

Facharbeit in Chemie

2024



Thema: **Bau und Evaluation eines günstigen Raman Spektrometers**

Betreuender Lehrer: Ronny Wolf

Autor: Benedikt Peetz

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird der Prozess des Baues eines Raman Spektrometers mit Nutzung des Smartphones als Detektor gezeigt. Im Weiteren wird die Auswertung der aufgenommen Spektral Bilder leicht ermöglicht, indem Software dafür geschrieben wird, die diese Raman Spektren umwandelt. Der Aufbau des Spektrometers wird außerdem durch ein 3D-Modell erleichtert. Das 3D-Modell und die Auswertungssoftware sind unter freien Lizenzen im Anhang verlinkt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Grundlagen des Themas	4
2.1	Theoretische Basis	4
2.2	Anwendung	5
3	Aufbau	7
3.1	Design	7
3.2	Material und Methoden	8
3.3	Kalibrierung	9
3.4	Aufnahme	9
3.5	Auswertung	10
4	Bewertung der Ergebnisse	12
5	Diskussion	13
6	Ausblick	14
	Literatur	15
A	Internetlinks	16
B	img2plot Code	18
C	Bilder in voller Größe	19

Copyright © Benedikt Peetz 2024

Dieses Werk ist lizenziert unter den Bedingungen der CC BY-SA 4.0. Der Lizenztext ist online unter <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/legalcode> abrufbar.

Einleitung

Wissenschaftlich zertifizierte Raman Spektrometer kosten zumeist über 15 000 € [5, 6]. Da diese Spektrometer nicht nur für viele kleine Aufgaben zu teuer sind, sondern auch in diesen Fällen meist für die Anforderungen überqualifiziert, haben sich kostengünstige DIY Optionen ausgebildet [7]. Viele dieser günstigeren Optionen können allerdings einen großen Kostenfaktor nicht entfernen: den Detektor, der Lichtintensität misst, und die aufwendigen Linsen und Rayleigh Sperrfilter.

Allerdings sind die meisten Smartphone-Kameras mittlerweile auf einem Niveau angekommen, das es ihnen ermöglicht, als ein Detektor in solch einem Aufbau genutzt zu werden. Genauso können die fragilen Laseroptiken ersetzt werden, indem statt der normalen zurückstreuende Geometrie („backscattered geometry“ in [3]) eine rechtwinklige Geometrie benutzt wird. Beide Geometrien werden in Abschnitt 3.1 auf Seite 7 erklärt.

Dhankhar, Nagpal und Rentzepis [3] beschreiben einen möglichen Aufbau, der diese Methoden nutzt, in „Cell-phone camera Raman spectrometer“. Insgesamt kostet er nur ca. 50,5 US\$ mit den Initial-Kosten des Smartphones nicht eingerechnet. [3, Tabelle I]

Diese Reduktion des Preises ermöglicht die Anwendung in verschiedenen Situationen, in denen selbst ein nur ca. 2264 € teures [8] openRaman „starter Edition“ Spektroskop

zu teuer ist: Das Spektroskop kann also z. B. auch in Schulen eingesetzt werden, da das teuerste Element, die Kamera, von dem/der Schüler:in gestellt werden kann.

Das Ziel dieser Arbeit ist zum einen die Reproduktion und Validierung der Ergebnisse aus [3]. Daraus folgend soll außerdem eine Anpassung des Spektroskops auf die mögliche Anwendung in schulischen Kontexten erfolgen. Ermöglicht werden sollte dies durch die Reduktion des Kaufpreises für die Schule und eine Vereinfachung der Komponenten und Auswertung für die Schüler:innen.

Grundlagen des Themas

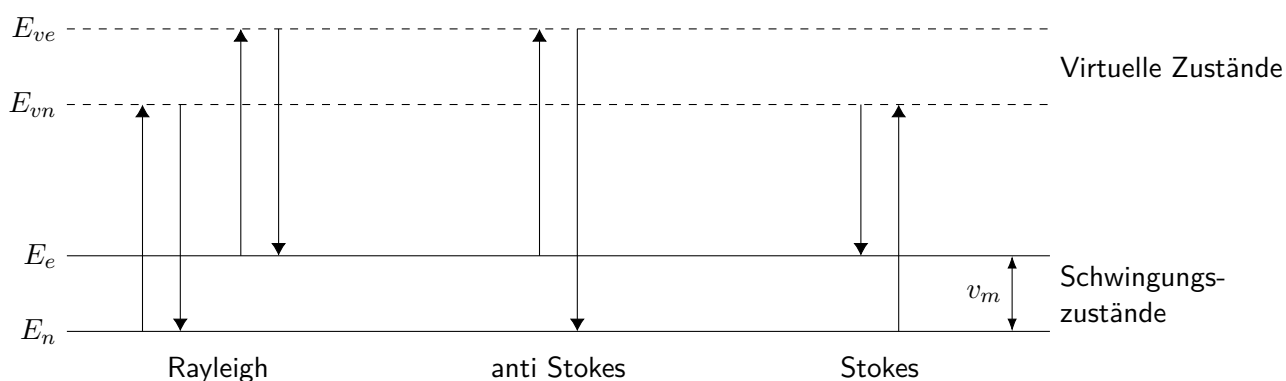


Abbildung 2.1: Darstellung der verschiedenen möglichen Übergänge eines Moleküls bei der Absorption von Licht. Diese Abbildung ist Abbildung 1.2 aus [2] nachempfunden.

Ramanspektroskopie ist eine der zur Strukturaufklärung genutzten Methoden in der Chemie, wird allerdings auch zur Identifizierung unbekannter Substanzen oder der Bestimmung der Konzentration eines Stoffes genutzt. Da sich diese Arbeit hauptsächlich mit der Identifizierung von Stoffen beschäftigt, wird nur diese beschreiben, wobei die theoretischen Grundlagen natürlich für jede Anwendung gleich sind.

2.1 Theoretische Basis

Ferraro, Nakamoto und Brown [1] und Smith und Dent [2] beschreiben in ihren jeweiligen Büchern *Introductory Raman Spectroscopy* bzw. *Modern Raman Spectroscopy – A Practical Approach* die Funktionsweise der Raman Spektrographie:

Einem Molekül wird Energie in Form von Licht zugefügt, was für dieses Molekül zur Folge hat, dass es eine Anregung der Schwingungszustände in sogenannte virtuelle Zustände erfährt. Die Energiedifferenz zwischen den Schwingungszuständen und der virtuellen Zustände ist alleinig von der Energie der Anregungsquelle (i. e. der bestrahlende Laser) abhängig.

Da diese virtuellen Zustände sehr instabil sind, folgt in jedem Fall wieder eine Abgabe von Energie und damit ein Rückgang in die Schwingungszustände. Wie in Abbildung 2.1 ersichtlich, ist die freigesetzte Energie – in Form von emittierten Licht mit einer Wellenlänge die der Energie entspricht – bei dem Rückgang nicht immer gleich groß.

