Spektromeetri koostamine ja kalibreerimine

Valter Kiisk  
Viimati redigeeritud: 2. september 2019. a.

[Töö eesmärk 1](#_Toc536624990)

[Tööülesanne 1](#_Toc536624991)

[Töövahendid 1](#_Toc536624992)

[1. Teoreetiline osa 1](#_Toc536624993)

[2. Töö käik 2](#_Toc536624994)

[3. Andmete töötlemine ja protokolli vormistamine 4](#_Toc536624995)

[3.1. Mathcad 4](#_Toc536624996)

[3.2. Python 5](#_Toc536624997)

[Viited 6](#_Toc536624998)

[A. Katsevahendid 7](#_Toc536624999)

Töö eesmärk

Dispergeerivat elementi ja maatrikssensorit kasutava spektro­meetri ehi­tuse ja tööpõhimõttega tutvumine, töövõtete oman­damine sellise spektromeetri koostamiseks ja kalibreerimiseks ning joonspektriga valgusallikate mõõtmiseks.

Tööülesanne

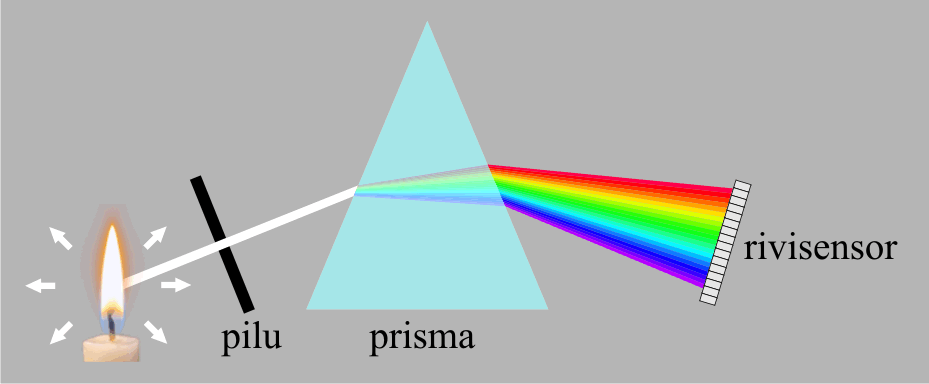
Optilistest komponentidest spektraalseadme koos­tamine, lu­minestsentslambi spektri mõõtmine ja kalibreerimine.

Töövahendid

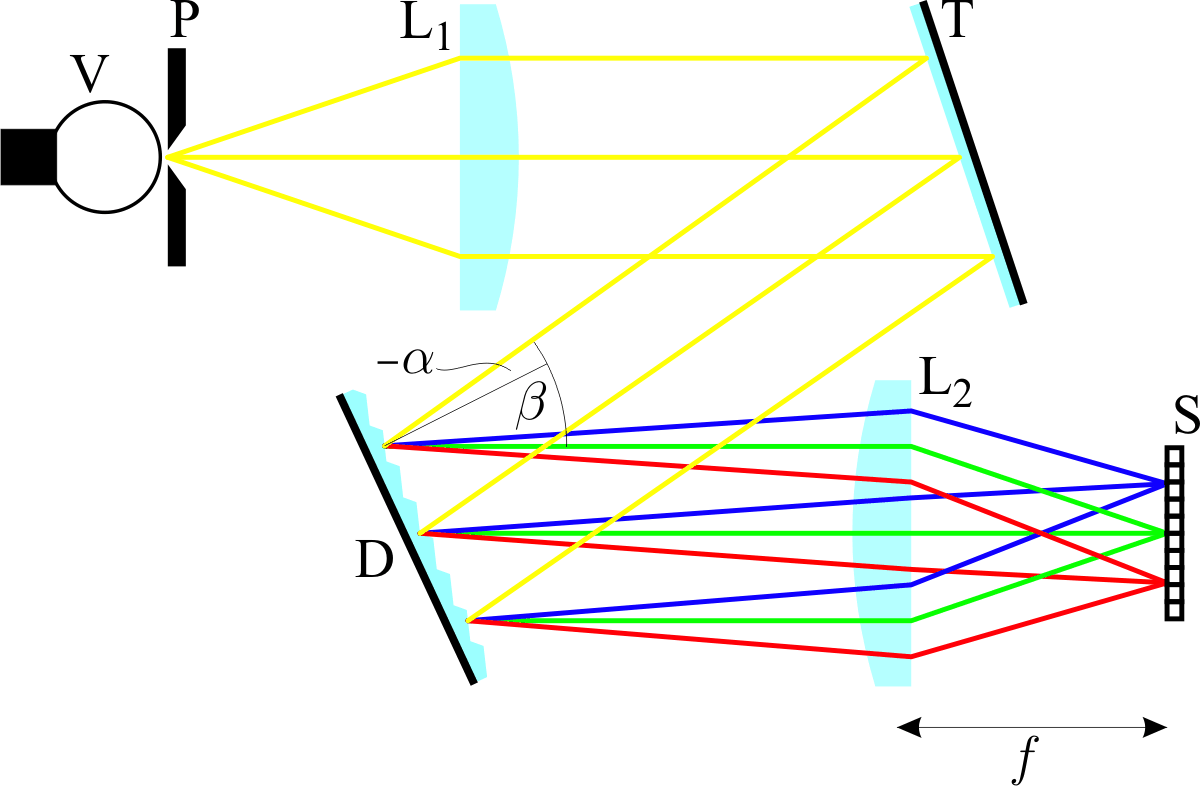
Reguleeritav vertikaalne pilu (0…0,4 mm), kaks identset tasa­kumerat läätse, difrakt­sioonvõre, tasapeegel, ilma ob­jektiivita digitaalne fotokaamera, laserdiood optiliste detailide joonda­miseks, märklaud laserkiire joonduse kontrol­limi­seks, milli­meeterskaalaga valge ekraan spektri/difrakt­siooni vaatlemi­seks/mõõtmiseks, nurgaskaala difraktsioon­võre orientatsiooni määramiseks, luminestsentslamp („säästupirn“) joonspektri allikana, must pappkarp spektro­meetri pimen­dami­seks.

