

Dispersion DADOS

Problemstellung

Für die Auswertung von Spektren ist es notwendig, die Nichtlinearität der Wellenlängenskala auf dem CCD Chip zu berücksichtigen. Dies wird hier am Beispiel des DADOS durchgerechnet, ist aber natürlich auch auf andere Spektrometer anwendbar. Es wird gezeigt, wie gross der Fehler bei linearer, quadratischer und kubischer Interpolation wird. Zum Vergleich wird die Dispersion in der Brennebene der Kamera mit der aus einer einfachen Formel berechneten verglichen.

Technische Daten, DADOS

Für die folgenden Rechnungen wurden die Eigenschaften des DADOS verwendet, entnommen aus der Gebrauchsanleitung:

Gitter: 200 resp. 900 L/mm

Brennweite des Objektivs: 96 mm

Winkel Kollimator – Kamera: 90°

Gesichtsfeld Kamera: 20 mm (entspricht etwa Canon 350D) für Gitter mit 900 L/mm resp. 12 mm für Gitter 200 L/mm, ausreichend für Wellenlängenbereich 4000 – 8000 Å

Rechnung

Die Rechnung wurde in einem EXCEL Datenblatt ausgeführt, basierend auf SIMSPEC.XLS von Christian Buil und für die vorliegende Fragestellung modifiziert.

Die Rechnung basiert auf der Gittergleichung

$$G \cdot m \cdot \lambda = \sin \alpha + \sin \beta \quad (1)$$

Wobei G die Gitterkonstante (Linien/mm)

m die Gitterordnung

und α resp. β Ein- und Ausfallswinkel darstellen. Dabei sind die richtigen Vorzeichen zu wählen, in unserem Fall α ca. 50° und β ca. -40°, somit $\alpha - \beta = 90^\circ$. Für das Gitter mit 900 L/mm wird α entsprechend grösser, ca. 65°. Mit dieser Winkelwahl ergibt sich auch die in der Anleitung spezifizierte Dispersion (rund 40 resp. 10 nm/mm).

Für die Winkeldispersion kann folgende Formel verwendet werden

$$D = d\beta / d\lambda = m \cdot G / \cos \beta, \quad (2)$$

welche durch Differenzieren der 1. Gleichung erhalten wird (Die Formel wurden dem Diffraction Grating Handbook entnommen, welches auf der Newport Webseite heruntergeladen werden kann).

Diese Formeln gelten insbesondere im Bildzentrum der CCD Kamera, d.h. für die Zentralwellenlänge λ_0 . Ist diese und somit α festgelegt, können für andere Wellenlängen λ die entsprechenden Winkel β berechnet werden und in Detektorkoordinaten x umgerechnet werden, wobei $x = 0$ dem Bildzentrum und somit λ_0 entspricht. Dabei gilt bei verzeichnungsfreier Abbildung des Objektivs:

$\tan(\beta - \beta_0) = x/f$, wobei f die Brennweite des Objektivs ist.

Somit kann für jede Wellenlänge λ und gegebenem α (bestimmt durch λ_0) der zugehörige Winkel β und weiter x bestimmt werden. Durch Ableitung von x nach λ (numerisch) kann die Lineardispersion über den CCD Chip bestimmt werden.

Die berechneten Werte $\lambda(x)$ können nun durch eine lineare, quadratische oder kubische Funktion approximiert werden:

$$\lambda = a + b \cdot x + c \cdot x^2 + d \cdot x^3,$$

wobei für die lineare Interpolation nur a und b variiert werden, c und d zu Null gesetzt werden, für die quadratische Interpolation noch c verwendet wird.

Dies wurde mit dem Solver von Excel durchgeführt, kann aber auch mit einer linearen, quadratischen oder kubischen Trendlinie im Diagramm erzielt werden.

