NOVÉ TECHNOLOGIE
VÝZKUMNÉ CENTRUM
ZÁPADOČESKÉ
UNIVERZITY
V PLZNI

ODBOR MATERIÁLY A TECHNOLOGIE

AUTORIZOVANÝ SOFTWARE

VYHODNOCOVÁNÍ ANALYTICKÝCH SPEKTER

Autor: *Ing. Marie Netrvalová*
Ing. Jan Očenášek, Ph.D.

Číslo projektu: *1M06031*

Číslo výsledku: *NTC-SW-13-10*

Odpovědný pracovník: *Ing. Marie Netrvalová*

Vedoucí odboru: *Doc. RNDr. Pavol Šutta, PhD.*

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

PLZEŇ, PROSINEC 2010

Jazyk výsledku: *CZE*

Hlavní obor: *BM*

Uplatněn: *ANO*

Název výsledku česky:

Vyhodnocování analytických spekter

Název výsledku anglicky:

Evaluation of analytic spectra

Abstrakt k výsledku česky:

Vytvořený software slouží k vyhodnocování analytických spekter – především získávání optických vlastností tenkých vrstev z měření na UV/Vis spektrofotometru. Je zde využita Swanepoelova metoda určování optických parametrů a tloušťky z měření propustnosti/odrazivosti vrstev. K dalšímu přiblížení byly použity fitovací disperzní vztahy s ohledem na zkoumaný materiál (Sellmeierovy, Cauchyho rovnice, Lorentzův klasický oscilační model nebo Forouhi-Bloomerův disperzní vztah).

Abstrakt k výsledku anglicky:

Developed software is a tool for analysis of analytical spectra, namely the identification of optical properties of thin films from the measurement on UV/Vis spectrometer. Applied methodology is based in the Swanepoel method of optical parameters and film thickness identification from the measurement of film transmittance or reflectance. According to tested material different dispersion model were applied (Sellmeier-Cauchy model, Lorentz oscillator model or Forouhi-Bloomer disperse relation).

Klíčová slova česky:

Swanepoelova metoda; optické vlastnosti; tloušťka vrstev

Klíčová slova anglicky:

Swanepoel method; optical properties; film thickness

Vlastník výsledku:	*Západočeská univerzita v Plzni*
IČ vlastníka výsledku:	*49777513*
Stát:	*Česká republika*
Lokalizace:	*http://www.zcu.cz/ntc/vysledky/sw/NTC-SW-13-10.html*
Licence:	*ANO*
Licenční poplatek:	*NE*
Ekonomické parametry:	*Ekonomické přínosy vyplývají ze zrychlení, zpřesnění a zkvalitnění práce uživatele.*
Technické parametry:	*Luděk Hynčík, Západočeská univerzita v Plzni, Nové technologie - Výzkumné centrum v západočeském regionu, Univerzitní 8, 306 14 Plzeň, 377634709, hyncik@ntc.zcu.cz*

NOVÉ TECHNOLOGIE
VÝZKUMNÉ CENTRUM
ZÁPADOČESKÉ
UNIVERZITY
V PLZNI

Autorizovaný software

Vyhodnocování analytických spekter

TF-SpecFit

Ing. Marie Netrvalová

Ing. Jan Očenášek, Ph.D.

Anotace

NOVÉ TECHNOLOGIE
VÝZKUMNÉ CENTRUM
ZÁPADOČESKÉ
UNIVERZITY
V PLZNI

Znalost přesných hodnot komplexního indexu lomu závislého na vlnových délkách tenkých vrstev je velmi důležitá, a to jak z technologického hlediska, tak kvůli základním znalostem vlastností materiálu. Index lomu je nezbytný pro navrhování a modelování optických prvků a optických povlaků např. pro interferenční filtry nebo fotovoltaické panely. Je-li model izotropní, homogenní a předpokládá planparalelní tenké vrstvy, pak je možné určit reálnou n(λ) i imaginarní část k(λ) indexu lomu závislé na vlnové délce. Obvykle jsou vyžadována dvě nezávislá měření pro získání n(λ) a k(λ). Pokud ale výše zmíněné požadavky nejsou splněné, je stále možné optické parametry získat díky optickým modelům.