# Teoreetiline osa

Spektraalriista üks põhiülesanne on kiirguse spekt­raal­koos­tise kindlakstegemine. Lihtsamal juhul piir­dutakse kiir­guses sisalduvate spektrijoonte lainepikkuste mää­ramisega. Tra­dit­sioo­ni­line mee­tod on kaasata spektromeetri optilisse skeemi valgust disper­geeriv ele­ment, mis eraldaks ruu­miliselt eri­neva laine­pik­kusega kiirgused. Saadud ruumilise spektrikujutise saaks siis üles võtta mõnesuguse maatriks- või rivisen­soriga. Kõige pri­mitiivsem skeem selle põhimõtte rea­liseeri­miseks on toodud järgneval joonisel. Selline lahendus on ääretult ebaefektiivne, sest enamus valgusenergiast läheb kaotsi (ei sisene spektraal­riista). Probleemi lahendamiseks tu­leb süsteemi kaasata val­gust koondavaid optilisi elemente.



Üldotstarbelistes spektromeetrites on levinuim dispergeeriv element difraktsioonvõre ning kiirguse koondamiseks ka­sutatakse tavaliselt nõguspeegleid, et vältida kromaatilist aberratsiooni. Antud töös kasutame liht­suse huvides siiski läätsesid (vt järgnev joonis). Lääts L1 teki­tab valgustatud pi­lust P kollimeeritud kiirtekimbu, mis suunatakse difraktsioon­võ­rele D. Tasa­peegli T üle­sanne on vaid muuta kiirte suunda, et lihtsus­tada skeemi koos­tamist optilisel laual.



Difraktsioonvõ­re on tasapindne optiline element, mille pin­nale on kantud tihedalt ühetaolised peegeldavad triibud teatud kindla sammuga , mis on võrreldav lainepikkusega. Sellisele pinnale langev valgusvihk peegeldub difrakt­siooni tõttu mit­mes erinevas suunas, kusjuures need suunad sõltuvad laine­pikkusest. Nimelt konstruktiivse interferentsi tekkeks peab ka­helt naabertriibult peegelduvate kiirte käiguvahe olema laine­pikkuse täisarv­kordne:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (1) |

kus on langemisnurk, on difraktsiooninurk, on lainepik­kus ja on täisarv (difraktsioo­nijärk). Seega kindlas difrakt­sioonijärgus ja fikseeritud langemisnurga korral nurk sõltub sujuvalt ja teadaoleval viisil lainepikkusest. Näiteks joon­spekt­riga kiirguse korral on tulemuseks selline hulk eri­nevas suunas liikuvaid kiirtekimpe, nagu on spektrijooni kiir­guses (joonisel näitena 3 tk). Et igale laine­pikkusele vastavat kiir­gusvoogu eraldi registreerida, on tarvis see teistest eralda­tult koondada ühte punkti detektori pinnale. Selleks suuna­takse difrageeru­nud kiir­gus edasi koonda­vale läätsele L2, mille foo­kuses on maatrikssensor S (antud juhul tavalise digitaalse fo­toaparaadi sensor). Lääts L2 koondab kõik samas suunas lii­ku­vad (kollimeeritud) kiired ühte kindlasse punkti sensori S pin­nal. Selle punkti asukoht sõltub nurgast ja seega laine­pikku­sest. Selle tulemusena olemegi saavutanud olukorra, kus eri­neva lainepikkusega kiirguskomponendid on ruumiliselt eral­datud.

Suure helendava pinnaga kiirgusallikate spektrite mõõtmiseks piisab, kui asetada kiirgusallikas otse vastu spektromeetri pilu, mis muutub selle tulemusena joonvalgusallikaks. Viimase spekt­raalkujutis tekib sensori pinnale. Sellist võtet kasu­tame ka siin luminestsentslambi kiirguse mõõtmiseks. Üldise­mal juhul tu­leks valgusallikast pärinev kiirgus suunata spekt­ro­meetri pilule täiendava läätse, peegli või optilise kiu vahen­du­sel, mis ühtlasi kindlustaks valguse koondumise spektraal­seadmesse optimaalse nurga all, mis on määratud sisendobjek­tiivi (L1) suhtelise avaga.

Difraktsioonvõre üheks puuduseks on erinevate dif­rakt­siooni­jär­ku­de olemasolu, st sensori pinnale tekib üldiselt mitu üksteise suhtes nihkes olevat spektrikujutist, millest igaüks vastab kindlale väärtusele valemis 1. Piisa­valt ula­tusliku spektri mõõtmisel võivad erinevates järkudes spektri­kujutised osaliselt kattuda. Käesolevas töös kasutada olev dif­raktsioon­võre töötab kõige efektiivse­malt 2. järgus. Seega, va­lemi 1 põhjal täpselt sa­made nurkade all liikudes koondub sa­masse punkti detektoril ka kiirgus lainepikkusega (1. jär­gus) või kiirgus lainepik­kusega (3. järgus). Näiteks, kui eesmärk on mõõta spek­ter lainepikkuse 600 nm ümbruses, tu­leks olla kindel, et kiir­guses puuduvad komponendid lainepik­kustega 1200 nm või 400 nm. Probleemi vähendab mõningal määral asjaolu, et õieti valitud difraktsioonvõre korral teis­tesse järkudesse difrageerub oluliselt vähem kiirgust. Lisaks ka sen­sori tundlikkus kukub ära nii ultravioletses kui infrapu­nases piirkonnas. Tõsisemal mõõtmisel tuleks siiski vajalik spektriosa välja eraldada filtriga.

