

Dall'acquisizione dell'immagine allo spettro calibrato

Marco Anni

Dipartimento di Matematica e Fisica "Ennio De Giorgi"

Università del Salento, Lecce

Per poter utilizzare lo spettrometro è necessario imparare ad utilizzare il programma *CellPhoneSpec*, che consente di estrarre i dati dell'intensità di emissione in funzione della lunghezza d'onda, partendo dalla foto della luce che raggiunge il rivelatore dello spettrometro auto costruito.

In questa guida illustreremo i vari passaggi necessari per passare dalla foto di un generico spettro al file ASCII dell'intensità in funzione della lunghezza d'onda, partendo dalla misura dello spettro di una lampada a basso consumo, necessario per calibrare lo spettrometro.

Lo spettro delle lampade a basso consumo o dei tubi al neon porta ad un'immagine salvata dal sensore dello spettrometro simile a quella riportata in Figura 1:

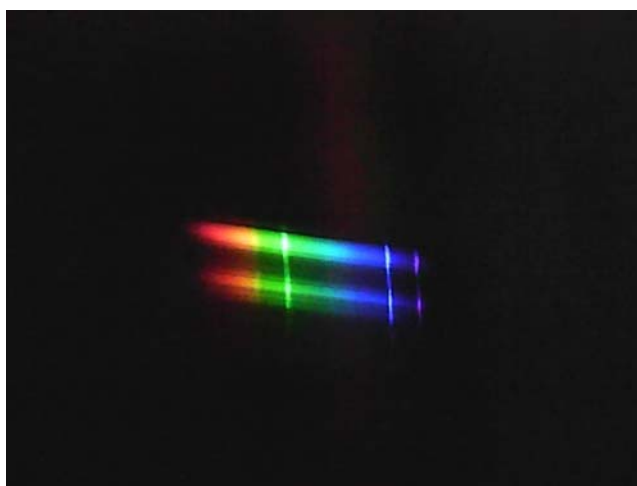


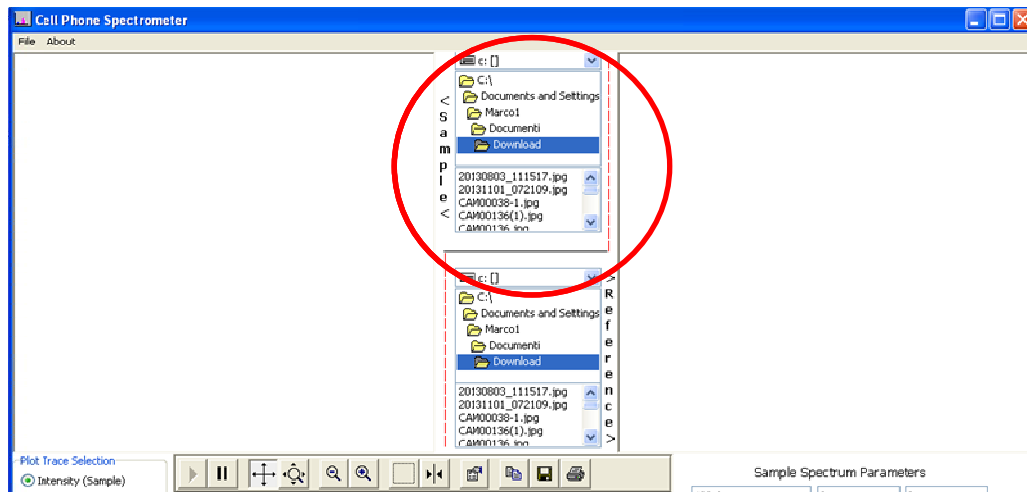
Figura 1: tipico risultato dell'acquisizione dello spettro di un tubo al neon o di una lampada a basso consumo.

Lo spettro mostra chiaramente la presenza di righe discrete, dovute ad emissione di Mercurio, sovrapposte ad un fondo continuo dovuto all'emissione di fosfori sulla superficie interna del tubo, che portano alla percezione di luce bianca.

Le righe del mercurio sono utili alla calibrazione dello spettrometro.

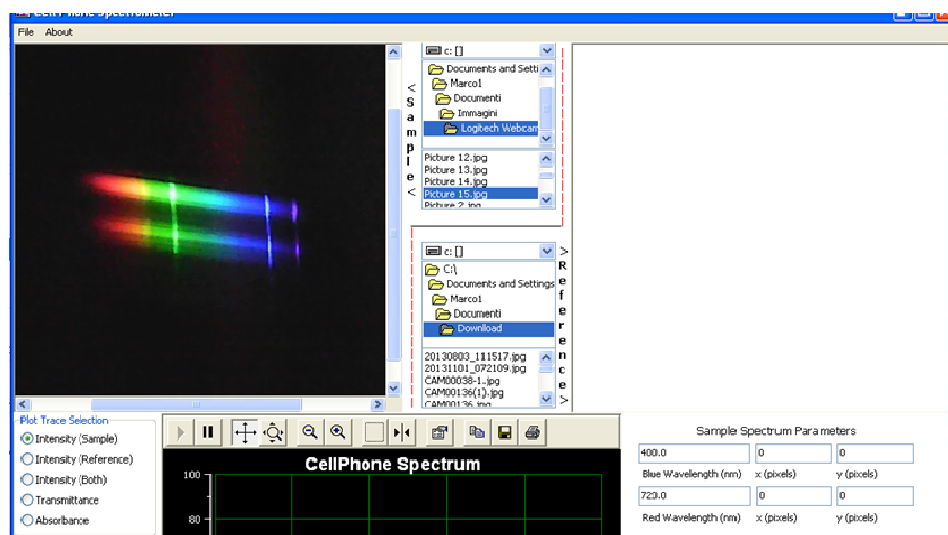
Importazione dell'immagine ed estrazione dello spettro

Dopo aver aperto il Programma è necessario caricare l'immagine dello spettro, selezionando il file dell'immagine nel menù al centro in alto (cerchio rosso in Figura 2).



da

L'immagine viene aperta nel pannello di sinistra e muovendosi con le due barre di scorrimento può essere centrata la regione in cui si osserva la luce della lampada (vedi Figura 3).



