

# Programy do analizy prądów TSD

---

*Instrukcja użytkownika*

**Władysław Tomaszewicz**

Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej

Politechnika Gdańska 2001

# Rozdział 1

## Ogólne informacje

*Niniejsza instrukcja przedstawia sposób użytkowania pakietu programów o nazwach **TSDOb1**, **TSDOb2**, **TSDFit1** i **TSDFit2**. Są one przeznaczone do obliczania teoretycznych i analizy doświadczalnych przebiegów prądów termicznie stymulowanej depolaryzacji (TSD). W tym rozdziale podane są ogólne informacje dotyczące prądów TSD, niektórych metod numerycznych stosowanych w programach oraz zasad posługiwania się wymienionymi programami. Następne rozdziały zawierają opis poleceń poszczególnych programów.*

### 1.1 Prądy termicznie stymulowanej depolaryzacji

#### 1.1.1 Podstawowe wiadomości

Prądy termicznie stymulowanej depolaryzacji występują przy ogrzewaniu uprzednio spolaryzowanego polarnego dielektryka [1]. Czas relaksacji określonego rodzaju polarnych cząsteczek w temperaturze  $T$  wyraża się wzorem

$$\tau(T) = \tau_0 \exp(E_a/kT), \quad (1.1)$$

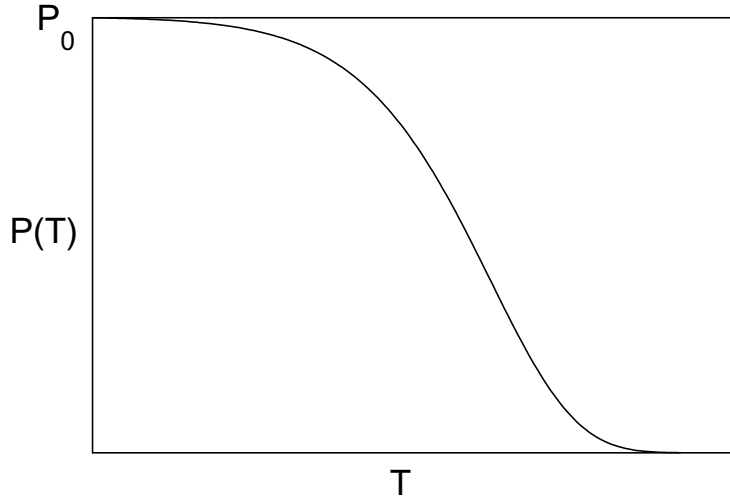
gdzie:  $\tau_0$  – czynnik przedwykładniczy,  $E_a$  – energia aktywacji,  $k$  – stała Boltzmanna. W przypadku liniowego wzrostu temperatury próbki,

$$T(t) = T_0 + bt, \quad (1.2)$$

( $t$  – czas,  $T_0$  – początkowa temperatura,  $b$  – prędkość ogrzewania) polaryzacja dielektryka zanika zgodnie ze wzorem

$$P(T) = P_0 \exp \left[ -\frac{1}{\tau_0 b} \int_{T_0}^T \exp(-E_a/kT') dT' \right], \quad (1.3)$$

gdzie  $P_0$  – początkowa wartość polaryzacji zwana polaryzacją nasycenia (rys. 1.1). Powoduje to przepływ prądu TSD, którego gęstość  $J(T) = I(T)/S$



Rysunek 1.1: Zanik polaryzacji dielektryka ze wzrostem temperatury w przypadku pojedynczego procesu relaksacji.

( $I(T)$  — natężenie prądu TSD,  $S$  — powierzchnia próbki) wynosi

$$J(T) = -b \frac{dP(T)}{dT} \quad (1.4)$$

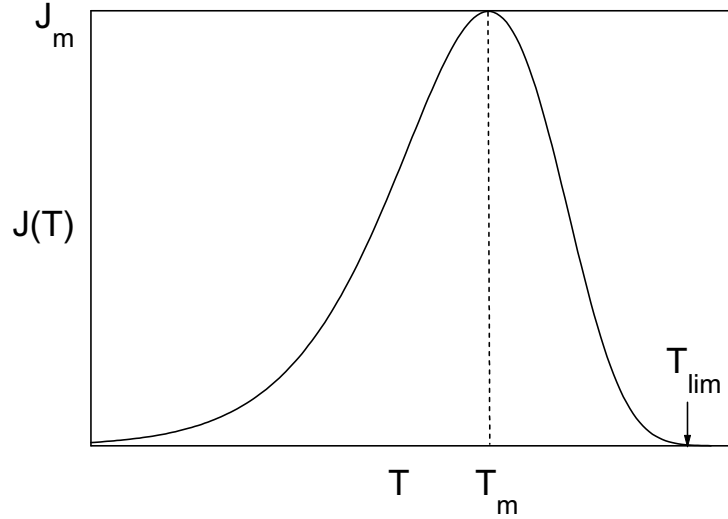
to jest

$$J(T) = \frac{P_0}{\tau_0} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \exp\left[-\frac{1}{\tau_0 b} \int_{T_0}^T \exp(-E_a/kT') dT'\right]. \quad (1.5)$$

(por. rys. 1.2). Rejestrowany doświadczalnie przebieg prądu TSD ma często bardziej złożony charakter, wskazujący na istnienie większej liczby procesów relaksacji. Na ogół jego analiza pozwala na wyznaczenie parametrów poszczególnych procesów relaksacyjnych. Głównym przeznaczeniem opisywanych programów jest ułatwienie tego zadania.

### 1.1.2 Analiza prądów TSD

Przy dopasowywaniu teoretycznych przebiegów prądów TSD do otrzymanych doświadczalnie wygodnie jest posługiwać się, jako parametrami wejściowymi, energią aktywacji  $E_a$  oraz temperaturą  $T_m$ , odpowiadającą maksimum prądu TSD i maksymalną wartością gęstości prądu  $J_m = J(T_m)$  (rys.



Rysunek 1.2: Przebieg prądu TSD dla pojedynczego procesu relaksacji.

1.2). Wartości czynnika przedwykładniczego i polaryzacji nasycenia można wyznaczyć wówczas ze wzorów [2]:

$$\tau_0 = \frac{kT_m^2}{bE_a} \exp\left(-\frac{E_a}{kT_m}\right), \quad (1.6)$$

$$P_0 = J_m \tau_0 \exp\left(\frac{E_a}{kT_m}\right) \exp\left[\frac{1}{\tau_0 b} \int_{T_0}^{T_m} \exp(-E_a/kT') dT'\right]. \quad (1.7)$$

Jedną z metod analizy doświadczalnych krzywych TSD jest metoda Buciego [3]. Zgodnie ze wzorem (1.4), polaryzację dielektryka w danej temperaturze można wyznaczyć, całkując gęstość prądu TSD,

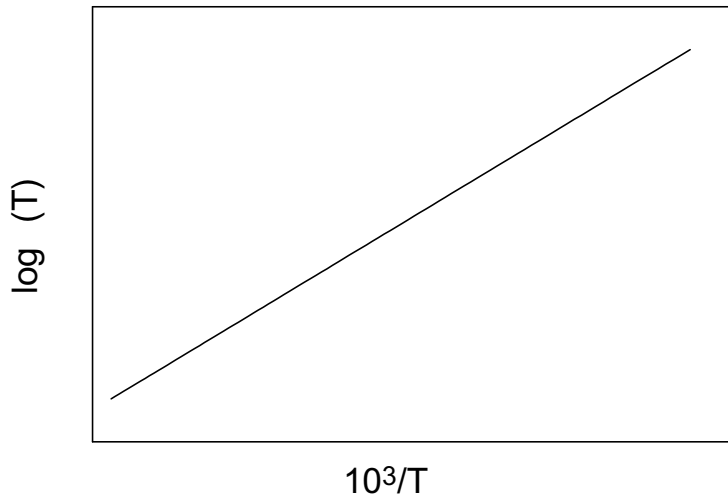
$$P(T) \approx \frac{1}{b} \int_T^{T_{lim}} J(T') dT', \quad (1.8)$$

gdzie  $T_{lim}$  jest temperaturą, przy której prąd depolaryzacji jest niemal równy zero (rys. 1.2). Ze wzorów (1.3), (1.5) i (1.1) wynika natomiast zależność

$$\tau(T) = \frac{P(T)}{J(T)}. \quad (1.9)$$

Podane wzory pozwalają wyznaczyć temperaturową zależność czasu relaksacji  $\tau(T)$  na podstawie zmierzonego przebiegu gęstości prądu  $J(T)$ . Jak wynika ze wzoru (1.1), zachodzi związek

$$\log \tau(T) = \log \tau_0 + E_a/kT. \quad (1.10)$$



Rysunek 1.3: Wykres Bucciego dla pojedynczego procesu relaksacji.