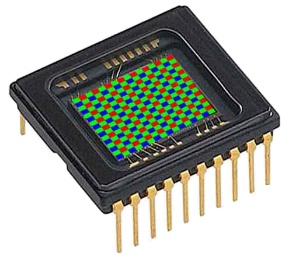
Spektraalseadme võimekust saab iseloomustada mitmete kvantitatiivsete näitajatega. Neist põhiline on lineaarne dispersioon *Dl*, mis näitab seda, mitu millimeetrit nihkub sensorile fokuseeritud monokromaatne valgustäpp, kui val­guse laine­pikkust muudetakse 1 nanomeetri võrra. Tavaliselt väljendatakse seda pöörd­väärtuse kaudu, mida nimetatakse vastavalt pöörd-­dis­per­sioo­niks. Teades täpselt spektro­meetri komponentide omadusi ja paigutust, saab põhimõtteliselt välja arvu­tada iga lainepikkuse jaoks kiirguse liikumise sead­mes ja see­läbi ka seadme lineaarse dispersiooni. Viimane avaldub ilm­selt difraktsioonvõre nurk­dis­per­siooni *Dβ* ja läätse L2 fookuskauguse korrutisena:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2) |

Kui spektromeetri pilu valgustada monokromaatse val­gusega, siis ideaaljuhul tekib sensori pinnale pilu kujutis, st valgus­triip, mis on piluga sama laiune (sest kui läätsed L1 ja L2 on ident­sed, siis süsteemi optiline suu­rendus on üks). Selle kuju­tise ekvivalentne spektraallaius on ilmselt

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (3) |

kus *s* on pilu (ehk selle kujutise) füüsiline laius. Parajalt laia pilu korral võibki avaldisega (3) antud suuruse lugeda seadme spektraal­lahutuseks, sest need lainepikkused, mis sensori pinnal paiknevad üksteisele ruumiliselt lähemal kui *s*, hakka­vad juba kokku sulanduma. Suur dispersioon on seega vajalik eeltingimus suure spektraallahutuse saavutamiseks. Muutes aga pilu aina väiksemaks, pääsevad mingil hetkel valitsema muud põhjused, mis hakkavad piirama sensoril tekkiva spekt­raalkujutise teravust: aberratsioonid, optiliste elementide val­mis­tamise ja paigutuse täpsus, difraktsiooniefektid. Maatriks- või rivisensori puhul tuleb mingil hetkel mängu ka sensorele­mendi (piksli) suurus. Antud kaamera piksli laius on siiski olu­liselt väiksem kui pilu laius (20 µm) ja seega olu­list panust spektraallahutuse vähenemisse ei anna.

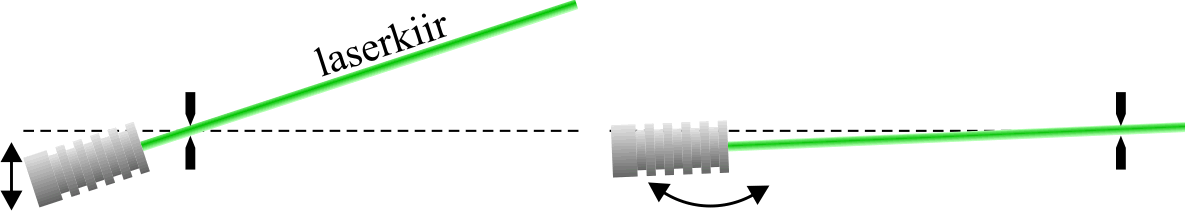
Spektroskoopilised maatriks­sen­so­rid on harilikult värvipimedad, et saavutada maksimaalset efek­tiiv­sust valguse registreerimisel. Meie kasu­tame siin didaktilistel kaa­lut­lus­tel võrdlemisi suure värvisenso­riga (23,4×15,6 mm) hari­likku digi­taal­set fotokaamerat. Selle sensori iga piksel on valguse filtreerimise tulemusena tundlik vaid ühele põhivärvile (sinine, roheline või punane) ja pikslid moo­dusta­vad teatud mustri, nagu kujutatud joonisel (tegelikus sen­soris on pikslite arv muidugi hulga suurem). Põhimõtteliselt oleks võimalik pikslite algsed signaalid teada saada nn RAW-faili salvestamisel, kuid viimased on mahult suured ja nendega opereerimine on tülikas. Seevastu JPEG- või TIFF-failis on pikslite primaarsed signaalid juba omavahel kombineeritud, nii et järgi jääb teatud efektiivne arv ühetaolisi pildielemente (antud juhul ~14 miljonit), kus iga pildielement sisaldab kõigi kolme primaarvärvuse efektiivset signaali. Pil­difaili ei salves­tata mitte tegelikku sensorile langenud valgusenergia väär­tust, vaid rakendatakse teatavat mittelineaarset teisendust, et hõl­mata suuremat dünaamilist diapasooni kui võimaldab pil­difaili digitaalse kodeeringu bitisügavus (näiteks 8 bitti vas­taks vaid 255-kordsele heleduste maksimaalsele suhtele li­neaarse skaala korral). Kui eesmärgiks on vaid spektrijoonte lainepikkuste tuvastamine, siis spektri moonutus ei ole olu­line. Samas on võimalik lihtsa matemaatilise teisendusega taastada ka enam-vähem õige spektraaljaotus.

# Töö käik

Spektromeetri optiline skeem realiseeritakse hori­sontaaltasan­dis, st spektromeetri optiline telg ja seda markee­riv laserkiir hakkavad kulgema kindlal kõrgusel laua pinnast. Opti­lised elemendid joondatakse laser­kiire järgi. Kontrolliks on antud märklaud, milles paiknevat ava peab laserkiir läbima kogu oma teekonnal läbi spektromeetri. Viimaks pärast spektro­meetri pimendamist ja kaamera fokuseerimist saab mõõta spektri.