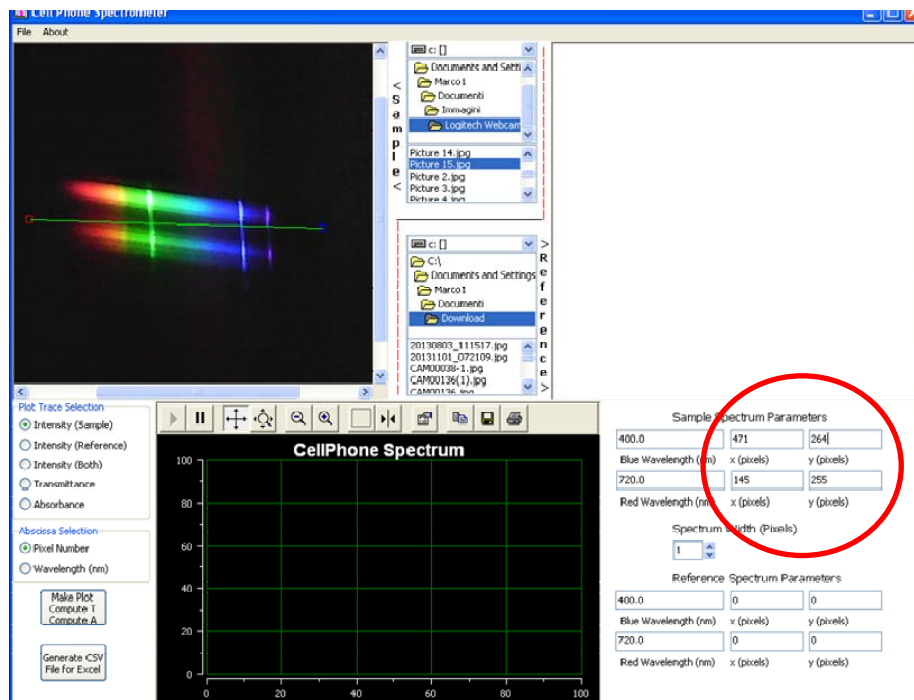


Figura 4: selezione della riga e indicazione delle coordinate degli estremi (cerchio rosso).

Per estrarre lo spettro è sufficiente determinare il punto iniziale e quello finale della riga di cui si vogliono estrarre i dati cliccando sull'immagine. Il software chiede se il punto selezionato è l'estremo nel blue dello spettro o quello nel rosso (o nessuno dei due per annullare la selezione).

Per essere sicuri di selezionare un intervallo di x sufficientemente grande è sufficiente selezionare l'estremo blue a destra dell'ultimo segnale blue visibile, e quello rosso a sinistra del rosso (vedi Figura 4).

Nell'effettuare la selezione, se possibile, si cerchi di selezionare una riga perpendicolare alle righe del mercurio (se risulta più semplice le coordinate degli estremi della riga si possono inserire direttamente nei campi x e y di *Sample spectrum parameters*).

Per aumentare il rapporto segnale rumore il programma consente di sommare righe orizzontali sopra e sotto la selezione, in numero deciso dal parametro *Spectrum width*. Tale numero può essere aumentato fino a coprire tutta la zona in cui c'è segnale (vedi Figura 5).

Per ottenere il grafico dello spettro si seleziona Wavelength (nm) nel campo *Abcissa selection*, e poi si preme *Make Plot*.

Infine, premendo *Generate CSV file for Excel* il programma salva un file ASCII con i valori di intensità nei vari pixel e i campi separati da una virgola (vedi Figura 6).

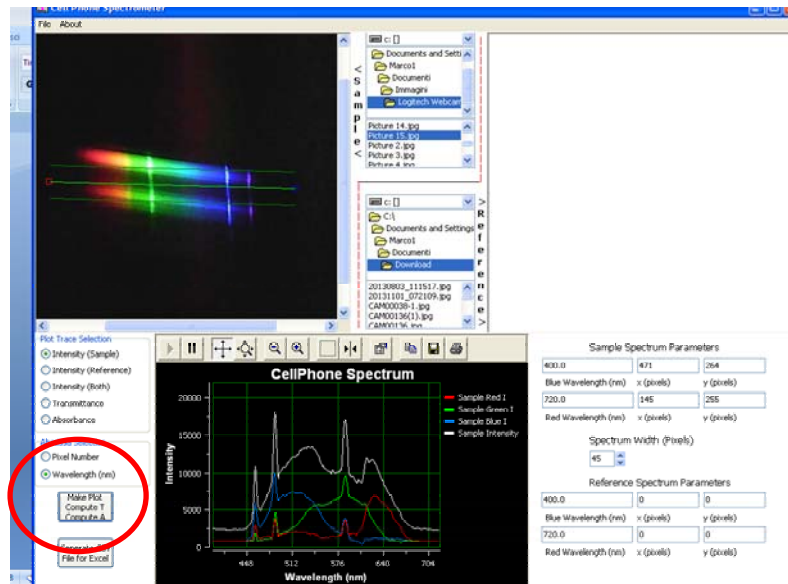


Figura 5: selezione del numero di righe su cui sommare il segnale ed indicazione del tasto per graficare il risultato (cerchio rosso).

```

CellPhoneData.txt - Blocco note
File Modifica Formato Visualizza ?
pixel number, wavelength, isample(red), isample(green), isample(blue), isample(total), pixel
number, wavelength, iref(red), iref(green), iref(blue), iref(total), wavelength,
Transmittance, Absorbance
0,400,427,427,427,1281,
1,400,63872255489,421,421,421,1263,
2,401,27744510978,413,413,411,1237,
3,401,926167664671,412,412,410,1234,
4,402,554890219561,409,409,403,1221,
5,403,193612774451,407,407,401,1215,
6,403,832335329341,407,407,401,1215,
7,404,471057884232,411,411,405,1227,
8,405,109780439122,441,423,428,1292,
9,405,748502994012,445,427,432,1304,
10,406,387225548902,451,425,438,1314,
11,407,025948103792,449,423,436,1308,
12,407,664670658683,448,428,438,1314,
13,408,303393213573,445,425,435,1305,
14,408,942115768463,444,418,441,1303,
15,409,580838323353,444,418,441,1303,
16,410,219560878243,429,403,426,1258,
17,410,858283433134,424,398,421,1243,
18,411,497005988024,420,400,410,1230,
19,412,135728542914,421,401,411,1233,
20,412,774451097804,411,403,407,1221,
21,413,413173652695,414,406,410,1230,

```

Figura 6: struttura del file salvato, aperto con Blocco note, e salvato con estensione txt.

