VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ
ÚSTAV AUTOMATIZACE A INFORMATIKY

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING
INSTITUTE OF AUTOMATION AND COMPUTER SCIENCE

ŘÍZENÍ NANÁŠECÍCH STOLKŮ PRO HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRY

CONTROL OF DEPOSITION INTERFACE FOR MASS SPECTROMETERS

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE
BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE ADAM KABOUREK
AUTHOR

VEDOUCÍ PRÁCE Ing. PAVEL HOUŠKA, Ph.D.
SUPERVISOR

BRNO 2012

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství

Ústav automatizace a informatiky
Akademický rok: 2011/12

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

student(ka): Adam Kabourek

který/která studuje v **bakalářském studijním programu**

obor: **Aplikovaná informatika a řízení (3902R001)**

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma bakalářské práce:

Řízení nanášecích stolků pro hmotnostní spektrometry

v anglickém jazyce:

Control of deposition interface for mass spectrometers

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Cílem práce je řešit řízení nanášecích stolků pro hmotnostní spektrometry. Je požadována co nejjednodušší specifikace bodů, nanášeného množství a ukládání nastavení. Dále je požadováno optimalizace procesu nanášení s cílem dosažení co nejvyšší rychlosti při dodržení požadované přesnosti.

Cíle bakalářské práce:

1. Seznamte se nanášecími stolky a problematikou jejich řízení;
2. Seznamte se s existujícím softwarovým řešením, definujte univerzální ovladač pro pohony;
3. Řešte optimalizaci uživatelského rozhraní s ohledem na jednoduchost ovládání,
4. Optimalizujte řízení procesu nanášení s cílem dosažení maximální rychlosti při dodržení požadované přesnosti,
5. Realizovaná řešení zhodnoťte, popište limity software a hardware.

Seznam odborné literatury:

[1] Siciliano B.: Robotics: Modelling, Planning and Control, Springer-Verlag, London 2009, e-ISBN 978-1-84628-642-1
[2] Ďaďo S., Kreidl M.: Senzory a měřící obvody, Skriptum ČVUT, 1999
[3] Fraden, J.: Handbook of Modern Sensors, 2004, Springer-Verlag, ISBN 0-378-00750-4
[4] Noskievič, P.: Modelování a identifikace systémů, Montanex a.s., Ostrava 1999, ISBN 80-7225-030-2
[5] National Instruments: LabVIEW Control Design User Manual[online], June 2009, 371057G-01, dostupné z URL:<http://www.ni.com>

Vedoucí bakalářské práce: Ing. Pavel Houška, Ph.D.

Termín odevzdání bakalářské práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2011/12.

V Brně, dne 23.11.2011

L.S.

Ing. Jan Roupec, Ph.D.
Ředitel ústavu

prof. RNDr. Miroslav Doupovec, CSc.
Děkan

Abstrakt

Předložená bakalářská práce se zabývá návrhem a realizací řídícího softwaru pro nanášecí zařízení hmotnostních spektrometrů. V práci se nejdříve seznámíme s použitým hardwarem a poté se samotným provedením řídící aplikace. Vytvořený software je používán v běžném provozu na existujících zařízeních.

Abstract

Presented bachelor thesis, deals with proposition and realization of control software for deposition machine. First, we will familiarize with used hardware and then with software of deposition machine itself. Developed software is used on existing machines and is used on daily basis.

Klíčová slova

Hmotnostní spektrometrie, Nanášecí zařízení, Funkční blok, Spot, Piezodávkovač

Keywords

Mass spectrometry, Deposition machine, Function block, Spot, Piezo pipetor

Poděkování

Děkuji vedoucímu bakalářské práce Ing. Pavlu Houškovi, Ph.D. za cenné rady, odborné konzultace a celkovou vstřícnost.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně na základně svých vědomostní, rad vedoucího bakalářské práce, poskytnutých materiálů a odborných konzultací.

V Brně, dne 20. 5. 2012

……..…….
Adam Kabourek

Bibliografická citace

KABOUREK, A. *Řízení nanášecích stolků pro hmotnostní spektrometry*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2012. 39 s. Vedoucí bakalářské práce Ing. Pavel Houška, Ph.D.

Obsah

Abstrakt 5

Klíčová slova 5

Poděkování 7

Prohlášení 9

Bibliografická citace 11

Obsah 13

1 Úvod 15

2 Nanášecí zařízení 17

2.1 Hardware stolku 17

2.1.1 Řízené lineární osy 18

2.1.2 Řídicí jednotky os 18

2.2 Periferie 20

2.2.1 Obslužné rameno 20

2.2.2 Generátor pulsů pro piezodávkovač 20

2.2.3 Upínač 21

2.3 Pracovní módy stolku 21

3 Definice parametrů softwaru 23

3.1 Definice nanášeného rastru 23

3.2 Pracovní módy 24

3.2.1 Mód automatu 24

3.2.2 Mód fluorescence 24

3.2.3 Mód nanášení piezodávkovačem 25

4 Návrh struktury aplikace 27

4.1 XControl 28

4.2 Bezpečnostní a informační koncept 28

5 Aplikace 29

5.1 Struktura aplikace 29

5.1.1 Ovládání nanášecího rastru 30

5.1.2 Přepínání módů 32

6 Závěr 35

7 Bibliografie 37

8 Seznam použitých obrázků 39

1 Úvod

Tato bakalářská práce se zabývá vývojem aplikace, která zajišťuje komplexní ovládání nanášecích stolků pro spektrometrii. Vývoj tohoto softwaru byl realizován pro již funkční zařízení, které obsahovalo i obslužný software – tento však nebyl plně vyhovující a byl vznesen požadavek na jeho modernizaci, případně na tvorbu softwaru kompletně nového.

