respecto a la normal de la superficie.

- n_1 y n_2 son los índices de refracción para el medio de entrada y el sustrato en ese orden.

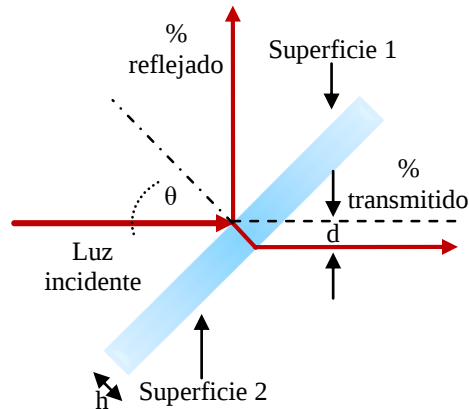


Figura 2.47. Diagrama de un divisor de haz de placa.

Fuente: propia del autor.

2.7. Colectores

La radiación dispersada por la muestra (Raman y Rayleigh), generada al incidir un haz de luz láser sobre una muestra, viaja en todas direcciones arbitrariamente. Debido a esto, la colección de radiación dispersada está limitada a la capacidad de colección de luz del elemento colector. Debido a que la radiación Raman equivale aproximadamente al 0.001 % de toda la radiación dispersada, los reflectores son una opción a analizar para lograr la mayor colección de luz posible por el elemento colector, ya que su diseño permite redirigir la luz dispersada que viaja fuera de la apertura del elemento colector, para que todos o la mayoría de los rayos, cambien su dirección arbitraria hacia una con dirección hacia la apertura.

Al igual que las lentes, los reflectores se clasifican en: esféricos y asféricos. Un reflector esférico, al igual que las lentes esféricas, su forma parte de la de una esfera o parte de ella. Debido a esto, tienden a la presencia de aberraciones, si la luz que índice sobre ellos viaja fuera de la región paraxial y/o en una dirección no paralela al eje óptico. Por otra parte, los reflectores asféricos están diseñados por rotación de las diferentes secciones planas de un cono, las cuales se obtienen al cortar una sección a un ángulo particular, y se les conoce como secciones cónicas (B. Meserve 1983, W. Smith 2008,). Existen 5 tipos de secciones cónicas: parábola, hipérbola, elipse prolata, elipse oblata y círculo, todas representadas en la *figura 2.48*.

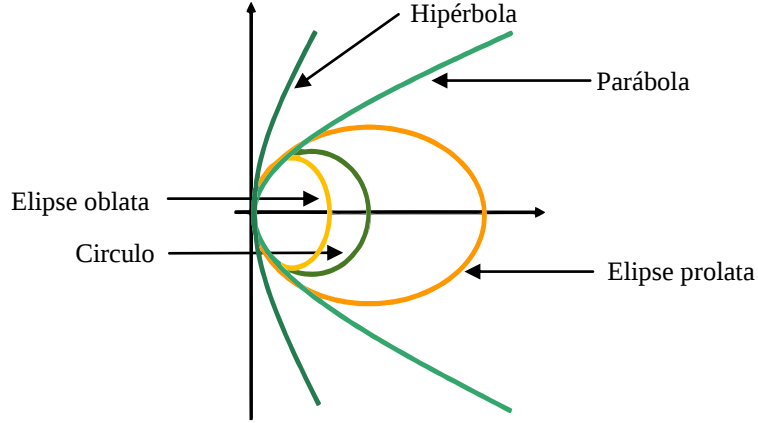


Figura 2.48. Tipos de secciones cónicas.

Fuente: propia del autor.

La ecuación general para una sección cónica que rota sobre el eje z es (30).

$$z(p) = \frac{r}{\varepsilon} \left(1 - \sqrt{1 - \varepsilon \zeta^2 \rho^2} \right) = \frac{\zeta \rho^2}{1 + \sqrt{1 - \varepsilon \zeta^2 \rho^2}} \quad (30)$$

Donde:

- ζ , es la curvatura y se define como el recíproco del radio de curvatura, $\zeta = 1/R$.
- ε , es la excentricidad y se define como la distancia entre el centro y el punto focal.
- ρ , es el semi-latus rectum, donde el latus rectum se define como la línea que pasa a través del foco, es perpendicular a la directriz y tiene ambos puntos finales en la curva.

Todas las superficies cónicas en el diseño óptico son definidas por la constante cónica kappa (k), la cual se relaciona con las constantes ρ y ε de la manera (31).

$$k = (\rho - 1) = -\varepsilon^2 \quad (31)$$

Sustituyendo k en (30) tenemos (32).

$$z = \frac{\zeta H^2}{1 + \sqrt{1 - (1 + k)\zeta^2 H^2}} \quad (32)$$

Donde:

- H , es la altura radial de la superficie.

La *tabla 2.4* presenta el valor de las constantes k , ρ y ε para cada sección cónica.

Tabla 2.4. Constantes k , ρ y ε para cada sección cónica.

Sección cónica	k	ρ	ε
Elipse oblata	$k > 0$	$\rho > 1$	$\varepsilon^2 < 0$
Círculo	$k = 0$	$\rho = 1$	$\varepsilon = 0$
Elipse prolata	$0 > k > -1$	$1 > \rho > 0$	$0 < \varepsilon^2 < 1$
Parábola	$k = -1$	$\rho = 0$	$\varepsilon = 1$
Hipérbola	$k < -1$	$\rho < 0$	$\varepsilon^2 > 1$

Fuente: Smith W. 2008.

2.7.1. Trazo de Rayos Para Cada Sección Cónica

Debido a su diseño, los reflectores asféricos permiten la redirección de toda la luz proveniente de una fuente puntual que dispersa luz en todas direcciones, cuando esta es colocada en las coordenadas del punto focal del reflector. El trazo de rayos difiere para cada sección cónica.

Si un rayo de luz proveniente del foco de alguna de las secciones cónicas, choca con la superficie de esta a un ángulo θ_i , trazamos una línea tangencial sobre el punto de incidencia del rayo en la superficie y sobre la línea tangencial, una línea normal, por ley de reflexión, el rayo que choco sobre la superficie cónica, se reflejara a un ángulo θ'_i . En la *figura 2.49* se muestra el trazo de rayos para cada sección cónica.

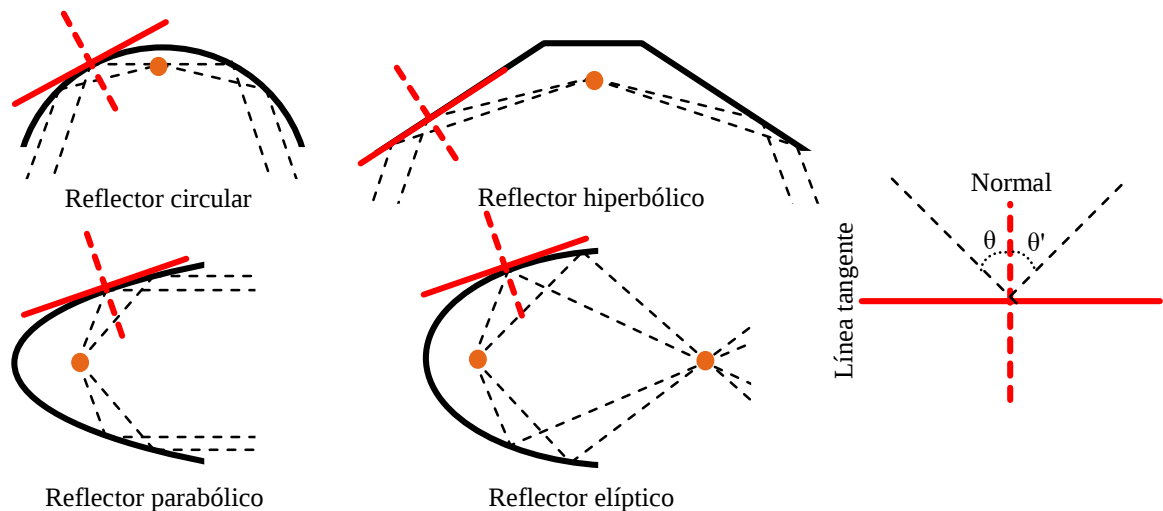


Figura 2.49. Trazo de rayos para las diferentes secciones cónicas.

Fuente: propia del autor.

Por su trazo de rayos, los reflectores circulares e hiperbólicos son utilizados comúnmente para aplicaciones de iluminación, ya que permiten la dispersión de todos los rayos provenientes de una fuente de luz sobre cierta área de incidencia. Mientras que los reflectores parabólicos y elípticos son utilizados para aplicaciones en las que se busca la colección de la luz. Los reflectores parabólicos permiten la colección de todos los rayos colimados provenientes de una fuente hacia un punto focal o de forma contraria, permiten que todos los rayos provenientes de una fuente colocada en el punto focal del reflector sean colimados para que incidan sobre un área específica. Por último, los reflectores parabólicos tienen la propiedad de que al situar una fuente de luz en su punto focal, todos los rayos dispersados por esa fuente son dirigidos hacia el foco conjugado.

2.7.2. Diseño de un Reflector Parabólico y un Reflector Elíptico

Debido a la necesidad de colección de luz del sistema Raman y las características colectoras de los reflectores parabólicos y elípticos, solo se analizara el diseño para ambos tipos de reflectores.

Para definir a una elipse, además de los parámetros definidos con anterioridad, se necesitan también los siguientes:

- Excentricidad lineal (c): es la distancia entre el centro y cualquiera de sus dos focos.
- Eje mayor (a): es la distancia entre el centro y un punto sobre la superficie con respecto al eje y .
- Eje menor (b): es la distancia entre el centro y un punto sobre la superficie con respecto al eje x .

La *figura 2.50* presenta los parámetros para la definición de las secciones cónicas, elipse y parábola.

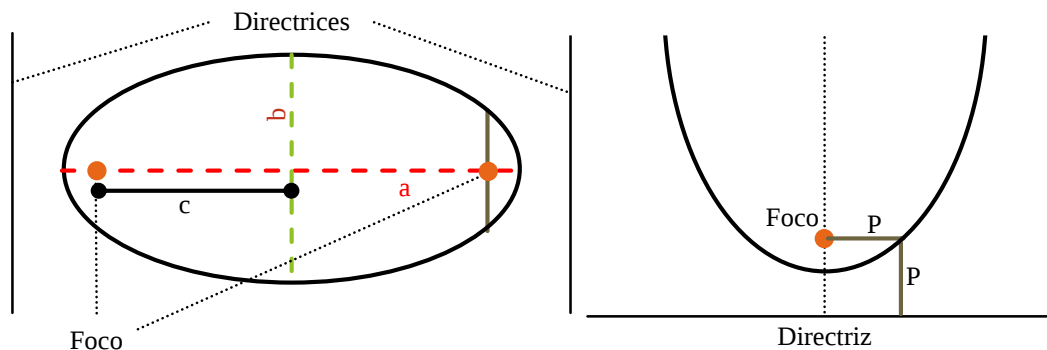


Figura 2.50. Parámetros para la definición de la sección cónica a) elipse y b) parábola.

Fuente: propia del autor.

Al introducir coordenadas cartesianas se tiene que la ecuación para definir a una elipse y una parábola con un foco en las coordenadas (0,0) son para la elipse (33).

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (33)$$

Y para la parábola (34).

$$y = \frac{x^2}{4f} \quad (34)$$

La excentricidad, definida como la relación entre la distancia entre un foco y un punto en la figura y la distancia entre el punto y la directriz. Para la elipse se define como la relación entre la semi-distancia focal (c) y la semi-distancia mayor (a) y está dada por (35).

$$\varepsilon = \frac{c}{a} \quad (35)$$

Para la parábola, dado que todas las parábolas tienen la misma forma y solo cambia su escala la excentricidad está dada por (36):

$$\varepsilon = 1 \quad (36)$$

La mitad del latus rectum se conoce como semi-latus rectum, el cual puede ser visto como el radio de curvatura. Para una elipse con dos focos está dado por (37).

$$\rho = R_c = \pm \frac{b^2}{a} \quad (37)$$

Y para una parábola con un foco (38).

$$\rho = R_c = 2f \quad (38)$$

Capítulo III

Arreglos Ópticos y Simulaciones

3.1. Introducción

Partiendo de la teoría desarrollada en el capítulo II de marco de referencia, podemos deducir que un espectro Raman genera una señal dentro del espectro visible cuya magnitud es menor al 1%. Su generación, colección y detección es posible al seleccionar la técnica de conveniencia y los elementos ópticos precisos. La selección de la técnica y de los elementos, depende en su mayoría de las características físicas y químicas de la muestra bajo análisis (si es que se conocen).

Los elementos ópticos, son los encargados de dirigir la luz láser de excitación hacia la muestra y coleccionar y dirigir la luz dispersada por esta misma hacia la entrada del espectrómetro para su medición. Los elementos ópticos seleccionados para el desarrollo de esta investigación, fueron escogidos de diferentes proveedores, basando su selección en la longitud de onda del láser de excitación.

La muestra que se busca analizar, es una mezcla heterogénea de material particulado cuyo diámetro varía entre 10 y $< 1 \mu\text{m}$ y su composición está conformada por componentes químicos que son clasificados como material geológico, materia orgánica, carbón elemental, nitrato de amonio, sulfato de amonio, elementos traza y sales minerales (Canales M., et al., 2014). Es importante notar que según la composición determinada por Canales M. et al. 2014, que en la muestra, uno de los elementos principales es el carbono por lo cual la fuente de excitación se seleccionó teniendo en cuenta la posibilidad de que ocurra una foto-

descomposición de la muestra. Para evitarlo, la longitud de onda del láser en los sistemas simulados se delimito a longitudes de onda cuya energía fotónica fuera menor a la del espectro visible.

El estudio del comportamiento de los componentes fue reproducido por medio de Zemax™, el cual es una plataforma de software para la asistencia en el diseño de sistemas ópticos. El programa combina visuales interactivos y funciones primarias con una gamma de algoritmos basados en la física para el análisis, la simulación y la optimización de sistemas ópticos con una interfaz de usuario sencilla que permite analizar física compleja y elementos visuales para impulsar la innovación y reducir los costos de desarrollo. Zemax™ proporciona herramientas de diseño rápido y preciso.

La plataforma Zemax™ maneja dos modos de simulación. El primero, el modo secuencial, realiza el trazado de rayos de forma secuencial sobre superficies 2D en el orden en el que están especificadas. Este modo permite la descripción de sistemas de imagen y permite el análisis de la calidad del punto focal para determinar si existe o no la presencia de aberraciones en la imagen. De igual manera el modo secuencial puede ser utilizado para analizar la resolución de la imagen y la presencia de distorsión al simular la imagen. El segundo modo de simulación es el modo no-secuencial, el cual permite la simulación de objetos en 3D a comparación del modo secuencial. En este modo no es necesario determinar la secuencia de las superficies de los elementos ópticos, si no que su posición física, se determina por coordenadas en el plano X, Y, Z. Los rayos provenientes de una fuente de cualquier tipo siguen la dirección especificada por el usuario y se reflejan o transmiten por los elementos, según sus características físicas, las cuales se definen en el editor de componentes, por lo que los rayos propagados pueden golpear cualquier parte de cualquier objeto conforme se presenten en su camino permitiendo el análisis de luz difusa, la dispersión de la luz y la iluminación en sistemas tanto de imagen como sistemas anidólicos.

Debido a la necesidad de analizar la propagación de los rayos a través del sistema, las simulaciones se realizaron en el modo no-secuencial.

En este capítulo se presenta el diseño y las simulaciones de tres sistemas: el primer sistema, es un sistema de espectrómetro Raman sin reflector, el segundo y el tercer sistema están basados en la adición de un reflector elíptico y un reflector parabólico al sistema de espectrómetro Raman sin reflector, respectivamente, para analizar y determinar cuál de los dos tipos de reflectores, logra un mayor aumento en la colección de radiación.

3.2. Sistema de Espectrómetro Raman sin Reflector

El sistema de espectrómetro Raman sin reflector está compuesto por diferentes elementos ópticos seleccionados según las necesidades del sistema para el análisis de material particulado, teniendo como base la teoría e investigaciones citadas en los capítulos II y III. Este sistema, es el más sencillo de los 3 sistemas propuestos, ya que cuenta con la menor cantidad de elementos ópticos, los cuales son descritos a continuación. El diseño del sistema de espectrómetro Raman sin reflector, se utilizó como base para los sistemas de espectrómetro Raman con reflector elíptico y sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico. La *figura 3.1* presenta el diagrama de bloques del sistema sin reflector.

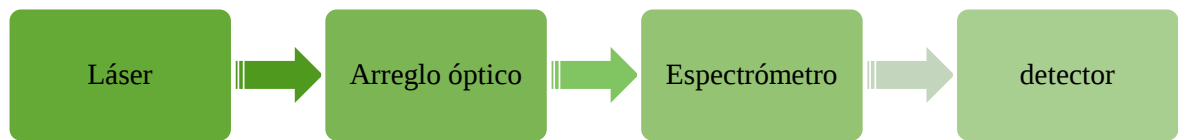


Figura 3.1. Diagrama de bloques del arreglo del sistema de espectrómetro Raman sin reflector.

Fuente: propia del autor.

3.2.1. Descripción de los Elementos

Los elementos ópticos fueron elegidos de proveedores tales como Thorlabs y Edmund Optics. A continuación, se presenta la descripción de los elementos utilizados para el arreglo del sistema de espectrómetro Raman sin reflector.

3.2.1.1. Fuente de Luz Monocromática

De acuerdo a la necesidad de una fuente de luz monocromática con una longitud de onda menor a la del espectro visible, y dado que se espera la presencia de muestras con un alto índice de carbono, se seleccionó el Láser de diodos L785P090 de la compañía Thorlabs de 785 ± 10 nm con una potencia de salida de 90 ± 10 miliWatts, el cual, dadas las características de un láser semiconductor, el haz de salida presenta una divergencia paralela de 9 ± 1 grados, una divergencia perpendicular de 16 ± 3 grados, un astigmatismo máximo de $15\text{ }\mu\text{m}$ y una precisión del punto de emisión de -80 a $80\text{ }\mu\text{m}$.

Para corregir la divergencia y formar un haz colimado, se seleccionó el sistema de colimación LTN330-B para este tipo de láseres de la misma compañía. El sistema de colimación, como se observa en la *figura 3.2*, consta de dos elementos principales: el primero es un socket ajustable con una tapa giratoria con un anillo de bloqueo con una rotación de 5 grados que permite ajustar el diámetro del haz desde $33\text{ }\mu\text{m}$ hasta $198\text{ }\mu\text{m}$. El segundo y más importante, es una lente asférica diseñada a una longitud de onda central de 830 nm. El

material utilizado para su fabricación es el sustrato D-ZK3, el cual presenta un porcentaje de transmisión interna mayor al 99 %, en una banda ancha de 600 a 1,100 nm. Ambas superficies de la lente están recubiertas con un revestimiento anti-reflejante del tipo B (clasificación de revestimientos anti-reflejantes de la compañía Thorlabs) con una reflectividad menor al 0.5 %, a una banda ancha de trabajo de 650 a 1050 nm y a un ángulo de incidencia de 0 grados. La lente presenta un diámetro de 6.33 ± 0.015 mm y una anchura de superficie a superficie de 3.21 mm, una apertura numérica de 0.7 y una distancia focal de $3.1 \text{ mm} \pm 1 \%$. La *tabla 3.1* presenta los coeficientes esféricos de la lente.

Tabla 3.1. Coeficientes esféricos de la lente LTN330-B.

	R	k	A2	A4	A6	A8	A10
S1	2.725	-0.542	0.000E+0	-2.077E-5	-1.373E-4	2.029E-5	-2.961E-6
S2	-2.979	-12.102	0.000E+0	-8.068E-3	-1.725E-3	1.839E-4	-8.936E-6

Fuente: hoja de datos LTN330-B, Thorlabs.

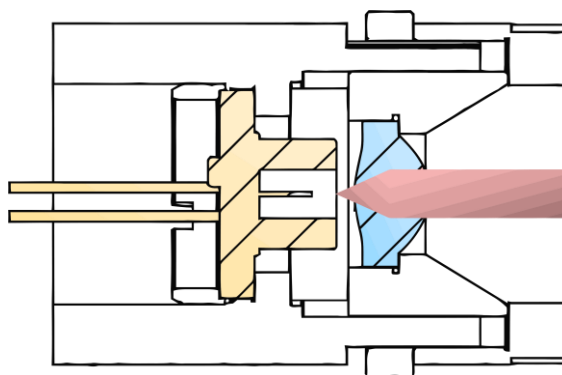


Figura 3.2. Coeficientes esféricos de la lente LTN330-B.

Fuente: propia del autor.

3.2.1.2. Arreglo Óptico

El arreglo óptico definido en el capítulo II, consta de 4 elementos principales: una lente colectora para coleccionar la radiación Raman y Rayleigh dispersada por la muestra, un divisor de haz para re-dirigir los rayos coleccionados hacia la entrada del espectrómetro, un filtro óptico para eliminar la radiación Rayleigh y por último, una lente de enfoque para llevar la radiación Raman coleccionada hacia la entrada del espectrómetro. Los elementos seleccionados se describen a continuación.

A. Lente Colectora y Lente de Enfoque

Como lente colectora y lente de enfoque para los sistemas propuestos, se seleccionaron lentes asféricas, ya que según sus características, pueden corregir la aberración esférica y permiten obtener una mejor colimación o divergencia del haz, según sea su aplicación.

Para la colección de radiación Raman y Rayleigh dispersada por la muestra se seleccionó la lente asférica de vidrio moldeado 355230-B de la compañía Thorlabs, diseñada a una longitud de onda central de 780 nm, con una apertura numérica de 0.55 y una distancia focal efectiva de 4.51 mm (*figura 3.3*). El material utilizado para su fabricación, es el sustrato D-ZLaF52LA, el cual presenta un porcentaje de transmisión interna mayor al 99 % desde 600 a 2,000 nm. Ambas superficies de la lente, están recubiertas con un revestimiento tipo B. La lente presenta un diámetro de 6.3 ± 0.015 mm, con una apertura clara de 5.07 mm y un grosor de 2.7 ± 0.04 mm. La *tabla 3.2* presenta los coeficientes asféricos de la lente.

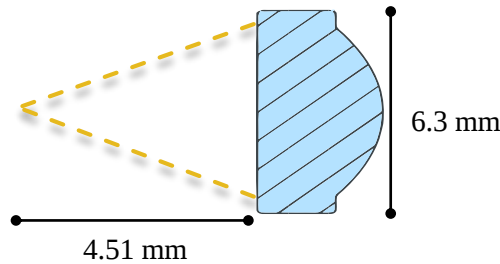


Figura 3.3. Lente colectora 355230-B.

Fuente: propia del autor.

Tabla 3.1. Coeficientes asféricos de la lente 355230-B.

	R	k	A2	A4	A6	A8	A10
S1	PLANO	0.00E+0	0.000E+0	0.000E+0	0.000E+0	0.000E+0	0.000E+0
S2	3.576	-0.924	0.000E+0	9.254E-4	8.343E-8	-5.247E-7	-2.600E-8

Fuente: hoja de datos 355230-B, Thorlabs.

Para enfocar la radiación Raman proveniente del filtro óptico hacia la entrada del espectrómetro, se seleccionó la lente asférica de vidrio moldeado 83-544 de la compañía Edmund Optics, diseñada a una longitud de onda central de 670 nm, con una apertura numérica de 0.13 y una distancia focal efectiva de 22 mm (*figura 3.4*). El material utilizado para su fabricación es el sustrato D-ZK3. Ambas superficies de la lente están recubiertas con un revestimiento anti-reflejante, el cual presenta una reflectividad absoluta menor al 1 %, a una banda ancha de trabajo de 600 a 1050 nm y a un ángulo de incidencia de 0 grados. La lente presenta un diámetro de 6.33 ± 0.015 mm, con una apertura clara de 5.50 mm y un

grosor de superficie a superficie de 2.66 ± 0.05 mm. La *tabla 3.3* presenta los coeficientes esféricos de la lente.

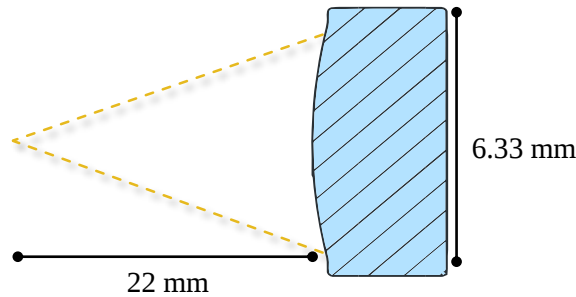


Figura 3.4. Lente de enfoque 83-544.

Fuente: propia del autor.

Tabla 3.3. Coeficientes esféricos de la lente 83-544.

	R	k	A2	A4	A6	A8	A10
S1	PLANO	0.00E+0	0.000E+0	0.000E+0	0.000E+0	0.000E+0	0.000E+0
S2	3.576	-0.924	0.000E+0	9.254E-4	8.343E-8	-5.247E-7	-2.600E-8

Fuente: hoja de datos 83-544, Edmund Optics.

B. Divisor de Haz

Para dirigir el haz dispersado por la muestra hacia la entrada del espectrómetro, se analizó el desempeño del sistema con un divisor de haz de placa y un divisor de haz cubico para determinar cuál presentaba un mejor desempeño.

El divisor de haz de placa 47-025 de la compañía Edmund Optics, presenta una banda ancha de 700 a 1,100 nm, a un ángulo de incidencia de 45 grados. El material utilizado para su fabricación es el sustrato N-BK7, el cual presenta un porcentaje de transmisión interna mayor al 99% a una banda ancha de 500 a 1,500 nm. Ambas superficies están recubiertas, cada una con un revestimiento con diferentes características. La superficie S1, está recubierta con un revestimiento 50 % transmisor - 50 % reflector (50T/50R) ± 10 %. La superficie S2, está recubierta con un revestimiento anti-reflejante con una reflectancia absoluta $\leq$ al 2 %. El divisor de haz tiene un tamaño de $12.5 \times 17.5 \times 3 \pm 0.25$ mm y una apertura clara mayor al 85 %. La *figura 3.5* muestra la gráfica de porcentaje de transmisión, mientras que la *figura 3.6* muestra el diagrama para el divisor de haz de placa 47-025.

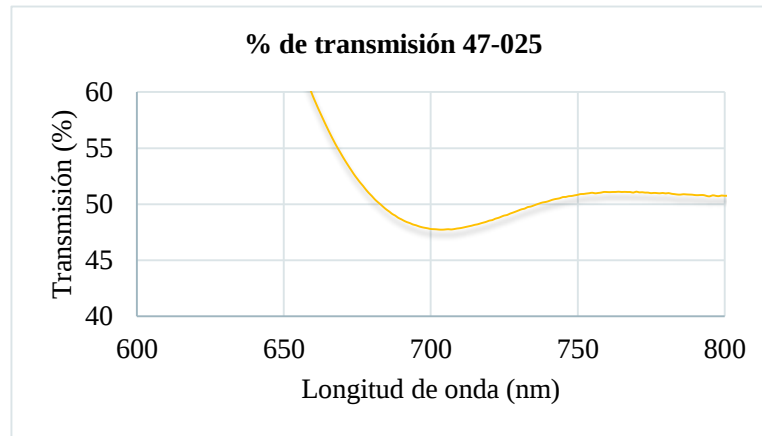


Figura 3.5. Ventana de transmisión del divisor de haz de placa 47-025.

Fuente: propia del autor.

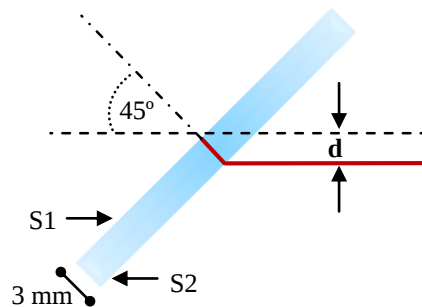


Figura 3.6. Divisor de haz de placa 47-025.

Fuente: propia del autor.

El divisor de haz cubico BS011 de la compañía Thorlabs, presenta una banda ancha de 700 a 1,100 nm, a un ángulo de incidencia de 0 grados. El material utilizado para su fabricación es el sustrato N-BK7. Las superficies S1, S2, S3 y S4 están recubiertas con un revestimiento anti-reflejante de 700 a 1,100 nm, con una reflectancia promedio menor al 0.5 %. Mientras que la superficie S5, está recubierta con un revestimiento dieléctrico y un adhesivo óptico, con un desempeño general de transmisión de 47 ± 10 % y de reflexión de 47 ± 10 %, con una desviación del haz transmitido y reflejado de ± 5 arcmin. El divisor de haz cubico, tiene un tamaño de $10 \times 10 \times 10 \pm 0.2$ mm y una apertura clara mayor al 80 % de la superficie de entrada S2. La figura 3.7 presenta el diagrama de transmisión y reflexión, mientras que la figura 3.8 muestra la gráfica de % de transmisión para el divisor de haz cubico BS011.

