



NOVÉ TECHNOLOGIE
VÝZKUMNÉ CENTRUM
ZÁPADOČESKÉ
UNIVERZITY
V PLZNI

ODBOR TERMOMECHANIKA TECHNOLOGICKÝCH PROCESŮ

AUTORIZOVANÝ SOFTWARE

PPRa

(Pulsed Photothermal Radiometry analyzer)

***SOFTWARE PRO VYHODNOCENÍ MĚŘENÍ TEPELNÝCH
VLASTNOSTÍ TENKÝCH VRSTEV***

Autor: *Ing. Jiří Martan, Ph.D.*

Číslo projektu: *FR-TII/273*

Číslo výsledku: *NTC-SW-09-10*

Odpovědný pracovník: *doc. Ing. Milan Honner, Ph.D.*

Vedoucí odboru: *doc. Ing. Milan Honner Ph.D.*

Ředitel centra: *doc. Dr. RNDr. Miroslav Holeček*

PLZEŇ, PROSINEC 2010

Jazyk výsledku: *ENG*

Hlavní obor: *BJ*

Uplatněn: *ANO*

Název výsledku česky:

PPRa (Pulsed Photothermal Radiometry analyzer) – Software pro vyhodnocení měření tepelných vlastností tenkých vrstev pomocí pulzní fototepelné radiometrie.

Název výsledku anglicky:

PPRa (Pulsed Photothermal Radiometry analyzer) – Software for analysis of thermal properties measurements made by Pulsed Photothermal Radiometry method.

Abstrakt k výsledku česky:

Software je určen pro zjišťování tepelných vlastností tenkých vrstev z měření pomocí metody Pulzní fototepelné radiometrie. Zjišťovány jsou tepelná jímavost, tepelná vodivost a objemová měrná tepelná kapacita tenkých vrstev o tloušťkách 0,5 až 5 μm . Software umožňuje provedení všech kroků potřebných pro stanovení tepelných vlastností – kalibraci, import dat, zpracování dat a analýzu pomocí analytického modelu.

Abstrakt k výsledku anglicky:

The software is intended to analyze thermal properties of thin films from measurements made by the Pulsed Photothermal Radiometry method. Analyzed are thermal effusivity, thermal conductivity and volumetric specific heat of thin films with thickness range of from 0.5 to 5 μm . The software provides all the steps needed for final thermal properties evaluation – calibration, data import, data processing and analysis by the analytical model.

Klíčová slova česky:

pulzní fototepelná radiometrie, tenké vrstvy, měření tepelné vodivosti, objemová měrná tepelná kapacita, nanosekundový laser

Klíčová slova anglicky:

pulsed photothermal radiometry, thin films, thermal conductivity measurement, volumetric specific heat, nanosecond laser

Vlastník výsledku: *Západočeská univerzita v Plzni*

IČ vlastníka výsledku: *49777513*

Stát: *Česká republika*

Lokalizace: <http://www.zcu.cz/ntc/vysledky/sw/NTC-SW-09-10.html>

Licence: *ANO*

Licenční poplatek: *ANO*

Ekonomické parametry: *Ekonomické přínosy vyplývající z výzkumu a stanovení tepelných vlastností tenkých vrstev pro použití v obrábění, mikroelektronice, laserové optice a technikách přetváření tenkých vrstev.*

Technické parametry: *Luděk Hynčik, Západočeská univerzita v Plzni, Nové technologie - Výzkumné centrum v západočeském regionu, Univerzitní 8, 306 14 Plzeň, 377634709, hyncik@ntc.zcu.cz*

Autorizovaný software

PPRa

Pulsed Photothermal Radiometry analyzer

**SOFTWARE PRO VYHODNOCENÍ MĚŘENÍ TEPELNÝCH
VLASTNOSTÍ TENKÝCH VRSTEV**

Ing. Jiří Martan, Ph.D.

Anotace

Software je určen pro zjišťování tepelných vlastností tenkých vrstev z měření pomocí metody Pulzní fototepelné radiometrie. Zjišťovány jsou tepelná jímavost, tepelná vodivost a objemová měrná tepelná kapacita tenkých vrstev o tloušťkách 0,5 až 5 μm . Software umožňuje provedení všech kroků potřebných pro stanovení tepelných vlastností – kalibraci, import dat, zpracování dat a analýzu pomocí analytického modelu. Software je vytvořen v programovacím prostředí Matlab a je vybaven grafickým uživatelským prostředím.

1. Účel použití softwaru

Počítačové zpracování naměřených dat Pulzní fototepelné radiometrie a vyhodnocení tepelných vlastností tenkých vrstev

Pulzní fototepelná radiometrie používá nanosekundový pulzní laser pro ohřev vzorku a rychlý infračervený (IR) detektor pro bezkontaktní měření teploty povrchu vzorku [1]. Detektor měří tepelné vyzařování povrchu a pomocí kalibrace je možné jeho signál převést na teplotu. Detektorem je sledován průběh teploty vzorku v čase po laserovém pulsu v řádech nanosekund a mikrosekund. Průběh teploty je převeden na průběh zdánlivé tepelné jímavosti (efuzivity). Tento časový průběh reprezentuje hloubkový profil pod povrchem. Pomocí analytického modelu je možné inverzní úlohou určit tepelnou vodivost a objemovou tepelnou kapacitu tenké vrstvy. Je používán analytický 1D model třívrstvé struktury [2].

Naměřená data průběhů napětí při měření s laserem jsou ukládána na osciloskopu do souborů. Kalibrační data jsou zapisována ručně při ohřevu na různé teploty. Tato data spolu s dalšími (teplotou vzorku, propustností okénka, velikostí laserového spotu, energií laserového pulsu, atd.) jsou vstupními hodnotami do popisovaného vyhodnocovacího softwaru. Tento software pak slouží k zjednodušení a automatizaci vyhodnocení tepelných vlastností.

Tenká vrstva je materiál nanesený na povrch součásti o tloušťce 1nm – 10 μm. Vrstva výrazně mění chování celé součásti. Použití také pro výrobu mikroelektroniky – mikročipy se skládají z tenkých vrstev. Tenké vrstvy mají různé speciální vlastnosti, pro které jsou vyráběny: mechanické, elektrické, optické, tepelné, chemické, magnetické nebo dekorativní. Tepelné vlastnosti silně závisí na chemickém složení, struktuře a teplotě materiálu, což je podstatné pro tenké vrstvy – vytvořené za nerovnovážných podmínek. Jejich chemické složení a struktura jsou odlišné od objemového materiálu. Znalost tepelných vlastností tenkých vrstev je důležitá v oblastech: mikroelektronika, laserové přetváření tenkých vrstev, laserové optické prvky, součásti ve styku s plazmatem, obrábění s povlakovanými nástroji. Pro každou aplikaci jsou vyžadovány odlišné vlastnosti

2. Popis softwaru

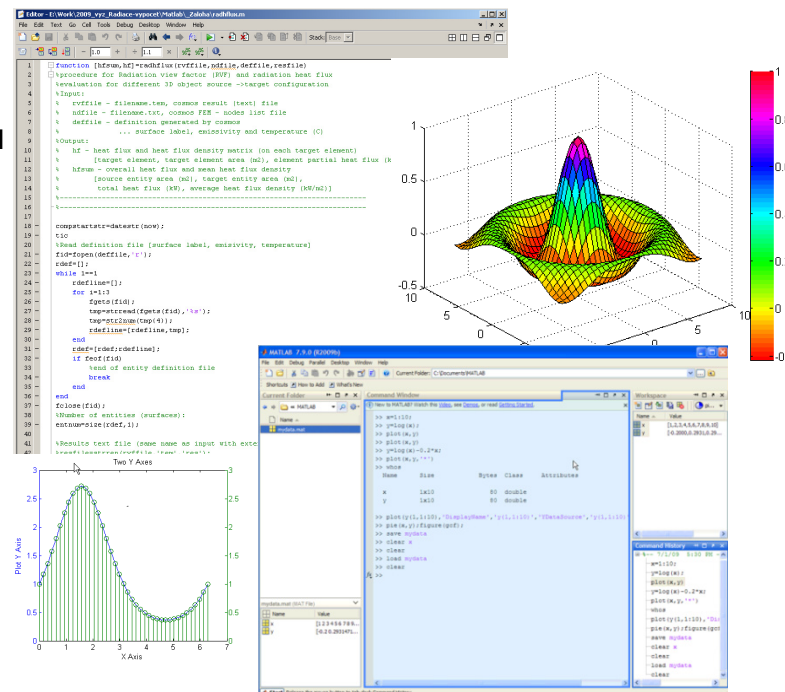
2.1 Programovací prostředí

Program je napsán v programovacím prostředí Matlab

Matlab je specializované programovací prostředí pro obecné matematické výpočty, analýzu dat a vizualizaci. Matlab je "high-level" programovací jazyk, který umožňuje rychlejší a efektivnější provedení náročných a objemných výpočetních úloh než v klasických programovacích jazycích (Delphi, C, C++ nebo Fortran)

Hlavní charakteristiky systému Matlab:

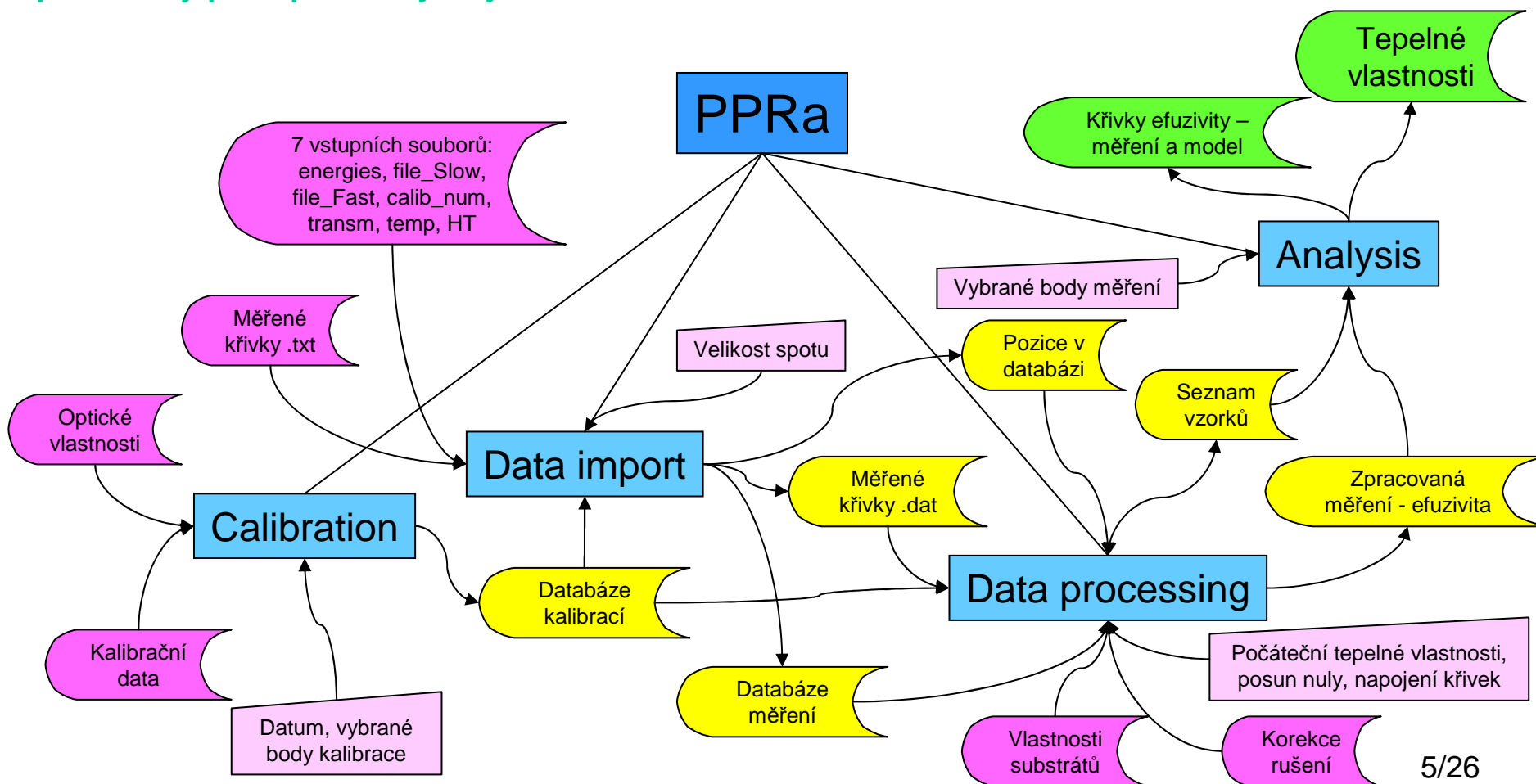
- "High-level" programovací jazyk pro technické výpočty
- Vyspělé grafické interaktivní prostředí pro výpočty, správu souborů, proměnných, dat a programování
- Matematické funkce pro lineární algebru, statistiku, Fourierovu analýzu, filtrování, optimalizaci a numerickou integraci
- Funkce pro 2D a 3D vizualizaci dat
- Funkce pro tvorbu vlastního grafického uživatelského prostředí
- Funkce pro integraci algoritmů s externími aplikacemi
- Možnosti rozšíření funkčnosti o specializované balíky (Toolbox)
- Možnost vytvoření samostatného spustitelného (EXE) souboru



2. Popis softwaru

2.2 Struktura programu

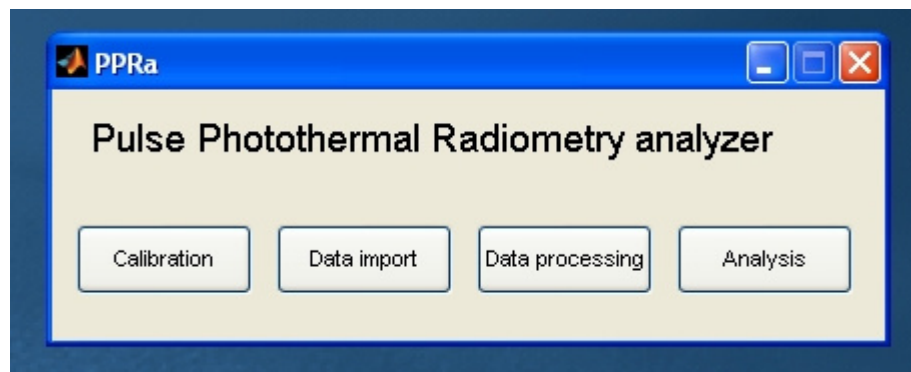
Program obsahuje hlavní úvodní okno a čtyři samostatné funkční celky, které pracují odděleně a představují postupné kroky k vyhodnocení.



2. Popis softwaru

2.3 Hlavní okno

Hlavní okno se spustí pomocí příkazu „PPRa“. Toto okno slouží jako rozcestník do ostatních funkčních oken.



Hlavní okno programu

Výpočty v programu se provádí pomocí vztahů popsaných v [3]. Software je vytvořen pro metodu používající dva IR detektory – rychlý a relativně pomalý. Pro pouze jeden detektor nemusí všechny části fungovat správně.

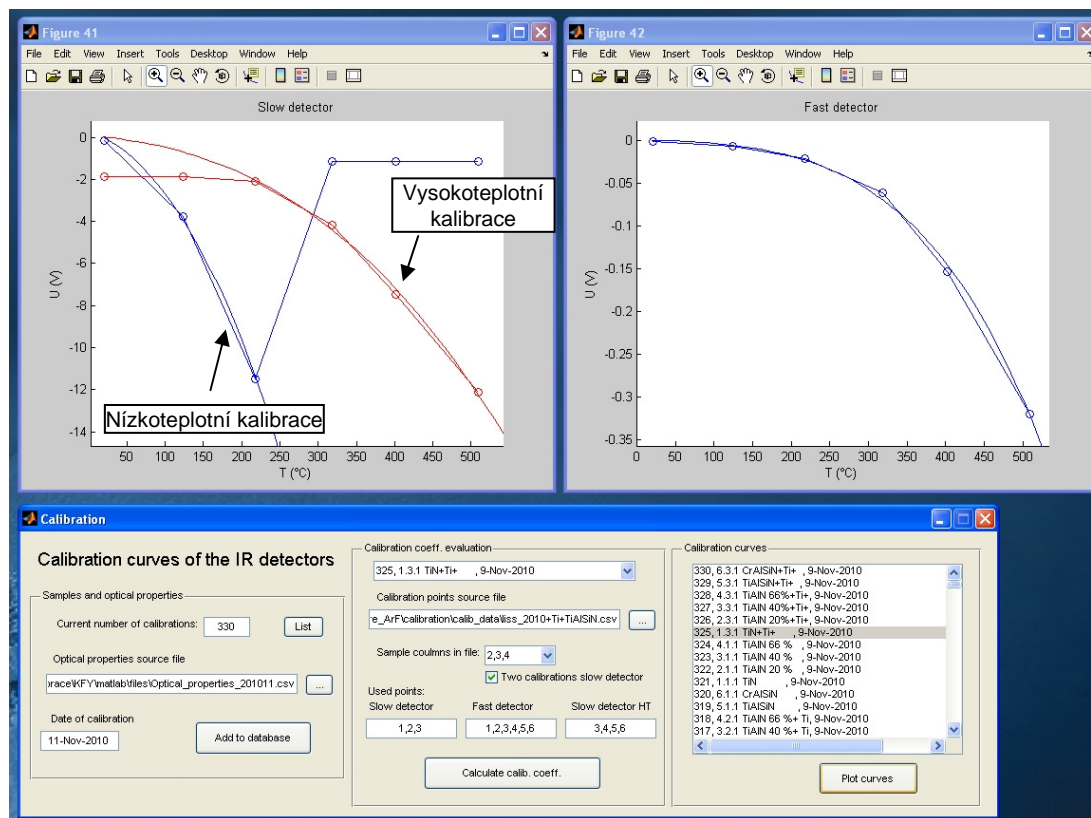
2. Popis softwaru

2.4 Calibration

Okno „Calibration“ slouží pro načtení kalibračních dat (dvojice: teplota, napětí) a nafitování teoretických kalibračních křivek.

Okno má tři části:

- „Samples and Optical properties“ slouží pro načtení názvu vzorků, jejich pohltivosti v UV a IR oblasti spektra, přiřazení kalibračního čísla a datu kalibrace
- „Calibration coeff. evaluation“ slouží pro vyhodnocení kalibračních koeficientů pro jednotlivé kalibrace (vzorky). Načítají se měřené kalibrační křivky a na základě vybraných bodů se fituje automaticky teoretická křivka na měřenou. Pro pomalý detektor je možné zpracovat dvě kalibrace: nízkoteplotní a vysokoteplotní (HT).
- „Calibration curves“ umožňuje prohlížení výsledných křivek a slouží hlavně pro kontrolu správného výběru bodů pro fitování a potenciálních chyb v zadání dat.



Okno „Calibration“ se zadanými daty a výslednými grafy. Použití dvou kalibrací.

2. Popis softwaru

2.4 Calibration

Microsoft Excel - vrstvy_liss_201011.xls

Zadání souboru s kalibračními body.