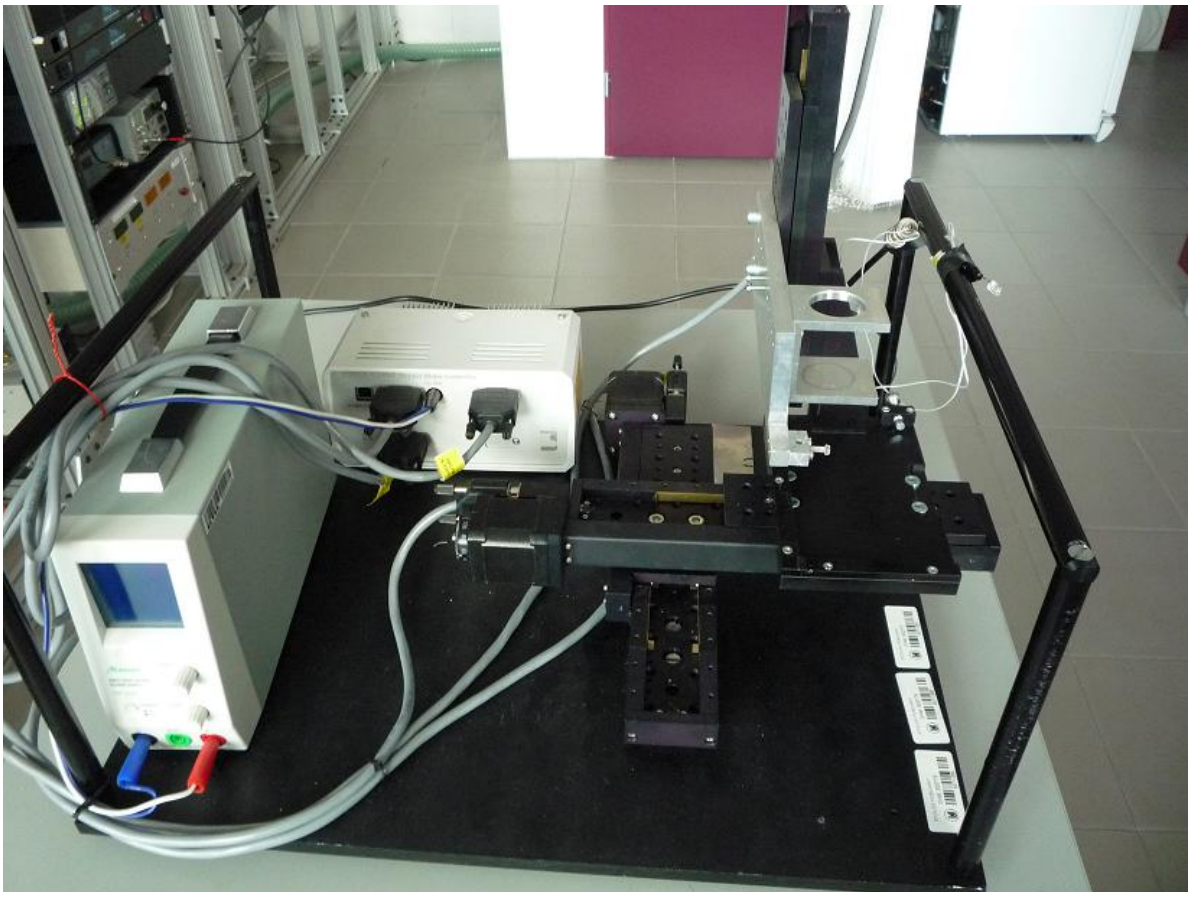
Zařízení nanášecích stolků je, stejně jako hmotnostní spektrometr, provozováno na Přírodovědecké fakultě Masarykovy university v Brně, konkrétně na ústavu experimentální chemie. Větší část samotné práce byla vykonána přímo na ústavu, tudíž bylo po celou dobu k dispozici zařízení jako takové a naše průběžné výsledky jsme tudíž měli možnost přímo testovat za provozu.

Řídicí aplikace je realizována v prostředí National Instrumets LabVIEW. Mezi požadavky zadavatele patřila rychlost běhu celé aplikace, její co možná největší přesnost a v neposlední řadě také nízká hardwarová náročnost. Zařízení je koncipováno jako mobilní, tudíž jsou k jeho obsluze často využívány přenosné počítače, o ne příliš velké výpočetní síle.

Tato práce řeší problematiku rozšíření funkcionality, spolehlivosti a snížení hardwarových nároků aplikace.

2 Nanášecí zařízení

Nanášecí zařízení slouží k přípravě vzorků pro spektrometrii a je koncipováno jako mobilní. Vzorky se nanáší na obdélníkové, či hexagonální desky (matrice) v přesně definovaném rastru. Používá se několik způsobů nanášení, které budou dále rozebrány. Zařízení je řízeno počítačem prostřednictvím periférií připojených pomocí USB rozhraní.



Obr. 1. Nanášecí stolek.

2.1 Hardware stolku

Základ nanášecího zařízení tvoří plošný manipulátor (stolek) se dvěma řízenými lineárními osami. Podle zvoleného způsobu nanášení se využívá buď třetí lineární osa (kartézský manipulátor) nebo piezodávkovač. Dráhy jednotlivých lineárních os přímo representují osy v kartézském souřadném systému. Osa umístěná vertikálně je vedena jako osa **z**, upínací zařízení je umístěno na ose **x,** a poslední osou, na které jsou umístěny všechny ostatní, je osa **y** (viz. Obr. 1.).

2.1.1 Řízené lineární osy

Jsou použity řízené lineární osy 8MT175-150 litevského výrobce Standa (obr. 2). Osa je tvořena lineárním vedením, pohybovým šroubem, krokovým motorem a koncovými spínači. Ovládání krokového motoru je realizováno řídící jednotkou 8SMC1-USBhF. Ovládání polohy je realizováno bez zpětné vazby, jsou pouze použity koncové spínače pro definici referenčního bodu a jako bezpečnostní prvek.

Výrobní specifikace lineárních os jsou dle [1] následující:
Rozlišení na jeden celý krok: 0,3125 µm
Stoupání pohybového šroubu: 0,5 mm
Pracovní rozsah: 150 mm
Maximální rychlost: 10 mm/s
Maximální zatížení: Horizontálně 8 kg, Vertikálně 3 kg

Obr. 2. Řízená lineární osa 8MT175-150 (Převzato z [2]).

2.1.2 Řídicí jednotky os

Je použité zařízení 8SMC1-USBhF taktéž od litevského výrobce Standa (obr. 3). Jedná se o mikrokrokový USB ovladač (microstep USB driver), který se stará o komunikaci počítače se samotnými motory. Komunikace s počítačem je řešena za využití USB portu a následné pokyny pro motory jsou předávány pomocí sériové linky.

Obr. 3. Mikro-krokový ovladač 8SMC1-USBhF (Převzato z [3]).