Úvod

NOVÉ TECHNOLOGIE
VÝZKUMNÉ CENTRUM
ZÁPADOČESKÉ
UNIVERZITY
V PLZNI

Program pro identifikace optických paremetrů n(λ) a k(λ) je založen na minimalizici odchylky mezi experimentálními daty závislosti transmitance na vlnové délce a předpovědí transmitance pomocí zvoleného modelu, který obsahuje několik parametrů. Takto formulovaná úloha vede na problém multiparametrické optimalizace s poměrně komplexní funkcí, kde se může vyskytovat několik lokálních minim a fyzikálně vhodné řešení navíc nemusí odpovídat globálnímu minimu.

Proto byl navržen efektivní způsob lokalizace možných řešení s interaktivním uživatelským rozhraním v kombinaci s multiparametrickou optimalizací využívající gradientí metodu.

Uvedený software je vhodné použít pro určení tloušťky vrstev a analýzu optických vlastností tenkých vrstev, které mají vysokou transmitanci a v určité oblasti malou absorpci. Jako model reálné části indexu lomu n(λ) je použit Sellmaierův vzorec (1) , imaginarní část indexu lomu k(λ) je určena Cauchyho vztahem (2).

$$n(\lambda) = \left(A_n + \frac{B_n \lambda^2}{\lambda^2 - C_n^2} \right)^{1/2} \quad (1)$$

$$k(\lambda) = K_1 + \frac{K_2}{\lambda^2} + \frac{K_3}{\lambda^4} \quad (2)$$

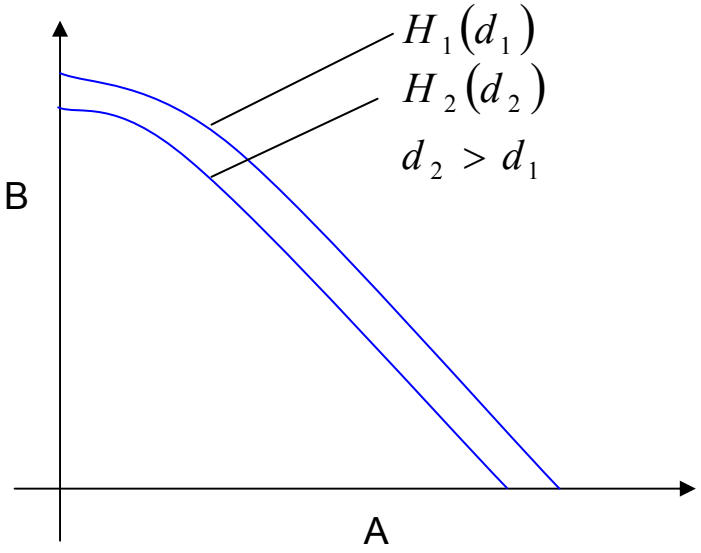
Popis prostředí

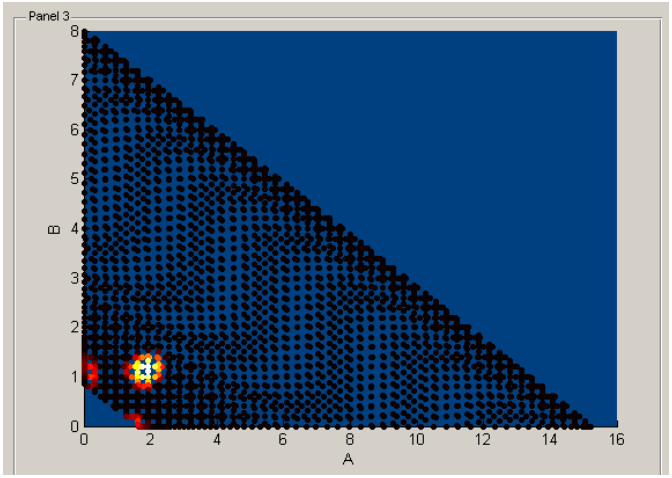
Phase fit mapping - teorie

Pro daný fázový rozdíl 2Nπ, parametr C a tloušťku vrstvy d_i, lze najít množinu bodů $[A_j\ B_j]$, pro který je fázový rozdíl mezi zvolenými extrémy shodný pro model i pro experimentálně určené hodnoty T.

