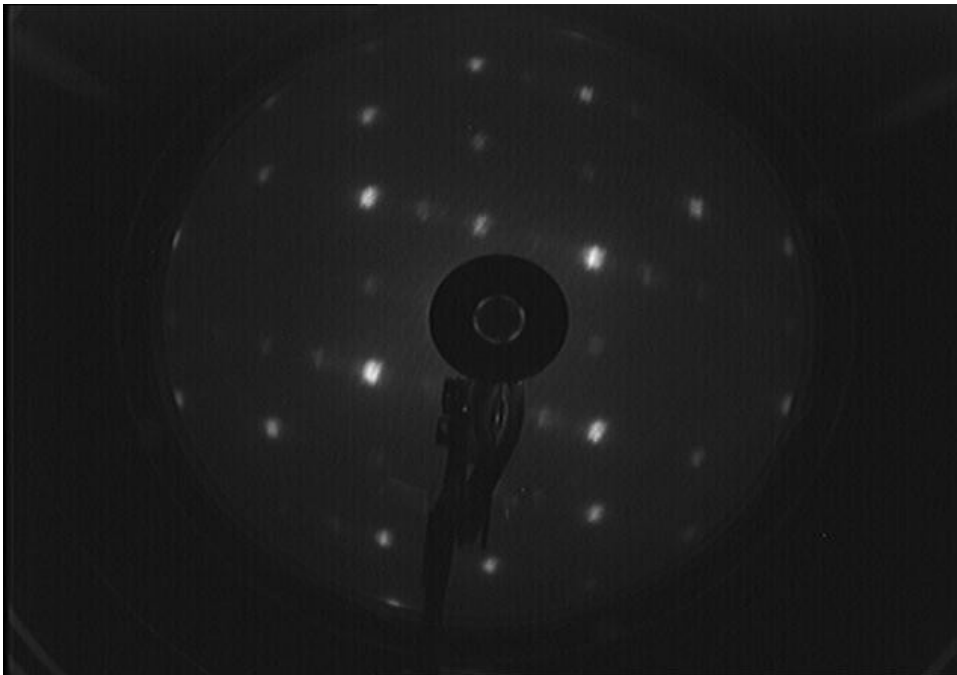


EasyLeed-ohjelman kehitys

EasyLeed on leed-tutkimuksessa (low energy electron diffraction) käytettävä apuväline. Ohjelma laskee elektronien intensiteetin tutkimuskuvien perusteella. Laskennallisen puolen koodista on kirjoittanut Andreas Mayer enkä ole itse perehtynyt syvällisemmin leed-teoriaan.

Ohjelmaan ladataan tutkimuskuvat (esimerkki kuva 1). Olen ymmärtänyt, että jotakin ainetta pommitetaan elektroneilla eri energioilla ja nämä kuvat ovat otettu kyseessä olevasta tilanteesta. Ohjelmalla valitaan kuvasta halutut seurattavat pisteet ja ohjelma laskee näiden pisteiden intensiteetin käyttäen Kalman filteriä, kun nämä pisteet “liikkuvat” eri energioissa. Omaan toimenkuvaani kuuluu ohjelman käytettävyyden parantaminen, joten en ole koskenut laskennalliseen osioon, etten sotkisi sitä kokonaan teoriaa ymmärtämättömänä.



Kuva 1. Esimerkki tutkimuskuvasta

Olen tähän mennessä lisännyt ohjelmaan mahdollisuuden piirtää kuvaajan lasketuista intensiteeteistä ja energiasta sekä kuvaajan, intensiteettien ja seurattavien pisteiden alkupaikkojen tallennuksen. Olen myös muokannut käyttöliittymää käyttäjäystävällisemmäksi.

Ohjelma on kirjoitettu Pythonilla ja grafiikka on toteutettu Qt:llä (PyQt 4). Kuvaajien piirtämiseen on käytetty matplotlib-kirjastoa.

Kesän aikana pitäisi saada toteutettua lisää toiminnallisuutta ja muokata koodia julkaisukuntoon; esimerkiksi selvitettävä käyttöongelmat Windows-ympäristössä ja mahdollisuus merkata seurattavat pisteet manuaalisesti kaikissa energioissa sen sijaan, että ohjelma seuraisi pisteitä valoisuuden perusteell. Tähän mennessä suurin osa ajasta on mennyt alkuperäisen koodin tulkitsemiseen ja selventämiseen (mukana funktioita ja luokkia, joita ei tarvita etc.).