

## Přihlášení na počítač v 07/02004

Pro fitování pomocí *newAD* je možné využít počítač v 07/02004 (seminární místnost S10).

Počítač implicitně bootuje do MS Windows, boot do Linuxu je zapotřebí explicitně zvolit v boot menu výběrem **Fedora, with Linux ...** (ideálně nejvyšší verzi).

Login: student.

Heslo: stejné jako na `hercules.physics.muni.cz`.

## Přihlášení na hercules

Fitovací software *newAD* je clusterový, hlavní počítač clusteru, kde jsou všechna data a odkud lze fitování řídit, je `hercules`.

Z fyziky:

```
ssh -X student@hercules
```

Z dálky:

```
ssh -CX student@hercules.physics.muni.cz
```

## Adresáře na hercules

`prakt/ROK/SKUPINA` – data z praktika si nakopírujte do podadresáře v domovském adresáři podle ročníku a skupiny a zpracování provádějte tam.

`/share` – adresář, kam se automaticky synchronizují data ze všech přístrojů. Pro vás je pouze ke čtení. Podadresáře podle přístrojů používaných v praktiku:

`e11` – elipsometr Jobin Yvon UVISEL.

`lambda1050` – spektrofotometr Perkin Elmer Lambda1050.

`opus` – spektrofotometr Bruker Vertex v80.

## Export dat Bruker Vertex 80v

Měřicí program automaticky ukládá všechna měření jako nečitelné binární soubory (s koncovkami `.0`, `.1`, ...).

Export do textového formátu (DPT – data point table) lze provést po kliknutí pravým tlačítkem na single-channel data v seznamu dat. Při exportu pozor na adresář, může být nastaven jiný, než kam se ukládají měření.

Správně exportovaná single-channel data připomínají křivku záření černého tělesa. Vypadají-li jinak, exportovali jste už přímo propustnost nebo nějakou jinou odvozenou veličinu.

## Export dat Perkin Elmer Lambda1050

Skončíte-li měření vzorku, zavřete okno s měřením, program se zeptá, zda chcete uložit Task. Jelikož Task znamená měření, uložit ho chcete. Odpovíte-li ne, nejsou data definitivně ztracena, ale nedá se k nim už dostat snadno a neuloží se k nim všechna metadata.

Měřicí software od výrobce pojmenovává automaticky měření dost nesmyslně. Aby se šlo v souborech vyznat byla zavedena následující konvence.

Měření se pojmenovávají hierarchicky, části názvu se oddělují čtyřtečkou (dvě dvojtečky), pro praktikum by název měl začínat `SpecPrakt::ROK::SKUPINA`, tedy například:

```
SpecPrakt::2014::B::Ti02-3B
```

Po skončení měření se pak programem *Folder Exporter* takto pojmenované měření exportuje do adresáře  
`C:/Users/Public/Export/SpecPrakt/2014/B/Ti02-3B`

odkud se už synchronizuje na *hercules*. Ve *Folder Exporteru* vybereme měření a tlačítkem *Export Selected* provedeme export. Po opětovném načtení seznamu by mělo mít zelené označení, indikující, že existuje exportovaná verze.

## Konverze dat Perkin Elmer Lambda1050

Soubory s daty se jmenují `ID.Sample.Raw.asc`, ostatní jsou pomocné soubory, které lze smazat, aby nepřekážely. Identifikátor *ID* rozlišuje jednotlivá měření.

Data je kromě sloučení, konverze a výpočtu fitovací váhy také nutné převést z relativní odrazivosti vůči normálu na absolutní odrazivost. Konverzní programy dělají obojí, standardně berou jako normál krystalický křemík (který se používá i v praxi), lze nicméně zvolit jiný.

Pro data měřená metodou 4×4 se používá program `spec4x4` a typy měření jsou `Dark.Front`, `Dark.Back`, `Sample.N.Front` a `Sample.N.Back`, kde *N* je pořadové číslo měření.