V našem případě využíváme funkční celek 8SMC1-USBhF-B2-MC2 (obr. 4.) Jedná se o tři mikro-krokové ovladače spojené v jeden celek tak, aby bylo možno ovládat tři osy.

K zařízení se dodává grafické uživatelské rozhraní SMCVieW pro operační systém Windows. Jedná se o program vytvořený v NI LabView, který má sloužit jako základní pomůcka pro ovládání motorů. Tohoto softwaru jsme využili k získání kalibračních profilů, které jsme později využili v našem softwaru. Dále je k zařízení přidána velká knihovna virtuálních nástrojů (funkčních bloků) přímo pro vývojové prostředí. V této knihovně instrukcí jsou obsaženy základní komunikační protokoly, které v naší aplikaci využíváme jako ovladače pro samotný chod motorů. Je v ní také k dispozici velké množství funkčních bloků sloužících pro zjednodušení práce s ovladači, potažmo přímo motory. Tyto „pomocné“ bloky nám byly inspirací při tvorbě našeho programu, přímo jsme jich využili jen minimální množství.

Výrobní specifikace USB ovladače jsou dle [2] následující:
Průměrný proud na fázi krokového motoru: až 1,5A
Napětí na krokovém motoru: až 40V
Rozlišení: plný krok, 1/2 kroku, 1/4 kroku, 1/8 kroku
Rychlost: 2 – 5000 kroků/s
Ochrana proti zkratu, přepěťová ochrana, teplotní ochrana
Více způsobů napájení, externě či z USB
Dva programovatelné koncové spínače
Nouzové tlačítko Stop

Obr. 4. Mikro-krokový ovladač 8SMC1-USBhF-B2-MC2 (Převzato z [3]).

2.2 Periferie

Kromě samotného hardwarového vybavení patří k nanášecímu stolku i zařízení nesouvisející přímo s funkcí motorů, ale za to nezbytné pro funkci stolku jako celku. Zařízení, jak již bylo zmíněno, využívá různých módů nanášení, a proto je potřeba věnovat pozornost i jednotlivým přidruženým periferiím.

2.2.1 Obslužné rameno

Obslužné rameno je vyrobeno z hliníku a je připevněno na pracovní ploše lineárního posuvu osy z. Je to přípravek zhotoven na míru nanášecího zařízení a slouží jako hlavní pracovní upínač pro nanášecí kapiláry, piezodávkovač, kameru či pro přídavné osvětlení LED diodou. (aluminiová část na obr. 1)

2.2.2 Generátor pulsů pro piezodávkovač

Generátor pulsů generuje obdélníkové nebo lichoběžníkové pulzy, kterými je možno řídit piezodávkovač MicroFab MJ-ABP-01-30-DLC. Tento generátor je vyráběný na míru, tudíž k němu není žádný oficiální zdroj informací. Piezodávkovač se připojuje pomocí USB konektoru k počítači, tím je mu dodáno napájecí napětí a generátor je připraven k provozu. K jeho řízení využíváme komunikaci přes USB port. Komunikační obvod FT232 a jeho ovladače vytvářejí virtuální sériový port, který se dá ovládat právě přes USB rozhraní. Samotná komunikace je řešena pomocí textových příkazů a to pouze jednostranně (posílají se textové příkazy pouze z počítače do generátoru).

Obr. 5. Generátor pulsů pro piezodávkovač.

2.2.3 Upínač

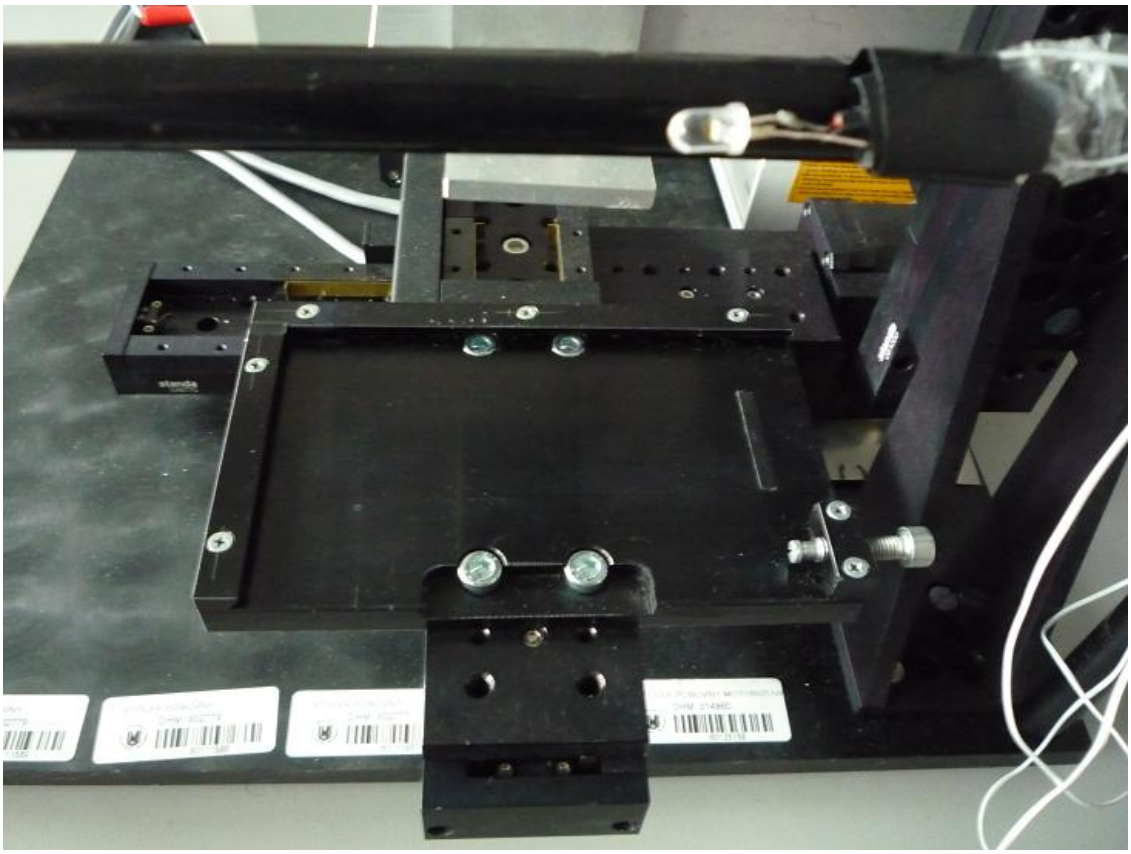
Je připevněn na lineární části symbolizující osu X a slouží k umísťování nanášecích matric. Standardně se používají tři typy matric, a proto je upínač vybaven systémem na vymezení polohy destičky. Jelikož je nanášení prováděno s přesností v milimetrech, měl by být upínač schopen vymezit polohu destičky co nejpřesněji. Je to další část zařízení vyráběná přímo na míru. Přesnost, se kterou je upínač zhotoven, není příliš vyhovující. Nejsou na něm dodrženy pravé úhly, a jelikož matrice mají různé profily, některé není možné aretovat do přesné pozice. S tímto problémem jsme nebyli schopni nic udělat - museli jsme se přizpůsobit.

