Программная платформа для спектроскопии

SpectraSuite

Руководство пользователя

ООО «Сенс-Оптик»

199178, Россия, Санкт-Петербург, Малый пр. В.О., д. 58

Тел./факс: +7 (812) 329 26 88; Тел.: +7 (812) 716 84 16

e-mail: sales@oceanopticsrussia.com

<http://www.oceanopticsrussia.com>

Дата последней редакции: 05.05.2009 г.

Назначение руководства

Руководство содержит инструкции по установке и конфигурированию программного обеспечения SpectraSuite, а также описание пользовательского интерфейса.

Глава 1

Введение

Общие сведения

SpectraSuite представляет собой модульную программную платформу для спектроскопии, основанную на технологии Java и работающую в операционных системах Windows, Macintosh и Linux. SpectraSuite поддерживает все USB-спектрометры и другие USB-устройства производства Ocean Optics, а также USB-приборы других производителей (при наличии соответствующих драйверов). Интерфейс SpectraSuite выглядит одинаково во всех операционных системах, сохраняя при этом характерный стиль, присущий каждой из них. Компания Ocean Optics одной из первых выпустила столь гибкое и функционально насыщенное межплатформенное приложение.

Модульная архитектура SpectraSuite позволяет легко изменить (или заменить) любую функцию. Например, функции сбора данных, функции управления и функции обработки реализованы в виде отдельных модулей. Вы можете добавлять или удалять модули с целью изменения интерфейса или функциональности, создавать собственные модули для выполнения расчётов или автоматизации экспериментов, а также делать многое другое. Настройка SpectraSuite выполняется через Java-код и может быть легко выполнена самостоятельно или при помощи программистов Ocean Optics.

SpectraSuite является платформой для всех будущих программных разработок Ocean Optics. Автономные приложения, включая OOISensors и OOILIBS, будут переведены на платформу SpectraSuite в ближайшем будущем.

Управление USB-спектрометрами и другими устройствами

SpectraSuite позволяет управлять несколькими USB-спектрометрами, работающими независимо друг от друга, и отображать данные с каждого спектрометра в отдельном окне. При помощи SpectraSuite можно объединять данные от разных источников, например, при измерении восходящего/нисходящего излучения, измерениях с опорным лучом и мониторинге процессов.

SpectraSuite может работать со следующими спектрометрами Ocean Optics, подключенными к компьютеру через порт USB:

- S2000 (с аналого-цифровым преобразователем)
- USB650
- USB2000
- USB2000+
- USB2000-FLG
- USB4000
- HR2000
- HR2000+
- HR4000
- QE65000

- NIR-512
- NIR256-2.1 и NIR256-2.5
- MMS (спектрометр комбинационного рассеяния)

Кроме спектрометров, SpectraSuite поддерживает следующие USB-устройства:

- Аналого-цифровой преобразователь ADC1000-USB
- Спектральный адаптер SHA-1

Отличительные черты SpectraSuite

Модульная архитектура: любая функция SpectraSuite может быть легко изменена или заменена. Например, функции сбора данных, функции управления и функции обработки реализованы в виде отдельных модулей. Вы можете добавлять или удалять модули с целью изменения интерфейса или функциональности, создавать собственные модули для выполнения расчётов или автоматизации экспериментов, а также делать многое другое. Настройка SpectraSuite выполняется через Java-код и может быть легко выполнена самостоятельно или при помощи программистов Ocean Optics.

Независимость от платформы: SpectraSuite может работать в операционных системах Windows, Linux или Macintosh, предоставляя пользователю один и тот же интерфейс.

Расширенное управление сбором данных: SpectraSuite позволяет управлять многочисленными параметрами сбора данных. Например, можно выполнять фиксированное количество сканирований или накапливать спектры в течение заданного интервала. Каждое сканирование может запускаться по внешнему сигналу или инициироваться событиями. Скорость переноса данных в память компьютера может достигать одного полного спектра за миллисекунду (при отсутствии ограничений со стороны аппаратуры).

Независимое управление несколькими USB-устройствами: на одном графике в одном окне возможно отображение данные с нескольких USB-устройств, которые могут настраиваться независимо.

Дальнейшее развитие SpectraSuite

Программная платформа SpectraSuite постоянно развивается. Приобретая её, вы получаете право на бесплатное автоматическое обновление через интернет в течение одного года.

В будущем планируются следующие изменения и дополнения:

Совместимость со стандартом 21 CFR Part 11: SpectraSuite будет соответствовать стандарту 21 CFR Part 11, сохраняя данные в кодированном двоичном файле. Этот двоичный формат позволяет проследить полную историю обработки данных. Помимо этого, SpectraSuite может сохранять данные во многих других форматах, в том числе ASCII с разделением табуляцией (для Excel и других аналитических пакетов), Grams SPC и JCAMP. Кроме того, Spectra Suite содержит модуль базы данных, который позволяет сохранять произвольные данные в любом выбранном формате. Преимуществом двоичного кодированного формата является то, что он даёт возможность изменять различные параметры процесса и применять эти изменения к данным, не воссоздавая сам процесс.

Полная интернационализация: все меню, диалоговые окна, подсказки и сообщения можно будет увидеть на родном языке после замены единственного файла. В ближайшее время появятся файлы поддержки японского, китайского, корейского и испанского языков; за ними последуют файлы для французского, немецкого и итальянского.

Спектроскопические функции

SpectraSuite позволяет выполнять три базовых спектроскопических эксперимента, а именно, измерять спектры поглощения, отражения и испускания. В процессе измерений можно выполнять обработку сигнала: вычитать темновой ток и фон от рассеянного излучения, сглаживать и усреднять спектры. Выбирать способ обработки удобно в режиме мониторинга, когда на экран непрерывно выводятся необработанные данные с детектора. Отображение данных в реальном времени позволяет оценить работу экспериментальной установки и эффективность выбранных алгоритмов, оперативно изменить настройки, сразу же увидеть результат изменения и сохранить данные. Большинство других спектрометрических программ не обеспечивают такой гибкости в работе.

При помощи SpectraSuite можно проводить кинетические измерения. Режим временной диаграммы позволяет контролировать до шести отдельных длин волн и двух математических комбинаций этих длин волн. Одновременно с этим можно регистрировать различные виды опорного сигнала: интенсивность на одной длине волны (1 или 2 канала), интегральную интенсивность в выбранном диапазоне (в одном или двух каналах) и отношение интенсивностей в двух каналах.

SpectraSuite обеспечивает управление всеми функциями спектрометрической системы, включая сбор данных, отображение и обработку спектров. Все настройки можно сохранять для использования в последующих экспериментах. Возможно программное управление синхронизацией с различными внешними событиями, например, генерацией лазерного импульса или включением источника света.

SpectraSuite предоставляет широкие возможности по сохранению полученных результатов. Вы можете независимо сохранять и загружать темновые, опорные, необработанные и обработанные спектры. При сохранении данных на диск возможна автоматическая генерация имен файлов. Данные можно сохранять как в собственном двоичном формате SpectraSuite, так и в форматах ASCII, GRAMS/32 SPC или JCAMP. Спектр можно распечатать непосредственно из SpectraSuite или перенести в другую программу, например Excel или Word.

Получение обновлений

Приобретая программное обеспечение SpectraSuite, вы получаете право на бесплатное автоматическое обновление через интернет в течение одного года. Чтобы воспользоваться этой услугой, при первом подключении необходимо зарегистрироваться. Продлить срок получения обновлений на год можно за половину стоимости программного обеспечения. Все покупатели (вне зависимости от того, подписаны ли они на бесплатные обновления) могут получать бесплатные исправления обнаруженных ошибок.

Значок , появляющийся в правом нижнем углу окна SpectraSuite, сообщает о наличии обновлений. Щелкните на нем или выберите пункт меню **Tools | Update Center (Инструменты/Центр обновлений)**, чтобы соединиться с центром обновлений, и следуйте пошаговым инструкциям мастера обновлений.

Глава 2

Установка

SpectraSuite может работать в следующих операционных системах:

- Microsoft Windows: Windows 2000, XP, Vista
- Apple Macintosh: OS X версии 10.0 и выше
- Linux: Red Hat версии 9 и выше, Fedora (любой версии), Debian 3.1, SUSE (версии 9.0 и выше)

Предупреждение

НЕ подключайте спектрометр к ПК до завершения установки SpectraSuite. Чтобы правильно подключить и сконфигурировать спектрометрическую систему, следуйте инструкциям, приведенным в данной главе.

Установка SpectraSuite

Программное обеспечение SpectraSuite может быть загружено с сайта Ocean Optics или установлено с компакт-диска.

Установка с компакт-диска

SpectraSuite поставляется компанией Ocean Optics либо на диске-сборнике **Software and Technical Resources**, либо на отдельном диске **SpectraSuite Spectroscopy Platform Software**. Для установки потребуется пароль, напечатанный на конверте диска.

► *Порядок действий*

1. Вставьте компакт-диск с программным обеспечением SpectraSuite в привод компакт-дисков вашего ПК.
2. После автоматического запуска программы установки выберите версию SpectraSuite, соответствующую вашей операционной системе. Следуйте инструкциям мастера установки.

Если установка не началась автоматически, найдите на диске установочный файл SpectraSuite и дважды щелкните на нем, чтобы запустить процесс установки.

Имена установочных файлов:

для Windows: SpectraSuiteSetup_Windows

для Mac: SpectraSuiteSetup_Mac.dmg

для Linux: SpectraSuiteSetup_Linux

Загрузка с сайта Ocean Optics (для ОС Windows)

► Порядок действий

1. Завершите работу всех прикладных программ, запущенных на ПК.
2. В адресной строке браузера наберите <ftp://spectrasuite.oceanoptics.com>.
3. Щелкните правой кнопкой мыши на любом свободном месте в окне браузера и выберите в контекстном меню **Login As... (Войти как...)**. На экране появится диалоговое окно для ввода имени пользователя и пароля.
4. Введите следующие данные:
Имя пользователя: *username*
Пароль: *password*
5. Щелкните два раза на папке **Installations**.
6. Перетащите файл `SpectraSuiteSetup_Windows.exe` в любую локальную папку. Его размер составляет около 30 Мбайт. Дождитесь окончания загрузки и дважды щелкните на файле левой кнопкой. По умолчанию установка производится в папку `\Program Files\Ocean Optics\SpectraSuite`. Ярлык для запуска программы появится в меню **Start | Programs | Ocean Optics | SpectraSuite | SpectraSuite** и на рабочем столе текущего пользователя.

Элементы управления и индикаторы

Общие сведения

Графический интерфейс SpectraSuite содержит элементы управления в виде значков и кнопок. В данной главе описано их назначение и использование.

Некоторые элементы управления и пункты меню можно использовать только после выполнения определенных действий. Недоступные в данный момент элементы затемняются. Во многих случаях программа будет сообщать, какие действия должны быть предприняты перед выполнением недоступной команды. Ниже перечислены общие требования.

- Для изменения параметров сбора данных, сохранения темнового/опорного спектра или отображения временной диаграммы требуется указать измерительный процесс, к которому относится данная операция. Если выполняющихся процессов нет, запустите как минимум один. Если одновременно выполняется несколько измерений, попробуйте щелкнуть на соответствующей кривой на графике. Попробуйте также раскрыть дерево параметров под значком спектрометра и посмотрите, как элементы управления реагируют на выбор различных пунктов. Пощелкайте правой кнопкой на этих пунктах, чтобы увидеть список возможных действий.
- Перед вычитанием темнового спектра требуется его сохранение.
- Для перехода в режимы A, T, R и I (относительная облученность) необходимо сохранить темновой и опорный спектры.
- Для перехода в режим абсолютной облученности (I) необходимо выполнить калибровку и сохранить темновой спектр.
- Для измерения энергии, мощности, числа фотонов и любых фотометрических величин необходимо перейти в режим абсолютной облученности.

Элементы управления графиками

Главным объектом пользовательского интерфейса SpectraSuite является график, на котором отображается тот или иной спектр. Вам предоставляются широкие возможности по настройке графиков и управлению отображением спектров.

Элементы управления распределены по нескольким панелям инструментов, каждую из которых можно показать или скрыть с помощью кнопки (стрелка вниз).

Инструменты масштабирования

Zoom Out to Maximum

Уменьшение масштаба до минимально возможного. При этом по осям устанавливаются максимальные для данного спектрометра диапазоны.

Scale Graph to Fill Window

Масштабирование спектра по размеру окна. Диапазоны по обеим осям устанавливаются так, чтобы спектр был показан целиком и занимал всю площадь графика. На приведенном примере ось Y заканчивается на 3500 отсчетах, так как максимум спектра не превосходит эту величину.

Scale Graph Height to Fill Window

Масштабирование спектра по высоте. Диапазон по оси Y устанавливается таким образом, чтобы спектр занимал всю высоту окна. В отличие от инструмента Scale Graph to Fill Window, масштабирования по оси X не происходит.

Manually Set Numeric Ranges

Ручная установка диапазонов по координатным осям. При щелчке на этом элементе управления открывается диалоговое окно Set Zoom Ranges, в котором вы можете ввести границы диапазонов. *Примечание:* чтобы кнопка Apply стала активной и вы могли применить сделанные изменения, необходимо ввести обе границы диапазона — нижнюю (Minimum) и верхнюю (Maximum).

Zoom In

Увеличение масштаба. При каждом щелчке на этом элементе управления масштаб увеличивается на одну ступень.

Для увеличения можно использовать колесо мыши. В этом случае центром увеличения является текущая позиция курсора (зеленая вертикальная линия).

Zoom 1

Zoom 2

Zoom Out

Уменьшение масштаба (операция, обратная увеличению).

Zoom to Region

Увеличение выбранного участка спектра. При щелчке на этом элементе управления на экране появляется курсор, позволяющий выделить нужный участок спектра.

Toggle Graph Pane

Переключение между графиками (если открыто более одного графика).

Инструменты сохранения спектров

Значок	Описание
	Сохранение темнового спектра
	Сохранение опорного спектра

Эти инструменты также доступны через меню **File | Store**.

Инструменты обработки спектров

Значок	Описание
Режим мониторинга («осциллограф»)
Режим мониторинга с вычитанием темнового сигнала
Режим измерения поглощения
Режим измерения пропускания
Режим измерения отражения
Режим измерения относительной облученности

Эти инструменты также доступны через меню **Processing | Processing Mode**.

Инструменты ввода-вывода

Значок	Описание
Сохранение спектра в одном из следующих форматов: Grams SPC, JCAMP, двоичный (может быть открыт только в SpectraSuite), текстовый с разделением табуляцией (может быть открыт в MS Excel).
Открытие диалогового окна печати. Выберите объект, который нужно напечатать, и устройство печати (системный принтер, файл PDF). Для печати можно выбрать отдельные слои графика или выделенную область. При необходимости можно добавить название, изменить размер шрифта и отключить показ линий сетки. Кнопка Preview служит для предварительного просмотра данных, выбранных для печати.
Копирование спектральных данных в буфер обмена.
Наложение ранее сохраненного спектра на текущий график.
Удаление всех наложенных спектров.

Наложение спектральных данных

Элемент управления **Overlay Spectral Data** позволяет выводить на экран сохраненный ранее спектр одновременно с текущим спектром. Щелкните на этой кнопке, затем в окне проводника выберите файл со спектром. Вместе с наложенным спектром будут отображены серийный номер спектрометра и имя файла, из которого был загружен спектр.

Инструменты для работы со слоями

Эти инструменты позволяют делать надписи на графиках и добавлять другую полезную информацию. Они сгруппированы на отдельной панели инструментов.

Значок	Описание
Add New Annotation. Вызов диалогового окна New Annotation для добавления новой подписи к выбранному графику.
Select and Drag Annotation. Перемещение подписи на другое место.

Draw. Рисование на графике от руки (при помощи мыши).
Erase Areas of Drawing Layer. Стирание отдельных частей рисунка, созданного при помощи инструмента Draw.
Clear Drawing Layer. Удаление всего рисунка, созданного при помощи инструмента Draw.
Graph Layer Options. Вызов диалогового окна Graph Layer Options (Параметры слоя).

Ниже показан график с наложенным изображением и подписью, обведенной при помощи инструмента Draw.