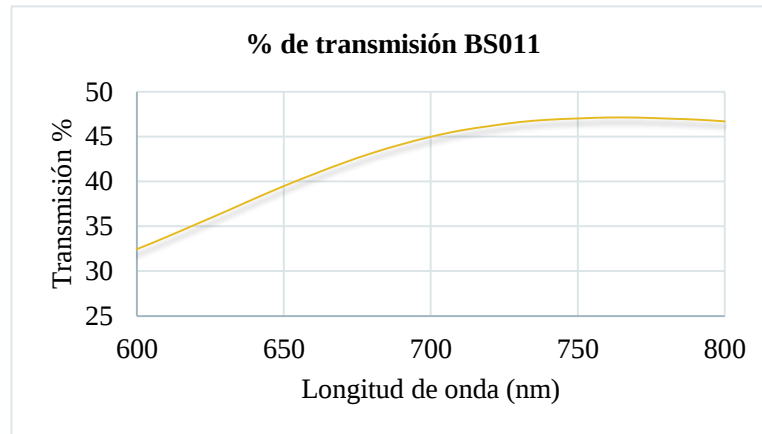


Figura 3.7. Ventana de transmisión del divisor de haz cúbico BS011.

Fuente: propia del autor.

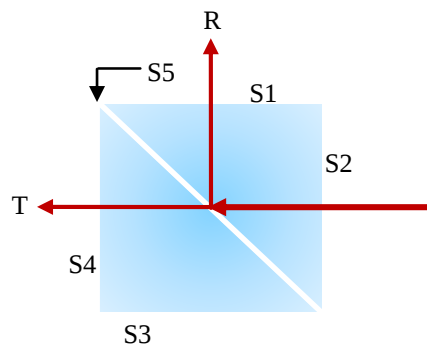


Figura 3.8. Divisor de haz cúbico BS011.

Fuente: propia del autor.

C. Filtro Óptico

Debido a que no se encontró un filtro Edge paso corto con una longitud de onda de corte igual a la longitud de onda del láser de excitación, se seleccionó el filtro Notch NF785-33 del catálogo de Thorlabs. El material con el que está fabricado, es el sustrato B-270, el cual presenta un porcentaje de transmisión interna mayor al 90% a una banda ancha de 550 a 1,500 nm. El filtro con una densidad óptica en la región de bloqueo mayor a 6, se encuentra diseñado a una longitud de onda central de 785 ± 2 nm, con un rango de bloqueo a un FWHM de 33 nm y maneja una transmisión promedio mayor al 90 %, a una banda ancha de 590 a 760 nm y 810 a 1040 nm, a un ángulo de incidencia de 0 grados. El recubrimiento óptico, es un aglomerado de materiales dieléctricos colocados sobre la superficie S1. El diámetro del filtro Notch es de 25.4 ± 1 mm, con un grosor de 6.3 ± 0.25 mm y una apertura clara de 21 ± 0.83 mm. La *figura 3.9* muestra la gráfica del % de transmisión y la *figura 3.10* el diagrama para el filtro Notch NF785-033.

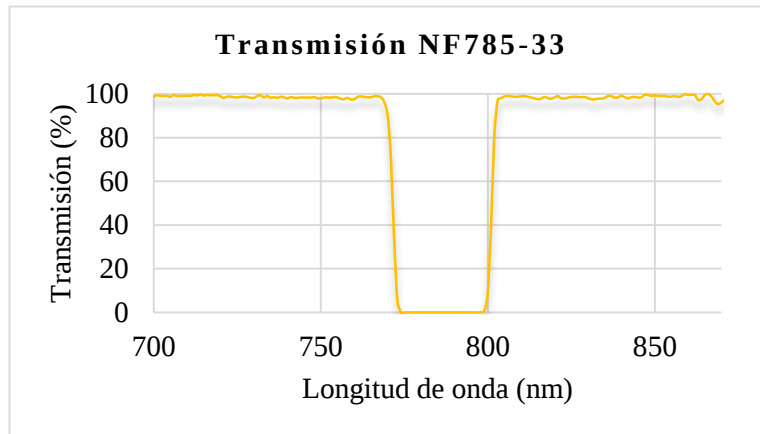


Figura 3.9. Ventana de transmisión del filtro Notch NF785-33.

Fuente: propia del autor.

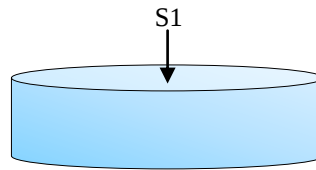


Figura 3.10. Superficie S1 del filtro Notch NF785-33.

Fuente: propia del autor.

3.2.1.3. Espectrómetro

Para el diseño del espectrómetro se seleccionó la configuración de un policromador Czerney-Turner cruzado, ya que esta configuración permite la reducción del tamaño del sistema. Este sistema está compuesto por tres elementos principales: una apertura que funciona como la unión entre el arreglo óptico y el espectrómetro, dos espejos encargados de la redirección de los rayos de luz y una red de difracción para separar los componentes del haz dispersado por longitud de onda. A continuación, se describen las características de los elementos seleccionados.

A. Apertura

El tamaño de la apertura se determinó por medio de la realización de simulaciones para los tres sistemas, en las cuales se analizó la calidad de la imagen para los diferentes tamaños propuestos para la apertura los cuales van desde 1, 5, 10, 25, 50, 75 y 100 μm .

B. Espejos

El espejo cóncavo (C1) CM508-100-E03 de la compañía Thorlabs, está fabricado con el sustrato N-BK7. La superficie S1 del espejo, está recubierta con un revestimiento dieléctrico con una reflectividad absoluta mayor al 99 %, a una banda ancha de 750 a 1100 nm, a un ángulo de incidencia de 0 a 45 grados. El espejo presenta un diámetro de 50.8 mm y un grosor de 10.6 mm, con un radio de curvatura de 200 mm y una distancia focal de 100 mm. En la *figura 3.11* se muestra el espejo cóncavo CM508-100-E03 utilizado en la simulación.

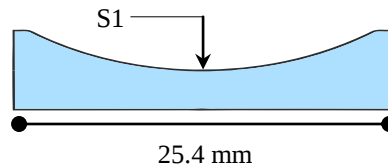


Figura 3.11. Espejo cóncavo (C1) CM508-100-E03.

Fuente: propia del autor.

El espejo cóncavo (C2) CM750-200-E03 de la compañía Thorlabs, está fabricado con el sustrato N-BK7. La superficie S1 del espejo, está recubierta con un revestimiento dieléctrico con una reflectividad absoluta mayor al 99 %, a una banda ancha de 750 a 1100 nm, a un ángulo de incidencia de 0 a 45 grados. El espejo presenta un diámetro de 75 mm y un grosor de 13.7 mm, con un radio de curvatura de 400 mm y una distancia focal de 200 mm. En la *figura 3.12* se muestra el espejo cóncavo CM750-200-E03 utilizado en la simulación.

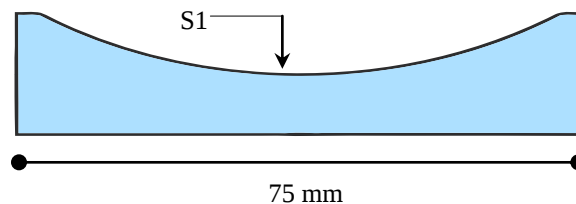


Figura 3.12. Espejo cóncavo (C2) CM750-200-E03.

Fuente: propia del autor.

C. Red de Difracción

La red de difracción de rejilla GR50-1208 de la compañía Thorlabs, está fabricada con el sustrato Lime Soda Glass. La superficie S1 presenta una superficie tipo diente de sierra con 1200 líneas/mm, cada una con un ángulo de 20 grados 44 minutos y un recubrimiento de aluminio reflectivo con una eficiencia del 60 al 80 %, a un rango de 750 a 1600 nm y con una intensidad fantasma menor al 0.5 %. La red presenta un tamaño de 50 x 50 x 9.5 mm, con una apertura clara mayor al 90 %. La *figura 3.13* muestra la red de difracción GR50-1208 utilizada en la simulación.

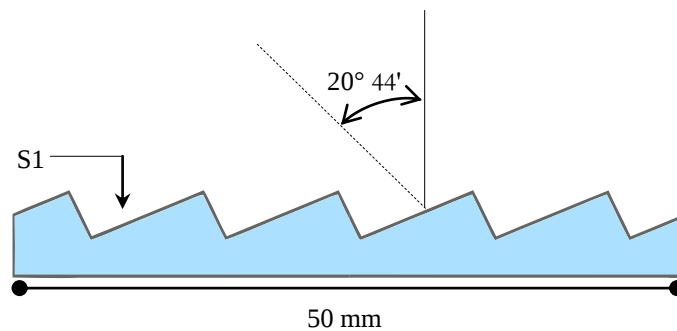


Figura 3.13. Red de difracción GR50-1208.

Fuente: propia del autor.

3.2.2. Descripción del Sistema de Espectrómetro Raman sin Reflector

Para determinar el arreglo más funcional de un espectrómetro de Raman simple, se analizó su desempeño con un divisor de haz de placa y un divisor de haz cúbico.

3.2.2.1. Parámetros y Simulaciones para el Sistema de Espectrometría Raman sin Reflector con Divisor de Haz de Placa

Para los diferentes elementos que componen al sistema de espectrómetro Raman sin reflector con un divisor de haz de placa, se definió el tipo de objeto en el editor de componentes en Zemax™, cuyas características de definición se determinaron según las características de cada elemento óptico utilizado para el diseño del sistema. La *tabla 3.4* presenta los diferentes tipos de objetos utilizados para definir los elementos que componen al sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.

Tabla 3.4. Tipos de objetos utilizados para definir a los elementos ópticos en el editor de componentes.

Elementos	Tipo de objeto
▪ Lente colectora ▪ Lente de enfoque ▪ Lente colimadora	Even asphere Lens
▪ Espejo C1 ▪ Espejo C2	Standard Lens
Red de difracción	Lenset Array 1
Filtro Notch	Cylinder Volume
Divisor de haz de placa	Rectangular volume
Láser	Source Diode

Fuente: propia del autor.

Dentro del manual de revestimientos de Zemax™, solo se encontró el archivo correspondiente al revestimiento para la lente colimadora y la lente de enfoque, denominado por el proveedor como revestimiento tipo B y denominado como THORB en el archivo Coating de Zemax™. Los revestimientos de los elementos ópticos restantes (divisor de haz, filtro Notch, espejo C1, espejo C2 y red de difracción) se tuvieron que añadir al archivo Coating. Para esto, se tomaron las tablas de datos de transmisión y/o reflexión para cada elemento, las cuales se encontraron en la página del proveedor correspondiente para cada elemento. Con los datos se crearon las tablas de recubrimientos en el archivo Coating especificando el nombre de la tabla, el ángulo de incidencia, las longitudes de onda en micrómetros, la reflexión para los coeficientes S y P, y/o la transmisión para los coeficientes S y P, ambos para cada longitud de onda especificada.

Para analizar el trazo de rayos y la potencia de salida a través del sistema, se diseñó una fuente puntal que emitía luz en todas direcciones. La potencia de salida de esta fuente, se fijó a 1 Watt. La fuente puntal se constituyó de longitudes de onda que van desde los 450 nm hasta los 800 nm con saltos de 5 nm, todas con un peso igual a 1. La *tabla 3.5* muestra el espectro de emisión de la fuente de luz puntal, así como su porcentaje (%) de paso a través del filtro Notch NF785-33.

Tabla 3.5. Espectro de emisión de la fuente puntal.

Longitud de onda (µm)	Peso	% de paso del filtro Notch
0.8	1	8.62
0.795	1	0
0.79	1	0
0.785	1	0

0.78	1	0
0.775	1	0
0.77	1	90.61
0.765	1	98.40
0.76	1	97.43
0.755	1	98.37
0.75	1	97.85
0.745	1	97.28
0.74	1	97.85
0.735	1	98.18
0.73	1	98.04
0.725	1	98.30
0.72	1	98.89
0.715	1	99.17
0.71	1	99.15
0.705	1	98.62
0.7	1	98.72
0.695	1	98.55
0.69	1	98.80
0.685	1	98.06
0.68	1	98.38
0.675	1	98.52
0.67	1	97.96
0.665	1	98.65
0.66	1	98.91
0.655	1	98.79
0.65	1	98.98
0.645	1	98.94
0.64	1	99.42
0.635	1	98.74
0.63	1	99.36
0.625	1	99.08
0.62	1	99.36
0.615	1	98.45
0.61	1	98.94
0.605	1	99.24
0.6	1	99.64
0.595	1	99.40
0.59	1	99.15
0.585	1	98.35
0.58	1	88.79

0.575	1	70.19
0.57	1	44.12
0.565	1	45.78
0.56	1	21.89
0.555	1	12.98
0.55	1	5.47
0.545	1	1.76
0.54	1	0.16
0.535	1	0
0.53	1	0
0.525	1	0
0.52	1	0
0.515	1	0
0.51	1	0
0.505	1	0
0.5	1	0
0.495	1	0
0.49	1	0
0.485	1	0
0.48	1	0
0.475	1	0
0.47	1	0
0.465	1	0
0.46	1	0
0.455	1	0
0.45	1	0

Fuente: propia del autor.

Para conocer la capacidad de colecciones de luz por la lente colectora se calculó su ángulo de colección α con la formula (27).

$$\alpha = 2 \tan^{-1} \frac{D}{2 \cdot F} = 2 \tan^{-1} \frac{6.3 \text{ mm}}{2 \cdot 4.51 \text{ mm}} = \frac{1.207 \cdot 180}{\pi} = 69.15^\circ$$

La *figura 3.14* muestra el diagrama de la apertura angular para la lente 355230-B.

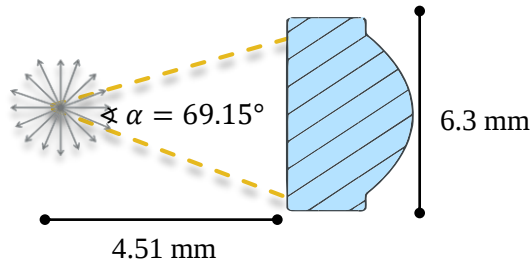


Figura 3.14. Apertura angular para la lente colectora 355230-B.

Fuente: propia del autor.

Debido a la selección de espejos cóncavos se decidió utilizar una lente de enfoque con una apertura numérica pequeña para poder trabajar lo más cercano posible a la región paraxial de ambos espejos. Para esta lente se calculó su ángulo de enfoque con (27).

$$\alpha = 2 \tan^{-1} \frac{D}{2 \cdot F} = 2 \tan^{-1} \frac{6.33 \text{ mm}}{2 \cdot 22 \text{ mm}} = \frac{0.284 \cdot 180}{\pi} = 16.27^\circ$$

La *figura 3.15* muestra la apertura angular para la lente 83-544.

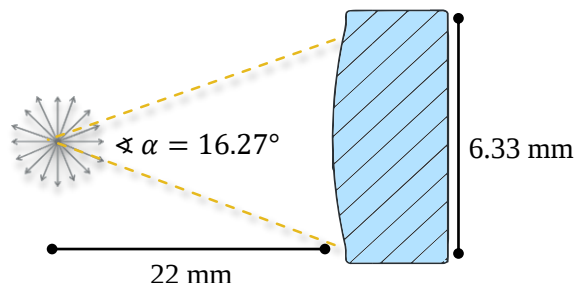


Figura 3.15. Apertura angular para la lente de enfoque 83-544.

Fuente: propia del autor.

Debido a que los divisores de haz de placa presentan una desviación del haz, se calculó su distancia d con las formulas (28) y (29) definidas en el capítulo II.

Para la formula (28) a una $h = 3 \text{ mm}$.

$$d = 0.329 \cdot h = 0.329 \cdot 3 \text{ mm} = \mathbf{0.987 \text{ mm}}$$

Para la formula (29), se determinaron los siguientes datos:

- $\theta = 45$ grados.
- $n_{1\text{aire}} = 1.0002$
- $n_{2\text{N-BK7 a } 900 \text{ nm}} = 1.5090$

$$\begin{aligned}
 d &= h \sin(\theta) \left[1 - \left(\frac{\cos(\theta)}{\sqrt{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 - \sin^2(\theta)}} \right) \right] \\
 &= (3 \text{ mm}) \sin(45^\circ) \left[1 - \left(\frac{\cos(45^\circ)}{\sqrt{\left(\frac{1.5090}{1.0002}\right)^2 - \sin^2(45^\circ)}} \right) \right] \\
 &= \mathbf{1.017 \text{ mm}}
 \end{aligned}$$

Dada la desviación del haz generada por el divisor de haz de placa, la lente de enfoque y la fuente puntual se colocaron a una posición sobre el eje Y, con un valor igual a -1.07 mm con respecto al eje óptico del láser, la lente colimadora y el divisor de haz, como se muestra en la *figura 3.16*.

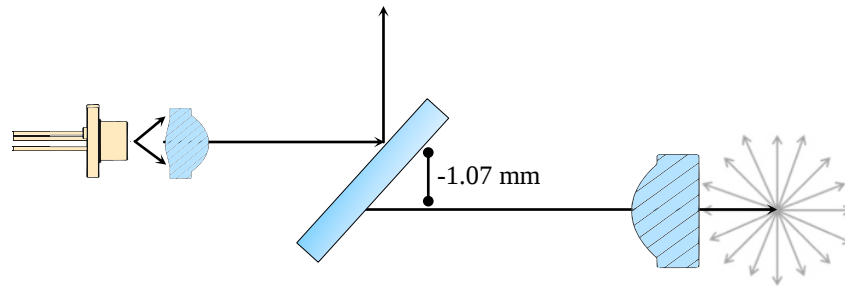


Figura 3.16. Desviación del haz causada por el divisor de haz de placa.

Fuente: propia del autor.

Un detector fue colocado en el punto focal del espejo C2, con la finalidad de analizar la forma de las manchas de luz por longitud de onda y la potencia de salida del sistema. Para esto se seleccionó un detector de color, con un área de 10 x 100 mm y una resolución de 500 x 5,000 pixeles en los ejes X y Y, respectivamente. Para identificarlo fácilmente entre los otros detectores utilizados durante las simulaciones, en los siguientes apartados se le menciona como detector final.

Además del detector final, se colocaron detectores de color en las superficies S1 de los siguientes elementos: filtro Notch, espejo C1, red de difracción y espejo C2. La información proporcionada por los detectores se utilizó para analizar el funcionamiento del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con un divisor de haz de placa. Las características de los detectores se muestran en la *tabla 3.6*.

Tabla 3.6. Características de los detectores utilizados para analizar el desempeño del sistema de espectrómetro Raman simple con un divisor de haz de placa.

Superficie S1	Área (mm)	No. De pixeles (X, Y)
Filtro Notch	12 x 12	250 x 250
Espejo C1	25.4 x 25.4	250 x 250
Red de difracción	50 x 50	250 x 250
Espejo C2	75 x 75	250 x 250

Fuente: propia del autor.

En la *figura 3.17* se observa el diagrama del arreglo del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa. En el diagrama se especifican los elementos utilizados para el arreglo, los cuales se resumen en la *tabla 3.7*. De igual manera, se especifican las distancias focales D1, D2, D3, D4 y D5 para la lente colimadora, lente colectora, lente de enfoque, espejo C1 y espejo C2 respectivamente. Las distancias entre los elementos restantes del arreglo óptico y del espectrómetro de igual manera fueron definidas con d1, d2, d3, d4, d5 y d6, para las distancias entre lente colimadora – divisor de haz, divisor de haz – lente colectora, divisor de haz – filtro Notch, filtro Notch – lente de enfoque, espejo C1 – red de difracción y red de difracción – espejo C2. Es importante mencionar que estas pueden variar ya que trabajan con haces colimados y no existe una divergencia o convergencia del haz que delimite la distancia de trabajo del elemento.

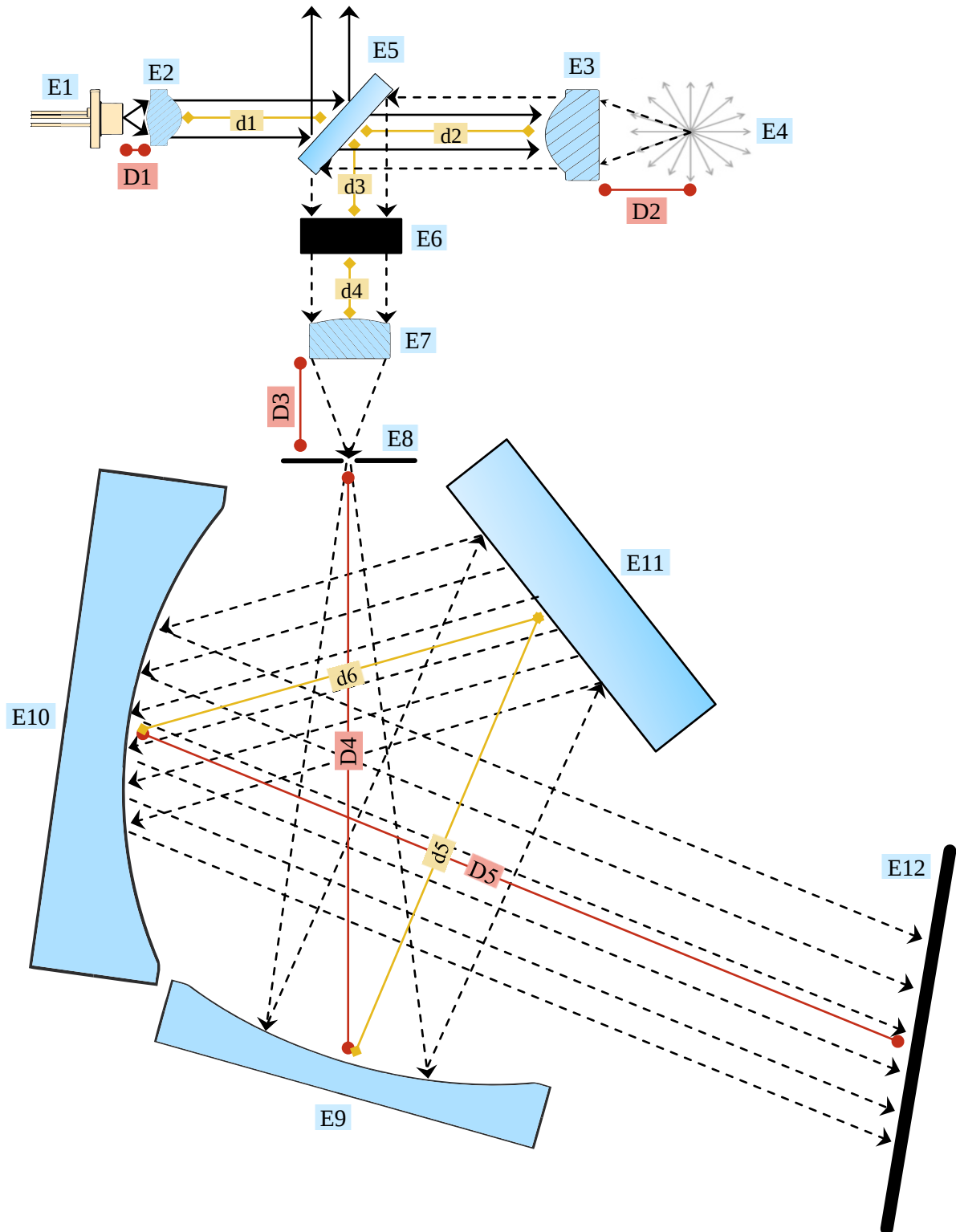


Figura 3.17. Arreglo básico del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.

Fuente: propia del autor.

Tabla 3.7. Listado de los elementos utilizados para la simulación del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con un divisor de haz de placa.

	Elemento
E1	Laser
E2	Fuente puntual
E3	Lente colimadora
E4	Lente colectora
E5	Divisor de haz de placa
E6	Filtro Notch
E7	Lente de enfoque
E8	Apertura
E9	Espejo C1
E10	Espejo C2
E11	Red de difracción
E12	Detector final

Fuente: propia del autor.

La *tabla 3.8* muestra las distancias de separación entre los elementos para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con un divisor de haz de placa definidas en el programa Zemax™ durante la simulación.

Tabla 3.8. Distancias entre elementos para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con un divisor de haz de placa.

	Elemento	Distancia (mm)
D1	Lente colimadora	3.1
D2	Lente colectora	4.51
D3	Lente de enfoque	22
D4	Espejo C1	100
D5	Espejo C2	200
	Elemento	Distancia (mm)
d1	Lente colimadora – divisor de haz de placa	18.6
d2	Divisor de haz de placa – lente colectora	21.25
d3	Divisor de haz de placa – filtro Notch	19.9
d4	Filtro Notch – lente de enfoque	23.05
d5	Espejo C1 – red de difracción	18
d6	Red de difracción – espejo C2	43

Fuente: propia del autor.

Con los parámetros para la simulación definidos, se integraron todos los elementos a la simulación en Zemax™ y se prosiguió con el análisis del trazo de rayos proporcionado por el simulador 2D y 3D. La *figura 3.18* muestra el trazo de rayos en 2D, mientras que la *figura 3.19* muestra el trazo de rayos en 3D para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa, ambas arrojadas por la simulación en Zemax™. Para el trazo de rayos se determinaron 100 rayos para cada una de las fuentes, mostrándose en color azul la fuente puntual y en color verde la fuente laser, mientras que, para el análisis de potencia, se determinaron 5 millones de rayos para cada una de las fuentes, siendo este valor un estándar para las simulaciones en Zemax™. En el trazo de rayos notamos como cada uno de los elementos cumple con su función. Tanto en la simulación en 3D como en la simulación en 2D, se observó la colimación del haz de la fuente laser por la lente colimadora, la colección de una parte de la luz dispersada desde la fuente puntual por la lente colectora, la transmisión y reflexión de la fuente laser y fuente puntual por el divisor de haz, la eliminación de los rayos de luz con una longitud de onda igual a la de la fuente de luz láser por el filtro Notch, el enfoque de la radiación que atravesó el filtro Notch hacia la apertura por la lente de enfoque y la separación de los rayos por longitud de onda y su enfoque hacia el detector final por parte del espectrómetro. Sin embargo, de igual manera se observó la existencia de pérdidas de rayos, causadas por las reflexiones en las superficies de todos los elementos ópticos, que aunque estos están recubiertos con revestimientos ópticos anti-reflejantes, estos elementos no son 100 % ideales. Debido a esto se presentaron rayos desviados en todas direcciones al atravesar las superficies de los elementos ópticos, por lo que se colocaron superficies rectangulares absorbentes con ventanas de transmisión, para evitar que los rayos desviados por las superficies de los elementos participaran e influenciaran las mediciones. Los diámetros de las ventanas de transmisión, se definieron según el diámetro de la apertura clara de los elementos sobre los que se colocaron las superficies rectangulares. Las superficies rectangulares con ventanas de transmisión se colocaron sobre los elementos: lente colectora, lente colimadora, filtro Notch y lente de enfoque. Los diámetros de las ventanas de transmisión se muestran en la *tabla 4.9*.

Tabla 4.9. Diámetros definidos para las ventanas de transmisión.

Ventana de transmisión	Diámetro
Lente colimadora	5
Lente colectora	5.07
Filtro Notch	21
Lente de enfoque	5.5

Fuente: propia del autor.

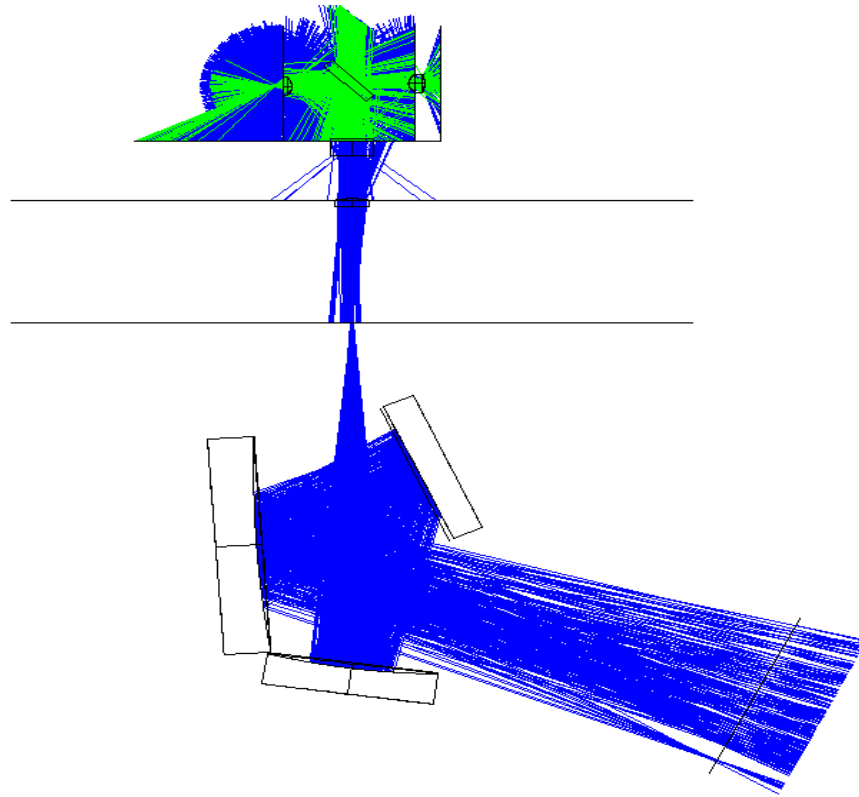


Figura 3.18. Diagrama del sistema en 2D arrojado por la simulación en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.

Fuente: Fuente: simulación en 2D, Zemax™.