2.3 Pracovní módy stolku

Této tématice se budu podrobněji věnovat až v kapitole o softwaru, nicméně bych zde chtěl nastínit pár principů jednotlivých módů. Nanášecí zařízení je využíváno pro více způsobů nanášení, a proto je kladen důraz na jeho universálnost.

V základním módu se nanáší pomocí kapiláry, která je umístěna do upínače. V kapiláře je kapalina o stálém tlaku a k nanášení spotu dojde tak, že se konec kapiláry dotkne povrchu (v tomto případě speciální matrice určené pro nanášení). Toto je řešeno pohybem v ose Z, kdy zařízení přejíždí osami X a Y na požadované body a právě sjetím na povrch matrice se provede nános kapaliny.

Druhý způsob nanášení vzorku je pomocí piezodávkovače. V tomto módu nanášení není využívána osa Z a místo ní je ovládán právě generátor pulsů (obr. 5). Na základě těchto generovaných pulsů sprejuje piezodávkovač kapalinu na určené spoty. Piezodávkovač je schopen sprejovat kapičky o velikosti řádově několika μm.



Obr. 6. Detail na upínač nanášecího zařízení.

3 Definice parametrů softwaru

Zde bych rád rozebral několik již dříve nastíněných základních požadavků na vyvíjenou aplikaci. Z počátku nebylo zcela jasné, jestli budeme pouze modernizovat stávající obslužný software, nebo zdali se vytvoří software úplně nový. Po analýze stávajícího softwaru a po zhodnocení požadavků na jeho úpravu, bylo rozhodnuto, že nejlepší cesta bude ho vytvořit úplně nový.

Jednou z věcí, na kterou jsme byli upozorněni, byl fakt, že software se chová za určitých podmínek poněkud nestandardně (přeskakoval jednotlivé spoty, zasekával se uprostřed chodu, přestávaly fungovat jednotlivé posuvy) a to bez zjevných mechanických příčin. Toto byl také hlavní důvod, proč jsme přistoupili k tvorbě softwaru nového.

Po rozhodnutí o tvorbě nového softwaru, bylo před samotnou tvorbou, nutné sestavit požadavky na jeho funkcionalitu. První z požadavků byl požadavek na hardwarovou nenáročnost. Při využívání nanášecího stolku je často samotný stolek přemísťován a ovládán pomocí slabých přenosných počítačů. Výkon, který máme k dispozici pro ovládání softwaru, je tudíž velmi malý – toto byl také jeden z klíčových bodů při tvorbě aplikace.

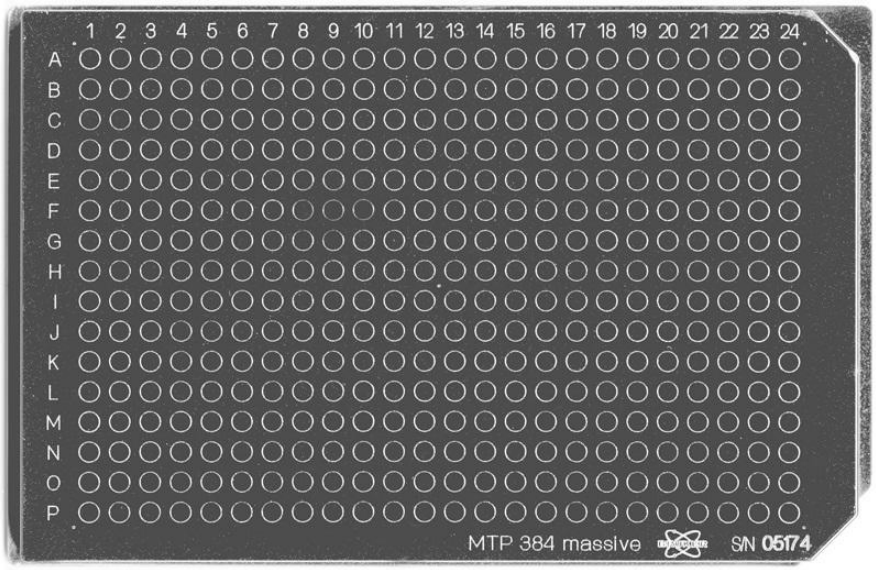
V souvislosti s předcházejícím požadavkem bylo také nutné brát v potaz, že zařízení bude obsluhováno z více než jednoho přístroje a aplikace samotná tudíž poběží ve zkompilované formě a ne přímo ve vývojovém prostředí.

Dále byl kladen důraz na rychlost obsluhy nanášecího zařízení. Jelikož matrice, na které se nanáší, můžou obsahovat i sto a více jednotlivých bodů, jakékoliv zbytečné navýšení času, ať už nanášecího nebo pojezdového, by se velice nepříznivě projevilo na výsledném čase tvorby celé matice. Na tento bod byl ze strany zadavatele kladen velký důraz.

Další, velice důležitý, požadavek, byl právě ten na spolehlivost, který stál nad všemi ostatními. Bylo naprosto nezbytné vytvořit aplikaci takovým způsobem, aby se eliminovalo co největší množství možných příčin nepředvídatelného chování. Oproti předchozí verzi bylo tedy nutné zvolit transparentnější způsoby psaní kódu. Bylo také nutné proměřit jednotlivé lineární osy i mikro-krokový ovladač tak, abychom si byli jisti, že funguje bezchybně.