Tato množina bodů tvoří v rovině AB křivku H, jejíž poloha se mění s předpokládanou tloušťkou vrstvy d.

V každém bodě křivky H lze navíc stanovit hodnotu odchylky poloh minim a maxim mezi experimentem a modelem. Tato odchylka je potom zobrazena v panelu 3 pomocí scatter grafu. Vyšší hodnoty se zobrazují červeně až černě, malé hodnoty odchylky světle až bíle.



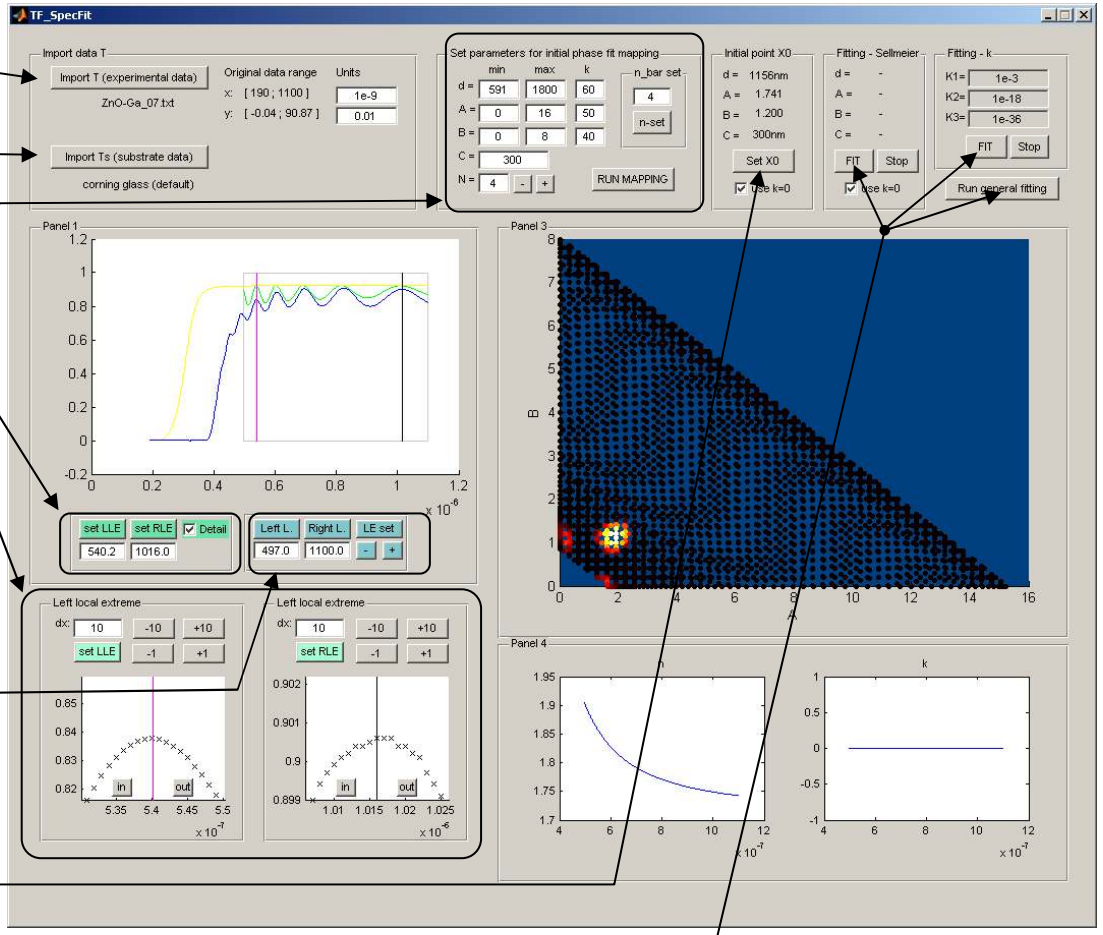


Manuál

NOVÉ TECHNOLOGIE
VÝZKUMNÉ CENTRUM
ZÁPADOČESKÉ
UNIVERZITY
V PLZNI

Stručný postup

1. Import experimentálních dat transmitance
2. Transmitance substrátu (pokud nebude načten žádný soubor, použijí se defautně přednastavené hodnoty pro *corning glass*)
3. Základní lokalizace extrémů
4. Zpřesnění polohy extrémů
5. Nastavení parametrů pro mapování fázového rozdílu a vytvoření mapy
6. Nastavení rozsahu vlnových délek pro fitování
7. Nastavení vhodné počáteční hodnoty parametrů A a B
8. Fitování parametrů