Прочие элементы управления

Управление сбором данных

Кнопки управления сбором данных, подобно кнопкам аудио- или видеопроигрывателя, позволяют приостановить или возобновить процесс получения спектров, а также выполнить одиночное измерение.

Кнопка	Действие
Приостановить выбранный процесс считывания спектров
Выполнить одиночное измерение
Возобновить процесс считывания спектров

Поиск максимумов

Эта кнопка, расположенная в нижнем правом углу графика, позволяет установить порог для последующей локализации спектральных максимумов.

Примечание

Если эта кнопка отсутствует, щелкните на графике для ее отображения.

► *Порядок действий*

1. Щелкните на кнопке . На графике появится пороговая линия вместе с дополнительными кнопками. По умолчанию порог устанавливается достаточно высоким и в большинстве случаев его следует отрегулировать.
2. Щелкните на кнопке для вызова диалогового окна **Peak Properties** (Параметры максимума), чтобы задать порог.

3. Введите пороговое значение, которое позволяет изолировать выбранные максимумы. Линия порога переместится в новое положение.
4. Пользуясь кнопками и , переместите курсор к следующему максимуму (слева или справа). Длина волны в максимуме отображается в поле **Wavelength**, расположенном под графиком.
5. Поставьте отметку **Show Peak Info**, чтобы получить информацию о максимуме в полях Pixel (Номер пиксела) и Wavelength (Длина волны).

Индикаторы

Индикаторы состояния

SpectraSuite показывает текущее состояние процесса считывания спектров с помощью индикаторов. Каждый индикатор соответствует одному из спектров, отображаемых на активном в данный момент графике и на графиках, расположенных на дополнительных вкладках основного окна. Индикаторы в виде кружков разного цвета выводятся в нижнем правом углу экрана. На приведенном ниже примере два индикатора относятся к спектрам графика С, в то время как третий индикатор относится к спектру на скрытом графике В.

Индикатор	Значение
Последний спектр был считан нормально
Насыщение детектора
Сбор данных приостановлен
Режим ожидания

Каждый кружок-индикатор соответствует одному из отображаемых спектров. Если навести указатель мыши на кружок, будет показана информация о спектрометре, с которого получен спектр, и его настройках (например: **USB2G6142, Int time: 20 ms, avg: 10, boxcar: 3**). Щелкните на кружке для выбора спектрометра, который с ним связан.

Индикатор наличия обновлений

Индикатор	Значение
Обновление программного обеспечения доступно для загрузки с сервера. Перейдите в меню Tools Update center .

Индикатор выполнения

Если накопление сигнала длится более 1 секунды, то в нижней части окна появляется индикатор выполнения. Он может появляться для каждого подключенного спектрометра, выполняющего измерение.

Глава 4

Функции меню File

В этой главе описаны различные функции и опции SpectraSuite, доступные через меню File (Файл).

Если ту или иную функцию можно вызвать также с панели инструментов, то рядом с названием пункта меню будет показан соответствующий значок.

New

Создание нового объекта (графика, таблицы) или выполнение нового измерения. Эти команды доступны также из панели инструментов Data Display. Меню **File | New** содержит следующие пункты:

- Spectrum Graph (график спектра)
- Spectrum Table (таблица спектра)
- High-Speed Acquisition (скоростное считывание данных)
- Absorbance Measurement (измерение поглощения)
- Transmission Measurement (измерение пропускания)
- Reflection Measurement (измерение отражения)
- Relative Irradiance Measurement (измерение относительной облученности)
- Gated Fluorescence Measurement (измерение флуоресценции со стробированием)
- Concentration Measurement (измерение концентрации)
- Absolute Irradiance Graph (график абсолютной облученности)
- Absolute Irradiance Measurement (измерение абсолютной облученности)
- Color Measurement (измерение цвета)
- Strip Chart (временная диаграмма)

Spectrum Graph

Вывод новой спектральной кривой на ранее открытый график, с параметрами, заданными на панели Acquisition. Каждая новая кривая получает другой цвет. По умолчанию новые спектры отображаются в режиме мониторинга.

Если щелкнуть на спектральной кривой, на панели Acquisition будут показаны ее параметры. Источник данных (спектрометр) отображается в поле Source.

► Порядок действий

Для вывода на экран нового спектра выполните следующие шаги:

1. Выберите пункт меню **File | New | Spectrum Graph**, или щелкните на кнопке панели инструментов Data Display. На экране появится диалоговое окно с просьбой указать место для нового графика (на новой или текущей вкладке).

2. Выберите, где будет размещен новый график, и нажмите кнопку .
3. Задайте необходимые параметры (время интегрирования, усреднение, сглаживание).

Ниже приведен пример графика с тремя спектральными кривыми (синей, розовой и оранжевой), расположенными на одной вкладке.

Spectrum Table

Отображение спектральных данных в табличной форме. Выберите пункт меню **File | Spectrum Table** или щелкните на соответствующем значке в панели Data Display. На экране появится таблица с длинами волн и интенсивностями.

High-Speed Acquisition

Скоростное считывание данных (20 мс и менее). Повышение скорости достигается за счет исключения обработки. Такие необработанные данные называются спектральной коллекцией (spectra collection).

Спектральная коллекция может быть отображена в графическом или табличном виде. Полученные таким способом данные можно также отобразить на трехмерном графике, а затем выполнять измерения на их основе.

Перед началом скоростного считывания следует сохранить опорный и темновой спектры в обычном графическом окне. Описанная ниже процедура подразумевает, что это уже сделано.

Скоростное считывание данных

► *Порядок действий*

1. Сохраните опорный спектр в файл.
2. Сохраните темновой спектр в файл.

Предупреждение

Для получения достоверных данных убедитесь, что ускоренное считывание выполняется с теми же параметрами (время интегрирования, усреднение, сглаживание), что и при получении темнового и опорного спектров.

3. Выберите пункт меню **File | New | High Speed Acquisition**. Если в данный момент выполняются другие измерения, на экран будет выведено предупреждение о том, что они должны быть остановлены перед началом скоростного считывания. Необходимо либо приостановить все запущенные процессы вручную, либо нажать кнопку **ОК** в окне с предупреждением, после чего SpectraSuite приостановит их автоматически. После этого на экране появится диалоговое окно **High-speed Acquisition**.

В верхней трети окна перечислены параметры, заданные в основном окне программы.

4. Введите следующую информацию:

Поле	Назначение
Integration Time (µsec)	Ввод времени интегрирования в микросекундах.
Scans to Average	Ввод количества спектров для усреднения
Boxcar Width	Ввод ширины окна сглаживания
External Trigger Mode	Выбор режима синхронизации (нормальный, программная синхронизация, внешняя аппаратная синхронизация)
Electric Dark Correction	Вычитание электрического темнового сигнала
Strobe/Lamp Enable	Включение источника излучения
Filename	Ввод имени файла, в котором будут сохранены данные (формат с разделением табуляцией). Можно выбрать существующий файл.
Number of Scans Capture Period (µsec)	Выбор одного из методов получения данных: Фиксированное количество спектров (более быстрый метод) Фиксированное время считывания
Show progress	Включение индикатора выполнения задачи

5. Нажмите на кнопку . На панели **Data Sources** появится символическое обозначение считанных данных.

6. Щелкните правой кнопкой на значке для доступа к меню, содержащему следующие команды:

- **Spectrum Graph** – графическое представление спектра.

- **Spectrum Table** – табличное представление спектра.

Wavelength (nm)	Intensity (counts)	Wavelength (nm)	Intensity (counts)
178.32	0.00	178.32	0.00
178.70	283.00	178.70	288.00
179.08	282.00	179.08	289.00
179.46	284.00	179.46	283.00
179.84	282.00	179.84	287.00
180.22	286.00	180.22	288.00
180.60	288.00	180.60	287.00
180.98	294.00	180.98	289.00
181.36	293.00	181.36	292.00
181.74	291.00	181.74	294.00
182.12	289.00	182.12	291.00
182.50	291.00	182.50	293.00
182.87	294.00	182.87	292.00
183.25	289.00	183.25	289.00
183.63	292.00	183.63	292.00
184.01	296.00	184.01	293.00
184.39	295.00	184.39	295.00
184.77	291.00	184.77	292.00
185.15	293.00	185.15	294.00
185.53	293.00	185.53	292.00
185.91	292.00	185.91	293.00
186.29	297.00	186.29	287.00
186.67	288.00	186.67	292.00
187.04	294.00	187.04	292.00
187.42	293.00	187.42	290.00
187.80	295.00	187.80	291.00
188.18	295.00	188.18	289.00
188.56	293.00	188.56	293.00
188.94	287.00	188.94	294.00

- **Save Spectra Collection** — сохранение полученных спектров в файл. См. следующий раздел «Создание трехмерного графика спектральной коллекции»

для получения дополнительной информации о том, что можно делать с такими данными.

- **Remove Spectra Collection** — удаление спектральной коллекции. Эта команда доступна также из меню **Spectrometer | Remove Spectra Collection**.

Создание трехмерного графика спектральной коллекции

Зависимость данных спектральной коллекции от времени можно представить в трехмерном виде. Этот график затем можно просматривать под различными углами, используя элементы навигации. Щелчок в любой точке графика позволяет увидеть соответствующую интенсивность и длину волны.

► Порядок действий

1. Щелкните правой кнопкой на значке спектрометра в панели **Data Sources** и выберите пункт **High Speed Acquisition**, или выберите пункт меню **File | New | High Speed Acquisition**. На экране появится диалоговое окно **High-speed Acquisition**.

2. Введите необходимые параметры и нажмите на кнопку . На экране появится трехмерный график.

Работа со спектральной коллекцией

Набор спектров, полученный в результате скоростного считывания, может использоваться следующими способами:

- Для просмотра в режиме воспроизведения, подобно любой другой записи (с возможностью приостановки и перемотки вперед/назад). Аналогичным образом могут быть просмотрены данные временной диаграммы (см. раздел «*Временная диаграмма*»).
- Для измерения поглощения, пропуска и т. д. путем нажатия на соответствующую кнопку (**A**, **T**, **R**, или **I**).

► *Порядок действий*

Для просмотра записанных спектров:

1. Щелкните правой кнопкой на нужном спектре в разделе **Simulated Acquisition (Имитированное считывание)** панели **Data Sources**. Появится контекстное меню.
2. Выберите пункт **Spectrum Playback Controls**. На экране появится одноименное диалоговое окно.

3. Поставьте запись на начало с помощью кнопки **Rewind**, затем нажмите на кнопку **Play** для просмотра.

Для последующей обработки записанных спектров:

1. Начните воспроизведение спектральной коллекции. Обратите внимание, что дерево на панели **Data Sources** заполняется данными обычного считывания.
2. При необходимости загрузите данные для предварительной обработки (темновой и опорный спектры), щелкнув правой кнопкой мыши на **No Pre-processor, Scope Mode** в панели **Data Sources**, а затем на **Load Dark Spectrum** и **Load Reference Spectrum**. Выберите необходимые файлы.

Темновой и опорный спектры можно сохранить в любой момент при воспроизведении, если спектральная коллекция содержит необходимые данные.

3. После загрузки файлов со спектрами можно переключиться в режим измерения поглощения, пропускания и т. д., щелкнув на соответствующем значке (**A** , **T** и т. д.).

Absorbance Measurement

A Этот пункт меню запускает мастер измерения поглощения (Absorbance Measurement wizard), который содержит несколько шагов:

1. Выбор источника данных
2. Настройка параметров считывания
3. Получение опорного спектра
4. Получение темнового спектра

Подробное описание приведено в приложении А, раздел «*Эксперименты по измерению поглощения*».

Transmission Measurement

T Этот пункт меню запускает мастер измерения пропускания (Transmission Measurement wizard), который помогает провести измерение.

Reflection Measurement

R Этот пункт меню запускает мастер измерения отражения (Reflection Measurement wizard), который помогает провести измерение.

Relative Irradiance Measurement

I Этот пункт меню запускает мастер измерения относительной облученности (Relative Irradiance Measurement wizard), который помогает провести измерение.

Absolute Irradiance Graph

Этот пункт меню выводит на экран график абсолютной облученности. SpectraSuite позволяет просматривать несколько спектров с нескольких независимо откалиброванных устройств. Вы можете проводить измерения как в энергетических единицах (ваттах, джоулях, фотонах), так и в фотометрических (люксах, люменах, канделах).

Новый график отображается в режиме мониторинга. Дополнительная информация приведена в приложении А, «Эксперименты по измерению облученности».

New Absolute Irradiance Measurement

Этот пункт меню запускает мастер измерения абсолютной облученности, который содержит следующие шаги:

1. Выбор источника
2. Настройка параметров считывания
3. Получение опорного спектра
4. Получение темного спектра
5. Калибровка спектрометра

Более подробное описание приведено в приложении А, раздел «Абсолютная облученность».

Gated Fluorescence Measurement

Этот пункт меню доступен только при использовании спектрометра со стробируемым детектором (например, USB2000-FLG) и вызывает мастер стробированного измерения флуоресценции, который содержит следующие шаги:

1. Выбор источника
2. Настройка параметров считывания
3. Получение опорного спектра
4. Получение темного спектра
5. Установка задержки стробирования

Дополнительная информация приведена в приложении А, раздел «Флуоресценция».

New Concentration Measurement

Концентрацией вещества называется его количество в единице объема раствора. Зависимость поглощения (оптической плотности) от концентрации является графическим представлением закона Бера. Эту зависимость получают путем измерения оптической плотности набора эталонных растворов с известными концентрациями. Длина образца (например, длина оптического пути держателя кювет) и длина волны, на которой производятся измерения, поддерживаются постоянными. Полученный таким образом линейный график используется в дальнейшем для определения неизвестных концентраций.

Color Measurement

При помощи SpectraSuite можно определять индекс цветопередачи (Color Rendering Index, CRI) и коррелированную цветовую температуру (Correlated Color Temperature, CCT) образцов. SpectraSuite выполняет цветовые измерения в любой системе, кроме RGB. В каждый момент времени цветовые измерения можно проводить только на одном спектрометре.

- Измерение цвета испускаемого излучения (emissive color): требует наличия спектрометра, откалиброванного для измерения облученности (относительной или абсолютной). SpectraSuite позволяет определять цвет испускаемого или отраженного излучения по абсолютной или относительной облученности.
- Измерение цвета отраженного излучения (reflective color): не требует калибровки по облученности, но требует наличия опорного спектра. Этот опорный спектр получают в той же оптической конфигурации, кроме случая, когда вместо образца устанавливается идеальный отражатель.

Strip Chart

SpectraSuite позволяет использовать временные диаграммы (Strip Charts) для слежения за процессами, исследования кинетики, а также спектрального мониторинга. Временная диаграмма показывает, как изменяется во времени выбранная величина. Такой величиной может быть:

- Интенсивность в одном пикселе (на одной длине волны)
- Среднее значение по диапазону пикселей
- Интеграл по заданному диапазону, вычисленный одним из трех методов.

Исходные данные могут быть получены в любом режиме измерения (пропускание, поглощение и т.д.).

► Порядок действий

1. Переведите SpectraSuite в режим мониторинга, нажав на кнопку Scope ( )^S, расположенную на панели инструментов Experiment, или выбрав пункт меню **Processing | Processing Mode | Scope**.
2. Сохраните опорный и темновой спектры.
3. Выберите режим измерения (поглощение, пропускание и т.д.).
4. Нажмите на кнопку Strip Chart ( ) или выберите пункт меню **File | New | Strip Chart**. На экране появится диалоговое окно **Chart Trend Settings**.
5. Для создания временной диаграммы введите следующие данные:

Поле	Назначение
Wavelength selection	Выбор типа данных, для которых требуется получить временную зависимость. One wavelength — один пиксель (используется, например, при флуоресцентных измерениях). Выберите длину волны. Average from...to — среднее по диапазону пикселей. Выберите начальную и конечную длину волны. Integrate over...to — площадь под кривой. Укажите начальную и конечную длину волны, затем выберите метод интегрирования: прямоугольников (Rectangular), Симпсона (Simpson's) или трапеций (Trapezoid).
Trend Line Color	Выбор цвета линии.

Scale Trend Value	Коэффициент масштабирования (если требуется).
Minimum delay between updates	Интервал (в мс) между точками на графике. Этот интервал не зависит от времени интегрирования. Данные будут отображаться медленнее. Примечание: чем больше период обновления графика, тем меньше компьютерной памяти используется для хранения данных.