Importazione in Excel

Per importare il file in *Excel* senza problemi di lettura (che dipendono da come è impostato il separatore tra i vari campi) conviene aprire il file con *Blocco note*, e salvarlo come file .txt. In tal modo al momento dell'apertura *Excel* chiede quale carattere impostare come separatore decimale. Selezionando la virgola il file viene aperto correttamente.

I vari passaggi sono:

- 1) Aprire *Excel*;
- 2) Selezionare *Apri* e l'opzione *Tutti i file*.
- 3) Andare nella cartella dove si è salvato il file e selezionare il file da aprire (Figura 7).

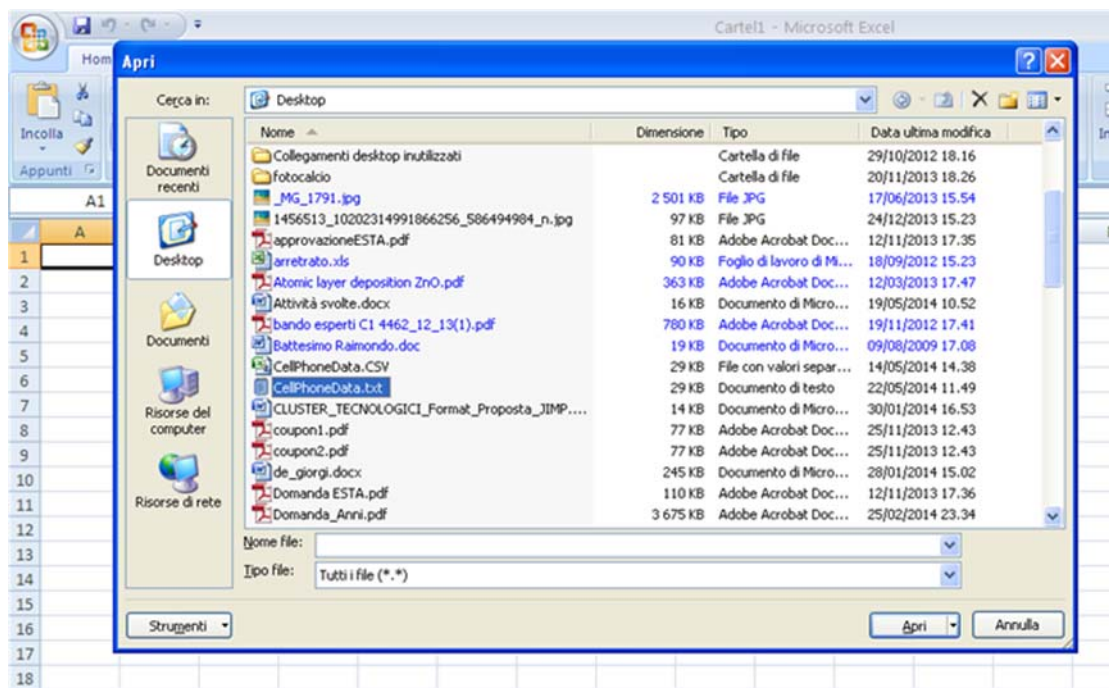


Figura 7: impostazione di *Tutti i file* nel campo *Tipo di file* e selezione del file .txt da aprire.

- 4) Premere *Apri*
- 5) Nel campo *Tipo di dati* selezionare *Delimitato* (Figura 8)
- 6) Nel campo *Inizia ad importare alla riga* selezionare 2
- 7) Selezionare *Avanti*
- 8) Nel campo *Delimitatori* selezionare *Virgola* (Figura 9)
- 9) Selezionare *Avanti*
- 10) Selezionare *Fine* (Figura 10)

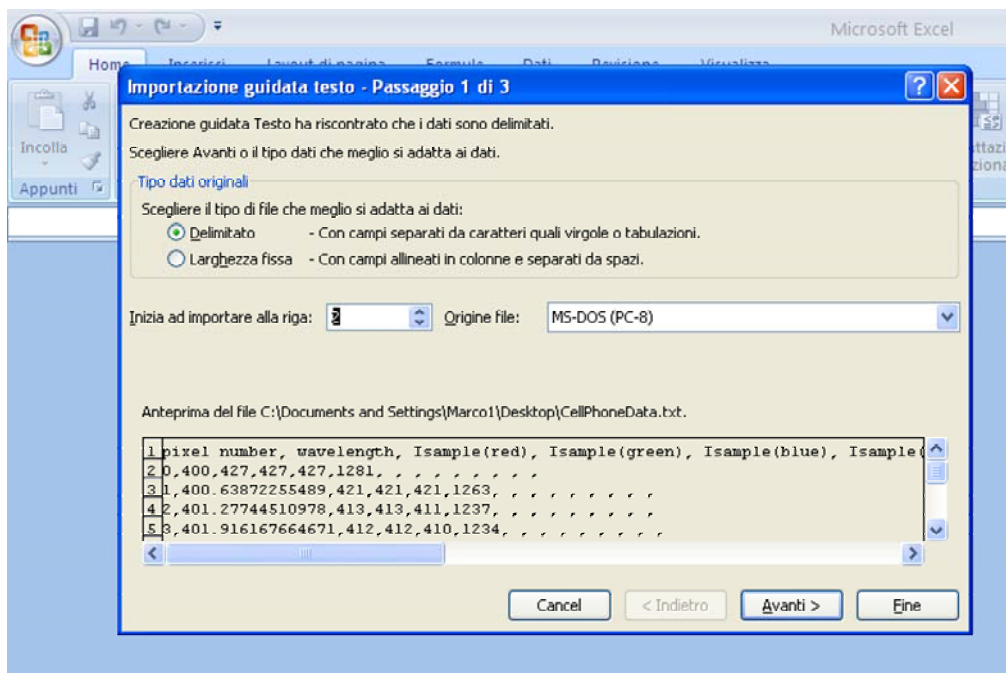


Figura 8: impostazione di *Delimitato* e dell'importazione a partire dalla riga 2.