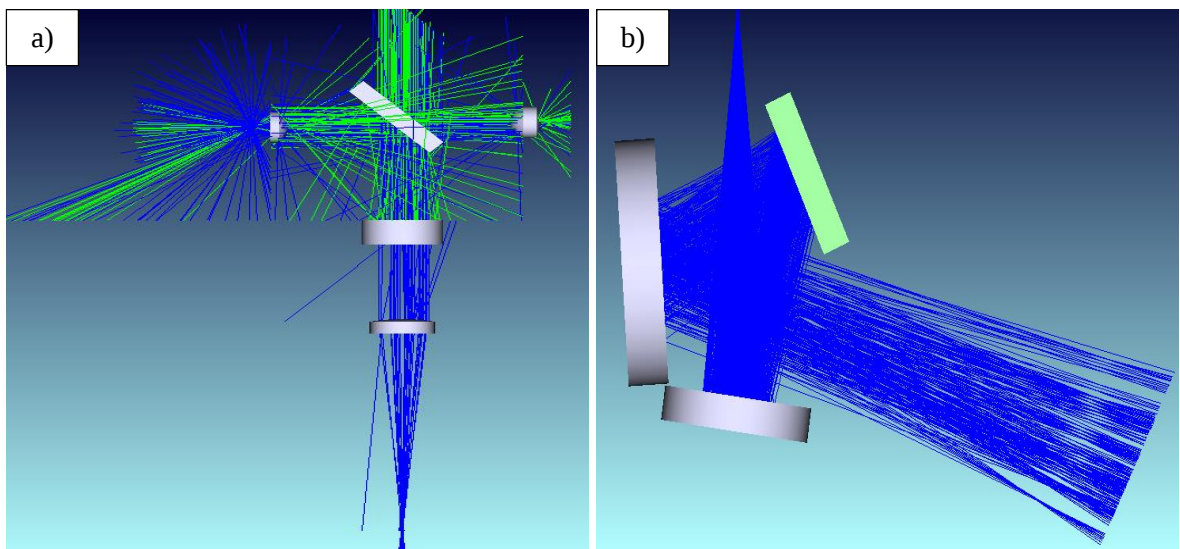


Figura 3.19. Diagrama del sistema en 3D arrojado por la simulación en Zemax™ del sistema sin reflector con divisor de haz de placa. En a) se observa el arreglo óptico y en b) se observa el espectrómetro.

Fuente: simulación en 3D, Zemax™.

3.2.2.2. Parámetros y Simulaciones para el Sistema de Espectrometría Raman sin Reflector con Divisor de Haz Cúbico

El sistema de espectrómetro Raman sin reflector, en este caso, con un divisor de haz cúbico, presenta las mismas características en diseño que el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.

Dado que un divisor de haz cúbico está compuesto por dos prismas de precisión de ángulo recto unidos entre sí, el tipo de objetos utilizados para definir al divisor de haz cúbico en el editor de componentes en Zemax™ fueron dos polygon object. Un polygon object permite crear objetos compuestos por triángulos en el espacio en 3D. En este caso se seleccionó, para ambos objetos, el archivo de datos Prism45.POB, el cual presenta una forma de prisma de ángulo recto. La *figura 3.20* muestra la imagen en 3D del Prism45.POB.

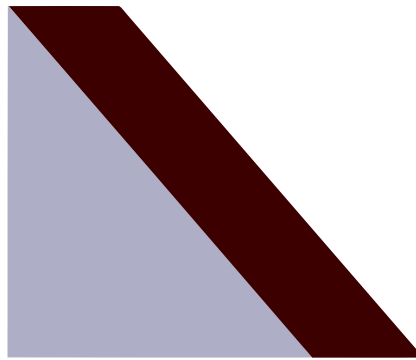


Figura 3.20. Prisma de ángulo recto, Prism45.POB.

Fuente: Zemax™.

De igual manera que en el sistema descrito con anterioridad, se colocaron detectores en las superficies S1 de los elementos ópticos, filtro Notch, espejo C1, red de difracción y espejo C2, en este caso con el objetivo de realizar una comparación entre el uso de divisores de haz de placa y divisores de haz cúbico. La *figura 3.21* es la representación esquemática del sistema de espectrómetro Raman con un divisor de haz cúbico. En el diagrama se especifican los elementos utilizados para el arreglo del sistema con divisor de haz cúbico, los cuales se mencionan en la *tabla 3.10*. Así mismo, se especifican las distancias focales D1, D2, D3, D4 y D5 para la lente colimadora, lente colectora, lente de enfoque, espejo C1 y espejo C2 respectivamente. Las distancias entre los elementos restantes del arreglo óptico y del espectrómetro de igual manera fueron definidas con d1, d2, d3, d4, d5 y d6, para las distancias entre lente colimadora – divisor de haz cúbico, divisor de haz cúbico – lente colectora, divisor de haz cúbico – filtro Notch, filtro Notch – lente de enfoque, espejo C1 – red de difracción y red de difracción – espejo C2. El valor de las distancias entre los elementos para el sistema con divisor de haz cúbico, se presentan en la *tabla 3.11*.

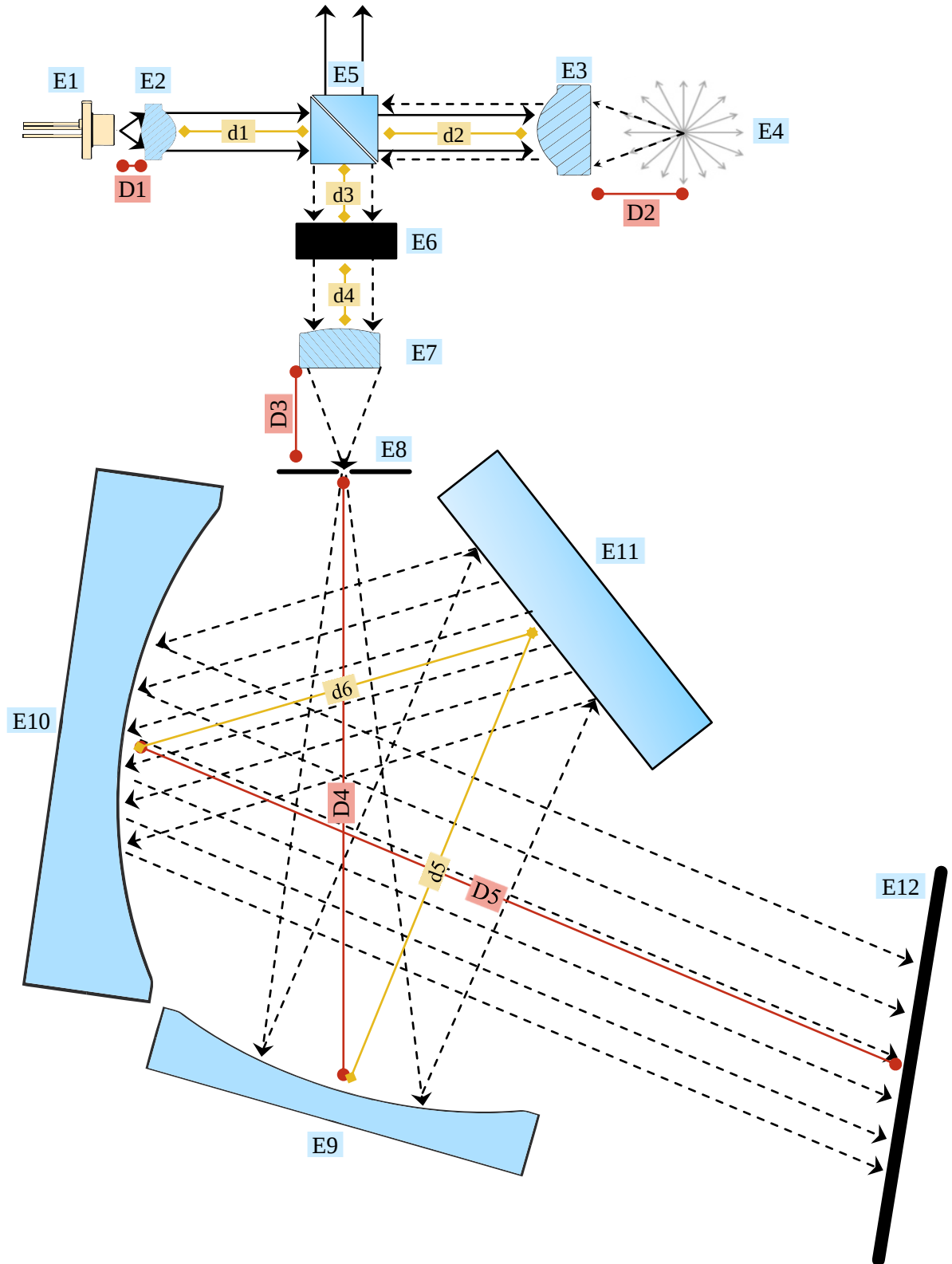


Figura 3.21. Arreglo básico del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.

Fuente: propia del autor.

Tabla 3.11. Listado de los elementos utilizados para la simulación del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.

	Elemento
E1	Laser
E2	Fuente puntual
E3	Lente colimadora
E4	Lente colectora
E5	Divisor de haz cúbico
E6	Filtro Notch
E7	Lente de enfoque
E8	Apertura
E9	Espejo C1
E10	Espejo C2
E11	Red de difracción
E12	Detector final

Fuente: propia del autor.

Tabla 3.12. Distancias entre elementos para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.

	Elemento	Distancia (mm)
D1	Lente colimadora	3.1
D2	Lente colectora	4.51
D3	Lente de enfoque	22
D4	Espejo C1	100
D5	Espejo C2	200
	Elemento	Distancia (mm)
d1	Lente colimadora – divisor de haz cúbico	20.6
d2	Divisor de haz cúbico – lente colectora	13.6
d3	Divisor de haz cúbico – filtro Notch	19.9
d4	Filtro Notch – lente de enfoque	23.05
d5	Espejo C1 – red de difracción	18
d6	Red de difracción – espejo C2	43

Fuente: propia del autor.

En este caso, ya que se está utilizando un divisor de haz cúbico y estos, dadas sus características, no generan una desviación del haz, los componentes: laser, lente colimadora, lente colectora y fuente puntual, son alineados sobre el eje paraxial del divisor de haz como se muestra en la *figura 3.22*.

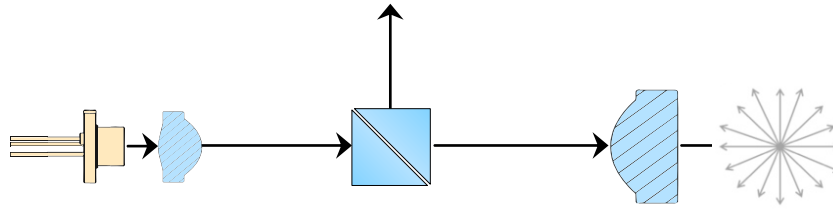


Figura 3.22. Diagrama de la colocación de los elementos, láser, lente colimadora, lente colectora y fuente puntual al utilizar un divisor de haz cúbico.

Fuente: propia del autor.

Con los parámetros para la simulación definidos, se integraron todos los elementos a la simulación en Zemax™ y se prosiguió con el análisis del trazo de rayos, proporcionado por el simulador 2D y 3D. La figura 3.23 muestra el trazo de rayos en 2D, mientras que la figura 3.24 muestra el trazo de rayos en 3D para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico, ambas arrojadas por la simulación en Zemax™. Para el trazo de rayos se determinaron 100 rayos para cada una de las fuentes mostrándose en color azul la fuente puntual y en color verde la fuente láser, mientras que, para el análisis de potencia, se determinaron 5 millones de rayos para cada una de las fuentes. En el trazo de rayos notamos, como cada uno de los elementos cumple con su función. Tanto en la simulación en 3D como en la simulación en 2D, se observó la colimación del haz de la fuente láser por la lente colimadora, la colección de una parte de la luz dispersada por la fuente puntual por la lente colectora, la transmisión y reflexión de la fuente láser y fuente puntual por el divisor de haz cúbico, la eliminación de los rayos de luz con una longitud de onda igual a la de la fuente de luz láser por el filtro Notch, el enfoque de la radiación que atravesó el filtro Notch hacia la apertura por la lente de enfoque y la separación de los rayos por longitud de onda y su enfoque hacia el detector final por parte del espectrómetro. Sin embargo, de igual manera se observó la existencia de pérdidas de rayos causadas por las reflexiones en las superficies de todos los elementos ópticos, por lo que de igual manera que el sistema de espectrómetro Raman con divisor de haz de placa, se colocaron superficies rectangulares absorbentes con ventanas de transmisión, para evitar que los rayos desviados por las superficies de los elementos participaran e influenciaran las mediciones. Las superficies rectangulares con ventanas de transmisión se colocaron sobre los elementos: lente colectora, lente colimadora, filtro Notch y lente de enfoque.

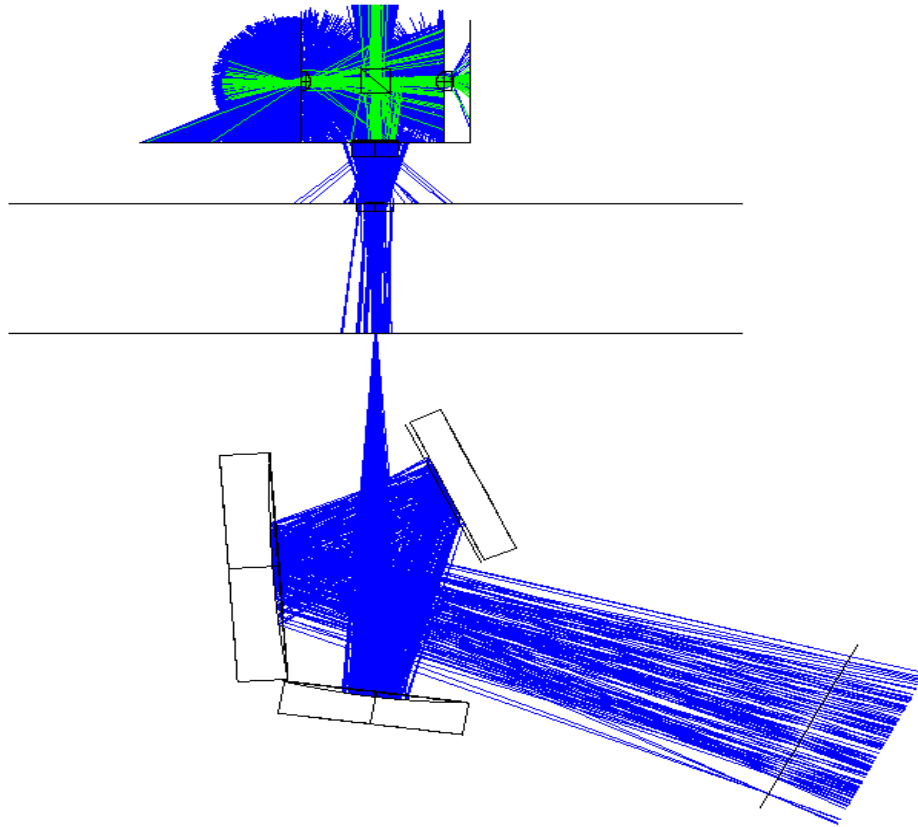


Figura 3.23. Diagrama del sistema en 2D arrojado por la simulación en Zemax™ para la simulación del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con un divisor de haz cúbico.

Fuente: simulación en 2D, Zemax™.

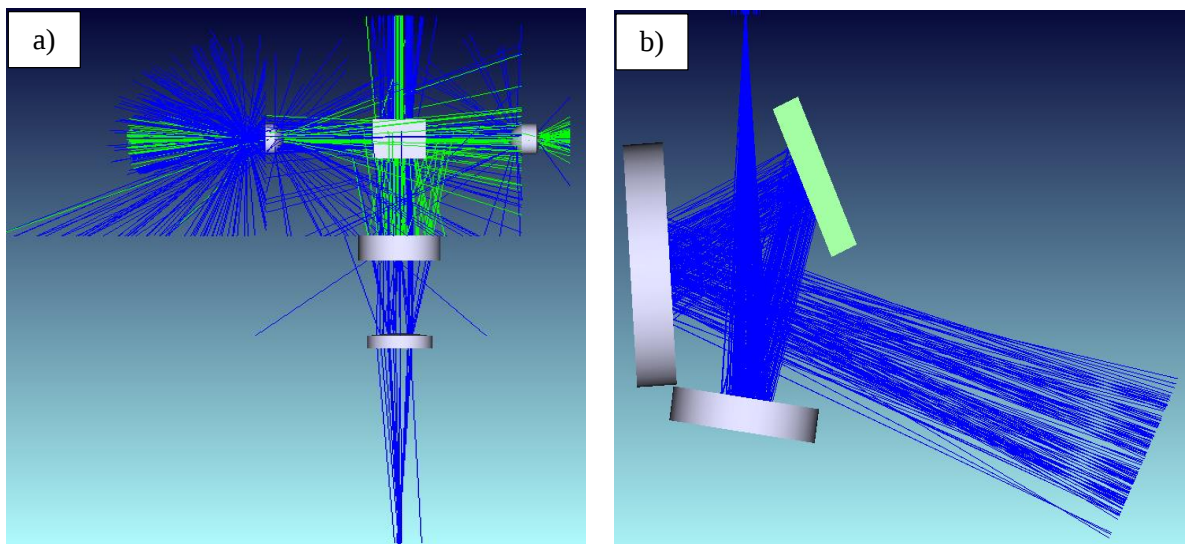


Figura 3.24. Diagrama del sistema en 3D arrojado por la simulación en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman simple con divisor de haz cúbico. En a) se observa el arreglo óptico y en b) se observa el espectrómetro.

Fuente: simulación en 3D, Zemax™.

El *apéndice A* y *B* muestran una vista resumida de los datos ingresados al editor de datos en Zemax™, para reproducir los componentes presentes en el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa y el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico, respectivamente.

3.3. Sistema de Espectrometría Raman con Reflector Elíptico

El sistema de espectrometría Raman con reflector elíptico presenta un diseño igual al sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico. En este caso, se añadió un reflector elíptico al arreglo óptico, para analizar el aumento de colección la luz emitida por la fuente puntual. La *figura 3.25* presenta el diagrama de bloques del sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.

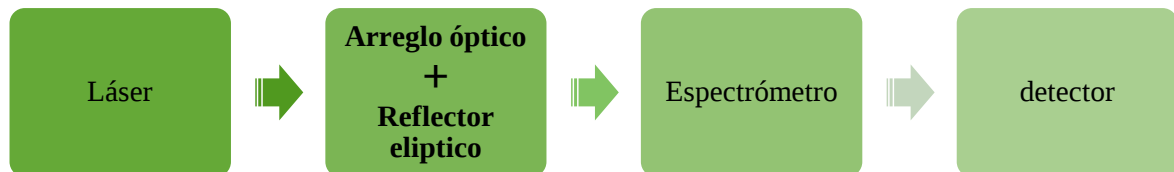


Figura 3.25. Diagrama de bloques del arreglo del sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.

Fuente: propia del autor.

3.3.1. Parámetros de Simulación Utilizados en el Sistema de Espectrómetro Raman con Reflector Elíptico

Recapitulando la información del capítulo II, con respecto a los reflectores elípticos, un reflector elíptico es un dispositivo que recoge los rayos que se generan desde un punto focal primario y los re-dirige a un punto focal secundario como se observa en la *figura 3.26*.

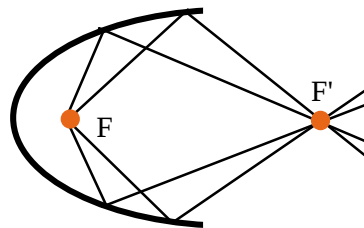


Figura 3.26. Trazo de rayos en un reflector elíptico.

Fuente: propia del autor.

Estos rayos a su vez presentan una apertura angular. El diseño del reflector elíptico utilizado para recolectar los rayos generados por la fuente puntual, se diseñó según la apertura angular (α) de la lente colectora calculada a 69.15 grados.

Por definición, una elipse en coordenadas cartesianas, con el origen siendo el centro de la elipse y el eje X el eje principal, los puntos focales y los vértices quedan en $F1 = (c, 0)$, $F2 = (-c, 0)$ y $V1 = (a, 0)$, $V2 = (-a, 0)$, respectivamente como se muestra en la *figura 3.27*.

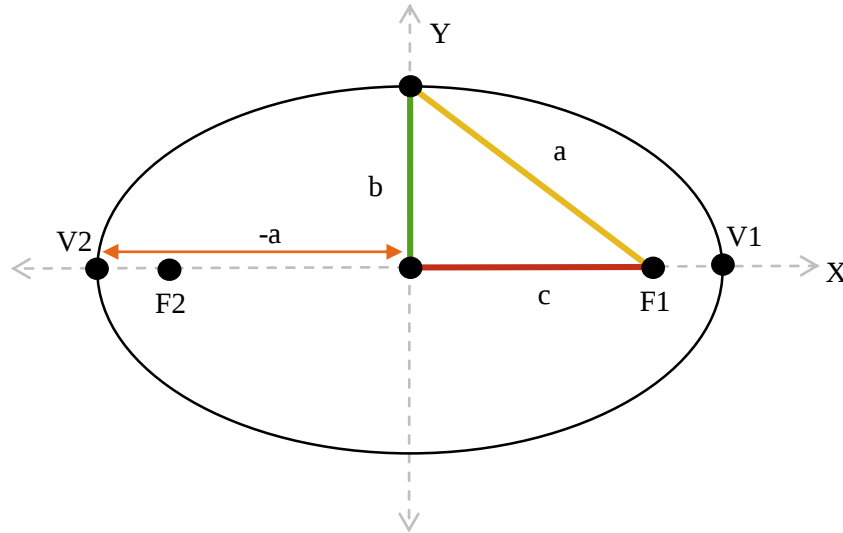


Figura 3.27. Representación de una elipse en coordenadas cartesianas.

Fuente: propia del autor.

Al tomar la sección $(0, 0)$, $(0, b)$, y $(c, 0)$ tenemos un triángulo equilátero con ángulos en las secciones (39), (40) y (41).

$$ab = \frac{\alpha}{2} + bc \quad (39)$$

$$bc = 90^\circ \quad (40)$$

$$ca = \frac{\alpha}{2} \quad (41)$$

Donde:

$$\alpha = 69^\circ \text{ y } b = 20 \text{ mm}$$

Sustituyendo valores en (39) y (41) tenemos que:

$$ab = \frac{\alpha}{2} + bc = \frac{69^\circ}{2} + 90^\circ = 124.5^\circ$$

$$ca = \frac{\alpha}{2} = 34.5^\circ$$

Con lo cual se obtuvo una relación de la forma representada en la *figura 3.28*.

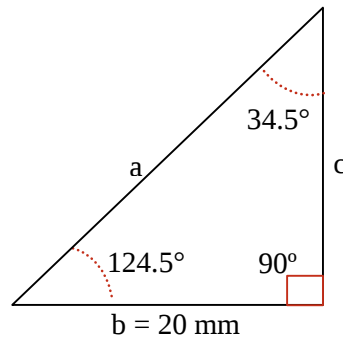


Figura 3.28. Relación entre los parámetros a, b y c para el reflector elíptico diseñado en Zemax™.

Fuente: propia del autor.

Utilizando la relación trigonométrica que relaciona al cateto opuesto y la hipotenusa con el seno del ángulo de $\alpha/2$, siendo en este caso el cateto opuesto, b, y la hipotenusa, a, se calculó el valor de a con (42).

$$a = \frac{b}{\sin(ac)} = \frac{20 \text{ mm}}{\sin(34.5^\circ)} = 35.31 \text{ mm} \quad (42)$$

Mientras que el valor de c se calculó con (43).

$$c = \sqrt{a^2 - b^2} = \sqrt{(35.21 \text{ mm})^2 - (20 \text{ mm})^2} = 29.09 \text{ mm} \quad (43)$$

Con estos datos se obtuvo un reflector elíptico con un valor de b = 20 mm, a = 35.21 mm y c = 29.09 mm, que concentra la luz emitida por la fuente puntual colocada en F1 hacia el segundo foco F2 en el eje óptico central, con una apertura angular igual a 69.15 grados, donde el foco F2, fue colocado a una distancia D2 igual a 4.21 mm de la lente colectora, como se muestra en la *figura 3.29*.

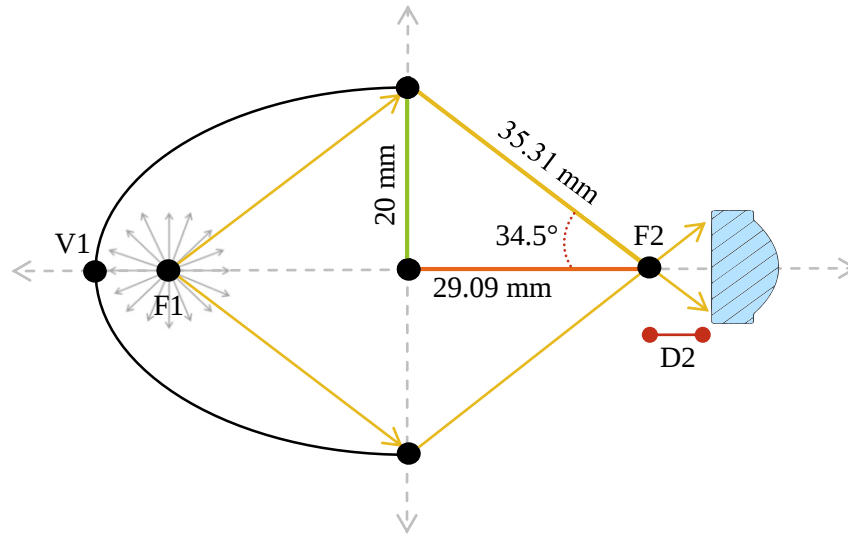


Figura 3.29. Representación del reflector elíptico diseñado para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.

Fuente: propia del autor.

Donde la distancia del vértice V1 al foco F1 es igual a:

$$a - c = 35.31 \text{ mm} - 29.09 \text{ mm} = 6.22 \text{ mm}$$

Para definir al reflector elíptico en el editor de componentes, se calculó la constante cónica (k) y el radio de curvatura (R_c) con las formulas (31) y (37), respectivamente, se seleccionó el tipo de objeto en el editor de componentes como Estándar Lens y el material se definió del tipo espejo.

$$\varepsilon = \frac{c}{a} = \frac{29.09 \text{ mm}}{35.31 \text{ mm}} = 0.82$$

$$k = -(\varepsilon^2) = -(0.82)^2 = -0.686$$

$$R_c = \frac{b^2}{a} = \frac{(20 \text{ mm})^2}{35.31 \text{ mm}} = 11.32 \text{ mm}$$

En la *figura 3.30* se muestra el reflector elíptico diseñado en 3D en Zemax™.

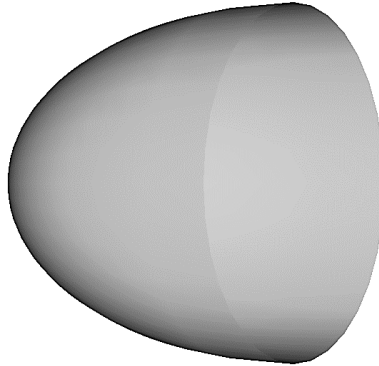


Figura 3.30. Imagen en 3D del reflector elíptico diseñado en Zemax™.

Fuente: simulación en Zemax™.

En la *figura 3.31* se observa el diagrama del arreglo del sistema de espectrómetro Raman con un reflector elíptico. En el diagrama se muestran los elementos utilizados para el arreglo, especificados en la *tabla 3.12*. De igual manera, se muestran las distancias focales DE1, DE2, DE3, DE4, DE5 Y DE6 para la lente colimadora, lente colectora, reflector elíptico, lente de enfoque, espejo C1 y espejo C2, respectivamente. Las distancias entre los elementos restantes del arreglo óptico y del espectrómetro, de igual manera fueron definidas con de1, de2, de3, de4, de5 y de6, para las distancias entre lente colimadora – divisor de haz cubico, divisor de haz cubico – lente colectora, divisor de haz cubico – filtro Notch, filtro Notch – lente de enfoque, espejo C1 – red de difracción y red de difracción – espejo C2. Las distancias se presentan en la *tabla 3.13*.