Man unterscheidet deshalb dieses gestreute Licht in drei Gruppen:

Rayleigh. Unabhängig von dem initialen Schwingungsstatus des Moleküls, ist es möglich – und am wahrscheinlichsten –, dass es genau die aufgenommene Energie wieder abgibt. Diese Streuung bein-

hält keinerlei Informationen, da sie genau der Wellenlänge der Anregungsquelle entspricht.

anti Stokes. Ein Molekül wird von einem angeregten Schwingungszustand in den korrespondierenden angeregten virtuellen Zustand befördert, gibt dann aber die Energie wieder ab und landet auf dem nicht angeregten Schwingungszustand. Die Emission hat damit Energie des Moleküls aufgenommen und ist in einen kleineren Wellenlängenbereich verschoben worden. Diese Streuung ist zumeist sehr unwahrscheinlich, da sie voraussetzt, dass das Molekül schon in einem angeregten Zustand ist. Sie wird mit steigenden Temperaturen allerdings wahrscheinlicher, da diese das Molekül anregen können.

Stokes. Beginnend in einem nicht angeregten Zustand wird das Molekül in den korrespondierenden virtuellen Zustand erhoben. Bei der Emission des Lichts wird dann allerdings etwas weniger Energie abgegeben, als aufgenommen wurde. Dies hat sowohl zur Folge, dass das Molekül nun in dem angeregten Schwingungszustand ist, als auch, dass das emittierte Licht in eine größere Wellenlänge verschoben wurde.

2.2 Anwendung

Rayleigh Streuung, da sie die Energie beibehält, besitzt die Frequenz der einkommenden Anregungsquelle. Diese wird meistens ν_0 genannt [1, Seite 15].

Die beiden Raman Streuungen (Stokes und anti Stokes) dagegen haben entweder Energie verloren oder hinzugewonnen: Deshalb ist die Frequenz des Stokes gestreutem Lichts $\nu_0 - \nu_m$ und des anti Stokes gestreutem Lichts $\nu_0 + \nu_m$

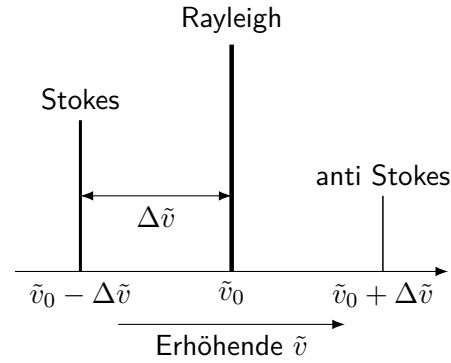


Abbildung 2.2: Relative Intensität (dargestellt durch die Höhe und Breite) von Stokes und anti Stokes Streuung im Vergleich zu Rayleigh Streuung. Diese Abbildung ist an Abbildung 4.3.2 aus [11] angelehnt.

ν_m . Wobei ν_m hierbei die Verschiebung der Frequenz des Lichts ist (i. e. der Unterschied der einzelnen Schwingungszustände).

Deshalb wird in einem Raman-Spektrum die Intensität, das heißt die Menge an gemessenem Licht, gegen die Verschiebung der Frequenz (ν_m), in Wellennummern, aufgetragen.

In der Spektrographie wird zumeist die Einheit der Wellennummer, statt der Frequenz, genutzt [1, Seite 3]. Die Wellennummer ist allerdings keine anerkannte SI-Einheit. Sie ist mit

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu}{c}$$

$$\tilde{\nu} \cdot c = \nu$$

definiert. Wenn diese Definition mit der Formel für die Frequenz kombiniert wird, erhält man:

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

$$\rightarrow \tilde{\nu} \cdot c = \frac{c}{\lambda}$$

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}.$$

Wie bereits erwähnt, ist es üblich die Ra-

man Verschiebung in Wellennummern anzugeben. Die Einheit dieser ist: cm^{-1} .

Da sehr wahrscheinlich nur eine der beiden Stokes Streuungen in relevanten Massen vorkommt (dargelegt in Abschnitt 2.1 auf Seite 4), ist es sinnvoll sich für den Ausschluss entweder der Stokes oder anti Stokes Streuung zu entscheiden, um eine konsistente Achsenbeschriftung zu ermöglichen.

Abbildung 2.2 auf der vorherigen Seite zeigt die Beziehungen der verschiedenen Streuungen zueinander.

Aufbau

3.1 Design

Wie schon kurz in Kapitel 1 auf Seite 3 erwähnt, ist das Design des Spektrometers auf zwei Parameter fokussiert: Ein relativ günstiger und simpler, von komplexen Laseroptiken entfernter Aufbau, der es dem Raman Spektrometer ermöglicht auch in Unterrichtsszenarien angewendet zu werden.

Es gibt zwei hauptsächliche Ansatzpunkte, um die obengenannten Ziele umzusetzen:

1. Der Detektor muss notwendigerweise das Smartphone sein, da es als einziger Detektor zu einer hohen Wahrscheinlichkeit bereits verfügbar ist, und deshalb nicht zu den Materialien dazu gezählt werden muss. Damit werden die Kosten des Detektors aus dem Gesamtpreis entfernt.

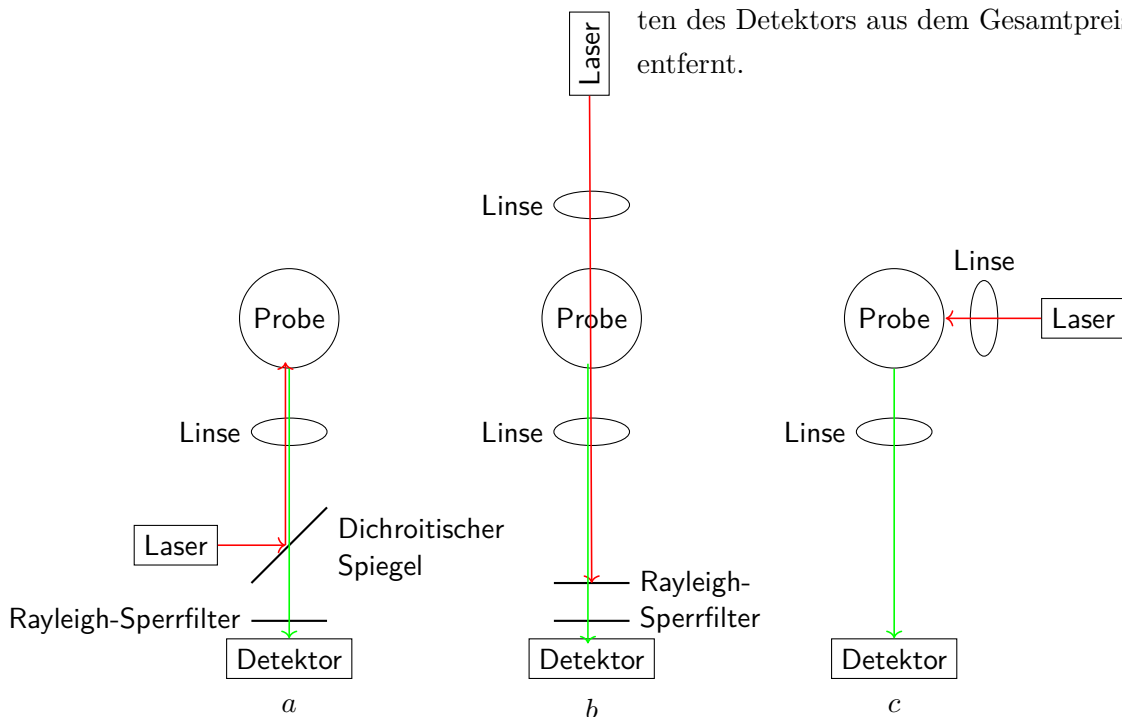


Abbildung 3.1: Vergleich der drei verschiedenen Raman Spektroskop Geometrien: Eine (a) zurückstreuende, (b) durchquerende oder (c) rechtwinklige Geometrie. Die roten Strahlen symbolisieren das direkt von dem Laser ausgesandte und Rayleigh gestreute Licht, die Grünen das von der Probe Raman gestreute Licht. Die Abbildung ist Abbildung 1 aus [3] nachempfunden.