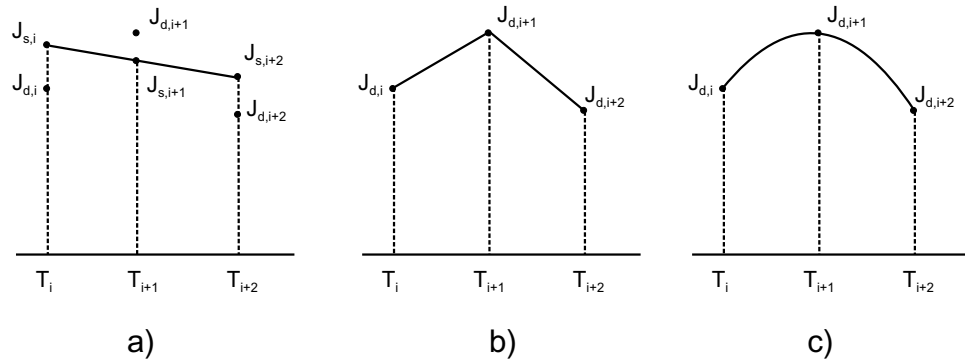
Dla pojedynczego procesu relaksacyjnego wykres  $\log \tau(T) - 1000/T$ , zwany wykresem Bucciego, będzie więc prostą (rys. 1.3) i umożliwi obliczenie czynnika przedwykładniczego  $\tau_0$  i energii aktywacji  $E_a$ . Jeżeli zanik polaryzacji jest związany z większą liczbą procesów relaksacyjnych, wykres Bucciego nie będzie prostoliniowy. W niektórych przypadkach jego analiza pozwala na wyznaczenie parametrów poszczególnych procesów.

## 1.2 Metody numeryczne

Zaczynając od obecnego podrozdziału, doświadczalne przebiegi gęstości prądu i obliczonej na ich podstawie polaryzacji będą oznaczane przez  $J_d(T)$  i  $P_d(T)$ , natomiast przebiegi odpowiadające wzorom (1.5) i (1.3) — przez  $J_a(T)$  i  $P_a(T)$ . Analogiczne oznaczenia są używane w opisywanych programach.

### 1.2.1 Numeryczne całkowanie

W programach **TSDOb1**, **TSDOb2** i **TSDFit1** do obliczenia polaryzacji  $P_d(T)$  stosuje się numeryczne całkowanie gęstości prądu  $J_d(T)$ , zgodnie ze wzorem (1.8). Program **TSDFit1** umożliwia wybór jednej z następujących metod całkowania:



Rysunek 1.4: Metody numerycznego całkowania: a) metoda trapezów z wygładzaniem funkcji, b) zwykła metoda trapezów, c) metoda parabol.

- metody trapezów ze wstępnym wygładzaniem funkcji podcałkowej, nazywanej w programie metodą trapezów 1,
- zwykłej metody trapezów, nazywanej metodą trapezów 2,
- metody parabol (Simpsona).

W programach **TSDObl1**, **TSDObl2** stosowana jest zwykła metoda trapezów.

Zasadę wymienionych metod ilustruje rysunek 1.4. W zwykłej metodzie trapezów funkcja podcałkowa w danym przedziale  $[T_i, T_{i+1}]$  jest aproksymowana odcinkiem prostej, przechodzącej przez punkty  $J_d(T_i)$ ,  $J_d(T_{i+1})$ . Przybliżona wartość całki w tym przedziale wyraża się więc wzorem:

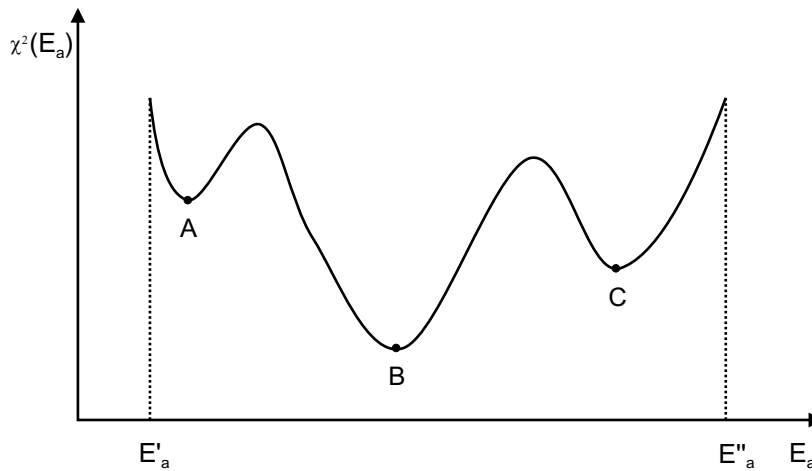
$$\int_{T_i}^{T_{i+1}} J_d(T) dT \approx \frac{1}{2} [J_d(T_i) + J_d(T_{i+1})] (T_{i+1} - T_i). \quad (1.11)$$

W metodzie trapezów z wygładzaniem funkcja podcałkowa w przedziale  $[T_i, T_{i+2}]$  jest wstępnie przybliżana odcinkiem prostej przechodzącej przez punkty  $J_s(T_i)$ ,  $J_s(T_{i+1})$  i  $J_s(T_{i+2})$ . Wygładzone wartości funkcji  $J_s(T_i)$  dobiera się w taki sposób, aby suma kwadratów odchyień,

$$\chi^2 [J_s(T_1), \dots, J_s(T_n)] = \sum_{i=1}^n [J_d(T_i) - J_s(T_i)]^2, \quad (1.12)$$

osiągała minimum. Całka z wygładzonej funkcji jest obliczana zwykłą metodą trapezów. W metodzie parabol podcałkowa funkcja w przedziale  $[T_i, T_{i+2}]$  jest aproksymowana parabolą, przechodzącą przez punkty  $J_d(T_i)$ ,  $J_d(T_{i+1})$  i  $J_d(T_{i+2})$ . Wynikający stąd wzór całkowania numerycznego jest dość skomplikowany i nie będzie tutaj przytoczony.

Opisane metody całkowania, w kolejności od a) do c), teoretycznie pozwalają na uzyskanie coraz dokładniejszych wyników. Jednocześnie, są one



Rysunek 1.5: Lokalne (A, C) i globalne (B) minima funkcji jednej zmiennej.

coraz bardziej podatne na ew. zakłócenia danych doświadczalnych. Z tego względu zaleca się stosowanie w większości przypadków zwykłej metody trapezów. Metoda trapezów z wygładzaniem i metoda parabol powinny być używane tylko w przypadkach, odpowiednio, bardzo dużego i znikomego rozrzutu punktów doświadczalnych na krzywych  $J_d(T)$ .

### 1.2.2 Minimalizacja funkcji wielu zmiennych

Zasada działania programu **TSDFit2**, służącego do wyznaczenia parametrów relaksacji z przebiegu prądu TSD, polega na minimalizacji funkcji

$$\begin{aligned} & \chi^2(E_{a1}, T_{m1}, J_{am1}, \dots, E_{al}, T_{ml}, J_{aml}) \\ & = \sum_{i=1}^n [J_d(T_i) - J_a(T_i; E_{a1}, T_{m1}, J_{am1}, \dots, E_{al}, T_{ml}, J_{aml})]^2. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Podobną metodę określania parametrów relaksacji w przypadku ich ciągłego rozkładu zastosowano w pracy [4]. W podanym wyrażeniu  $J_a(T_i; \dots)$  jest gęstością prądu TSD, będącą w ogólnym przypadku sumą gęstości prądów (1.5), związanych z  $l$  procesami relaksacyjnymi. Jako parametry wejściowe, opisujące  $k$ -ty proces, przyjmuje się oprócz energii aktywacji  $E_{ak}$ , temperaturę  $T_{mk}$ , odpowiadającą maksimum prądu TSD i maksymalną wartość gęstości prądu  $J_{amk} = J_{ak}(T_{mk})$  (por. wzory (1.6) - (1.7)).

W przypadku nieliniowej zależności minimalizowanej funkcji od jej parametrów dostępne procedury (np. opisane w [5]) pozwalają wyznaczyć tylko jedno z *lokalnych* minimów funkcji w zadanym obszarze zmienności parametrów, niekoniecznie będące minimum *globalnym* (rys.1.5). Wynika stąd, że zadanie rozłożenia doświadczalnego przebiegu prądu TSD na przebiegi teoretyczne, odpowiadające poszczególnym procesom relaksacyjnym, nie ma

jednoznacznego rozwiązania. Dla przynajmniej częściowego wyeliminowania tych niejednoznaczności przy analizie doświadczalnego przebiegu prądu TSD zaleca się:

- a) porównanie wyników obliczeń dla różnych początkowych wartości parametrów relaksacji i różnych przedziałów ich zmienności,
- b) przyjęcie możliwie najmniejszej liczby procesów relaksacyjnych, dającej zadowalającą zgodność między zmierzoną i obliczoną krzywą prądu TSD.

W opisywanym programie do minimalizacji funkcji (1.13) wykorzystano podprogram **Mina**, opracowany w Sandia Laboratories. Pewną wadą tego podprogramu jest stosunkowo długi czas obliczeń, natomiast istotną zaletą — duża niezawodność. Bardziej efektywne podprogramy minimalizacji funkcji wymagają na ogół określenia początkowych wartości parametrów, zbliżonych do położenia minimum.

## 1.3 Zasady korzystania z programów

Ogólne zasady posługiwania się opisywanymi programami są typowe dla większości programów, pracujących w środowisku **Windows95/98/2000**, np. programów z pakietu **Microsoft Office**. Dalej przedstawione będą jedynie specyficzne cechy w.w. programów.