Resultate

Gitter 900 L/mm

Fitparameter	linear fit	quad fit	kub fit
a	5508.70	5500.01	5500.01
b	104.95	104.95	105.31
c		0.248	0.248
d			-5.66E-03
rms Fehler	7.81	0.917	0.017

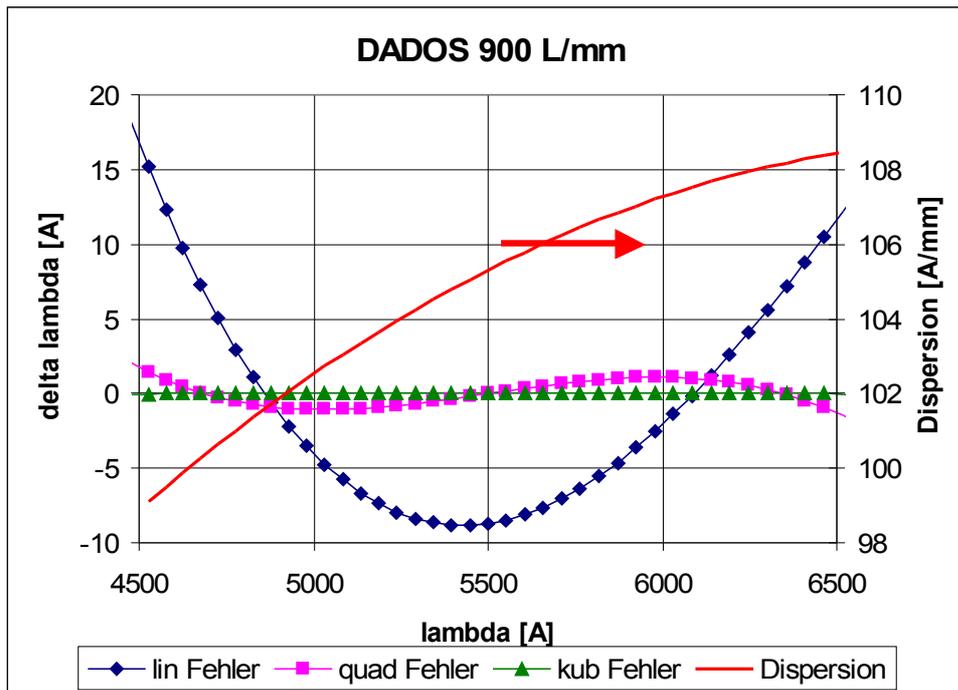
(Dasselbe für $\lambda_0 = 400 \text{ nm}$:

a	4010.57	4000.02	4000.02
b	99.64	99.64	99.98
c		0.302	0.302
d			-5.37E-03
rms Fehler	9.47	0.871	0.020

Die Rechnungen wurden für einen grossen Chip durchgeführt mit 20 mm Länge des Spektrums (z.B. Canon 350D), bei dem die Nichtlinearität natürlich besonders gut sichtbar ist.