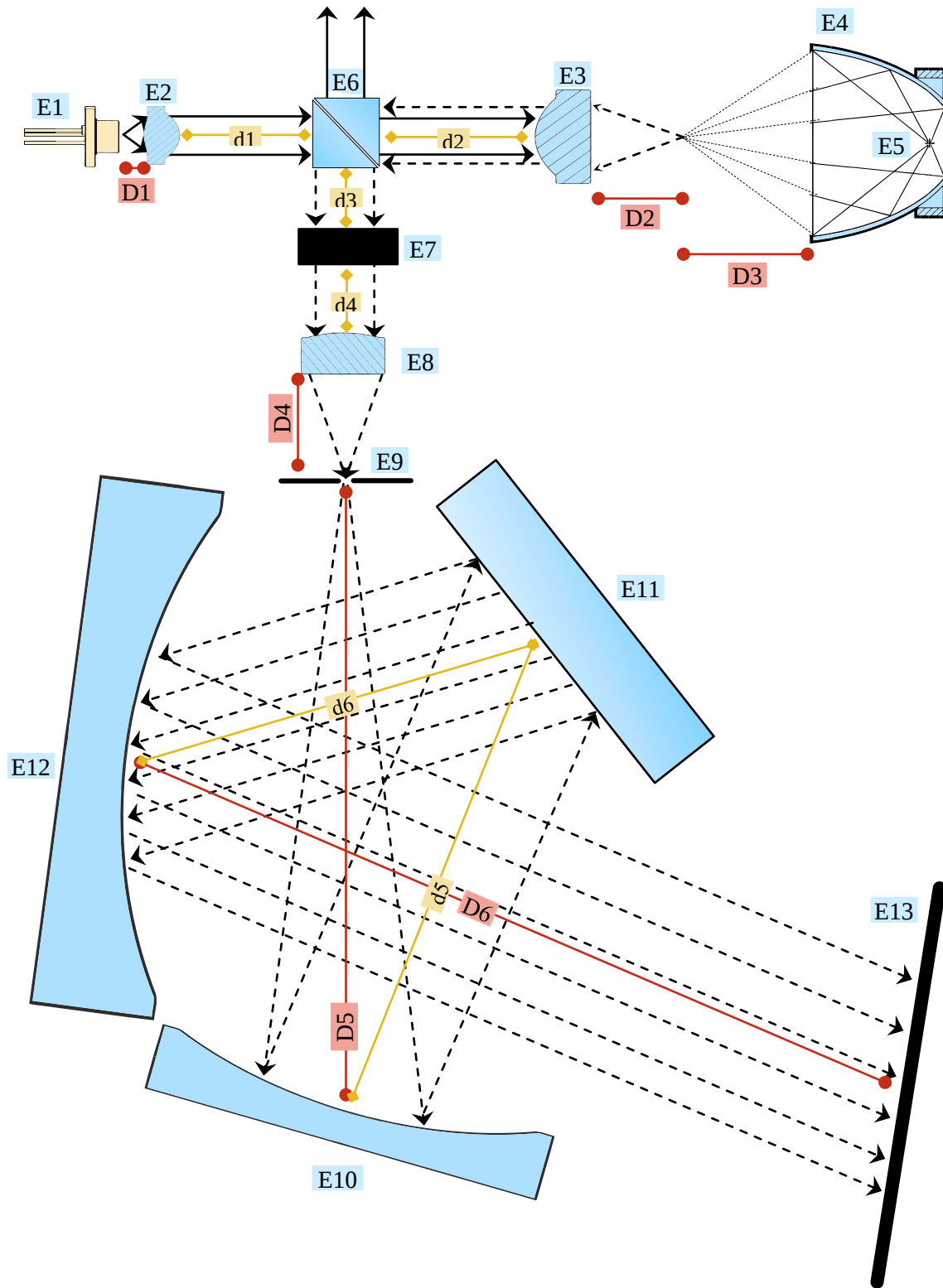


Figura 3.31. Arreglo del sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.

Fuente: propia del autor.

Tabla 3.13. Listado de los elementos utilizados para la simulación del sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.

	Elemento
E1	Láser
E2	Fuente puntual
E3	Lente colimadora
E4	Lente colectora
E5	Reflector elíptico
E6	Divisor de haz cúbico
E7	Filtro Notch
E8	Lente de enfoque
E9	Apertura
E10	Espejo C1
E11	Espejo C2
E12	Red de difracción
E13	Detector final

Fuente: propia del autor.

Tabla 3.14. Distancias entre elementos para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.

	Elemento	Distancia (mm)
DE1	Lente colimadora	3.1
DE2	Lente colectora	4.51
DE3	Reflector elíptico	29.09
DE4	Lente de enfoque	22
DE5	Espejo C1	100
DE6	Espejo C2	200
	Elemento	Distancia (mm)
de1	Lente colimadora – divisor de haz cúbico	20.6
de2	Divisor de haz cúbico – lente colectora	13.6
de3	Divisor de haz cúbico – filtro Notch	19.9
de4	Filtro Notch – lente de enfoque	23.05
de5	Espejo C1 – red de difracción	18
de6	Red de difracción – espejo C2	43

Fuente: propia del autor.

Con los parámetros para la simulación definidos se integraron todos los elementos a la simulación en Zemax™ y se prosiguió con el análisis del trazo de rayos, proporcionado por el simulador 2D y 3D. La *figura 3.32* muestra el trazo de rayos en 2D, mientras que la *figura 3.33* muestra el trazo de rayos en 3D para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico, ambas arrojadas por la simulación en Zemax™. Para el trazo de rayos se determinaron 100 rayos para cada una de las fuentes, mostrándose en color azul la fuente puntual y en color verde la fuente láser, mientras que, para el análisis de potencia, se determinaron 5 millones de rayos para cada una de las fuentes. En el trazo de rayos notamos, como cada uno de los elementos cumple con su función. Tanto en la simulación en 3D como en la simulación en 2D se observó la colimación del haz de la fuente láser por la lente colimadora, la colección y redirección de la luz dispersada desde la fuente puntual hacia un segundo punto focal por el reflector elíptico, la colección de la luz re-direccionada en el reflector elíptico por la lente colectora, la transmisión y reflexión de la fuente láser y fuente puntual por el divisor de haz cúbico, la eliminación de los rayos de luz con una longitud de onda igual a la de la fuente de luz láser por el filtro Notch, el enfoque de la radiación que atravesó el filtro Notch hacia la apertura por la lente de enfoque y la separación de los rayos por longitud de onda y su enfoque hacia el detector final por parte del espectrómetro. Sin embargo, de igual manera que en el sistema de espectrómetro Raman sin reflector, se observó la existencia de pérdidas de rayos causadas por las reflexiones en las superficies de todos los elementos ópticos, por lo que también, se colocaron superficies rectangulares absorbentes con ventanas de transmisión sobre los elementos, lente colectora, lente colimadora, filtro Notch y lente de enfoque. En este caso se agregó una superficie rectangular en el punto focal del foco F2 del reflector elíptico con una ventana de transmisión de diámetro igual a 0.250 mm.

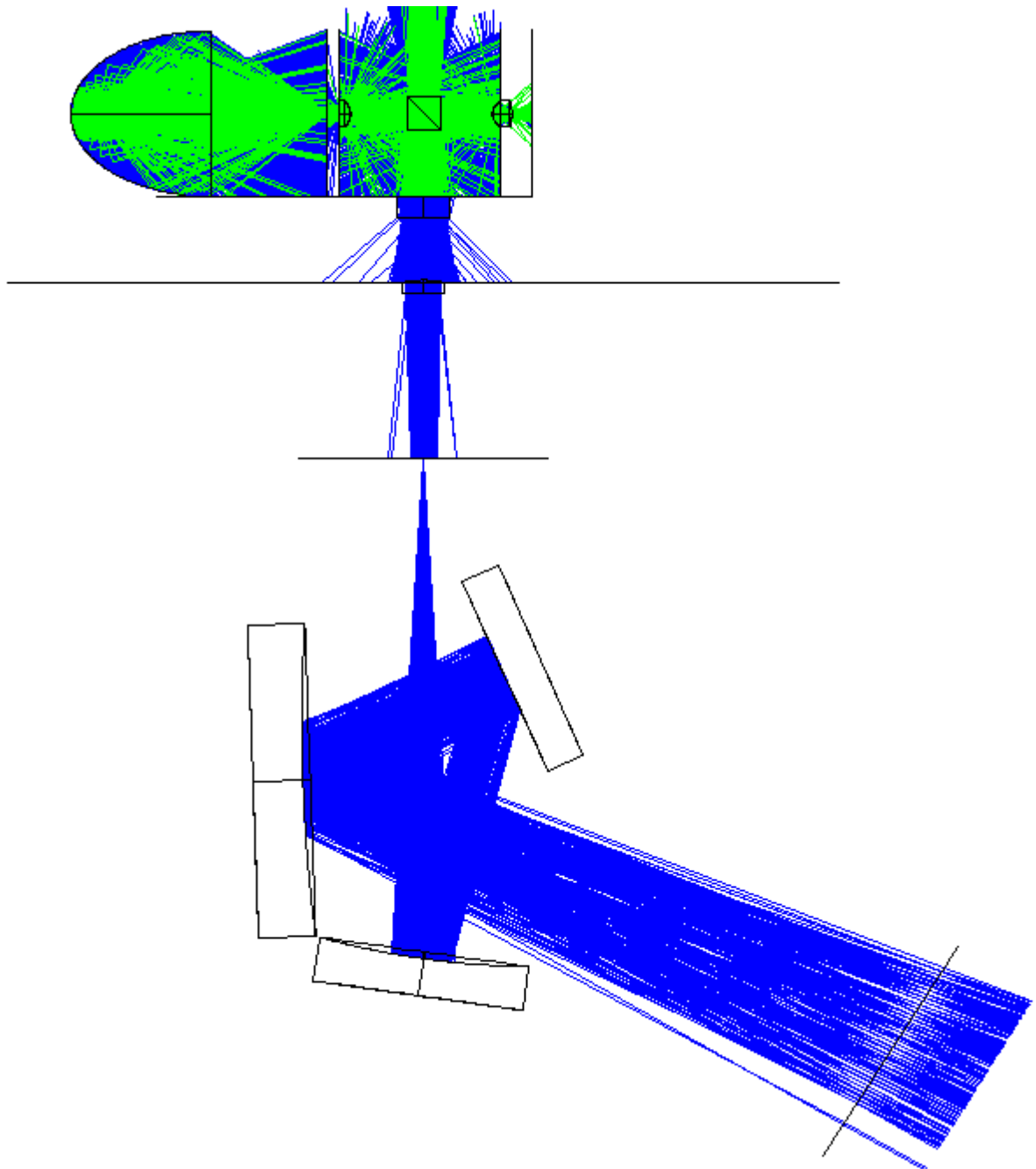


Figura 3.32. Diagrama del sistema en 2D arrojado por la simulación en Zemax™ para la simulación del sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.

Fuente: simulación en 2D, Zemax™.

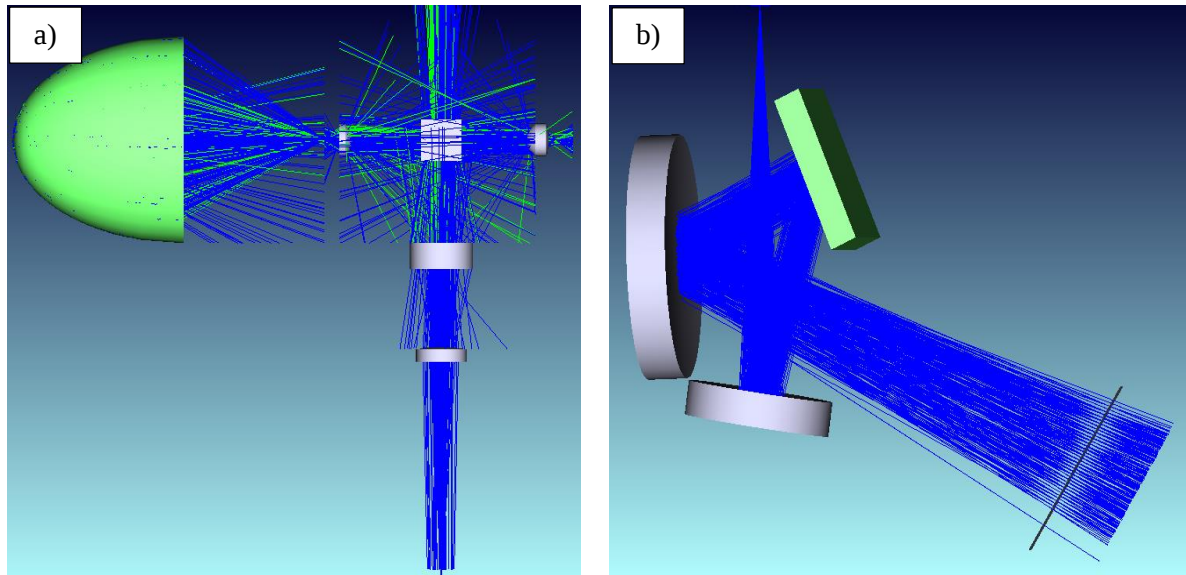


Figura 3.33. Diagrama del sistema en 3D arrojado por la simulación en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico. En a) se observa el arreglo óptico y en b) se observa el arreglo del espectrómetro.

Fuente: simulación en 3D, Zemax™.

El *anexo C* muestra una vista resumida de los datos ingresados al editor de datos en Zemax™ para reproducir los componentes presentes en el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.

3.4. Sistema de Espectrómetro Raman con Reflector Parabólico

El sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico presenta un diseño igual al sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico. En este caso, se añadió un reflector parabólico al arreglo óptico. La *figura 3.34* presenta el diagrama de bloques del sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.

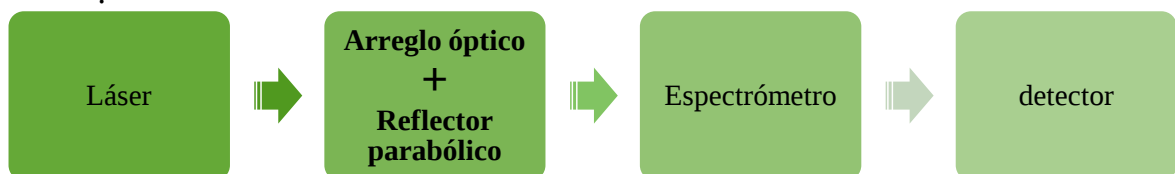


Figura 3.34. Diagrama de bloques del arreglo del sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.

Fuente: propia del autor.

3.4.1. Descripción de los Elementos

Para el sistema con reflector parabólico se requirió la adición de una lente esférica la cual se utilizó para reducir el diámetro del haz y poder así enfocararlo sobre la lente colectora.

3.4.1.1. Lente Reductora

Para la reducción del tamaño del haz colimado generado por el reflector parabólico, se seleccionó la lente esférica condensadora ACL3026U-B de la compañía Thorlabs, con una apertura numérica de 0.55 y una distancia focal efectiva de $26 \text{ mm} \pm 8 \%$ (figura 3.35). El material utilizado para su fabricación, es el sustrato B270. Ambas superficies de la lente están recubiertas con un revestimiento tipo B. La lente presenta un diámetro de $30 \pm 0.015 \text{ mm}$, con una apertura clara con un valor mayor a 27 mm y un grosor de $11.9 \pm 0.04 \text{ mm}$. La tabla 3.14 presenta los coeficientes esféricos de la lente.

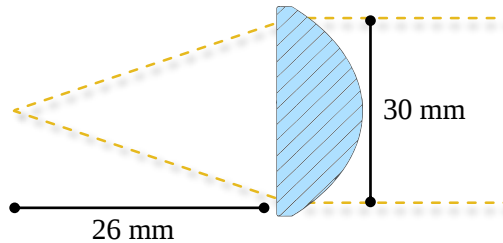


Figura 3.35. Apertura angular para la lente reductora ACL3026U-B.

Fuente: propia del autor.

Tabla 3.14. Coeficientes esféricos de la lente ACL3026U-B.

	R	k	A2	A4	A6	A8	A10
S1	13.551	-0.6301	0.000E+0	5.5E-6	0.000E+0	0.000E+0	0.000E+0
S2	PLANO	-0.924	0.000E+0	0.000E+0	0.000E+0	0.000E+0	0.000E+0

Fuente: hoja de datos ACL3026U-B, Thorlabs.

3.4.2. Parámetros de Simulación Utilizados en el Sistema de Espectrometría Raman con Reflector Parabólico

Recapitulando la información del capítulo II, con respecto a los reflectores parabólicos, un reflector parabólico, es un dispositivo que recoge los rayos que se generan desde un punto focal primario y los re-dirige de forma colimada hacia una apertura, como se observa en la figura 3.36.

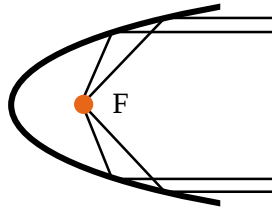


Figura 3.36. Trazo de rayos en un reflector parabólico.

Fuente: propia del autor.

Un reflector parabólico en coordenadas cartesianas, con el origen siendo el vértice y el eje X el eje principal, como se muestra en la *figura 3.37* el punto focal y el vértice quedan en $F = (0, f)$, donde $f > 0$ y $V = (0, 0)$, respectivamente y está gobernada por la formula (34).

$$y = \frac{x^2}{4 \cdot f}$$

Donde x es el radio de la apertura y f es el foco F .

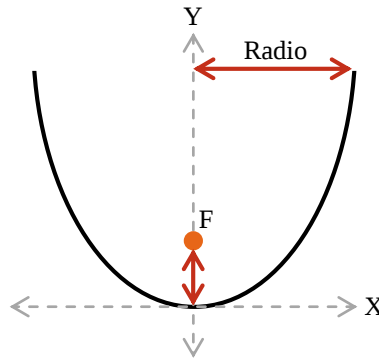


Figura 3.37. Trazo de rayos en un reflector parabólico.

Fuente: propia del autor.

Para el reflector parabólico añadido al sistema de espectrómetro Raman, se definió un radio de 15 mm y un foco a 2.5 mm del vértice. Sustituyendo valores en (34) tenemos que:

$$y = \frac{x^2}{4 \cdot f} = \frac{(15 \text{ mm})^2}{4 \cdot 2.5 \text{ mm}} = 22.5 \text{ mm}$$

Con estos datos se definió un reflector parabólico con valores en $y = 22.5 \text{ mm}$, $f = 2.5 \text{ mm}$ y $r = 15 \text{ mm}$, que colima la luz emitida por la fuente puntual colocada en F hacia la apertura. Debido a que el diámetro de la apertura es igual a 30 mm , el diámetro del haz generado por reflector presenta el mismo diámetro, donde ambos son mayores al diámetro de la lente colectora. Por esto, se colocó la lente esférica ACL3026U-B con el objetivo de coleccionar el haz colimado por el reflector parabólico y converger los rayos que componen al haz a su punto focal, con un valor de 26 mm , para posteriormente ser colectados por la lente colectora colocada a una distancia igual a su distancia focal, con un valor de 4.51 mm como se muestra en la *figura 3.38*.

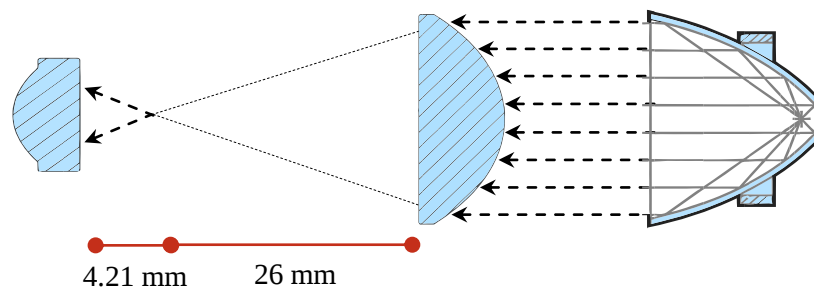


Figura 3.38. Representación del reflector parabólico diseñado para el sistema de espectrómetro Raman con un reflector parabólico.

Fuente: propia del autor.

Para definir al reflector parabólico en el editor de componentes se calculó el valor de la constante cónica (k) y el radio de curvatura (R_c) con las formulas (31) y (37), respectivamente, y se seleccionó el tipo de objeto en el editor de componentes como Estándar Lens y el material se definió del tipo espejo.

$$\varepsilon = 1$$

$$k = -(\varepsilon^2) = -(1^2) = -1$$

$$R_c = 2 \cdot f = 2 \cdot 2.5 \text{ mm} = 5 \text{ mm}$$

En la *figura 3.39* se muestra el reflector elíptico diseñado en 3D en Zemax™.

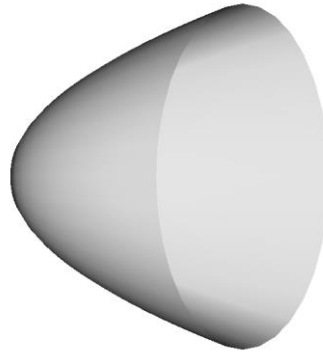


Figura 3.39. Imagen en 3D del reflector parabólico diseñado en Zemax™.

Fuente: simulación en Zemax™.

En la *figura 3.40* se observa el diagrama del arreglo del sistema de espectrómetro Raman con un reflector parabólico. En el diagrama se muestran los elementos utilizados para el arreglo, especificados en la *tabla 3.15*. De igual manera, se muestran las distancias focales DP1, DP2, DP3, DP4, DP5 Y DP6 para la lente colimadora, lente colectora, lente reductora, lente de enfoque, espejo C1 y espejo C2, respectivamente. Las distancias entre los elementos restantes del arreglo óptico y del espectrómetro de igual manera fueron definidas con dp1, dp2, dp3, dp4, dp5 y dp6, para las distancias entre lente colimadora – divisor de haz cubico, reflector parabólico – lente reductora, divisor de haz cubico – lente colectora, divisor de haz cubico – filtro Notch, filtro Notch – lente de enfoque, espejo C1 – red de difracción y red de difracción – espejo C2, respectivamente. Las distancias se presentan en la *tabla 3.16*.

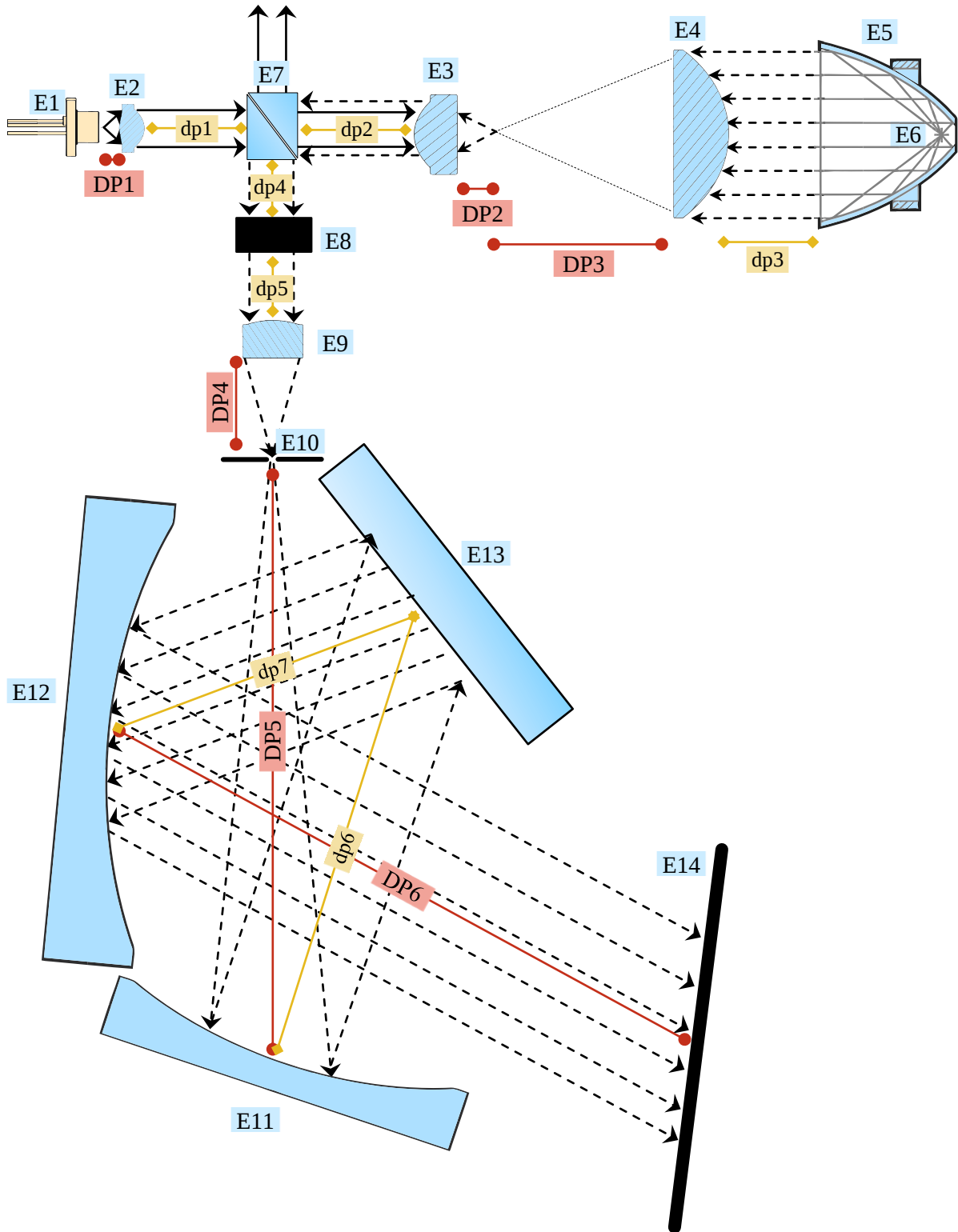


Figura 3.1. Arreglo del sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.

Fuente: propia del autor.

Tabla 3.15. Listado de los elementos utilizados para la simulación del sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.

	Elemento
E1	Láser
E2	Fuente puntual
E3	Lente colimadora
E4	Lente colectora
E5	Lente reductora
E6	Reflector parabólico
E7	Divisor de haz cúbico
E8	Filtro Notch
E9	Lente de enfoque
E10	Apertura
E11	Espejo C1
E12	Espejo C2
E13	Red de difracción
E14	Detector final

Fuente: propia del autor.

Tabla 3.16. Distancias entre elementos para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.

	Elemento	Distancia (mm)
DP1	Lente colimadora	3.1
DP2	Lente colectora	4.51
DP3	Lente reductora	26
DP4	Lente de enfoque	22
DP5	Espejo C1	100
DP6	Espejo C2	200
	Elemento	Distancia (mm)
dp1	Lente colimadora – divisor de haz cúbico	20.6
dp2	Reflector parabólico – lente reductora	30
dp3	Divisor de haz cúbico – lente colectora	13.6
dp4	Divisor de haz cúbico – filtro Notch	19.9
dp5	Filtro Notch – lente de enfoque	23.05
dp6	Espejo C1 – red de difracción	18
dp7	Red de difracción – espejo C2	43

Fuente: propia del autor.

Con los parámetros para la simulación definidos, se integraron todos los elementos a la simulación en Zemax™ y se prosiguió con el análisis del trazo de rayos, proporcionado por el simulador 2D y 3D. La *figura 3.42* muestra el trazo de rayos en 2D, mientras que la *figura 3.43* muestra el trazo de rayos en 3D para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico, ambas arrojadas por la simulación en Zemax™. Para el trazo de rayos se determinaron 100 rayos para cada una de las fuentes, mostrándose en color azul la fuente puntual y en color verde la fuente láser, mientras que, para el análisis de potencia, se determinaron 5 millones de rayos para cada una de las fuentes. En el trazo de rayos notamos, como cada uno de los elementos cumple con su función. Tanto en la simulación en 3D, como en la simulación en 2D, se observó la colimación del haz de la fuente láser por la lente colimadora, la colección y colimación de la luz dispersada desde la fuente puntual por el reflector parabólico, la colección de la luz colimada por el sistema lente reductora-lente, la transmisión y reflexión de la fuente láser y fuente puntual por el divisor de haz cúbico, la eliminación de los rayos de luz con una longitud de onda igual a la de la fuente de luz láser por el filtro Notch, el enfoque de la radiación que atravesó el filtro Notch hacia la apertura por la lente de enfoque y la separación de los rayos por longitud de onda y su enfoque hacia el detector final por parte del espectrómetro. Sin embargo, de igual manera se observó la existencia de pérdidas de rayos causadas por las reflexiones en las superficies de todos los elementos ópticos, por lo que de igual manera que el sistema de espectrómetro Raman sin reflector, se colocaron superficies rectangulares absorbentes con ventanas de transmisión sobre los elementos, lente colectora, lente colimadora, filtro Notch y lente de enfoque. En este caso se agregó una superficie rectangular a la lente reductora, con una ventana de transmisión de diámetro igual a 27 mm.