2. Die Laseroptiken sind zum Teil redundant, sofern der Detektor einer rechtwinkligen Positionierung (c) unterzogen wird. In Abbildung 3.1 werden die verschiedenen möglichen Geometrien gezeigt. Wie in [3] erwähnt reduziert der Aufbau nach (c) die ankommende Ray-

leigh Streuung, was es ermöglicht die sowohl bei (a) und (b) notwendigen Rayleigh Sperrfilter zu entfernen. Die Reduktion des ankommenden Streulichts, welche die Rayleigh Sperrfilter überflüssig macht, reduziert allerdings auch das ankommende Stokes (und anti Stokes) gestreute Licht. Dies ist allerdings durch eine längere Belichtungszeit und nachträgliche Entfernung der Rayleigh Streuung (wie in Punkt 3 auf Seite 10 gezeigt) auszugleichen, da eine sehr hohe Genauigkeit, bei den genannten Zielen, zu vernachlässigen ist.

Da die Genauigkeit durch den – geringen – Anteil der Rayleigh Streuung, die die Aufnahme stört, schon reduziert wurde, erscheint es sinnvoll auch auf Kunststoffoptiken zu setzen, da diese sowohl günstiger als auch sicher vor Kratzern sind.

3.2 Material und Methoden

Die Materialien und ihre jeweiligen Preise sind Tabelle 3.1 zu entnehmen. Insgesamt kosten die Bauteile ca. 77,41 €.

Neben diesen genannten Materialien wird auch noch eine Küvette benötigt, die auf allen vier Seiten klar ist. Dies ist notwendig, um die rechtwinklige Geometrie nutzen zu können.

Den ausgetesteten Prinzipien aus Ab-

schnitt 3.1 auf der vorherigen Seite folgend, wird ein 3D Modell erstellt, welches als Plattform den Aufbau signifikant erleichtert. Abbildung 3.2 zeigt dieses Modell und die verschiedenen Teile.

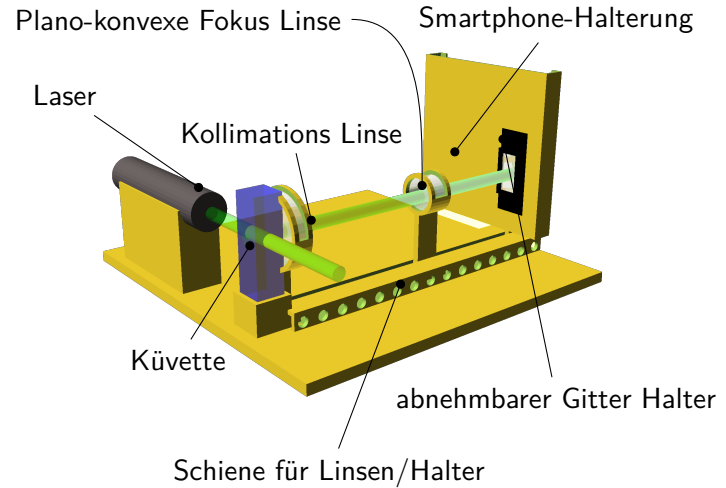


Abbildung 3.2: Das 3d Modell für den Aufbau. Kapitel A auf Seite 16 beinhaltet einen Link zu dem OpenSCAD Quellcode. Abbildung C.5 auf Seite 23 zeigt das Bild in voller Größe.

Diese gedruckte Plattform bringt mehrere Vorteile mit sich:

Zum einen ermöglicht sie, als durch OpenSCAD parametrisiertes, d. h. mit Abhängigkeiten zwischen den einzelnen Größen der Bauteile versehenes Modell, eine leichte Anpassbarkeit an abgeänderte Bauteile (z. B. ist der Aufwand einen 1 cm längeren Laser zu nutzen, beschränkt auf die Veränderung der Längenangabe des Lasers in der `measurements.scad` Datei. Der Sockel, auf dem der Laser ruht, wird dann automatisch

Name (Diameters, Brennpunktes, mitt. Dicke)	jetziger Preis	originaler Kaufpreis
30mm Diameter Kollimator Linse (D30F30H3)	24,73 €	12,90 €
6mm Diameter Fokussierung Linse (D6F30H3)	6,69 €	3,40 €
Plano Konvex Kondensator Linse (D15F10H7.3)	1,40 €	1,14 €
Gitter 1200 Linien/mm 20x10x2mm	17,68 €	20,59 €
1875 532nm 50mw Laser	31,86 €	39,38 €

Tabelle 3.1: Liste aller Bauteile mit ihrer jeweiligen Namen, dem originalen Kaufpreis und dem jetzigen Preis (Stand: Montag, 29. April 2024) um die möglichen Preisfluktuationen zu zeigen.

1 cm länger um sich an die vergrößerte Länge anzupassen.).

Zum anderen kann das Modell die Größenunterschiede der verschiedenen Teile ausgleichen: Der Sockel des Lasers ist auf genau der Höhe, die benötigt wird, damit der Laserstrahl die Mitte der Küvette treffen kann, die die zu analysierende Flüssigkeit enthält.

Die Linsen sind ebenfalls durch Stiele auf eine Höhe gebracht, die es ermöglicht, dass der Laserstrahl die Mittelpunkte der Linsen durchquert. (Man beachte hierbei den etwas längeren Stiel der kleineren Linse in Abbildung 3.2 auf der vorherigen Seite.).

Natürlich sind die einzelnen Höhen auch an die Position der Smartphone-Linsen angepasst.

Neben diesen Vorteilen, die sich alleine von der Parametrisierung ableiten, sind andere ebenfalls wichtig:

Die Linsen und die Smartphone-Halterung sind mit Ankern versehen, die es ermöglichen sie in der Schiene zu verschieben, um die einzelnen Brennweiten aneinander anzupassen. Ist dies geschehen, können in die Löcher, die in der Schienen Wand eingelassen sind, genutzt werden, um diese zu fixieren. Hierbei werden M5x20 Schrauben benutzt.

3.3 Kalibrierung

Vor der Auswertung werden die Brennpunkte der beiden Linsen aufeinander eingestellt, indem man den Laser um 90° dreht, damit er direkt auf die Mitte der Streuung einfallenden Linse leuchtet. Diese leichte Veränderung ermöglicht es, den Gitterhalter, der normalerweise auf der Smartphone-Halterung angebracht ist, gegen ein weißes Blatt Pa-

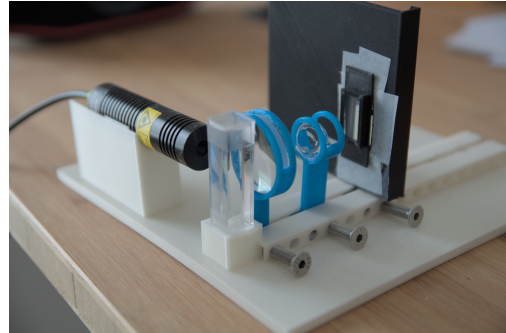


Abbildung 3.3: Das gebaute Modell. Abbildung C.6 auf Seite 23 zeigt das Bild in voller Größe.

pier zu tauschen, auf dem sich dann die Fokussierung des Lasers in Form eines grünen Punktes ersichtlich macht. Hierbei werden die Entfernungen zwischen den beiden Linsen und zwischen der letzten Linse und dem Gitter so lange verändert, bis der Laserpunkt möglichst scharf zu sehen ist. Zum Eigenschutz, und um den Laserpunkt, der sonst von dem Streulicht der Reflexion an dem Papier überdeckt wird, sehen zu können, wird eine Laserschutzbrille getragen.