	A	B	C	D	E	F	G
1	20101109	1.3.1			2.3.1		
2	teplota	PV	PV100	PV_HT	PV	PV100	PV_HT
3	21	1.02	0.00249		1.02	0.00248	
4	124	-2.61	0.00796		-2.66	0.00808	
5	218	-10.31	0.0227	-0.214	-10.4	0.023	-0.233
6	318		0.0624	-2.32		0.0626	-2.33
7	402		0.154	-5.59		0.156	-5.64
8	509		0.32	-10.26		0.322	-10.38

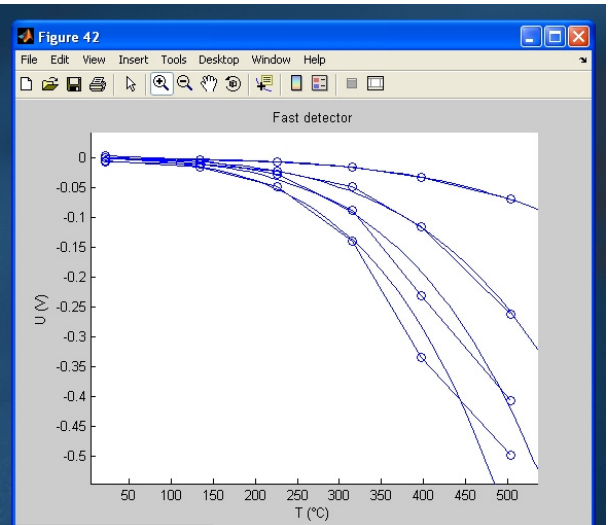
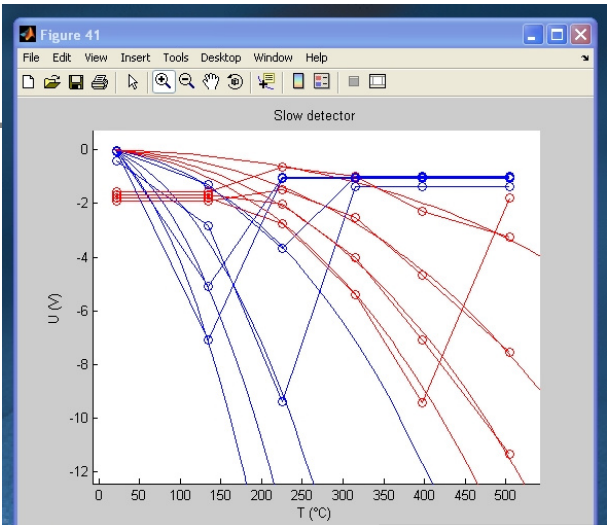
Formát: Teplota; VZ1 napětí pomalý detektor nízkoteplotní; rychlý detektor; pomalý vysokoteplotní; VZ2 ...

Lister - [e:\users\jmartan\prace\WFY\mesure_ArF\calibration\calib_data\liss_2010-Ti+TiAlSiN.csv]

```

21;1.02;0.00249;;1.02;0.00248;;1.02;0.00249;;1.02;0.00248;;1.02;0.00245;;1.02;0.00246;
124;-2.61;0.00796;;-2.66;0.00808;;-2.13;0.00721;;-2.01;0.00703;;-1.93;0.00693;;-2.66;0.00815;
218;-10.31;0.0227;-0.214;-10.4;0.023;-0.233;-9.74;0.0216;-0.139;-9.31;0.0207;-0.0849;-9.07;0.0202;-0.0235;-10.19;0.0232;-0.215;
318;0.062;-2.31;0.0629;-2.33;0.145;-5.32;0.158;-5.64;0.3;0.304;-9.797;0.325;-10.46
    
```

Soubor uložen v textovém formátu .csv bez hlaviček



Zobrazení křivek pro více vzorků

Calibration

Calibration curves of the IR detectors

Calibration coeff. evaluation: 330, 6.3.1 CrAlSiN+Ti+, 9-Nov-2010

Calibration points source file: ..\mesure_ArF\calibration\calib_data*.csv

Sample columns in file: #, #

Used points: Slow detector, Fast detector, Slow detector HT

Calculate calib. coeff.

Calibration curves:

```

328, 4.3.1 TiAlN 66%+Ti+, 9-Nov-2010
327, 3.3.1 TiAlN 40%+Ti+, 9-Nov-2010
326, 2.3.1 TiAlN 20%+Ti+, 9-Nov-2010
325, 1.3.1 TiN+Ti+, 9-Nov-2010
324, 4.1.1 TiAlN 66%+, 9-Nov-2010
323, 3.1.1 TiAlN 40%+, 9-Nov-2010
322, 2.1.1 TiAlN 20%+, 9-Nov-2010
321, 1.1.1 TiN, 9-Nov-2010
320, 6.1.1 CrAlSiN, 9-Nov-2010
319, 5.1.1 TiAlSiN, 9-Nov-2010
318, 4.2.1 TiAlN 66%+Ti, 9-Nov-2010
317, 3.2.1 TiAlN 40%+Ti, 9-Nov-2010
316, 2.2.1 TiAlN 20%+Ti, 9-Nov-2010
315, 1.2.1 TiN+Ti, 9-Nov-2010
    
```

Plot curves

Calibration

Calibration curves of the IR detectors

Calibration coeff. evaluation: 312, 107/Si-ZrO2-1300C, 01_09_2010

Calibration points source file: e_ArF\calibration\calib_data\liss_2010+Ti+TiAlSiN.csv

Sample columns in file: 18,19

Used points: Slow detector, Fast detector, Slow detector HT

1,2,3,4,5,6

1,2,3,4,5,6

#

calib. coeff.

Plot curves

Použití pouze jedné kalibrace

Lister - [e:\users\jmartan\prace\WFY\matlab\files]

```

313;5.2.1 TiAlSiN+Ti ;0.965;0.318
314;6.2.1 CrAlSiN+Ti ;0.956;0.255
315;1.2.1 TiN + Ti ;0.947;0.195
316;2.2.1 TiAlN 20%+ Ti;0.912;0.224
317;3.2.1 TiAlN 40%+ Ti;0.956;0.264
318;4.2.1 TiAlN 66%+Ti;0.943;0.376
319;5.1.1 CrAlSiN+Ti;0.902;0.358
320;6.1.1 CrAlSiN+Ti;0.943;0.376
321;1.1.1 TiN ;0.947;0.195
322;2.1.1 TiAlN 20%+Ti;0.912;0.224
323;3.1.1 TiAlN 40%+Ti;0.956;0.268
    
```

Příklad souboru „Optical_properties_201011.csv“.

Formát: Č. kalibrace; název vzorku; a_UV 193 nm; a_IR 7-11um

329;5.3.1 TiAlSiN+Ti+ ;0.943;0.376
330;6.3.1 CrAlSiN+Ti+ ;0.902;0.358

2. Popis softwaru

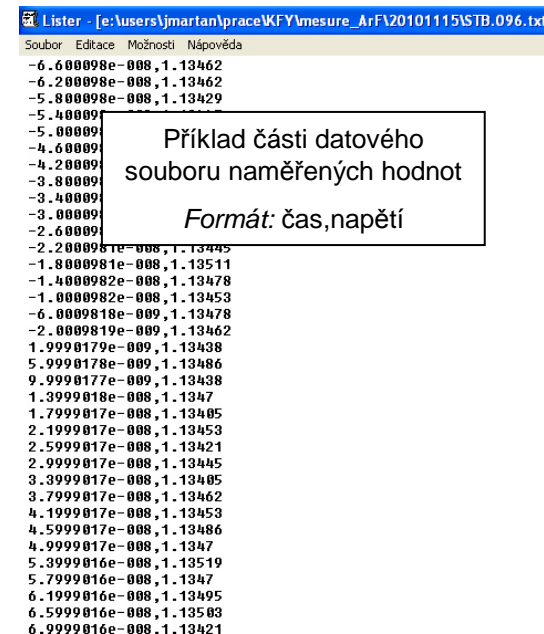
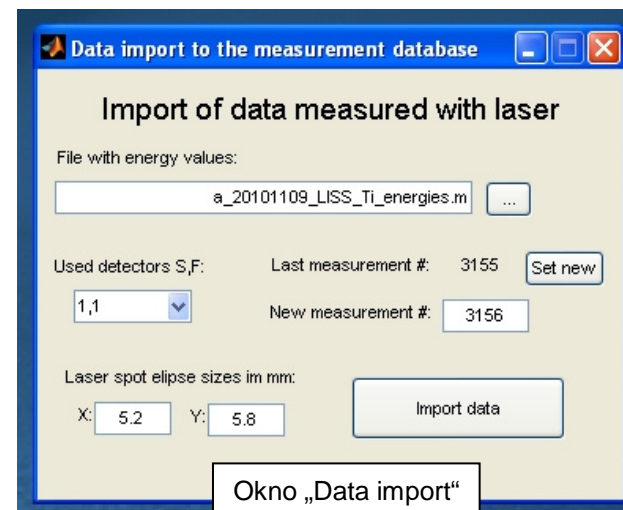
2.5 Data import

Okno „Data import“ slouží pro načtení měření provedených s laserem do databáze měření.

Načítané soubory z osciloskopu obsahují napětí v závislosti na čase reprezentující teplotu vzorku při a po laserovém pulzu. Tyto soubory „*.txt“ jsou překonvertovány do úspornější podoby „*.dat“ s názvem podle čísla měření v databázi.

Do databáze se načítají hodnoty ostatních veličin: hustota energie laserového pulzu pro každé měření, počáteční teplota vzorku, propustnost okénka do vakuové komory a kalibrační číslo vzorku. Dále pak názvy zdrojových souborů měření pro oba detektory a zda je měření provedeno podle vysokoteplotní kalibrace. Název vzorku je přebrán z databáze kalibrací.

Na začátku se zvolí soubor s hodnotami energie pulzů. Ostatní soubory musí mít stejný název a pouze místo „energies“ jsou následující názvy: file_Slow, file_Fast, calib_num, transm, temp, HT. Soubory musí být připravené předem (jejich formát viz dále). Nastaví se číslo měření od kterého chceme začít načítat. Pokud je menší než poslední měření, pak to znamená, že chcete přepisovat starší měření. Vybere se zda se používají oba detektory nebo jen jeden a zadá se velikost elipsy laserového spotu.