3.1 Definice nanášeného rastru

Matrice, na které se bude pomocí zhotoveného softwaru nanášet, mají několik základních rozměrů. Bude nutno nanášet, jak na matrice s předem vygravírovanými spoty, tak na matice hladké, na které se bude nanášet podle libovolného rastru. Při tvorbě softwaru bude nutno brát zřetel především na nepřekročení pracovního prostoru zařízení, na stanovení referenčních bodů pro každý typ matric a také vhodným způsobem zavést konstantní definice pro jednotlivé matrice, včetně jejich referenčních bodů tak, aby obsluha byla co nejplynulejší. V rámci následného exportování parametrů zvoleného rastru bude též vhodné ukládat rastry do externího formátu. Ideální stav by poté byl ten, že by obsluha pouze upnula matrici, načetla předem definovaný rastr a byla již schopná pustit nanášecí cyklus. Poté by přemístila matrici do spektrometru, který bude schopen načíst námi vytvořený formát a provést výslednou analýzu vzorku.



Obr. 7. Nanášecí matrice s vygravírovanými spoty (Převzato z [6]).

3.2 Pracovní módy

Každý mód používá jiné nastavení posuvů, či dokonce úplně jiné osy, tudíž bude nutné je od sebe v aplikaci viditelně oddělit, aby nedošlo k záměně. Každý mód bude mít jinak zadávané vstupní proměnné a jiné požadavky na zobrazovanou zpětnou vazbu. Z hlediska úspory hardwarových nároků aplikace, bude zvážena varianta kompilace různých verzí pro různé účely použití tak, aby zbytečně neobsahovaly části, které při daném způsobu zůstanou nevyužívané. V každém módu bude hrát hlavní řídící roli část, která bude zajišťovat definici nanášecího rastru.

3.2.1 Mód automatu

Při využívání tohoto pracovního módu nebude nutné zadávat velké množství vstupních parametrů. Kromě nadefinovaného rastru se bude zadávat i vzdálenost nanášecí (kontaktní) hladiny od hladiny pojezdu. Regulací této vzdálenosti bude obsluha schopna ovlivnit velikost nanesené kapky – čím bude vzdálenost větší, tím se kapka na konci kapiláry bude déle tvořit a tím bude větší. V tomto módu bude také nutné pracovat s časem pojezdu mezi jednotlivými spoty. Tuto dobu bude také možné regulovat a její regulací dosáhneme podobného efektu, jako regulací výšky hladin. Vhodné bude též zavést matematické modely, které obsluze zobrazí časy pojezdu a celkové časy operace.

3.2.2 Mód fluorescence

Tento mód je prozatím ve fázi vývoje. Zadavatel pro něj prozatím nemá žádné podklady a ani představu, jak by přesně měl fungovat. Bude se jednat o kombinaci automatického módu s novými prvky fluorescence. Zařízení bude projíždět rastr, nad každým bodem se zastaví, prosvítí ho zdrojem světla a odměří fluorescenci daného spotu. Zatím není

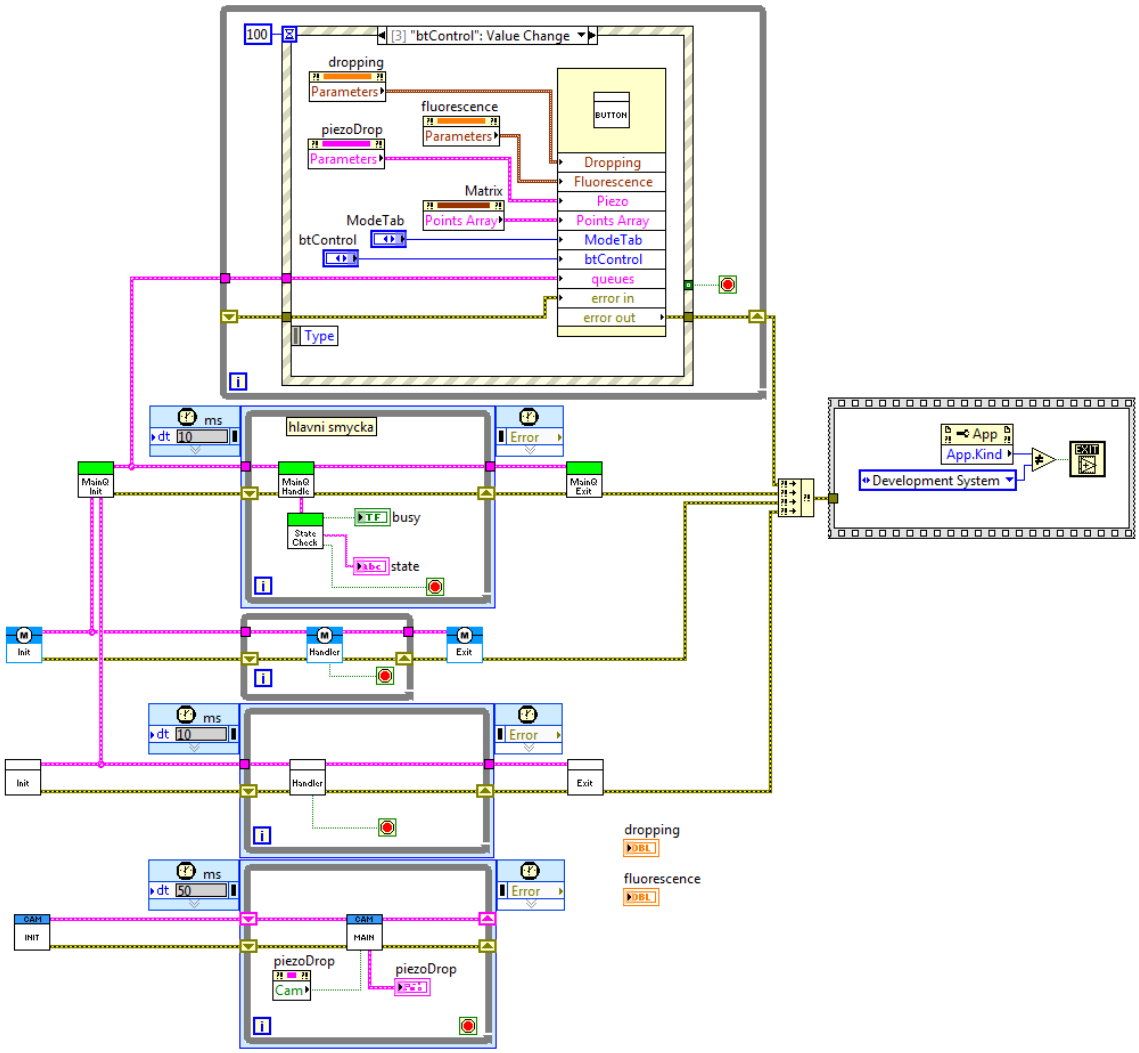
jasné, zda se bude využívat kapiláry, nebo nějakého jiného způsobu. V případě použití kapiláry, bude potřeba přepočítávat časy pojezdu a sestupu tak, aby se nezměnila velikost nanesené kapky v důsledku prodloužení jednoho cyklu nánosu, způsobeného čekáním na prosvětlení. Tento mód bude do aplikace zaveden, ale jeho funkce bude prozatím potlačena.