Program `spec4x4` rozlišuje měření podle názvu souboru a stačí ho jen spustit na všechny datové soubory:

```
spec4x4 Dark_*.asc Sample_*.asc
```

nebo po smazání pomocných souborů prostě

```
spec4x4 *.asc
```

Vytvoří soubor `R.dat` se standardní strukturou.

## Konverze dat Jobin Yvon UVISEL 2

Konverze vyžaduje nejprve přejmenování souborů `*.spe`, aby měly koncovky podle elipsometrické konfigurace. To provádí skript `jy-rename.py`, v adresáři s daty stačí spustit

```
jy-rename.py -d
```

Volba `-d` zajišťuje smazání původních `*.spe` souborů, které nebudeme potřebovat.

Výsledkem jsou soubory

```
p.0m p.0p p.9m p.9p p.mm p.mp p.pm p.pp
```

Vlastní konverzi provádí program `e11`, kterému stačí zadat báze jméno souborů (bez koncovky):

```
e11 p
```

Tlačítko *Skew* provede automatickou korekci úhlů rotace optických prvků. Zjištěné odchylky  $dA$ ,  $dM$  by měly být mnohem menší než 1, jinak je něco špatně.

Data lze ve spektrech ručně opravovat posouváním jednotlivých bodů, případně stisknutím tlačítka *Correct*, které opraví všechny detekované chybné body ve vybraném spektru.

Spojení měření na jednotlivých konfiguracích a výpočet opravených hodnot  $I_s$ ,  $I_{cII}$  a  $I_{cIII}$  a fitovacích vah provedeme tlačítkem *Execute*, které zapíše soubor `p.dat`.

Program ukončíme *Quit*.

Nastavení čísla vzorku (1) nebo typu výstupu ( $I_s$ ,  $I_{cII}$  a  $I_{cIII}$ ) nemáte důvod měnit.

## Konverze dat Bruker Vertex 80v

Pro sloučení dat propustnosti nebo odrazivosti a výpočet fitovacích vah ze single-channel dat se používá program `speccheck`. V adresáři s daty spustíte

```
speccheck TMIR
```

kde TMIR znamená transmittanci (T) ve střední (M) infračervené oblasti (IR). Další možnosti jsou RMIR, TFIR a RFIR.

Program se pokusí roztrždit data na single-channel měření vzorku, prázdného kanálu, případně normálu, což nicméně vyžaduje určité konvence při pojmenování vzorků.

Data lze vybrat a ručně přiřadit do *Sample*, *Background* nebo *Ignore*. Máme-li v jednom adresáři více vzorků, je samozřejmě zapotřebí převést data postupně.

Tlačítko *Run* spustí konverzi, která vytvoří soubor T-MIR.dat (případně analogicky podle typu dat).

## Fitovací software *newAD*

Software pro fitování dat z optických měření je clusterový a skládá se z několika spolupracujících programů. Jeden uživatel může současně mít spuštěno pouze jedno fitování – skupiny se tedy musejí domluvit a nelézt si do zelí, protože všechny pracují pod stejným uživatelem *student*.

Grafické uživatelské rozhraní se spouští

**xviewerAD**

Tento program se spouští v adresáři s daty, která chceme fitovat. Tím se současně definuje, kde bude hledat a vytvářet soubory celý zbytek *newAD*.

V levém panelu lze do výpočtu přidávat počítače z clusteru, v pravém měnit hodnoty parametrů a nastavovat je jako volné/pevné.

Funkce tlačítek:

*Model* – volba modelu vzorku typu a měření, což je první věc, kterou je zapotřebí udělat.

*Input* – volba vstupních datových souborů (lze jich zvolit několik současně, nicméně ze stejného adresáře).

*Quit* – opuštění grafického rozhraní. Tlačítko nepřerušuje fitování, nezapomíná žádné nastavení ani pracovní adresář. Během fitování může být grafické rozhraní spuštěno vícekrát, případně i vůbec, fitování běží nezávisle na něm. Spustíme-li znovu *xviewerAD*, připojí se k již běžícímu fitovacímu procesu.