2. Popis softwaru

2.5 Data import



```
1 - calib_num=[313
2   313
3   313
4   313
5   313
6   313
7   314
8   314
9   314
10  314

...

92  318
93  318
94  313
95  313
96  313
97  313
98  314
99  314
100 314
101 314
102 ];

1 - e=[260
2   266
3   262
4   255
5   266
6   259
7   260
8   253
9   257
10  257

...

92  231
93  234
94  245
95  238
96  235
97  225
98  232
99  232
100 224
101 222
102 ];

1 - soubor_PV100=[ '..\mesure_ArF\20101109\sta.000.txt ';
2   '..\mesure_ArF\20101109\sta.001.txt ';
3   '..\mesure_ArF\20101109\sta.002.txt ';
4   '..\mesure_ArF\20101109\sta.003.txt ';
5   '..\mesure_ArF\20101109\sta.004.txt ';
6   '..\mesure_ArF\20101109\sta.005.txt ';
7   '..\mesure_ArF\20101109\sta.010.txt ';
8   '..\mesure_ArF\20101109\sta.011.txt ';
9   '..\mesure_ArF\20101109\sta.012.txt ';
10  '..\mesure_ArF\20101109\sta.013.txt ';

...

92  '..\mesure_ArF\20101109\sta.095.txt ';
93  '..\mesure_ArF\20101109\sta.096.txt ';
94  '..\mesure_ArF\20101109\sta.097.txt ';
95  '..\mesure_ArF\20101109\sta.098.txt ';
96  '..\mesure_ArF\20101109\sta.099.txt ';
97  '..\mesure_ArF\20101109\sta.100.txt ';
98  '..\mesure_ArF\20101109\sta.101.txt ';
99  '..\mesure_ArF\20101109\sta.102.txt ';
100 '..\mesure_ArF\20101109\sta.103.txt ';
101 '..\mesure_ArF\20101109\sta.104.txt ';
102 ];

1 - soubor_PV=[ '..\mesure_ArF\20101109\stb.000.txt ';
2   '..\mesure_ArF\20101109\stb.001.txt ';
3   '..\mesure_ArF\20101109\stb.002.txt ';
4   '..\mesure_ArF\20101109\stb.003.txt ';
5   '..\mesure_ArF\20101109\stb.004.txt ';
6   '..\mesure_ArF\20101109\stb.005.txt ';
7   '..\mesure_ArF\20101109\stb.010.txt ';
8   '..\mesure_ArF\20101109\stb.011.txt ';
9   '..\mesure_ArF\20101109\stb.012.txt ';
10  '..\mesure_ArF\20101109\stb.013.txt ';

...

92  '..\mesure_ArF\20101109\stb.095.txt ';
93  '..\mesure_ArF\20101109\stb.096.txt ';
94  '..\mesure_ArF\20101109\stb.097.txt ';
95  '..\mesure_ArF\20101109\stb.098.txt ';
96  '..\mesure_ArF\20101109\stb.099.txt ';
97  '..\mesure_ArF\20101109\stb.100.txt ';
98  '..\mesure_ArF\20101109\stb.101.txt ';
99  '..\mesure_ArF\20101109\stb.102.txt ';
100 '..\mesure_ArF\20101109\stb.103.txt ';
101 '..\mesure_ArF\20101109\stb.104.txt ';
102 ];
```

```
1 - HT=[0
2   0
3   0
4   0
5   0
6   0
7   0
8   0
9   0
10  0

...

92  1
93  1
94  1
95  1
96  1
97  1
98  1
99  1
100 1
101 1
102 ];

1 - T_ini=[22
2   22
3   22
4   22
5   22
6   22
7   22
8   22
9   22
10  22

...

92  510
93  510
94  510
95  510
96  510
97  510
98  510
99  510
100 510
101 510
102 ];

1 - transmission=[0.724
2   0.724
3   0.724
4   0.724
5   0.724
6   0.724
7   0.724
8   0.724
9   0.724
10  0.724

...

92  0.724
93  0.724
94  0.724
95  0.724
96  0.724
97  0.724
98  0.724
99  0.724
100 0.724
101 0.724
102 ];
```

Formát vstupních souborů je m-file (*.m). Každý obsahuje zadání jedné matice v jazyku Matlab.

2. Popis softwaru

2.5 Data import

Po spuštění se data postupně načítají a jednotlivé položky databáze se pro kontrolu vypisují v okně Matlabu: „Command Window“. Položky se automaticky uloží do databáze.

The screenshot displays a MATLAB Command Window on the left, showing a list of data entries. Each entry consists of a line number, a sample ID, material composition, detector type, wavelength, energy value, temperature, and a date. The entries range from 3119 to 3155. On the right, a dialog box titled 'Data import to the measurement database' is open. It contains the following fields and controls:

- File with energy values:** A text field containing 'a_20101109_LISS_Ti_energies.m' and a browse button (...).
- Used detectors S,F:** A dropdown menu showing '1,1'.
- Last measurement #:** A text field with '3155' and a 'Set new' button.
- New measurement #:** A text field with '3055'.
- Laser spot ellipse sizes in mm:** Two text fields for 'X:' (value 5.2) and 'Y:' (value 5.8).
- Import data:** A large button.
- Data imported:** A status message at the bottom of the dialog.

A callout box at the bottom right of the screenshot contains the text: "Příklad výstupu po načtení souborů".

2. Popis softwaru

2.6 Data processing

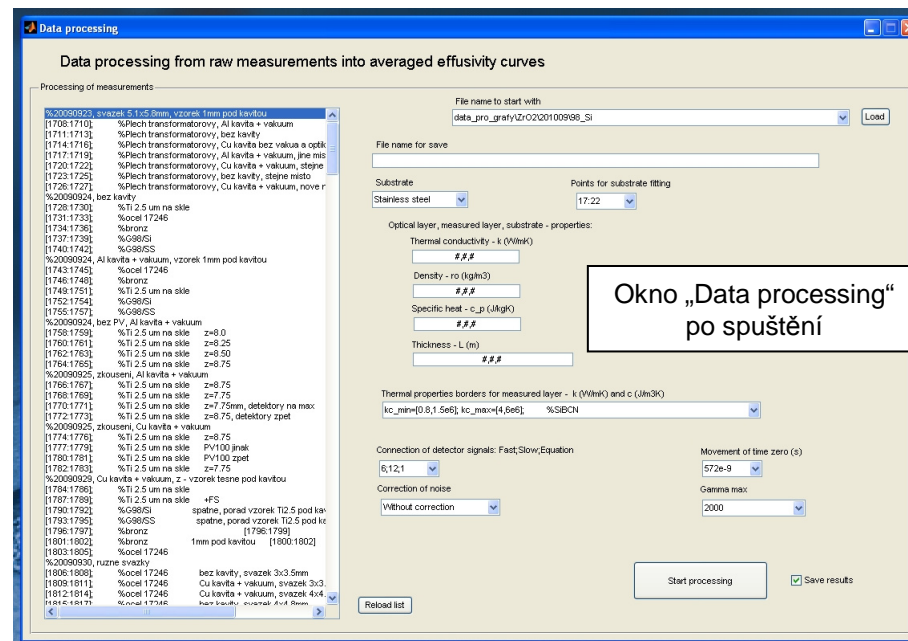
Okno „Data processing“ slouží pro numerické zpracování dat a pro výpočty teploty a efuzivity z naměřených napětí.

V programu nejprve probíhají úpravy signálu: posunutí počátečního napětí detektoru na nulu, posunutí času aby začínala teplotní odezva na laser v čase $t=0$, korekce rušení od laseru pomocí zvoleného souboru a logaritmické průměrování signálu. Následně je upravený napěťový signál U převeden na teplotu T pomocí kalibrační křivky a z teplotního rozdílu ΔT je spočtena zdánlivá efuzivita e pro oba detektory pomocí vzorce:

$$e = \frac{Q}{\Delta T(t) \sqrt{\pi}}$$

kde Q je absorbovaná hustota energie laserového pulzu.

Po vypočtení efuzivity je prováděn fit měřené efuzivity substrátu pomocí pomalého detektoru na teoretickou hodnotu pro danou teplotu. Pro tento fit je třeba zadat tepelné vlastnosti všech tří vrstev (přidavná, měřená, substrát), body křivky na které se bude fitovat, zvolit substrát, hranice pro hledanou tepelnou vodivost a kapacitu vrstvy a počet gamma potřebných pro výpočet (závisí na tepelných vlastnostech; čím vyšší, tím delší výpočet; souvisí se součtem řady čísel v analytickém modelu). Fituje se násobná konstanta. Poté se fituje podobná konstanta pro rychlý detektor, tak aby spolu obě křivky souhlasily v jejich překryvu. Oba fity by měly za dobrého měření provádět změnu do 10% hodnoty efuzivity.



2. Popis softwaru

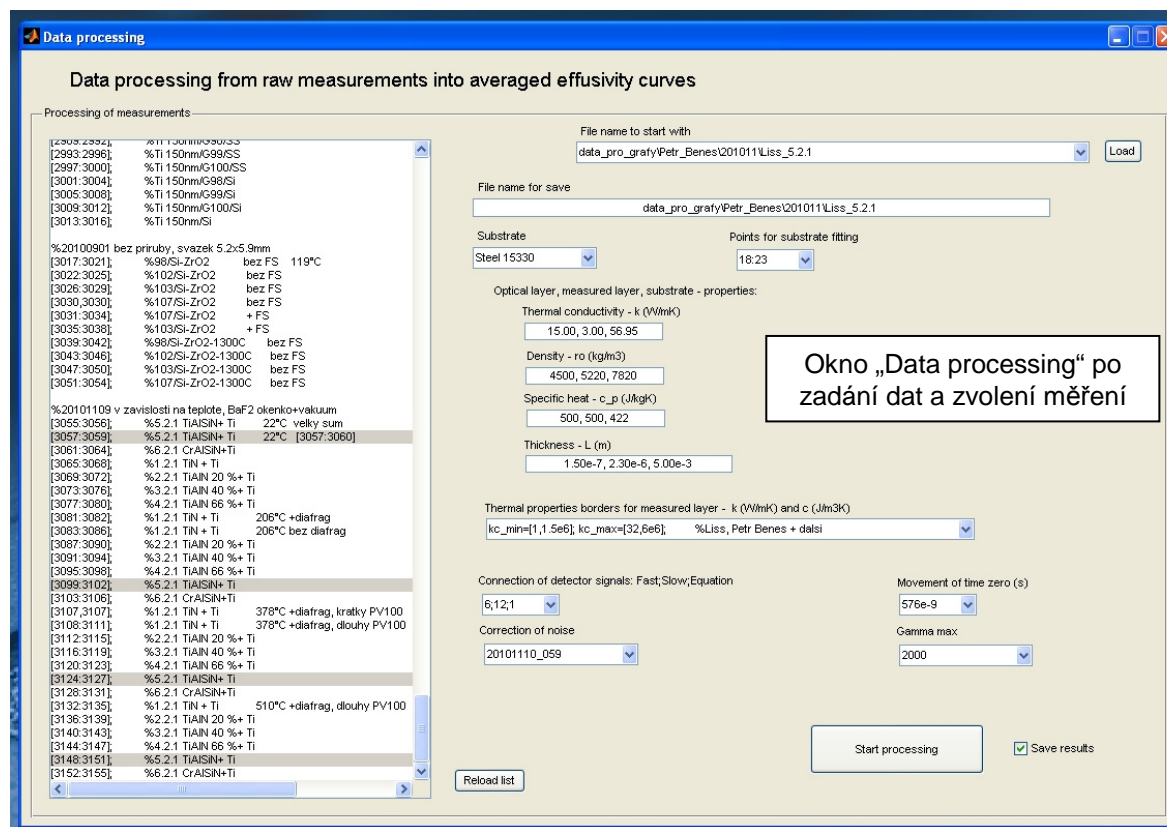
2.6 Data processing

V seznamu pozic měření se vybere jedna nebo více řádek patřící k jednomu vzorku. Je tak možné zpracovávat najednou jeden vzorek za více teplot měření. Seznam je uložen v textovém souboru „positionGroups.txt“ a je možné ho upravovat – přidávat komentáře, rozdělovat měření na části – v nezávislém textovém editoru a pak ho znovu načíst pomocí tlačítka „Reload list“.