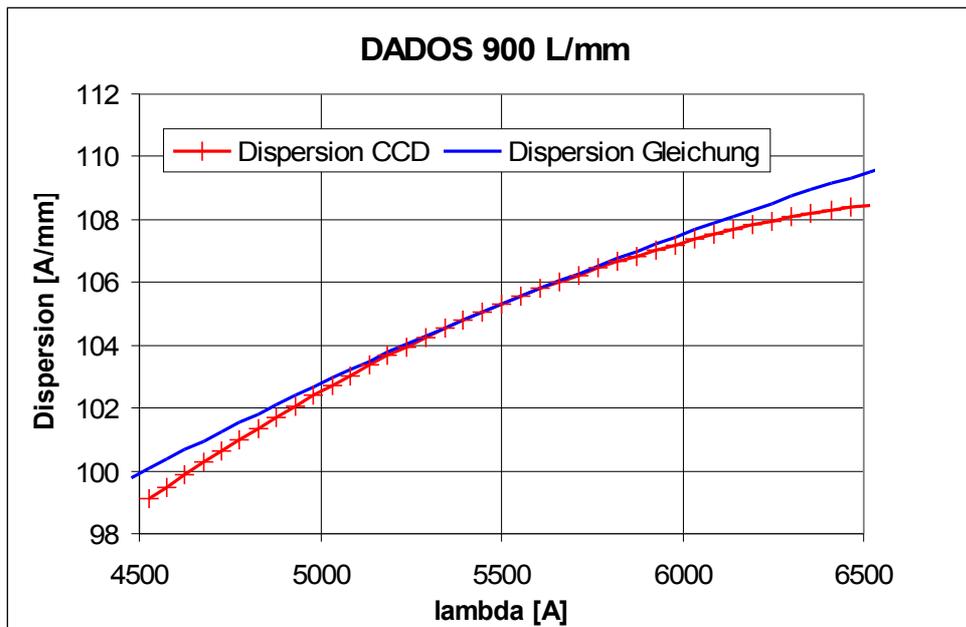
Für eine andere Zentralwellenlänge sind die quadratischen und kubischen Korrekturen relativ ähnlich, d. h. bei einer wenig geänderten Zentralwellenlänge sollte es ausreichend sein, die lineare Dispersion mit zwei Kalibrierlinien anzupassen.)

In der folgenden Abbildung sind die Fehler der verschiedenen Interpolationen über den Wellenlängenbereich dargestellt, bei optimaler Wahl der Kalibrierparameter.



Wie man sieht, ist eine lineare Interpolation nicht zulässig, bei quadratischer Interpolation sind die Fehler im Mittel etwa 1 \AA , eine kubische Interpolation ist ausreichend. Dazu sollten mindestens etwa 5 Linien über den Spektralbereich zur Kalibrierung verwendet werden. Bei ungünstiger Wahl der Kalibrierwellenlängen werden die Fehler noch grösser als hier dargestellt.

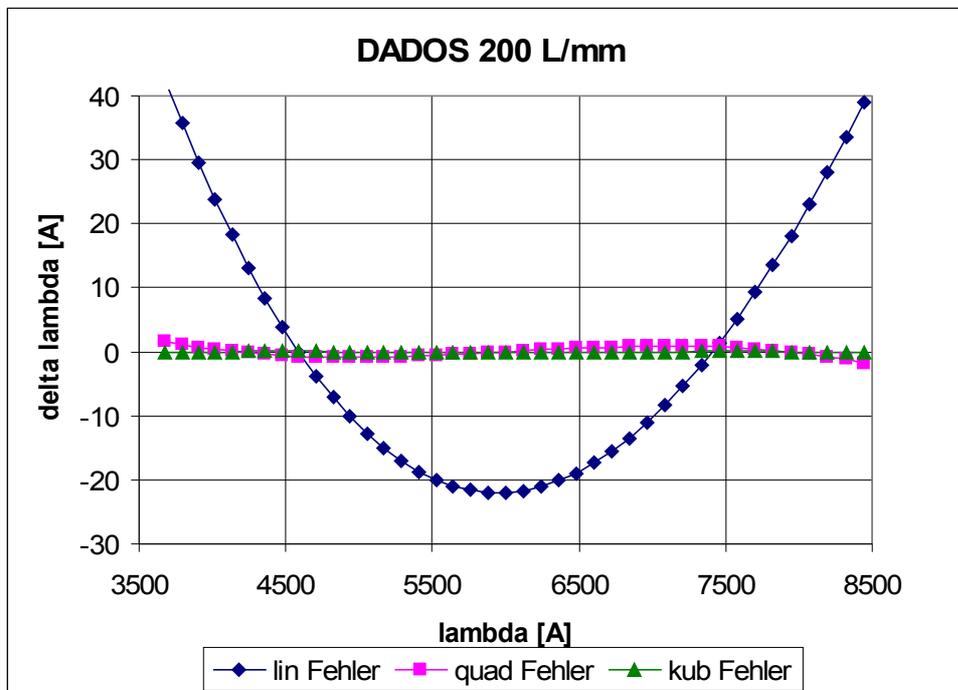
Im folgenden Diagramm ist noch die lineare Dispersion in $\text{\AA}/\text{mm}$ dargestellt, einmal exakt für den ebenen CCD Chip und andererseits berechnet mit der obigen Formel aus der Gittergleichung allein abgeleitet. Für ein Objektiv mit Verzeichnung würde wieder eine andere Kurve herauskommen, am einfachsten ist es also, die Wellenlängenkalibrierung mit einem geeigneten Eichspektrum einmal sorgfältig experimentell zu bestimmen.