NB! Vältige otsese või peegeldunud laserkiire sattumist silma! Ärge kummarduge vaatama laserkiire levikut hori­sontaaltasandis! Väl­tige optiliste pindade (eriti difrakt­sioon­võre, peegli ja kaamera sensori) puudutamist! Opti­lisi elemente haarake vaid raamist kinni hoides!

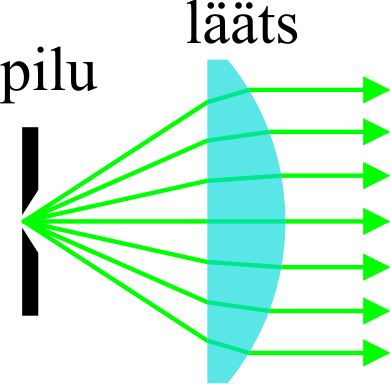
**1. Laseri ettevalmistamine.** Spektromeetrit moodustavate optiliste elementide joondamiseks kasutatakse rohelise diood­laseri kiirt. Kinnitage laser esialgu silma järgi enam-vähem horisontaalsesse asendisse ja lülitage sisse. Nii laseri kõrgust laua pinnast kui ka kiire levikusuunda saab muuta (viimast vastavate re­gu­leer­kru­vi­de­ga). Kui laserkiir liigub täpselt hori­sontaaltasandis ja õigel kõrgusel, siis kiir läbib ava märklauas nii juhul kui viimane on laseri lähedal kui ka juhul kui see on laserist viidud kaugele. Järgneval joonisel on kujutatud prot­se­duur, mis võimaldab süstemaatiliselt laseri joondada sel­lisel viisil. Mõistliku täpsusega saab laseri joondatud, kui seda protseduuri 2–3 korda läbi teha.[[1]](#footnote-1)



Pärast laseri kõrguse ja kalde fikseerimist nihutage laseri mag­netalus sellisesse positsiooni, kus laserkiir lii­guks täpselt opti­lise laua ühe aukuderea kohal. Seda kontrollige jällegi märk­lauaga (millele on joonestatud ka vertikaalne triip joon­du­seks) kasutades äsja mainitud meetodit. Seejärel fikseerige la­seri alus poldiga optilise laua külge (analoogiliselt kinnituvad lauale ka enamus teisi optilisi ele­mente). Edaspidi laserit roh­kem ei liigutata.

**2. Difraktsioonvõre uurimine.** Enne spektromeetri koosta­mist uurime eraldi difraktsioonvõre. Asetage viimane täpselt risti laseri teele (seda saab kontrollida tagasipeegelduse kaudu). Valge paberitüki abil jälgige erinevate difraktsiooni­maksimumide paiknemist ja veenduge, et intensiivseim dif­rakt­sioon tekib tõepoolest 2. järgus. Difraktsioonipildi mõõ­distamiseks on olemas mõõtskaalaga valge ekraan. See tuleb joondada risti laserkiirega ja asetada sellisele kaugusele dif­raktsioonvõrest, et näha oleks parajasti kolme madalaimat dif­raktsioonijärku. Protokollige ekraanil nähtavate valgustäppide kaugused laserkiirest ja ekraani kaugus võ­rest. Nende and­mete baasil saab leida difraktsioon­võre triipude sammu (võrrand 1).

**3. Spektromeetri koostamine.** Esmalt ase­tage laseri teele risti vertikaalne pilu, mille võib spektromeetri koostamise ajaks lõpuni lahti keerata (~0.4 mm). Laseri ja pilu vahele pla­neerige pii­savalt ruumi (~30 cm), et sinna mahuks edaspidi lu­minestsentslamp. Sättige pilu sellisesse asen­disse, et laserkiir langeks täpselt pilu keskele, ja fikseerige see asend.

Pärast pilu tuleb kollimeeriv lääts L1 (üks antud kahest ident­sest läät­sest). Lääts on kinnitatud ratsurile, mida saab li­bistada piki relssi. Aberratsioonide vä­hendami­seks tu­leks lääts orien­teerida nii, et tasane pool oleks suunatud pilu poole (st lääts töötaks valguse murdmisel pris­mana kaldemiinimumi lähe­dal). Kui­võrd lääts peab tekitama kollimee­ritud kiir­tekimbu, siis pilu peab sattuma läätse eesmisse fookusse. Ase­tage ajutiselt vastu pilu tükk õhukest val­get pa­berit, mis hak­kaks la­serkiirt haju­tama ja muutuks seega punktvalgusal­likaks. Kui nüüd lääts viia pilust enam-vähem õigele kaugusele, siis läät­sest väljuv kiir­tekimp muutub kollimeeri­tuks (st ei koondu ega valgu ka laiali). Leitud asendis (kus lääts asetseb enam-vähem relsi kes­kel) tuleb relss kinnitada, joon­dades selle ühtlasi pa­ralleelseks la­serkiirega. Nüüd saab fookust täpsemalt tim­mida. Läätsest väljuv kiirtekimp tekitab mõõtskaalaga ekraa­nil ümmarguse valguslaigu. Kui kiirte­kimp on kollimeeritud, siis ekraani ni­hutamisel nimetatud val­gus­laigu suurus prakti­liselt ei muutu. Selle saavutamiseks mõõtke esmalt valguslaigu suurus läätse vahetus läheduses (kus tulemus on määratud läätse ava suuru­sega) ja seejärel läätse nihutamise teel piki relssi püüdke saa­vutada sama suurusega valguslaik ka läätsest kaugel. Opti­maalses asendis fikseerige lääts ning mõõtke ja protokol­lige läätse foo­kus­kaugus (läätse tasasest pinnast ekraani või piluni).