6. Нажмите кнопку . Откроется диалоговое окно Strip Chart Options. В этом окне перечислены все созданные вами временные диаграммы с выбранными настройками. Это диалоговое окно используется для добавления, редактирования и удаления трендов (кривых на диаграмме).

Примечание

Чтобы кнопки удаления и редактирования стали активными, необходимо выделить тренд.

7. Нажмите кнопку . На экране появится созданная вами временная диаграмма. Время откладывается по оси X. По оси Y в данном примере отложено пропускание (в процентах) для выбранного пикселя (пикселей).
8. Для добавления еще одного тренда на текущий график нажмите .

Open

Меню **Open** позволяет загрузить ранее сохраненный темновой спектр, опорный спектр, обработанный спектр, или другие сохраненные файлы спектров. Выберите тип загружаемого спектра, затем перейдите в папку, содержащую нужный файл.

Load Dark Spectrum

Темновой спектр — это спектр, полученный при перекрытом или выключенном источнике излучения.

Выберите пункт меню **File | Open | Load Dark Spectrum**, чтобы открыть один или несколько темновых спектров.

Load Reference Spectrum

Опорный спектр — это спектр, полученный при включенном источнике излучения в отсутствие образца.

Выберите пункт меню **File | Open | Load Reference Spectrum**, чтобы открыть один или несколько опорных спектров.

Load Processed Spectrum

Вы можете загружать ранее сохраненные обработанные спектры.

► Порядок действий

1. Выберите пункт меню **File | Open | Load Processed Spectrum**.
2. Введите имя файла или перейдите в папку, содержащую файл. На панели **Data Sources** появится значок обработанного спектра.

3. Вы можете снова сохранить этот спектр в качестве обработанного, темнового или опорного. Щелчок правой кнопкой на значке обработанного спектра вызывает диалоговое окно сохранения спектра (SpectraSuite Save Spectrum).

4. Введите имя файла или перейдите к файлу на диске, выберите тип спектра (обработанный, темновой или опорный) и формат файла (двоичный или текстовый с разделением табуляцией).

Примечание

Чтобы файл можно было открыть в MS Excel, выберите формат с разделением табуляцией.

5. Нажмите кнопку .

Load Spectrum Collection

Спектральная коллекция (spectrum collection) создается в результате скоростного считывания. Выберите пункт меню **File | Open | Load Spectrum Collection** для загрузки спектров, полученных в этом режиме.

Save

Save Spectra Collection

Этот пункт меню позволяет сохранить спектральную коллекцию в файл. Выберите **File | Save | Save Spectra Collection** и введите имя файла. См. также описание пункта меню «*Exporting Processed Data*».

Save Spectrum

Этот пункт меню выводит на экран диалоговое окно, в котором можно задать параметры сохранения. Для экспорта спектра с выбранными параметрами нажмите кнопку , выберите пункт **File | Save | Save Spectrum** или нажмите комбинацию клавиш CTRL+S.

Для изменения параметров используйте пункт меню **File | Save | Configure Export**.

Для отмены экспорта используйте пункт меню **File | Save | Stop Export**.

Store

Этот пункт меню предназначен для сохранения темнового и опорного спектров перед выполнением эксперимента.

Store Dark Spectrum

Темновой спектр — это спектр, полученный при перекрытом или выключенном источнике излучения.

Для сохранения темнового спектра в файл выберите пункт меню **File | Store | Store Dark Spectrum** или воспользуйтесь кнопкой на панели инструментов.

Store Reference Spectrum

Опорный спектр — это спектр, полученный при включенном источнике излучения в отсутствие образца.

Для сохранения опорного спектра в файл выберите пункт меню **File | Store | Store Reference Spectrum** или воспользуйтесь кнопкой на панели инструментов.

Convert Spectra

Пункт меню **File | Convert Spectra** позволяет преобразовывать файлы из одного формата в другой. После его выбора открывается диалоговое окно **File Converter**, в котором можно выбрать файлы и выходной формат.

Screen Capture

Эта функция позволяет сделать снимок окна SpectraSuite или всего экрана компьютера в реальном времени, а затем сохранить его в выбранном формате.

► Порядок действий

1. Выберите пункт меню **File | Screen Capture**. На экране появится диалоговое окно **Screen Capture Config**.

2. Выберите объект для снимка (окно программы SpectraSuite или весь экран компьютера).
3. Если снимок не требуется делать немедленно, то установите время задержки.
4. Выберите формат сохраняемого файла (PNG или JPG).
5. Нажмите кнопку .
6. Введите имя файла и укажите путь для его сохранения, затем нажмите .

Exit

Для выхода из SpectraSuite выберите пункт меню **File | Exit**. На экране появится окно подтверждения. Нажмите **Yes** для завершения работы программы.

Альтернативный способ является нажатие на кнопку «X», расположенную в правом верхнем углу окна программы.

Примечание

Если при попытке выхода из SpectraSuite система зависает, нажмите дважды на клавишу Escape.

Глава 5

Функции меню View

В этой главе описаны различные функции и настройки SpectraSuite, доступные через меню View (Вид).

Scale

Этот пункт меню зарезервирован для применения в будущем.

Graph Layer Options

Диалоговое окно Graph Layer Options обеспечивает расширенное управление настройками окна с графическими данными. Для вызова этого окна выберите пункт меню **View | Graph Layer Options**, или щелкните правой кнопкой на графике и выберите в контекстном меню пункт **Graph Layer Options**, или щелкните на кнопке , или нажмите комбинацию клавиш CTRL+ALT+L.

Annotations

Вкладка Annotations позволяет добавлять текст или изображение в заданное место графика. Аннотации связываются с источником (выбираемым пользователем) и при удалении этого источника удаляются вместе с ним. Подмножество функций этой вкладки доступно также при щелчке правой кнопкой на графике или нажатии кнопки .

Chart

Эта вкладка используется для изменения следующих параметров графика:

Вид линии (line pattern)

Ширина линии (Chart line width)

Размер шрифта (Font size)

Фон (Chart background)

Точность по осям x и y (Number precision for x and y axes)

Шаг основных делений по осям x и y (Number spacing for x and y axes)

Шаг дополнительных делений по осям x и y (Tick spacing for x and y axes)

Шаг сетки по осям x и y (Grid spacing for x and y axes)

Отображение сетки (Grid lines)

Цвет линий сетки (Grid line color)

Cursor

Вкладка Cursor позволяет изменить цвет курсора.

Peaks

Вкладка Peaks позволяет выполнять следующие действия, связанные со спектральными пиками:

отображать на графике параметры пика (значение в максимуме, центральная длина волны, номер пиксела, центр тяжести и т.д.);

включать оповещение о превышении максимума. Вы можете приостановить измерение, сохранить спектр и настроить сигнал оповещения.

Image

Эта вкладка используется для добавления к графику фонового изображения. Вы можете задавать размер и ориентацию этого изображения, а также зеркально отображать его, поворачивать, растягивать и менять наклон. Изображение можно закрепить на месте для данного диапазона.

Draw

Эта вкладка содержит инструменты для редактирования линии, созданной с помощью инструмента .

Trendline

Эта вкладка позволяет изменять цвет и толщину линии тренда на выбранном графике.

Overlay

Используйте эту вкладку для наложения спектров на выбранный график.

Visible Spectrum

Эта вкладка позволяет отобразить на графике спектр видимого излучения. Спектр может занимать всю высоту графика, иметь вид полосы по оси x или располагаться под выбранной линией тренда (как показано на рисунке ниже).

Spectrum Range

Эта вкладка позволяет вывести на график названия следующих спектральных диапазонов: гамма-излучение, рентгеновское излучение, УФ, видимая область, ближний ИК, средний ИК, дальний ИК, микроволны и радиоволны.

Legend

Используется для добавления легенды на график. Легенда содержит серийный номер спектрометра и имя файла, из которого загружен наложенный спектр (при наличии такой возможности).

Toolbars

Этот пункт позволяет выбрать панели инструментов, которые будут отображаться в основном окне SpectraSuite. Если панель в данный момент отображается, рядом с ее названием стоит галочка. Щелкните на ней, чтобы убрать панель с экрана.

Панели, доступные для отображения в данном меню, показаны на рисунке:

Acquisition

Выберите пункт **View | Acquisition**, чтобы показать или скрыть инструменты, позволяющие управлять сбором данных.

Инструмент	Описание
<p>Установка времени интегрирования спектрометра (аналогично установке выдержки в фотоаппарате). Чем больше время интегрирования, тем дольше детектор регистрирует падающие на него фотоны. Если сигнал в режиме мониторинга слишком мал, увеличьте время интегрирования. Если сигнал слишком велик, уменьшите его.</p> <p>Время интегрирования следует выбирать так, чтобы самый большой предполагаемый сигнал составлял примерно 85% от полного диапазона спектрометра: около 3500 для спектрометров с максимальным числом отсчетов 4096; 14000 для спектрометров с максимальным числом отсчетов 16384; 50000 для спектрометров с максимальным числом отсчетов 65535. Наблюдая за отображаемым спектром, изменяйте время интегрирования до тех пор, пока уровень сигнала не приблизится к оптимальному для вашего спектрометра. Указанное время интегрирования относится к включённым каналам спектрометра в активном спектральном окне.</p>
<p>Ввод количества спектров, которые будут накапливаться и усредняться драйвером устройства перед передачей результата в SpectraSuite. Чем больше это значение, тем выше будет отношение сигнал/шум, которое растет как квадратный корень из числа усредняемых спектров.</p>
<p>Ввод ширины окна сглаживания, т.е. количества соседних точек, подлежащих усреднению. Например, при ширине 5 каждая точка усредняется с 5 точками слева и 5 точками справа. Чем больше это значение, тем более гладким будет спектр и тем выше будет отношение сигнал/шум, которое растет как квадратный корень из числа усредняемых точек. Однако слишком большое значение приведёт к потере спектрального разрешения.</p>
<p>Включение или выключение стробирования (может использоваться для управления источником света). Сигнал выдается на линию S0 интерфейса спектрометра.</p>
<p>Включение или выключение вычитания электрического темного сигнала, считанного с неосвещенных элементов детектора.</p> <p>Например, если не освещаются первые 24 элемента, то из спектра будет вычитаться среднее по этим 24 элементам.</p>

Acquisition Controls

Выберите пункт **View | Toolbars | Acquisition Controls**, чтобы показать или скрыть кнопки приостановки и возобновления сбора данных.

Кнопка	Назначение
Временная остановка считывания
Считывание одного спектра
Возобновление считывания

Correction

На этой панели находится только один инструмент: флажок для включения/выключения корректировки нелинейности детектора. Панель Correction по умолчанию не отображается; ее нужно выбрать в меню **View | Toolbars | Correction**.

Data Display

Панель инструментов отображения данных содержит значки следующих графических функций:

Значок	Функция
График спектра. Отображение на текущем графике новой спектральной кривой с параметрами, заданными на панели инструментов Acquisition. Каждая новая кривая отображается другим цветом. Параметры сбора данных для каждой кривой приводятся в окне Data Source.
Таблица спектра. Отображение спектра в табличном формате. Таблица создается на отдельной вкладке, заголовок которой появляется в верхней части графического окна. Дополнительная информация приведена в разделе «Таблица спектра».
График абсолютной облученности. Этот график выводится на отдельной вкладке, заголовок которой появляется в верхней части графического окна и в разделе Data Views.
Цветовые измерения. Запуск мастера цветowych измерений. См. описание пункта меню «Color measurement».
Временная диаграмма. Позволяет следить за процессами, выполнять кинетические измерения и наблюдать за изменением спектров во времени. См. раздел «Временные диаграммы» для получения дополнительной информации.

Memory

На панели Memory находится индикатор памяти, используемой в данный момент программой SpectraSuite ( ). Щелкните на нем, чтобы удалить ненужные данные из памяти. Панель Memory по умолчанию не отображается; ее нужно выбрать в меню **View | Toolbars | Memory**.

Preprocessing

Панель инструментов предварительной обработки данных содержит значки следующих функций:

Значок	Функция
Корректировка неполного отражения. Расчет компенсации для эталона отражения, не являющегося абсолютно белым.
Добавление мониторинга опорного спектра. Компенсация изменений спектральной интенсивности, вызванных нестабильностью источника излучения и системными дрейфами.

SeaChanger

Данная функция ( ) даёт возможность настроить цветовую систему устройства SeaChanger, соединенного с CDS LanBox-LCE кабелем Ethernet. Для использования этой функции необходимо иметь спектрометр RedTide (USB650) с подключенным к нему источником излучения.

► Порядок действий

1. Щелкните на значке SeaChanger ( ) на панели инструментов. На экране появится диалоговое окно **Choose DMX Source (Выбрать источник DMX)**.

2. Выберите **None (нет)** или **LanBox DMX** для вашего источника, затем нажмите .
 - a) Если вы выбрали None, то переходите к шагу 3.
 - b) Если вы выбрали LanBox DMX, то появится диалоговое окно SeaChanger DMX Login. Введите информацию, необходимую для Ethernet-подключения к LanBox-LCE.

На экране появится график и сообщение о прогреве лампы.

Во время инициализации SpectraSuite выполняет следующие действия:

- включает источник излучения;
- устанавливает оптимальное время интегрирования;
- сохраняет эталонный спектр;
- выключает источник, чтобы сохранить темновой спектр;
- запускает процедуру измерения цветности испускаемого излучения;
- открывает консоль LanBox DMX и проводит калибровку, пока результаты измерений не стабилизируются.

3. Консоль SeaChanger позволяет менять параметры, описание которых приведено в таблице ниже.

Параметр	Назначение
Measure Color from... (Измерить цвет с)	Выбор спектрометра по серийному номеру
Custom color (Заказной цвет)	Выбор цвета
Reference Gel from (Эталонный фильтр)	Выбор одного из вариантов: все диапазоны (All ranges), Cinegel, Cinelux, Roscolux, Permacolor, или Lee
Stored Colors (Сохраненные цвета)	Добавление (Add), сохранение (Save), удаление (Remove)
Configuration (Конфигурация)	СУМГ с объективами или без (w/o)
Store Dark/Reference (Сохранить темновой/эталонный спектр)	Принудительное обновление спектра
Color information (Информация о цвете) x , y, Y Closest gel from (Ближайший фильтр) Color difference in XYZ (Цветовая разность в XYZ)	Выбор одного из вариантов: все диапазоны (All ranges), Cinegel, Cinelux, Roscolux, Permacolor, или Lee
Preview (Предварительный просмотр)	Просмотр кривых пропускания и интенсивности излучения

Элементы управления на верхней правой панели предназначены для изменения цвета SeaChanger путем управления его цветовыми дисками.

Testing

Панель тестирования содержит один элемент ( ), позволяющий оценить скорость работы SpectraSuite (время с момента получения данных до завершения их обработки). Панель Testing по умолчанию не отображается; ее нужно выбрать в меню **View | Toolbars | Testing**.

Trigger

Список External Trigger позволяет выбрать один из режимов синхронизации спектрометра:

Normal — без синхронизации (автоматический запуск)

Software — асинхронный запуск по внешнему сигналу (время интегрирования задается пользователем)

External Hardware — запуск по внешнему сигналу (время интегрирования фиксировано или задается пользователем)

Strobe-Gate Delay

Этот элемент управления позволяет установить задержку стробирования в мс.

Customize

Этот пункт меню позволяет настроить панели инструментов, выбрав нужные функции в диалоговом окне Customize Toolbars.

Глава 6

Функции меню Spectrometer

В этой главе описаны различные функции и настройки SpectraSuite, доступные через меню Spectrometer (Спектрометр).

Acquisition

Это меню позволяет запускать и останавливать процесс получения данных. После запуска, SpectraSuite автоматически начинает сбор данных со всех подключенных спектрометров в режиме мониторинга. Если подключено более одного спектрометра, то перед подачей команд следует выбрать один из них на панели Data Sources. После этого можно использовать пункт **Spectrometer | Acquisition | Pause Acquisition** для временной остановки, или пункт **Spectrometer | Acquisition | Resume Acquisition** для возобновления считывания спектров.

Pause Acquisition/Resume Acquisition

Эти пункты меню непосредственно останавливают и возобновляют сбор данных, как описано выше.