3.2.3 Mód nanášení piezodávkovačem

Tento mód bude vyžadovat práci s největším počtem vstupních parametrů. Kromě načtení nanášecího rastru, bude třeba pracovat s parametry pro piezodávkovač. Pro jednotlivé nastavení pulsu, bude opět vhodné zajistit ukládání dat tak, aby byly exportovatelné. V tomto módu je k funkci také potřeba pracovat s kamerou, proto pro ni musí být do aplikace zabudována obslužná část (obsluha potřebuje sledovat velikost a intenzitu sprejovaných kapiček). Tato část aplikace je například vhodná k vyjmutí z kompilované verze, které pro svoji práci nebude vyžadovat obsluhu kamery.

4 Návrh struktury aplikace

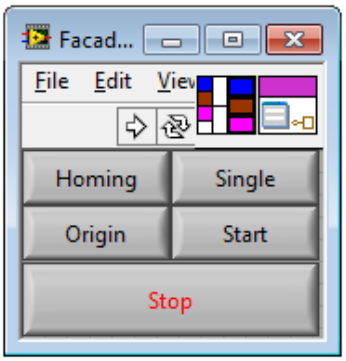
Po analýze požadavků na parametry aplikace bylo tedy rozhodnuto o tvorbě aplikace nové, s využitím některých funkčních bloků. Při navrhování základní struktury aplikace byl kladen zřetel na všechny požadavky, především pak na hardwarovou nenáročnost. Všechny jednotlivé sub-procesy běží odděleně ve vlastních smyčkách (viz obr. 7).



Obr. 8. Struktura kódu aplikace.

4.1 XControl

Pro návrh designu samotného čelního panelu je využíváno XControlů. Informace o využití XControlů jsou přejaty z [4]. Pomocí XControlů je možné kombinovat ovládací prvky samotného LabView a vytvořit tak svůj vlastní. Jejich výhoda spočívá v jejich rychlosti a možnosti zachytávat jednotlivé události (jako například stisknutí tlačítka). Každý XControl obsahuje svoji vlastní knihovnu funkčních bloků, které se dají upravovat. Tato knihovna většinou obsahuje nastavení samotného XControlu, což jsou všechny ovládací prvky potřebné k jeho běhu a dále pak obsahuje informace o jeho vzhledu. Jednou z výhod jejich použití je značné zpřehlednění kódu, díky faktu, že data XControlu jsou umístěna mimo hlavní programovou část a pouze se na ně odvoláváme.



Obr. 9. XControl hlavních ovládacích tlačítek.

4.2 Bezpečnostní a informační koncept

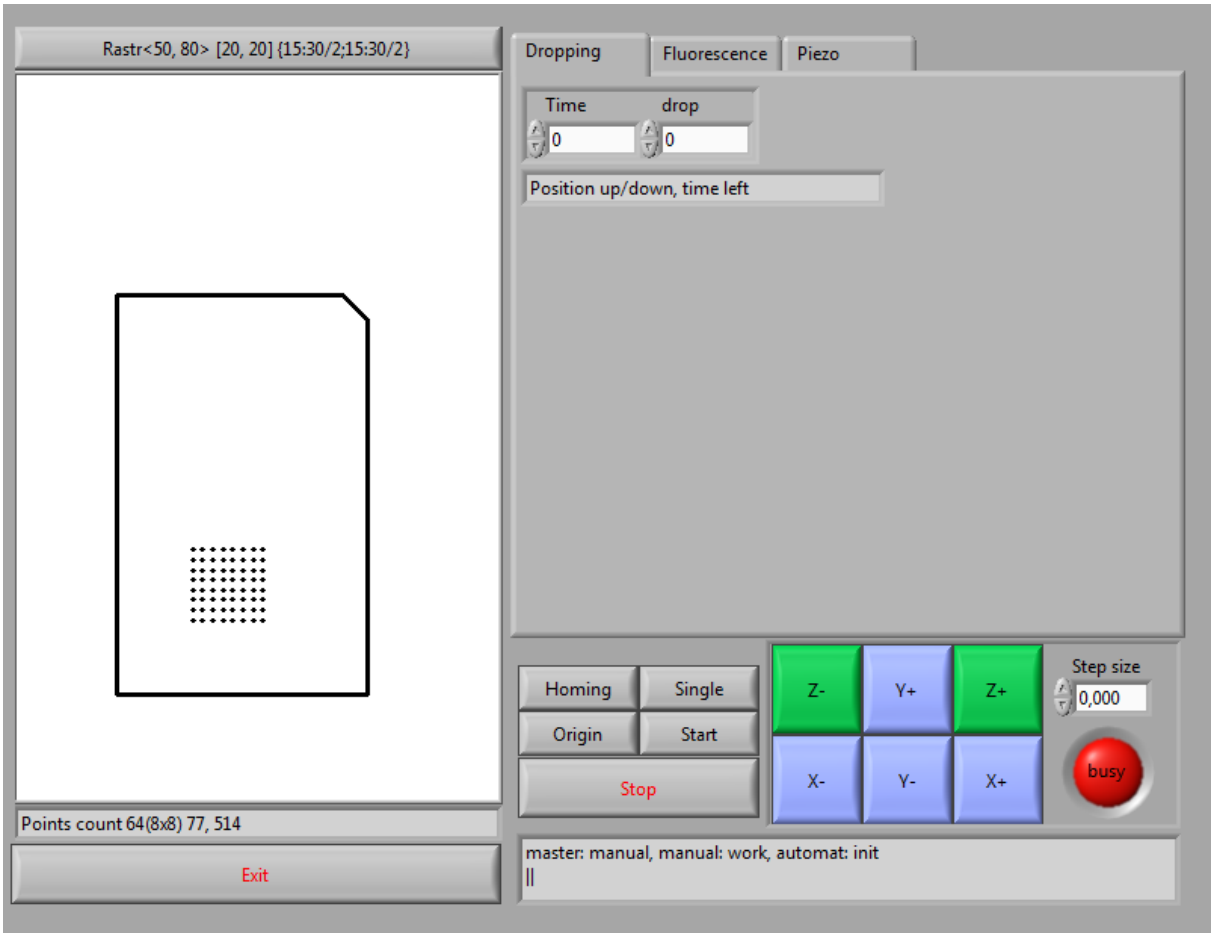
V zájmu, co možná největší uživatelské přívětivosti, je v softwaru kladen důraz na stavové a informační pole tak, aby uživatel viděl všechny informace o aktuálním stavu softwaru a mohl tak reagovat na jednotlivé změny.