Nüüd võib pilule asetatud paberitüki eemaldada, et saaks la­serkiire järgi reguleerida ka läätse ülejäänud koordinaate. Re­guleerida saab nii läätse kõrgust kui ka külgnihet, vabasta­des vastavad fikseerimiskruvid. La­serkiir, kui see langeb täpselt läätse keskele piki optilist telge, ei kaldu kõrvale algsihist, mida saab jällegi märklauaga kontrollida, ase­tades viimase vä­hemalt pool meetrit läät­sest teisele poole.

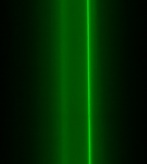
Järgmine element, tasapeegel, tuleks asetada läätsest umbes 150–200 mm kaugusele (määratud pimenduseks kasutatava pappkarbi suurusega). Difraktsioonvõre mahub parajasti opti­lise laua kahe auguvahe võrra nihutatud positsiooni läätse L1 lähedale. Kuigi peegel ja difraktsioonvõre on tasapindsed, tu­leks la­ser­kiir juhtida ikkagi tingimata nende elementide kes­kele (mitte serva lähedale), sest reaalsete mõõtmiste ajal hak­kab spektro­meetris liikuma mitte peenike valguskiir, vaid ~40 mm jäme­dune valguskiirte kimp, mis peab ära mahtuma kõigi op­tiliste elementide apertuuri sisse. Valgusvihu laiust tu­leb silmas pi­dada ka difraktsioonvõre positsioneerimisel, et lääts L1 ei jääks valgusvihu teele ette. Peegli ja difraktsiooni­võre pööra­mise teel (kasutades eespool mainitud protseduuri) püüdke saavutada olukord, kus heledaimale dif­raktsioonimak­simu­mile vastav kiir hakkaks liikuma täpselt ülejärg­mise pa­ral­leelse aukuderea kohal. Siinkohal võib eel­dada, et dif­rakt­sioonvõre ja tasapeegel on piisava täpsusega vertikaalsed. Kuivõrd edasised spektraalmõõtmised toimuvad samuti näh­tava spektriala keskosa ümbruses, siis difraktsioon­võre jääbki sellisesse asendisse praktikumi lõpuni. Mõõtke malliga ja pro­tokollige difraktsiooninurga väärtus.[[2]](#footnote-2)

Vii­mase elemendina asetage paika koondav lääts L2, mis jäl­legi peab jätma laserkiire suuna muutumatuks. Läätse võib paigu­tada difraktsioonvõrele nii lähedale, et see ei hakkaks hiljem takis­tama tasapeeglilt lähtuvat kollimeeritud kiirte­kimpu.

**4. Kaamera paigaldamine.** Asetage vastu sisendpilu lu­mi­nest­sentslamp, mille mõningaid teravaid spektrijooni saab ühtlasi ka­sutada kaamera fokuseerimiseks. Esmalt püüdke saavutada spektrikujutise moodustumine valgele ekraanile, asetades selle koondava läätse L2 fokaaltasandisse (kuju­tise detailseks vaatamiseks võib vajalik olla toa pimendamine). Nihutage ekraan asen­disse kus spektrijooned saavutavad mak­simaalse tera­vuse.

Nüüd võib ekraani asemele paigutada fotokaamera, nii et spektrikujutis koonduks sensori pinnale. Sensor on tsentreeri­tud kaamera kinnituse suhtes. Laser­kiire tagasipeegelduse järgi saab sensori orienteerida täpselt risti langeva kiirega. Kaamera kõrgust ei pea reguleerima, sest sensor on piisavalt suur spektri heledaima piirkonna haaramiseks. Fikseerige kaa­mera alus poldiga laua külge.

Viimaks katke spektromeeter musta pappümbrisega. Viimases on ole­mas ava sisendpilu ja kaamera jaoks ning luuk, mis või­maldab ligipääsu läätse L2 kinnitusele. Ideaaljuhul peaks val­gus pää­sema spektro­meetrisse vaid läbi sisendpilu.

**5. Fokuseerimine ja spektri mõõtmine.** Spektraalmõõtmis­teks seame pilu laiuseks 20 µm.[[3]](#footnote-3) Lülitage kaamera sisse ja va­lige manuaalse särituse re­žiim. Seejuures tuleb eelistada või­malikult lühikest ekspositsioo­niaega, et spektri­joonte asuko­has ei oleks sensor küllastuses (vastasel juhul te­ravaid spektrijooni ekraanile ei teki). Kaa­mera täpseks fokuseerimiseks on ka­sulik akti­veerida ka manuaalse fokusee­rimise režiim, mis kuvab LCD ekraanil suurendatud kujutise. Lii­gu­tage kujutis spektri keskele ja läätse L2 nihu­tamisega piki op­tilist telge püüdke saavutada olukord, kus keskne intensiivne roheline spekt­rijoon oleks maksimaal­selt selgelt lõhenenud kaheks kompo­nendiks, kusjuures üks joon­test (mis pärineb gaaslahendu­sest) peab muutuma äärmi­selt te­ravaks.

Lambi spektri võiks mõõta vähemalt kolme erineva säriajaga. Vähim säriaeg peaks garanteerima, et ka kõige intensiivsemad spektrijooned ei küllasta sensorit. Suurem ekspositsiooniaeg võib siiski olla kasulik nõrgemate spektrijoonte vaatlemiseks. Pärast säritust saadud kujutis salvestub automaatselt JPEG-failina.

Viimaks võiks veel korra seadistada kaamera fookust ja kor­rata spektri mõõtmist.

# Andmete töötlemine ja protokolli vormista­mine

Ar­vutused võib teos­tada ja protokolli vormistada meelevald­ses süsteemis (MS Word, Mathcad, Jupyter, jne), kuid proto­koll peab olema viimaks esitatav lõppkujunduses tervikliku failina (nt PDF või HTML). Protokoll peab olema loogilises järjestuses liigendatud (nagu järgnevas kirjeldatud) ja kõik andmetöötlusetapid arusaadavalt pealkirjastatud. Piisavate selgitustega ja korrektselt vormis­tatuna tuleb välja tuua kõik vajalikud lähteandmed, arvutusteks ka­sutatud valemid ja ar­vutustulemused.