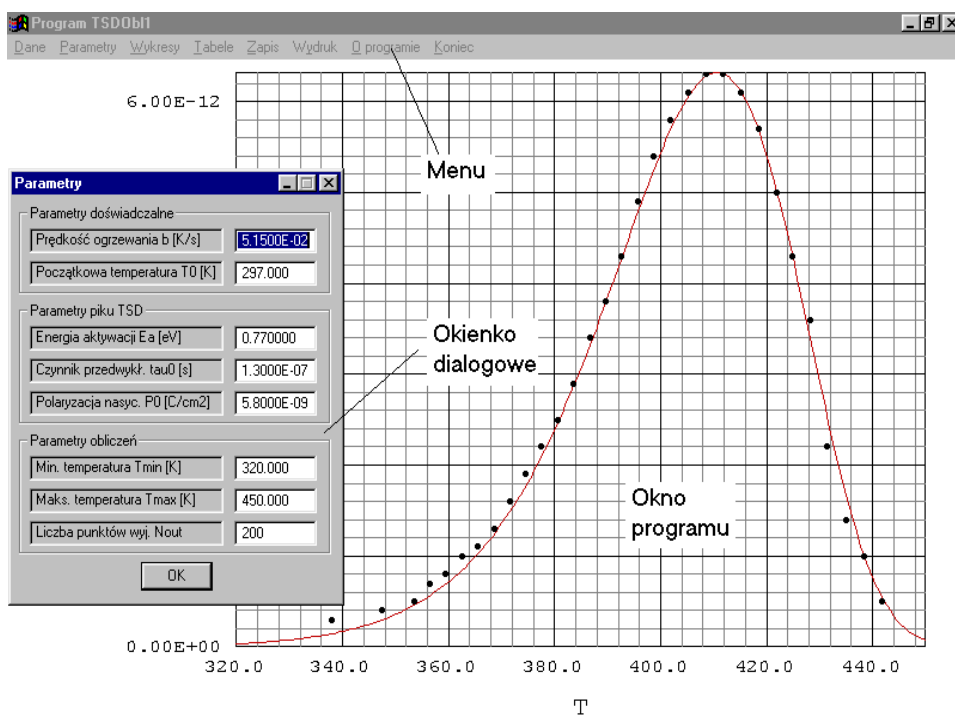
### 1.3.1 Struktura programów

Z punktu widzenia użytkownika wszystkie programy mają podobną strukturę (rys.1.6). Możemy wyróżnić:

- a) główne okno programu, które służy do wyświetlania wykresów,
- b) główne menu programu,
- c) okienka dialogowe.

Wywołanie niektórych pozycji głównego menu powoduje wyświetlenie rozwijanego menu podrzędnego. Okienka dialogowe służą do czytania danych z dysku, zapisu wyników na dysk oraz do wprowadzania danych i wyświetlania wyników obliczeń i dodatkowych informacji. Jeżeli okienko dialogowe jest otwarte, dalsze czynności, np. wybór pozycji menu, możliwe są dopiero po zamknięciu okienka przyciskiem **OK**. W programach sprawdzana jest formalna poprawność danych wczytywanych z plików dyskowych i okienek dialogowych. W przypadku stwierdzenia błędu wyświetlane jest okienko dialogowe z odpowiednim komunikatem.

Programy można obsługiwać przy pomocy myszy i klawiatury (zalecane) lub wyłącznie z klawiatury. W drugim przypadku aktywację głównego



Rysunek 1.6: Główne okno programu **TSDOb11** z otwartym okienkiem dialogowym.

menu uzyskuje się kombinacją klawiszy **Alt** + klawisz odpowiadający podkreślonej literze pozycji menu, przemieszczanie się po pozycjach menu — klawiszami kursorów, wybór danej pozycji menu głównego lub jednego z menu podrzędnych — klawiszem **Enter**. Do przemieszczania się po poszczególnych pozycjach okienka dialogowego służą klawisze **Tab** i **Shift** + **Tab**.

### 1.3.2 Jednostki

W programach przyjęto następujące jednostki długości, czasu, temperatury, energii i natężenia prądu:  $[x] = \text{cm}$ ,  $[t] = \text{s}$ ,  $[T] = \text{K}$ ,  $[E_a] = \text{eV}$ ,  $[I] = \text{A}$ . W związku z tym jednostkami wymienionych wielkości są: czynnik przedwykładniczy:  $[\tau_0] = \text{s}$ , prędkość ogrzewania:  $[b] = \text{K/s}$ , gęstość prądu:  $[J] = \text{A/cm}^2$ , polaryzacja:  $[P] = \text{C/cm}^2$ .

Zasadniczo wszystkie dane liczbowe do programów powinny być wyrażone w przytoczonych jednostkach. W przypadku stosowania innych jednostek należy odpowiednio przeliczyć otrzymane wyniki. Ponieważ w programach stała Boltzmanna jest wyrażona w eV/K, stosowanie innych jednostek ener-

gii i temperatury, niż wymienione wyżej, jest niedopuszczalne.

### 1.3.3 Czytanie danych

Wywołanie komendy menu podrzędnego **Dane/Czytaj dane** w programach **TSDOb11** i **TSDOb12** lub komendy menu **Dane** w programach **TSDFit1** i **TSDFit2** powoduje wyświetlenie standartowego okienka dialogowego odczytu pliku, znanego z innych programów pracujących w środowisku **Windows**. Umożliwia ono wybór pliku dyskowego z aktualnego katalogu oraz zmianę aktualnego katalogu lub dysku. W programach przyjęto, że pliki danych mają rozszerzenie **dat**, **prn** lub **txt**.

Założona we wszystkich programach struktura danych jest identyczna. Przyjęto, że doświadczalna krzywa TSD jest zapisana w postaci tabeli  $T_i$  —  $I_d(T_i)$  ( $i = 1, 2, \dots, N_{in}$ ,  $N_{in} \leq 800$ ). Wartości  $T_i$  muszą być uporządkowane w rosnącej kolejności. Pierwszy wiersz powinien kolejno zawierać: liczbę  $N_{in}$  punktów krzywej TSD, prędkość ogrzewania próbki  $b$ , temperaturę początkową próbki  $T_0$  i powierzchnię próbki  $S$ . Następnym  $N_{in}$  wierszy zawiera pary wartości  $T_i$  i  $I_d(T_i)$ . Początkowy fragment pliku danych może więc np. wyglądać jak następuje:

```
31  0.05  300.0  0.01
338.2  3.1E-14
347.5  4.2E-14
.....
```

Symbol „E” z następującą po nim liczbą całkowitą oznacza wykładniczą część liczby, np.  $3.1E-14 = 3.1 \cdot 10^{-14}$ . Po wczytaniu danych automatycznie wyliczane są wartości gęstości prądu TSD,  $J_d(T_i) = I_d(T_i)/S$ . Wszystkie dalsze obliczenia, wykresy, i.t.d. odnoszą się do wartości gęstości prądu TSD,  $J_d(T_i)$ .

### 1.3.4 Zapis wyników

We wszystkich programach wywołanie komendy menu **Zapis** i następnie jednej z komend menu podrzędnego (za wyjątkiem ostatniej) powoduje wyświetlenie standartowego okienka dialogowego zapisu pliku. Umożliwia ono określenie nazwy zapisywanego pliku dyskowego oraz zmianę aktualnego katalogu lub dysku. W programach przyjęto, że wynikowe pliki będą miały rozszerzenie **dat** lub **txt**. W związku z tym nie należy dopisywać nazwy rozszerzenia do nazwy pliku. Jeżeli zapisywane pliki stanowią tabelę pewnej funkcji, preferowane jest rozszerzenie **dat**, w pozostałych przypadkach — rozszerzenie **txt**. W przypadku, gdy dany plik dyskowy już istnieje w aktualnym katalogu, wyniki są dopisywane do niego.

Utworzone w ten sposób pliki zawierające tabele funkcji mogą być po usunięciu pierwszego wiersza, stanowiącego nagłówek tabeli, odczytywane

przez inne programy. Należą do nich programy rysowania wykresów, np. **Origin**, który „rozpoznaje” pliki z rozszerzeniami **dat** i **txt** oraz arkusze kalkulacyjne, np. **MS Excel**, który m.in. wczytuje pliki z rozszerzeniem **txt**.

### 1.3.5 Zapis parametrów

Niektóre parametry, określające działanie programów (np. parametry procesu relaksacyjnego) są zapisane w plikach dyskowych o nazwach **<Nazwa programu>.par**, zwanych dalej plikami konfiguracyjnymi. Po uruchomieniu danego programu parametry te są automatycznie wczytywane z odpowiedniego pliku konfiguracyjnego. Wywołanie komendy menu podrzędnego **Zapis/Parametry — Plik <Nazwa programu>.par** powoduje zapis parametrów w pliku konfiguracyjnym. W ten sposób można zachować aktualne wartości tych parametrów.

### 1.3.6 Dane testowe

W celu zapoznania użytkownika ze sposobem działania programów załączono do nich przykładowe pliki danych. Plik **Test.dat** przedstawia rezultat pomiaru prądu TSD, odpowiadającego pojedynczemu procesowi relaksacji, pliki **Test1.dat — Test4.dat** przedstawiają teoretyczne krzywe TSD, odpowiadające kolejno 1, 2, 3 i 4 procesom relaksacyjnym. Wartości parametrów tych procesów zamieszczono w tabelce (wartości odpowiadające danym **Test.dat** mają przybliżony charakter).