Nach Befestigung der Linsen- und des Smartphone-Halters durch die Schrauben in der Schiene, wird der Laser wieder auf den rechtwinklig positionierten Sockel gesetzt. Um nun den Laser selbst auf die Probe zu fokussieren, wird dieser so weit nach vorne bewegt, bis in der Küvette (gefüllt mit Wasser) ein klarer Strahl ersichtlich ist. Auch dies wird mit einer Schutzbrille durchgeführt.

3.4 Aufnahme

Die wirkliche *Aufnahme* des Spektral-Bildes soll an dieser Stelle durch Wiederanbringung des Gitters an dem Smartphone-Halter und Einlage des Smartphones leicht vonstattengehen.

Um die Aufnahmen zu machen wird die OpenCamera [9] Anwendung auf einem Sam-

sung A50 Smartphone genutzt. Sie wird durch F-Droid [10] installiert. Die Einstellungs- (ISO, Verschlusszeit, etc.) werden der Automatik überlassen, da keine nennenswerten Unterschiede, durch Veränderung, ersichtlich sind.



Abbildung 3.4: Aufnahme des Smartphones, nachdem alle Schritte der Kalibrierung vollzogen waren. Man beachte, dass das Gitter vor der Smartphone-Kameralinse eine Aufspaltung des Lichts verursachen sollte, diese Aufspaltung allerdings nur minimal in der Verdopplung der Linse erkennbar wird.

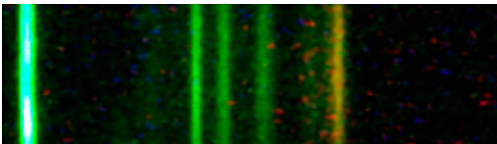


Abbildung 3.5: Aufnahme entnommen aus [3]. Man erkennt, im Gegensatz zu Bild 3.4, dass hier eine Aufspaltung des Lichts stattfand.

Bild 3.4 zeigt eine der Aufnahmen, die nach der Kalibrierung, aufgenommen wurden. Bild 3.5 hingegen zeigt eine Aufnahme, welche aus [3] entnommen wurde. Mögliche Gründe, woher diese Unterschiede in den Aufnahmen kommen, werden in Kapitel 4 auf Seite 12 weiter erörtert.

Da die Auswertung abseits der initialen Bildaufnahme funktioniert, wird nachfolgend Bild 3.5 exemplarisch ausgewertet.

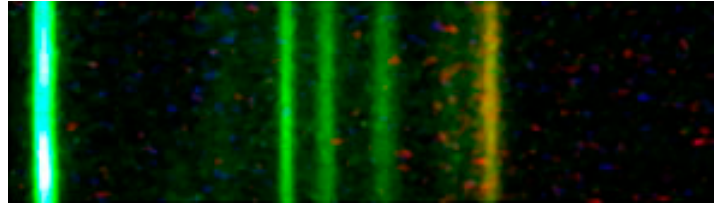
3.5 Auswertung

Die Auswertung hält sich nah an der Methode, die in [3] vorgeschlagen wird.

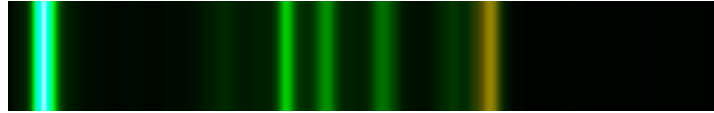
Sie wird vollends durch ein Programm, `img2plot` genannt, umgesetzt.

Die Auswertung ist in vier Schritte unterteilt (welche sich aus Kapitel B auf Seite 18 ergeben):

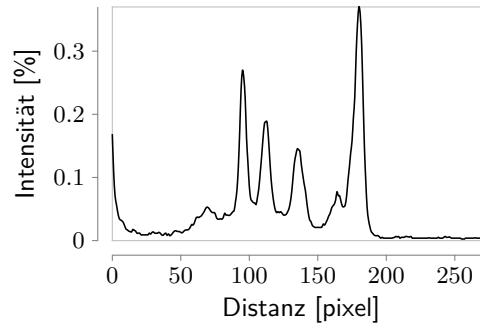
1. Das Bild wird so oft um 90° gedreht, bis die Spektrale Aufspaltung horizontal vorliegt. Die Anzahl der Rotationen müssen `img2plot` angegeben werden.
2. Das Bild wird in seine einzelnen Spalten unterteilt. Für jede dieser Spalten wird ein Medianwert aus ihren Pixeln errechnet. Das Bild hat danach eine Höhe von einem Pixel, behält aber seine originale Breite. Ziel dieses Schrittes ist es, mögliche Unreinheiten oder Lichteinschläge des Bildes zu entfernen. Der Effekt dieser Normalisierung kann in Bild 3.6b auf der nächsten Seite gesehen werden.
3. Mögliche Rayleigh Streuung wird am linken Bildrand ausgeblendet, indem eine spezifizierte Anzahl von Pixeln entfernt wird. Dies macht es möglich, störende Rayleigh Streuung aus dem resultierenden Graphen zu filtern. In Abschnitt 3.1 auf Seite 7 wird dargelegt, warum der Verlust der niedrigen Wellennummer Verschiebungen akzeptable ist. Diese Ausblendung findet nur statt, wenn sie explizit spezifiziert wird.
4. Das Bild, welches ab Punkt 2 als 2D Repräsentation vorliegt, wird in Datenpunkte für den resultierenden Graphen umgewandelt: `img2plot` durchläuft hierbei die Pixel des 2D Bildes von links nach rechts, normalisiert die Rot-, Grün-



(a) Das Anfangsbild; entnommen aus [3].



(b) Bild 3.6a durch Median Berechnung bereinigt und skaliert.



(c) Der generierte Graph zu Bild 3.6b. Die ersten 20 Pixel wurden vor der Verarbeitung entfernt, um die Rayleigh Streuung zu eliminieren. Generiert wurde dieser Graph mit dem Befehl: `img2plot ./anfangsbild.png --scale-height 200 --discard 20`.

Abbildung 3.6: Die Schritte, die zur Auswertung des Spektral Bildes unternommen werden.

und Blauwerte (d. h. sie werden durch ihren Maximalwert dividiert) und bildet aus diesen dann ein gemeinsames arithmetisches Mittel. `img2plot` gibt diese dann vorformatiert als $\text{\LaTeX}$ Code aus, damit das Diagramm direkt in einem ($\text{\LaTeX}$) Dokument eingebunden werden kann.

Dieser Prozess ist exemplarisch in Abbildung 3.6 dargestellt.

aufeinander verschoben, und eine Zuordnung ist ablesbar.