Terminate Acquisition

Этот пункт меню используется для окончательной остановки сбора данных с выбранного на панели **Data Sources** спектрометра.

Spectrometer Features

Этот пункт меню обеспечивает доступ к дополнительным настройкам подключенных спектрометров. Чтобы он стал активным, необходимо выбрать спектрометр на панели **Data Sources**. Диалоговое окно Features можно открыть двумя способами: выбрать пункт меню **Spectrometer | Spectrometer Features** или щелкнуть правой кнопкой на устройстве в панели **Data Sources** и выбрать **Spectrometer Features** в контекстном меню.

Каждый спектрометр имеет свой набор функций, о которых можно прочитать в прилагаемой документации. Спектрометр комбинационного рассеяния (MMS Raman) имеет специфические настройки, описанные в разделе «*Спектрометр комбинационного рассеяния (MMS Raman)*».

Ниже приводится пример диалогового окна для спектрометра HR4000.

Полное описание вкладок диалогового окна для HR4000 приведено в таблице ниже. Многие из настроек применимы также и к другим спектрометрам Ocean Optics.

Заголовок вкладки	Группа настроек
Analog In	Установка диапазона входных напряжений и периода выборки для аналогового входа (этот вход доступен через вспомогательный разъем спектрометра).
Analog Out	Управление аналоговым выходом спектрометра. Этот выход может использоваться для различных целей, например, анализа интенсивности в единичном пикселе или управления интенсивностью источника излучения.
Autonulling	Управление автоматической коррекцией нуля. Коррекция осуществляется вычитанием электрического темного сигнала.
Board Temperature	Спектрометры высокого разрешения имеют датчик температуры, установленный на печатной плате. Вы можете просмотреть текущее значение температуры.
Channel Features	Для модели ADC1000-USB. Включение каналов (1–7).
Continuous Strobe	Управление задержкой непрерывного стробирующего сигнала (представляет собой последовательность импульсов с регулируемой частотой).
Detector Linearity	Изменение коэффициентов, корректирующих нелинейность детектора.

External Trigger Delay	Управление задержкой запуска.
GPIO	Управление универсальными линиями ввода-вывода.
Hardware Trigger	Внешний запуск цикла интегрирования осуществляется по фронту TTL-сигнала. Здесь устанавливается задержка (в дискретных интервалах).
I2C	Установка параметров шины I2C (Inter-Integrated Circuit). Эта двухпроводная шина широко используется во встраиваемых системах. С ее помощью вы можете добавлять к системе периферийные устройства, не используя такие дорогостоящие ресурсы, как порты ввода-вывода.
Irradiance	Загрузка и сохранение калибровочных коэффициентов для измерения абсолютной облученности.
LS-450	Эта вкладка появляется при подключении к спектрометру источника излучения USB-LS-450. Здесь можно включить импульсный режим светодиода.
LS-450 Calibration Constants	Калибровочные константы для источника излучения USB-LS-450.
LS-450 Current Out	Регулировка выходного тока источника излучения USB-LS-450.
Multi Channel Provider	Эта вкладка появляется у модели ADC1000.
Single Strobe	Управление задержкой фронта и спада однократного стробирующего TTL-импульса.
SPI	Управление последовательным интерфейсом периферийных устройств (SPI). Этот трёхпроводный интерфейс может использоваться для связи с различными подчиненными устройствами.
Stray Light	Ввод коэффициента для учета рассеянного излучения.
TEC	Установка режима работы термоэлектрического охладителя (TEC) ПЗС-матрицы в спектрометрах QE65000.
Thermoelectric	Для спектрометров ближнего ИК диапазона.
Trigger Delay	То же, что и External Trigger Delay.
UV/VIS	Управление источником излучения ISS-UV-VIS (включение/выключение ламп видимого и УФ)

	диапазонов и регулировка их интенсивности).
Wavelength	Ввод или изменение коэффициентов калибровки по длине волны. Эти коэффициенты приведены в калибровочном сертификате, прилагаемом к спектрометру.

Спектрометр комбинационного рассеяния (MMS-Raman)

Ниже показано диалоговое окно для управления спектрометром комбинационного рассеяния.

В нижней части вкладки Raman Exposure Image можно просмотреть необработанное изображение, поступающее с ПЗС-детектора. Это полезно, если ваш спектральный график выглядит некорректно. Каждая полоса представляет спектральную линию. Светлые вертикальные линии соответствуют пикам. Элементы управления, расположенные на данной вкладке, описаны в таблице.

Элемент управления	Назначение
Auto Equalize	Автоматическое повышение контраста изображения с ПЗС-матрицы.
Show Raw	Вывод на экран необработанного изображения.
Brightness/Contrast	Регулировка яркости и контрастности изображения.
Reset	Сброс изображения.
Save Raw Image/Processed Image	Сохранение необработанного/обработанного изображения в файл.
Zoom	Стандартные элементы управления для увеличения/уменьшения изображения.

Вкладка Laser используется для ввода информации об используемом лазере.

Вкладки Wavelength и Calibration используются для сохранения или загрузки калибровочных файлов.

Вкладка Firmware предназначена для обновления встроенной микропрограммы. Перед обновлением необходимо остановить все процессы сбора данных.

Вкладка CCD Temperature используется для просмотра и регулировки температуры ПЗС-детектора.

Вкладка CCD Shutter предназначена для управления затвором ПЗС-детектора. В частности, затвор должен быть закрыт при сохранении темного спектра.

Rescan devices

Этот пункт меню следует использовать при подключении устройства после запуска SpectraSuite. Новое устройство будет отображено на панели Data Sources.

Remove spectra

Удаление спектральной коллекции, полученной в режиме скоростного считывания. Для этого можно также щелкнуть правой кнопкой на значке спектральной коллекции на панели **Data Views** и выбрать **Remove Spectra** в контекстном меню. См. описание пункта меню «*High-Speed Acquisition*» для получения дополнительной информации.

Show devices

Этот пункт меню позволяет снова вывести на экран панели Data Sources и Data Views, если они были закрыты.

Глава 7

Функции меню Processing

В этой главе описаны различные функции обработки сигналов, доступные через меню Processing (Обработка).

Color

Edit Color Settings

Изменение настроек для цветовых измерений.

Pre-processing

К функциям предварительной обработки спектров в настоящее время относятся:

- Коррекция неполного отражения
- Компенсация нестабильности опорного спектра

Предварительную обработку можно полностью отключить.

Remove Preprocessor

Выберите пункт меню **Processing | Pre-processing | Remove Preprocessor** для исключения предварительной обработки (коррекции неполного отражения).

Non-Unity correction

Коррекция неполного отражения (пункт меню **Processing | Pre-processing | Non-Unity correction**) используется при измерении спектров отражения, в тех случаях, когда эталон отражения не является абсолютно белым. Эта функция также доступна на панели инструментов (значок .

Add Reference Monitor

Пункт меню **Processing | Pre-processing | Add Reference Monitor** позволяет компенсировать колебания интенсивности спектра, вызванные нестабильностью источника излучения и дрейфами в системе. Опорный спектр источника, сохраненный перед началом измерений, считается эталонным. При любом отклонении от него будет выполняться соответствующая коррекция спектра образца.

Для получения оптимального результата при длительных экспериментах рекомендуется сохранять опорный спектр как можно чаще. Если это невозможно, используйте мониторинг источника излучения для автоматической компенсации дрейфов. Дрейфы бывают двух видов: спектрально однородные и спектрально неоднородные. Дрейф вольфрамовой лампы обычно однороден, тогда как дрейф дейтериевой лампы — нет.

Для перехода в режим мониторинга опорного спектра должны быть выполнены следующие условия:

- Используется либо несколько спектрометров (с перекрытием спектральных диапазонов в опорной области), либо один спектрометр со сбором данных от разных источников.
- Сохранены как опорный, так и темновой спектры. Функция мониторинга (если ее использование возможно) становится доступной сразу после сохранения этих спектров.

► **Порядок действий**

Для включения мониторинга опорного спектра:

1. Запустите спектрометр, который будет контролировать источник излучения. Настройте параметры сбора данных так, чтобы спектр лежал в пределах шкалы.
2. Сохраните опорный и темновой спектры для этого измерительного канала.
3. Запустите спектрометр, на котором будут сниматься спектры образца.
4. Сохраните темновой спектр образца.
5. Щелкните на графике со спектром образца или выберите соответствующий объект на панели Data Sources. Функция мониторинга опорного спектра должна стать доступной.
6. Щелкните на значке или выберите пункт меню **Processing | Preprocessing | Add Reference Monitor**. Появится диалоговое окно **Configure Reference Monitoring**.

7. Выберите источник опорного сигнала (Reference Channel).

8. Выберите тип опорного сигнала (Reference Type):

Тип сигнала	Описание
Все длины волн	Требует наличия не менее двух спектрометрических каналов с перекрывающимися диапазонами. Позволяет компенсировать как однородный, так и неоднородный дрейф.
Одна длина волны	Компенсация дрейфа в одной точке спектра.
Интегральная интенсивность	Используется при однородном дрейфе источника.

9. Нажмите кнопку .

Processing Mode

В этом меню собраны все режимы обработки, используемые при проведении экспериментов. Эти режимы также доступны из панели инструментов над графиком. Порядок проведения измерений в каждом из этих режимов подробно описан в приложении А, «Руководство по проведению экспериментов».

Scope

Выбор пункта меню **Processing | Processing Mode | Scope** или щелчок на значке панели инструментов переводит SpectraSuite в режим мониторинга.

В этом режиме на графике отображается необработанный сигнал с выхода аналого-цифрового преобразователя. Это удобно для выбора оптимального способа обработки спектра перед измерением поглощения, пропускания, отражения или относительной облученности. Спектр, наблюдаемый в этом режиме, является комбинацией спектра источника излучения, спектров отражения дифракционной решётки и зеркал спектрометра, спектров пропускания световодов, спектральной чувствительности детектора и спектральных характеристик образца.

Режим мониторинга используется при конфигурировании измерительной системы, подборе времени интегрирования и сохранении опорного/темнового спектров.

Scope Minus Dark

Пункт меню **Processing | Processing Mode | Scope Minus Dark** переключает текущее окно в режим мониторинга с вычитанием темнового спектра. Темновой спектр вычитается во всех каналах спектрометра до вывода спектра на график. Для перехода в этот режим можно также нажать на панели инструментов.

См. также описание режима мониторинга (*Scope*).

Absorbance

Пункт меню **Processing | Processing Mode | Absorbance** переключает текущее окно в режим измерения поглощения (оптической плотности). Для перехода в этот режим можно также нажать на панели инструментов. Переход в режим поглощения возможен только после сохранения опорного и темнового спектров в режиме мониторинга

Оптическая плотность на каждой длине волны рассчитывается по следующей формуле:

$$A_{\lambda} = -\log_{10} \left(\frac{S_{\lambda} - D_{\lambda}}{R_{\lambda} - D_{\lambda}} \right)$$

где:

S_{λ} — аналитический (sample) сигнал на длине волны λ ,

D_{λ} — темновой (dark) сигнал на длине волны λ ,

R_{λ} — опорный (reference) сигнал на длине волны λ .

Оптическая плотность раствора непосредственно связана с концентрацией вещества в растворе. Эта связь дается законом Бера:

$$A_{\lambda} = \varepsilon_{\lambda} c l$$

где:

A_{λ} — оптическая плотность на длине волны λ ,

ε_{λ} — коэффициент экстинкции поглощающего вещества на длине волны λ ,

c — концентрация поглощающего вещества,

l — длина оптического пути в растворе.

См. «Руководство по проведению экспериментов» для получения дополнительной информации об измерении спектров поглощения.

Transmission

Пункт меню **Processing | Processing Mode | Transmission** переключает текущее окно в режим измерения пропускания. Для перехода в этот режим можно также нажать **T** на панели инструментов. Переход в режим измерения пропускания возможен только после сохранения опорного и темнового спектров в режиме мониторинга. Коэффициент пропускания рассчитывается по следующей формуле:

$$\%T_{\lambda} = \frac{S_{\lambda} - D_{\lambda}}{R_{\lambda} - D_{\lambda}} \times 100\%$$

где:

S_{λ} — аналитический сигнал на длине волны λ ,

D_{λ} — темновой сигнал на длине волны λ ,

R_{λ} — опорный сигнал на длине волны λ .

См. «Руководство по проведению экспериментов» для получения дополнительной информации об измерении спектров пропускания.

Reflection

Пункт меню **Processing | Processing Mode | Reflection** переключает текущее окно в режим измерения отражения. Для перехода в этот режим можно также нажать **R** на панели инструментов. Переход в режим измерения отражения возможен только после сохранения опорного и темнового спектров в режиме мониторинга. Коэффициент отражения рассчитывается по следующей формуле:

$$\%T_{\lambda} = \frac{S_{\lambda} - D_{\lambda}}{R_{\lambda} - D_{\lambda}} \times 100\%$$

где:

S_{λ} — аналитический сигнал на длине волны λ ,

D_{λ} — темновой сигнал на длине волны λ ,

R_{λ} — опорный сигнал на длине волны λ .

См. «Руководство по проведению экспериментов» для получения дополнительной информации об измерении спектров отражения.

Relative Irradiance

Пункт меню **Processing | Processing Mode | Relative Irradiance** переключает текущее окно в режим измерения относительной облученности. Для перехода в этот режим можно также нажать **I** на панели инструментов.

Переход в режим измерения относительной облученности возможен только после сохранения спектра сравнения (спектр черного тела с известной цветовой температурой). Кроме того, необходимо сохранить темновой спектр, отсоединив оптический кабель от эталонного источника и закрыв конец кабеля от света.

Относительная облученность служит мерой интенсивности исследуемого источника относительно эталонного. SpectraSuite рассчитывает относительную облученность по следующей формуле:

$$I_{\lambda} = B_{\lambda} \left(\frac{S_{\lambda} - D_{\lambda}}{R_{\lambda} - D_{\lambda}} \right)$$

где:

B_{λ} — относительная энергия эталона, рассчитанная по его цветовой температуре,

S_{λ} — аналитический сигнал на длине волны λ ,

D_{λ} — темновой сигнал на длине волны λ ,

R_{λ} — опорный сигнал на длине волны λ .

См. *«Руководство по проведению экспериментов»* для получения дополнительной информации об измерении спектров относительной облученности.

Raman shifts

Сдвиг частоты в спектроскопии комбинационного рассеяния измеряется относительно частоты источника возбуждения. Для использования этого пункта меню необходимо ввести длину волны вашего лазера (см. пункт меню Set Laser Wavelength).

Absolute Irradiance

Абсолютная облученность — это количество световой энергии, падающей в единицу времени на единицу площади поверхности. Такой поверхностью может быть торец оптического волокна, поверхность косинусного корректора или поверхность интегрирующей сферы (фотометрического шара).

Scope

Этот пункт меню позволяет перейти в режим мониторинга, чтобы полностью контролировать обработку спектра перед калибровкой системы и проведением измерений. Будьте внимательны при работе в этом режиме, поскольку на отображаемый спектр влияют сразу несколько факторов: спектральное распределение интенсивности источника излучения, отражательная способность дифракционной решетки и зеркал спектрометра, пропускание световодов и спектральная чувствительность детектора.

Absolute Irradiance

Пункт меню **Processing | Absolute Irradiance | Absolute Irradiance** позволяет создать новый график абсолютной облученности. Можно также нажать **I** на панели инструментов Data Display. В этом случае будет вызван мастер, помогающий создать график.

В режиме абсолютной облученности измеряется истинная энергия, падающая на поверхность зонда. Абсолютная облученность выражается в мкВт/см²/нм (при измерениях с интегрирующей сферой результат выдается в мкВт/нм). Перед началом измерений необходимо сохранить темновой спектр и иметь калибровочный файл. Сохранение опорного спектра при абсолютных измерениях не требуется.

Если ваш спектрометр был откалиброван в лаборатории Ocean Optics, то вы должны были получить компакт-диск с файлами радиометрической калибровки. Если таких файлов у вас нет, их необходимо создать самостоятельно, используя калиброванный источник излучения.

См. «Руководство по проведению экспериментов» для получения дополнительной информации об измерении абсолютной облученности.

Collection Area

Пункт меню **Processing | Absolute Irradiance | Collection Area** предназначен для ввода площади, с которой собирается световая энергия.