Plik	$E_a$ [eV]	$\tau_0$ [s]	$P_0$ [C/cm <sup>2</sup> ]	$T_m$ [K]	$J_m$ [A/cm <sup>2</sup> ]
Test.dat	0.77	$1.30 \cdot 10^{-7}$	$5.80 \cdot 10^{-9}$	410	$6.3 \cdot 10^{-12}$
Test1.dat	0.80	$2.87 \cdot 10^{-8}$	$8.68 \cdot 10^{-10}$	400	$1.0 \cdot 10^{-12}$
Test2.dat	1.00	$5.64 \cdot 10^{-12}$	$6.05 \cdot 10^{-10}$	370	$1.0 \cdot 10^{-12}$
	1.00	$1.48 \cdot 10^{-10}$	$7.39 \cdot 10^{-10}$	410	$1.0 \cdot 10^{-12}$
Test3.dat	1.30	$1.09 \cdot 10^{-16}$	$4.47 \cdot 10^{-10}$	360	$1.0 \cdot 10^{-12}$
	1.30	$3.20 \cdot 10^{-15}$	$5.22 \cdot 10^{-10}$	390	$1.0 \cdot 10^{-12}$
	1.30	$5.88 \cdot 10^{-14}$	$6.04 \cdot 10^{-10}$	420	$1.0 \cdot 10^{-12}$
Test4.dat	1.50	$3.54 \cdot 10^{-20}$	$3.68 \cdot 10^{-10}$	350	$1.0 \cdot 10^{-12}$
	1.50	$1.12 \cdot 10^{-18}$	$4.22 \cdot 10^{-10}$	375	$1.0 \cdot 10^{-12}$
	1.50	$2.32 \cdot 10^{-17}$	$4.79 \cdot 10^{-10}$	400	$1.0 \cdot 10^{-12}$
	1.50	$3.38 \cdot 10^{-16}$	$5.39 \cdot 10^{-10}$	425	$1.0 \cdot 10^{-12}$

## Rozdział 2

# Programy TSDOb11, TSDOb12

*Programy TSDOb11 i TSDOb12 są przeznaczone głównie do obliczania teoretycznych przebiegów prądu TSD i polaryzacji, związanych z pojedynczym procesem relaksacyjnym. Możliwe jest też wczytanie tablicowanych danych doświadczalnych, reprezentujących przebieg prądu TSD, obliczenie przebiegu polaryzacji przez całkowanie numeryczne i określenie parametrów procesu relaksacyjnego przez wizualne dopasowanie teoretycznych krzywych prądu TSD i polaryzacji do krzywych doświadczalnych. Szersze możliwości analizy danych doświadczalnych dają programy TSDFit1 i TSDFit2.*

### 2.1 Podstawowe informacje

Programy TSDOb11 i TSDOb12 są niemal identyczne. Jedyna różnica polega na tym, że w programie TSDOb11 parametrami wejściowymi do obliczania przebiegów prądu TSD i polaryzacji są energia aktywacji  $E_a$  oraz czynnik przedwykładniczy  $\tau_0$  i polaryzacja nasycenia  $P_0$  a w programie TSDOb12 — energia aktywacji  $E_a$  oraz temperatura  $T_m$ , odpowiadająca maksimum prądu TSD i maksymalna wartość gęstości prądu  $J_m$ . Z tego względu program TSDOb12 jest wygodniejszy przy dopasowywaniu teoretycznego przebiegu prądu TSD do przebiegu doświadczalnego.

Zakres i liczbę punktów, w których są obliczane teoretyczne wartości gęstości prądu TSD  $J_a(T_i)$  i polaryzacji  $P_a(T_i)$  określają parametry  $T_{min}$ ,  $T_{max}$  i  $N_{out}$ . Wartości  $J_a(T_i)$  i  $P_a(T_i)$  są tablicowane ze stałym odstępem  $\Delta T = (T_{max} - T_{min}) / (N_{out} - 1)$ , przy czym  $i = 1, 2, \dots, N_{out}$ . Parametry  $T_{min}$ ,  $T_{max}$  i  $N_{out}$  wyznaczają jednocześnie zakres temperatury i liczbę punktów, w których wielkości  $J_a(T_i)$  i  $P_a(T_i)$  są wyświetlane na wykresach oraz wyświetlane, zapisywane i drukowane w tabelach.

Wszystkie w.w. parametry oraz prędkość ogrzewania  $b$  i początkowa temperatura  $T_0$  zapisywane są w plikach konfiguracyjnych programów.

## 2.2 Opis komend menu

### 2.2.1 Główne menu

Główne menu obu programów ma postać:

- Dane
- Parametry
- Wykresy
- Tabele
- Zapis
- Wydruk
- O programie
- Koniec

Poszczególne pozycje są omówione w następujących podrozdziałach.

### 2.2.2 Dane

Po wyborze komendy wyświetlane jest menu podrzędne:

- Czytanie danych
- Usuwanie danych

Wywołanie komendy **Czytanie danych** umożliwia wybór pliku dyskowego i wczytanie z niego danych. Poprzednie wartości wszystkich wielkości są zastępowane przez wartości odczytane z pliku. Jeżeli wcześniej dane nie były wczytane, zmiana ta dotyczy wartości prędkości ogrzewania  $b$  i początkowej temperatury  $T_0$ , które są wczytywane z pliku konfiguracyjnego przy uruchomieniu programu. Następnie w programie obliczana jest polaryzacja  $P_d(T_i)$  przez całkowanie funkcji  $J_d(T_i)$  zwykłą metodą trapezów. Za górną granicę całkowania  $T_{lim}$  przyjmuje się maksymalną wartość temperatury  $T_i$ , tzn. wartość  $T_{N_{in}}$ , gdzie  $N_{in}$  jest liczbą danych wejściowych. Należy zwrócić uwagę, że do funkcjonowania obu programów nie jest wymagane początkowe wczytanie danych.

Wybór komendy **Usuwanie danych** powoduje, że dane doświadczalne nie są pokazywane na wykresach ani wyświetlane, zapisywane i drukowane w tabelach.

### 2.2.3 Parametry

Wywołanie tej komendy powoduje wyświetlenie okienka dialogowego, które umożliwia zmianę wartości parametrów doświadczalnych —  $b$  i  $T_0$ , parametrów procesu relaksacyjnego —  $E_a$  oraz  $\tau_0$  i  $P_0$  w przypadku programu **TSDOb11** lub  $T_m$  i  $J_m$  w przypadku programu **TSDOb12**, jak również parametrów obliczeń —  $T_{min}$ ,  $T_{max}$  i  $N_{out}$ . W okienku dialogowym programu **TSDOb12** wyświetlane są dodatkowo wartości  $\tau_0$  i  $P_0$  (wartości tych nie można bezpośrednio zmienić).

### 2.2.4 Wykresy

Komenda ta pozwala na obejrzenie wykresów obliczonych i ew. wczytanych funkcji. Odpowiednie menu podrzędne wygląda następująco:

- **Wykres 1:**  $J_a, J_d — T$
- **Wykres 2:**  $P_a, P_d — T$
- **Włącz/wyłącz siatkę**

**Wykres 1** przedstawia przebieg gęstości  $J_a(T)$  prądu TSD, obliczony analitycznie (ciągła linia) oraz, w przypadku wczytania danych, doświadczalny przebieg gęstości  $J_d(T)$  prądu (czarne punkty).

**Wykres 2** pokazuje obliczony analitycznie przebieg polaryzacji  $P_a(T)$  (ciągła linia) oraz, gdy były wczytane dane, przebieg polaryzacji  $P_d(T)$  (czarne punkty), otrzymany przez całkowanie gęstości prądu  $J_d(T)$ .

Komenda **Włącz/wyłącz siatkę** powoduje wyświetlenie na wykresach siatki współrzędnych, jeżeli nie była ona wcześniej wyświetlana, lub usunięcie z wykresów siatki współrzędnych, gdy była ona uprzednio wyświetlana.

### 2.2.5 Tabele

Wybór powyższej komendy pozwala na przegląd tabel wyników obliczeń i ew. danych wejściowych. Wyświetlane menu podrzędne ma postać:

- **Tabela 1:**  $T — J_a — P_a$
- **Tabela 2:**  $T — J_d — P_d$

**Tabela 1** pokazuje obliczone analitycznie wartości temperatury  $T_i$ , gęstości prądu TSD  $J_a(T_i)$  i polaryzacji  $P_a(T_i)$  ( $i = 1, 2, \dots, N_{out}$ ).

**Tabela 2** zawiera doświadczalne wartości temperatury  $T_i$ , gęstości prądu  $J_d(T_i)$  i obliczonej na ich podstawie polaryzacji  $P_d(T_i)$  ( $i = 1, 2, \dots, N_{in}$ ). Dodatkowo wyświetlane są numery wierszy tabel. Jest ona wyświetlana tylko w przypadku wcześniejszego wczytania danych.