Pomocí zaškrtačacího políčka je také možné zvolit variantu pouze výpočtu a ukázání grafů bez uložení vypočtených dat do souborů.

Korekce rušení od laseru se musí připravit předem a jsou to zprůměrované naměřené napětí při laserovém pulzu se zakrytým laserovým svazkem.

Je možné nahrát dříve zadané měření pomocí tlačítka „Load“. Nahraje se pouze název souboru a vlastnosti tří vrstev: k, c, ro a L.



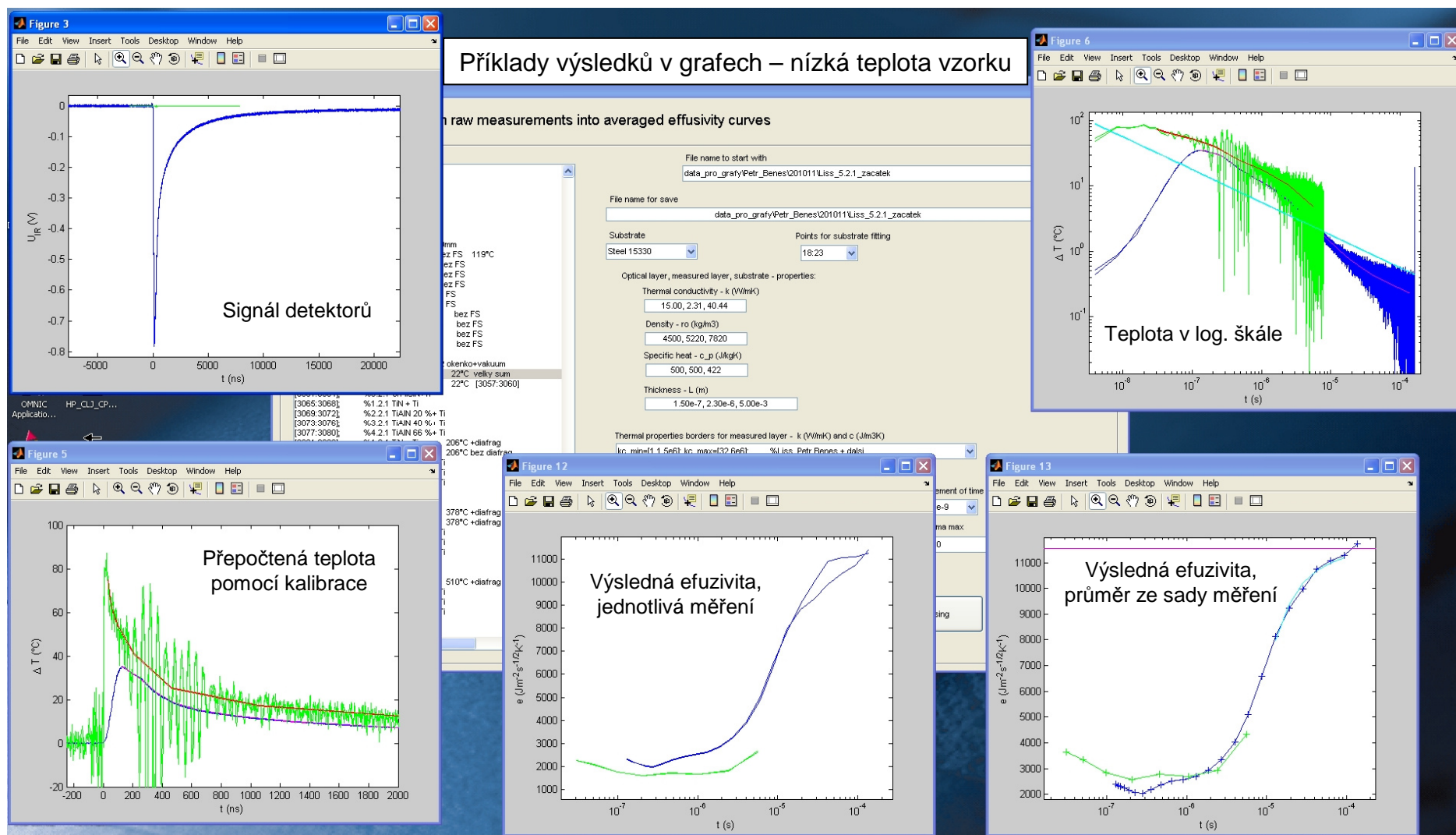
Okno „Data processing“ po zadání dat a zvolení měření

Korekce rušení jsou uloženy v souborech „noise_2*.mat“ v adresáři „files“ a obsahují tři proměnné: „nPv_final“, „nPv100_final_short“ a „nPv100_final_long“. Proměnné musí mít stejnou délku jako měřené soubory minus 3 první hodnoty. Pozice nuly v čase musí být také stejná.

2. Popis softwaru

2.6 Data processing

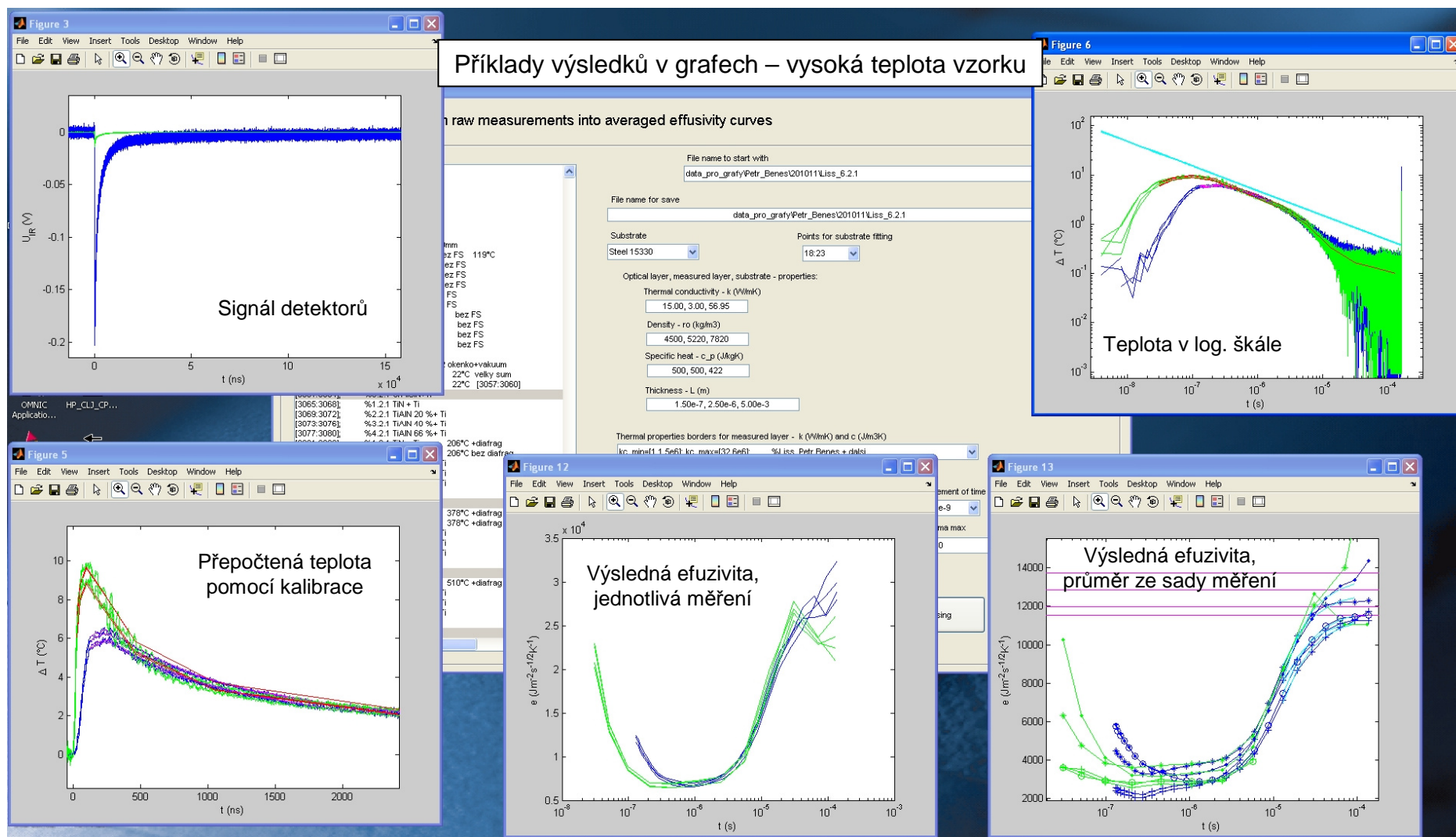
Po spuštění probíhají zpracování jednotlivých sad měření a pro poslední sadu se zobrazí grafy 3, 5, a 6. Pro každou sadu se průběžně zobrazuje graf 12 a výsledky všech řad jsou zobrazeny v grafu 13. Jedna křivka v grafu 13 je průměr ze sady křivek z grafu 12. Ukládány jsou výsledné křivky (graf 13).