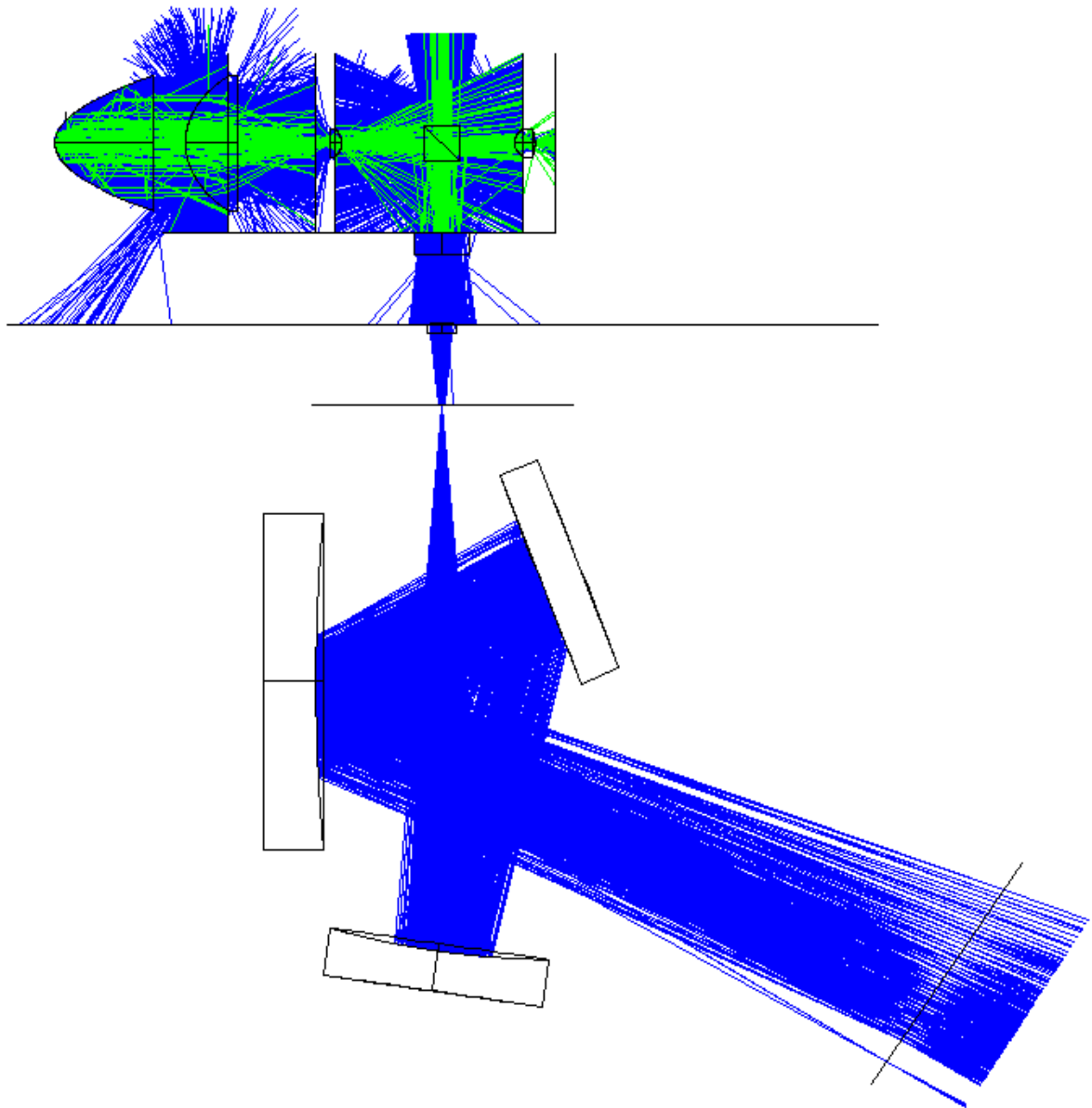


Figura 3.42. Diagrama del sistema en 2D arrojado por la simulación en Zemax™ para la simulación del sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.

Fuente: simulación en 2D, Zemax™.

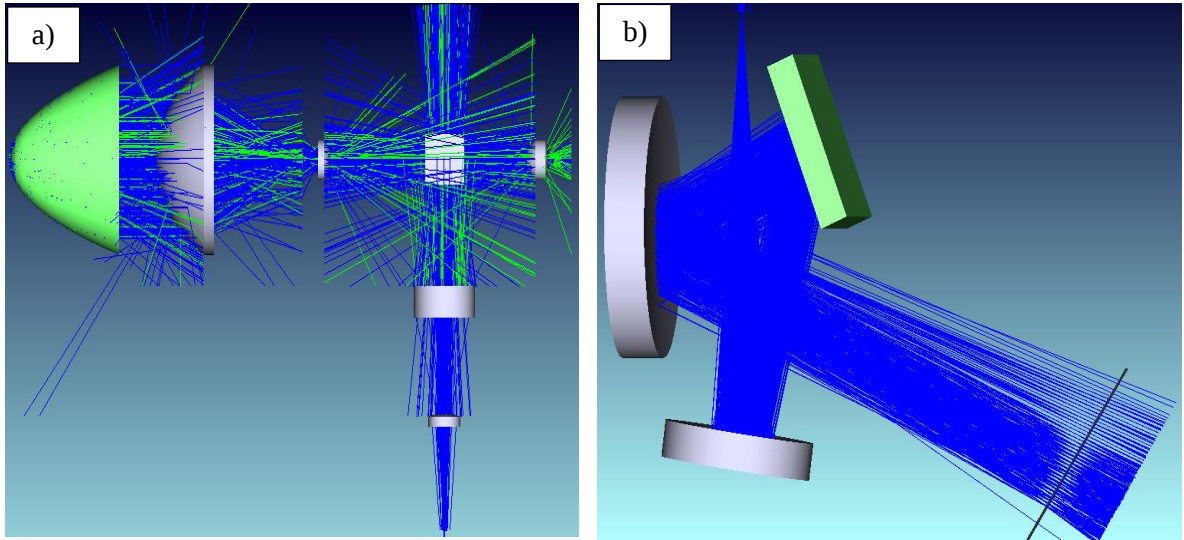


Figura 3.43. Diagrama del sistema en 3D arrojado por la simulación en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con un reflector parabólico. En a) se observa el arreglo óptico y en b) se observa el arreglo del espectrómetro.

Fuente: simulación en 3D, Zemax™.

El *anexo D* muestra una vista resumida de los datos ingresados al editor de datos en Zemax™ para reproducir los componentes presentes en el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.

Capítulo IV

Análisis de Resultados

4.1. Introducción

En el capítulo II, fueron definidos los conceptos fundamentales de óptica, así como presentados los tres arreglos ópticos simulados en la plataforma Zemax™, para analizar el aumento de la entrada de la radiación dispersada por una fuente puntual a un sistema de espectrómetro Raman sin reflector al añadir un reflector elíptico y un reflector parabólico.

En este capítulo, se presentan los resultados de las simulaciones de los tres sistemas descritos con anterioridad donde, los resultados se dividen en dos formas: análisis de la mancha de luz y análisis de la potencia de salida de los sistemas. Los resultados se presentan en la siguiente secuencia:

- Comparación del desempeño de un espectrómetro Raman sin reflector con un divisor de haz de placa y un divisor de haz cúbico.
- Análisis del tamaño de la apertura para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector, sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico y sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.
- Comparación entre el aumento de potencia de salida entre los sistemas: espectrómetro Raman sin reflector, espectrómetro Raman con reflector elíptico y espectrómetro Raman con reflector parabólico con un análisis de diferencia de medianas.

4.2. Comparación del Desempeño de un Espectrómetro Raman Simple con un Divisor de Haz de Placa y un Divisor de Haz Cúbico

En la *figura 4.1* se muestran las manchas de luz proporcionadas por los detectores colocados en las superficies S1 de los elementos: filtro Notch, espejo C1, red de difracción y espejo C2 en la simulación del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa. En la figura observamos los detectores colocados en a) superficie del filtro Notch, b) superficie del espejo C1, c) superficie de la red de difracción y d) superficie del espejo C2. En a) se obtuvo un haz de luz conformado por todos los colores especificados en la fuente puntual, debido a que el haz aun no pasa a través del filtro Notch. De igual manera se observó una serie de rayos aleatorios alrededor del haz, los cuales son generados por las reflexiones de los rayos en las superficies de los elementos que aunque estos presentan películas anti-reflejantes, no son 100% ideales según sus características descritas en el capítulo IV. En b), c) y d) se obtuvieron manchas de luz compuestas por longitudes de onda que caen dentro del espectro de color naranja y rojo, esto debido a que el haz de luz ya atravesó el filtro Notch, y dadas sus características de transmisión por longitud de onda, especificadas en la tabla 3.5 en el capítulo III, las longitudes de onda de 1069 a 800 nm y de 700 a 590 nm presentan una transmisión mayor al 90 %, mientras que aquellas que cae fuera de este rango presentan transmisiones menores al 90 %. De igual manera también se observó que en todas las imágenes a color de los detectores, se visualizaron dos manchas de luz sobrepuestas una sobre la otra. Recordando la teoría mencionada en el capítulo II, al utilizar divisores de haz de placa, se presenta la reflexión de los rayos de luz sobre ambas superficies del elemento, lo que conlleva a una doble refracción del haz, creando dos haces de luz: un haz principal y un haz secundario o haz fantasma, donde los focos de ambos haces se encuentran a una distancia (d) debido a la desviación del haz, donde en este caso, d tuvo un valor calculado de 1.07 mm.

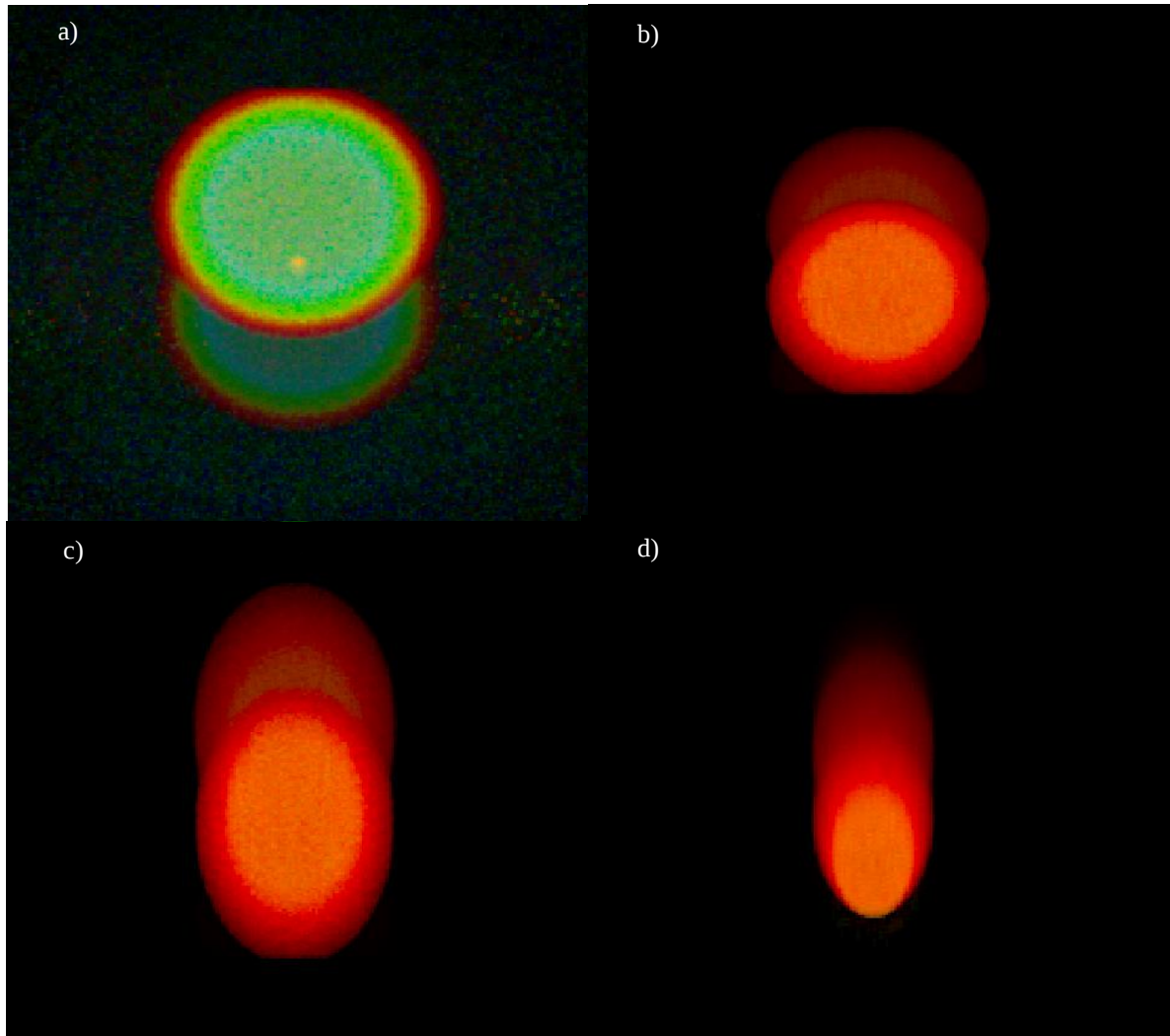


Figura 4.1. Manchas de luz para los detectores colocados en las superficies S1 de a) filtro Notch, b) espejo C1, c) red de difracción y d) espejo C2 del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.
Fuente: visor de detector en Zemax™.

En la figura 4.2 se muestran las manchas de luz proporcionadas por los detectores colocados en las superficies S1 de los elementos: filtro Notch, espejo C1, red de difracción y espejo C2 de la simulación del sistema de espectrómetro Raman con divisor de haz cúbico. En la figura podemos observar los detectores colocados en a) superficie del filtro Notch, b) superficie del espejo C1, c) superficie de la red de difracción y d) superficie del espejo C2. En a) se obtuvo un haz de luz conformado por todos los colores especificados en la fuente puntual ya que el haz aun no pasa a través del filtro Notch. De igual manera se muestran una serie de rayos aleatorios alrededor del haz, generados por las constantes reflexiones sobre las superficies de los elementos. En b), c) y d) se obtuvieron manchas de luz compuestas por

longitudes de onda que caen dentro del espectro de color naranja y rojo, debido a que el haz de luz ya atravesó el filtro Notch, y dadas sus características de transmisión, las longitudes de onda de 590 a 770 nm y de 800 a 1069 nm presentan una transmisión mayor al 90 %, mientras que aquellas que cae fuera de este rango presentan transmisiones menores al 90 %.

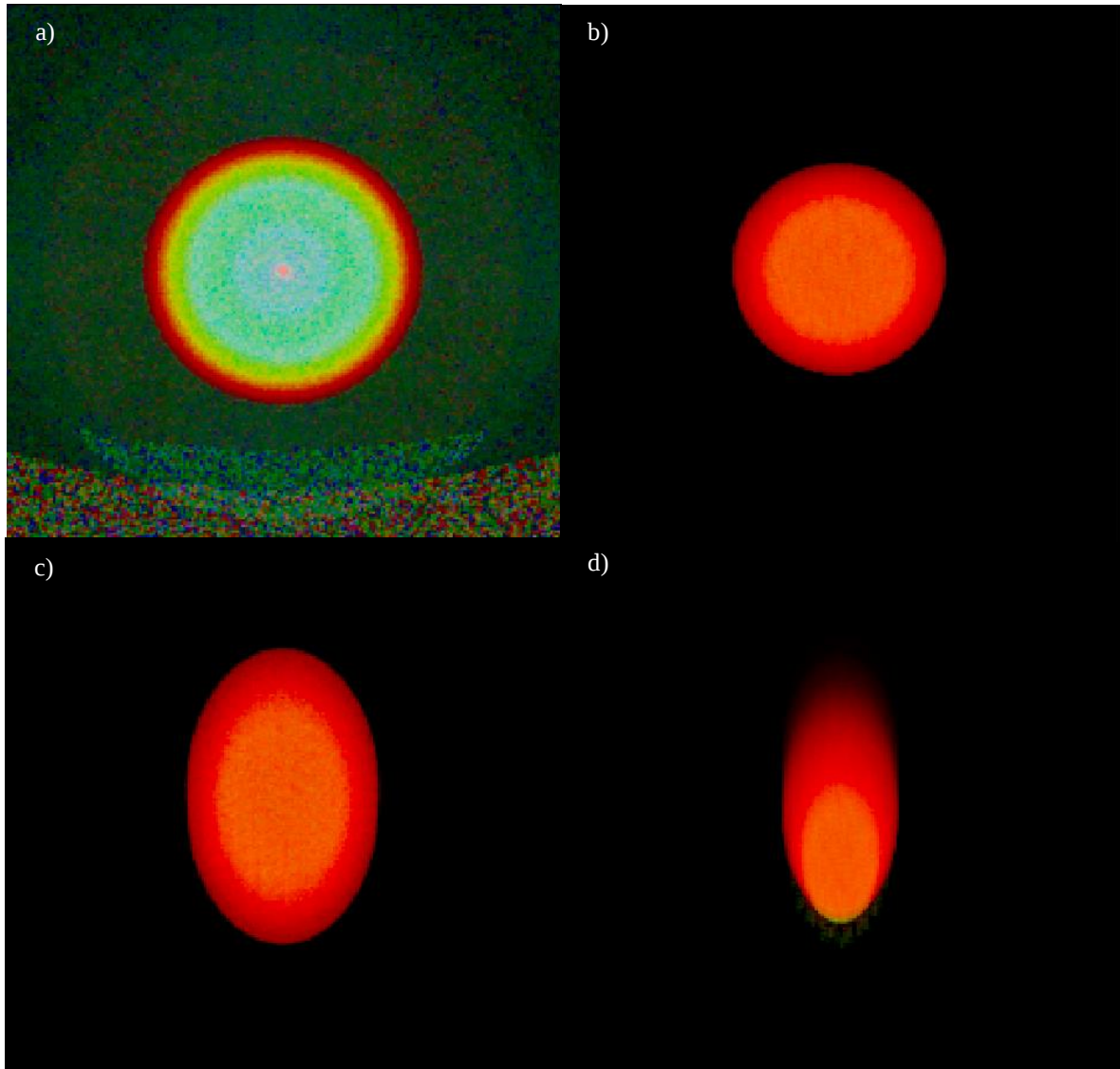


Figura 4.2. Manchas de luz para los detectores colocados en las superficies S1 de a) filtro Notch, b) espejo C1, c) red de difracción y d) espejo C2 del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.

Fuente: visor de detector en Zemax™.

La *tabla 4.1* muestra las potencias de salida en los detectores finales para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa y el sistema de espectrómetro Raman con divisor de haz cúbico. En la tabla se muestra que, la potencia de

salida en el detector final del sistema con divisor de haz de placa fue menor a la potencia de salida del detector final del sistema con divisor de haz cúbico, siendo esta última 4.9 veces mayor a la potencia de salida del sistema con divisor de haz de placa. Esto se debe a que, aunque el divisor de haz de placa tenga una anchura menor a la del divisor de haz cúbico y que sus superficies carezcan de cementos ópticos que absorben luz, el defecto de la desviación del haz y la generación de un haz de luz secundario, disminuye la entrada de radiación hacia el espectrómetro y al mismo tiempo al tener una imagen con dos haces, estos, al ser dispersados por la red de difracción generan manchas de luz difusas, afectando la resolución del sistema.

Tabla 4.1. Potencia de salida de los detectores finales en el sistema de espectrómetro Raman con divisor de haz de placa y sistema de espectrómetro Raman con divisor de haz cúbico.

Sistema	Potencia de salida (Watts)
Con un divisor de haz de placa	5.418E-03
Con un divisor de haz cubico	2.661E-02

Fuente: propia del autor.

La *figura 4.3* muestra la imagen a color y en escala de grises del detector principal en a) para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa y en b) para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico. En los incisos a) y b) se aprecian las manchas de luz por longitud de onda especificadas en la fuente puntual. En ambas figuras se observó un espacio entre la longitud de onda de 800 nm y la longitud de onda de 770 nm debido a la banda ancha de trabajo del filtro Notch. De igual manera se notó la presencia de astigmatismo en todas las manchas de luz causado por las reflexiones generadas en las superficies de los elementos ópticos. En a) se aprecia como la presencia del doble haz generado por el divisor de haz de placa generó una mancha de luz difusa para cada longitud de onda, aumentando el tamaño de la mancha de tal forma que la capacidad del sistema de distinguir longitudes de onda se vio afectada. En b) se aprecia que, las manchas de luz para cada longitud de onda no son difusas ya que los divisores de haz cúbicos, por sus características, no generan un doble haz a diferencia que los divisores de haz de placa.

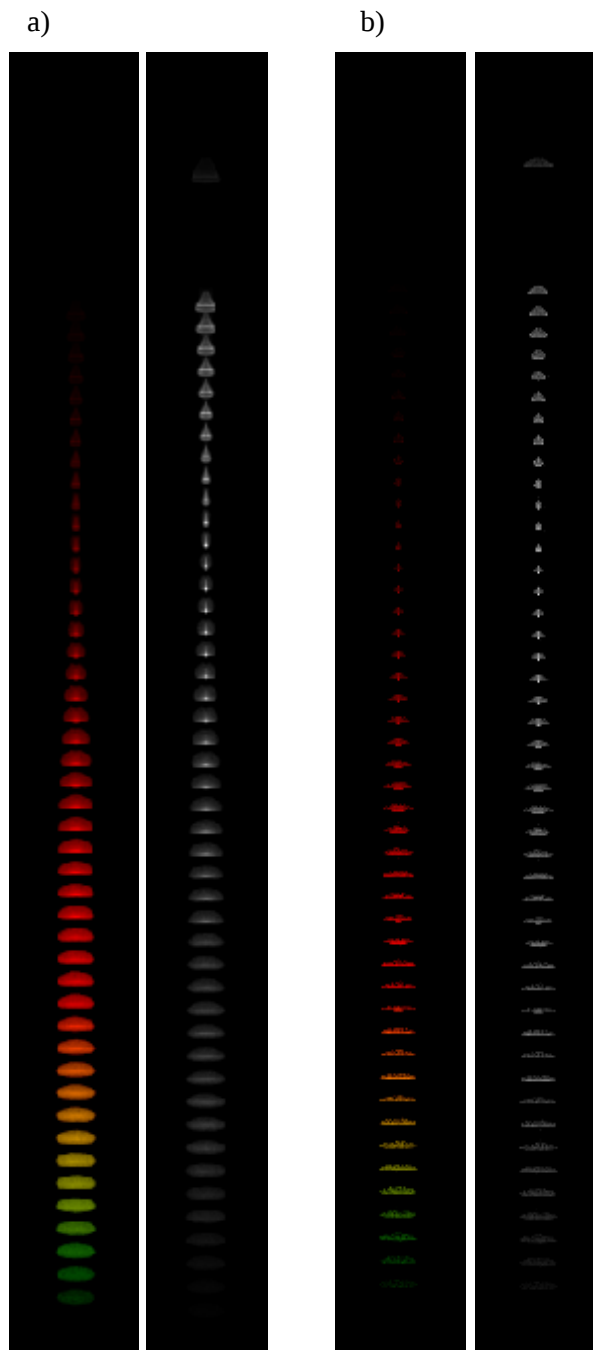


Figura 4.3. Manchas de luz en los detectores finales en a) sistema de espectrómetro Raman con divisor de haz de placa y b) sistema de espectrómetro Raman con divisor de haz cúbico.

Fuente: visor de detector en Zemax™.

4.3. Análisis del Tamaño de la Apertura

Para determinar el tamaño de apertura más adecuado para cada uno de los tres arreglos, se realizaron simulaciones en las cuales se modificó el tamaño de la apertura colocada en el punto focal de la lente de enfoque. Los tamaños de apertura analizados fueron de 5, 10, 25, 50, 75 y 100 μm . A continuación, se muestra los resultados de las simulaciones en ZemaxTM a diferentes tamaños de apertura para los tres sistemas.

4.3.1 Sistema de Espectrómetro Raman sin Reflector

La *tabla 4.2* muestra las potencias totales de salida en Watts (W) en el detector final para los diámetros de apertura de 5, 10, 25, 50, 75 y 100 μm para el sistema sin reflector. Al analizar los datos de la *tabla 4.2*, se observó que la potencia total de salida para las aperturas de 50, 75 y 100 μm , presentan un valor semejante.

Tabla 4.2. Potencias totales de salida en el sistema de espectrómetro Raman sin reflector a diferentes diámetros de apertura.

Diámetro de apertura (μm)	Potencia total de salida (W)
5	1.315E-03
10	2.615E-03
25	6.108E-03
50	1.016E-02
75	1.302E-02
100	1.500E-02

Fuente: propia del autor.

En la *figura 4.4* se muestran las manchas de luz a color y en escala de grises del detector final del sistema de espectrómetro Raman sin reflector a un diámetro de apertura en a) 5 μm , b) 10 μm , c) 25 μm , d) 50 μm , e) 75 μm , y f) 100 μm . En la figura observamos que, al aumentar el diámetro de la apertura, aumenta la entrada de luz al espectrómetro, lo que permite la llegada de más rayos al detector final del sistema sin reflector. Al mismo tiempo, se aprecia que entre más grande sea el diámetro de la apertura, más evidente es la presencia de aberraciones, en este caso notamos la presencia de astigmatismo. Al observar la mancha de luz del detector final en el inciso f) notamos que, a longitudes de onda cortas, el astigmatismo se presentó sobre el eje tangencial, mientras que al acercarnos a ondas largas, el astigmatismo se presentó sobre el eje sagital. Teniendo en cuenta la *tabla 3.5* presentada en el capítulo III, las longitudes de onda que se presentaron sobre los detectores finales son aquellas que corresponden a los valores de 800 nm y 770 a 550 nm, donde el punto de menor confusión, para el sistema sin reflector a diferentes diámetros de apertura, se presenta sobre la longitud de onda de 740 nm. La presencia de astigmatismo se debe a la constante reflexión

y refracción de los rayos sobre las superficies de los elementos ópticos puesto que, al no transmitir el 100 % de la luz, dadas sus características de transmisión y reflexión especificadas en el capítulo III, las superficies refractan una parte del rayo de luz y reflejan la otra parte desviándolo de su trayectoria inicial.

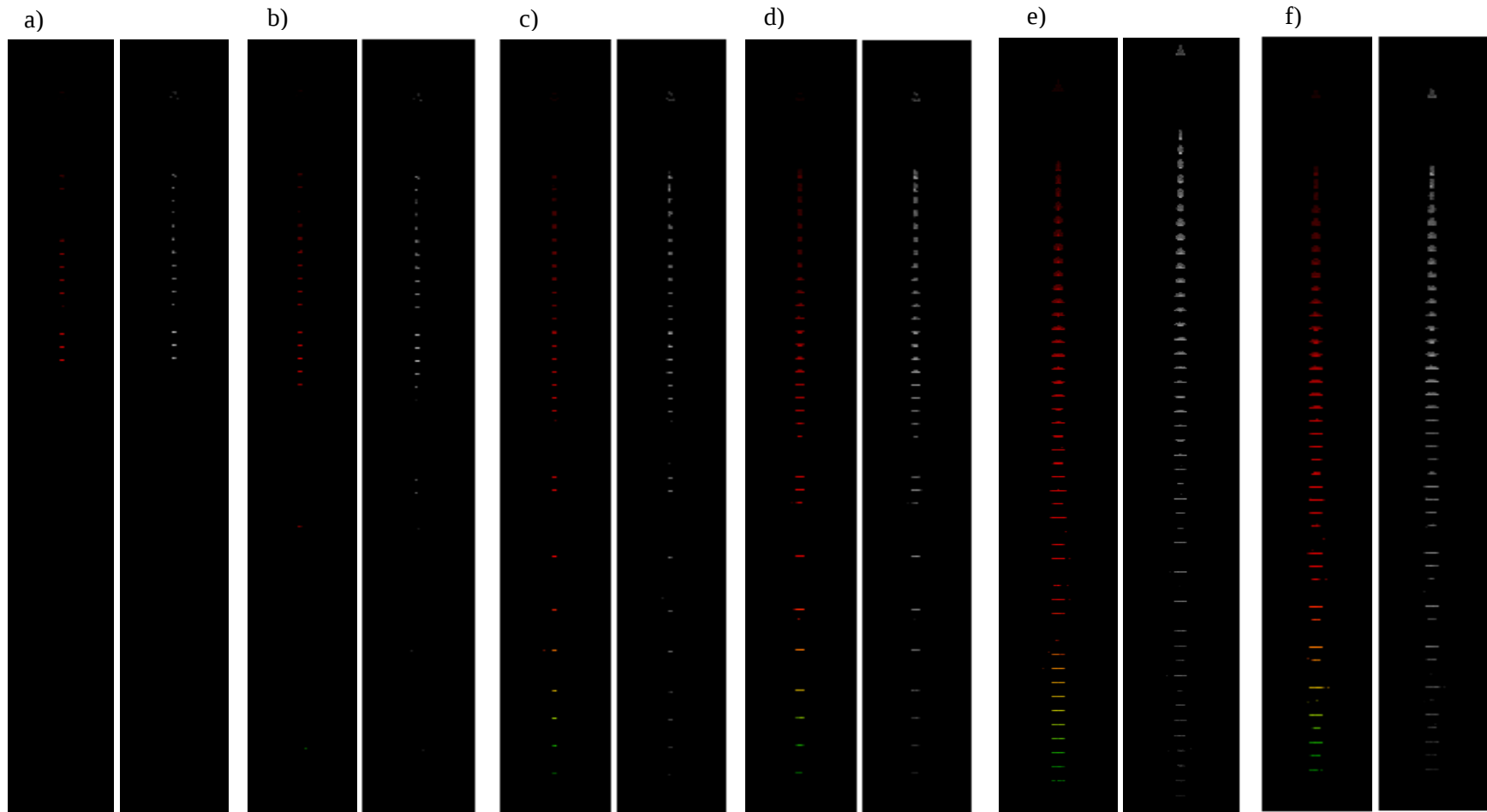


Figura 4.4. Manchas de luz en el detector final del sistema de espectrómetro Raman sin reflector con diámetros de apertura en a) 5 μm , b) 10 μm , c) 25 μm , d) 50 μm , e) 75 μm y f) 100 μm .

Fuente: visor de detector en ZemaxTM.