Da aber die Aufnahmen in diesen Aufbau nicht nutzbar sind, ist eine Kalibrierung auch nicht möglich. Diese benötigt nämlich notwendigerweise ein Spektral Bild, aufgenommen in derselben Qualität, um einen Vergleich der Werte zu ermöglichen.

Da die Pixelzahlen völlig von der Qualität, in der das Bild aufgenommen wurde, abhängen, ist es notwendig eine Eichung vorzunehmen. Um zu bestimmen, welche Pixel Distanzen welchen Wellennummer-Verschiebungen zuzuordnen sind, wird ein Graph mit einer Substanz erstellt, von der ein Raman-Spektrum vorliegt. Dann werden die Peaks

Bewertung der Ergebnisse

Da die Ergebnisse nach der Aufnahme mit denen aus [3] übereinstimmen (bis auf die Pixeldifferenzen, aber diese sind arbiträr), ist nur die Aufnahme des Spektral Bildes zu untersuchen, denn die anderen Schritte funktionieren erfolgreich.

Bilder C.1 bis C.4 auf den Seiten 19–22 gehören zu den Aufnahmen, die durch diesen Aufbau erzielt werden können. Bei der Betrachtung dieser *Bilder* fällt auf, was sie von einem Spektral Bild (z. B. Bild 3.5 auf Seite 10) unterscheidet: Eine Aufspaltung des Lichts in die einzelnen Farbspektren durch das Gitter findet nicht statt.

Durch Betrachtung des Gitters alleine kann allerdings nachgewiesen werden, dass dieses funktioniert. Wenn es vor einen Laserstrahl gehalten wird, kann auf der auftreffenden Wand das typische Aufspaltungsmuster wahrgenommen werden (Mehrere grüne Punkte, welche die einzelnen Bäuche der interferierenden Laserwellen darstellen und zwischen ihnen freie Stellen, die nichts zeigen, da sich dort Knoten überlagern.).

Diese Aufspaltung lässt sich aber erst in etwa 1 m Entfernung zu der angestrahlten Wand beobachten, wohingegen die Smartphone-Kamera in der Halterung nur ca. 1 mm Entfernung zu dem Gitter hat (die Wanddicke des Halters). Das Problem in diesem Fall ist, dass die Aufspaltung zu weit gefächert ist, und deshalb eine längere Ausbreitungsstrecke braucht, um überhaupt er-

sichtlich zu sein.

Diese Vermutung bringt allerdings ein weiteres Problem mit sich: Da das Smartphone nur ca. 2 mm breite Kameralinsen besitzt, ist es naheliegend, dass die Aufspaltung bei einem längeren Weg zu breit wäre, und nicht mehr aufgenommen werden würde.

Um diese Hypothese zu widerlegen, wird eine Aufnahme mit einer digitalen Kamera gemacht, welche eine Linse mit ca. 6 cm Durchmesser besitzt. Diese Ergebnisse unterscheiden sich nicht von denen des Smartphones. Zu diesem Vergleich ist allerdings anzugeben, dass keine Halterung für diese Kamera existiert, die Entfernung und der Winkel zu der Probe nur von dem Autor manuell, denen des Smartphones, angenähert wird.

Diskussion

Die Arbeit als Ganzes hatte das Hauptziel anhand der präsentierten Ergebnisse aus [3] ein kostengünstiges Raman Spektrometer zu bauen, was in Teilen auch gelungen ist:

Zum einen ist das Spektrometer an sich gebaut worden, mit der in Kapitel 4 auf der vorherigen Seite dargelegten Limitation, dass es nicht in der Lage ist ein sinnvolles Spektral Bild zu erzeugen.

Der in Abschnitt 3.2 auf Seite 8 festgestellte Preis von 77,41 € ist um ca. 30 € höher, als das Spektrometer, welches in [3] beschrieben wird – dieses kostet nur 50,5 US\$ (ca. 47 €). Allerdings sind 77,41 € auch eine starke Verbesserung zu den in Kapitel 1 auf Seite 3 erwähnten DIY Spektrometern.

Zum anderen ist die Auswertung – in dem Rahmen, in dem sie beurteilt werden konnte – in einem Kommandozeilenprogramm umgesetzt und deckt sich mit den ausgewerteten Werten von [3] (siehe dazu: Abschnitt 3.5 auf Seite 10). Dies belegt, dass die Auswertungssoftware funktioniert, und folglich nur der Mangel der Möglichkeit Spektral Bilder aufzunehmen, die Anwendung dieses Spektroskop behindert.

Die erste Zielsetzung, die Ergebnisse aus [3] zu reproduzieren konnte folglich nur in Teilen erreicht werden (wobei in Kapitel 6 auf der nächsten Seite Vorschläge gemacht werden, die eine volle Reproduktion möglich machen könnten). Die zweite Zielsetzung, ein Raman Spektrometer zu bauen, welches

potenziell im Unterricht eingesetzt werden könnte, scheint an sich erfolgreich gewesen zu sein, auch wenn es sehr erschwert ist:

1. Bei einem Preis von 77,41 € ist es nicht wirklich realistisch, genug Kits für alleine schon z. B. 10 Schüler:innen anzuschaffen – die Bauzeit ist hierbei noch nicht mal mit eingerechnet.
2. Schüler:innen einen Laser der Klasse 3B zu geben (der genutzte hatte 50 mW) überschreitet die erlaubte Obergrenze von Klasse 2 [4, Seite 5].
3. Da die Auswertungssoftware „nur“ ein Kommandozeileninterface hat, ist sie nicht gut für die Benutzung durch technisch ungeschulte Personen angepasst.

Ausblick

Eine Nutzung im Unterricht, die in der jetzigen Form unmöglich ist, scheint nicht ausgeschlossen, wenn gewisse Veränderungen vorgenommen werden:

Denn die in Kapitel 5 dargelegten Problematiken können gelöst werden:

Punkt 1 auf der vorherigen Seite wäre umgangen, wenn nicht jede:r Schüler:in ein eigenes Raman Spektrometer zur Verfügung gestellt bekommt. Es reicht, wenn die Lehrkraft die Möglichkeit hat, dieses zu Bedienen und den Schüler:innen die Anwendung zu zeigen.

Auch die in Punkt 2 erwähnte Sicherheit ist einhaltbar, indem ein sicherer Laser (d. h. mit einer geringen Leistung) genutzt wird und/oder eine Abdeckung für das Spektroskop als ganzes angewendet wird. Diese Abdeckung des Spektrometers ist, auch ohne die genannte Sicherheitsaspekte sinnvoll, da diese ungewolltes Streulicht aus der Umgebung reduziert und damit bessere Aufnahmen ermöglicht.

Und Punkt 3 ist ebenfalls behebbar, da Auswertungssoftware eine Zielgruppe orientierte Bedienungsfläche bekommen kann.

Sollte das Spektrometer an sich funktionieren, bieten sich die Möglichkeiten, die schon in [3] als zukünftige Optionen genannt wurden an:

Zum einen ist ein solches Spektrometer in

der Lage auch *in situ* Ergebnisse zu liefern. Dies würde die Identifizierung oder Bestimmung von Konzentrationen gewisser Stoffe ermöglichen, welche sonst aufwendig zu dem Spektroskop transportiert werden müssten.