### 2.2.6 Zapis

Komendę tę wywołuje się w celu zapisu wyników obliczeń i danych wejściowych w pliku dyskowym. Wyświetlane jest wówczas następujące menu podrzędne:

- **Parametry obliczeń**
- **Tabela 1:**  $T — J_a — P_a$
- **Tabela 2:**  $T — J_d — P_d$
- **Parametry** — plik TSDObl(1,2).par

Wybór komendy **Parametry obliczeń** powoduje zapisanie nazwy programu, ew. nazwy wejściowego pliku danych i aktualnych parametrów obliczeń, wybór drugiej lub trzeciej komendy – zapis odpowiedniej tabeli wraz z jej nagłówkiem. Postać tabel jest podobna, jak w przypadku ich przeglądania (poprzedni podrozdział), nie zapisywane są jednak numery wierszy. Tabela 2 może być zapisana tylko w przypadku uprzedniego wczytania danych. Komenda **Parametry** — plik TSDObl(1,2).par służy do zapisu aktualnych wartości parametrów w pliku konfiguracyjnym programu.

### 2.2.7 Wydruk

Komenda ta umożliwia wydrukowanie danych wejściowych i wyników obliczeń oraz ew. danych doświadczalnych. Wyświetlane menu podrzędne i postać drukowanych wyników są identyczne, jak w przypadku ich zapisu w pliku dyskowym (por. pozycje 1-3 menu z poprzedniego podrozdziału). Tabela 2 jest drukowana tylko po wcześniejszym wczytaniu danych.

### 2.2.8 O programie

Po wybraniu tej komendy wyświetlana jest krótka informacja o autorze i aktualnej wersji programu.

### 2.2.9 Koniec

Wywołanie tej komendy powoduje zakończenie pracy programu.

## Rozdział 3

# Program TSDFit1

Głównym przeznaczeniem programu **TSDFit1** jest analiza doświadczalnego przebiegu prądu TSD, związanego z pojedynczym procesem relaksacyjnym. Parametry procesu są określane metodą Bucciego. Dla większej liczby procesów relaksacyjnych wyznaczenie ich parametrów jest możliwe tylko w przypadku niewielkiego nakładania się poszczególnych krzywych TSD. W przeciwnym przypadku lepsze rezultaty można uzyskać przy pomocy programu **TSDFit2**.

### 3.1 Podstawowe informacje

Przy użytkowaniu programu **TSDFit1** pierwszą czynnością powinno być wczytanie danych. Do tego momentu większość komend menu jest zablokowana (komendy oznaczone szarym kolorem). Po odczytaniu danych przeprowadzana jest ich analiza metodą Bucciego (patrz podrozdział 1.1.2) przy założeniu, że dane odpowiadają pojedynczemu procesowi relaksacyjnemu. W programie obliczane są kolejno: polaryzacja  $P_d(T_i)$  przez numeryczne całkowanie funkcji  $J_d(T_i)$  ( $i = 1, 2, \dots, N_{in}$ ), czas relaksacji  $\tau_d(T_i)$  ze wzoru (1.9), energia aktywacji  $E_a$  i czynnik przedwykładniczy  $\tau_0$  przez aproksymację funkcji  $\log \tau_d(T_i) - 1000/T_i$  funkcją liniową oraz polaryzacja nasycenia  $P_0$ . Następnie, na podstawie wyznaczonych wartości  $E_a$ ,  $\tau_0$  i  $P_0$ , obliczane są teoretyczne wartości gęstości prądu TSD  $J_a(T_i)$ , polaryzacji  $P_a(T_i)$  oraz czasu relaksacji  $\tau_a(T_i)$  ( $i = 1, 2, \dots, N_{out}$ ).

Wyniki powyższych obliczeń zależą od parametrów, które określają: zakres całkowania numerycznego, zakres aproksymacji, w którym przeprowadzana jest analiza krzywej TSD, zakres obliczeń, w którym wyliczane są teoretyczne wartości prądu TSD, polaryzacji i czasu relaksacji oraz od metod numerycznego całkowania i obliczania polaryzacji nasycenia. Do ich zmiany służy komenda głównego menu **Parametry** z odpowiednimi podkomendami. W programie obliczenia przeprowadzane są dla trzech zestawów parametrów i metod, zwanych dalej seriami i dokonywane ponownie po każdej

ich zmianie. Wyniki obliczeń, odpowiadające poszczególnym seriom, mogą być wyświetlane na wykresach i w tabelach oraz zapisywane na dysku i drukowane.

## 3.2 Opis komend menu

### 3.2.1 Główne menu

Główne menu programu ma postać:

- Dane
- Parametry
- Wykresy
- Tabele
- Zapis
- Wydruk
- O programie
- Koniec

Poszczególne pozycje są omówione w następujących podrozdziałach.

### 3.2.2 Dane

Wywołanie tej komendy umożliwia wybór pliku dyskowego i wczytanie z niego danych. Jeżeli dane były już czytane wcześniej, poprzednie wartości wszystkich wielkości są zastępowane przez wartości odczytane z aktualnego pliku.

### 3.2.3 Parametry

Komenda ta pozwala na określenie parametrów i metod, mających wpływ na wyniki obliczeń. Pojawia się wówczas podrzędne menu:

- Zakres aproksymacji
- Metody numeryczne
- Zakres obliczeń
- Numery serii

wybór komend którego powoduje wyświetlenie odpowiedniego okienka dialogowego.

Komenda **Zakres aproksymacji** umożliwia zmianę dolnej i górnej granicy,  $T_{min}$  i  $T_{max}$ , zakresu aproksymacji oraz dolnej i górnej granicy,  $T_{ini}$  i  $T_{lim}$ , zakresu całkowania numerycznego gęstości prądu przy obliczaniu polaryzacji. W przedziale  $[T_{min}, T_{max}]$  wyznacza się: 1) wartości  $E_a$  i  $\tau_0$  na podstawie przebiegu funkcji  $\log \tau_d(T) - 1000/T$ , 2) wartość  $P_0$  przez dopasowanie teoretycznych krzywych  $J_a(T)$  lub  $P_a(T)$  do krzywych doświadczalnych. W programie przyjęto, że wartość polaryzacji poza przedziałem całkowania jest równa zero. Zakresy aproksymacji i całkowania powinny się przynajmniej częściowo nakładać. Jeżeli  $T_{min} < T_{ini}$ , to zakres aproksymacji odpowiada przedziałowi  $[T_{ini}, T_{max}]$  a gdy  $T_{lim} < T_{max}$  — przedziałowi  $[T_{min}, T_{lim}]$ . Do pól okienka dialogowego można wpisywać wartości temperatur  $T...$  (pola po lewej stronie) bądź też wartości  $1000/T...$  (pola po prawej stronie). Wczytywane są tylko wartości z pól z włączonym przełącznikiem, oznaczonym czarną kropką.

Po wczytaniu danych za zakres aproksymacji i całkowania przyjmowany jest zakres zmienności wczytanych danych, tj.  $T_{min} = T_{ini} = T_1$ ,  $T_{max} = T_{lim} = T_{N_{in}}$ , gdzie  $N_{in}$  jest liczbą punktów krzywej TSD. Zgodnie z obliczeniami testowymi wykres Bucciego,  $\log \tau_d(T) - 1000/T$ , wykazuje odchylenia od liniowości nawet w przypadku danych, odpowiadających teoretycznym krzywom TSD. Jest to spowodowane małą dokładnością całkowania numerycznego dla temperatur  $T \approx T_{lim}$ . W praktyce konieczne jest więc zawsze ograniczenie przedziału aproksymacji do prostoliniowej części wykresu Bucciego. Natomiast zawężenie przedziału całkowania powinno być stosowane tylko w wyjątkowych przypadkach, dla wyodrębnienia analizowanej krzywej TSD spośród kilku słabo nakładających się krzywych.

Komenda **Metody numeryczne** pozwala na wybór metod numerycznego całkowania oraz wyznaczania polaryzacji nasycenia  $P_0$ . Dokonuje się go przez włączenie przełącznika, oznaczonego czarną kropką, przy nazwie metody. Do wyboru są trzy metody całkowania (por. podrozdział 1.2.1): metoda trapezów z wygładzaniem (metoda 1) lub bez wygładzania (metoda 2) funkcji podcałkowej i metoda parabol. Należy zauważyć, że pierwsza i trzecia metoda wymagają nieparzystej liczby punktów w przedziale całkowania. Jeżeli liczba punktów jest parzysta, wartość polaryzacji w punkcie położonym najbliżej granicy całkowania  $T_{ini}$  przyjmowana jest za równą zero. Można też wybrać jedną z trzech metod wyznaczania polaryzacji nasycenia  $P_0$ : przez dopasowanie teoretycznych przebiegów funkcji  $J_a(T)$  i  $P_a(T)$  do przebiegów doświadczalnych  $J_d(T)$  i  $P_d(T)$  w przedziale aproksymacji, oraz przez założenie, że polaryzacja nasycenia odpowiada polaryzacji w początkowym punkcie przedziału całkowania (metody od 1 do 3). Ostatnia metoda daje poprawne wyniki tylko wówczas, gdy przedział całkowania obejmuje niemal całą krzywą TSD.