Veaarvutus on nõutav vaid difraktsioonvõre võresammu ja spektromeetri teoreetilise dispersiooni jaoks. Seejuures, kuna tegemist on võrdlemisi lihtsate valemitega, siis kaudmõõtmise määramatuse jaoks vajalikud osatuletised võiks leida käsitsi ja korrektselt välja kirjutada (st mitte leida numbrilise või süm­bolarvutuse teel).

Proto­koll tuleb saata e-postiga praktikumi juhendajale aad­res­sil [valter.kiisk@ut.ee](mailto:valter.kiisk@ut.ee).

Järgnevalt anname mõned suunised arvutuste teostamiseks Mathcad’is ja Pythonis.

## Mathcad

Mathcad’i puhul tuleks võimaluste piires kasutada loomulikke muutujanimesid ja ühikuid (kooskõlas füüsikaliste suuruste tähistega käesolevas juhendis). Sellest hoolimata tuleks lühi­dalt kommenteerida iga kasutuselevõetud muutuja või saadud arvutustulemuse tähendus. Mathcad’i jaoks on Moodle’s saa­daval protokolli toorik, kus on kirjas üldine arvutusloogika.

**1. Pildifaili ettevalmistus.** Salvestatud spekt­ri­ku­ju­ti­sed on algkujul (14 megapikslit) liiga massiivsed Mathcad’i lugemi­seks. Fotodest tuleks välja lõi­gata vaid intensiivseim ridade­vahemik (see ei pruugi paikneda täpselt sensori keskel). Seda operatsiooni (kärpimist, i.k. crop) saab läbi viia tüüpilise foto­töötlusprog­rammiga, näiteks vabavaralise rakendusega IrfanView (Edit 🞂 Crop selection). Sama programm lubab uurida ka üksikute pikslite signaale (veendumaks et pilt ei ole üle eksponeeritud). 24-bitises pildifailis iga primaarvärvuse heledust kirjeldab täisarv vahemikus 0 kuni 255 (st 8-bitine väärtus), seega tuleks jäl­gida, et intensiivseimate spektrijoonte kohal oleks heledus kindlalt väiksem kui 255. Kärbi­tud kuju­tised salvestada uuesti JPEG formaadis (maksimaalse kvali­teediga, sest JPEG pakitakse kadudega).

**2. Difraktsioonvõre.** Enne spektromeetri koostamist sai vaa­deldud difraktsiooni tekkimist laserkiire langemisel risti ase­tatud difraktsioonvõrele. Seega langemisnurk ja dif­raktsiooni peamaksimumide võrrandist (1) saame lihtsa seose

kus laseri lainepikkus . Seega graafikul, mis ku­jutab sõltuvust -st, peaksid katsepunktid langema sir­gele, mis kulgeb läbi koordinaatide alguse ja mille tõus annab suhte .

Kui meil on katsepunkti , kus sõltumatu muutuja määramatus on tühine, siis koordinaatide algust läbiva reg­ressioonsirge tõus vähimruutude meetodil ja selle standardmääramatus avalduvad valemitega

Summad esimeses valemis saab Mathcad’is mugavalt arvu­tada vastavate vektorite skalaarkorrutisena. baasil saab ar­vutada ka määramatuse. Laseri lainepikkuse piirveaks võib hinnata 0,5 nm ja B-tüüpi määramatus on vastavalt  nm.

**3. Spektraaljaotus.** JPEG-formaadis pildifaili saab laadida maatriksi kujul Mathcad’i funktsiooniga READRGB. Nagu ees­pool mainitud, tavafotograafia otstarbega kaamera teostab keerulist pilditöötlust, millega moonutab algset optilist sig­naali. Meie vaja­dusteks piisab täiesti kui pildifailist loetav sig­naal tõsta ast­messe 2 (see on lähedane gamma-korrektsioonile, mida kasu­tatakse sRGB värviruumis [1]). Ar­vutuskiiruse huvides tasub see teisendus rakendada kohe algse pildimaatriksi elementi­dele vektoriseerimisoperaatori abil.

Funktsiooniga READRGB laaditud pildimaatriksis sisaldub kolm primaarvärvuste hele­duste maatriksit, mis on kõrvuti kokku pandud (järjestuses pu­nane, roheline, sinine). Funkt­siooni submatrix abil saab need üksteisest eraldada. Spekt­roskoopilise signaali hinnan­guks tuleb võtta mingisu­gune kombinatsioon nendest kolmest värvisignaalist. See valik määrab lihtsalt sensori efektiivse spekt­raalse koste. Näi­teks, kui võtta valguse intensiivsuseks vaid roheliste pikslite sig­naal, siis sensor saab olema väga tuim sinise ja punase spekt­riosa esin­damise suh­tes ning pu­naste ja siniste pikslite kogu­tud signaal läheks asjatult kaotsi. Luminestsentslambi spektri­joonte vahekorda arvestades võiks mõistlik valik olla umbes . Viimaks, spektri tavapärase graafilise esituse (intensiivsus vs. lainepik­kus) saamiseks tuleb igas pikslivee­rus heledused summeerida (vektori elementide summeerimi­seks on Mathcad’is spetsiaalne summa-operaator, mis tekib klahvivajutusega Ctrl+4).

**4. Spektraalskaala kalibreerimine.** Spektraalskaala ka­lib­reerimiseks on tarvis kindlate lainepikkustega spektrijooni. Luminestsentslambi kiirguses on sellisteks spektrijoonteks elavhõbeda (Hg) gaaslahenduse kiirgusjooned lainepikkus­tega 435,83, 546,07, 576,96 ja 579,07 nm [2]. Spektrijoonte koordinaate (pikslite skaalas) saab otse Mathcad’i graafikult välja lugeda, kasutades kontekstimenüüst avanevaid vahen­deid Zoom ja Trace. Märgime, et ideaalis tuleks spektrijoone asukohad identifitseerida täpsemalt kui on ühe piksli laius, seega ei ole soovitav koostada algoritmi, mis leiab lihtsalt mak­simaalse signaaliga piksli.