Popis prostředí

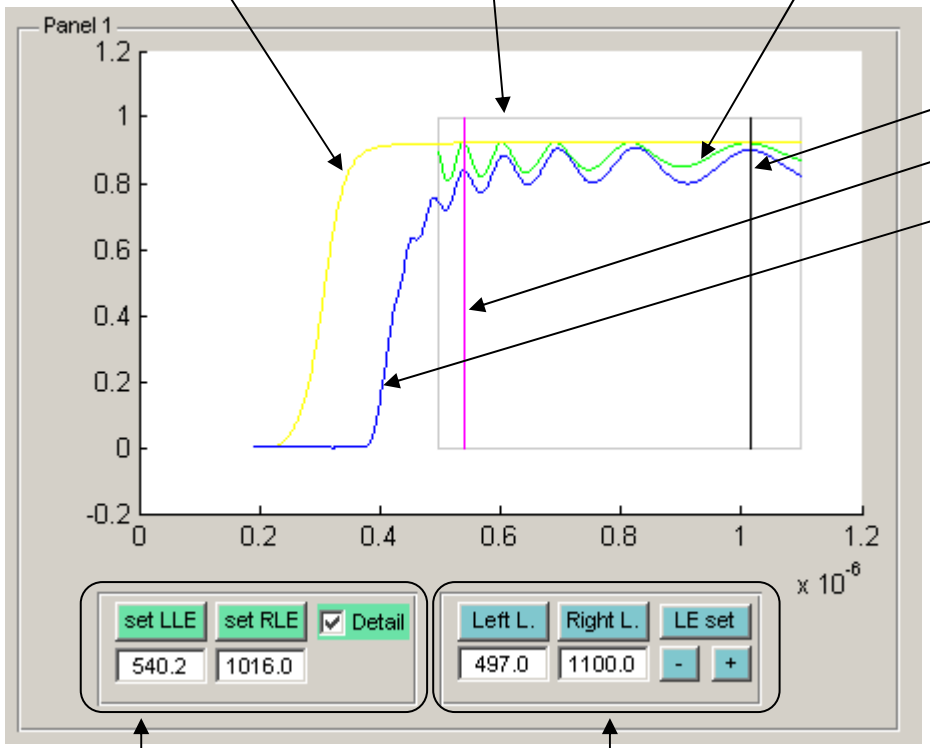
NOVÉ TECHNOLOGIE
VÝZKUMNÉ CENTRUM
ZÁPADOČESKÉ
UNIVERZITY
V PLZNI

Panel 1

Transmitance pozadí

Rozsah pro fitování

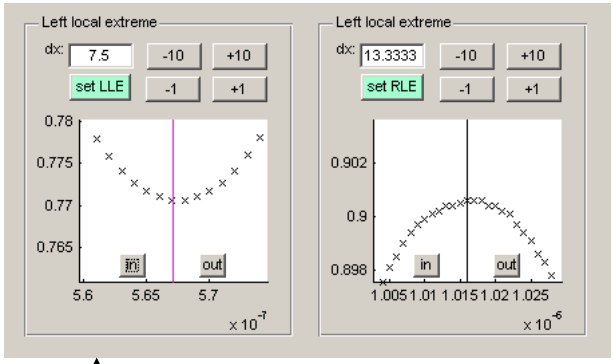
Transmitance modelu



Poloha lokálního extrému vpravo

Poloha lokálního extrému vlevo

Experimentální hodnoty transmitance



Nástroje pro určení polohy lokálních extrémů