Aplikace reaguje jak na hardwarové koncové body, tak má definované i své softwarové. Cílem implementace softwarových limitů bylo zvýšení bezpečnosti – hardwarové nefungují stoprocentně. Pokud by i přesto došlo ke kolizi, je aplikace vybavena tlačítkem „stop“, které nadřazeně nad všemi ostatními procesy ukončí běh motorů.

5 Aplikace

Aplikace pro řízení nanášecích stolků byla programována ve vývojovém prostředí NI LabView. Jak již bylo zmíněno, aplikace je navržena pro co možná nejjednodušší a zároveň co nejkomplexnější možnosti ovládání. Základní uživatelské rozhrání je rozděleno do několika bloků pro větší přehlednost, toto je řešeno pomocí XControlů (viz. 4). Samotný design aplikace není nějak zvláště výrazný, neboť aplikace prochází neustálými úpravami na žádosti uživatelů.

Jako jazyk pro celou aplikaci byla zvolena angličtina, protože zadavatel své výsledky a nástroje často presentuje i mimo hranice naší země.



Obr. 10. Pohled na základní aplikaci.

5.1 Struktura aplikace

Hlavní aplikace je rozdělena do tří částí. První část, na levé straně hlavního okna, má na starosti obsluhu nanášecího rastru, po kterém postupuje nanášecí zařízení v automatickém

módu. Pod touto částí najdeme tlačítko pro regulérní ukončení celé aplikace. Hlavní okno aplikace má softwarově zakázaný „toolbox“ – uživatel není schopen ukončit aplikaci jinak, než pomocí tlačítka exit. Toto je důležité proto, aby nedocházelo k nečekaným ukončením aplikace, kdy ji uživatel zavře standardním klikem na křížek v pravém horním rohu. Při takovémto ukončení se může aplikace začít chovat nevhodně, neboť se nečeká na ukončení všech jejich vnitřních relací.

Pravá část aplikace se opět dá rozdělit na dvě části: vrchní a spodní. Ve vrchní části se nachází záložky sloužící pro přepínání jednotlivých módů činnosti (jednoduché nanášení, mód fluorescence, mód nanášení pomocí piezodávkovače). Pod ní je umístěna samotná obsluha pohonů. V aktuální verzi softwaru zde máme pět tlačítek pro automatické ovládání a šest kláves pro manuální posun. Dále je zde indikátor činnosti celé aplikace a stavový řádek.

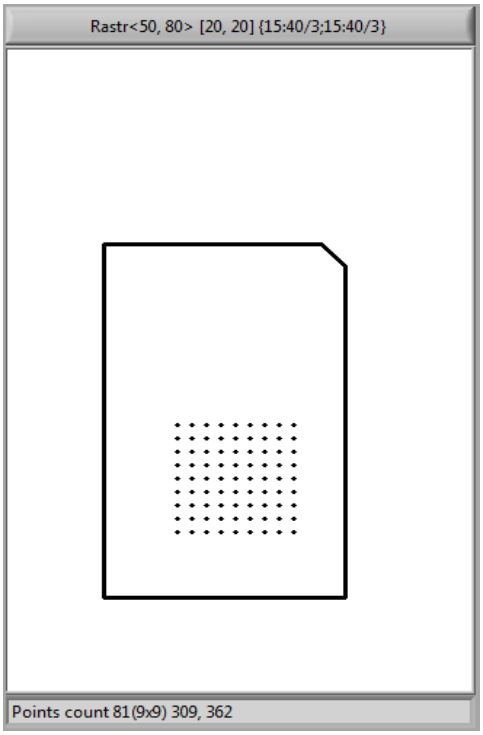
5.1.1 Ovládání nanášecího rastru

Obslužná sekce, která má na starosti ovládání nanášecího rastru, obsahuje tři části (viz. Obr. 4). Hlavní tlačítko, které zobrazuje menu pro samotnou definici rastru (viz. Obr. 5), náhled zvoleného rastru a stavový řádek.