Kaks viimati mainitud spektrijoont, kuigi väga teravad, on sa­mas väga nõrgad. Seega esmase skaala võib paika panna kahe tugevaima spektrijoone järgi (eeldades konstantset disper­siooni), seejärel on kerge leida üles ka nõr­gemad joo­ned. Tu­lemusena esitage spektrijoonte tabel (maat­riks), kus esimeses veerus on piksli järjekorranumber ja teises veerus sellele vas­tav lainepikkus. Siit saab veeruoperaatoriga eral­dada oma­korda vastavad andmevektorid. Konstantse dis­per­siooni eel­dusel peavad saadud andmepunktid langema kõik ühele sir­gele. Kui mõni katsepunkt silm­nähtavalt hälbib sel­lest sirgest, on tõenäoliselt tegemist veaga spektrijoonte in­terpreteeri­mi­sel. Regressioonsirge parameetrid saab funkt­siooniga line. Katsepunktide ruutkeskmine hälve lähendus­sirgest annab üht­lasi hinnangu saadud lainepikkuste skaala täpsusele. (Mär­gime, et siin meid huvitab vaid hinnang skaala täpsusele, mitte määramatuse arvutamine.)

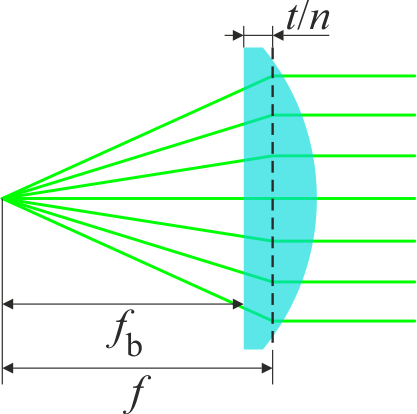
Lõpptulemina esitage luminestsentslambi spekter juba nano­meetrite skaa­las. Leidke lambi luminofoorkattest pärinevate tugevamate spektrijoonte lainepikkused (roheline ja punane kiirgus).

**5. Eksperimentaalne dispersioon ja lahutusvõime.** Mää­rake spektromeetri li­neaarse pöörd-­dis­persiooni väärtus (ühi­kutes nm/mm). Selleks on ühelt poolt tarvis teada kahe naa­berpiksli lainepikkuste erinevust (mille annab äsja leitud lä­hendussirge tõus), teiselt poolt piksli füüsilist laiust (viimase saab teada sensori kogulaiuse ja resolutsiooni kaudu). Lahu­tusvõime hinnanguks võib võtta 576,96 või 579,07 nm spekt­rijoone täislaiuse poolel kõrgusel. Nende spektrijoonte tõeli­sed laiu­sed on eeldatavasti hulga väiksemad kui on antud seadme spektraallahutus.

Nimetatud spektrijooned on paraku võrdlemisi nõrgad, seega võib võtta mõne pikema säriajaga spektrikujutise. Li­saks asuvad need jooned laia fooni peal. Vii­mast saab kir­jeldada heas lähendu­ses sir­gega. Seega tuleb kum­malgi pool spektrijoont võtta üks punkt foonil, saadud kahe punkti baasil konstrueerida sirge ja see maha lahutada algsest spekt­rist. Jällegi, kõiki vajalikke koordinaate (sh spektrijoone mak­simumi tugevust) saab graafikult välja lugeda vahendiga Trace (kusjuures Track data points on antud juhul soovitav välja lüli­tada, sest pikslid paiknevad liiga jämeda sammuga ja müra tõttu joonte profiil ei pruugi olla väga regulaarse ku­juga).

**6. Teoreetiline dispersioon ja lahutusvõime.** Lineaarse pöörd-dispersiooni teoreetilise väärtuse (koos määramatu­sega) saab vale­mist (2), kus läheb tarvis malliga mõõdetud dif­raktsiooninurka ja koondava läätse (efektiivset) fookuskaugust . Vii­mase puhul tuleb arvestada, et otseselt mõõdeti mitte , vaid fookuse kaugus läätse tagumisest, tasasest pinnast (back focal distance). Tähista­gem see mõõt . Nagu kiirteoptikast teada, on ainult õhukese läätse korral . Paksu läätse korral on kõik paraksiaalse lähenduse valemid keerulisemad, sisaldades ka läätse paksust [3]:

kus ja on vastavalt eesmise ja tagumise pinna kõverus­raadiused ja on klaasi murdumisnäitaja. Praegusel juhul on tagumine pind tasapind (), mille tõttu saame lihtsa seose . (Teiste sõnadega, vas­tav peatasand asub läätse sees, kaugusel läätse tasasest pinnast.) Kasutatava läätse jaoks ja .



Määramatuse arvutamisel saab ära kasutada eespool leitud väärtust. Seevastu ja jaoks tuleb hinnata piirviga ja selle baasil B-tüüpi määramatust.

La­hu­tus­või­me teoreetiliseks hinnanguks võib võtta valemiga (3) antud spektraalpilu laiuse, mille saab pilu füüsilise laiuse ja disper­siooni kaudu.

## Python

Pythonis (nt Jupyter’i keskkonnas) andmetöötlust tehes leiab kõik vajalikud vahendid moodulitest numpy ja matplotlib.pyplot. Järgnevalt vaid mainitakse olulised käsud. Vajadusel tuleks vaadata detailsemat teavet dokumen­tatsioonist [4,5]. Sisuline arvutusskeem ja vormistusnõuded on samad, mis Mathcad’i puhul, ja seda siin üle ei korrata.

