OES

# Allgemeine Informationen

OES: optical emission spectroscopy

Spektraler Übergang bezeichnet die Wellenlänge λ, welche nach Anregung von Molekülen beim Fall in den stabilen Zustand emittiert wird. Also lässt die Auswertung aller Peaks eines Spektrogramms Rückschlüsse auf das Gasgemisch der verschiedenen Moleküle zu.

Da eine Auswertung der absoluten aufgenommenen Werte nicht sinnvoll/möglich ist, wird ein Referenzpeak (Wasserstoff/Methan) genutzt, um eine Konzentration eines anderen Moleküls zu bestimmen.

Einstieg in die aktuelle Version der Python über die Datei: oes-spa.py

## Schematische Darstellung der Software

Andor Software

* Steuert Spektrometer 🡪 nimmt indirekt Spektren auf (oes)
* Mittels Parameter konfigurierbar bzw. Spektren einstellbar

Spexhex

* In VB programmiert
* Auswertung der Stickstoff Spektren
* Spezial-Software, da nur bestimmte Parameter eingestellt werden können und nur Stickstoff ausgewertet werden kann

Daten/Spektren

Parameter

Oes-spectra-analysis

* Python Programmierung
* Auswertung der Bor Spektren
* Erweiterung der Möglichkeiten von Spexhex um Bor-Auswertung

Andor Messgerät

* Parametereinstellung der Messung
* Durchführung der Spektroskopie

Daten/Spektren

Parameter

Daten

Spektren

Dateisystem

## Bisherige Nutzung

1. Spexhex
   1. Aufnahme der Spektren
      1. Wellenlängenkalibrierung
      2. Speicherung in .spk-Datei
      3. Pixel zu Intensität
      4. Pixel zu Messgeräte-Wellenlänge
      5. Pixel zu korrigierter Wellenlänge
   2. Auswertung der Spektren
   3. Erstellung einer .dat-Datei
      1. Zeitpunkt der Spektrumsaufnahme
      2. Kennwert des Spektrums (z.B. CN-Wert)
      3. Wissenschaftliche Analyse erfolgt anhand der .dat-Datei
2. OES-Analysis (Python-Software)
   1. Untersuchung des Bor-Peaks
   2. Erstellung einer .dat-Datei (s.o.)

## Derzeitige Nutzer

* Peter Knittel
* Philipp Reinke
* Christoph Schreyvogel
* Julia Langer
* Arne Götze
* Volker Cimalla

# Lastenheft (LH)

* Primäre Parameter
  + Wellenlänge
  + Grating
  + Step and Glue
  + Port (zukünftig: 1/2/1 u. 2)
  + Shutter (zukünftig)
* Sekundäre Parameter
  + Belichtungszeit (Exposure time)
  + Anzahl der Akkumulierungen
  + Readout Mode (default: FVB)
  + Vertical/horizontal Pixel Shift (default values)

## Use-Cases

### Paramterierung

* Speicherort?
* Dateiformat?
  + .ini
  + .json

### Messgerätesteuerung

* Unterschiedliche Andor Messgeräte mit verschiedenen Parametersätzen (Anzahl der möglichen Optionen für einen Parameter), z.B. verfügbare Gitter/Ports
* Zugriff nur über Remote-PC möglich, da das Messgerät keine direkte Netzwerkverbindung hat und Datenaustausch nur über USB-Kabel möglich ist

1. Einstellen von Parametern
   1. Auslesen der aktuell eingestellten Parameter
   2. Auslesen des Parametersatzes
   3. Bereitstellen eines Interfaces zum Einstellen möglicher Optionen
   4. Schreiben der Parameter
   5. Standard-Konfiguration(.conf-Datei?)
   6. Primäre und sekundäre Parameter (s.o.)
   7. 🡪 Lese-/Schreibzugriff
2. Ausführen der Spektroskopie
   1. Anzahl/Wiederholrate/Modus (Stick and Glue) /Dauer einstellen
   2. Messung triggern
   3. Messergebnisse speichern/bereitstellen
      1. Dateiformat
      2. Definition der Dateistruktur
      3. Festlegung des Speicherpfades
   4. Machbarkeitsstudie zu Programmierung der Andor Software (Schritt 1)
   5. Übertragung in Analysesoftware (Schritt 2)