Диалоговое окно Collection Area предлагает следующие варианты:

Use Integrating Sphere (Использовать интегрирующую сферу) — выбирается только при наличии интегрирующей сферы и калибровочного источника LS1-CAL-INT. Этот вариант предполагает, что исследуемый источник находится внутри сферы, поэтому понятие площади светособирания здесь неприменимо. Если сфера используется для сбора излучения от внешнего источника, SpectraSuite предполагает, что диаметром ее входного отверстия является величина в поле **Fiber Diameter**. Убедитесь, что введено правильное значение (в микронах).

Collection Area (Площадь сбора) — если вам известна фактическая площадь светособирания, введите её. По умолчанию это 1 см².

Fiber Diameter (Диаметр волокна) — если в качестве зонда используется волокно без дополнительных насадок, введите его диаметр в микронах. Если излучение собирается интегрирующей сферой, введите диаметр ее входного отверстия (также в микронах). Если источник излучения помещен внутрь сферы, это значение игнорируется. При использовании косинусного корректора необходимо вводить следующие значения:

Используемый корректор	Диаметр (мкм)
CC-3 или CC-3-UV	3900
CC-3-DA	7140

SpectraSuite рассчитает площадь, исходя из введенного диаметра.

Calibration

Спектрометр можно откалибровать двумя способами:

1. Заказать калибровку в Ocean Optics. В этом случае вам будет выслан калибровочный файл.
2. Выполнить калибровку самостоятельно, используя данный пункт меню. Для калибровки необходим источник излучения (калибровочная лампа), который создает известную освещенность (мкВт/см²/нм).

Combine Calibration Files

Этот пункт меню предназначен для объединения двух калибровочных файлов, один из которых получен при помощи дейтериевой калибровочной лампы (УФ диапазон), а другой — при помощи вольфрамовой калибровочной лампы (видимый и ближний ИК диапазоны). Результирующий файл можно будет использовать во всем спектральном диапазоне.

► Порядок действий

1. Выберите пункт меню **Processing | Absolute Irradiance | Combine Calibration Files**.
2. Введите имя калибровочного файла, полученного при помощи дейтериевой лампы, либо перейдите к нужному файлу.
3. Введите имя калибровочного файла, полученного при помощи вольфрамовой лампы, либо перейдите к нужному файлу.
4. В поле **Boundary Wavelength** (Граничная длина волны) выберите длину волны, на которой будут объединены оба файла, или перейдите к шагу 5, приняв значение, предложенное SpectraSuite.

5. Нажмите кнопку . Справа на панели предварительного просмотра (**Spectrometer Calibration Preview**) будет показан объединенный калибровочный график.

New Energy, Power, Photons

Этот пункт меню позволяет измерять интегральные величины (энергию, мощность, число фотонов) в заданном интервале длин волн. Он активен только в режиме измерения абсолютной облученности (.

► Порядок действий

1. Создайте новый график абсолютной облученности. См. раздел «Абсолютная облученность» в приложении А, «Руководство по проведению экспериментов».
2. Выберите пункт меню **Processing | Absolute Irradiance | New Energy, Power, Photons** или щелкните на значке рядом с графиком, чтобы вывести на экран диалоговое окно Energy, Power, Photons.

3. Если открыто более одного графика абсолютной облученности, выберите нужный спектрометр, выделив его в списке **Source**.
4. Введите пределы интегрирования (**Integrate from...to**).
5. Выберите метод интегрирования (метод прямоугольников, трапеций или Симпсона).
6. В завершение нажмите кнопку . Справа от графика появится таблица Energy, Power, Photons. Для изменения параметров и пересчета значений щелкните на значке .

Ниже приводится описание строк таблицы:

Параметр	Значение
Source	Источник излучения, выбранный на шаге 3
Start	Начальная длина волны, выбранная на шаге 4
End	Конечная длина волны, выбранная на шаге 4
Method	Метод интегрирования, выбранный на шаге 5
μJoule	Рассчитанная энергия в микроджоулях
μWatt	Рассчитанная мощность в микроваттах
μJoule/cm ²	Рассчитанная плотность энергии
μWatt/cm ²	Рассчитанная плотность мощности
dBm	Рассчитанная мощность в децибелах по отношению к одному милливатту. Используется при измерении мощности лазеров
Photons/cm ² /s	Число фотонов, падающих на квадратный сантиметр за секунду
Total photons	Общее число фотонов

Moles of photons

Количество фотонов в молях

New Photometry Measurement

Этот пункт меню позволяет проводить измерения в фотометрических единицах (люменах, люксах и канделах). Расчет проводится в диапазоне от 380 до 780 нм. При этом учитывается различие между фотопическим (дневным) и скотопическим (ночным) зрением. Фотопическая кривая относительной чувствительности глаза $V(\lambda)$ заменяется на скотопическую кривую $V'(\lambda)$ при яркости менее нескольких сотен кд/м².

Фотометрические измерения возможны только в режиме абсолютной облученности (I).

► Порядок действий

1. Создайте новый график абсолютной облученности. См. раздел «Абсолютная облученность» в приложении А, «Руководство по проведению экспериментов».
2. Выберите пункт меню **Processing | Absolute Irradiance | New Photometry Measurement** или нажмите на графике облученности, чтобы открыть диалоговое окно **Configure Photometry**.

3. Если открыто более одного графика абсолютной облученности, выберите нужный спектрометр, выделив его в списке **Source**.
4. Выберите тип наблюдателя (**Observer**).
5. Оставьте для телесного угла (**Steradians**) значение по умолчанию (1.0) или введите собственное значение. (Если значение равно 1, то кандела численно равна люмену).

В правой части диалогового окна представлена информация о наблюдателе (Observer Information) в текстовом (Details) и графическом (Graph) виде. Пример текстовой информации был приведен выше, пример графической — ниже.

6. В завершение нажмите кнопку . Справа от графика появится таблица Photometry. Для изменения параметров и пересчета значений щелкните на значке .

Ниже приводится описание строк таблицы:

Параметр	Значение
Source	Источник излучения, выбранный на шаге 3
Observer	Тип наблюдателя, выбранный на шаге 5
Steradians	Телесный угол (область пространства, ограниченная конусом с вершиной в центре сферы и основанием на поверхности сферы) в стерadians. Световой поток в люменах делится на телесный угол, чтобы получить силу света в канделах.
Area (m ²)	Площадь сбора светового излучения в квадратных метрах
Lumen	Световой поток в люменах. Люмен — это «световой ватт». При переходе от ваттов к люменам учитывается спектральная чувствительность человеческого глаза.
Lux	Освещённость в люксах. Определяется как количество люменов на квадратный метр.
Кандела	Сила света в канделах согласно международным стандартам
PAR	Photosynthetic Active Radiation (фотосинтетически активное излучение). Абсолютное число фотонов (в молях) в интервале 400–700 нм. Чтобы изменить границы этого интервала и выполнить новый расчет, используйте пункт меню New Energy, Power, Photons

X-axis Units

Этот пункт меню позволяет выбрать единицы измерения по оси X на спектральном графике. Возможны следующие варианты: нанометры, микроны, гигагерцы, волновые числа, комбинационные сдвиги (Raman Shifts) и пиксели. По умолчанию используются нанометры.

Set Color Temperature

Если у вас есть лампа накаливания с известной цветовой температурой, вы можете ввести здесь значение этой температуры для использования при цветовых измерениях.

► Порядок действий

1. Выберите пункт меню **Processing | Select Color Temperature**. Откроется диалоговое окно Configure Photometry.
2. Введите цветовую температуру (в градусах Кельвина) и нажмите . Эта температура будет показана на панели Color Values в режиме цветовых измерений.

Exporting Processed Data

SpectraSuite позволяет сохранять и экспортировать обработанные данные в двоичный файл или текстовый файл с разделением табуляцией. В режиме внешнего запуска сохранение полного спектра может выполняться автоматически после каждого запускающего события.

► Порядок действий

1. Щелкните правой кнопкой на узле **Result** в панели Data Sources и выберите **Export Result**.

Откроется диалоговое окно экспорта данных.

2. Введите следующие данные:

Поле	Значение
Save options:	Варианты сохранения:
Save every scan	Сохранять каждый спектр
Save after every: ... scans	Сохранять через каждые ... спектров
Between saved scans, wait at least:	После каждого сохранения ожидать как минимум...
Save the first available scan every:	Сохранять первый доступный спектр через каждые...
File options:	Параметры файлов:
File Type	Тип файла: Grams SPC, JCAMP, двоичный

Save to directory	ООИ или текстовый с разделением таблицей
Base Filename	Папка для сохранения (ввод или выбор)
Padding Digits	Базовая часть имени файла
Preview	Количество цифр для автонумерации файлов (3 — сохранение сотен файлов; 4 — сохранение тысяч файлов и т. д. до 15). Например, при 3 цифрах файлы получают имена от BaseFilename001 до BaseFilename999
	В настоящее время не используется

3. Нажмите , чтобы начать экспорт.

Source	observer	Illuminant	Color Mode	X	Y	Z	x	y	z	CRI Ra	CRI
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4849	0.3710	0.1441	84.5	(2096K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4849	0.3710	0.1441	84.5	(2096K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4891	0.3739	0.1371	85.9	(2075K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4891	0.3739	0.1371	85.9	(2075K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4885	0.3720	0.1396	83.3	(2068K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4885	0.3720	0.1396	83.3	(2068K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4859	0.3755	0.1387	84.9	(2119K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4859	0.3755	0.1387	84.9	(2119K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4854	0.3749	0.1397	88.9	(2119K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4854	0.3749	0.1397	88.9	(2119K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4830	0.3721	0.1449	86.2	(2124K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4830	0.3721	0.1449	86.2	(2124K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4842	0.3703	0.1456	85.6	(2098K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4842	0.3703	0.1456	85.6	(2098K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4887	0.3721	0.1392	85.6	(2066K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4887	0.3721	0.1392	85.6	(2066K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4847	0.3703	0.1449	84.1	(2093K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4847	0.3703	0.1449	84.1	(2093K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4886	0.3760	0.1354	87.0	(2095K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4886	0.3760	0.1354	87.0	(2095K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4843	0.3725	0.1431	85.9	(2113K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4843	0.3725	0.1431	85.9	(2113K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4843	0.3720	0.1437	87.7	(2110K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4843	0.3720	0.1437	87.7	(2110K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4806	0.3699	0.1494	84.2	(2132K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4806	0.3699	0.1494	84.2	(2132K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4812	0.3724	0.1464	82.9	(2144K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4812	0.3724	0.1464	82.9	(2144K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4856	0.3688	0.1456	83.4	(2073K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4856	0.3688	0.1456	83.4	(2073K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4859	0.3731	0.1410	84.9	(2101K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4859	0.3731	0.1410	84.9	(2101K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4866	0.3731	0.1403	83.5	(2094K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4866	0.3731	0.1403	83.5	(2094K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4918	0.3691	0.1391	85.0	(2016K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4918	0.3691	0.1391	85.0	(2016K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4843	0.3747	0.1410	86.8	(2130K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4843	0.3747	0.1410	86.8	(2130K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4790	0.3748	0.1461	84.7	(2186K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4790	0.3748	0.1461	84.7	(2186K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4841	0.3740	0.1419	85.9	(2127K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4841	0.3740	0.1419	85.9	(2127K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4854	0.3704	0.1442	83.8	(2087K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4854	0.3704	0.1442	83.8	(2087K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4864	0.3761	0.1375	85.1	(2118K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4864	0.3761	0.1375	85.1	(2118K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4851	0.3750	0.1400	88.1	(2123K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4851	0.3750	0.1400	88.1	(2123K)

Set Laser Wavelength

Этот пункт меню предназначен для спектроскопии комбинационного рассеяния. Здесь нужно ввести длину волны используемого лазера, после чего станет доступен пункт меню Raman Shifts.

Edit Result Colors

Здесь можно выбрать цвет для отображения данных. Он будет использован для всех графиков, построенных по этим данным, включая график абсолютной облученности и ленточные диаграммы.

► Порядок действий

1. Выберите пункт меню **Processing | Edit Result Colors** для вызова редактора цвета (Result Color Editor).

2. Укажите источник данных и нажмите кнопку **Change Color (Изменить цвет)**. Откроется диалоговое окно Result Color Selection (Выбор цвета).

Цвет можно выбрать тремя способами — по образцам (Swatches), по координатам HSB (цветовой тон, насыщенность, яркость) или по координатам RGB (красный, зелёный, синий).

3. Выберите вкладку с тем способом, который вы хотите использовать.
4. Выберите цвет. В таблице **Recent** содержатся цвета, которые выбирались ранее; вы можете использовать один из них вместо создания нового цвета. Цвет будет показан в панели предварительного просмотра (Preview).

Если цвет вас устраивает, нажмите **OK**. Если вы хотите оставить прежний цвет, нажмите **Reset**, а затем **OK**.

5. На экране вновь появится диалоговое окно Result Color Editor. Закройте его кнопкой **Close**, и цвет кривой изменится на выбранный вами.

Глава 8

Функции меню Tools

Меню Tools (Инструменты) обеспечивает доступ к центру обновлений, настройкам NetBeans для модулей SpectraSuite и настройкам SpectraSuite.

Options

Пункт Options (Опции) позволяет устанавливать значения по умолчанию для различных параметров SpectraSuite.

Default Acquisition Parameters

Параметры спектрометра(ов), заданные в разделе **Tools | Options | SpectraSuite Settings | Default Acquisition Parameters**, будут сохраняться при остановке и перезапуске процесса сбора данных.

Template Manager

В настоящее время не используется.

Module Manager

Диспетчер модулей содержит список установленных модулей SpectraSuite. Вы можете отключать или обновлять отдельные модули.

Update Center

Центр обновлений хранит ссылку на сайт Ocean Optics, с которого можно загружать обновлённые модули SpectraSuite. Для этого необходимо оформить годовую подписку (SpectraSuite-U). Исправления ошибок доступны для всех пользователей SpectraSuite бесплатно.

Внимание!

Если компьютер не подключен к интернету, загрузите обновления на другой компьютер, скопируйте их на флэш-карту или компакт-диск, распакуйте в подходящую папку и выберите в мастере обновлений **Install Manually Downloaded Modules (.nbm Files)**.

► Порядок действий

Для загрузки обновлений:

1. Выберите пункт меню **Tools | Update Center**, чтобы вызвать мастер обновлений (Update Center Wizard).

2. Нажмите для соединения с центром обновлений. Появится второй экран мастера.

3. Нажмите для переноса всех файлов/модулей на панель **Include in Install (Включить в установку)**. Чтобы перенести лишь некоторые файлы и/или модули, выделяйте их и нажимайте . На нижней панели будут показаны размер и дата изменения выделенного файла или модуля. Информация о версии установленного и загружаемого модулей выводится в полях **Available Version (Доступная версия)** и **Installed Version (Установленная версия)**.
4. Нажмите для вывода на экран лицензионного соглашения SpectraSuite.

5. Нажмите , чтобы принять лицензионное соглашение и начать загрузку. Ход загрузки будет показан на следующем экране.

6. Нажмите для перехода к следующему экрану мастера обновлений.

7. Поставьте отметки справа и слева от файлов/модулей, которые вы хотите установить (Include и Global). Если модуль снабжен цифровой подписью, необходимо сначала

просмотреть и принять сертификат. Если модуль не подписан, то потребуется подтвердить его установку в отдельном диалоговом окне.

Для установки модуля (модулей) нажмите кнопку . Появится диалоговое окно Restart the IDE (Перезапустить интегрированную среду разработки) с вопросом, хотите ли вы выполнить перезапуск сейчас или позже. При выборе немедленного перезапуска потребуется подтвердить выход из SpectraSuite. Обновления вступят в силу при следующем запуске программы.

Глава 9

Функции меню Window

Меню Window предназначено для управления графическими окнами SpectraSuite.

Close All Documents

Этот пункт меню позволяет закрыть все окна SpectraSuite.

Documents

Этот пункт меню вызывает диалоговое окно Documents (Документы), при помощи которого можно переключаться между открытыми окнами, закрывать их, или сохранять данные.

Close Window

Используется для закрытия текущего графического окна.

Maximize/Restore Window

Разворачивание выбранного окна (панели) до заполнения всего окна программы SpectraSuite, или восстановление исходного размера. Пример развернутой панели Data Sources приведен ниже.