Para analizar la dispersión de las manchas sobre el detector final, se realizó una gráfica en MATLAB® en la cual se graficaron los datos del vector columna central sobre el eje Y del detector final del cual se obtuvo la información de 2600 píxeles pertenecientes a las primeras 31 manchas posteriores a la longitud de onda de corte del filtro Notch que correspondieron a los valores de 770 a 550 nm, para la apertura de 5, 10, 25, 50, 75 y 100 μm . Con la gráfica se analizó la relación entre el diámetro de la apertura, la irradiancia en watts por unidad de área (W/mm^2) y el tamaño de la mancha de luz sobre el detector final. En la *figura 4.5* se muestran las irradiancias pico por píxel para las 31 manchas. Al analizar la gráfica, se observó que la longitud de onda de 740 nm, la cual correspondió con el punto de menor confusión, fue la que presentó la irradiancia pico mayor, con un valor igual a 11 W/mm^2 .

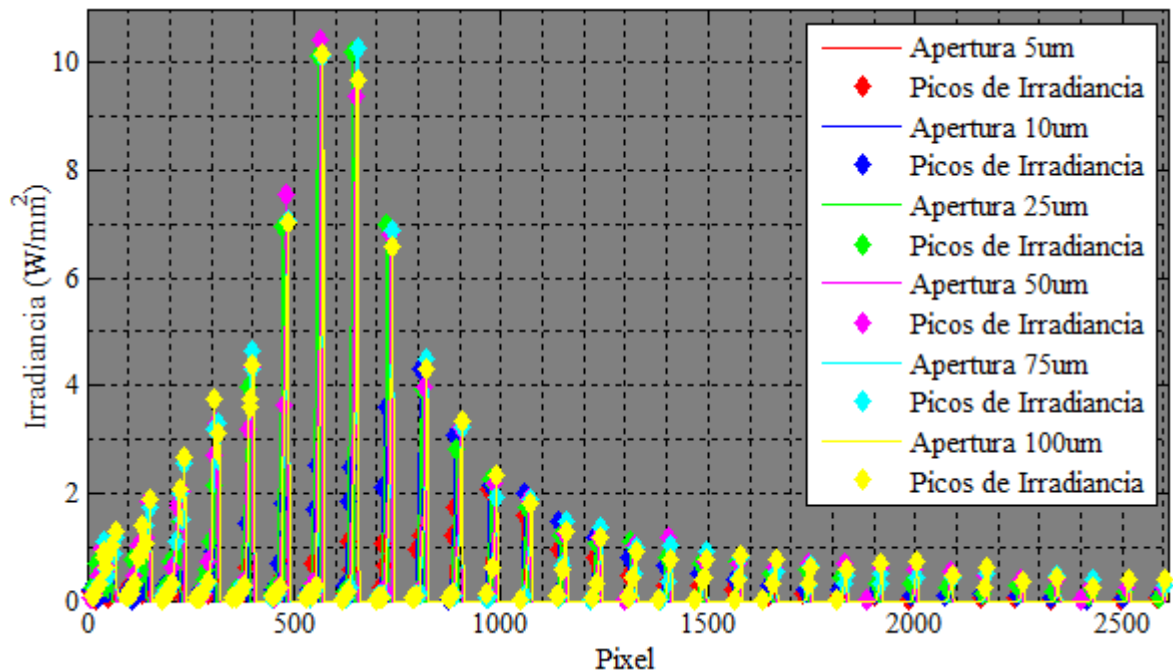


Figura 4.5. Gráfica de picos de irradiancia por píxel a diferentes diámetros de apertura para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector.

Fuente: MATLAB®.

La *figura 4.6* muestra la gráfica de la longitud de onda de 740 nm correspondiente al valor de mayor irradiancia para el sistema sin reflector. En la gráfica se observó que aunque la irradiancia pico para las aperturas de 25, 50, 75 y 100 μm presentaron valores similares, la distribución sobre el número de píxeles aumentó conforme aumentó el diámetro de la apertura. Para la apertura de 25 μm se tuvo una distribución lineal de 39 píxeles, para la apertura de 50 μm de 45 píxeles, para la apertura de 75 μm de 52 píxeles y para la apertura de 100 μm de 55 píxeles.

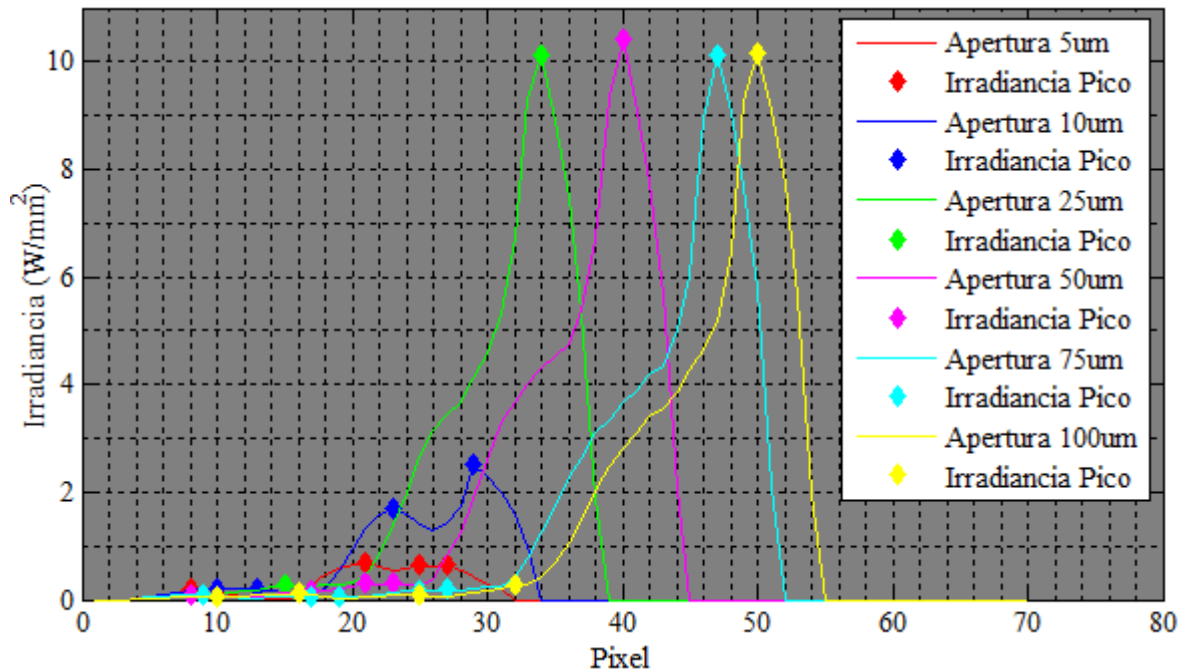


Figura 4.6. Gráfica de picos de irradiancia por pixel para la longitud de onda de 740 nm a diferentes diámetros de apertura en el sistema de espectrómetro Raman sin reflector.

Fuente: MATLAB®.

Con la información obtenida se determinó que la apertura más adecuada para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector, fue la apertura con un diámetro de 50 μm , ya que esta permite la suficiente entrada de luz hacia el espectrómetro manteniendo una alta potencia de salida con un astigmatismo moderado.

4.3.2 Sistema de Espectrómetro Raman con Reflector Elíptico

La *tabla 4.3* muestra las potencias totales de salida en watts (W) medidas en el detector final para los diámetros de apertura de 5, 10, 25, 50, 75 y 100 μm para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico. Al analizar los datos de la tabla, se observó que la potencia total de salida a diferentes diámetros de apertura para el sistema con reflector elíptico, contrario al sistema sin reflector no presentaron valores semejantes.

Tabla 4.3. Potencias totales de salida en el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico a diferentes diámetros de apertura.

Diámetro de apertura (μm)	Potencia total de salida (W)
5	2.668E-03
10	5.443E-03
25	1.385E-02
50	2.873E-02
75	4.430E-02
100	6.110E-02

Fuente: propia del autor.

En la *figura 4.7* se muestran las manchas de luz a color y en escala de grises del detector final del sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico a un diámetro de apertura en a) 5 μm , b) 10 μm , c) 25 μm , d) 50 μm , e) 75 μm , y f) 100 μm . En la figura observamos que, al aumentar el diámetro de la apertura, aumentó la entra de luz al espectrómetro, lo que permitió la llegada de más rayos al detector final del sistema con reflector elíptico. Al mismo tiempo, observamos que entre más grande fue el diámetro de la apertura, más evidente fue la presencia de astigmatismo sobre el eje sagital, lo cual se debió a que en este sistema se trabajó con dos aperturas: la primera en el punto focal F2 del reflector elíptico y la segunda en el punto focal de la lente de enfoque. Dado que solo se modificó la apertura colocada en el punto focal de la lente de enfoque y a la apertura en el punto focal F2 del reflector quedó fija a 0.25 mm, debido al tamaño de la apertura con diámetro fijo y las constantes reflexiones en los elementos ópticos, algunos de los rayos que pasaron a través de la apertura fija, se encontraban fuera de foco y como consecuencia, se generaron manchas de luz difusas sobre el detector final en el sistema con reflector elíptico con una mayor área de incidencia que aquellas manchas en el sistema sin reflector. De igual manera, se notó un aumento en la intensidad de las manchas de luz debido a que el reflector elíptico, permitió la redirección de una mayor cantidad de los rayos dispersados por la fuente puntual hacia el punto focal de la lente colectora con igual apertura angular. Para este sistema, el punto de menor confusión se presentó sobre la mancha correspondiente a la longitud de onda de 690 nm.

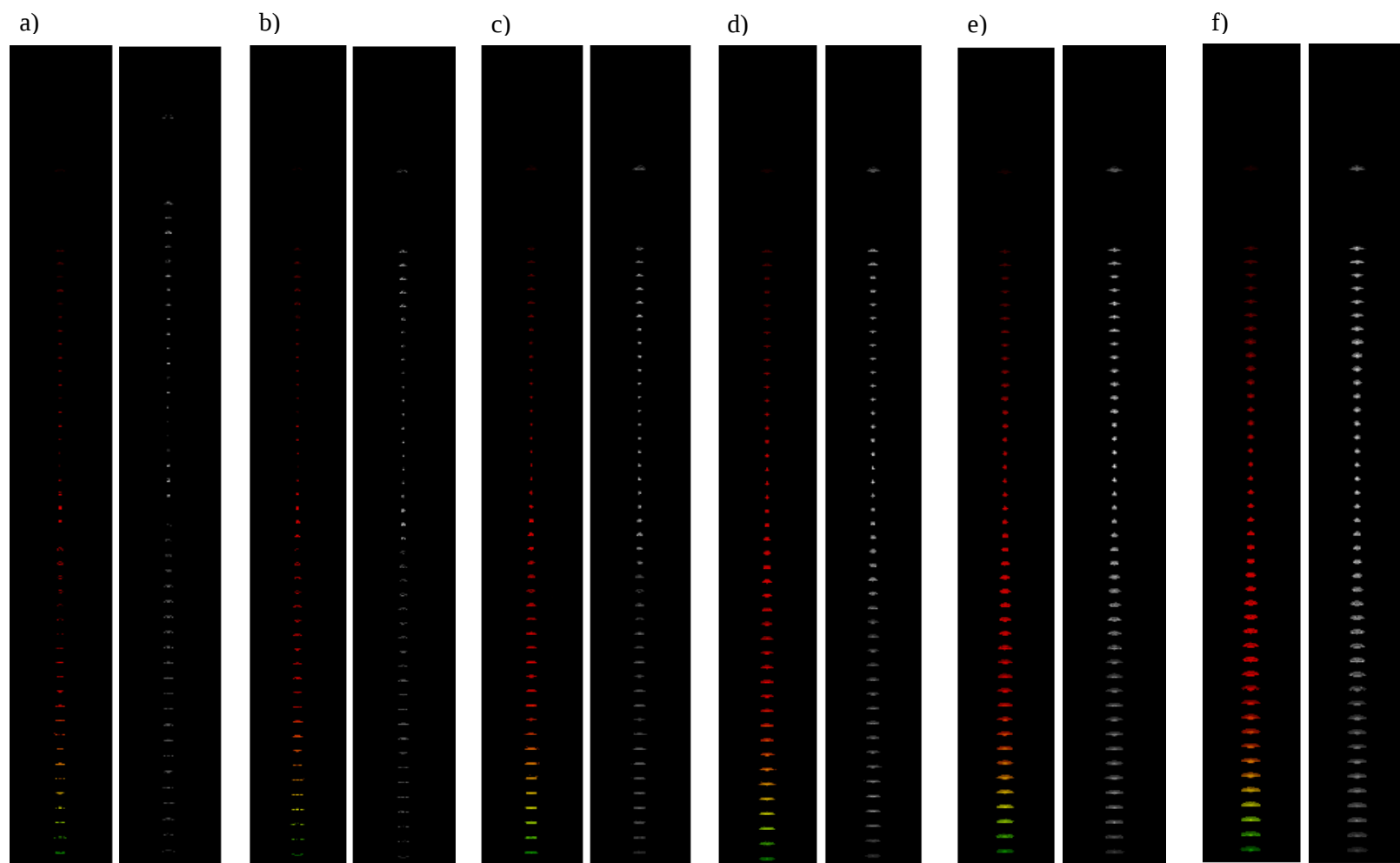


Figura 4.7. Manchas de luz en el detector final del sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico con diámetros de apertura en a) 5 μm , b) 10 μm , c) 25 μm , d) 50 μm , e) 75 μm y f) 100 μm .

Fuente: visor de detector en Zemax™.

Para determinar el tamaño de apertura para el sistema con reflector elíptico, se realizó una gráfica en MATLAB® con las mismas características que la gráfica en MATLAB® para el sistema sin reflector para la apertura de 5, 10, 25, 50, 75 y 100 μm . Con la gráfica, se analizó la relación entre el diámetro de la apertura, la irradiancia en watts por unidad de área (W/mm^2) y el tamaño de la mancha de luz sobre el detector final.

En la *figura 4.9* se muestra la gráfica de las irradiancias por pixel para el vector columna central para las primeras 31 entradas de longitudes de onda de la banda de paso anteriores a la longitud de onda de corte del filtro Notch a diferentes diámetros de apertura. En la figura observamos en este caso que solo los valores de irradiancia pico para las aperturas de 75 y 100 μm presentaron un valor semejante para las longitudes de onda representadas en la gráfica. De igual manera, se observó en la gráfica que la longitud de onda de 690 nm, la cual correspondió con el punto de menor confusión, fue la que presentó la irradiancia pico mayor, con un valor igual a $15 \text{ W}/\text{mm}^2$, donde al comparar este valor con la irradiancia pico del sistema sin reflector, solo se obtuvo un aumento de 1.36 veces.

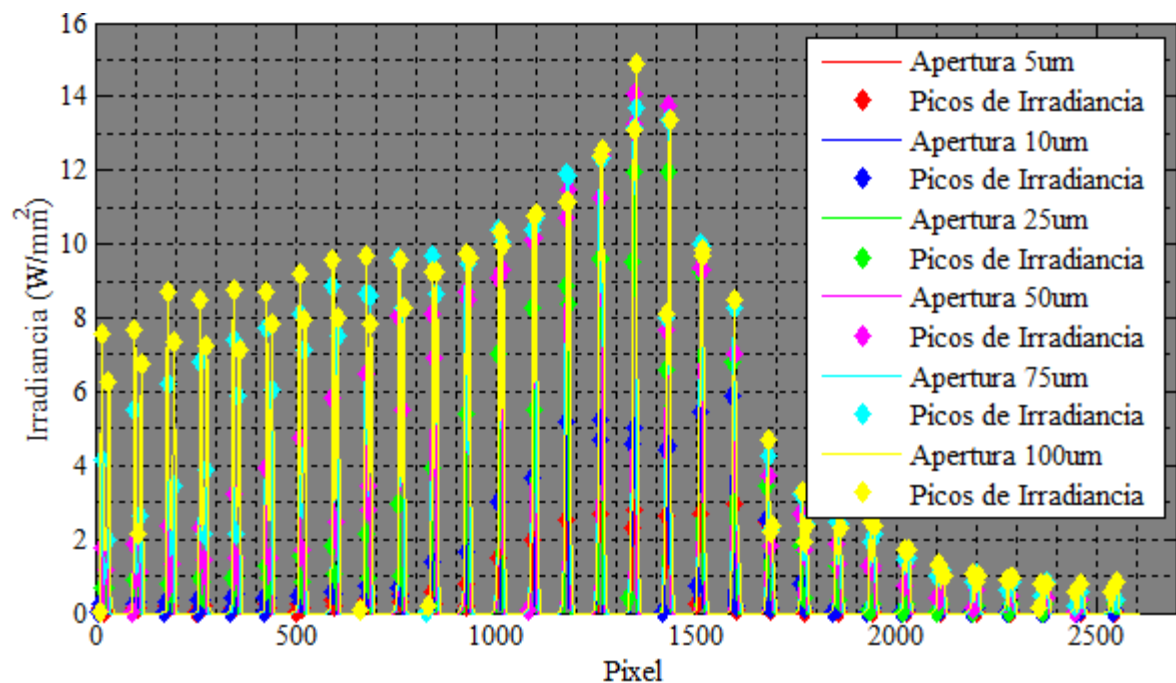


Figura 4.8. Gráfica de picos de irradiancia por pixel a diferentes diámetros de apertura para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.

Fuente: MATLAB®.

La *figura 4.9* muestra la gráfica de la longitud de onda de 690 nm correspondiente al valor de mayor irradiancia para el sistema con reflector elíptico. En la gráfica se observó que

aunque las intensidades pico para las aperturas de 75 y 100 μm presentan valores similares, la distribución sobre el número de pixeles aumenta conforme aumenta el diámetro de la apertura. Para la apertura de 75 μm se tiene una distribución lineal de 35 pixeles y para la apertura de 100 μm de 40 pixeles.

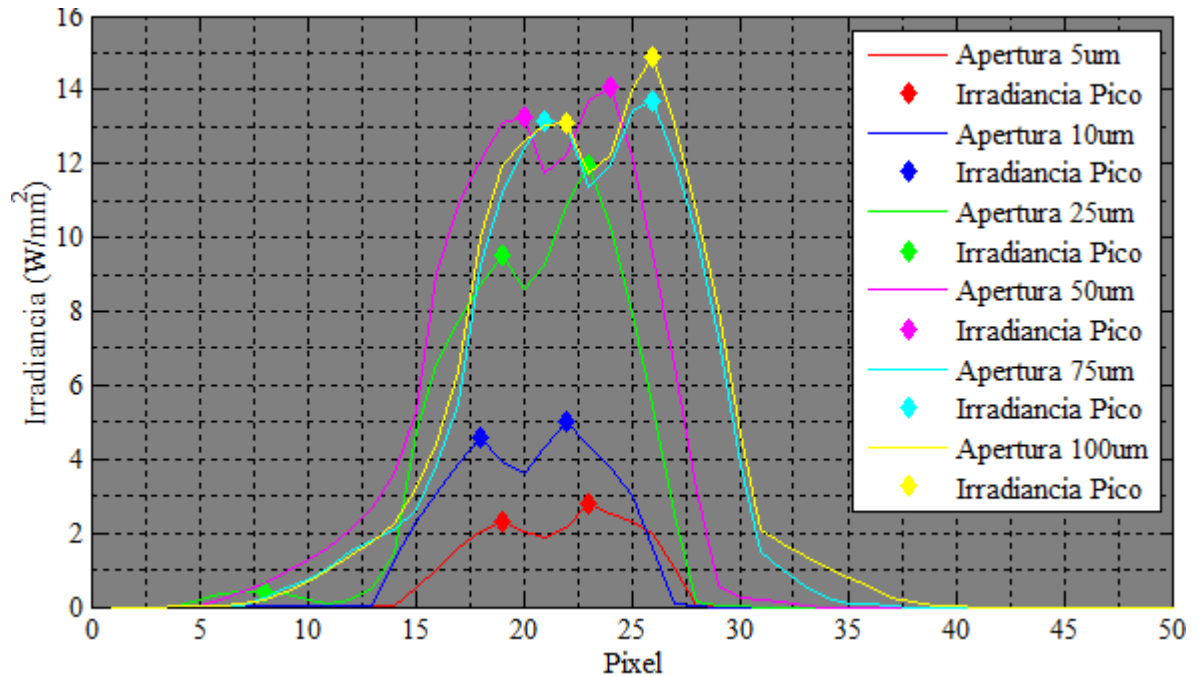


Figura 4.9. Gráfica de picos de intensidad para la longitud de onda de 740 nm a diferentes diámetros de apertura en el sistema de espectrómetro Raman sin reflector.

Fuente: MATLAB®.

Con la información obtenida, se determinó que la apertura más adecuada para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico, fue la apertura con un diámetro de 75 μm , ya que esta permite la suficiente entrada de luz hacia el espectrómetro con un astigmatismo moderado y manteniendo una alta potencia de salida con un valor de $4.430\text{E-}02$ W, teniendo como resultado, un aumento de 4.36 veces con respecto al sistema de espectrómetro Raman sin reflector.

4.3.3. Sistema de Espectrómetro Raman con Reflector Parabólico

La *tabla 4.4* muestra las potencias totales de salida en watts (W) en el detector final para los diámetros de apertura de 5, 10, 25, 50, 75 y 100 μm para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico. Al analizar los datos presentados en la tabla, se observó que la potencia total de salida para las diferentes aperturas, fueron menores a aquellas en el sistema con reflector elíptico, lo cual se debió a que el sistema con reflector elíptico presento

una mayor dispersión de los datos sobre el detector final que el sistema con reflector parabólico.

Tabla 4.4. Potencias totales de salida en el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico a diferentes diámetros de apertura.

Diámetro de apertura (μm)	Potencia total de salida (W)
5	5.544E-03
10	1.030E-02
25	1.973E-02
50	3.294E-02
75	4.516E-02
100	5.613E-02

Fuente: propia del autor.

En la *figura 4.10* se muestran las manchas de luz a color y en escala de grises del detector final del sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico, a un diámetro de apertura en a) 5 μm , b) 10 μm , c) 25 μm , d) 50 μm , e) 75 μm , y f) 100 μm . En la figura podemos observar que al aumentar el diámetro de la apertura, aumenta la entrada de luz al espectrómetro, lo que permite la llegada de más rayos al detector final del sistema con reflector parabólico. A comparación de las manchas de luz de los reflectores finales del sistema de espectrómetro Raman sin reflector y espectrómetro Raman con reflector elíptico, el astigmatismo sagital y transversal en las manchas de luz del detector final del sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico es mínimo. Esto se debe a que el reflector parabólico genera la entrada de un haz colimado hacia el sistema, lo que permite que los rayos entren paralelos al eje óptico de la lente reductora, causando que las reflexiones en las superficies de los elementos sean a un ángulo de cero grados con respecto a la normal del elemento. Para este sistema, el punto de menor confusión se presentó sobre la mancha correspondiente a la longitud de onda de 740 nm al igual que en el sistema sin reflector.

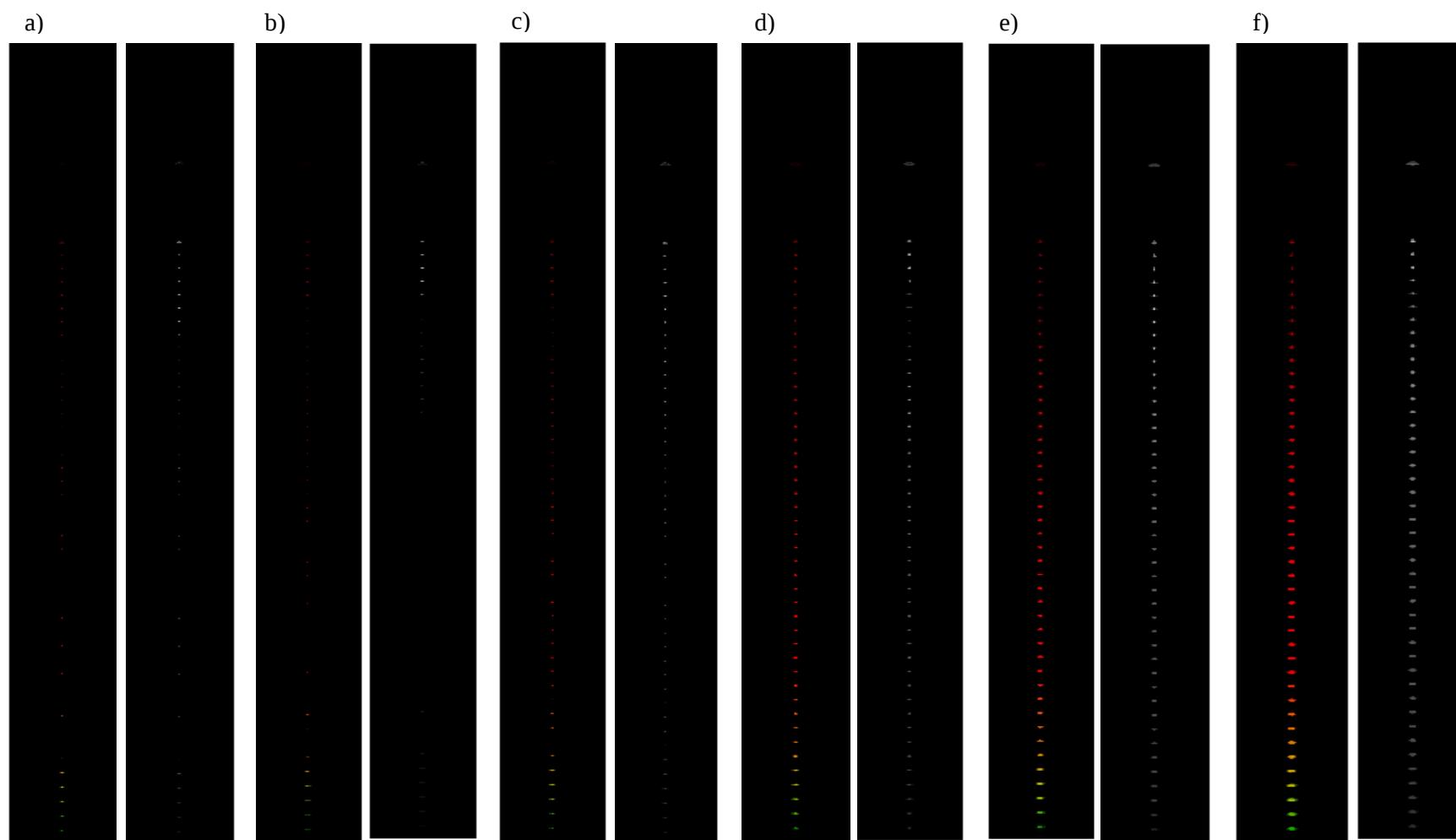


Figura 4.10. Manchas de luz en el detector final del sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico con diámetros de apertura en a) 5 μm , b) 10 μm , c) 25 μm , d) 50 μm , e) 75 μm y f) 100 μm .

Fuente: visor de detector en ZemaxTM.

Para determinar el tamaño de apertura para el sistema con reflector parabólico, se realizó una gráfica en MATLAB® con las mismas características que la gráfica en MATLAB® para el sistema sin reflector para la apertura de 5, 10, 25, 50, 75 y 100 μm . Con la gráfica, se analizó la relación entre el diámetro de la apertura, la irradiancia en watts por unidad de área (W/mm^2) y el tamaño de la mancha de luz sobre el detector final.

En la *figura 4.12* se muestra la gráfica de las irradiancias por pixel para el vector columna central para las primeras 31 entradas de longitudes de onda de la banda de paso posteriores a la longitud de onda de corte del filtro Notch a diferentes diámetros de apertura. En la figura se muestran los valores de irradiancia pico para las aperturas de 50, 75 y 100 μm presentan un valor semejante para las longitudes de onda representadas en la gráfica. De igual manera, se observó en la gráfica que la longitud de onda de 740 nm, la cual correspondió con el punto de menor confusión, fue la que presentó la irradiancia pico mayor, con un valor igual a $100 \text{ W}/\text{mm}^2$, donde al comparar este valor con la irradiancia pico del sistema sin reflector, solo se obtuvo un aumento de 9.09 veces.

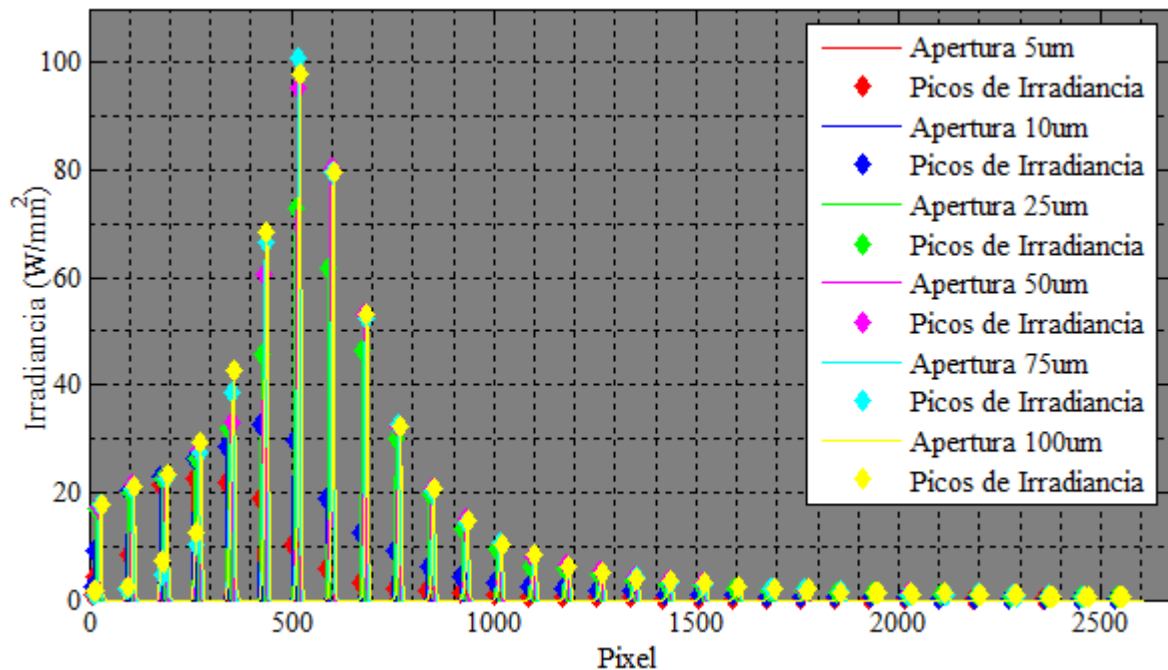


Figura 4.11. Gráfica de picos de intensidad a diferentes diámetros de apertura para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.