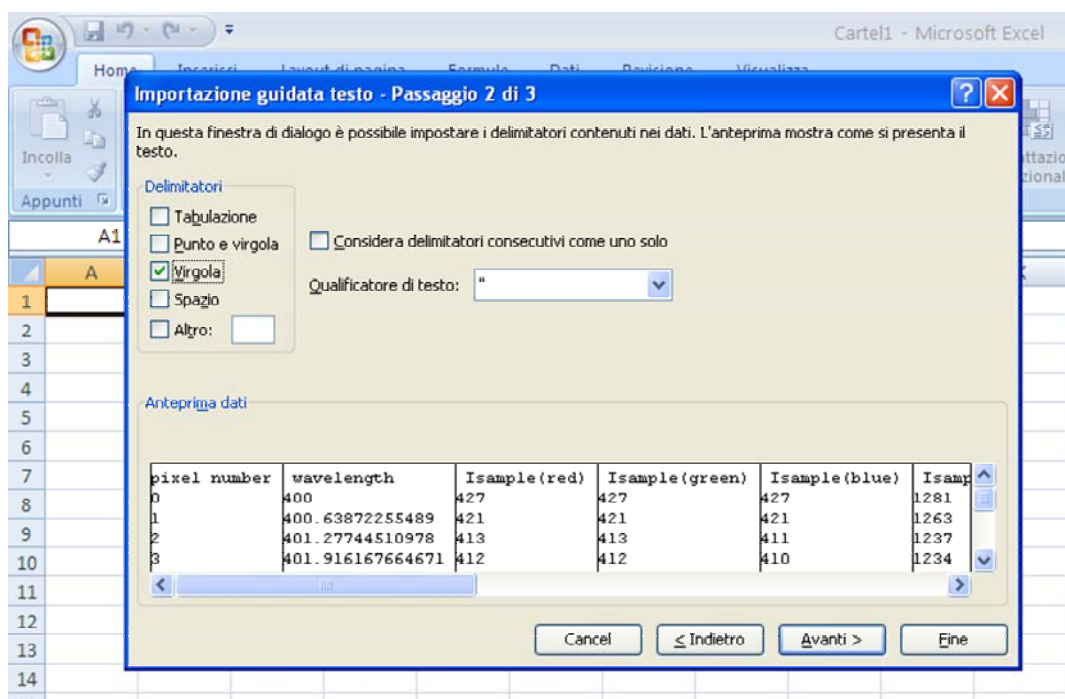


Figura 9: impostazione della virgola come separatore tra i campi e anteprima della separazione dei campi.

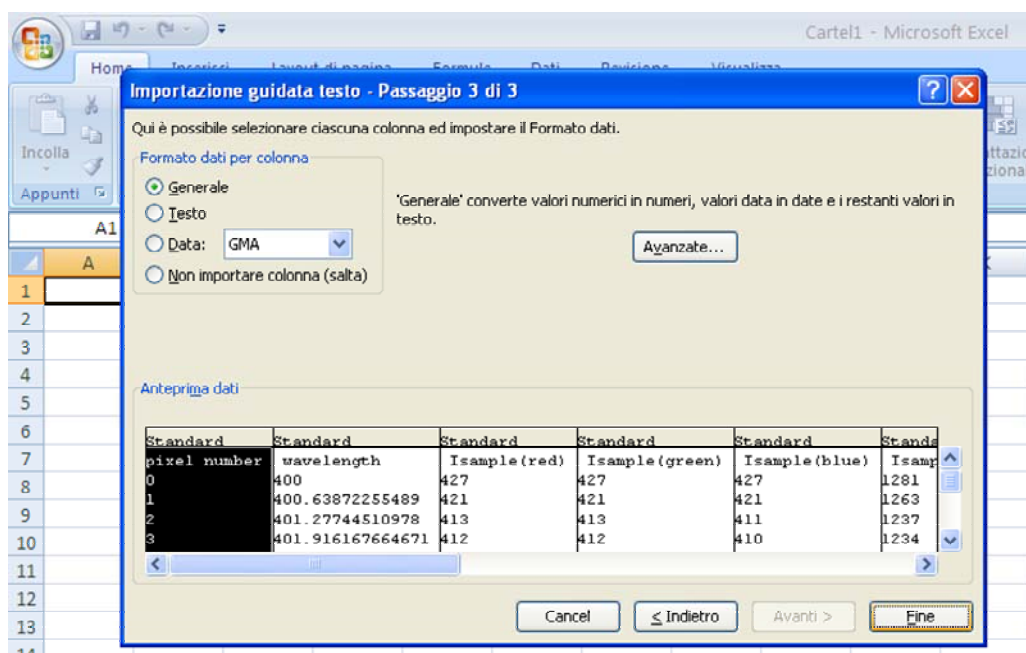


Figura 10: ultimo passaggio dell'apertura del file.

Il File che si ottiene (vedi Figura 11) contiene sei colonne che nell'ordine da sinistra a destra sono:

- Colonna A numero di pixel;
- Colonna B lunghezza d'onda (non affidabile fino alla calibrazione)
- Colonna C, D, E intensità misurata dai pixel rossi, verdi e blue del rivelatore, rispettivamente.
- Colonna F intensità totale.