Maximize

Restore

Output

Пункт меню **Window | Output** позволяет открыть панель Output (Вывод) со списком сообщений о текущем состоянии SpectraSuite.

Глава 10

Временные диаграммы

SpectraSuite позволяет использовать временные диаграммы (strip charts) для слежения за процессами, исследования кинетики, а также спектрального мониторинга. Временная диаграмма показывает, как изменяется во времени выбранная величина. Такой величиной может быть:

- Интенсивность на одной длине волны (в одном элементе детектора)
- Среднее значение по диапазону длин волн
- Интеграл по заданному диапазону, вычисленный одним из трех методов.

Исходные данные могут быть получены в любом режиме измерения (пропускание, поглощение и т.д.).

Создание временных диаграмм

► Порядок действий

1. Переведите SpectraSuite в режим мониторинга, щелкнув на значке Scope ( ) панели инструментов или выбрав пункт меню **Processing | Processing Mode | Scope**.
2. Сохраните опорный и темновой спектры.
3. Выберите режим измерения (поглощение, пропускание и т. д.).
4. Нажмите на кнопку Strip Chart ( ) или выберите пункт меню **File | New | Strip Chart**. Откроется диалоговое окно **Chart Trend Settings (Параметры диаграммы)** с выбранной вкладкой Update Rate (Частота обновления).

5. Для создания временной диаграммы введите следующие данные:

Поле	Назначение
Source	Источник данных для диаграммы
Вкладка Update Rate: Update every scan Update after every: ... scans Between updates, wait at least: Update with the first available scan every: Start at the beginning of the next:	Обновлять после каждого сканирования Обновлять после каждых ... сканирований Между обновлениями ожидать не менее: Обновлять по первому доступному спектру через каждые... Начать со следующей...
Range Selection Единицы измерения в этом разделе меняются в зависимости от единиц измерения, выбранных для оси X (см. описание пункта меню X-axis Units).	Выбор типа данных, для которых требуется получить временную зависимость. One wavelength — одна длина волны (используется, например, при флуоресцентных измерениях). Выберите длину волны. Average from...to — среднее по диапазону длин волн. Выберите начальную и конечную длину волны.

Integrate over...to — площадь под кривой.
 Укажите начальную и конечную длину волны,
 затем выберите метод интегрирования:
 прямоугольников (Rectangular), Симпсона
 (Simpson's) или трапеций (Trapezoid).

6. Щелкните на вкладке Display Options (Параметры отображения).

Поле	Назначение
Trend Line Color	Выбор цвета линии
Scale Trend Value	Масштабирование графика (если требуется): Multiply by (Умножить на...) then add (затем прибавить...)

7. Щелкните на вкладке Auto-Save (Автосохранение).

Поле	Назначение
Вкладка Auto-Save:	
Enable Trend Auto-Save	Включить автосохранение
Save to directory	Папка для сохранения (ввод или выбор)
Base Filename	Базовая часть имени файла
Padding Digits	Количество цифр для автонумерации файлов (3 — сохранение сотен файлов; 4 — сохранение тысяч файлов и т. д. до 15). Например, при 3 цифрах файлы получают имена от BaseFilename001 до BaseFilename999
Preview	В настоящее время не используется
Save after every...	Сохранять каждые...
Clear Trend from Memory After Save	Удаление данных из памяти после сохранения

8. Нажмите кнопку . Откроется диалоговое окно **Strip Chart Options**, в котором будут перечислены все созданные временные диаграммы и их параметры. Используйте этот диалог для добавления, редактирования, удаления или очистки трендов.

Внимание!

Для активизации кнопок **Clear (Очистить)**, **Remove Trend (Удалить тренд)** и **Edit Trend (Редактировать тренд)** необходимо выделить один из трендов.

9. Нажмите кнопку . На экране появится созданная диаграмма. Обратите внимание, что по оси X теперь отложено время. Ось Y в приведенном ниже примере показывает коэффициент пропускания на выбранной длине волны.

10. Чтобы добавить ещё один тренд к текущему графику, нажмите .

Сохранение данных временной диаграммы

Примечание

Автоматическое сохранение описано в разделе «Создание временных диаграмм».

► Порядок действий

Для сохранения данных временной диаграммы:

1. Нажмите кнопку на панели инструментов графика. Откроется диалоговое окно **Save Trend (Сохранить тренд)**.

2. Выберите тренд, который нужно сохранить, и введите имя файла. Затем нажмите кнопку .

Управление временной диаграммой

Для управления процессами вывода данных на временные диаграммы используются следующие элементы:

Элемент управления	Действие
Возобновление всех приостановленных процессов
Приостановка всех процессов
Перезапуск процессов, имеющих фиксированную длину или длительность (см. «Создание временных диаграмм»).
Clear	Удаление всех накопленных данных
Переход к последним полученным данным

Приложение А

Руководство по проведению экспериментов

В этом приложении описан порядок проведения типовых экспериментов при помощи программного обеспечения SpectraSuite. При этом предполагается, что к компьютеру подключен спектрометр USB2000.

Если вы используете другой спектрометр Ocean Optics, то обращайтесь к руководству, приложенному к этому спектрометру.

Подготовка к экспериментам

Проверьте правильность установки SpectraSuite, а также правильность подключения спектрометра и конфигурацию оптической системы (включая источник излучения).

Если вы следовали инструкциям, приведенным в данном руководстве, то после запуска SpectraSuite спектрометр будет работать в режиме мониторинга. При отсутствии излучения на входе спектрометра в нижней части графика должна присутствовать шумовая дорожка. При освещении входа спектрометра шумовая дорожка должна подниматься тем выше, чем больше интенсивность света. Если это так, то программное обеспечение и аппаратура работают правильно.

Установленный спектрометр будет показан в списке на панели Data Sources. Для каждого спектрометра из этого списка доступна следующая информация:

- Параметры сбора данных (время интегрирования, количество усредняемых спектров, ширина окна сглаживание)
- Сохранялся ли опорный/темновой спектр
- Какой график (А, В, С и т. д.) связан с данным спектрометром (это важно, если установлено более одного спектрометра)
- Характеристики спектрометра (заводской номер, версия микропрограммы, количество элементов детектора, спектральный диапазон)

После проверки работоспособности программного обеспечения, спектрометра и оптической системы можно приступить к измерениям.

Далее подробно описываются следующие типы экспериментов:

- Измерение поглощения (absorbance)
- Измерение концентрации (concentration)
- Измерение пропускания (transmission)
- Измерение отражения (reflection)
- Измерение облученности (irradiance)
- Измерение флуоресценции (fluorescence)

Тип измерений определяет конфигурацию вашей оптической системы; от выбора опорного спектра и способа обработки данных зависит представление результатов в SpectraSuite.

Примечание

Значки **A**, **T**, **I** на панели инструментов, служащие для переключения в тот или иной измерительный режим, становятся активными только после сохранения опорного и темнового спектров. Сохранив один раз опорный и темновой спектры, вы можете выполнить любое число измерений. Однако при изменении какого-либо параметра эксперимента (время интегрирования, число усредняемых спектров, ширина окна сглаживания, диаметр световода и т. д.) необходимо записать опорный и темновой спектры заново.

Уровень сигнала

Если в спектрометр поступает слишком много света и детектор насыщается (выходной сигнал превышает 4000 отсчетов), необходимо снизить освещенность детектора. Для этого:

- Уменьшите время интегрирования
- Уменьшите интенсивность излучения, поступающего в спектрометр
- Используйте оптическое волокно меньшего диаметра
- Используйте нейтральный светофильтр с подходящей оптической плотностью

Если выходной сигнал слишком мал (спектр выглядит зашумленным), следует повысить освещенность детектора. Для этого:

- Увеличьте время интегрирования
- Используйте оптическое волокно большего диаметра
- Удалите светофильтры

Регулировать уровень сигнала удобнее в режиме мониторинга.

Получение опорного и темнового спектров

Опорный (reference) и темновой (dark) спектры должны быть сохранены до начала измерений. Если вы задержите курсор над строкой **No Pre-processor** в панели Data Sources или Data Views, то появится всплывающее окно с информацией о том, сохранялись ли эти спектры (spectrum stored — спектр сохранен, no spectrum stored — спектр не сохранен).

Опорный спектр — это спектр, полученный при включённом источнике излучения в отсутствие измеряемого образца. Щелкните на значке для сохранения опорного спектра.

Темновой спектр — это спектр, полученный при отсутствии излучения на входе спектрометра. Перекройте путь света, уберите отметку **Strobe/Lamp Enable** на панели инструментов или отключите лампу, после чего щелкните на значке для сохранения спектра.

Эксперименты по измерению поглощения

Спектры поглощения показывают, какое количество света поглощает образец на каждой длине волны. Для большинства образцов оптическая плотность линейно связана с концентрацией вещества. SpectraSuite рассчитывают спектральную оптическую плотность (A_λ) по следующей формуле:

$$A_\lambda = -\log_{10} \left(\frac{S_\lambda - D_\lambda}{R_\lambda - D_\lambda} \right)$$

где:

S_λ — аналитический (sample) сигнал на длине волны λ ,

D_λ — темновой (dark) сигнал на длине волны λ ,

R_λ — опорный (reference) сигнал на длине волны λ .

Ниже на рисунке показана стандартная оптическая конфигурация для измерения спектров поглощения: свет от источника излучения (справа) поступает через входной световод в кювету, установленную в держателе. Прошедший через образец свет передается по выходному световоду в спектрометр, соединённый с компьютером.

Оптическая плотность пропорциональна концентрации вещества, взаимодействующего с оптическим излучением (этот факт известен как закон Бера). Оптический абсорбционный метод широко применяется для количественного анализа водных и газообразных образцов.

► **Порядок действий**

Чтобы измерить поглощение при помощи SpectraSuite, сделайте следующее:

1. Переведите SpectraSuite в режим мониторинга, щелкнув на значке **S** панели инструментов или выбрав пункт меню **Processing | Processing Mode | Scope**.
2. Убедитесь, что наблюдаемый на экране спектр не выходит за пределы шкалы. При необходимости отрегулируйте уровень сигнала.
3. Выберите пункт меню **File | New | Absorbance Measurement** или щелкните на значке **A**, чтобы запустить мастер измерения поглощения (Absorbance Measurement wizard).

4. Выберите источник данных и нажмите кнопку **Next >**. Откроется вторая страница мастера.

5. Включите источник излучения и настройте параметры сбора данных так, чтобы пиковое значение (Last Peak value) было вблизи рекомендованного (Recommended peak value). Нажмите **Next >**. Откроется третья страница мастера.

6. Налейте в кювету растворитель (если это еще не сделано), чтобы получить опорный спектр. Опорный спектр необходимо сохранить до начала измерений.

Внимание!

При получении опорного спектра в кювете должен находиться только чистый растворитель, без исследуемого вещества.

7. Щелкните на значке сохранения опорного спектра ( ). Спектр будет сохранен в памяти компьютера. Чтобы сохранить его на диске, щелкните на значке сохранения ( ) или выберите пункт меню **File | Save | Save Spectra Collection**. Нажмите кнопку . Откроется четвертая страница мастера.

8. Перекройте путь света, уберите отметку **Strobe/Lamp Enable** или выключите источник оптического излучения, чтобы сохранить темновой спектр. Щелкнув на значке , вы сохраните спектр в памяти компьютера. Чтобы сохранить его на диске, щелкните на значке или выберите пункт меню **File | Save | Save Spectra Collection**.

Внимание!

По возможности не выключайте источник излучения при получении темнового спектра. Если источник все же был отключен, дайте лампе прогреться перед продолжением эксперимента. По окончании прогрева сохраните новый опорный спектр.

9. Поместите в кювету образец и убедитесь, что путь света нигде не перекрыт. Затем нажмите кнопку .

Если ранее вы уже измеряли поглощение, откроется диалоговое окно с вопросом, где отображать данные: на новой вкладке или на существующем графике.

Обратите внимание, что на экране произошли следующие изменения:

- Режим проведения экспериментов на панелях Data Sources и Data Views изменился на **Absorbance Mode**.
- Ось Y на графике теперь проградуирована в единицах оптической плотности (OD, optical density).

10. Чтобы сохранить спектр на диске, щелкните на значке Save Spectra ( ) панели инструментов.

Внимание!

При изменении какого-либо параметра эксперимента (время интегрирования, число усредняемых спектров, ширина окна сглаживания, диаметр световода и т. д.) необходимо сохранить опорный и темновой спектры заново.

Эксперименты по измерению концентрации

Чтобы определить неизвестную концентрацию вещества в растворе, необходимо сначала получить спектры нескольких растворов с различными известными концентрациями и построить калибровочную кривую. Начинать следует с раствора, имеющего самую высокую концентрацию.

Когда мастер выдаст запрос на сохранение опорного спектра, поместить в держатель кюветы с чистым растворителем.

Искомую концентрацию можно определить тремя методами:

- Применить закон Бера
- Выполнить калибровку, используя растворы с известной концентрацией
- Загрузить из файла ранее сохраненную калибровку

Мастер измерения концентрации (Concentration Measurement Setup Wizard) позволяет выбрать один из этих трёх способов.

Перед измерением концентрации необходимо измерить спектр поглощения (см. раздел «Эксперименты по измерению поглощения»).

► Порядок действий

1. Выберите пункт меню **File | New | Concentration Experiment**, чтобы запустить мастер измерения концентрации.

2. Выберите метод расчёта концентрации.

Расчёт концентрации при помощи закона Бера

- a) Выберите пункт **Beer-Lambert Law** и нажмите .

Откроется следующее окно:

Concentration Measurement Setup

wizard (Concentration Measurement Setup Wizard)

Molar Extinction ϵ : 1/c * 1/cm

Path length l : cm

Wavelength: nm

Compound Name:

Concentration Units:

< Back Next > Finish Cancel Help

- b) Введите значения, соответствующие вашему образцу. Поля **Compound Name (Наименование соединения)** и **Concentration Units (Единицы концентрации)** приведены для справки и могут быть заполнены произвольным образом. В завершение нажмите кнопку .

Калибровка по растворам с известной концентрацией

- a) Установите в держатель кювету с известной концентрацией.
- b) Выберите **Calibrate from solutions of known concentration** и нажмите .
- Откроется следующее окно:

- с) Выберите длину волны, на которой поглощение образца максимально. Можно выбрать среднее или интеграл по диапазону длин волн, что обеспечит более надежную калибровку, не зависящую от возможных флуктуаций поглощения на одной длине волны. Нажмите . Откроется следующее окно:

- d) При желании введите название (Compound Name) и единицы концентрации (Concentration Units) используемого вещества (этот шаг не является обязательным).
- e) Чтобы начать построение калибровочной кривой, введите известную концентрацию в поле **Concentration** и либо вручную введите величину оптической плотности в поле **Absorbance**, либо установите кювету в держатель и нажмите кнопку **Use Last Scan** для ее измерения. Поле **Notes** можно использовать для ввода комментариев.
- f) Нажмите кнопку **Add Sample (Добавить образец)**, чтобы сохранить введенные значения концентрации и оптической плотности. Они будут внесены в таблицу в верхней части окна и отображены на графике регрессии (Regression Plot).
- g) После ввода нескольких точек через них будет автоматически проведена линия регрессии. Ее появление говорит о том, что для калибровки использовано достаточное количество образцов.

h) Введите параметры регрессии в нижнем правом углу окна:

Order (Порядок) — введите **1** (прямая линия) или **2** (полином второй степени).

Zero Intercept (Прохождение через нуль) — если вы поставите здесь отметку, кривая регрессии будет проведена через начало координат (точку с нулевой концентрацией и нулевой оптической плотностью).

Для построения кривой первого порядка требуется не менее двух точек, а для кривой второго порядка — не менее трех. Если выбрана опция **Zero Intercept**, то необходимое количество точек уменьшается до одной и двух, соответственно.

В общем случае с увеличением числа калибровочных точек растет точность определения неизвестной концентрации. Рекомендуется использовать столько точек, сколько возможно с практической точки зрения. Перед калибровкой по многим точкам необходимо дать лампе стабилизироваться, поскольку любой дрейф в излучении будет вносить дополнительную ошибку.