Fuente: MATLAB®.

La *figura 4.12* muestra la gráfica de la longitud de onda de 740 nm correspondiente al valor de mayor irradiancia para el sistema con reflector parabólico. En la gráfica se observó

que, aunque las irradiancias pico para las aperturas de 50, 75 y 100 μm presentaron valores similares, la distribución sobre el número de píxeles aumentó conforme aumentó el diámetro de la apertura. Para la apertura de 50 μm se tuvo una distribución lineal de 22 píxeles, para la apertura de 75 μm de 26 y para la apertura de 100 μm de 30 píxeles.

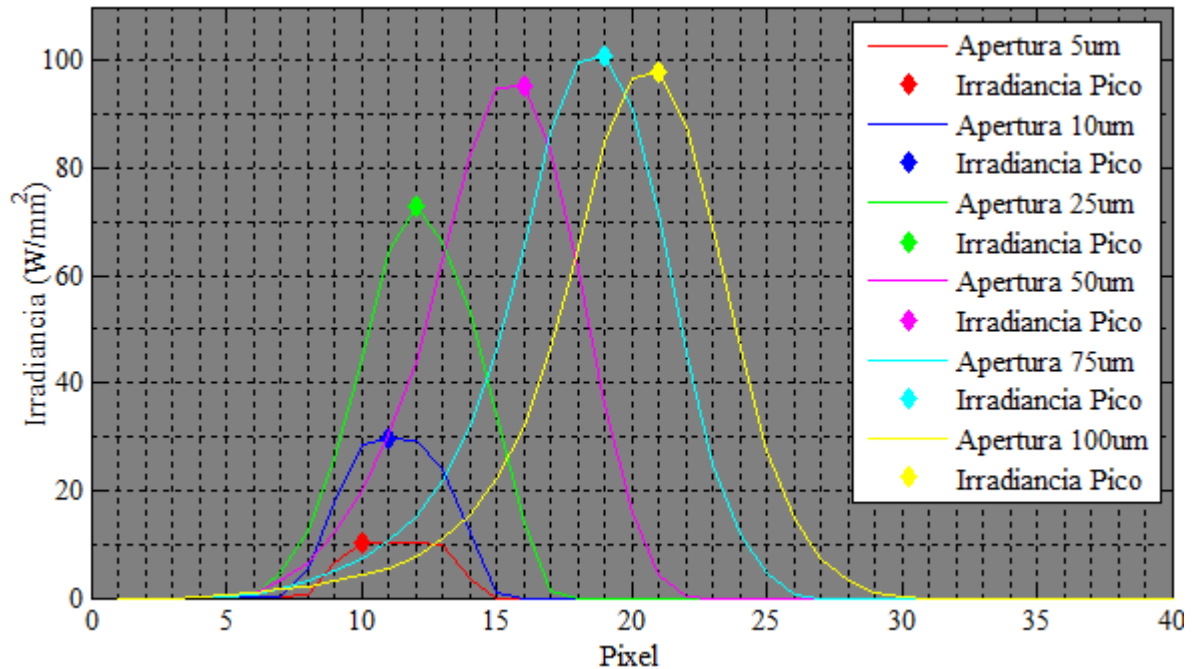


Figura 4.12. Gráfica de picos de irradiancia por pixel para la longitud de onda de 740 nm a diferentes diámetros de apertura en el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.

Fuente: MATLAB®.

Con la información obtenida se determinó que la apertura más adecuada para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico, fue la apertura con un diámetro de 50 μm , ya que esta permite la suficiente entrada de luz hacia el espectrómetro manteniendo una mínima presencia de astigmatismo con una alta potencia de salida con valor igual a $3.294\text{E-}02$, teniendo como resultado, un aumento de 2.82 veces con respecto al sistema de espectrómetro Raman sin reflector.

4.4. Análisis de Medianas Para los Tres Sistemas

En la *tabla 4.5* observamos la variación de la potencia total de salida en los tres sistemas, teniendo la potencia total de salida en el espectrómetro Raman con reflector elíptico un aumento del 77 % con respecto al sistema sin reflector, mientras que el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico presentó un aumento del 65 % con respecto a la potencia de salida del sistema sin reflector. Para validar los resultados y determinar qué

sistema presentó un aumento de potencia de salida con un astigmatismo mínimo, se realizó el análisis de diferencia de medianas mediante diagramas de cajas y bigotes para los tres sistemas en conjunto.

Tabla 4.5. Potencia de salida para los tres sistemas.

Sistema	Potencia de salida (Watts)
Sin reflector	1.016E-02
Con reflector elíptico	4.430E-02
Con reflector parabólico	2.873E-02

Fuente: propia del autor.

Para el desarrollo de la gráfica, se tomaron todos los datos correspondientes al conjunto de datos de las manchas de luz en los detectores finales, para cada uno de los tres sistemas: el sistema sin reflector, sistema con reflector elíptico y sistema con reflector parabólico. Posteriormente, se identificaron los datos atípicos presentes en cada conjunto de datos. La *tabla 4.6* muestra la cantidad de datos recolectados de los detectores finales, la cantidad de datos atípicos y la cantidad de datos finales para cada sistema.

Tabla 4.6. Datos iniciales, atípicos y finales para cada uno de los sistemas.

Sistema	Datos iniciales	Datos atípicos	Datos finales
Sin reflector	18,963	761	18,202
Con reflector elíptico	24,963	2,477	22,486
Con reflector parabólico	11,084	381	10,703

Fuente: propia del autor.

En la *figura 4.13* se muestra el diagrama de cajas y bigotes, en color verde para el sistema sin reflector, en color naranja para el sistema con reflector elíptico y en color amarillo para el sistema con reflector parabólico. Claramente observamos como los datos para los tres sistemas, presentan una distribución no normal, ya que el valor de la mediana se encuentra sesgado hacia el valor mínimo. De igual manera, se aprecia como el gráfico para el sistema con reflector parabólico, sobresale muy por encima de las otras, mientras que el gráfico para el sistema elíptico presenta una forma similar a aquella para el sistema sin reflector. En color rojo y azul, observamos los datos atípicos leves y los datos atípicos extremos, respectivamente. Para los datos en el sistema sin reflector y el sistema con reflector elíptico se generaron una mayor cantidad de datos extremos debido a que la dispersión de los datos sobre el detector final para cada sistema es mayor a comparación del sistema con reflector

parabólico, en el cual los datos atípicos son leves ya que en este sistema los datos no se encuentran tan dispersos sobre el detector final. En la *tabla 4.7* se muestran los valores calculados de la mediana, el valor mínimo, el valor del primer cuartil (Q_{25}), la mediana, el valor del tercer cuartil (Q_{75}) y el valor máximo, para cada uno de los sistemas.

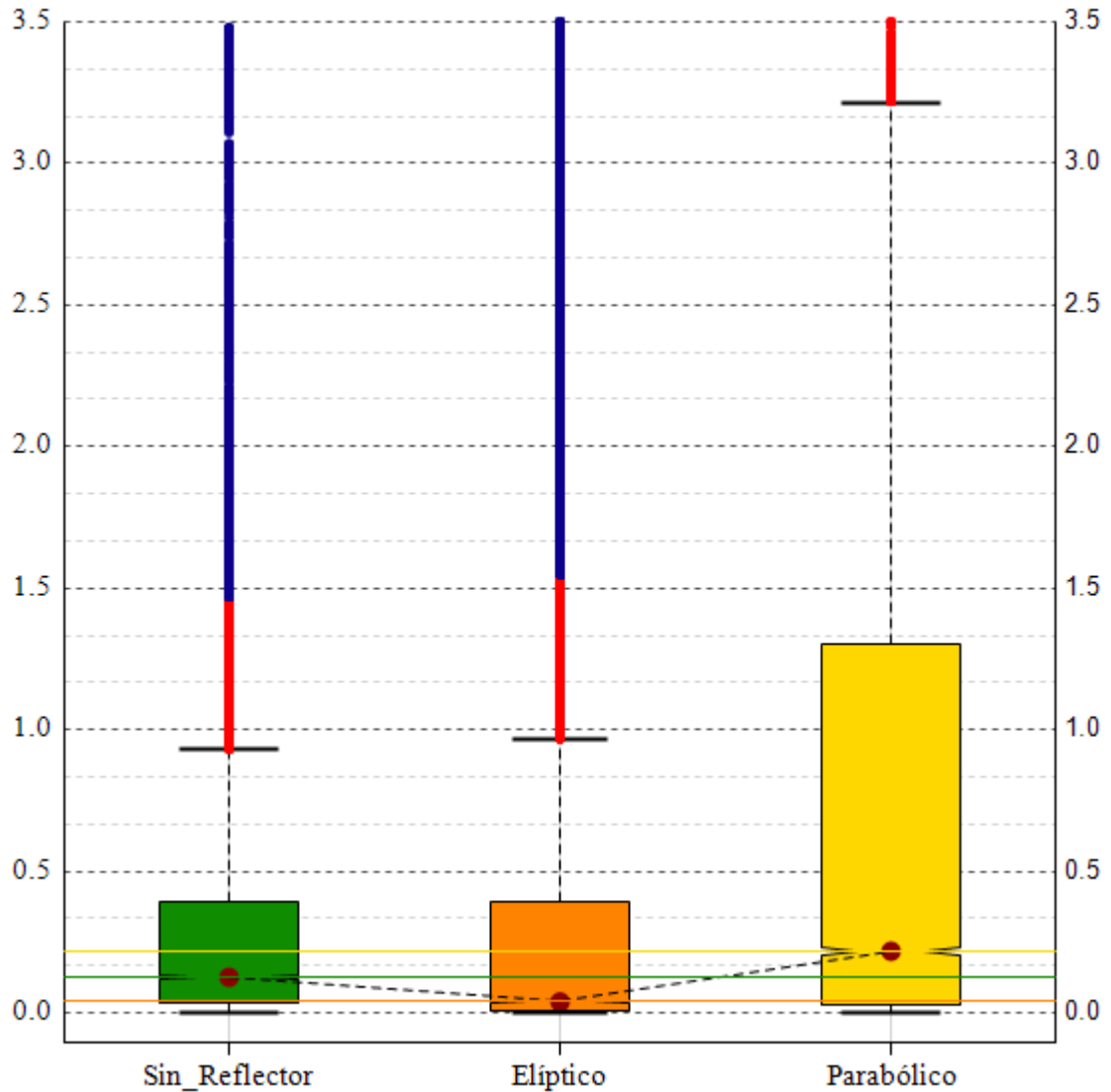


Figura 4.13. Diagrama de caja de los datos del sistema de espectrómetro Raman sin reflector, espectrómetro Raman con reflector elíptico y espectrómetro Raman con reflector parabólico.

Fuente: NCSS®.

Tabla 4.7. Valor mínimo, primer cuartil, mediana, tercer cuartil y valor máximo para las gráficas de caja para cada uno de los sistemas.

Sistema	Valor mínimo	Q25	mediana	Q75	Valor máximo
Sin reflector	0.00584	0.0356	0.126	0.394	0.885
Con reflector elíptico	0.00072	0.00531	0.039	0.39	0.970
Con reflector parabólico	0.00027	0.00782	0.131	1.29	3.23

Fuente: propia del autor.

En la *figura 4.15* podemos observar más claramente el intervalo de confianza para la mediana de cada uno de los sistemas. En la figura, apreciamos como los intervalos de confianza para los tres sistemas no se traslapan entre sí, lo que significa que si existen diferencias significativas, con un nivel de confianza del 95 % entre los sistemas sin reflector, con reflector elíptico y con reflector parabólico.

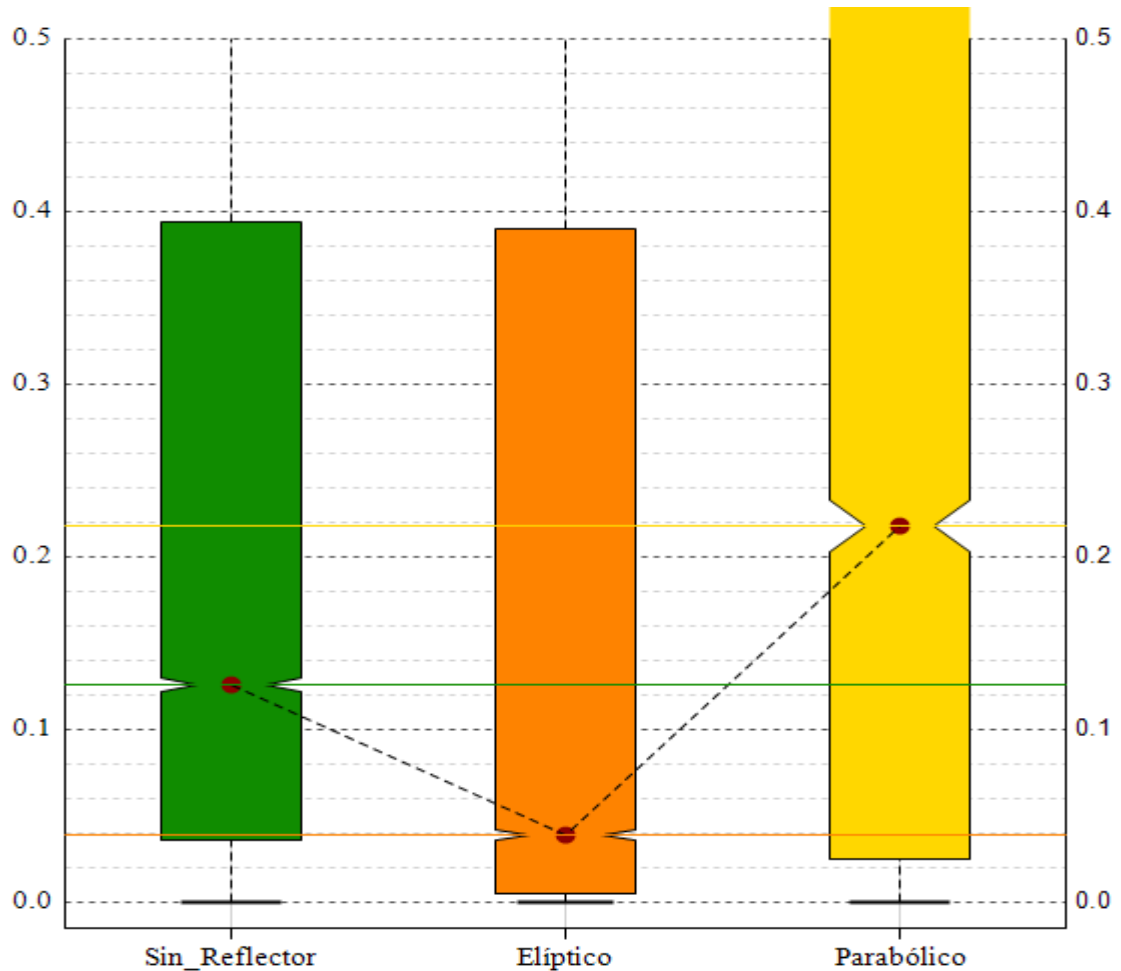


Figura 4.14. Diagrama de caja donde se pareció el intervalo de confianza para la mediana de los datos del sistema sin reflector, con reflector elíptico y con reflector parabólico.

Fuente: NCSS®.

Al comparar los datos proporcionados en las *tablas 4.5 y 4.7* y, al observar la gráfica en la *figura 4.14* podemos deducir lo siguiente:

- Aunque existió una diferencia estadísticamente significativa entre los datos del sistema sin reflector y el sistema con reflector elíptico, los datos en el sistema con reflector elíptico se encontraron sesgados hacia abajo lo que significa que sí aunque el sistema con reflector elíptico si logro el aumentó la colección de radiación dispersada por la fuente puntual, las manchas en el detector final de este sistema fueron más difusas que aquellas en el sistema sin reflector por lo que datos en el sistema con reflector elíptico presentaron una mayor cantidad de valores atípicos en comparación al sistema sin reflector y el sistema con reflector parabólico.
- Además de que el sistema con reflector parabólico mostró el aumento más estadísticamente significativo para la colección de luz dispersada por la fuente puntual entre los tres sistemas, las manchas en el detector final para cada longitud de onda presentaron una forma más puntual comparadas con las manchas presentes en los detectores finales en los sistemas sin reflector y con reflector elíptico. Debido a esto, las gráfica de cajas y bigotes para el sistema sin reflector y el sistema con reflector elíptico presentaron una mayor cantidad de datos atípicos leves y extremos que la gráfica de cajas y bigotes para el sistema con reflector parabólico, el cual mostro una menor cantidad de datos atípicos leves.

Capítulo V

Conclusiones y Trabajo a Futuro

Las conclusiones obtenidas en la presente tesis, así como el trabajo a futuro identificado se presentan a continuación.

5.1. Conclusiones

Hoy en día, la necesidad de entender los efectos de la contaminación ambiental en materia de material particulado, ha aumentado la exigencia de sistemas de análisis cualitativo y cuantitativo con los cuales sea posible estudiar la composición química, elemental y morfológica de material particulado. Los sistemas de espectrometría Raman, han demostrado ser una herramienta con la cual es posible conocer la composición química, tanto de muestras conglomeradas como de muestras individuales de partículas contaminantes del aire. No obstante, su adquisición puede ser a veces difícil para las instituciones, por lo que algunos investigadores, han desarrollado sistemas de espectrometría Raman sencillos con elementos de fácil acceso, para lograr la realización de investigaciones en el campo de la contaminación ambiental. Sin embargo, su principal problema es la intensidad de la señal Raman, la cual llega a ser muy pequeña y en ocasiones imperceptible. Los resultados de este trabajo de tesis, pueden ayudar en el desarrollo de nuevos sistemas de espectrometría Raman sencillos, con los cuales se logra el aumento de la intensidad de la señal Raman.

La técnica utilizada para lograr el aumento de intensidad en un espectrómetro Raman es el diseño y su simulación, innovando la colocación de dos tipos de colectores de luz: un reflector parabólico y un reflector elíptico.

Se realizó un análisis teórico y simulaciones sobre dos arreglos ópticos propuestos como sistemas de espectrometría Raman, cuyos resultados fueron comparados con aquellos de un sistema de espectrometría Raman sin reflector. Las principales características que fueron buscadas en ambos sistemas, fue el aumento en la colección de radiación emitida por parte de una fuente puntual para lograr el aumento en la intensidad de la señal Raman con la mínima presencia de aberraciones en las manchas de luz sobre un detector final.

Durante el análisis teórico de los elementos que se buscaba constituyeran el sistema de espectrómetro Raman, se encontraron elementos de fácil adquisición que permiten la colección, redirección y dispersión de la señal emitida por una fuente puntual, como es el caso de tres lentes asféricas: la primera para colimar la luz proveniente de la fuente laser, la segunda para coleccionar la radiación dispersada por una fuente puntual y la tercera para enfocar la luz colectada hacia la entrada del espectrómetro, las cuales, debido a su forma, permiten disminuir o eliminar la aberración esférica. Un divisor de haz cúbico por su parte, permitió la redirección de la luz colectada por la lente asférica hacia la entrada del espectrómetro eliminando la desviación del haz causada por un divisor de haz de placa. Dos espejos cóncavos se utilizaron para redirigir la luz a través del espectrómetro y una red de difracción de rejillas para separar los rayos de luz por longitud de onda. Además, el uso de reflectores incrementó la entrada de la señal emitida para el sistema con reflector elíptico en un 77 % y para el sistema con reflector parabólico en un 65 %.

Todos los elementos ópticos utilizados para los sistemas de espectrometría Raman, fueron diseñados según sus características físicas, las cuales se encontraron en las hojas de datos proporcionadas por el fabricante.

El trazo de rayos en las simulaciones de los arreglos ópticos, permitió analizar cómo se reflejaban y transmitían los rayos emitidos tanto por la fuente láser como por la fuente puntual a través de los elementos ópticos. Asimismo, el trazo de rayos permitió observar que, aunque se utilizaron lentes asféricas y se trabajara lo más cerca del área paraxial de los espejos cóncavos con una lente asférica con apertura numérica igual a 0.13, la aberración astigmatismo se observó en las manchas de luz del detector final en los tres sistemas, debido a las constantes reflexiones sobre las superficies de los elementos ópticos. Se observó una relación estrecha entre el aumento en el tamaño de la apertura y el incremento en el área de la mancha de luz en el detector final, afectando la resolución espectral de los tres sistemas. En el sistema de espectrómetro Raman sin reflector, fue en el que se observó la mayor presencia de astigmatismo conforme se aumentaba el diámetro de la apertura debido a la emisión de luz dispersa por la fuente puntual, sobre el eje tangencial para las longitudes de ondas cortas, mientras que para las ondas largas se observó sobre el eje sagital. Para el sistema

de espectrómetro Raman con reflector elíptico, en el que se trabajó con dos puntos focales importantes: el punto focal F2 del reflector elíptico y el punto focal de la lente esférica de enfoque, fue necesario la colocación de una apertura para evitar la entrada de aquellos rayos que se encontraran fuera de foco. Debido a que solo se modificó el tamaño de la apertura colocada en el punto focal de la lente de enfoque y la apertura en el punto focal F2 se mantuvo constante con un diámetro igual a 0.250 mm, se observó la presencia de astigmatismo, aunque en este caso se observó astigmatismo solo sobre el eje tangencial tanto para longitudes de onda cortas como longitudes de onda largas. Para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico, fue en el que la presencia de astigmatismo se mantuvo mínima sobre el eje tangencial y el eje sagital, para longitudes de ondas cortas y longitudes de ondas largas, respectivamente, debido a que la entrada de los rayos dispersos por la fuente puntual se dio de forma colimada a causa de la forma parabólica del reflector.

Para determinar el tamaño de la apertura ideal para mantener una entrada de radiación máxima con un astigmatismo al mínimo, para los tres sistemas se analizó la potencia de salida medida sobre el detector final a diferentes diámetros de apertura del punto focal de la lente esférica de enfoque. Para el sistema sin reflector se determinó una apertura de 50 μm , para el sistema con reflector elíptico se determinó una apertura de 75 μm y para el sistema con reflector parabólico se determinó una apertura de 50 μm , para los cuales se obtuvieron potencias de salida total de 1.016E-02 W, 4.430E-02 W y 2.873E-02 W, respectivamente.

Para el sistema con reflector elíptico se observó un aumento de la señal de 4.36 veces en relación con el sistema sin reflector, mientras que para el sistema con reflector parabólico, el aumento fue de 2.86 veces con respecto a la señal del sistema sin reflector. Sin embargo, al observar las gráficas de potencia para el sistema con reflector elíptico y el sistema con reflector parabólico, observamos que las intensidades relativas por longitud de onda medidas en el detector final, fueron mayores para el sistema con reflector parabólico, llegando la irradiancia máxima a 100 W/mm², mientras que para el reflector elíptico, la irradiancia máxima fue de aproximadamente 16 W/mm². Esto debido a que el diámetro de la apertura en el foco F2 del reflector elíptico, que aunque permitió la entrada de más rayos al sistema, debido a que la apertura en el foco F2 tenía un diámetro muy grande, algunos de los rayos que entraron al arreglo óptico se encontraban fuera de foco, lo que provocó un aumento en el área de distribución de los rayos enfocados por el espejo C2 sobre el detector final, dando como resultado manchas de luz con una forma difusa, mientras que el sistema con reflector parabólico, al trabajar con rayos colimados, permitió que el área de distribución de los rayos al ser enfocados en un punto en el detector final fuera menor, acercándose a la forma de una mancha puntual.

Por último, la información se verificó por medio de un análisis de medianas con una gráfica de cajas y bigotes, con la cual se relacionó el aumento de potencia y la presencia de astigmatismo en los tres sistemas. En el diagrama de cajas y bigotes con datos atípicos observamos que se presentó una mayor cantidad de datos atípicos extremos para el sistema sin reflector y el sistema con reflector elíptico debido a que en ambos sistemas existe una mayor dispersión de los datos sobre el detector final correspondiente, mientras que para el sistema con reflector parabólico se presentaron solo datos atípicos leves debido a que la dispersión de datos sobre el detector final fue en un área menor con lo que deducimos que a menor presencia de datos atípicos es menor la presencia de astigmatismo en las manchas por longitud de onda sobre el detector final para cada uno de los tres sistemas.

Con respecto a las potencias de salida de los sistemas, se encontró que, aunque la potencia de salida en el detector final del sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico fue mayor a la potencia de salida en el detector final del sistema con reflector parabólico, la intensidad por pixel en el sistema con reflector parabólico fue más grande, debido a que los rayos se concentraron en un área menor a la del sistema con reflector elíptico en el detector final lo cual se observó en las gráficas de cajas y bigotes. En ellas se muestra, al igual que en las gráficas realizadas en MATLAB®, que los datos por pixel recolectados en el detector final del sistema con reflector elíptico fueron menores a los datos recolectados por pixel en el detector final del sistema con reflector parabólico debido a que en el sistema con reflector parabólico se generó una menor dispersión de los datos y por ende aumento la intensidad por pixel, siendo este sistema el que presentó una mayor diferencia estadísticamente significativa con respecto al sistema sin reflector y el sistema con reflector elíptico.

Con esto podemos concluir que el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico, permitió un mayor aumento en la colección de luz dispersada por una fuente puntual con una presencia de astigmatismo mínima en las manchas por longitud de onda del detector final, con respecto a las mediciones del sistema de espectrómetro Raman sin reflector y el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico. Es importante recordar que en el sistema con reflector elíptico, debido a que solo se modificó el diámetro de la apertura colocada en el punto focal de la lente de enfoque, es necesario realizar el análisis del sistema al modificar el diámetro de la apertura en el foco F2 del reflector elíptico y la apertura en el punto focal de la lente de enfoque para determinar si existe o no una mejora en la disminución de la presencia de astigmatismo en las manchas por longitud de onda sobre el detector final.

5.2. Trabajo a Futuro

El trabajo a futuro que se ha identificado durante el desarrollo de esta tesis se presenta a continuación:

- Analizar el efecto sobre la presencia de aberraciones al cambiar el tamaño de la apertura en el punto focal F2 y la apertura en el punto focal de la lente de enfoque en el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.
- Realizar la simulación de los sistemas en el modo secuencial para analizar el tipo de aberración presente en las manchas de luz en el detector final.
- Analizar en los tres sistemas la disminución de las aberraciones en las manchas de luz de los detectores finales al cambiar los espejos cóncavos por espejos toroidales y la red de difracción de rejilla por una red de difracción holográfica.
- Desarrollar una fuente de luz con características de una muestra de material particulado que disperse radiación Raman y Rayleigh.
- Desarrollar un elemento con características que simulen a un filtro de membrana y añadirlo a la simulación para analizar su efecto sobre el trazo de rayos y la potencia de salida en los tres sistemas.

Referencias

1. Adar F. (2013). Molecular Spectroscopy Workbench: Considerations of Grating Selection in Optimizing a Raman Spectrograph. *Spectroscopy* Vol. 28 (10). <http://www.spectroscopyonline.com/considerations-grating-selection-optimizing-raman-spectrograph> 16/04/2018
2. Dobrowolski J. A. (2010). Optical Properties of Films and Coatings en: *Handbook of Optics: Volumen IV – Optical Properties of Materials, Nonlinear Optics, Quantum Optics*. 3ra Ed. McGraw-Hill Professional. Pp. 42.3-42.130.
3. Bumbrah G. S., Sharma R. M. (2016). Raman spectroscopy – Basic principle, instrumentation and selected applications for the characterization of drugs of abuse, *Egypt J. Forensic Sci.* Vol. 6 (3), pp. 209 – 215. DOI: 10.1016/j.ejfs.2015.06.001
4. Braun R. D. (2016). Chemical Analysis. *Encyclopedia Britannica*, inc. [en línea]. <https://www.britannica.com/science/chemical-analysis/Classical-methods#ref80801>. 03/04/2018.
5. Cardell C., Guerra I. (2016). An overview of emerging hyphenated SEM – EDX and Raman spectroscopy systems: Applications in life, environmental and material sciences. *Trends Anal. Chem.* Vol. 77, pp. 156 – 166. DOI: 10.1016/j.trac.2015.12.001
6. Catelani T., Pratesi G., Zoppi M. (2014). Raman Characterization of Ambient Airborne Soot and Associated Mineral Phases. *Aerosol Sci. Technol.* Vol. 48 (1), pp. 13-21. DOI: 10.1080/02786826.2013.847270
7. Chandra S. (2009). *Molecular Spectroscopy*. 1ra. Ed. Alpha Science International LTD. U.K. 274 pp.
8. Chandra S., Zeng H., Guo C., Cai W. (2012). *Nanomaterials. Processing and Characterization with Lasers*. 1ra. Ed. WILEY-VCH. 777 pp. DOI: 10.1002/9783527646821.ch1
9. Chaves J. (2016). *Introduction to Nonimaging Optics*. 2da. Ed. CRC Press. Madrid, España. 749 pp.