Wie auch von [3] schon vorgeschlagen, könnte es in der weiten Zukunft möglich sein diese Sensorik direkt in Smartphones einzubauen, um diesen die Fähigkeit zu geben Chemikalien direkt zu erkennen.

Literatur

Bücher

- [1] John R. Ferraro, Kazuo Nakamoto und Chris W. Brown. *Introductory Raman Spectroscopy*. Second. Elsevier Science, 2003. Kap. 1, S. 3–33. ISBN: 978-0-12-254105-6.
- [2] Ewen Smith und Geoffrey Dent. *Modern Raman Spectroscopy – A Practical Approach*. John Wiley & Sons Ltd, 2005. Kap. 1, S. 2–8. ISBN: 0-471-49794-0.

Artikel

- [3] Dinesh Dhankhar, Anushka Nagpal und Peter M. Rentzepis. „Cell-phone camera Raman spectrometer“. In: *Review of Scientific Instruments* 92.5 (Mai 2021), S. 054101. ISSN: 0034-6748. DOI: [10.1063/5.0046281](https://doi.org/10.1063/5.0046281). eprint: https://pubs.aip.org/aip/rsi/article-pdf/doi/10.1063/5.0046281/19765646/054101_1_online.pdf. URL: <https://doi.org/10.1063/5.0046281>.
- [4] E. Romanus und L. Udovičić. „Optische Strahlungssicherheit im Physikunterricht“. In: *baua: Fokus* (Juni 2018). DOI: [10.21934/baua:fokus20180801](https://doi.org/10.21934/baua:fokus20180801). URL: <https://www.baua.de/DE/Angebote/Publikationen/Fokus/Optische-Strahlungssicherheit.html>.

Internet

- [5] URL: https://www.thorlabs.com/newgrouppage9.cfm?objectgroup_id=15634 (besucht am 21.04.2024).
- [6] URL: <https://www.shopstellarnet.com/785nm-preconfigured-raman-spectrometer-system/> (besucht am 21.04.2024).
- [7] URL: <https://www.open-raman.org/> (besucht am 22.04.2024).
- [8] URL: <https://www.open-raman.org/build/starter-edition/download/> (besucht am 22.04.2024).
- [9] URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Open_Camera (besucht am 30.04.2024).
- [10] URL: <https://f-droid.org/de/> (besucht am 30.04.2024).
- [11] Pavan M. V. Raja und Andrew R. Barron. 4.3: *Raman Spectroscopy*. Hrsg. von LibreTexts. URL: <https://chem.libretexts.org/@go/page/55879?pdf> (besucht am 01.05.2024).

Internetlinks



Abbildung A.1: Die digitale Version dieser Arbeit, als QR-code.

Diese Arbeit ist auch digital verfügbar, was es möglich macht auf Referenzen zu klicken: https://b-peetz.de/dead-trees/raman_spectrometer.pdf oder als QR-Code in Abbildung A.1.

Die Auswertungssoftware (`img2plot`) ist unter der `GPL-3.0-or-later` Lizenz verfügbar unter: <https://codeberg.org/bpeetz/img2plot>.

Das 3d-Modell unter der `CC-BY-SA 4.0` Lizenz verfügbar unter: https://codeberg.org/bpeetz/raman_spectrometer.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Darstellung der verschiedenen möglichen Übergänge eines Moleküls bei der Absorption von Licht. Diese Abbildung ist Abbildung 1.2 aus [2] nachempfunden.	4
2.2	Relative Intensität (dargestellt durch die Höhe und Breite) von Stokes und anti Stokes Streuung im Vergleich zu Rayleigh Streuung. Diese Abbildung ist an Abbildung 4.3.2 aus [11] angelehnt.	5
3.1	Vergleich der drei verschiedenen Raman Spektroskop Geometrien: Eine (a) zurückstreuende, (b) durchquerende oder (c) rechtwinklige Geometrie. Die roten Strahlen symbolisieren das direkt von dem Laser ausgesandte und Rayleigh gestreute Licht, die Grünen das von der Probe Raman gestreute Licht. Die Abbildung ist Abbildung 1 aus [3] nachempfunden.	7
3.2	Das 3d Modell für den Aufbau. Kapitel A auf der vorherigen Seite beinhaltet einen Link zu dem OpenSCAD Quellcode. Abbildung C.5 auf Seite 23 zeigt das Bild in voller Größe.	8
3.3	Das gebaute Modell. Abbildung C.6 auf Seite 23 zeigt das Bild in voller Größe.	9
3.4	Aufnahme des Smartphones, nachdem alle Schritte der Kalibrierung vollzogen waren. Man beachte, dass das Gitter vor der Smartphone-Kameralinse eine Aufspaltung des Lichts verursachen sollte, diese Aufspaltung allerdings nur minimal in der Verdopplung der Linse erkennbar wird.	10
3.5	Aufnahme entnommen aus [3]. Man erkennt, im Gegensatz zu Bild 3.4 auf Seite 10, dass hier eine Aufspaltung des Lichts stattfand.	10
3.6	Die Schritte, die zur Auswertung des Spektral Bildes unternommen werden.	11
A.1	Die digitale Version dieser Arbeit, als QR-code.	16
B.1	Grundcode, der die verschiedenen Schritte von <code>img2plot</code> zeigt. <code>average_vertical_lines</code> ist falsch benannt, da es in Wirklichkeit Mediane benutzt.	18
C.1	Aufgenommenes Bild A	19
C.2	Aufgenommenes Bild B	20
C.3	Aufgenommenes Bild C	21
C.4	Aufgenommenes Bild D	22
C.5	Abbildung 3.2 auf Seite 8 in voller Größe.	23
C.6	Abbildung 3.3 auf Seite 9 in voller Größe.	23

img2plot Code

Relevante Ausschnitte des Codes sind hier nochmal dargelegt, um direkte Referenzen zu ermöglichen. Kapitel A auf Seite 16 enthält den Link zu dem ganzen Quellcode.

```
fn main() -> anyhow::Result<()> {  
    // ...  
    let image = make_image_type(rotate_image(args.rotate, image));  
  
    let vertical = average_vertical_lines(image);  
    let discarded = discard_first_pixels(vertical, args.discard)?;  
    let scaled = extend_to_height(args.scale_height, &discarded);  
    output_image(&discarded, "./vertical.png"?);  
    output_image(&scaled, "./scaled.png"?);  
  
    let latex_plot = transform_image_to_latex(discarded, args.standalone);  
    println!("{}", latex_plot);  
    // ...  
}
```

Abbildung B.1: Grundcode, der die verschiedenen Schritte von `img2plot` zeigt. `average_vertical_lines` ist falsch benannt, da es in Wirklichkeit Mediane benutzt.