Pildifaili saab sisse lugeda käsuga imread. See tagastab kol­memõõtmelise NumPy massiivi, kus esimese mõõtme sihis kulgevad read, teise mõõtme sihis pikslid reas, ja kolmanda mõõtme sihis kolm primaarvärvuse väärtust. Kõik vastavad mõõdud saab teada atribuudiga shape. Pildi saab kuvada kä­suga imshow.

Indekseerimise teel saab välja eraldada sobiliku ridadevahe­miku (st eraldi programmiga pole vaja kujutist kärpida). Mas­siivi saab otse ruutu tõsta (kõik aritmeetilised ope­ratsioonid on vektoriseeritud, nagu ka Mathcad’is). Enne tu­leks siiski and­metüüp teisendada reaalarvuks (numpy.float) meetodiga astype, sest algne andmetüüp on väike täisarv (numpy.uint8), mille ruututõstmisel võib tekkida ületäitu­mine.

Kahemõõtmelised R, G ja B maatriksid saab eraldada indek­seerimise teel, vajadusel enne sobivalt muutes massiivi kuju funktsiooniga swapaxes (või moveaxis). Spektroskoopi­lise signaaliks tuleb võtta kombinatsioon nen­dest kolmest värvisignaalist. Viimaks tuleb igas piksliveerus hele­dused summeerida (meetod sum). Spektri graafiku saab kä­suga plot.

Esialgu võib graafiku x-teljel kuvada lihtsalt pikslite järjekor­ranumbrid (mille saab käsuga numpy.arange) ja graafik ise teha „elav“ (Jupyter’i töölehel näiteks käsuga %matplotlib notebook), nii et oleks näha hiirekursori koordinaadid. Sel viisil saab kindlaks teha tuntud spektri­joonte keskpunktide asukohad (vajadusel suumida graafikut). Need tuleks koon­dada järjendisse. Teise järjendisse tuleks sa­mas järjekorras kirja panna vastavad teadaolevad lainepikku­sed. Nüüd käsuga numpy.polyfit saab sobitada sirge (või isegi mõne kõrge­mat järku polünoomi) läbi selle sõltuvuse.

Viited

[1] <https://en.wikipedia.org/wiki/SRGB>

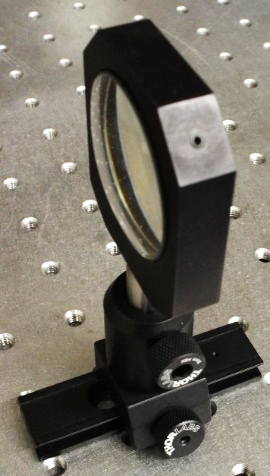
[2] <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Handbook/element_name.htm>

[3] <https://en.wikipedia.org/wiki/Focal_length>

[4] <https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/index.html>

[5] <https://matplotlib.org/api/pyplot_api.html>

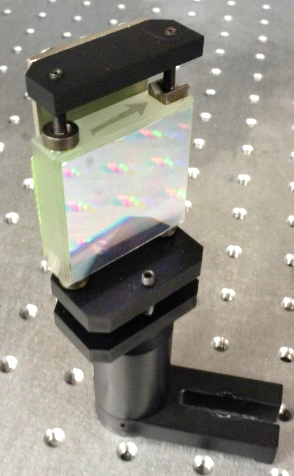
1. Katsevahendid



lääts relsil

difraktsioonvõre

kaamera

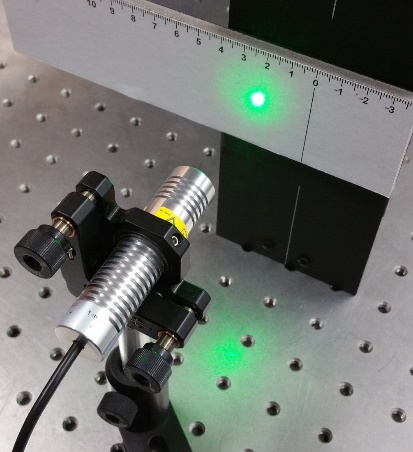
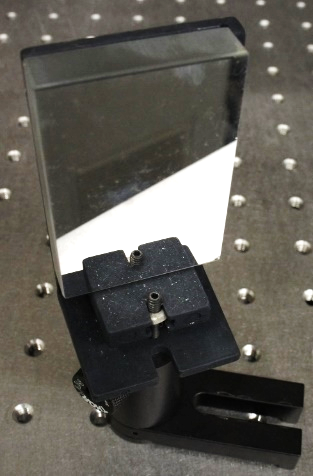


luminestsentslamp

laser ja ekraan

pilu

tasapeegel



märklaud



1. Selline algoritm kirjel­dab põhimõtteliselt kahest võrrandist koosneva ja kahte tund­matut sisaldava võrrandisüsteemi lahendamist numbrilise lä­hendamise teel. [↑](#footnote-ref-1)
2. Tõenäoliselt mõnevõrra täpsemalt saaks difraktsiooninurga väärtust määrata mõõtes nurkade asemel kauguseid, näiteks peegli ja võre keskpunktide vahekaugust. Lisaks on teada, et optilisel laual kahe naaberaugu vahekaugus on täpselt 25 mm. Neid andmeid kasutades saaks kõik nurgad arvutada võrrandi 1 baasil. Kuna aga sel teel nurkade ja avaldamine nõuab mittelineaarse võrrandisüsteemi lahendamist, tuleb nurkade suurust siiski ka silma järgi hinnata. [↑](#footnote-ref-2)
3. Pilu mehaaniline skaala ei pruugi olla päris täpne. Vastava pärandi saab arvesse võtta, keerates pilu aeglaselt koomale kuni hetkeni kus pilu täpselt sulgub (st pilu läbiv laserkiir ühel hetkel kaob ära). [↑](#footnote-ref-3)