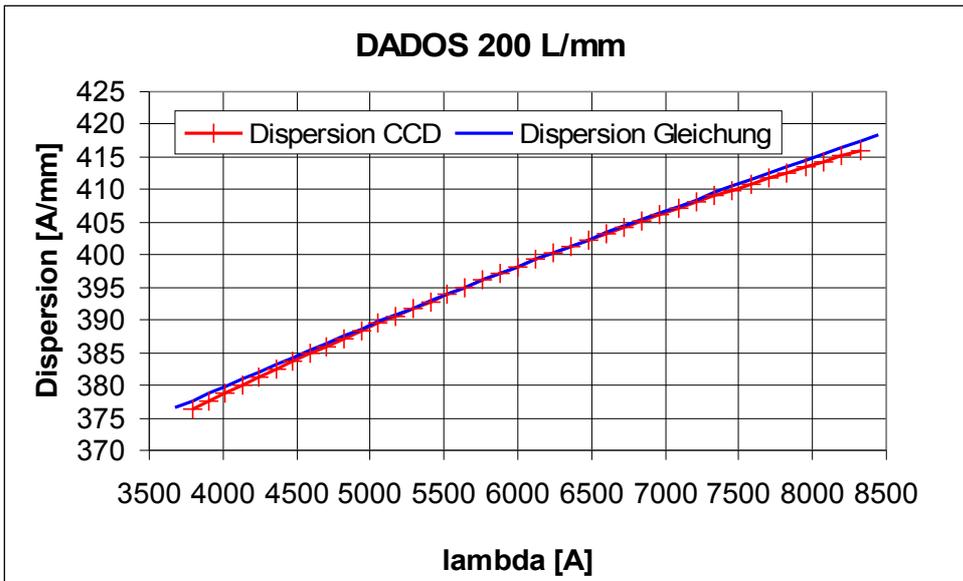
Die Dispersion variiert über den Bereich 4500 – 6500 Å um rund 10%, dazu ist der Einfluss der Umwandlung des Winkels auf die Bildebene des CCD deutlich sichtbar. Der letztere Effekt ist bei allen Spektrometern vorhanden, welche ein ebenes Bildfeld aufweisen.

Gitter 200 L/mm

Fitparameter	linear fit	quad fit	kub fit
a	6021.99	6000.01	6000.01
b	397.72	397.72	398.21
c		1.744	1.744
d			-2.16E-02
rms Fehler	19.650	0.754	0.016



Für den grösseren Spektralbereich ist die lineare Interpolation noch schlechter, hingegen sind die quadratische und kubische Interpolation vergleichbar mit dem Gitter höherer Auflösung.