Komenda **Zakres obliczeń** pozwala ustalić zakres i liczbę punktów, w których są obliczane teoretyczne wartości prądu TSD  $J_a(T_i)$ , polaryzacji  $P_a(T_i)$  i logarytmu czasu relaksacji  $\log \tau_a(T_i)$ . Określają je odpowiednio parametry  $T_{min}$ ,  $T_{max}$  i  $N_{out}$ . Podobnie jak w przypadku okienka dialogowego Zakres aproksymacji, można wpisywać wartości temperatur  $T_{...}$  (pola po lewej stronie) bądź też wartości  $1000/T_{...}$  (pola po prawej stronie), włączając przełącznik przy danym polu. Wartości  $J_a(T_i)$  i  $P_a(T_i)$  są tablicowane ze stałym odstępem  $\Delta T = (T_{max} - T_{min}) / (N_{out} - 1)$ , przy czym  $i = 1, 2, \dots, N_{out}$ . Dane do wykresu Bucciego,  $\log \tau_a(T_i) - 1000/T_i$  odpowiadają tym samym wartościom temperatur  $T_i$ .

Parametry  $T_{min}$ ,  $T_{max}$  i  $N_{out}$  wyznaczają jednocześnie zakres temperatury i liczbę punktów, w których wielkości  $J_a(T_i)$ ,  $P_a(T_i)$  i  $\log \tau_a(T_i)$  są wyświetlane na wykresach oraz wyświetlane, zapisywane i drukowane w tabelach.

Komenda **Numery serii** umożliwia wybór serii danych, odpowiadające którym wyniki są przedstawiane na wykresach (do 3 serii) oraz w wyświetlanych, zapisywanych na dysku i drukowanych tabelach (tylko jedna, wybrana seria). Należy w tym celu włączyć odpowiednie przełączniki, oznaczone „ptaszkiem” lub kropką.

### 3.2.4 Wykresy

Komenda ta pozwala na obejrzenie i porównanie wykresów otrzymanych na podstawie danych doświadczalnych i obliczonych funkcji. Odpowiednie menu podrzędne wygląda następująco:

- **Wykres 1:**  $J_d, J_a - T$
- **Wykres 2:**  $P_d, P_a - T$
- **Wykres 3:**  $\log \tau_d, \log \tau_a - 1000/T$
- **Włącz/wyłącz siatkę**

Kolory punktów i linii odpowiadają, za wyjątkiem punktów na wykresie 1, kolorom numerów wybranych serii danych, które są wyświetlane w dolnym lewym rogu wykresu. Punkty leżące w zakresie aproksymacji są oznaczone pełnymi kółkami, pozostałe punkty — pustymi kółkami. W przypadku wyboru więcej niż jednej serii danych wykresy mogą być mało czytelne. Należy zwrócić uwagę, że wykresy są wówczas nakładane na siebie w kolejności numerów serii — od 1 do 3.

**Wykres 1** przedstawia doświadczalny przebieg  $J_d(T)$  gęstości prądu TSD (czarne punkty) oraz przebieg  $J_a(T)$  gęstości prądu, obliczony analitycznie (ciągła linia).

**Wykres 2** pokazuje przebieg polaryzacji  $P_d(T)$  (punkty), otrzymany przez całkowanie gęstości prądu  $J_d(T)$  oraz obliczony analitycznie przebieg polaryzacji  $P_a(T)$  (ciągła linia).

**Wykres 3** jest wykresem Bucciego, przedstawiającym przebiegi wielkości  $\log \tau_d(T)$  i  $\log \tau_a(T)$ , obliczonych na podstawie danych doświadczalnych i obliczonych analitycznie (odpowiednio punkty i linie), w funkcji  $1000/T$ .

Komenda **Włącz/wyłącz siatkę** powoduje wyświetlenie na wykresach siatki współrzędnych, jeżeli nie była ona wcześniej wyświetlana, lub usunięcie z wykresów siatki współrzędnych, gdy była ona uprzednio wyświetlana.

### 3.2.5 Tabele

Wybór powyższej komendy pozwala na przegląd tabel wyników obliczeń, łącznie z wejściowymi wartościami gęstości prądu. Wyświetlane menu podrzędne ma postać:

- **Wyniki obliczeń**
- **Tabela 1:**  $T — J_d — P_d$
- **Tabela 2:**  $T — J_a — P_a$
- **Tabela 3:**  $1000/T — \log \tau_d$
- **Tabela 4:**  $1000/T — \log \tau_a$

Dla ułatwienia orientacji wiersze tabel 1-4 są kolejno numerowane.

Komenda **Wyniki obliczeń** powoduje wyświetlenie obliczonych wartości energii aktywacji  $E_a$ , czynnika przedwykładniczego  $\tau_0$  i polaryzacji nasycenia  $P_0$  oraz ich błędów dla trzech serii danych. Podawane wartości błędów należy traktować jako orientacyjne. Ich oszacowanie opiera się na założeniu, że odstępstwa funkcji  $J_a(T)$ ,  $P_a(T)$  i  $\tau_a(T)$  od funkcji  $J_d(T)$ ,  $P_d(T)$  i  $\tau_d(T)$  są przypadkowe, podczas gdy w rzeczywistości mają one na ogół systematyczny charakter.

**Tabela 1** zawiera doświadczalne wartości temperatury  $T_i$ , gęstości prądu  $J_d(T_i)$  i obliczonej na ich podstawie polaryzacji  $P_d(T_i)$ .

**Tabela 2** pokazuje wartości temperatury  $T_i$ , gęstości prądu TSD  $J_a(T_i)$  i polaryzacji  $P_a(T_i)$  ( $i = 1, 2, \dots, N_{out}$ ), obliczone na podstawie wyznaczonych wartości  $E_a$ ,  $\tau_0$  i  $P_0$ ,

**Tabela 3** przedstawia wielkości odpowiadające wykresowi Bucciego, tj. wartości  $1000/T_i$  i  $\log \tau_d(T_i)$ , obliczone na podstawie danych doświadczalnych.

**Tabela 4** reprezentuje obliczone analitycznie wielkości odpowiadające wykresowi Bucciego, tzn. wartości  $1000/T_i$  i  $\log \tau_a(T_i)$ .

### 3.2.6 Zapis

Komendę tę wywołuje się w celu zapisu wyników obliczeń i danych wejściowych w pliku dyskowym. Wyświetlane jest wówczas następujące menu podrzędne:

- Parametry obliczeń
- Wyniki obliczeń
- Tabela 1:  $T — J_d — P_d$
- Tabela 2:  $T — J_a — P_a$
- Tabela 3:  $1000/T — \log\tau_d$
- Tabela 4:  $1000/T — \log\tau_a$
- Parametry — plik TSDFit1.par

Wybór komendy **Parametry obliczeń** powoduje zapisanie nazwy programu, nazwy wejściowego pliku danych i aktualnych parametrów obliczeń dla trzech serii, wybór komendy **Wyniki obliczeń** — zapis obliczonych wartości  $E_a$ ,  $\tau_0$  i  $P_0$  i ich błędów dla trzech serii parametrów obliczeń, wybór komend od trzeciej do szóstej – zapis odpowiedniej tabeli wraz z jej nagłówkiem. Postać tabel jest podobna, jak w przypadku ich przeglądania (poprzedni podrozdział), nie zapisywane są jednak numery wierszy.

Komenda **Parametry** — plik **TSDFit1.par** służy do zapisu aktualnych wartości parametrów w pliku konfiguracyjnym programu. Określają one: ustawienie wszystkich przełączników w okienkach dialogowych komendy **Parametry**, numer wyświetlanego wykresu, włączenie/wyłączenie siatki na wykresach i liczbę punktów  $N_{out}$ , dla których wyliczane są teoretyczne wartości gęstości prądu TSD i pozostałych wielkości.

### 3.2.7 Wydruk

Komenda ta umożliwia wydrukowanie danych wejściowych oraz wyników obliczeń. Wyświetlane menu podrzędne i postać drukowanych wyników są identyczne, jak w przypadku ich zapisu w pliku dyskowym (por. pozycje 1-6 menu z poprzedniego podrozdziału).

### 3.2.8 O programie

Po wybraniu tej komendy wyświetlana jest krótka informacja o autorze i aktualnej wersji programu.

### 3.2.9 Koniec

Wywołanie tej komendy powoduje zakończenie pracy programu.

## Rozdział 4

# Program TSDFit2

*Program TSDFit2 jest przeznaczony do analizy doświadczalnego przebiegu prądu TSD, zarówno w przypadku pojedynczego jak i większej liczby (do czterech) procesów relaksacyjnych. Ich parametry są wyznaczone przez minimalizację funkcji, przedstawiającej średniokwadratowe odchylenie teoretycznego przebiegu termostymulowanego prądu od przebiegu doświadczalnego. Ogólne informacje, dotyczące zasady działania programu oraz minimalizacji funkcji wielu zmiennych, zamieszczono w podrozdziale 1.2.2.*

### 4.1 Podstawowe informacje

Pierwszą czynnością przy użytkowaniu programu **TSDFit2** powinno być wczytanie danych. Wcześniej większość komend menu jest niedostępna (są one oznaczone szarym kolorem). Po odczytaniu danych wyświetlany jest wykres, przedstawiający doświadczalny przebieg  $J_d(T)$  gęstości prądu TSD (czarne punkty) oraz przebiegi  $J_{ak}(T)$  i ew.  $J_a(T)$  gęstości prądu, obliczone analitycznie.  $J_{ak}(T)$  ( $1 \leq k \leq 4$ ) oznacza gęstość prądu, odpowiadającego pojedynczemu procesowi relaksacji (kolorowa linia) natomiast  $J_a(T)$  — sumaryczną gęstość prądu, związaną ze wszystkimi wybranymi procesami relaksacyjnymi (czarna linia; wykres wyświetlany w przypadku co najmniej dwóch procesów). Korzystając z komendy podrzędnego menu **Parametry/Parametry pików TSD** należy tak dobrać liczbę i wejściowe wartości parametrów procesów relaksacyjnych — energii aktywacji  $E_{ak}$ , temperatury  $T_{mk}$ , odpowiadającej maksimum gęstości prądu TSD i maksymalnej wartości gęstości prądu  $J_{mk}$ , aby teoretyczny przebieg gęstości prądu był zbliżony do przebiegu doświadczalnego. Inne podkomendy menu **Parametry** umożliwiają zmianę zakresu aproksymacji, w którym przeprowadzane jest dopasowanie teoretycznej krzywej TSD do krzywej doświadczalnej oraz wartości parametrów, określających działanie podprogramu minimalizacji. Początkowe wartości większości z wymienionych parametrów są odczytywane z pliku konfiguracyjnego programu.