Calibrazione e spettro finale

Per effettuare la calibrazione ed ottenere lo spettro finale:

- 1) aprire il file Excel *Estrazione_spettri.xls*,
- 2) Selezionare le sei colonne del file contenente i dati e copiarle nelle prime 6 colonne del foglio Spettro_iniziale.
- 3) Cliccare sulla linea del grafico e sovrapporre il puntatore al punto sperimentale di massima intensità della prima riga di emissione del Mercurio sulla sinistra e inserire nella cella K1 il valore indicato dopo “Punto” nel rettangolo che si apre (vedi Figura 12);
- 4) Individuare il pixel di massima intensità della terza riga del Mercurio e inserire il valore nella casella K2 (Terza riga pixel).

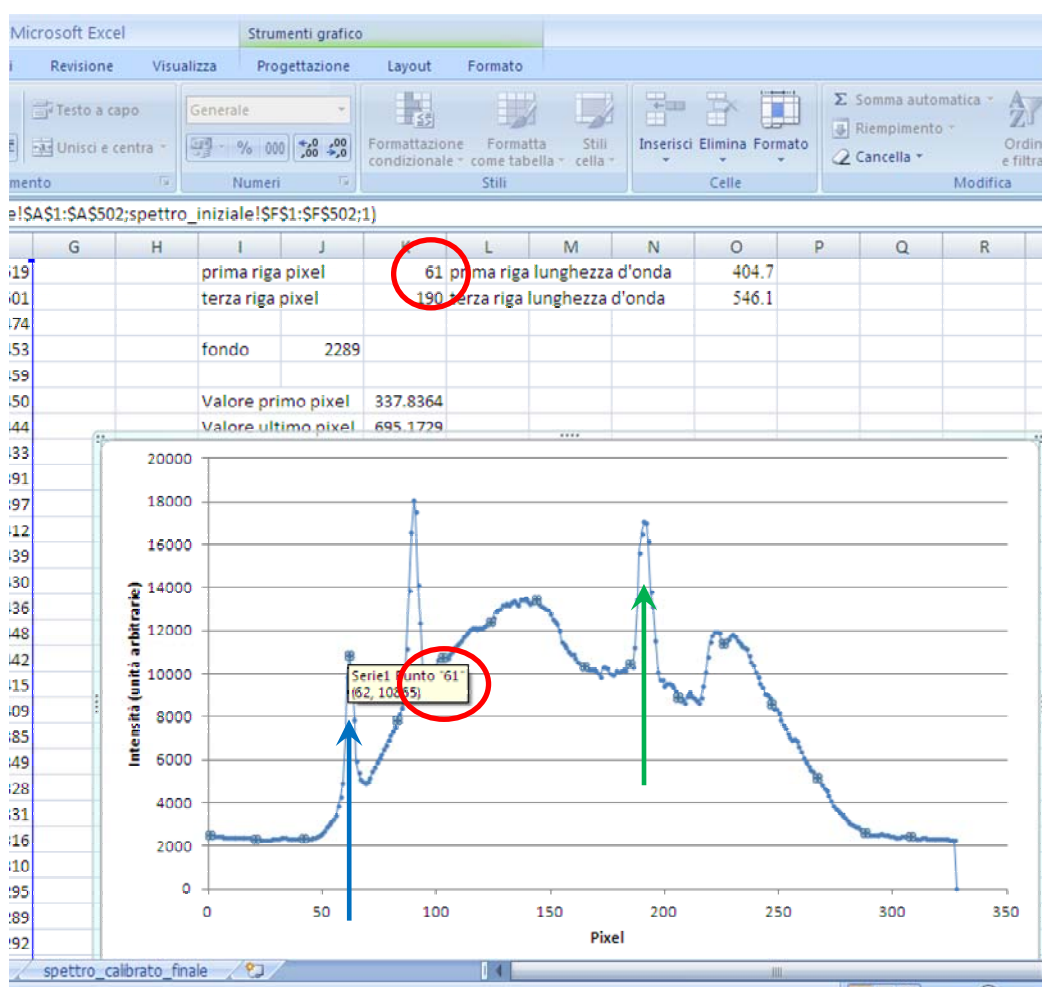


Figura 12: individuazione del valore dei pixel di massima intensità della prima e della terza riga spettrale (evidenziate dalle frecce blue e verde, rispettivamente). La posizione della prima riga è stata evidenziata cliccando sulla riga e sovrapponendo il cursore alla riga. Il cerchio rosso indica il valore da inserire nella cella K1.

5) In alcuni casi potrebbero esserci due o più punti sperimentali vicino al picco, e non è detto che la procedura precedente consenta di individuare correttamente il più intenso. Per scrupolo può essere quindi utile verificare la correttezza della procedura precedente scorrendo i dati fino al valore della colonna A vicino a quello individuato ai due precedenti punti, determinando per quale valore della colonna A la colonna F ha il massimo valore (vedi Figura 13 per la prima riga). In tal caso si osserva come il punto di massima intensità sia stato individuato correttamente al valore 61 della colonna A.

57	56	454.8012	1109	942	1779	3830
58	57	455.7798	1184	872	2204	4260
59	58	456.7584	1323	798	2833	4954
60	59	457.737	1908	1115	4055	7078
61	60	458.7156	2730	1686	5440	9856
62	61	459.6942	3041	1922	5902	10865
63	62	460.6728	2770	1715	5502	9987
64	63	461.6514	2056	1155	4666	7877
65	64	462.63	1435	830	3664	5929

Figura 13: verifica della corretta individuazione del pixel di massima intensità della riga 1. In questo caso il valore individuato con la procedura grafica (61) è corretto.

6) Nel Foglio *spettro_finale* si ottiene lo spettro con lunghezze d'onda calibrate, e il corretto grafico dell'intensità totale in funzione della lunghezza d'onda (Figura 14).