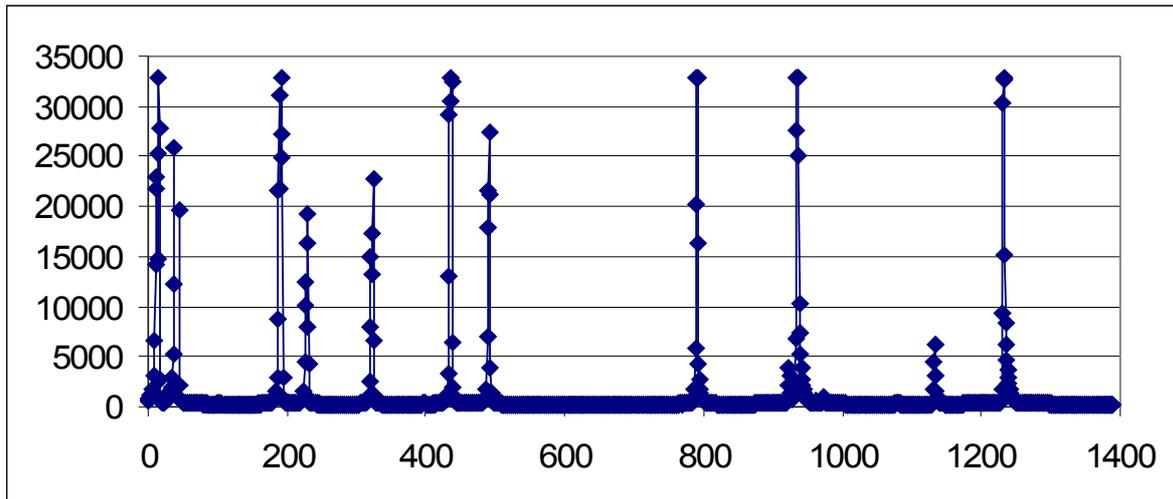


Bei der kleineren Dispersion und dem kleineren CCD Chip +/- 6 mm von der Zentralwellenlänge ist der Einfluss des Tangens des Bildwinkels kleiner. Um die Kalibrierung mit mehreren Wellenlängen nicht jedes Mal durchführen zu müssen, ist es empfehlenswert, immer bei der gleichen Zentralwellenlänge zu arbeiten, indem das Gitter so eingestellt wird, dass eine bekannte Wellenlänge immer an der gleichen Position auf dem CCD erscheint. Dann reicht eine Kalibrierung mit einer Linie (vorausgesetzt, dass nichts an der Fokussierung geändert wird, was direkt in die Dispersion eingeht).

Vergleich mit gemessenem Spektrum

Urs Flükiger hat mir verdankenswerterweise Spektren zur Verfügung gestellt, mit denen diese Berechnungen überprüft werden konnten.

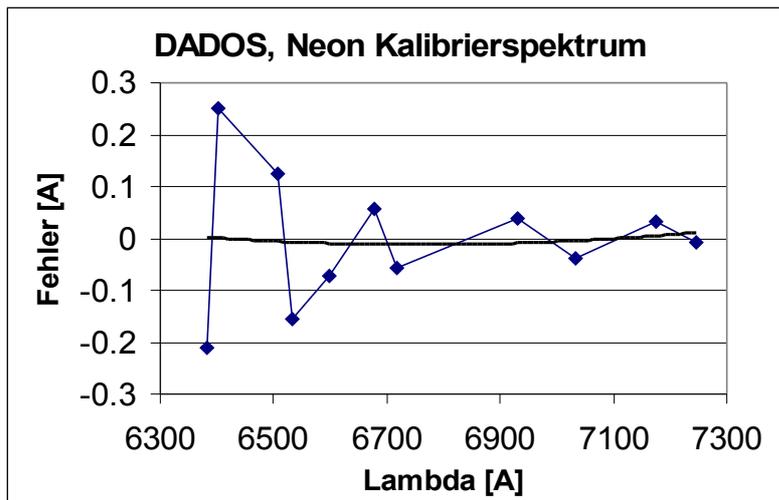
Als Beispiel sei hier ein Neonspektrum, gemessen mit dem Gitter mit 900 L/mm und aufgenommen mit einer ATIK ATK 314 L, Pixelgröße 6.45 μ , 1392 x 1040 Pixel.



Spektrallinien von 6382 – 7245 Å.