Показателем «качества» регрессии служит величина **R²**, показанная внизу справа. Значение 1.0 соответствует идеальной аппроксимации; чем оно меньше, тем хуже аппроксимация. В таблице вверху окна показана также остаточная ошибка (Residual) в каждой точке: она представляет собой разность между известной концентрацией и концентрацией, рассчитанной при помощи регрессии. В идеальном случае эта разность стремится к нулю. На практике всегда наблюдаются небольшие ненулевые значения (порядка 10^{-12} и менее), связанные с погрешностью округления и не влияющие на качество измерений.

- i) Введенные точки можно удалить в любой момент, выбрав соответствующую строку в таблице вверху окна и нажав кнопку **Remove Sample (Удалить образец)**. Как только количество точек станет достаточным для расчёта регрессии, активизируется кнопка **Save Calibration...**, позволяющая сохранить на диске калибровочные данные.
- j) После ввода нужного количества точек нажмите кнопку **Finish**.

Загрузка калибровки из существующего файла

- a) Выберите **Load calibration from file**, чтобы загрузить результаты калибровки, выполненной ранее по растворам с известной концентрацией. Откроется следующее окно (вид окна приведен для Windows XP):

- b) Выберите файл, сохранённый ранее кнопкой **Save Calibration...** в мастере измерения концентрации (см. «Калибровка по растворам с известной концентрацией», шаг i). После выбора соответствующего файла наименование соединения и единицы измерения концентрации появятся в нижней части окна.
- c) Нажмите кнопку **Next >**. Открывшееся окно будет выглядеть так же, как после ручного ввода калибровочных данных:

3. После выбора одного из трех доступных методов расчёта концентрации нажмите кнопку . Откроется окно с результатом расчёта:

4. По умолчанию окно не обновляется автоматически. Для однократного обновления результата нажмите **Single Update** (например, после установки новой кюветы с веществом). Нажмите **Continuous Update**, если результаты должны обновляться максимально быстро.

Обратите внимание на следующее:

- Название соединения и единицы измерения показаны так, как вы их ввели.
- Значение концентрации будет показано чёрным цветом, если оно лежит в допустимых пределах. При расчёте по закону Ламберта-Бера допустимой считается любая концентрация, соответствующая положительной оптической плотности. Если концентрация определялась по калибровочной кривой, то чёрным будут показаны только те значения, которые лежат в диапазоне концентраций эталонных образцов. Если текущий образец не попадает в этот диапазон, концентрация будет показана **красным цветом**, что говорит о возможной неточности:

В любой момент можно нажать **Measurement Setup...** для вызова мастера измерения концентрации и изменения параметров.

Эксперименты по измерению пропускания

Коэффициент пропускания — это отношение энергии, прошедшей через образец, к энергии, прошедшей через эталон. В режиме пропускания можно также определять, сколько энергии *отразилось* от образца, т. к. при измерении пропускания и отражения используются одни и те же формулы. Пропускание выражается в процентах (%T_λ) от пропускания стандартного вещества (например, воздуха). SpectraSuite рассчитывает %T_λ (или %R_λ) по следующей формуле:

$$\%T_{\lambda} = \frac{S_{\lambda} - D_{\lambda}}{R_{\lambda} - D_{\lambda}} \times 100\%$$

где:

S_{λ} — аналитический сигнал на длине волны λ ,

D_{λ} — темновой сигнал на длине волны λ ,

R_{λ} — опорный сигнал на длине волны λ .

Ниже на рисунке показана стандартная оптическая конфигурация для измерения спектров пропускания: свет от источника излучения (справа) поступает через световод в оптический зонд, опущенный в контейнер с образцом (внизу). Прошедший через образец свет собирается зондом и по выходному световоду передается в спектрометр, соединённый с компьютером.

Измерение пропускания широко применяется для определения концентрации веществ в растворах, а также определения характеристик светофильтров, оптических покрытий и других оптических элементов (например, линз, световодов).

► Порядок действий

Чтобы измерить пропускание при помощи SpectraSuite, сделайте следующее:

1. Переведите SpectraSuite в режим мониторинга, щелкнув на значке панели инструментов или выбрав пункт меню **Processing | Processing Mode | Scope**.
2. Убедитесь, что наблюдаемый на экране спектр не выходит за пределы шкалы. При необходимости отрегулируйте уровень сигнала.
3. Налейте в кювету растворитель (если это еще не сделано), чтобы получить опорный спектр. Опорный спектр необходимо сохранить до начала измерений.

Щелкните на значке сохранения опорного спектра ( ). Спектр будет сохранен в памяти компьютера. Чтобы сохранить его на диске, щелкните на значке сохранения ( ) или выберите пункт меню **File | Save | Save Spectra Collection**.

Внимание!

При получении опорного спектра в кювете должен находиться только чистый растворитель, без исследуемого вещества.

4. Перекройте путь света, уберите отметку **Strobe/Lamp Enable** или выключите источник оптического излучения, чтобы сохранить темновой спектр. Щелкните на значке для сохранения спектра в памяти компьютера. Чтобы сохранить спектр на диске, щелкните на значке или выберите пункт меню **File | Save | Save Spectra Collection**.

Внимание!

По возможности не выключайте источник излучения при получении темнового спектра. Если источник все же был отключен, дайте лампе прогреться перед продолжением эксперимента. По окончании прогрева сохраните новый опорный спектр.

Темновой спектр должен быть сохранен до измерения пропускания.

5. Установите образец и убедитесь, что путь света нигде не перекрыт. Затем приступите к измерениям, щелкнув на значке Transmission ( ) на панели инструментов или выбрав пункт меню **Processing | Processing Mode | Transmission**.

Обратите внимание, что на экране произошли следующие изменения:

- Режим проведения экспериментов на панелях Data Sources и Data Views изменился на **Transmission Mode**.
 - Ось Y на графике теперь проградуирована в процентах пропускания.
6. Чтобы сохранить спектр на диске, щелкните на значке Save Spectra ( ) на панели инструментов или выберите пункт меню **File | Save | Save Spectra Collection**.

Внимание!

При изменении какого-либо параметра эксперимента (время интегрирования, число усредняемых спектров, ширина окна сглаживания, диаметр световода и т. д.) необходимо сохранить опорный и темновой спектры заново.

Эксперименты по измерению отражения

Отражение — это возврат излучения поверхностью без изменения длины волны. Отражение может быть *зеркальным* (угол падения равен углу отражения) или *диффузным* (угол падения не равен углу отражения)

Каждая поверхность обладает как зеркальным, так и диффузным отражением. Для одних поверхностей доминирует зеркальное отражение, для других — диффузное. Коэффициент зеркального отражения растет пропорционально степени глянца поверхности.

Отражение выражается в процентах ($\%R_\lambda$) от отражения эталонной поверхности:

$$\%T_{\lambda} = \frac{S_{\lambda} - D_{\lambda}}{R_{\lambda} - D_{\lambda}} \times 100\%$$

где:

S_{λ} — аналитический сигнал на длине волны λ ,

D_{λ} — темновой сигнал на длине волны λ ,

R_{λ} — опорный сигнал на длине волны λ .

Ниже на рисунке показана стандартная оптическая конфигурация для измерения спектров отражения: свет от источника излучения (справа) поступает через световод в оптический зонд, поднесенный к поверхности под углом 90 или 45 градусов (внизу). Отраженный от образца свет собирается зондом и по выходному световоду передается в спектрометр, соединённый с компьютером.

Измерение отражения широко применяется для определения характеристик зеркал и различных оптических покрытий. Кроме того, по отражению определяются визуальные цвета красок, пластмасс и пищевых продуктов.

► Порядок действий

Чтобы измерить отражение при помощи SpectraSuite, сделайте следующее:

1. Переведите SpectraSuite в режим мониторинга, щелкнув на значке панели инструментов Experiment mode или выбрав пункт меню **Processing | Processing Mode | Scope**.
2. Убедитесь, что наблюдаемый на экране спектр не выходит за пределы шкалы. При необходимости отрегулируйте уровень сигнала.
3. Установите в систему эталон диффузного отражения WS-1 или эталон зеркального отражения STAN-SSH, чтобы получить опорный спектр. Этот спектр необходимо сохранить до начала измерений.
4. Щелкните на значке сохранения опорного спектра ( ) или выберите пункт меню **File | Store | Store Reference Spectrum**. После этого спектр будет сохранен в памяти компьютера. Чтобы сохранить его на диске, щелкните на значке сохранения ( ) или выберите пункт меню **File | Save | Save Spectra Collection**.
5. Перекройте путь света, уберите отметку **Strobe/Lamp Enable** или выключите источник оптического излучения, чтобы сохранить темновой спектр. Щелкните на значке или выберите пункт меню **File | Store | Store Dark Spectrum** для сохранения спектра в памяти компьютера. Чтобы сохранить спектр на диске,

щелкните на значке или выберите пункт меню **File | Save | Save Spectra Collection**.

Внимание!

По возможности не выключайте источник излучения при получении темного спектра. Если источник все же был отключен, дайте лампе прогреться перед продолжением эксперимента. По окончании прогрева сохраните новый опорный спектр.

Темновой спектр должен быть сохранен до начала измерений.

- Установите образец и убедитесь, что путь света нигде не перекрыт. Затем приступите к измерениям, щелкнув на значке Transmission (**T**) на панели инструментов или выбрав пункт меню **Processing | Processing Mode | Transmission** (поскольку коэффициент отражения рассчитывается по тем же формулам, что и коэффициент пропускания).
- Если к вашему эталону отражения прилагался калибровочный файл, щелкните на значке коррекции неполного отражения (**≠1**). Откроется окно **Select Reference File (Выберите опорный файл)**.

- Выберите требуемый файл и нажмите кнопку **Apply (Применить)**.

На панели **Reference Information** появится информация об используемом эталоне отражения.

9. Нажмите кнопку , чтобы применить коррекцию к полученному ранее спектру.
10. Чтобы сохранить спектр на диске, щелкните на значке Save Spectra ( ) на панели инструментов или выберите пункт меню **File | Save | Save Spectra Collection**.

Внимание!

При изменении какого-либо параметра эксперимента (время интегрирования, число усредняемых спектров, ширина окна сглаживания, диаметр световода и т. д.) необходимо сохранить опорный и темновой спектры заново.

Эксперименты по измерению облученности

Облученность (или энергетическая освещенность) — это количество световой энергии, падающей в единицу времени на единицу площади поверхности. Абсолютная облученность измеряется в энергетических единицах и не привязана к какому-либо эталону. Относительная облученность — это отношение облученности от исследуемого источника к облученности от лампы, спектр которой близок к спектру чёрного тела (нормированное на 1 в максимуме спектрального распределения). SpectraSuite рассчитывает относительную облученность по следующей формуле:

$$I_{\lambda} = B_{\lambda} \left(\frac{S_{\lambda} - D_{\lambda}}{R_{\lambda} - D_{\lambda}} \right)$$

где:

B_{λ} — относительная энергия эталона, рассчитанная по его цветовой температуре,

S_{λ} — аналитический сигнал на длине волны λ ,

D_{λ} — темновой сигнал на длине волны λ ,

R_{λ} — опорный сигнал на длине волны λ .

Ниже на рисунке показана стандартная оптическая конфигурация для измерения относительной облученности: опорный спектр создается лампой с известной яркостной температурой, например, LS-1 или LS-1-LL (внизу справа). Свет от исследуемого источника (внизу слева) собирается косинусным корректором CC-3 или интегрирующей сферой FOIS и по световоду передается в спектрометр, соединённый с компьютером. Компьютер рассчитывает отношение измеренного и эталонного спектров, устранив влияние зависящего от длины волны отклика спектрометра.

Описанные измерения широко используются для определения характеристик светодиодов, ламп накаливания и других источников излучения (включая Солнце), а также для изучения флуоресценции (свечения веществ, возбуждаемого излучением с более короткими длинами волн).

Абсолютная облученность

При измерении абсолютной облученности не требуется сохранять опорный спектр (хотя такая возможность есть). Необходимо лишь сохранить темновой спектр и иметь калибровочный файл для своей измерительной системы. Оборудование для калибровки можно приобрести у Ocean Optics. Для получения подробной информации свяжитесь с техническими специалистами компании.

Значок на панели инструментов или пункт меню **File | New | Absolute Irradiance Measurement** открывает окно мастера абсолютной облученности (Absolute Irradiance Wizard), который поможет подготовиться к измерениям. Если выбрать пункт меню **File | New | Absolute Irradiance Graph**, то на экране появится график абсолютной облученности в режиме мониторинга и вам придется выполнить подготовительные шаги самостоятельно. В приведенном ниже описании предполагается, что вы работаете с мастером.

► Порядок действий

1. Выберите пункт меню **File | New | Absolute Irradiance Measurement** или щелкните на значке , чтобы создать новый график абсолютной облученности.

Откроется первая страница мастера.

2. Выберите источник данных (новый или существующий процесс) и нажмите . Откроется вторая страница мастера.

3. Если у вас более одного спектрометра, выделите тот, который нужно использовать. Затем нажмите . Откроется третья страница мастера.

4. Выберите способ калибровки:
- Get Irradiance Calibration From File (Загрузить калибровку из файла)
 - New Calibration (Новая калибровка)

Загрузка калибровочного файла

- а) После выбора пункта **Get Irradiance Calibration from File** перейдите в папку с калибровочными файлами.

b) Выберите нужный файл и нажмите .

- c) Если используется интегрирующая сфера, отметьте пункт **Use Integrating Sphere**.
- d) Если известна площадь сбора излучения, отметьте пункт **Collection Area** и введите ее значение.
- e) Если излучение собирается непосредственно торцом световода, отметьте пункт **Fiber Diameter** и введите диаметр волокна.
- f) Если используется косинусный корректор Ocean Optics (на конце световода или непосредственно на входе спектрометра), отметьте пункт **Fiber Diameter**, но вместо диаметра волокна введите одно из следующих значений:

Модель корректора	Условный диаметр
CC-3	3900 мкм
CC-3-UV	3900 мкм
CC-3-DA	7140 мкм

- g) Нажмите кнопку . Откроется страница настройки параметров считывания (**Set Acquisition Parameters**).

- h. Установите время интегрирования (**Integration time**) таким, чтобы последняя зарегистрированная пиковая амплитуда (**Last peak value**) была близка к рекомендованной (**Recommended peak value**). Для уменьшения шумов можно увеличить число усредняемых спектров (**Scans to average**) и ширину окна сглаживания (**Boxcar width**), контролируя при этом пиковую амплитуду. Затем нажмите . Откроется страница сохранения темного спектра.

- i) Перекройте путь света или уберите отметку **Strobe/Lamp Enable**, после чего щелкните на значке для сохранения темного спектра. Этот спектр будет показан справа на контрольном графике. Нажмите кнопку .

Новая калибровка

- a) После выбора варианта **New Calibration (Новая калибровка)** открывается страница настройки параметров считывания (Set Acquisition Parameters).

- b) Введите необходимые параметры (см. пункт h выше) и нажмите кнопку . Откроется страница сохранения эталонного спектра (Store Reference Spectrum).

- c) Щелкните на для сохранения эталонного спектра и нажмите кнопку . Откроется страница сохранения темного спектра (Store Dark Spectrum).

- d) Перекройте путь света или уберите отметку **Strobe/Lamp Enable**, после чего щелкните на значке для сохранения темного спектра. Этот спектр будет показан справа на контрольном графике. Нажмите кнопку . Откроется страница выбора файла с параметрами лампы (Lamp File).

- е) Введите или выберите имя файла с калибровочными данными лампы. Откроется последняя страница мастера калибровки. Обратите внимание, что на графике **Spectrometer Calibration Preview** калибровочная кривая лампы (жёлтого цвета) наложена на калибровочную кривую спектрометра (красного цвета). При правильно выполненной калибровке эти кривые должны совпадать.

- g) Нажмите кнопку **Finish**. Откроется калиброванный график абсолютной облученности.

Относительная облученность

Относительная облученность — это отношение облученности от исследуемого источника к облученности от лампы, спектр которой близок к спектру чёрного тела. Измерения относительной облученности широко используется для определения характеристик светодиодов, ламп накаливания и других источников излучения (включая Солнце), а также для изучения флуоресценции (свечения веществ, возбуждаемого излучением с более короткими длинами волн). Этот тип измерений требует сохранения опорного и темнового спектров.