Po ustaleniu wartości parametrów obliczeń należy wywołać komendę głównego menu **Obliczenia**. Powoduje to uruchomienie podprogramu minimalizacji odchylenia teoretycznego przebiegu gęstości prądu TSD od przebiegu doświadczalnego, który oblicza optymalne wartości parametrów procesów relaksacyjnych —  $E_{ak}$ ,  $T_{mk}$  i  $J_{mk}$ . Następnie wyliczane są wartości czynnika przedwykładniczego  $\tau_{0k}$ , polaryzacji nasycenia  $P_{0k}$  (patrz podrozdział 1.1.2) oraz wartości gęstości prądów TSD  $J_{ak}(T_i)$  i ew.  $J_a(T_i)$  ( $i = 1, 2, \dots, N_{out}$ ). Obliczone przebiegi gęstości prądów są po zakończeniu obliczeń wyświetlane na wykresie. Wszystkie wyniki obliczeń są zamieszczane w tabelach, które mogą być wyświetlane, zapisywane na dysku i drukowane. W przypadku, gdy występują znaczne rozbieżności między wyliczonym i doświadczalnym przebiegiem gęstości prądu lub gdy zachodzi potrzeba zwiększenia dokładności obliczeń, można je powtarzać, zmieniając parametry obliczeń.

## 4.2 Opis komend menu

### 4.2.1 Główne menu

Główne menu programu wygląda jak następuje:

- Dane
- Parametry
- Obliczenia
- Wykres
- Tabele
- Zapis
- Wydruk
- O programie
- Koniec

Poszczególne pozycje są omówione w następnych podrozdziałach.

### 4.2.2 Dane

Wywołanie tej komendy umożliwia wybór pliku dyskowego i wczytanie z niego danych. Jeżeli dane były już czytane wcześniej, poprzednie wartości wszystkich wielkości są zastępowane przez wartości odczytane z aktualnego pliku. Po wczytaniu danych wyświetlane na wykresie teoretyczne przebiegi gęstości prądu odpowiadają *wejściowym* wartościom parametrów procesów relaksacyjnych.

### 4.2.3 Parametry

Komenda ta pozwala na określenie większości parametrów obliczeń. Wyświetlane jest wtedy podrzędne menu:

- **Parametry pików TSD**
- **Przepisanie parametrów**
- **Zakres aproksymacji**
- **Parametry obliczeń**

wybór komend którego powoduje ukazanie się odpowiedniego okienka dialogowego. Teoretyczne przebiegi gęstości prądu, pokazywane na wykresie po wywołaniu jednej z ww. pokomend, odpowiadają zawsze *wejściowym* wartościom parametrów procesów relaksacyjnych.

Komenda **Parametry pików TSD** umożliwia ustalenie liczby procesów relaksacyjnych oraz wejściowych wartości ich parametrów —  $E_{ak}$ ,  $T_{mk}$  i  $J_{mk}$ . Pola okienka dialogowego, do których wpisuje się nowe wartości tych parametrów, połączone są w grupy odpowiadające poszczególnym procesom, numerowane od 1 do 4. Liczbę procesów relaksacyjnych ustala się włączając lub wyłączając oznaczony „ptaszkiem” przełącznik przy danej grupie. W obliczeniach uwzględniane są jedynie wartości z grup pól z włączonym przełącznikiem. W celu identyfikacji na wykresie poszczególnych krzywych gęstości prądu  $J_{ak}(T)$ , w lewym dolnym rogu wykresu wyświetlane są tym samym kolorem wybrane numery procesów relaksacyjnych.

Komenda **Przepisanie parametrów** powoduje przepisanie *wyjściowych* wartości parametrów  $E_{ak}$ ,  $T_{mk}$  i  $J_{mk}$ , otrzymanych w rezultacie poprzedniego wywołania komendy **Obliczenia**, jako nowych *wejściowych* wartości parametrów wybranych procesów. Można następnie kontynuować obliczenia, co przy odpowiednio dobranych wartościach pozostałych parametrów obliczeń (por. opis następnych komend) pozwala na ogół zwiększyć dokładność wyznaczenia wielkości  $E_{ak}$ ,  $T_{mk}$  i  $J_{mk}$ .

Komenda **Zakres aproksymacji** umożliwia zmianę dolnej i górnej granicy,  $T_{min}$  i  $T_{max}$ , przedziału, w którym doświadczalna krzywa TSD  $J_d(T)$  jest aproksymowana krzywą teoretyczną  $J_a(T)$  lub  $J_{ak}(T)$ . Na wykresie punkty doświadczalne leżące w zakresie aproksymacji są oznaczone punktami, pozostałe punkty — pustymi kółkami. Zawężenie zakresu aproksymacji może być wykorzystane do wyodrębnienia odpowiedniego fragmentu analizowanej krzywej TSD. Za początkowy zakres aproksymacji przyjmowany jest zakres zmienności wczytanych danych, tj.  $T_{min} = T_1$ ,  $T_{max} = T_{N_{in}}$ , gdzie  $N_{in}$  jest liczbą punktów doświadczalnej krzywej TSD.

Ostatnia komenda **Parametry obliczeń** pozwala na zmianę parametrów, kontrolujących działanie podprogramu minimalizacji. Wielkości  $QE_a$ ,  $QT_m$  i  $QJ_m$ , których wartości muszą być większe od jedności, wyznaczają

przeszukiwane w podprogramie przedziały zmienności parametrów  $E_{ak}$ ,  $T_{mk}$  i  $J_{mk}$ . Odpowiednie przedziały są określone jak następuje:  $[E_{ak}/QE_a, E_{ak} * QE_a]$ ,  $[T_{mk}/QT_m, T_{mk} * QT_m]$  i  $[J_{mk}/QJ_m, J_{mk} * QJ_m]$ , gdzie  $E_{ak}$ ,  $T_{mk}$  i  $J_{mk}$  oznaczają wejściowe wartości parametrów. Wartość początkowych kroków przeszukiwania zakresu parametrów określa czynnik  $Del$  ( $Del < 1.0$ ):  $\Delta E_{ak} = Del * E_{ak} * (QE_a - 1/QE_a)$ ,  $\Delta T_{mk} = Del * T_{mk} * (QT_m - 1/QT_m)$ ,  $\Delta J_{mk} = Del * J_{mk} * (QJ_m - 1/QJ_m)$ . Całkowity parametr  $Ldiv$  ( $1 \leq Ldiv \leq 9$ ) określa, ile razy kroki przeszukiwania są dzielone przez 10 w trakcie obliczeń.

Z powyższego opisu wynika, że dokładność wyznaczenia parametrów relaksacji wzrasta m.in. przy zmniejszaniu wartości  $Del$  i zwiększaniu wartości  $Ldiv$ . Jednocześnie rośnie jednak wyraźnie czas obliczeń. Z tego względu celowe jest przeprowadzenie wstępnych obliczeń z niezbyt dużą dokładnością, przyjmując np.  $Del = 0.2$  i  $Ldiv = 2$ . Znając przybliżone wartości parametrów procesów relaksacyjnych można następnie, powtarzając obliczenia, określić ich optymalne wartości.

#### 4.2.4 Obliczenia

Powyższa komenda powoduje wywołanie podprogramu, dopasowującego teoretyczny przebieg gęstości prądu TSD do przebiegu doświadczalnego. Podczas trwania obliczeń wyświetlane jest okienko dialogowe z odpowiednim komunikatem. Po zakończeniu obliczeń przebiegi gęstości prądów, odpowiadające wyznaczonym wartościom parametrów procesów relaksacyjnych, są wyświetlane na wykresie i zamieszczane w tabelach.

Należy zwrócić uwagę, że jedyna możliwość przerwania obliczeń polega na wciśnięciu kombinacji klawiszy **Ctrl** + **Alt** + **Del** i zamknięciu okienka dialogowego **Zakończ program**, wyświetlanego wówczas przez system operacyjny.