Die Peakpositionen wurden mit IRIS bestimmt und eine kubische Kalibriergleichung mit EXCEL gefittet. Dabei wurde zum Vergleich mit den Rechnungen der Nullpunkt der x-Achse in den Mittelpunkt des Bildes gelegt (Pixel 700, 6865 Å).

Die Restfehler $\lambda - \lambda(\text{fit})$ des kubischen Fit sind im folgenden Diagramm dargestellt:



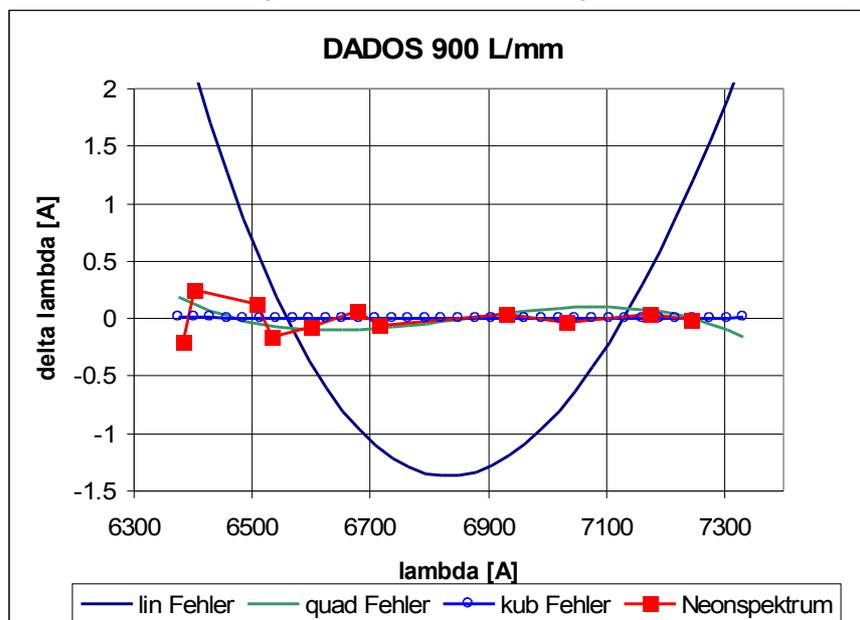
Im unteren Wellenlängenbereich waren die Linien nicht sehr scharf, deshalb die etwas grösseren Fehler, aber wesentlich kleiner als 1 Pixel (0.7 Å).

Zum Vergleich mit der Theorie die Koeffizienten des kubischen Polynoms:

	Neonspektrum	Theorie für 6865 Å	
a	6864.50	6864.00	Zentralwellenlänge
b	0.7095	0.7054	Dispersion Å/Pixel
c	9.38E-06	8.17E-06	Quadratische Korrektur
d	-1.77E-09	-1.58E-09	Kubische Korrektur

Die Zentralwellenlänge der Theorie wurde auf ganze nm gerundet, die Dispersion stimmt fast genau, exakt für 95.5 anstatt 96 mm Objektivbrennweite. Auch die Übereinstimmung der restlichen Koeffizienten ist sehr gut.

Zum Schluss sind die Daten des kubischen Fit auf das Neonspektrum noch verglichen mit den theoretischen Fehlern mit verschiedenen Approximationen für diesen Wellenlängenbereich, der im Vergleich zu den Rechnungen oben kleiner gewählt wurde. Die Restfehler sind von gleicher Grössenordnung wie die Fehler der quadratischen Interpolation.



Schlussfolgerung

Eine Zweiwellenlängenkalibrierung ist in der Regel nicht ausreichend, ausser es wird nur ein sehr kleiner Spektralbereich beobachtet und die Kalibrierlinien sind in der Nähe der Ränder dieses Bereichs, oder die quadratischen und kubischen Korrekturen werden auf Grund früherer Messungen hinzugefügt.