Nástroje pro nastavení rozsahu pro fitování

Nástroje pro přesnější nastavení polohy extrémů

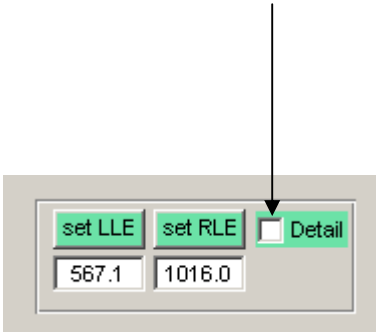
Popis prostředí

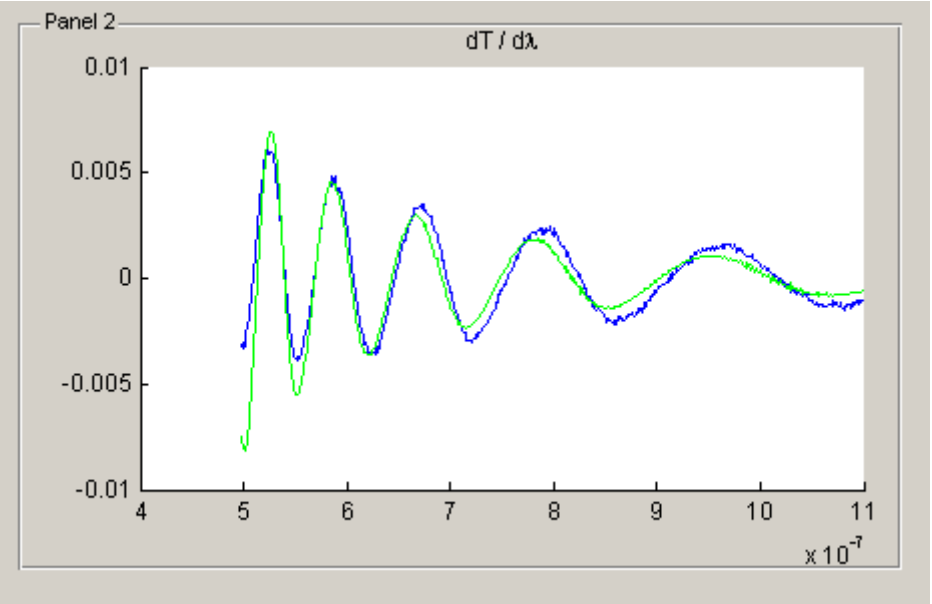
Panel 2

Pro fitování fáze (resp. polohy maxim a minim) je efektivnější posuzovat derivaci nebo diferenci závislosti transmitance na vlnové délce.

Panel 2 zobrazuje tuto diferenci pro experimentální data (modrá) a model (zelená).