► Порядок действий

1. Переведите SpectraSuite в режим мониторинга, щелкнув на значке панели инструментов или выбрав пункт меню **Processing | Processing Mode | Scope**.
2. Убедитесь, что наблюдаемый на экране спектр не выходит за пределы шкалы. При необходимости отрегулируйте уровень сигнала.
3. Подключите к системе источник оптического излучения, спектр которого близок к спектру чёрного тела (например, LS-1).
4. Щелкните на значке сохранения опорного спектра ( ) или выберите пункт меню **File | Store | Store Reference Spectrum**. После этого спектр будет сохранен в памяти компьютера. Чтобы сохранить его на диске, щелкните на значке сохранения ( ) или выберите пункт меню **File | Save | Save Spectra Collection**.
5. Перекройте путь света, уберите отметку **Strobe/Lamp Enable** или выключите источник оптического излучения, чтобы сохранить темновой спектр. Щелкните на значке или выберите пункт меню **File | Store | Store Dark Spectrum** для сохранения спектра в памяти компьютера. Чтобы сохранить спектр на диске, щелкните на значке или выберите пункт меню **File | Save | Save Spectra Collection**.

Внимание!

По возможности не выключайте источник излучения при получении темнового спектра. Если источник все же был отключен, дайте лампе прогреться перед продолжением эксперимента. По окончании прогрева сохраните новый опорный спектр.

Темновой спектр должен быть сохранен до начала измерений.

6. Поднесите световод к исследуемому источнику. Затем щелкните на значке . Откроется график относительной облученности.

Флуоресценция

Измерение флуоресценции является разновидностью измерений относительной облученности, при котором измеряется свечение вещества, возбужденного излучением с более короткими длинами волн. Аналитические методы, основанные на измерении флуоресценции, обладают такими достоинствами, как высокая чувствительность, быстрый отклик (интенсивность может меняться на временах порядка пикосекунд) и безопасность (образец не повреждается, отсутствуют вредные сопутствующие продукты). Типичная схема измерения флуоресценции приведена ниже. Чтобы возбуждающее излучение не мешало регистрации сигнала флуоресценции, необходимо использовать специальный фильтр или располагать световоды лампы и спектрометра под углом 90° друг к другу.

Флуоресценция может измеряться в следующих режимах:

- Режим мониторинга (Score mode): этот режим наиболее удобен для настройки спектрометра. Сигнал, показанный на графике, представляет собой оцифрованное напряжение с выхода детектора. Форма сигнала определяется не только спектром излучения, но и спектрами отражения решётки и зеркал спектрометра, а также спектральной чувствительностью детектора.
- Режим относительной облученности: это предпочтительный режим для проведения измерений. Спектры, полученные в этом режиме, характеризуют исследуемый источник по отношению к опорному источнику. Вы можете действовать двумя способами: перевести SpectraSuite в режим относительной облученности и использовать калибровочные файлы, сгенерированные при заводской калибровке, либо выполнить радиометрическую калибровку самостоятельно при помощи чёрного тела с известной яркостной температурой. Порядок действий описан в разделе «*Относительная облученность*».

Ниже в качестве примера приведены спектры флуоресценции, полученные в режиме мониторинга (верхний спектр) и в режиме измерения относительной облученности (нижний спектр):

PVK sample measured with the USB2000-FL spectrometer, PX2 pulsed xenon light source, CUV-ALL-4-Way cuvette holder, 1000 um illumination fiber, 600 um detection fiber
Sample in disposable cuvette

PVK sample measured with the USB2000-FL spectrometer, PX2 pulsed xenon light source, CUV-ALL-4-Way cuvette holder, 1000 um illumination fiber, 600 um detection fiber (LS-1 tungsten halogen light source used for reference) Sample in disposable cuvette

Внимание!

Если вы используете спектрометр со стробируемым (gated) детектором (USB2000-FLG), то начать измерение флуоресценции можно через пункт меню **File | New | New Gated Fluorescence Measurement**.

Если вы используете эмиссионный спектрофлуориметр Curie UV-VIS (заводской номер начинается с «CUR»), то начать измерение флуоресценции можно через пункт меню **File | New | New Curie Fluorescence Measurement**.

Советы по регулировке уровня сигнала

Если получаемый сигнал:	Вы можете:	Для этого:
Насыщает детектор спектрометра (максимумы выходят за пределы динамического диапазона)	Уменьшить экспозицию в режиме мониторинга	Уменьшите время интегрирования, или установите линейные перестраиваемые фильтры (LVF)
Имеет слишком низкий уровень (зашумлён)	Увеличить экспозицию в режиме мониторинга	Увеличьте время интегрирования или удалите перестраиваемые фильтры

Эксперименты по измерению цвета

SpectraSuite позволяет проводить фотометрические измерения (в люменах или люксах) на основе стандартной кривой видности CIE. Измерение цвета возможно в любой цветовой системе, кроме RGB.

► Порядок действий

1. Щелкните на значке панели инструментов или выберите пункт меню **File | New | Color Measurement**.

Откроется диалоговое окно **New Color Measurement (Новое измерение цвета)**.

2. Выберите источник данных — новый (New) или существующий (Existing) измерительный процесс и нажмите кнопку . На экране появится первая страница мастера цветных измерений.

3. Выберите источник спектров и нажмите . Откроется вторая страница мастера.

4. Установите время интегрирования (**Integration time**) таким, чтобы последняя зарегистрированная пиковая амплитуда (**Last peak value**) была близка к рекомендованной (**Recommended peak value**). Критерием служит изменение цвета **Last peak value** с розового на чёрный. Для уменьшения шумов можно увеличить число усредняемых спектров (**Scans to average**) и ширину окна сглаживания (**Boxcar width**), контролируя при этом пиковую амплитуду. Затем нажмите . Откроется третья страница мастера.

Если вы проводите калибровку для измерения абсолютной облученности, переходите к шагу 6. В остальных случаях продолжайте с шага 5.

5. Поставьте отметку **Strobe/Lamp Enable** или физически включите лампу. Когда она прогреется, щелкните на значке , чтобы сохранить опорный спектр. Этот спектр будет показан на контрольном графике справа.

6. Нажмите кнопку . Откроется четвертая страница мастера.

7. Перекройте путь света, уберите отметку **Strobe/Lamp Enable** или выключите лампу. Затем щелкните на значке , чтобы сохранить темновой спектр. Этот спектр будет показан на контрольном графике справа.

8. Нажмите кнопку . Откроется следующее диалоговое окно:

Элементы этого окна описаны в таблице ниже.

Элемент	Описание
Mode	<p>Выбора режима измерения (испускание или отражение). Первоначально выбран тот режим, который вы указали на шаге 1. Здесь его можно изменить.</p> <p>Reflective (Отражение) Измерение цвета поверхности при освещении одним из стандартных источников CIE.</p> <p>Emissive (Испускание) Измерение цветности излучения, испускаемого светодиодом или лампой (источником излучения).</p>
Observer	<p>Выбор стандартного наблюдателя (угла обзора):</p> <p>2° (CIE 1931) – фотопический (дневное зрение)</p> <p>10° (CIE 1964) – скотопический (ночное зрение)</p>
Illuminant	<p>Выбор стандартного осветителя для режима отражения. Это идеальный источник, стандартизованный CIE; он не имеет ничего общего с реальной лампой, используемой для измерений.</p>
<input type="button" value="Load Illuminant"/>	<p>В настоящее время не используется.</p>

9. Описание выбранных параметров появляется на вкладке Details в правой части окна. В поле **Show details for** можно выбрать описание наблюдателя или источника света. Ниже приведен пример окна с описанием наблюдателя.

10. На вкладке Graph можно увидеть спектральную кривую, характеризующую наблюдателя или источник света. Ниже приведен пример графика для источника.

11. Нажмите кнопку . Цветовые характеристики излучения будут выведены на главный экран SpectraSuite, как показано ниже.

Совет

Чтобы одновременно закрыть все три панели с цветовой информацией (**Graph**, **Color Values** и **Chromaticity Diagram**), выделите на панели **Data Sources** процесс, являющийся источником данных для цветового измерения, щелкните на нем правой кнопкой и выберите пункт **Terminate (Завершить)**.

Элементы управления на панели Color Values

После отображения результатов цветового измерения можно воспользоваться дополнительными элементами управления, находящимися на панели Color Values (Цветовые величины).

Элемент управления	Назначение
Редактирование цветовых настроек. См. описание пункта меню « <i>Edit Color Settings</i> ».
Копирование спектральных данных в буфер обмена.
Log	Выбор и открытие файла журнала.
Auto-save	Сохранение цветовых данных в файл. Пример такого файла, открытого в Notepad, приведен ниже. См. описание пункта меню « <i>Exporting Processed Data</i> ».

Source	Observer	Illuminant	Color Mode	X	Y	Z	x	y	z	CRI Ra	CRI
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4849	0.3710	0.1441	84.5	(2096K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4849	0.3710	0.1441	84.5	(2096K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4891	0.3739	0.1371	85.9	(2075K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4891	0.3739	0.1371	85.9	(2075K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4885	0.3720	0.1396	83.3	(2068K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4885	0.3720	0.1396	83.3	(2068K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4859	0.3755	0.1387	84.9	(2119K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4859	0.3755	0.1387	84.9	(2119K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4854	0.3749	0.1397	88.9	(2119K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4854	0.3749	0.1397	88.9	(2119K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4830	0.3721	0.1449	86.2	(2124K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4830	0.3721	0.1449	86.2	(2124K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4842	0.3703	0.1456	85.6	(2098K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4842	0.3703	0.1456	85.6	(2098K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4887	0.3721	0.1392	85.6	(2066K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4887	0.3721	0.1392	85.6	(2066K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4847	0.3703	0.1449	84.1	(2093K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4847	0.3703	0.1449	84.1	(2093K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4886	0.3760	0.1354	87.0	(2095K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4886	0.3760	0.1354	87.0	(2095K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4843	0.3725	0.1431	85.9	(2113K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4843	0.3725	0.1431	85.9	(2113K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4843	0.3720	0.1437	87.7	(2110K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4843	0.3720	0.1437	87.7	(2110K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4806	0.3699	0.1494	84.2	(2132K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4806	0.3699	0.1494	84.2	(2132K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4812	0.3724	0.1464	82.9	(2144K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4812	0.3724	0.1464	82.9	(2144K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4856	0.3688	0.1456	83.4	(2073K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4856	0.3688	0.1456	83.4	(2073K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4859	0.3731	0.1410	84.9	(2101K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4859	0.3731	0.1410	84.9	(2101K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4866	0.3731	0.1403	83.5	(2094K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4866	0.3731	0.1403	83.5	(2094K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4918	0.3691	0.1391	85.0	(2016K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4918	0.3691	0.1391	85.0	(2016K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4843	0.3747	0.1410	86.8	(2130K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4843	0.3747	0.1410	86.8	(2130K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4790	0.3748	0.1461	84.7	(2186K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4790	0.3748	0.1461	84.7	(2186K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4841	0.3740	0.1419	85.9	(2127K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4841	0.3740	0.1419	85.9	(2127K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4854	0.3704	0.1442	83.8	(2087K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4854	0.3704	0.1442	83.8	(2087K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4864	0.3761	0.1375	85.1	(2118K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4864	0.3761	0.1375	85.1	(2118K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4851	0.3750	0.1400	88.1	(2123K)
USB2G6142	2-degree	A	Emissive	-0.00	-0.00	-0.00	0.4851	0.3750	0.1400	88.1	(2123K)

Приложение В

Возможные проблемы и их устранение

В приведенной ниже таблице перечислены типичные проблемы, возникающие при работе со SpectraSuite, и способы их устранения.

Проблема	Возможные причины	Рекомендуемое решение
SpectraSuite запускается, но не показывает спектрометр.	<ol style="list-style-type: none">1. Спектрометр не подключён к компьютеру.2. SpectraSuite не поддерживает подключённый спектрометр.3. Устройство не обнаружено или не идентифицировано.	<ol style="list-style-type: none">1. Вставить один конец USB-кабеля в спектрометр, а другой — в порт USB вашего компьютера.2. См. список поддерживаемых спектрометров, приведенный в начале главы 1.3. Отсоедините все лампы и модули, которые могут быть присоединены к спектрометру. Отсоедините и вновь подсоедините спектрометр к компьютеру; подождите 10 секунд и сделайте то же самое ещё раз. Если спектрометр обнаружен, повторите процедуру, но уже с подключенной лампой или модулем. Это может выявить проблему с устройством. <p>В Windows и Linux возможна ситуация, когда модель спектрометра новее, чем файл драйвера, который информирует операционную систему о спектрометре. Центр обновлений SpectraSuite пока не обновляет эти системные файлы, поэтому может потребоваться переустановка с использованием самого нового инсталлятора SpectraSuite, содержащего нужные файлы.</p>

<p>При подключении спектрометра USB2000 загрузка SpectraSuite останавливается на этапе заставки.</p>	<p>Версия микропрограммы USB2000 старше, чем 2.41.0.</p>	<p>Используя USB-программатор (USB Programmer), доступный на сайте Ocean Optics, проверьте версию и при необходимости обновите микропрограмму.</p>
<p>Некоторые пункты меню и значки на панелях инструментов неактивны (затенены).</p>	<p>Выполнение некоторых команд возможно только в определенных условиях.</p>	<p>Для изменения параметров сбора данных, сохранения темного/опорного спектра или отображения временной диаграммы требуется указать измерительный процесс, к которому относится данная операция. Если выполняющихся процессов нет, запустите как минимум один. Если одновременно выполняется несколько измерений, попробуйте щелкнуть на соответствующей кривой на графике. Попробуйте также раскрыть дерево параметров под значком спектрометра и посмотрите, как элементы управления реагируют на выбор различных пунктов. Пощелкайте правой кнопкой на этих пунктах, чтобы увидеть список возможных действий.</p> <p>Перед вычитанием темного спектра требуется его сохранение.</p> <p>Для перехода в режимы А, Т, R и I (относительная облученность) необходимо сохранить темновой и опорный спектры.</p> <p>Для перехода в режим абсолютной облученности (I) необходимо выполнить калибровку и сохранить темновой спектр.</p> <p>Для измерения энергии, мощности, числа фотонов и любых фотометрических величин необходимо перейти в режим абсолютной</p>

<p>Отображение спектра на графике заняло гораздо больше времени, чем ожидалось.</p>	<p>Управляющий компьютер запросил изменение параметров сбора данных (время интегрирования, включение/выключение источника излучения и т. д.)</p>	<p>облученности.</p> <p>SpectraSuite отбрасывает спектр, полученный сразу после изменения параметров, поэтому однократное считывание занимает в два раза больше времени, чем обычно. Это сделано для повышения стабильности.</p> <p>По той же причине при внешнем запуске может потребоваться второй синхроимпульс. При подготовке к однократному запуску или запуску по внешнему сигналу рекомендуется сначала выполнить все настройки в режиме непрерывного запуска (Normal).</p> <p>Если SpectraSuite циклически считывает спектры с разными параметрами с одного спектрометра, отбрасывание первого спектра после смены параметров может выполняться каждый раз.</p> <p>Кроме того, время интегрирования умножается на количество спектров, подлежащих усреднению.</p>
<p>Недоступен режим измерения абсолютной облученности</p>	<p>Не выполнена калибровка спектрометра и/или не сохранен темновой спектр.</p>	<p>Выберите пункт меню File New New Absolute Irradiance Measurement для вызова мастера, который поможет выполнить необходимые действия. Для измерения абсолютной облученности требуется загрузить калибровочный файл с диска или откалибровать спектрометр по эталонному источнику, а также сохранить темновой спектр.</p> <p>Чаще всего абсолютную облученность не удастся измерить из-за того, что</p>

		после калибровки не был сохранен темновой спектр.
Вместо спектральной кривой на графике присутствует хаотический набор точек.	Известная проблема с отображением графиков видеокартами ATI в Microsoft Windows.	Щелкните правой кнопкой на рабочем столе, выберите Properties (Свойства), вкладку Settings (Настройки) и нажмите кнопку Advanced (Дополнительно). В открывшемся окне должна присутствовать вкладка Troubleshoot, позволяющая изменять степень аппаратного ускорения (Hardware Acceleration). Установите ускорение примерно на половине от максимального и нажмите Apply. Проблема должна решиться сразу же. Если этого не произошло, попробуйте сделать ускорение еще меньше.