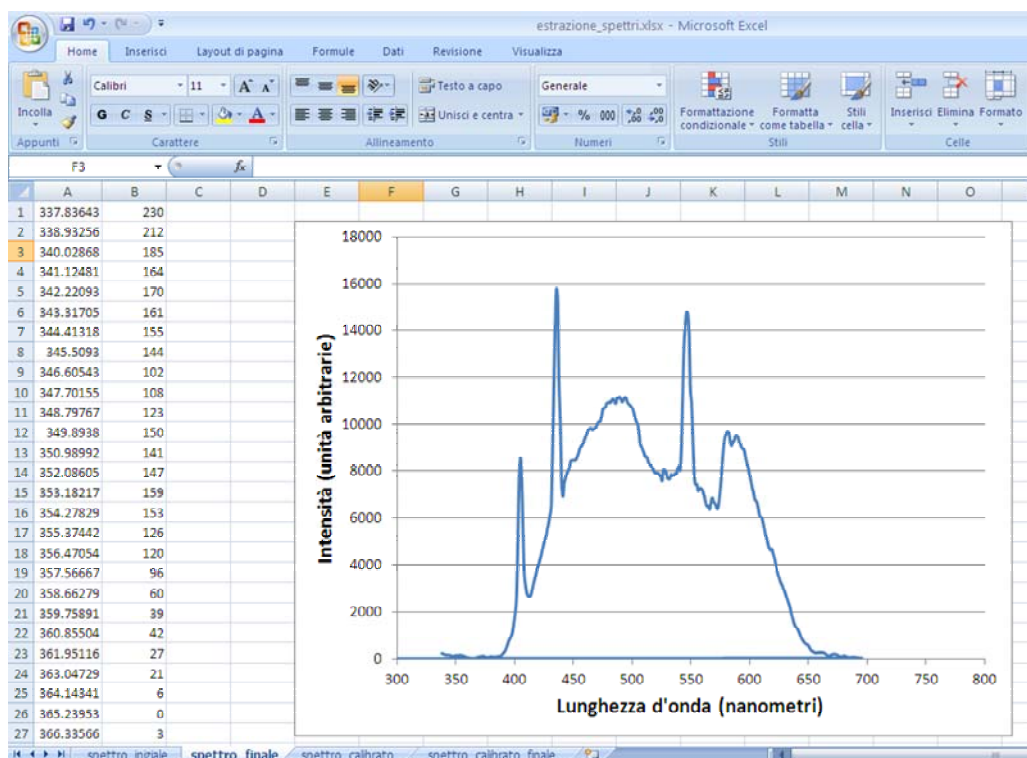


Figura 14: spettro calibrato, graficato in automatico nel Foglio Spettro_finale.

Utilizzo della calibrazione

Per poter utilizzare questa calibrazione in ogni successiva misura è sufficiente (Figura 15):

- 1) Tenere fissi i valori di pixel iniziale e finale della riga selezionata nel programma *CellPhoneSpec* per tutti gli spettri da estrarre;
- 2) Inserire nel campo Blue Wavelength il valore nella cella K6 (Valore primo pixel) del foglio spettro_iniziale.
- 3) Inserire nel campo Red Wavelength il valore della cella K7 (valore ultimo pixel).
- 4) Graficare lo spettro e salvarlo come descritto in precedenza.
- 5) Ripetere la procedura per importare il file in Excel
- 6) Copiare le sei colonne del file al posto delle colonne nel Foglio Spettro_calibrato del File estrazione_spettri.
- 7) Nel Foglio Spettro_calibrato_finale si troverà lo spettro calibrato con il rispettivo grafico (privato in automatico del rumore di fondo) (Figura 16).

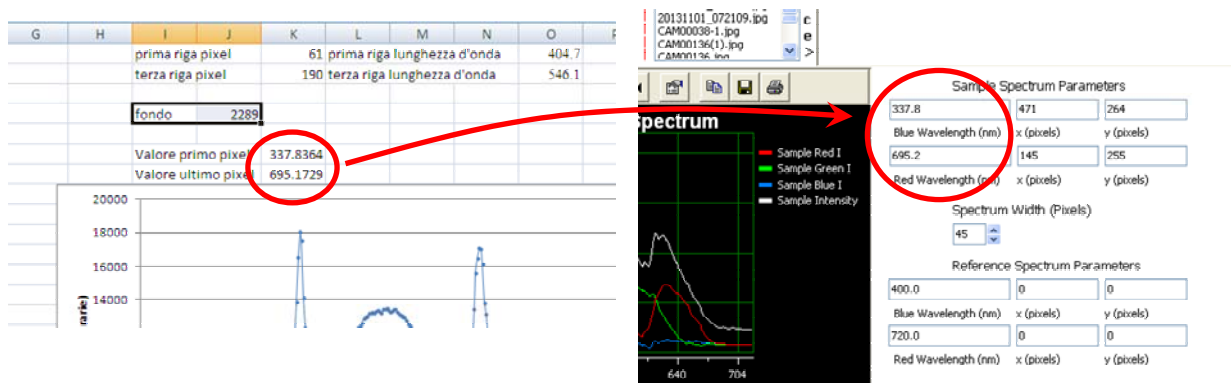


Figura 15: valori delle lunghezze d'onda da inserire in CellPhoneSpec per ottenere direttamente spettri calibrati.