2. Popis softwaru

2.6 Data processing

Grafy: 3) měřené napětí, 5) teplotní nárůst, 6) teplotní nárůst v logaritmické škále, 12) zdánlivá efuzivita v semi-logaritmické škále – jedna sada měření; bez fitování, 13) výsledná efuzivita po fitování; pro všechny sady



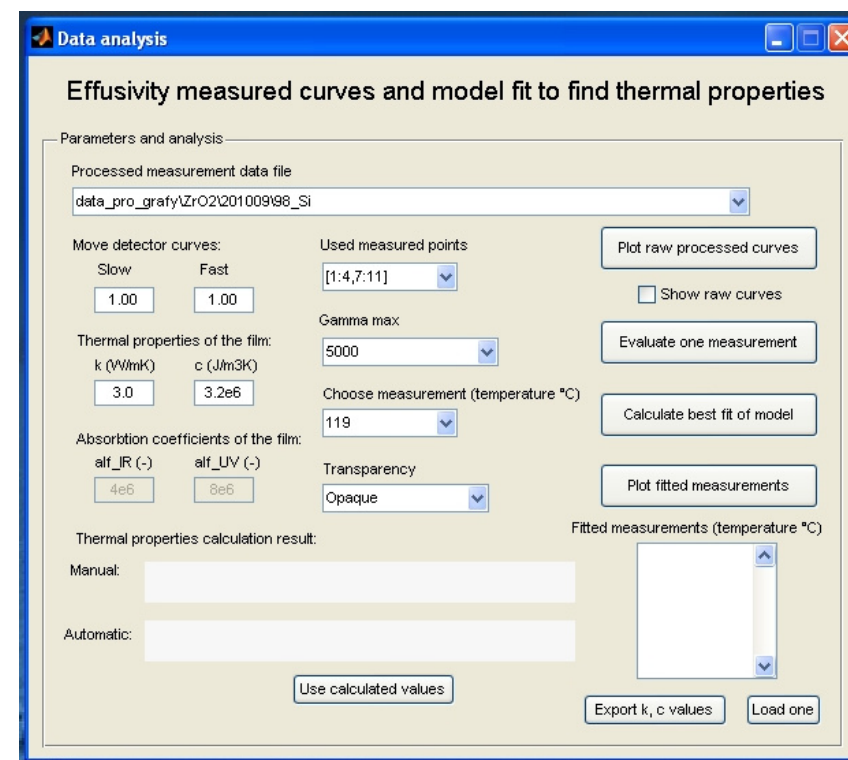
2. Popis softwaru

2.7 Analysis

Okno „Analysis“ slouží pro analýzu naměřených dat. Jde o zobrazení zdánlivých efuzivit, výpočet modelové křivky efuzivity, automatické fitování modelové křivky na naměřená data a zobrazení výsledků.

Vstupem do programu jsou zpracovaná data z předchozího kroku. Seznam zpracovaných měření je nahrán do menu. Po výběru měření se automaticky zobrazí do menu výběru teploty pro jaké teploty byla provedena měření a do menu fitovaných měření pro jaké teploty byly již provedeny fity.

V okně je možno nastavovat posuny měřených křivek pro oba detektory pomocí násobné konstanty, hodnoty tepelné vodivosti a měrné objemové tepelné kapacity zkoumané vrstvy a pro případ polopropustných vrstev také koeficienty absorpce v IR a UV oblasti. Dále je možno zvolit body z jakých se budou vyhodnocovat odchylky měřené a vypočtené efuzivity, maximální počet gamma (viz výše) a optickou propustnost či nepropustnost vzorku. Pro poslední zmíněnou volbu se výsledky ukládají odděleně.



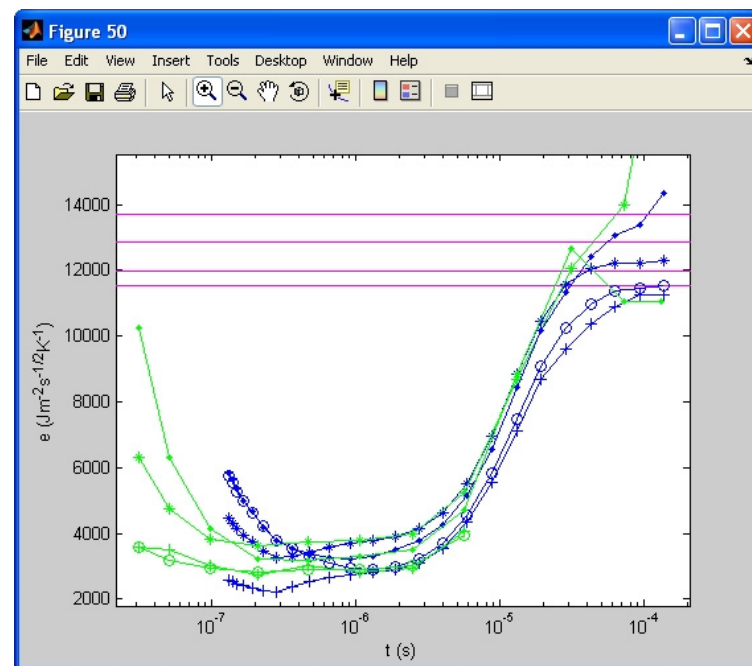
Okno „Data analysis“ po spuštění

2. Popis softwaru

2.7 Analysis

Pomocí tlačítka „Raw processed curves“ je možné zobrazit hrubá zpracovaná měření. Zobrazí se do grafu č. 50, a to pro všechny sady (teploty) které byly zpracovány najednou. Pokud je zaškrtnuto „Show raw curves“ zobrazí se také křivky před fitováním substrátu a spojováním detektorů (tečkovaně).

Na toto zobrazení nemá vliv žádné jiné nastavení v okně.



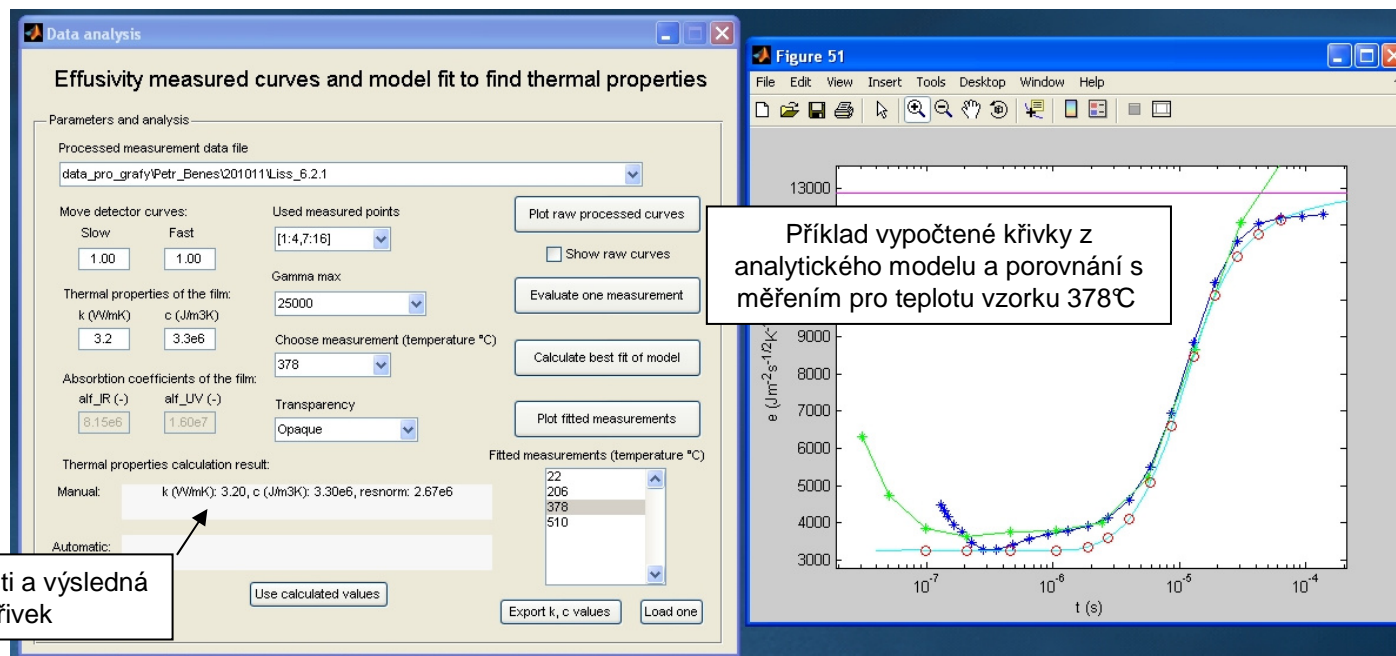
Zobrazená hrubá zpracovaná měření

2. Popis softwaru

2.7 Analysis

Pomocí tlačítka „Evaluate one measurement“ je spuštěn výpočet modelu s použitím nastavených parametrů. Do grafu č. 51 se zobrazí posunuté měřené efuzivity a vypočtená křivka efuzivity z modelu. Zde také funguje políčko „Show raw curves“. Vypočtená křivka používá parametry substrátu a pomocné vrstvy a tloušťku měřené vrstvy zadané v kroku „Data processing“. Jde o výpočet pro zvolenou teplotu (jedna sada měření)

Vypočtená data jsou uložena jak do Matlabovského souboru *.mat tak do textových souborů pro snazší prohlížení výsledků. Výsledky tepelné vodivosti k a měrné objemové tepelné kapacity c jsou také zobrazeny v políčku výsledků spolu se součtem čtverců odchylek pro porovnání shody křivek.

