

分光器の波長校正

以下はどのように分光器の波長を校正するかについて解説しています。各分光器はオーシャンオプティクスから出荷される前に校正されておりませんが、全ての分光器にとって波長は時間や環境条件の作用につれて僅かにドリフトします。

ピクセル番号と波長との関係が三次の多項式である事を示す下記方程式を解明している事になります...

$$\rho = l + C_1 p + C_2 p^2 + C_3 p^3$$

...ここで ρ はピクセル p の波長、 l はピクセル 0 の波長、 C_1 は第一係数 (nm/ピクセル)、 C_2 は第二係数 (nm/ピクセル²)、および C_3 は第三係数 (nm/ピクセル³) をそれぞれ示しています。これから l および 3 つの C を算出します。

準備

分光器の波長を再校正するために下記が必要となります：

- ◆ スペクトル輝線を生じる光源。オーシャンオプティクスの HG-1 水銀アルゴンランプはこのために理想的です。HG-1 をお持ちでなければ、分光器の波長範囲でいくつか(少なくとも 4-6)のスペクトル輝線を生じるスペクトル輝線光源が必要となります。
- ◆ 波長校正を行う分光器。
- ◆ 光ファイバ(内蔵スリットのない分光器には 50 μ m ファイバが最適です)。
- ◆ スプレッドシートプログラム(例えば Excel や Quattro Pro)または三次線形回帰を実行する計算機のいずれか。Microsoft Excel をご使用の場合は、**ツール | アドイン** を選択し、**分析ツール** と **分析ツール-VBA** をチェックして下さい。

分光器の波長校正

1. 001Base32 をスコープモードに設定した後、光源のスペクトルを取り込んで下さい。縦軸スケールから外れずに画面内にいくつかのピークが出るまで露光時間--または A/D カードの変換周波数--を調整して下さい。
2. ピークのうちのひとつにカーソルを動かし、カーソルが最大強度のポイントに位置するように慎重に移動させて下さい。ステータスバー(グラフの下にあります)に表示されたピクセル番号を記録して下さい。スペクトル内の全てのピークに対してこのステップを繰り返して下さい。
3. スプレッドシートを使い、次ページに示すような表を作って下さい。
 - ◆ 最初の列に、使用されたスペクトル輝線の正確な、もしくは真の波長を入力して下さい。ほとんどの校正輝線光源には波長校正シートが付属しています。お持ちの光源に波長校正シートがなければ、その輝線(それらが純元素によって生じられているとみなして)の波長はおそらく化学または物理の教科書か、*CRC Handbook of Chemistry and Physics* のようなハンドブックで見つける事が出来ます。
 - ◆ このワークシートの二列目には、観測したピクセル番号を入力して下さい。
 - ◆ 三列目には、ピクセル番号の二乗を計算して下さい。
 - ◆ 四列目には、ピクセル番号の三乗を計算して下さい。

独立変数	従属変数			回帰出力から計算される値	
真の波長 (nm)	ピクセル#	ピクセル# ²	ピクセル# ³	予測波長	差異
253.65	175	30625	5359375	253.54	0.11
296.73	296	87616	25934336	296.72	0.01
302.15	312	97344	30371328	302.40	-0.25
313.16	342	116964	40001688	313.03	0.13
334.15	402	161604	64964808	334.21	-0.06
365.02	490	240100	117649000	365.07	-0.05
404.66	604	364816	220348864	404.68	-0.02
407.78	613	375769	230346397	407.79	-0.01
435.84	694	481636	334255384	435.66	0.18
546.07	1022	1044484	1067462648	546.11	-0.04
576.96	1116	1245456	1389928896	577.02	-0.06
579.07	1122	1258884	1412467848	578.98	0.09
696.54	1491	2223081	3314613771	696.69	-0.15
706.72	1523	2319529	3532642667	706.62	0.10
727.29	1590	2528100	4019679000	727.26	0.03
738.40	1627	2647129	4306878883	738.57	-0.17
751.47	1669	2785561	4649101309	751.32	0.15

- これで波長校正係数の算出は実行可能です。スプレッドシートプログラムで線形回帰を実行する機能を見つけて下さい。
 --Quattro Pro をご使用の場合、**Tools | Advanced Math** を見て下さい。
 --Excel をご使用の場合、**ツール | 分析ツール** を見て下さい。
- 従属変数(Y)として真の波長の列を選択して下さい。独立変数(X)としてピクセル番号、ピクセル番号の二乗、およびピクセル番号の三乗を選択して下さい。回帰を実行後、下記のような出力が得られます。

回帰統計

重相関 R	0.999999775
重決定 R2	0.999999551
補正 R2	0.999999447
標準誤差	0.132805509
観測数	17

	係数	標準誤差	
切片	190.3772211	0.244196197	First coefficient
X 値 1	0.363159511	0.001077276	
X 値 2	-1.24634E-05	1.31845E-06	
X 値 3	-2.24751E-09	4.70516E-10	Second coefficient
			Third coefficient

- 重要な数は上図で示されています。第一(First Coefficient)、第二(Second Coefficient)、および第三係数(Third Coefficient)と同様に切片(Intercept)も記録する必要があります。さらに重決定 R2 の値を見て下さい。この値は極めて 1 に近い値でなければなりません。もしそうでなければ、恐らくそれは波長の割り当てがどこかで間違っているでしょう。
- 001Base32 内で、メニューから **Spectrometer | Configure** を選択し、波長係数を更新するために **Wavelength Calibration** のページを選んで下さい。
- 分光器システムの各チャンネルでこの工程を繰り返して下さい。