*Halt* – ukončení celého *newAD*, včetně grafického rozhraní. Použijte, když skončíte práci, chcete fitovat jiný vzorek v jiném adresáři a pod.

*Output* – vytvoření výstupního souboru (tradičně pojmenovaného *out*).

*Calculate* – výpočet teoretických dat podle aktuálních hodnot parametrů.

*Minimum* – minimalizace součtu čtverců odchylek pomocí variace jednoho vybraného parametru hrubou silou (právě jeden parametr musí být vybrán jako volný, *free*).

*Fit* – fitování volných *free* parametrů.

*Grapher* – spuštění prohlížeče grafů (ve výchozím nastavení prázdného, je zapotřebí vybrat křivky, které chceme zobrazovat). Lze ho spustit i samostatně např. na výstupní soubor:

**grapherAD out**

*Restore* – načtení uloženého stavu fitování z *restorefileAD* a pokračování, například po pádu či násilném ukončení.

*Import* – načtení výstupního souboru například z fitu v jiném adresáři. Nastaví se model a parametry, vstupní soubory se nemění.

Fitování či minimalizaci lze ukončit předčasně tlačítkem *End*. Právě běžící iterace ovšem doběhne celá.

## Standardní struktura dat *newAD*

Vstupní datové soubory jsou textové soubory s pevným počtem sloupců:

1	2	3	4	5	6	7
typ_dat	vlnová_délka/nm	úhel_dopadu/deg	exp1	exp2	exp3	váha

Typ dat se skládá s vlastního typu dat a dvou čísel 00 až 99 určující číslo sekundárního a primárního vzorku (pro vícevzorkové zpracování dat). V praxi budou koncové čtyři cifry vždy 0001.

Sloupce s experimentálními daty jsou vždy tři, u spektrofotometrie (2), kde je jen jedna měřená veličina, jsou sloupce `data2` a `data3` vždy nuly, například:

```
20001 275.01 0 0.258605 0 0 10000
```

U elipsometrie (9) jsou v datových sloupcích  $I_s$ ,  $I_{cII}$ , a  $I_{cIII}$ , v tomto pořadí:

```
90001 190.746472 75.000000 7.463960e-01 5.331406e-01 3.655881e-01 9.246797e+04
```

## Struktura výstupního souboru *newAD*

Výstupní soubor (`out`) začíná hlavičkou, kde je uveden model, čas, vstupní data, residuální sumy čtverců a hodnoty  $\chi$ , hodnoty všech parametrů včetně chyb, korelační matice, etc. Všechny řádky hlavičky začínají znakem `#`.

Řádky nezačínající `#` obsahují experimentální a nafitované křivky optických veličin a spektrální závislosti optických konstant. Prvních deset sloupců je podobných jako u vstupního souboru, pouze navíc obsahují i nafitovanou teoretická data:

```
1      2      3      4      5      6      7      8      9      10
typ_dat vlnová_délka/nm úhel_dopadu/deg exp1 exp2 exp3 th1 th2 th3 váha
```

Následuje  $2 \times 5 \times 2$  sloupců s optickými konstantami.

Nejprve pro primární vzorek, poté pro sekundární.

Optické konstanty každého vzorku jsou uvedeny po materiálech v pořadí *overlayer*, *film*, *transition layer*, *substrate*, *back-side layer*.

A konečně každý materiál má dva sloupce: index lomu  $n$ , a extinkční koeficient  $k$ .

Všechny sloupce jsou vždy přítomny, pokud model neobsahuje některou vrstvu, sloupce obsahují nuly.

Optické konstanty lze extrahovat skriptem `extractAD-oc.py`, například:

```
extractAD-oc.py f+ out
```

sloučí spektrální závislosti optických konstant vrstvy (*film*) všech vzorků a všech měření v souboru `out` a zapíše je do souboru `f1.nk` (resp. podobným, podle toho, co se přesně doopravdy sloučilo).