#### 4.2.5 Wykres

Po wyborze powyższej komendy wyświetlane jest następujące menu podrzędne:

- **Zakres wyświetlania**
- **Włącz/wyłącz siatkę**

Podkomenda **Zakres wyświetlania** pozwala zmienić przedział, od  $T_{min}$  do  $T_{max}$ , oraz liczbę punktów  $N_{out}$ , w których są obliczane i wyświetlane na wykresie teoretyczne wartości gęstości prądu TSD  $J_{ak}(T_i)$  i ew.  $J_a(T_i)$ . Wartości te są tablicowane ze stałym odstępem  $\Delta T = (T_{max} - T_{min}) / (N_{out} - 1)$ . Te same wartości  $T_i$ ,  $J_{ak}(T_i)$  i ew.  $J_a(T_i)$  są wyświetlane, zapisywane i drukowane w tabelach. Początkowo za zakres obliczeń w programie przyjmowany jest zakres zmienności wczytanych danych, tzn.  $T_{min} = T_1$ ,  $T_{max} = T_{N_{in}}$ .

Wywołanie podkomendy **Włącz/wyłącz siatkę** powoduje wyświetlenie na wykresach siatki współrzędnych, jeżeli nie była ona wcześniej wyświetlana, lub usunięcie z wykresów siatki współrzędnych, gdy była ona uprzednio wyświetlana.

#### 4.2.6 Tabele

Wybór powyższej komendy pozwala na przegląd tabel doświadczalnych wartości gęstości prądu TSD i wyników obliczeń. Wyświetlane menu podrzędne ma postać:

- **Wyniki obliczeń**
- **Tabela 1:**  $T — J_d$
- **Tabela 2:**  $T — J_a$
- **Tabela 3:**  $T — J_{ak}$

Wiersze tabel 1-3 są kolejno numerowane w celu ułatwienia orientacji.

Wywołanie podkomendy **Wyniki obliczeń** powoduje wyświetlenie obliczonych wartości energii aktywacji  $E_{ak}$ , temperatury  $T_{mk}$ , maksymalnej gęstości prądu  $J_{mk}$ , czynnika przedwykładniczego  $\tau_{0k}$  i polaryzacji nasycenia  $P_{0k}$  oraz ich błędów dla wybranych procesów relaksacyjnych. Przy oszacowaniu błędów przyjęto, że odstępstwa funkcji  $J_a(T)$  lub  $J_{ak}(T)$  od funkcji  $J_d(T)$  mają przypadkowy charakter, co w praktyce najczęściej nie zachodzi. Dodatkowo wyświetlana jest wartość  $\chi$  średniokwadratowego odchylenia teoretycznego przebiegu gęstości prądu TSD od przebiegu doświadczalnego (por. podrozdział 1.2.2). W celu wyznaczenia optymalnych wartości parametrów procesów relaksacyjnych zaleca się kontynuowanie obliczeń do momentu, gdy wartość średniokwadratowego odchylenia  $\chi$  przestanie znacząco zmniejszać się.

**Tabela 1** pokazuje doświadczalne wartości temperatury  $T_i$  i gęstości prądu  $J_d(T_i)$ .

**Tabela 2** przedstawia obliczone wartości temperatury  $T_i$  i sumarycznej gęstości prądu TSD  $J_a(T_i)$  ( $i = 1, 2, \dots, N_{out}$ ), odpowiadającej wszystkim wybranym procesom relaksacyjnym. Można ją wyświetlić tylko wtedy, gdy liczba procesów relaksacyjnych jest większa od jedności.

**Tabela 3** zawiera wartości temperatury  $T_i$  oraz gęstości prądów TSD  $J_{ak}(T_i)$  ( $i = 1, 2, \dots, N_{out}$ ), odpowiadających poszczególnym procesom relaksacyjnym.

#### 4.2.7 Zapis

Komendę tę wywołuje się w celu zapisania danych wejściowych i wyników obliczeń w pliku dyskowym. Wyświetlane jest wtedy następujące menu podrzędne:

- Parametry obliczeń
- Wyniki obliczeń
- Tabela 1:  $T$  —  $J_d$
- Tabela 2:  $T$  —  $J_a$
- Tabela 3:  $T$  —  $J_{ak}$
- Parametry — plik TSDFit2.par

Wybór komendy **Parametry obliczeń** powoduje zapisanie nazwy programu, nazwy wejściowego pliku danych i aktualnych parametrów obliczeń dla wybranych procesów relaksacyjnych, wybór komendy **Wyniki obliczeń** — zapis obliczonych wartości  $E_{ak}$ ,  $T_{mk}$ ,  $J_{mk}$ ,  $\tau_{0k}$  i  $P_{0k}$  i ich błędów oraz średniokwadratowego odchylenia  $\chi$ , wybór komend od trzeciej do piątej — zapis odpowiedniej tabeli wraz z jej nagłówkiem. Tabele mają podobną postać, jak w przypadku ich przeglądania (poprzedni podrozdział), nie zapisywane są jednak numery wierszy. Tabelę 2 można zapisać jedynie wówczas, gdy liczba procesów relaksacyjnych jest większa od jednośc.

Komenda **Parametry — plik TSDFit2.par** służy do zapisu aktualnych wartości parametrów w pliku konfiguracyjnym programu. Są to: wejściowe wartości parametrów wszystkich procesów relaksacyjnych, parametry podprogramu minimalizacji  $QE_a$ ,  $QT_m$ ,  $QJ_m$ ,  $Del$  i  $Ldiv$ , parametry określające ustawienie przełączników w okienku dialogowym podkomendy **Parametry/Parametry pików TSD** oraz włączenie/wyłączenie siatki na wykresie i liczba  $N_{out}$  punktów, dla których wyliczane są teoretyczne wartości gęstości prądu TSD.

#### 4.2.8 Wydruk

Komenda ta umożliwia wydrukowanie danych wejściowych oraz wyników obliczeń. Wyświetlane menu podrzędne i postać drukowanych wyników są identyczne, jak w przypadku ich zapisu w pliku dyskowym (patrz pozycje 1-5 menu z poprzedniego podrozdziału). Wydruk tabeli 2 jest możliwy tylko w przypadku dwóch lub większej liczby procesów relaksacyjnych.

#### 4.2.9 O programie

Po wybraniu tej komendy wyświetlana jest krótka informacja o autorze i aktualnej wersji programu.

#### 4.2.10 Koniec

Wywołanie tej komendy powoduje zakończenie pracy programu.

# Spis treści

<b>1</b>	<b>Ogólne informacje</b>	<b>1</b>
1.1	Prądy termicznie stymulowanej depolaryzacji . . . . .	1
1.1.1	Podstawowe wiadomości . . . . .	1
1.1.2	Analiza prądów TSD . . . . .	2
1.2	Metody numeryczne . . . . .	4
1.2.1	Numeryczne całkowanie . . . . .	4
1.2.2	Minimalizacja funkcji wielu zmiennych . . . . .	6
1.3	Zasady korzystania z programów . . . . .	7
1.3.1	Struktura programów . . . . .	7
1.3.2	Jednostki . . . . .	8
1.3.3	Czytanie danych . . . . .	9
1.3.4	Zapis wyników . . . . .	9
1.3.5	Zapis parametrów . . . . .	10
1.3.6	Dane testowe . . . . .	10
<b>2</b>	<b>Programy TSDOb1, TSDOb2</b>	<b>11</b>
2.1	Podstawowe informacje . . . . .	11
2.2	Opis komend menu . . . . .	12
2.2.1	Główne menu . . . . .	12
2.2.2	Dane . . . . .	12
2.2.3	Parametry . . . . .	13
2.2.4	Wykresy . . . . .	13
2.2.5	Tabele . . . . .	13
2.2.6	Zapis . . . . .	14
2.2.7	Wydruk . . . . .	14
2.2.8	O programie . . . . .	14
2.2.9	Koniec . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Program TSDFit1</b>	<b>15</b>
3.1	Podstawowe informacje . . . . .	15
3.2	Opis komend menu . . . . .	16
3.2.1	Główne menu . . . . .	16
3.2.2	Dane . . . . .	16

---

3.2.3	Parametry . . . . .	16
3.2.4	Wykresy . . . . .	18
3.2.5	Tabele . . . . .	19
3.2.6	Zapis . . . . .	19
3.2.7	Wydruk . . . . .	20
3.2.8	O programie . . . . .	20
3.2.9	Koniec . . . . .	20
<b>4</b>	<b>Program TSDFit2</b>	<b>21</b>
4.1	Podstawowe informacje . . . . .	21
4.2	Opis komend menu . . . . .	22
4.2.1	Główne menu . . . . .	22
4.2.2	Dane . . . . .	22
4.2.3	Parametry . . . . .	23
4.2.4	Obliczenia . . . . .	24
4.2.5	Wykres . . . . .	24
4.2.6	Tabele . . . . .	25
4.2.7	Zapis . . . . .	25
4.2.8	Wydruk . . . . .	26
4.2.9	O programie . . . . .	26
4.2.10	Koniec . . . . .	26

# Bibliografia

- [1] J. Vanderschueren i J. Gasiot, w *Thermally Stimulated Relaxation in Solids*, Topics in Applied Physics, Vol. 37, wyd. P. Braunlich (Springer, Nowy Jork, 1979).
- [2] F. Faubert i M. Sanchez, *J. Appl. Phys.* **84**, 1541 (1998).
- [3] C. Bucci, R. Fieschi i G. Guidi, *Phys. Rev.* **148**, 816 (1966).
- [4] M. Aldana, E. Laredo, A. Bello i M. Suarez, *J. Polymer Science* **32**, 2197 (1994).
- [5] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky i W.T. Wetterling, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, (Cambridge University Press, Nowy Jork, 1986), rozdział 10.