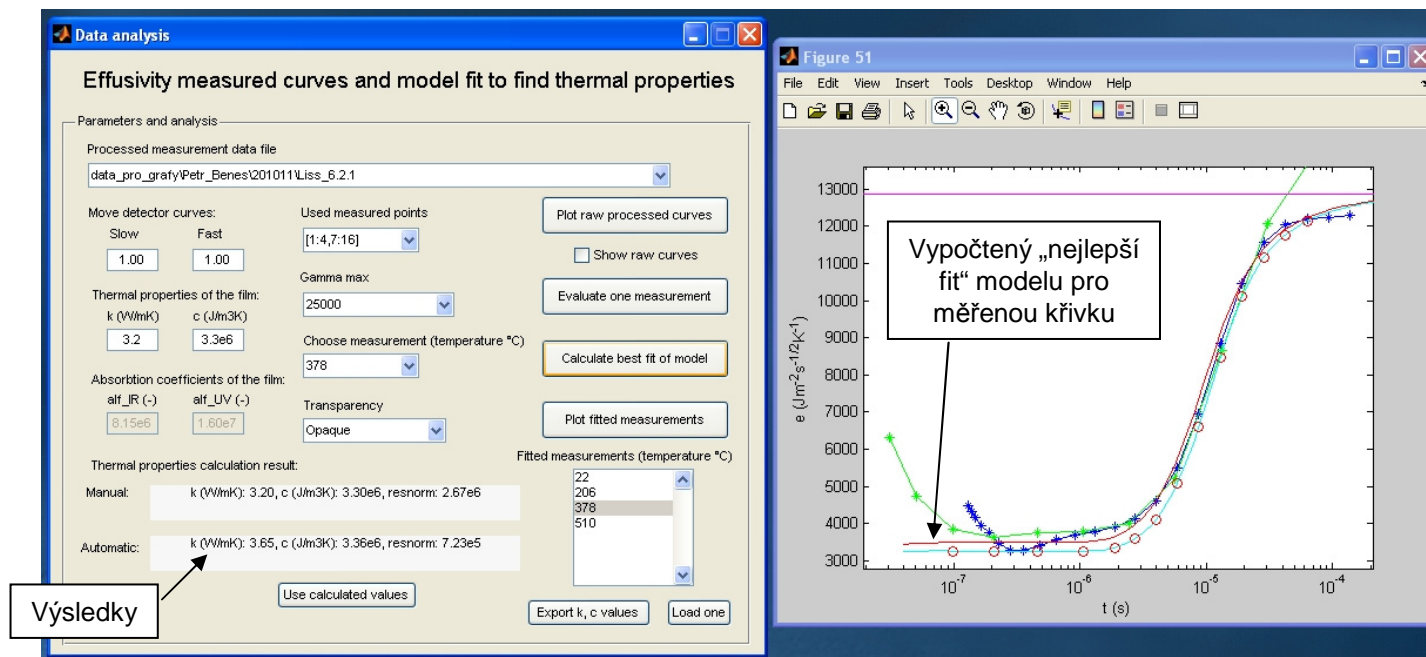


2. Popis softwaru

2.7 Analysis

Pomocí tlačítka „Calculate best fit of model“ je spuštěn výpočet inverzní úlohy – vypočtení parametrů modelu na základě porovnání s jeho výsledkem. Model je iterativně spouštěn a pomocí Gauss-Newtonovy numerické metody (nelineární fitování pomocí metody nejmenších čtverců) je hledána nejlepší shoda výsledku modelu s měřenou křivkou efuzivity.

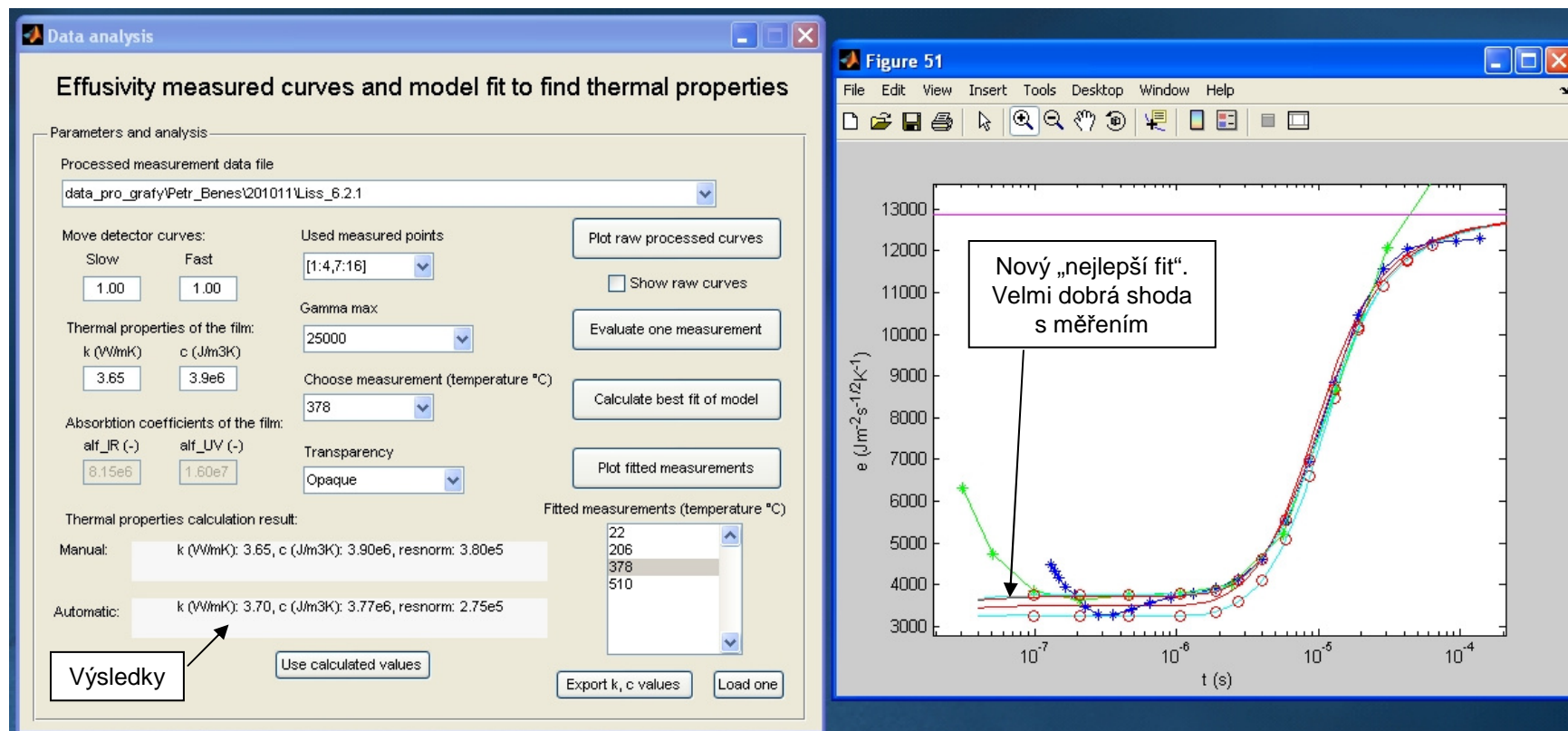
Parametry pro výpočet jsou použité z uloženého souboru pro daný vzorek a teplotu (z „Evaluate one measurement“ výpočtu). Nepoužívají se zde parametry nastavené v menu. Výsledek výpočtu se zobrazí v políčku automatického fitování a může se porovnat s předchozím výsledkem ručního fitování. Pokud je vhodný, můžeme pomocí tlačítka „Use calculated values“ přesunout vypočtené hodnoty do zadávacích políček. Potom pro uložení těchto výsledků znovu spustíme „Evaluate one measurement“.



2. Popis softwaru

2.7 Analysis

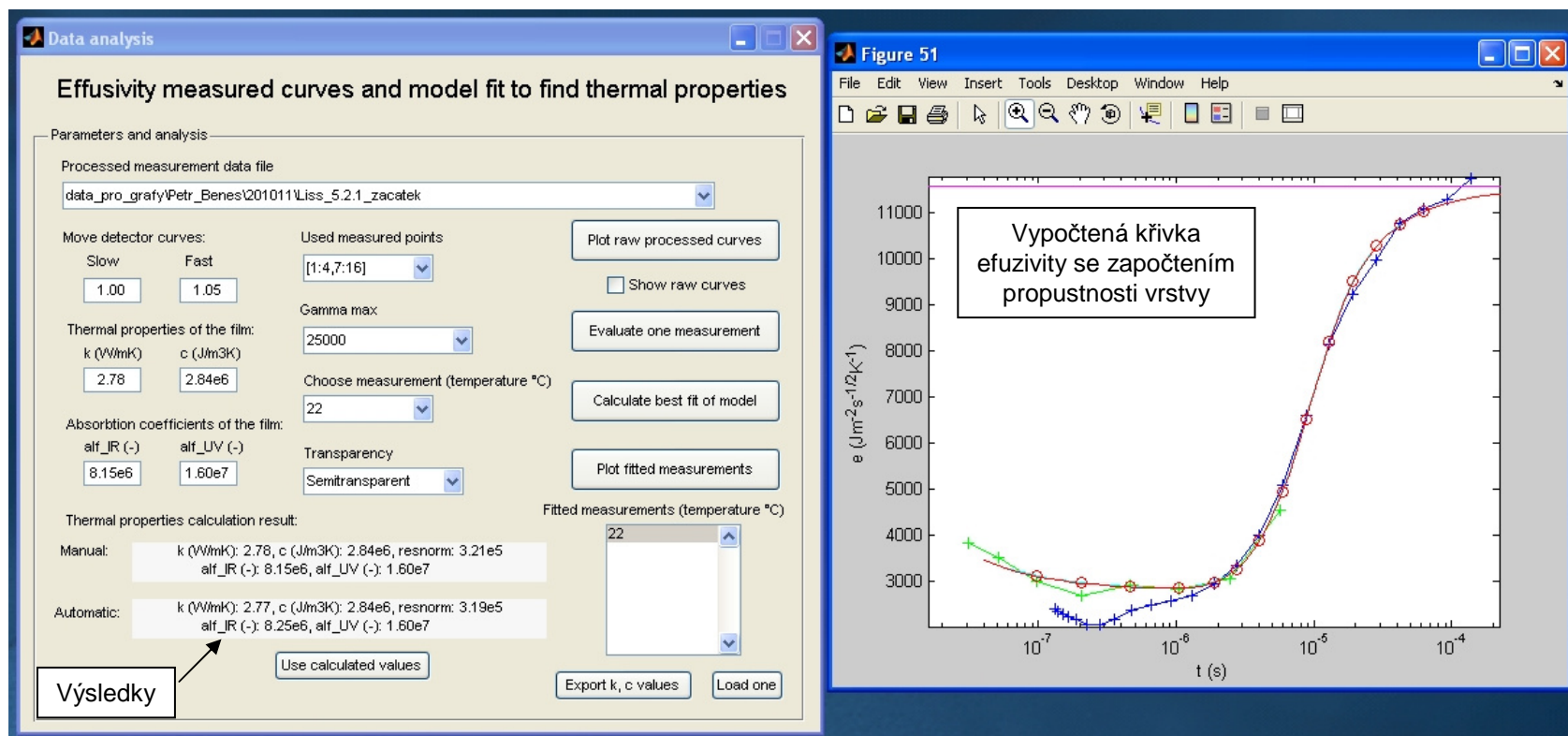
Pokud však není fitovaná křivka dostatečně blízko měřené, můžeme spustit výpočet „Evaluate one measurement“ pro jiné vstupní hodnoty a pak znovu „Calculate best fit of model“. Výsledek může být lepší, protože fitování závisí na počátečním nastavení a někdy špatně konverguje.