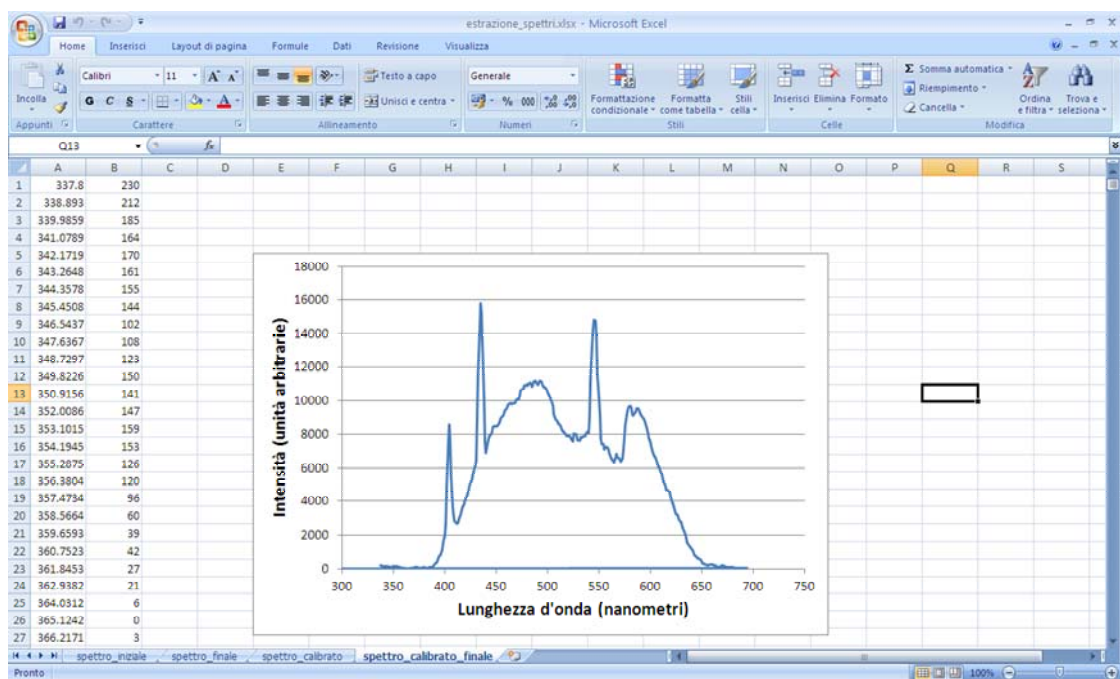


Figura 16: grafico finale dello spettro, correttamente calibrato e privato in automatico del rumore di fondo.

Procedura di calibrazione veloce

La procedura appena descritta consente di utilizzare lo spettrometro al meglio delle sue possibilità, in termini di miglior risoluzione spettrale e migliore affidabilità delle lunghezze d'onda misurate. Qualora la procedura precedente risultasse troppo complicata, tanto da impedire l'utilizzo dello spettrometro, è possibile seguire la seguente procedura più rapida, anche se meno rigorosa:

- 1) Importare l'immagine
- 2) Cliccare in corrispondenza del punto centrale della prima riga del Mercurio selezionandolo come estremo blue dello spettro, circa a metà altezza della zona in cui si osserva il segnale (Figura 17)
- 3) Cliccare al centro della terza riga, selezionandolo come estremo rosso.

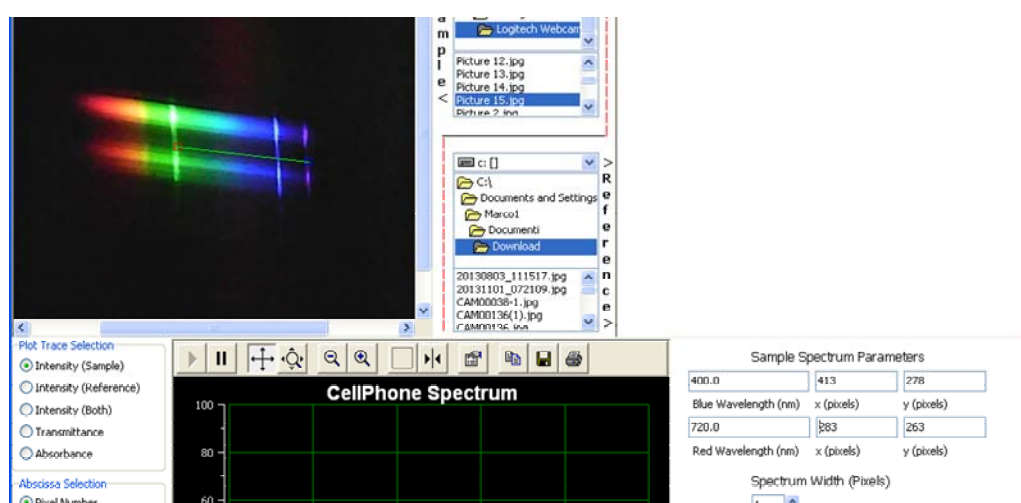


Figura 17: determinazione visiva dei pixel della prima e della terza riga spettrale del mercurio.

- 4) Inserire nel campo x pixel prima riga (cella C4) del foglio Calibrazione del file Excel calibrazione rapida il valore del pixel della prima riga
- 5) Inserire nel campo x pixel terza riga (cella C5) del foglio Calibrazione del file Excel calibrazione rapida il valore del pixel della terza riga.
- 6) Selezionare l'intervallo di pixel in cui estrarre il segnale come descritto a pagina 3.
- 7) Inserire nel campo x pixel blue (cella C1) il valore del pixel x dell'estremo blue dello spettro e nel campo x pixel red (cella C2) il valore di pixel x dell'estremo rosso.
- 8) Il foglio di calcolo determina i corrispondenti valori di lunghezza d'onda (celle G1 per l'estremo blue e G2 per quello rosso), da inserire nei corrispondenti campi del programma CellPhoneSpec.
- 9) Graficare lo spettro e salvare il file (vedi Pagina 3).

10) Dopo aver convertito il file per consentire l'apertura con Excel (pagina 5), copiare le sei colonne di dati nel foglio *Spettro* del file *Calibrazione_rapida.xls*.

11) Nel foglio *Spettro_finale* si trova il grafico calibrato, oltre ai dati privati del fondo.