Přepnout mezi Panelem 2 a detailu na pole extrémů lze zde





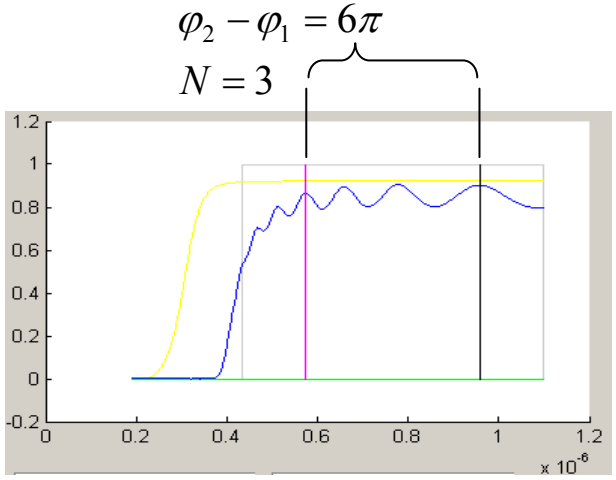
Popis prostředí

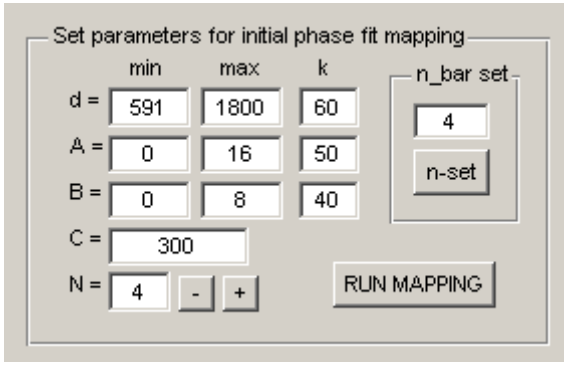
Phase fit mapping – parametery

Definuje rozsah parametrů d, A a B pro zmapování vhodného fázového rozdílu.

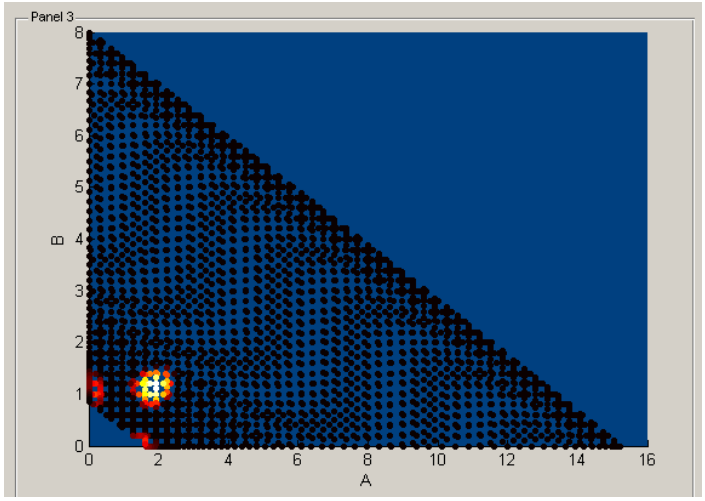
Parametr *N* určuje fázový rozdíl mezi nastavenými lokálními extrémy v násobcích 2π, viz příklad.

Tlačítko n-set nastavuje vhodné parametry d_{min}, A_{max} a B_{max} podle odhadu maximálního indexu lomu n_bar.





Parametry k určují počet kroků v intervalu a tím i hustotu scatter zobrazení v Panelu 3 (ovšem i délku jeho výpočtu).