2. Popis softwaru

2.7 Analysis

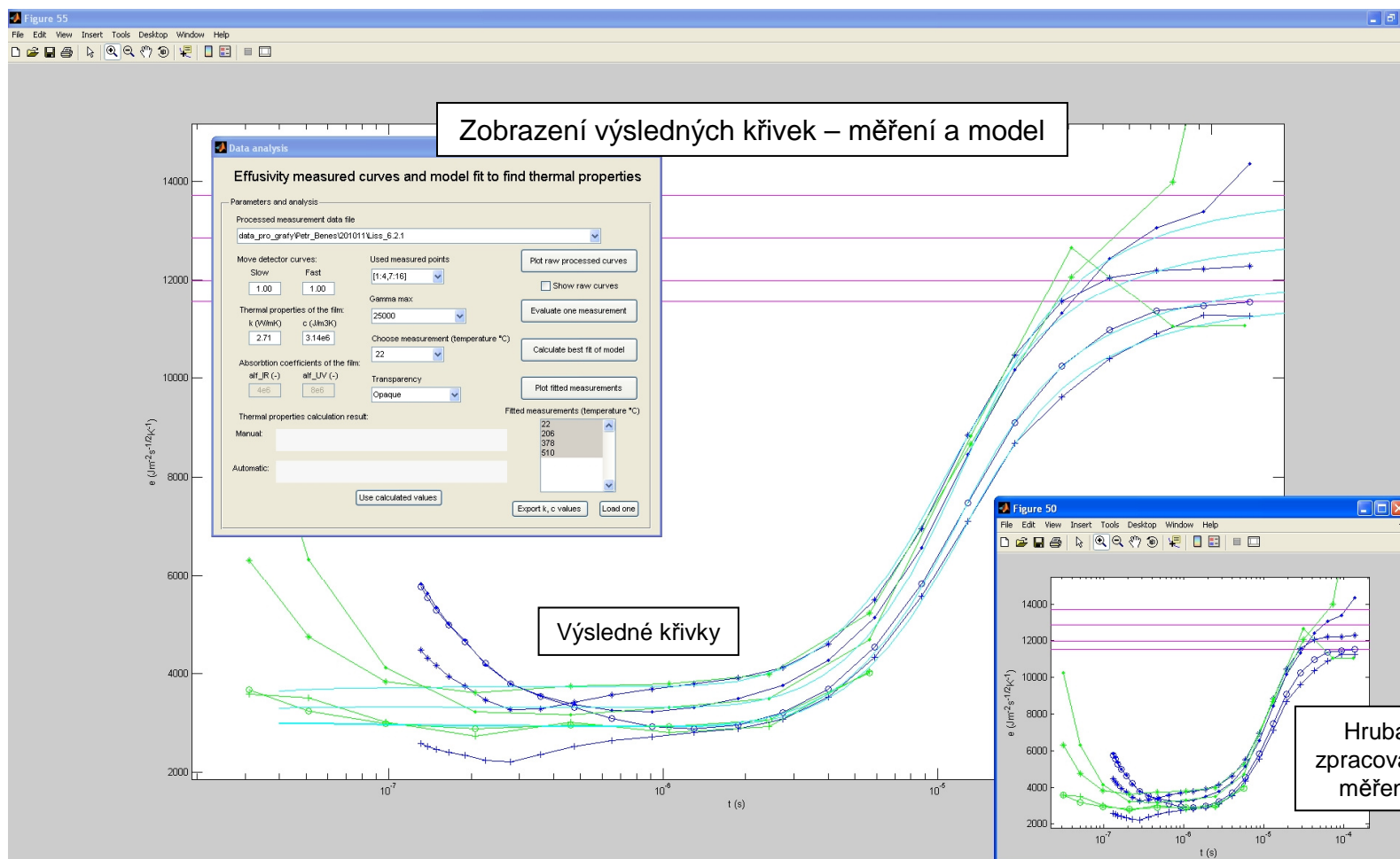
Obdobně se provádějí výpočty pro propustnou vrstvu, kde se používá stejný model, ale je k němu přidána korekce propustnosti. Tato korekce není přesná, ale pro přibližný výsledek se dá použít. Při tomto výpočtu se ještě zadávají propustnosti a v inverzní úloze se hledá mimo tepelných vlastností jedna z nich – α_{IR} .



2. Popis softwaru

2.7 Analysis

Výsledné křivky je možné zobrazit pomocí „Plot fitted measurements“. Zobrazí se v grafu 55. Zobrazit se může jedna i více křivek najednou.



2. Popis softwaru

2.7 Analysis

Když jsou vypočteny tepelné vlastnosti pro několik teplot, je možno exportovat vyhodnocenou tepelnou vodivost a kapacitu (případně propustnosti) tlačítkem „Export k, c values“ do jednoho souboru pro daný vzorek. Soubor je v adresáři vyhodnocení pro daný vzorek a má název vzorku + „_results.txt“

Pomocí tlačítka „Load one“ se nahrají vypočtené a zadané hodnoty do menu pro zvolenou teplotu v seznamu fitovaných měření.

2. Popis softwaru

2.8 Soubory

Software se skládá z velkého množství souborů. Jde o zobrazovaná menu, výpočtové funkce, databázové soubory a vstupní a výstupní soubory.

Programy:

analysis	fig
calibration	fig
dataImport	fig
dataProcessing	fig
PPRa	fig
QuestionDialog	fig
addCalibCurves	m
analysis	m
calculateCalibCoeff	m
calibration	m
dataImport	m
dataProcessing	m
findgama2	m
fit_efuz	m
fit_efuz_substr	m
fit_efuz_transm	m
photothermal_3layers_fun	m
photothermal_3layers_fun_transm	m
plotCalibCurves	m
plotEifus	m
positionGroups	m
PPRa	m
processArFmulti	m
QuestionDialog	m
readDataArF	m
sumgama2	m

Databáze a pomocné soubory s daty:

kalib_dtb_KFY_curve_mix_1_2	mat
kalib_dtb_KFY_curve_PV_4_PV100_6	mat
kalib_dtb_KFY_curve_strma200912	mat
kalib_dtb_KFY_curve_strma200912_corrDTGS	mat
mereni_ArF	mat
noise_200910	mat
noise_201009	mat
noise_20101109_009	mat
noise_20101110_059	mat
noise_20101111_051	mat
noise_20101111_079	mat
noise_20101112_063	mat
noise_20101115_099	mat
result_opaque	mat
result_transm	mat
samples_processed	mat
thermal_15330_R18	mat
thermal_Si_SS	mat
time_comp_efuz	mat
positionGroups	txt

Vstupní a výstupní soubory, příklad:

a_20101109_LISS_Ti_calib_num	m
a_20101109_LISS_Ti_energies	m
a_20101109_LISS_Ti_file_Fast	m
a_20101109_LISS_Ti_file_Slow	m
a_20101109_LISS_Ti_HT	m
a_20101109_LISS_Ti_temp	m
a_20101109_LISS_Ti_transm	m
Liss_5.2.1_results	txt
Liss_5.2.1_4_510°C	mat
Liss_5.2.1_4_510°C_fit_efuz	txt
Liss_5.2.1_4_510°C_PV_final	txt
Liss_5.2.1_4_510°C_PV100_final	txt
Liss_5.2.1_4_510°C_thermal_prop	txt
Liss_5.2.1_2_206°C	mat
Liss_5.2.1_2_206°C_fit_efuz	txt
Liss_5.2.1_2_206°C_PV_final	txt
Liss_5.2.1_2_206°C_PV100_final	txt
Liss_5.2.1_2_206°C_thermal_prop	txt
[Liss_3.2.1]	
[Liss_5.2.1]	
[Liss_5.2.1_transm]	
[Liss_5.2.1_zacatek]	
[Liss_5.2.1_zacatek_transm]	
[Liss_6.2.1]	
Liss_1.2.1	mat
Liss_1.2.1_cond	mat
Liss_1.2.1_substrate_fit	txt
Liss_2.2.1	mat
Liss_2.2.1_cond	mat
Liss_2.2.1_substrate_fit	txt
Liss_5.2.1	mat
Liss_5.2.1_cond	mat
Liss_5.2.1_substrate_fit	txt

Měřené křivky ve složce „data_ArF“:

3148_PV	dat
3148_PV100	dat
3149_PV	dat
3149_PV100	dat

2. Popis softwaru

2.9 Instalace a spuštění

Software ve formě kódovaných zdrojových programů jazyka Matlab, tzv. p-files (*.p) a je přímo spustitelný v prostředí Matlab a jeho spuštění nevyžaduje žádnou další speciální instalaci

Spuštění: příkaz „PPRa“ v příkazové řádce prostředí Matlab (je nutné, aby všechny součásti byly v aktuálním adresáři nebo k nim byla nastavena cesta v Matlabu). Soubory s korekcí rušení musí být ve složce „files“ umístěné v aktuální pracovní složce.

Software lze konvertovat do formy spustitelného souboru pro MS Windows (*.exe). Pro konverzi je nutný toolbox Compiler pro Matlab. Je nutná instalace Matlab Run Time "MCRInstaller.exe" (volně k dispozici). Spouští se pak soubor „PPRa.exe“. Spustit lze pouze na platformě MS Windows.

3. Literatura

- [1] J. Martan, O. Herve, V. Lang, Two-detector measurement system of pulse photothermal radiometry for the investigation of the thermal properties of thin films, *J. Appl. Phys.* 102, 064903, (2007).
- [2] D. L. Balageas, J. C. Krapez, P. Cielo, Pulsed photothermal modeling of layered materials, *J. Appl. Phys.* 59, 348 (1986).
- [3] J. Martan, Thermo-kinetic model of laser-material interaction in the form of criteria equations, Ph.D. thesis (University of West Bohemia in Plzen, Faculty of Applied Sciences, Plzen, Czech Republic, University of Orleans, Ecole Polytechnique, Orleans, France, 2005), p. 45-53.