10. Chow J., Watson J., Green M., Loenthal D., Bates B., Oslund W., Torres G. (2000) Cross - border transport and spatial variability of suspended particles in Mexicali and California's Imperial Valley, *Atmospheric Environ.* Vol. 34 (11), pp. 1833-1843. DOI: 10.1016/S1352-2310(99)00282-4
11. Davis C. (1996). *Lasers and Electro-Optics. Fundamentals and Engineering.* 1ra. Ed. CAMBRIGE University Press. UK. 720 pp.
12. Desroches J., Jermyn M., Mok K., Lemieux – Leduc C., Mercier J., St – Arnaud K., Urmey K., Guiot MC., Marple E., Petrecca K., Leblond F. (2015). Characterization of a Raman spectroscopy probe system for intraoperative brain tissue classification. *Biomed. Opt. Express.* Vol. 6 (7), pp. 2380-2397. DOI: 10.1364/BOE.6.002380
13. Dieing T., Toporski J., Hollricher O. (2010). *Confocal Raman Microscopy.* 1ra. Ed. Springer Series in Optical Sciences. DE. 289 pp.
14. Dou X., Yamaguchi Y., Yamamoto H., Uenoyama H., Ozaki Y. (1996). Biological Applications of Anti-Stokes Raman Spectroscopy: Quantitative Analysis of Glucose in Plasma and Serum by a Highly Sensitive Multichannel Raman Spectrometer. *Appl. Opt.* Vol. 50 (10), pp. 1301 – 1306.
15. Dorronsoro M. (1995). *La Tecnología Láser. Fundamentos, Aplicaciones y Tendencias.* 1ra. Ed. McGraw Hill. ES. 262 pp.
16. Elmes M., Gasparon M. (2017). Sampling and single particle analysis for the chemical characterization of fine atmospheric particulates: A review. *Journal of Environmental Management.* Vol. 202 (1), pp. 137-150. DOI: 10.1016/j.jenvman.2017.06.067
17. Erdogan T., Mizrahi V. (2004). *Molecular Spectroscopy Workbench: Thin-Film Filters for Raman Spectroscopy.*
https://www.semrock.com/Data/Sites/1/semrockpdfs/2004dec_spectroscopy_thin_film_filters_raman_spectroscopy.pdf
18. Goienaga N., Sarmiento A., Olivares A., Carrero J. A., Fernández L. A., Madariaga J. M. (2013). Emerging Application of a Structural and Chemical Analyzer for the

- Complete characterization of Metal-Rich Particulate matter. *Anal. Chem.* Vol. 85 (15), pp. 7173 – 7181. DOI: 10.1021/ac400878y
19. Harvey, D. (2000). *Modern Analytical Chemistry*. 1ra. Ed. McGraw-Hill Higher Education. EE. UU. 798 pp.
20. Hernandez Vizuet M. (2007). *Diseño y construcción de un equipo de fotobioestimulación basado en diodos láser de $\lambda = 850$ nm para aplicaciones de bioestimulación en objetos biológicos*. Maestro en Ciencias en Ingeniería Electrónica. Instituto Politécnico Nacional. México D.F. 101 pp.
21. Hetch E. (2002). *Optics*. 4ta. Ed. Addison Wesley. EE. UU. 698 pp.
22. Holst G., Lomheim T. (2007). *CMOS/CCD Sensors and Camera Systems*. 1ra. Ed. JCD Publishing. EE.UU. 355 pp.
23. Hurts G. S., Stoner J. O., Graybeal J. D. Chu S. (2017). *Spectroscopy*. Encyclopedia Britannica, inc. [en línea]. <https://www.britannica.com/science/spectroscopy/Energy-states-of-real-diatomic-molecules#ref80631>. 03/04/2018.
24. Janesick J. (2001). *Scientific Charge-Couple Devices*. 1ra. Ed. SPIE Press. EE.UU. 906 pp.
25. Ji Z., Dai R., Zhang Z. (2015). Characterization of Fine Particulate Matter in Ambient Air my Combining TEM and Multiple Spectroscopic Techniques – NMR, FTIR and Raman spectroscopy. *Environ. Sci. Process. Impact*. Vol. 17 (3), pp. 552 – 560. DOI: 10.1039/C4EM00678J
26. Kelly, F. J., Fussell, J. C. (2012). Size, source and chemical composition as determinants of toxicity attributable to ambient particulate matter. *Atmospheric Environ.* Vol. 60, pp. 504–526. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2012.06.039
27. Lippmann M. (1998). Human health risk of airborne particles: historical perspective. *Studies in Environmental Science*. 72, pp. 49-85. DOI: 10.1016/S0166-1116(98)80005-8

28. Liu C., Berg W. (2012). Determining the Spectral Resolution of a Charge-Couple Device (CCD) Raman Instrument. *Appl. Spectrosc.* Vol. 66 (9), pp. 1034-1043. DOI: 10.1366/11-06508
29. Lucatorio T., Parr A. C., Baldwin K. (2014). *Experimental Methods in the physical Sciences*. ELSEVIER. Vol. 49. 533 pp. DOI: 10.1016/B978-0-12-805324-9.09993-3
30. Macleod H. A. (2010). *Thin-Film Optical Filters*. 4ta Ed. CRC Press. EE. UU. 791 pp.
31. Malacara D., Malacada Z. (2004). *Handbook of Optical Design*. 2da. Ed. Marcel Dekker, Inc. EE. UU. 507 pp.
32. Manzanares P. L., Echaniz P. G., Perez R. I., Lopez V. M., Garibay B. V. (2011). *Guía metodológica para la estimación de emisiones de PM_{2.5}*. 1ra. Ed. Secretaria de Medio Ambiente y Recursos Naturales e Instituto Nacional de Ecología. Tlalnepantla, México. 103 pp.
33. Matousek P., Morris M. D. (2010). *Emerging Raman Applications and Techniques in Biomedical and Pharmaceutical Fields*. 1ra. Ed. Springer. EE. UU. 463 pp.
34. Matousek P., Stone N. (2016). Development of deep subsurface Raman spectroscopy for medical diagnosis and disease monitoring. *Chem. Soc. Rev.* Vol. 45, pp. 1794 – 1802. DOI: 10.1039/c5cs00466g
35. Mohr C., Spencer C. L., Hippler M. (2010). Inexpensive Raman Spectrometer for Undergraduate and Graduate Experiments and research. *J. Chem. Educ.* Vol. 87 (3), pp. 326 – 330. DOI: 10.1021/ed800081t
36. Montoya E. H., Arbildo A., Baltuano O. R. (2015). A Homemade Cost Effective Raman Spectrometer with High Performance. *J. Lab. Chem. Educ.* Vol. 3 (4), pp. 67 – 75. DOI: 10.5923/j.jlce.20150304.02
37. Moreton-Godoy R. H., Potgieter-Vermaak S., De-Hong J., Kaegi R., Van-Grieken R. (2006). Substrate selection for optimum qualitative and quantitative single atmospheric particles analysis using nano-manipulation, sequential thin-window

- electron probe X-ray microanalysis and micro-Raman spectrometry. *Spectrochim. Acta B*. Vol. 61 (4), pp. 375 – 388. DOI: 10.1016/j.sab.2006.02.004
38. Mourou G. A., Tajima T., Bulanov S. V. (2006). Optics in the relativistic regime. *Rev. Mod. Phys.* Vol. 78, 371 pp. DOI: 10.1103/RevModPhys.78.309
39. Nelson M. P., Zugates C. T., Treado P. J., Casuccio G. S., Exline D. L., Schlaegle S. F. (2001). Combining Raman chemical Imaging and Scanning Electron Microscopy to Characterize Ambient Fine Particulate Matter. Vol 34 (1), pp. 108 – 117. DOI: 10.1080/02786820120709
40. Palmer C. (2005). *Diffraction grating Handbook*. 6ta. Ed. Newport Corporation. 271 pp.
41. Rietdorf J. Stelzer E. H. K. (2006). Special Optical Elements. En: *Handbook of Biological Confocal Microscopy* (Pawley J. B.). 3ra. Ed. Springer. EE. UU., pp.43-58.
42. Rae A., Stosch R., Klapetek P., Hight-Walker A., Roy D. (2014). State of the art Raman techniques for biological applications. *Methods*. Vol. 68, pp. 338 – 347. DOI: 10.1016/j.ymeth.2014.02.035
43. Raman C. V., F. R. S., Krishnan K. S. (1928). A new class of spectra due to secondary radiation – Part I. *Indian J. Phys.* Vol. 2, pp. 399 – 419.
44. Rojas-Bracho L., Garibay-Bravo V. (2003). Las partículas suspendidas, aeropartículas o aerosoles ¿hacen daño a la salud? ¿Podemos hacer algo? *Gaceta ecológica*. Vol. 69 (4), pp. 29-44.
45. Samet J.M., Brauer M., Schlesinger R. (2005). Particulate matter. En: *Air Quality Guidelines: Global Update*. World Health Organization, Copenhagen, DEN, 2da. Ed., pp. 217-280.
46. Serway R. A., Jewett Jr. J. W. (2009). *Física para ciencias e ingeniería con Física Moderna*. 7ma Ed. CENGAGE Learning. Mexico D.F. 1392 pp.
47. Silfvast W. (2004). *Laser Fundamentals*. 2da. Ed. CAMBRIGE University Press. UK. 642 pp.

-
48. Sobanska S., Hwang H., Choël M., Jung H., Eom H., Kim H., Barbillat J., Ro C. (2012). Investigation of the Chemical Mixing State of Individual Asian Dust Particles by the Combine Use of Electron Probe X-ray Microanalysis and Raman Microspectrometry. *Anal. Chem.* Vol. 84, pp. 3145 – 3154. DOI: 10.1021/ac2029584.
49. Somerville W. R. C., Le – Ru E. C., Northcote P. T., Etchegoin P. G. (2010). High performance Raman spectroscopy with simple optical components. *Am. J. Phys.* Vol. 78 (7), pp. 671 – 677. DOI: 10.1119/1.3427413
50. Sun H. (2012). *Laser diode Beam Basics, Manipulations and Characterizations*. 1ra. Ed. Springer. EE. UU. 76 pp.
51. Schrader B. (1995). *Infrared and Raman Spectroscopy Methods and Applications*. 1ra. Ed. VCH. DE. 787 pp.
52. Skoog D., Holler J., Crouch S. (2008). *Principios de Análisis Instrumental*. 6ta. Ed. CENGAGE Learning. Mexico D.F. 1038 pp.
53. Smith W. J. (2000). *Optical Engineering: The Design of Optical systems*. 3ra. Ed. McGraw-Hill. EE. UU. 617 pp.
54. Smith W. J. (2008). *Modern Optical Engineering: The Design of Optical systems*. 4ta. Ed. McGraw-Hill. EE. UU. 754 pp.
55. SSA (2014). Norma Oficial Mexicana NOM – 025 – SSA1 – 2014, salud ambiental. Valores límite permisibles para la concentración de partículas suspendidas PM10 y PM2.5 en el aire ambiente y criterios para su evaluación. Secretaría de Salud. Diario Oficial de la Federación, 20 de agosto de 2014.
56. Stefaniak E. A., Worobick A., Potgieter-Vermaak S., Alsecc A., Török S., Van-Grieken R. (2006). Molecular and elemental characterisation of mineral particles by means of parallel micro-Raman spectrometry and Scanning Electrone Mocoscopy/Energy Dispersive X-ray Analysis. *Spectrochim. Acta B*. Vol. 61 (7), pp. 824 – 830. DOI: 10.1016/j.sab.2006.04.009
57. Thermo Scientific. (2008). *Introduction to Raman Spectroscopy*. Thermo Scientific Instruments LLC. Madison, WI. U.S.A. 11 pp.
-

58. Tian Y., Weiming – Su J., Ju J., Liu Q. (2017). Efficiency enhancement of Raman microspectroscopy at long working distance by parabolic reflector. SPIE-OSA. Vol. 10411, pp. 1041103-1 – 1041103-10. DOI: 10.1117/12.2281826
59. Viera González P. M. (2014). Estudio del Acoplamiento de un Colector Solar con Fibras Ópticas Plásticas para la Iluminación de Interiores. Tesis para obtener el grado de Maestría en Ingeniería Física Industrial. Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad Autónoma de Nuevo León. Nuevo León, México, 133 pp.
60. Wahadoszamen Md., Rahaman A., Raquinul – Hoque N. Md., Talukder A. I., Monowar – Abedin K., Yusuf – Haider A. F. M. (2015). Laser Raman Spectroscopy with Different Excitation Sources and Extension to Surface Enhance Raman Spectroscopy. Spectrosc. (Hindawi. Online). Vol. 2015, pp. 1 – 8. DOI: 10.1155/2015/895317
61. Wyatt C. L. (1991). Electro-optical system design: for information processing. 1ra. Ed. McGraw-Hill. 343 pp.
62. Yamamoto H., Uenoyama H., Hirau K., Dou X., Ozaki Y. (1998). Quantitative analysis of metabolic gases by multichannel Raman spectroscopy: use of a newly designed elliptic-spherical integration type of cell holder. Appl. Opt. Vol. 37 (13), pp. 2640 – 2645. DOI: 10.1364/AO.37.002640
63. Yu A., Zuo D., Li B., Gao J., Wang X. (2016). Parabolic cell for low-background Raman analysis of gas samples. Appl. Opt. Vol. 55 (13), pp. 3650 – 3655. DOI: 10.1364/AO.55.003650

Anexo A

Editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.

Object #	Object Type	Comment	Ref Object	Inside Of	X Position	Y Position	Z Position	Tilt About X	Tilt About Y	Tilt About Z
1	Source Point		0	0	0	0	65.75	0	0	0
2	Source Diode		0	0	0	0	111.65	180	0	0
3	Rectangular Volume		0	0	0	0	85	-45	0	180
4	Even Asphere Lens		0	0	0	0	105.6	0	0	0
5	Cylinder Volume		0	0	0	-19.9	89	90	0	0
6	Standard Lens		0	0	0	-203	89	98	0	0
7	Lenslet Array 1		7	0	0	18	-75	60	0	0
8	Standard Lens		0	0	0	-160	60	178.5	0	0
9	Detector Color		9	0	0	60	-146	26	0	0
10	Rectangle		0	0	0	0	68.7	0	0	0
11	Standard Surface		0	0	0	0	68.7	0	0	0
12	Rectangle		0	0	0	0	107.6	0	0	0
13	Standard Surface		0	0	0	0	107.6	0	0	0
14	Rectangle		0	0	0	0	115	0	0	0
15	Rectangle		0	0	0	-20	70	90	0	0
16	Standard Surface		0	0	0	-20	89	90	0	0
17	Rectangle		0	0	0	-40.5	89	90	0	0
18	Standard Surface		0	0	0	-40.5	89	90	0	0
19	Rectangle		0	0	0	-83	89	90	0	0
20	Standard Surface		0	0	0	-83	89	90	0	0
21	Even Asphere Lens	355230-A.1	0	0	0	0	71.4	180	0	0
22	Even Asphere Lens		0	0	0	-42.95	89	-90	0	0

Tabla A.1. Tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.

Material	Param 1	Param 2	Param 3	Param 4	Param 5	Param 6	Param 7	Param 8	Param 9	Param 10	Param 11	Param 12	Param 13
-	20	5000000	1	0	0	180							
-	0	5000000	1	0	0	0.015	16	1.00E-02	9	1.00E-02	1	1	0
N-BK7	6.25	8.75	3	6.25	8.75								
D-ZK3	3.15	4.8			2.725	-0.542	0	-2.08E-05	-1.37E-04	2.03E-05	-2.96E-06	0	0
B270	6.25	5	6.25										
N-BK7	-200	0	25.4	25.4	9	0	0	25.4	25.4				
MIRROR	25	25	9.5			0	0	0	0	1.22	1	0	0
N-BK7	-400	0	37.5	37.5	12	0	0	37.5	37.5				
	3	30	500	5000	0	0	0	0	0	0	0	-90	90
ABSORB	50	20											
	0	0	2.85	0									
ABSORB	50	20											
	0	0	2.5	0									
ABSORB	50	20											
ABSORB	50	45											
	0	0	5.3	0									
ABSORB	100	100											
	0	0	4.5	0									
ABSORB	100	100											
	0	0	1.00E-03	0									
D-ZLAF52LAM	3.15	2.708			3.576	-0.925	0	9.26E-04	8.34E-08	-5.47E-07	-2.60E-08	6.98E-10	0
D-ZK3M	5	3			0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabla A.2. Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.

Param 14	Param 15	Param 16	Param 17	Param 18	Param 19	Param 20	Param 21	Param 22	Param 23	Param 24
0	0	0	1.00E-02	0	0	1.00E-02				
0	-2.979	-12.102	0	8.07E-03	-1.73E-03	1.84E-04	-8.94E-06	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	2
-90	90	0	0							
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	-0.022	-4.47E-06	0	0	0	0	0	0

Tabla A.3. Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz de placa.

Anexo B

Editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.

Object #	Object Type	Comment	Ref Object	Inside Of	X Position	Y Position	Z Position	Tilt About X	Tilt About Y	Tilt About Z
1	Source Point		0	0	0	0	65.75	0	0	0
2	Source Diode		0	0	0	0	111.65	180	0	0
3	Polygon Object	Prism45.POB	0	0	0	0	85	0	0	180
4	Polygon Object	Prism45.POB	3	0	0	0	8	180	0	0
5	Even Asphere Lens		0	0	0	0	105.6	0	0	0
6	Cylinder Volume		0	0	0	-19.9	89	90	0	0
7	Standard Lens		0	0	0	-203	89	98	0	0
8	Lenslet Array 1		7	0	0	18	-75	60	0	0
9	Standard Lens		0	0	0	-160	60	178.5	0	0
10	Detector Color		9	0	0	60	-146	26	0	0
11	Rectangle		0	0	0	0	68.7	0	0	0
12	Standard Surface		0	0	0	0	68.7	0	0	0
13	Rectangle		0	0	0	0	107.6	0	0	0
14	Standard Surface		0	0	0	0	107.6	0	0	0
15	Rectangle		0	0	0	0	115	0	0	0
16	Rectangle		0	0	0	-20	70	90	0	0
17	Standard Surface		0	0	0	-20	89	90	0	0
18	Rectangle		0	0	0	-40.5	89	90	0	0
19	Standard Surface		0	0	0	-40.5	89	90	0	0
20	Rectangle		0	0	0	-83	89	90	0	0
21	Standard Surface		0	0	0	-83	89	90	0	0
22	Even Asphere Lens	355230-A.1	0	0	0	0	71.4	180	0	0
23	Even Asphere Lens		0	0	0	-42.95	89	-90	0	0

Tabla B.1. Tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.

Material	Param 1	Param 2	Param 3	Param 4	Param 5	Param 6	Param 7	Param 8	Param 9	Param 10	Param 11	Param 12	Param 13
-	20	5000000	1	0	0	180							
-	0	5000000	1	0	0	0.015	16	1.00E-02	9	1.00E-02	1	1	0
N-BK7	4	1											
N-BK7	4	1											
D-ZK3	3.15	4.8			2.725	-0.542	0	-2.08E-05	-1.37E-04	2.03E-05	-2.96E-06	0	0
B270	6.25	5	6.25										
N-BK7	-200	0	25.4	25.4	9	0	0	25.4	25.4				
MIRROR	25	25	9.5			0	0	0	0	1.22	1	0	0
N-BK7	-400	0	37.5	37.5	12	0	0	37.5	37.5				
	3	30	500	5000	0	0	0	0	0	0	0	-90	90
ABSORB	50	20											
	0	0	2.85	0									
ABSORB	50	20											
	0	0	2.5	0									
ABSORB	50	20											
ABSORB	50	45											
	0	0	5.3	0									
ABSORB	100	100											
	0	0	4.5	0									
ABSORB	100	100											
	0	0	1.00E-03	0									
D-ZLAF52LAM	3.15	2.708			3.576	-0.925	0	9.26E-04	8.34E-08	-5.47E-07	-2.60E-08	6.98E-10	0
D-ZK3M	5	3			0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabla B.2. Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector con divisor de haz cúbico.

Param 14	Param 15	Param 16	Param 17	Param 18	Param 19	Param 20	Param 21	Param 22	Param 23	Param 24
0	0	0	1.00E-02	0	0	1.00E-02				
0	-2.979	-12.102	0	8.07E-03	-1.73E-03	1.84E-04	-8.94E-06	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	2
-90	90	0	0							
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	-0.022	-4.47E-06	0	0	0	0	0	0

Tabla B.3. Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman sin reflector.

Anexo C

Editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.

Object #	Object Type	Comment	Ref Object	Inside Of	X Position	Y Position	Z Position	Tilt About X	Tilt About Y	Tilt About Z
1	Source Point		0	0	0	0	6.8	0	0	0
2	Source Diode		0	0	0	0	111.65	180	0	0
3	Standard Surface		0	0	0	0	0.67	0	0	0
4	Polygon Object	Prism45.POB	0	0	0	0	85	0	0	180
5	Polygon Object	Prism45.POB	4	0	0	0	8	180	0	0
6	Even Asphere Lens		0	0	0	0	105.6	0	0	0
7	Cylinder Volume		0	0	0	-19.9	89	90	0	0
8	Standard Lens		0	0	0	-203	89	98	0	0
9	Lenslet Array 1		8	0	0	18	-75	58	0	0
10	Standard Lens		0	0	0	-160	60	178	0	0
11	Detector Color		10	0	0	70	-139	35	0	0
12	Rectangle			0	0	0	68.8	0	0	0
13	Standard Surface		0	0	0	0	68.8	0	0	0
14	Rectangle		0	0	0	0	107.6	0	0	0
15	Standard Surface		0	0	0	0	107.6	0	0	0
16	Rectangle		0	0	0	0	115	0	0	0
17	Rectangle		0	0	0	-20	70	90	0	0
18	Standard Surface		0	0	0	-20	89	90	0	0
19	Rectangle		0	0	0	-40.4	89	90	0	0
20	Standard Surface		0	0	0	-40.4	89	90	0	0
21	Rectangle		0	0	0	-83	89	90	0	0
22	Standard Surface		0	0	0	-83	89	90	0	0
23	Rectangle		0	0	0	0	65.86	0	0	0
24	Standard Surface		0	0	0	0	65.86	0	0	0
25	Even Asphere Lens	355230-A.1	0	0	0	0	71.5	180	0	0
26	Even Asphere Lens	83543.1	0	0	0	-42.95	89	-90	0	0

Tabla C.1. Tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.

Material	Param 1	Param 2	Param 3	Param 4	Param 5	Param 6	Param 7	Param 8	Param 9	Param 10	Param 11	Param 12	Param 13
-	1000	5000000	1	0	0	180							
-	50	5000000	1	0	0	0.015	16	1.00E-02	9	1.00E-02	1	1	0
MIRROR	11.2	-0.686	19.98	0									
N-BK7	4	1											
N-BK7	4	1											
D-ZK3	3.15	4.8			2.725	-0.542	0	-2.08E-05	-1.37E-04	2.03E-05	-2.96E-06	0	0
B270	6.25	5	6.25										
N-BK7	-200	0	25.4	25.4	9	0	0	25.4	25.4				
MIRROR	25	25	9.5			0	0	0	0	1.22	1	0	0
N-BK7	-400	0	37.5	37.5	12	0	0	37.5	37.5				
	3	30	500	5000	0	0	0	0	0	0	0	-90	90
ABSORB	50	20											
	0	0	2.85	0									
ABSORB	50	20											
	0	0	2.5	0									
ABSORB	50	20											
ABSORB	50	45											
	0	0	5.3	0									
ABSORB	100	100											
	0	0	4.5	0									
ABSORB	50	30											
	0	0	0.1	0									
ABSORB	50	20											
	0	0	0.25	0									
D-ZLAF52LAM	3.15	2.708			3.576	-0.925	0	9.26E-04	8.34E-08	-5.47E-07	-2.60E-08	6.98E-10	0
D-ZK3M	5	3			0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabla C.2. Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.

Param 14	Param 15	Param 16	Param 17	Param 18	Param 19	Param 20	Param 21	Param 22	Param 23	Param 24
0	0	0	1.00E-02	0	0	1.00E-02				
0	-2.979	-12.102	0	8.07E-03	-1.73E-03	1.84E-04	-8.94E-06	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	2
-90	90	0	0							
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	-0.022	-4.47E-06	0	0	0	0	0	0

Tabla C.3. Continuación de la tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector elíptico.

Anexo D

Editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.

Object #	Object Type	Comment	Ref Object	Inside Of	X Position	Y Position	Z Position	Tilt About X	Tilt About Y	Tilt About Z
1	Source Point		0	0	0	0	2.5	0	0	0
2	Source Diode		0	0	0	0	111.65	180	0	0
3	Standard Surface		0	0	0	0	0	0	0	0
4	Even Asphere Lens		0	0	0	0	30	0	0	0
5	Polygon Object	Prism45.POB	0	0	0	0	85	0	0	180
6	Polygon Object	Prism45.POB	5	0	0	0	8	180	0	0
7	Even Asphere Lens		0	0	0	0	105.6	0	0	0
8	Cylinder Volume		0	0	0	-19.9	89	90	0	0
9	Standard Lens		0	0	0	-203	89	98	0	0
10	Lenslet Array 1		9	0	0	18	-75	58	0	0
11	Standard Lens		0	0	0	-160	60	178	0	0
12	Detector Color		11	0	0	70	-139	35	0	0
13	Rectangle		0	0	0	0	39.8	0	0	0
14	Standard Surface		0	0	0	0	39.8	0	0	0
15	Rectangle		0	0	0	0	64.4	0	0	0
16	Standard Surface		0	0	0	0	64.4	0	0	0
17	Rectangle		0	0	0	0	60	0	0	0
18	Standard Surface		0	0	0	0	60	0	0	0
19	Rectangle		0	0	0	0	107.6	0	0	0
20	Standard Surface		0	0	0	0	107.6	0	0	0
21	Rectangle		0	0	0	0	115	0	0	0
22	Rectangle		0	0	0	-20	70	90	0	0
23	Standard Surface		0	0	0	-20	89	90	0	0
24	Rectangle		0	0	0	-40.5	89	90	0	0
25	Standard Surface		0	0	0	-40.5	89	90	0	0
26	Rectangle		0	0	0	-83	89	90	0	0
27	Standard Surface		0	0	0	-83	89	90	0	0
28	Even Asphere Lens	355230-A.1	0	0	0	0	65.9	180	0	0
29	Even Asphere Lens		0	0	0	-42.95	89	-90	0	0

Tabla D.1. Tabla del editor de componentes en Zemax™ para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.

Material	Param 1	Param 2	Param 3	Param 4	Param 5	Param 6	Param 7	Param 8	Param 9	Param 10	Param 11	Param 12	Param 13
-	1	5000000	1	0	0	180							
-	50	5000000	1	0	0	0.015	16	1.00E-02	9	1.00E-02	1	1	0
MIRROR	5	-1	15	0									
B270	15	11.9			13.551	-0.63	0	5.50E-06	0	0	0	0	0
N-BK7	4	1											
N-BK7	4	1											
D-ZK3	3.15	4.8			2.725	-0.542	0	-2.08E-05	-1.37E-04	2.03E-05	-2.96E-06	0	0
B270	6.25	5	6.25										
N-BK7	-200	0	25.4	25.4	9	0	0	25.4	25.4				
MIRROR	25	25	9.5			0	0	0	0	1.22	1	0	0
N-BK7	-400	0	37.5	37.5	12	0	0	37.5	37.5				
	3	30	500	5000	0	0	0	0	0	0	0	-90	90
ABSORB	50	20											
	0	0	13.5	0									
ABSORB	50	20											
	0	0	2.535	0									
ABSORB	50	20											
	0	0	0.078	0									
ABSORB	50	20											
	0	0	2.5	0									
ABSORB	50	20											
ABSORB	50	45											
	0	0	5.3	0									
ABSORB	50	100											
	0	0	2.75	0									
ABSORB	50	30											
	0	0	0.075	0									
D-ZLAF52LAM	3.15	2.708			3.576	-0.925	0	9.26E-04	8.34E-08	-5.47E-07	-2.60E-08	6.98E-10	0
D-ZK3M	5	3			0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabla D.2. Continuación de la tabla del editor de componentes en ZemaxTM para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico.

Param 14	Param 15	Param 16	Param 17	Param 18	Param 19	Param 20	Param 21	Param 22	Param 23	Param 24
0	0	0	1.00E-02	0	0	1.00E-02				
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	-2.979	-12.102	0	8.07E-03	-1.73E-03	1.84E-04	-8.94E-06	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	2
-90	90	0	0							
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	-0.022	-4.47E-06	0	0	0	0	0	0

Tabla D.3. Continuación de la tabla del editor de componentes en ZemaxTM para el sistema de espectrómetro Raman con reflector parabólico