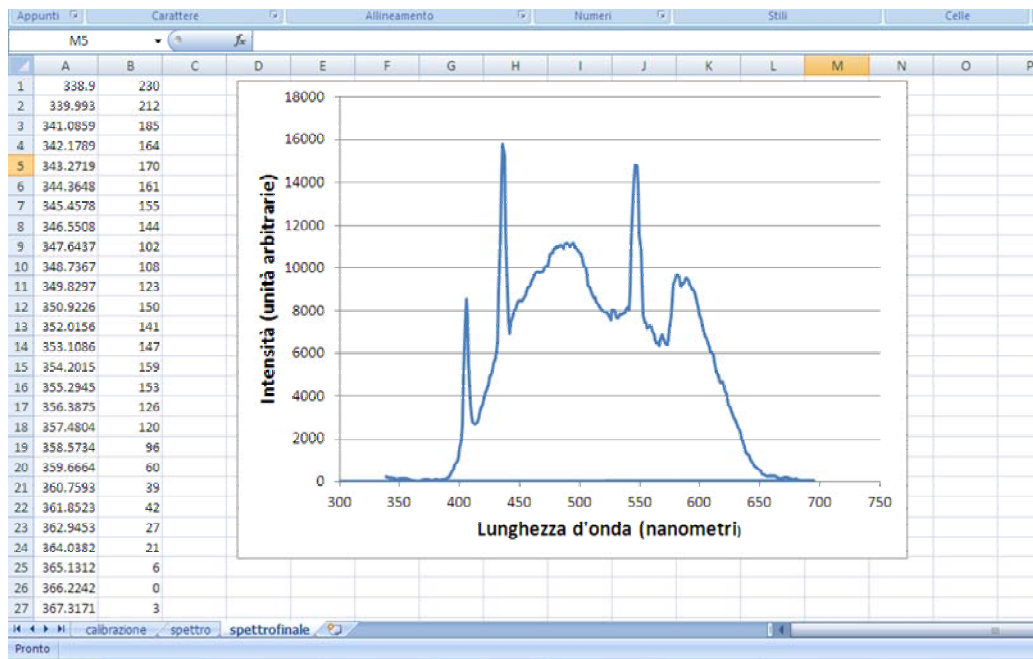


Figura 18: spettro finale, ottenuto a valle della calibrazione rapida.

Pro e contro della procedura rapida

Il vantaggio di questa seconda procedura è di essere più rapida ma espone al rischio di ottenere una calibrazione meno affidabile. Dato che la selezione del pixel di massima intensità delle due righe spettrali usate per la calibrazione è fatta visivamente, è probabile che il pixel individuato possa differire da quello corretto di 1 o 2 pixel.

Nello spettrometro testato per redigere questa guida l'effetto è di un possibile errore sistematico sulle lunghezze d'onda tra 1.6 e 3.2 nanometri.

Tale valore è confrontabile con la tipica risoluzione spettrale dello spettrometro, e ovviamente una leggera scalibrazione porta ad una peggiore affidabilità delle misure.

In Figura 19 si riporta, a titolo di esempio, il grafico di 3 spettri ottenuti selezionando i pixel delle righe spettrali in punti con diversa y nell'immagine di partenza, consentendo di osservare l'entità dell'effetto della scalibrazione.

Nel limite in cui lo spettrometro venga poi usato per misurare spettri continui (LED, corpi incandescenti, spettri di trasmissione e assorbimento) l'effetto può ritenersi relativamente secondario.

La determinazione di spettri a righe diventa invece inevitabilmente meno accurata quantitativamente, ma resta possibile evidenziare la differenza tra spettri emessi da sostanze diverse, e usare lo spettrometro per individuare la composizione chimica di un gas emettitore incognito, dato che la calibrazione condiziona sia lo spettro incognito che quello delle lampade da usare come riferimento.

La scelta tra minimizzazione delle difficoltà di calibrazione e di massimizzazione dell'accuratezza è soggettiva, e potrà essere meglio valutata dai docenti note le capacità di utilizzo dei fogli di calcolo da parte degli studenti.

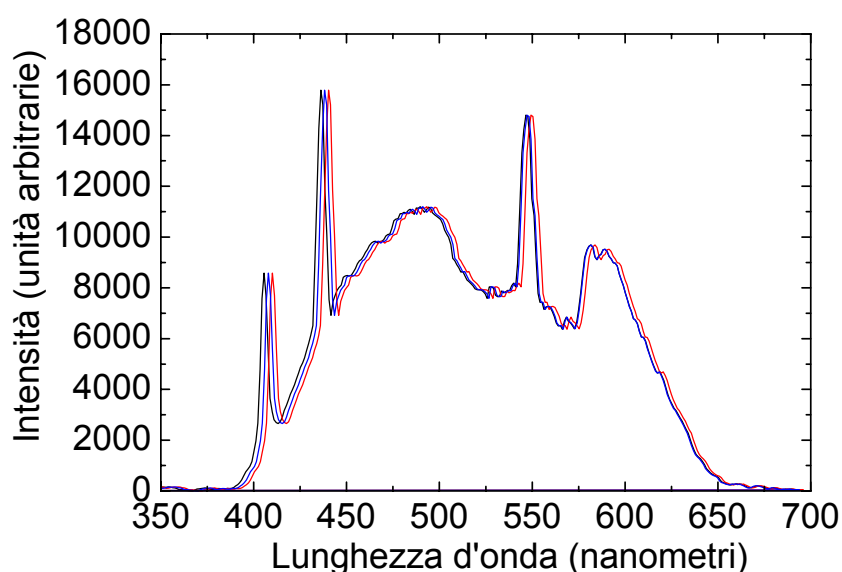


Figura 19: variazione sistematica degli spettri dovuta alla parziale soggettività delle posizioni delle due righe spettrali di calibrazione.

Risoluzione dei Problemi

Finora mi sono stati segnalati due intoppi legati all'uso del programma. Qualora se ne riscontrassero altri vi chiedo gentilmente di segnalarmelo via mail: marco.anni@unisalento.it per cercare una soluzione e aggiornare questa sezione:

1) All'apertura del programma CellPhoneSpec compare l'errore "400,0 is not a valid floating point value". L'errore è dovuto all'uso della virgola come separatore decimale, invece che il punto, che il software invece si aspetta. Per risolvere il problema aprire il Pannello di Controllo e selezionare Opzioni internazionali. Cliccando su Personalizza si selezionerà il punto come separatore decimale.

2) In alcuni casi all'apertura non si riesce a visualizzare la schermata intera del Programma. Tale problema è dovuto all'altezza (fissa) della finestra del Programma che è 800 pixel. Per risolvere il problema si clicchi col tasto destro in un punto qualsiasi del Desktop e si selezionerà Proprietà e poi Impostazioni. Nel campo Risoluzione dello schermo si selezionerà una qualunque opzione con almeno 800 pixel in verticale.