Popis prostředí

NOVÉ TECHNOLOGIE
VÝZKUMNÉ CENTRUM
ZÁPADOČESKÉ
UNIVERZITY
V PLZNI

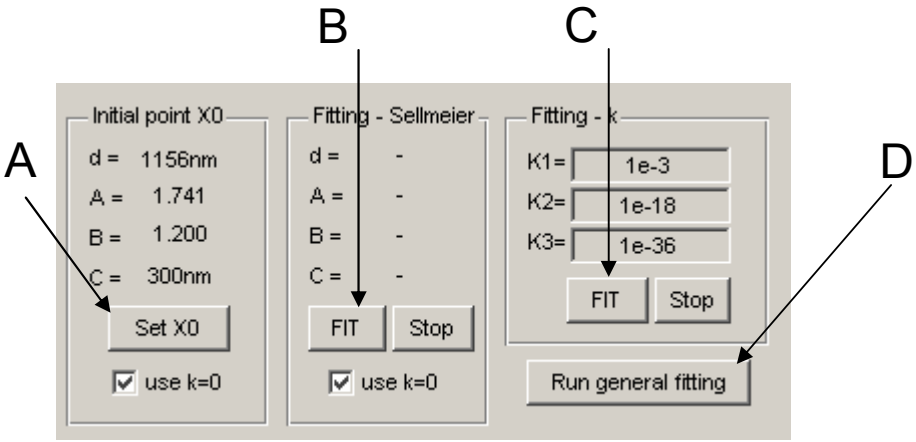
Identifikace

A. Volba počátečního bodu (tj. paremtrů A a B) pro fitování.

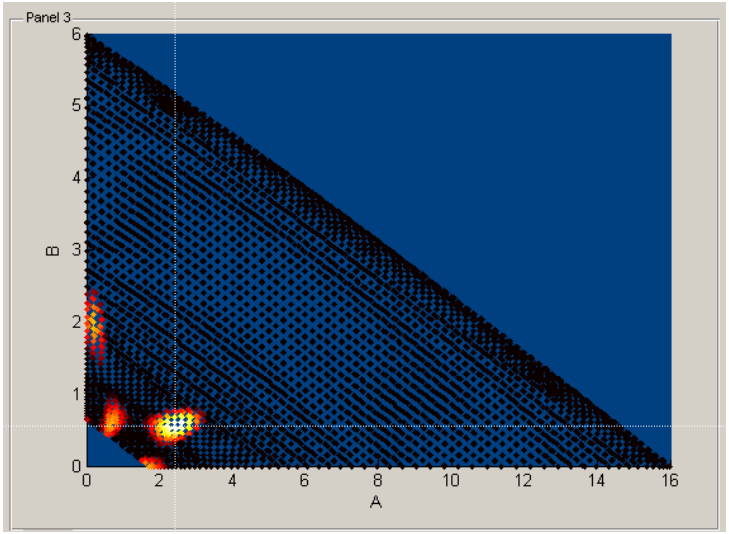
B. Identifikace pouze parametrů A, B, C a d.

C. Identifikace parametrů K_1, K_2 a K_3.

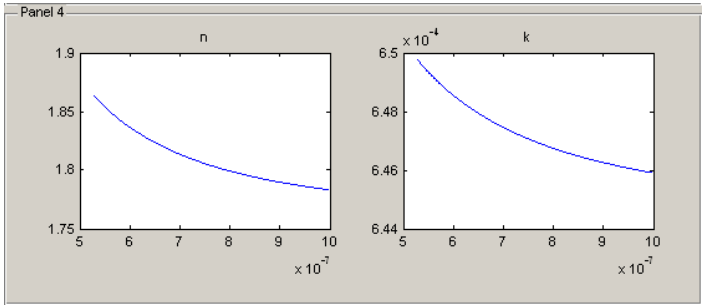
D. Identifikace všech parametrů.



Po stisknutí [Set X0] lze na panelu 3 graficky lokalizovat lokální minimum odchylky, tj. počáteční odhad A a B.



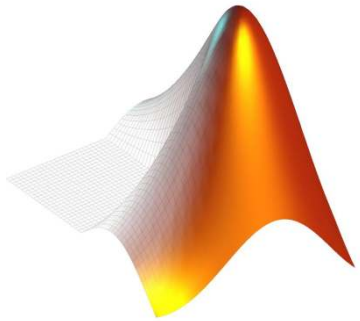
Panel 4 slouží k monitorování hodnot n(λ) a k (λ) .



Program

NOVÉ TECHNOLOGIE
VÝZKUMNÉ CENTRUM
ZÁPADOČESKÉ
UNIVERZITY
V PLZNI

Struktura programu a instalace



Program byl implementovám v prostředí MATLAB včetně grafického uživatelského prostředí.

Pro běh programu je nutné mít nainstalován výpočetní a programovací systém Matlab v.2007 nebo vyšší.

Program se sestává z několika skriptových souborů s příponou .m a jednoho souboru .fig pro grafické rozhraní. Instalace se neprovádí. Hlavní spustitelný soubor je

TF_SpecFit.m