Bilder in voller Größe



Abbildung C.1: Aufgenommenes Bild A

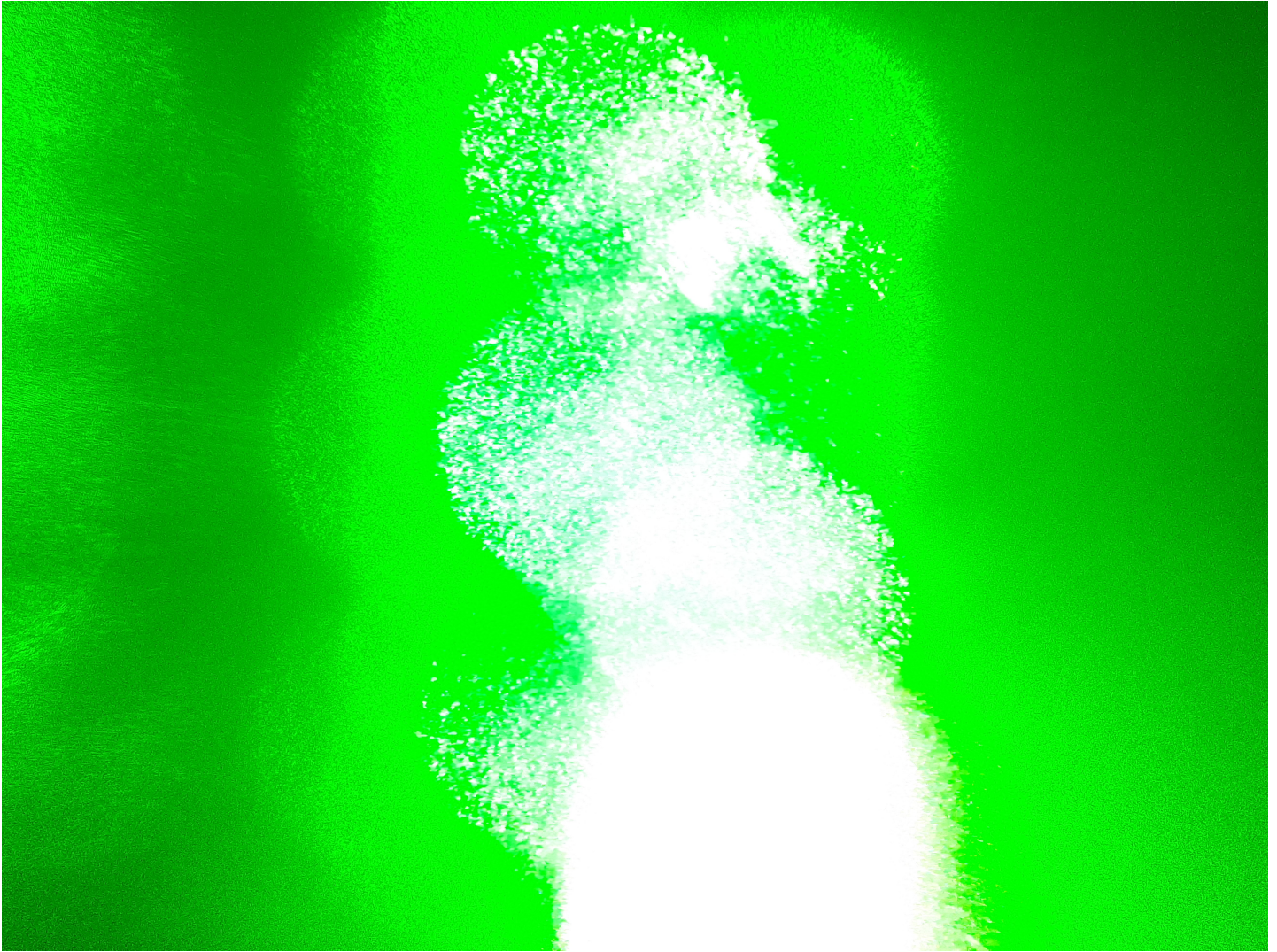


Abbildung C.2: Aufgenommenes Bild B

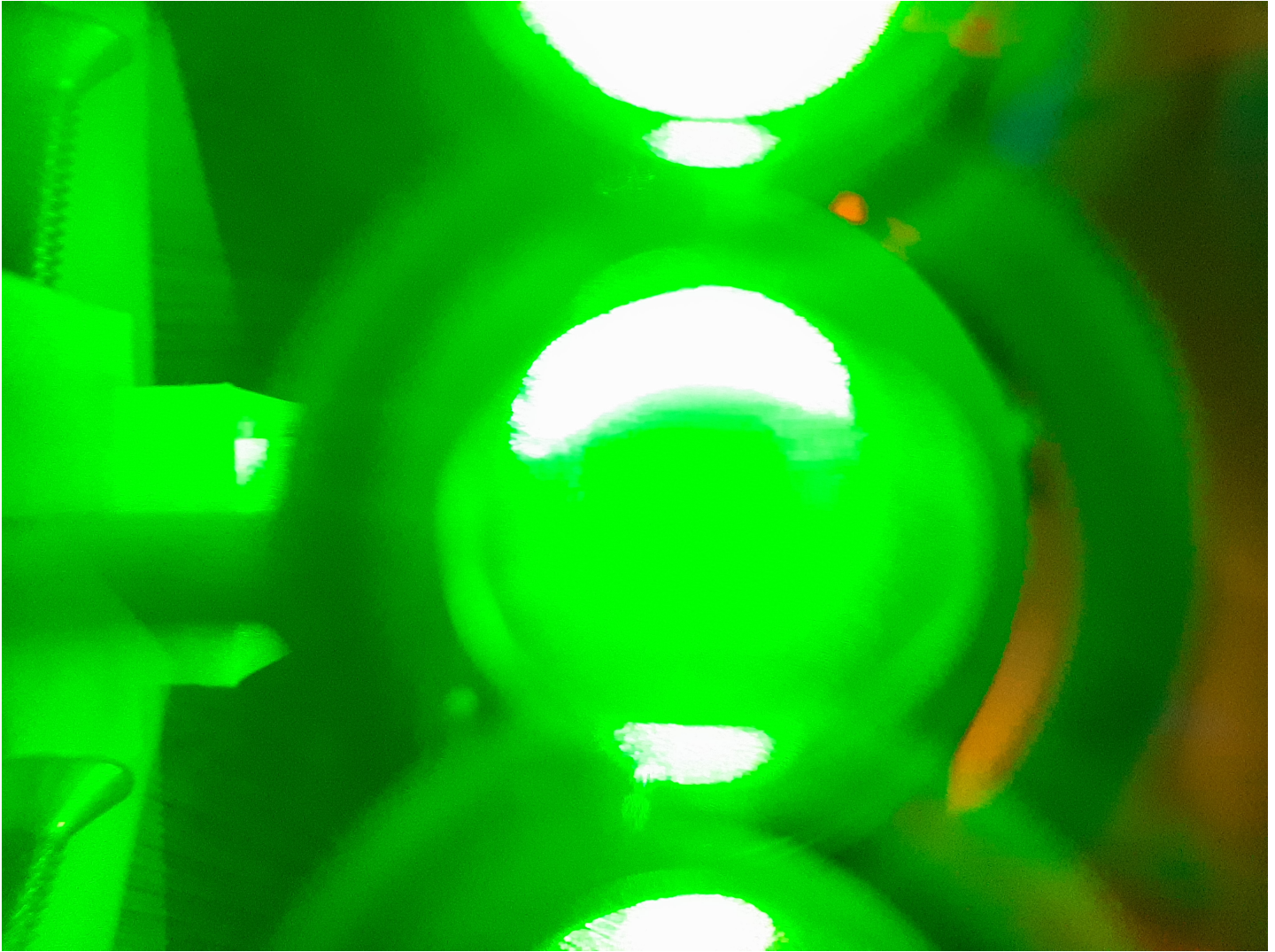


Abbildung C.3: Aufgenommenes Bild C



Abbildung C.4: Aufgenommenes Bild D

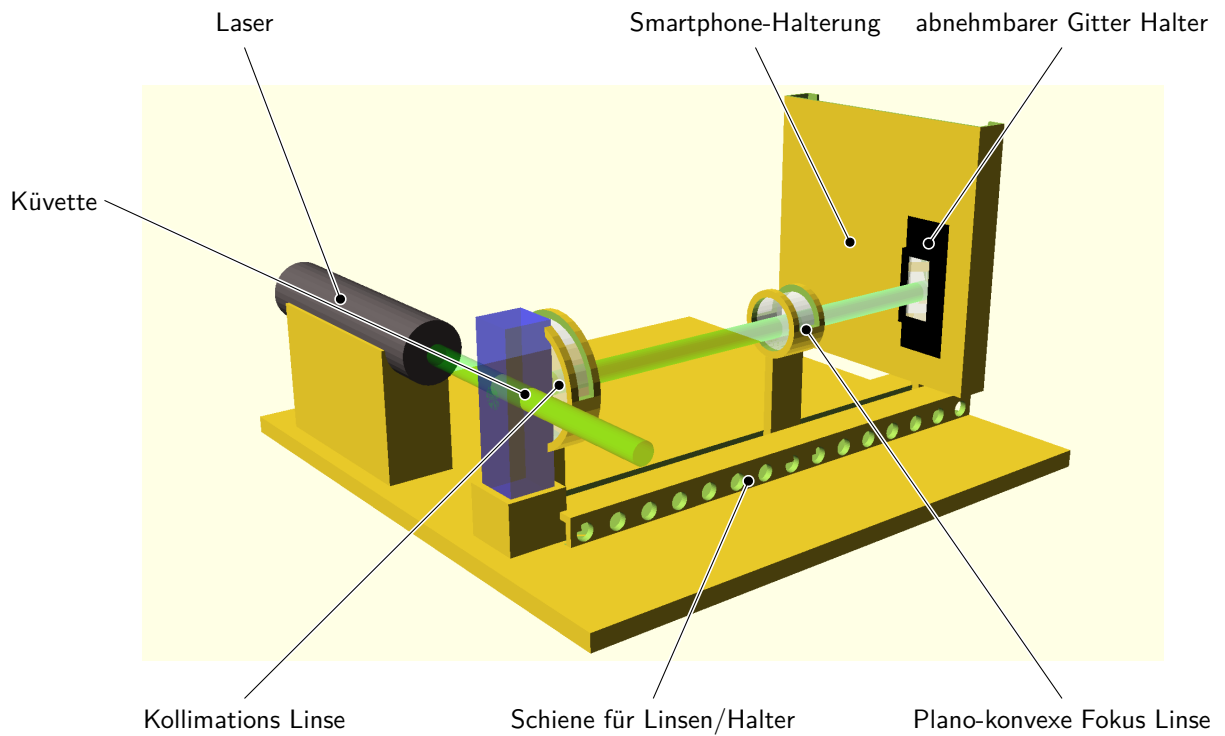


Abbildung C.5: Abbildung 3.2 auf Seite 8 in voller Größe.