### Auswertung/Analyse

1. Auswerten von Peaks
   1. Einstellen des Peaks (N, Bor, P, MH4)
   2. Laden des charakteristischen Spektrums des Peaks
      1. Definierter Speicherort?
   3. Faltung des aufgenommenen und des Referenzspektrums zur Kalibrierung
   4. Berechnung von Kennwerten (z.B. CN-Wert) und Ausgabe
      1. Welche Kennwerte können berechnet werden
      2. Welche Kennwerte sollen berechnet werden
      3. Wo wird das festgelegt (gleiche Datei/Speicherort wie bei charakteristischen Spektrum
2. Darstellung von Spektren
   1. Rohes Spektrum (Raw Spectrum)
      1. X-Achse: Pixel (in Abhängigkeit des Gratings)
      2. Y-Achse: Intensität
      3. Berechnen und Einfügen einer Basislinie (Baseline)
   2. Bearbeitetes Spektrum (Processed Spectrum)
      1. X-Achse: Wellenlänge (in Abhängigkeit der zentralen Wellenlänge (Central Wavelength))
      2. Y-Achse: Intensität
   3. Laden von Dateien
      1. Per Browsen
      2. Per Drag&Drop
      3. Anzeige des Speicherpfades
      4. Dateiformate
         1. Spk
         2. Csv (gespeichertes Spektrum; csv zu Unterschied zu Raw Spektrum)
         3. Binary file von der Andor SW (sekundär)
   4. Interaktives Design
      1. Zoom
      2. Einstellen der Achsen
      3. Speichern

# Programmcode von oes-spa.py

(Unstrukturierte Dokumentation)

* openFile
  + AnalysisWindow
    - \_\_init\_\_
      * leer initialisiert W
    - dropEvent
      * Dropped File W
      * getValues R
      * getHead R
    - file\_open
      * opened File W
      * getValues R
      * getHead R
  + BatchAnalysis
    - multi\_calc
      * selected File W
      * getValues R
      * getHead R

## Name Convention

### Klassen

* Jede Klasse ist in einer eigenen Datei definiert
* Datei und Klasse haben den gleichen Namen
* Methoden-Bezeichnungen
  + camelCase, wenn die Methode vom Qt-Backend erkennt werden muss, z.B. Events wie dragEnterEvent
  + snakeCase, wenn die Methode unabhängig com Qt-Backend ist, z.B. file\_open

## Testen der Anwendung

Schwierigkeiten:

* Testen von Events?!

### PICT

Pairwise Independent Combinatorial Tool 🡪 Reduziert die ausgeführten Tests und behält trotzdem eine gute Testabdeckung bei.

### Test der GUI mit QtTest

Bessere Testbarkeit von GUI-Elementen anstatt mit python.unittest

### Test mit python.unittest

* Verwendung der Bibliothek unittest.
* How to: <https://www.youtube.com/watch?v=1Lfv5tUGsn8>

Ausführen von Tests:

* Öffnen der Anaconda Promt
* Navigation zu dem Ordner mit Modulen und Tests
* Eingabe: python -m unittest [name]
  + -m 🡪 instruct the python module to run as a script
  + [name] (optional) 🡪 run a specific test, if left blank it will run all tests in that directory

# Weitere Beschreibungen und Abhängigkeiten

## Central Wavelength

* Parametereinstellung in der Andor SW bei der Aufnahme eines Spektrums
* Unabhängig vom Fitting/Grating
* Soll als Parameter mit in die Spk Dateien aufgenommen werden
* Derzeit: Triggered ein Redraw bei Änderung+Enter
* Weitere Verwendung:
  + Auslesen der central Wavelength
    - Berechnen der minimalen und maximalen Wellenlänge in Abhängigkeit des Gratings
      * Mögliche Fittings auswählen, wenn die gesuchten und die zu referenzierenden Peaks innerhalb der berechneten Wellenlängen vorhanden sind