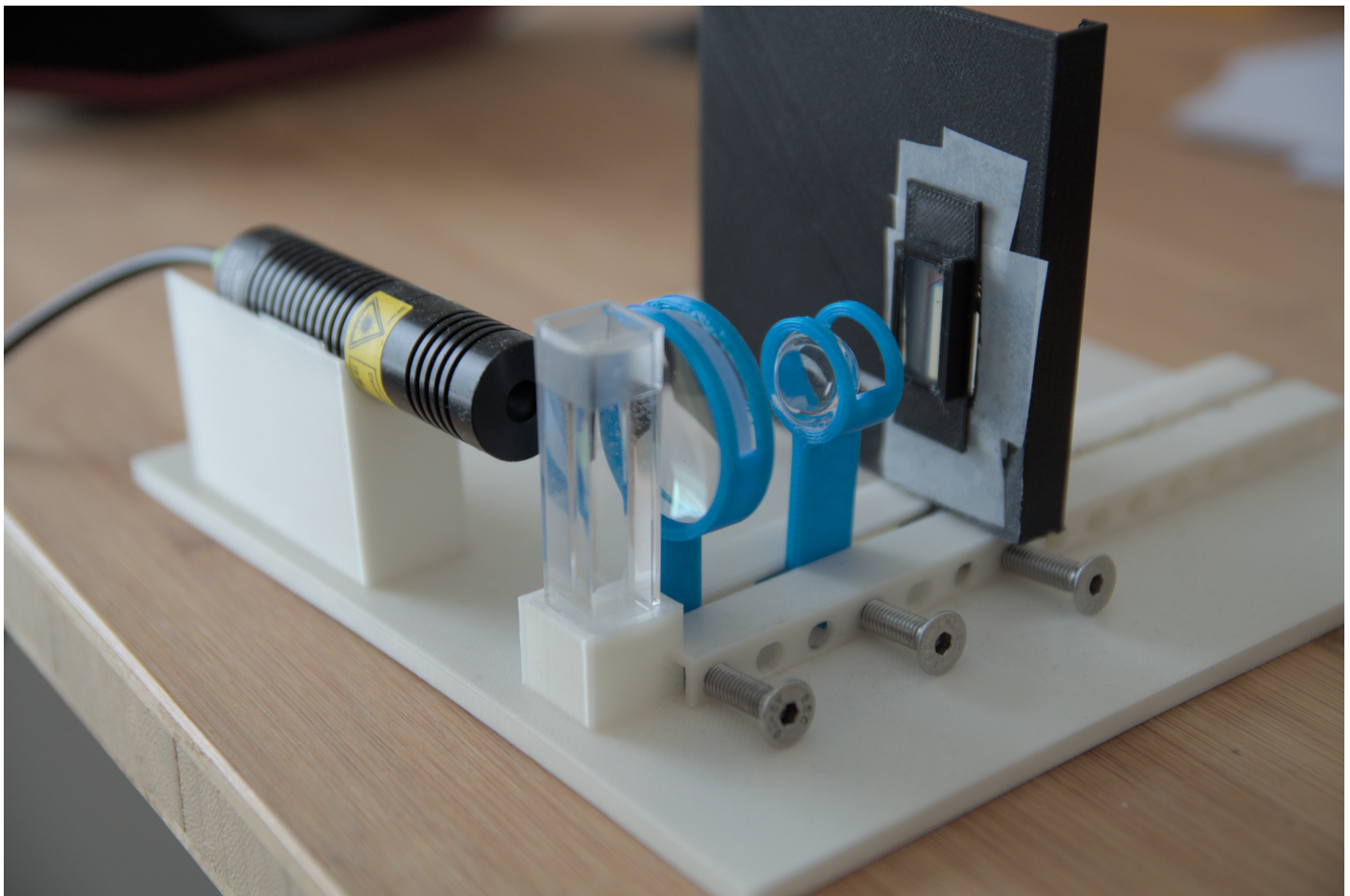


Abbildung C.6: Abbildung 3.3 auf Seite 9 in voller Größe.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne fremde Hilfe verfasst und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe. Insbesondere versichere ich, dass ich alle wörtlichen und sinngemäßen Übernahmen aus anderen Werken als solche kenntlich gemacht habe.

(Ort, Datum)

(Unterschrift)