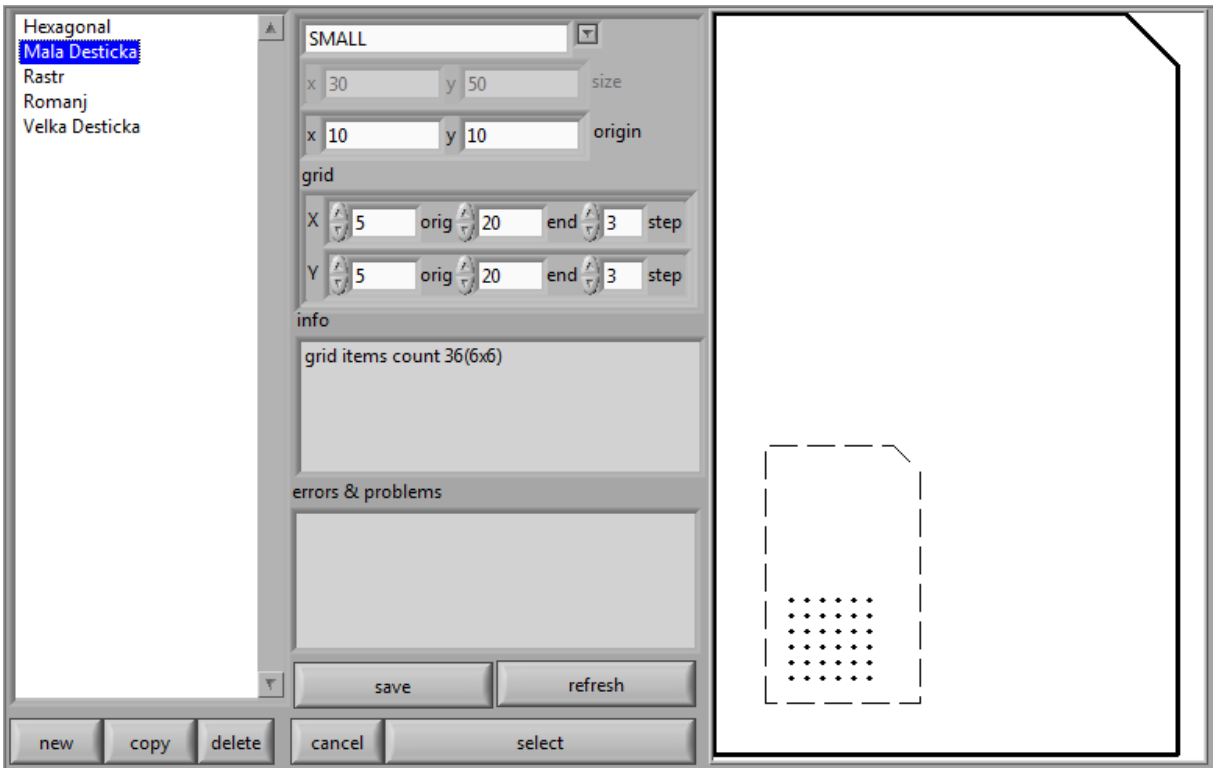
Menu, kterého dosáhneme po stisknutí hlavního tlačítka, poskytuje uživateli komplexní možnost nastavení rastru. Základní obslužné funkce, jako ukládání, mazání a kopírování jsou přítomny ve spodní části nabídky. Jednotlivé profily ukládáme do formátu .xml, který je následně možné exportovat do hmotnostního spektrometru a dále s nimi pracovat. Každý z profilů se ukládá do unikátního xml souboru. Důvod, proč jsme zvolili xml formát je ten, že se jedná o formát plně podporovaný vývojovým prostředím LabView a tudíž se s ním poměrně jednoduše pracuje. Dále také jeho velká rozšířenost v moderních technologiích.

Obrázek, který je generován v pravé části tohoto menu, představuje celý pracovní prostor nanášecího stolku. Čerchovaná část pak představuje samotnou matrici a jednotlivé body jsou nanášené spoty. Při definici rozměrů matrice má uživatel možnost vybrat si ze tří předdefinovaných rozměrů: malé (small), velké (huge) a hexagonální (hexagonal). Je tu i možnost definovat si destičku o specifických rozměrech vybráním volby „ostatní“ (other). Definice parametrů pro samotný rastr se skládá z definice jeho počátku, konce a velikosti kroku (vzdálenosti dvou spotů hada). Pod zadáváním bodů najdeme dvě informační lišty. Jednu zobrazující informace o nadefinované destičce a druhou, která nám hlásí možné problémy – například zadání rozměru mimo rozsah ať už pracovního prostoru, či špatný rozsah spotů v rámci destičky.

V dolní části, jsou pak umístěna dvě hlavní tlačítka „zruš“ (cancel) a „vyber“ (select), které nás vrátí do hlavního obslužného menu. V případě tlačítka „vyber“ se použijí a u tlačítka „zruš“ ignorují námi nadefinované parametry matrice a rastru. Po úspěšném načtení parametrů přejme tlačítko v hlavním menu jméno a hodnoty vybraného profilu a samotná matrice se vykreslí do bílého pole. I zde je pro přehlednost umístěna informační lišta.



Obr. 11. Levé část hlavní nabídky.

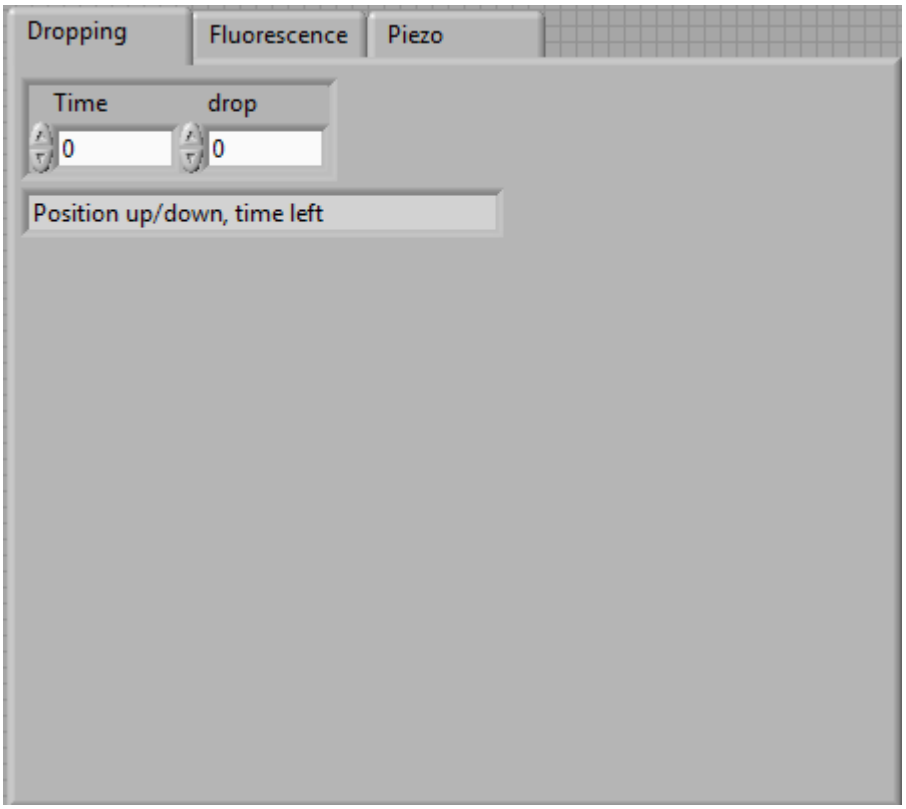


Obr. 12. Menu nastavování rastru.

5.1.2 Přepínání módů

Obslužný panel pro přepínání jednotlivých nanášecích módu je umístěn v pravé horní části (Viz. Obr. 3). Panel obsahuje tři záložky: normální nanášení (dropping), fluorescenci a piezo nanášení.

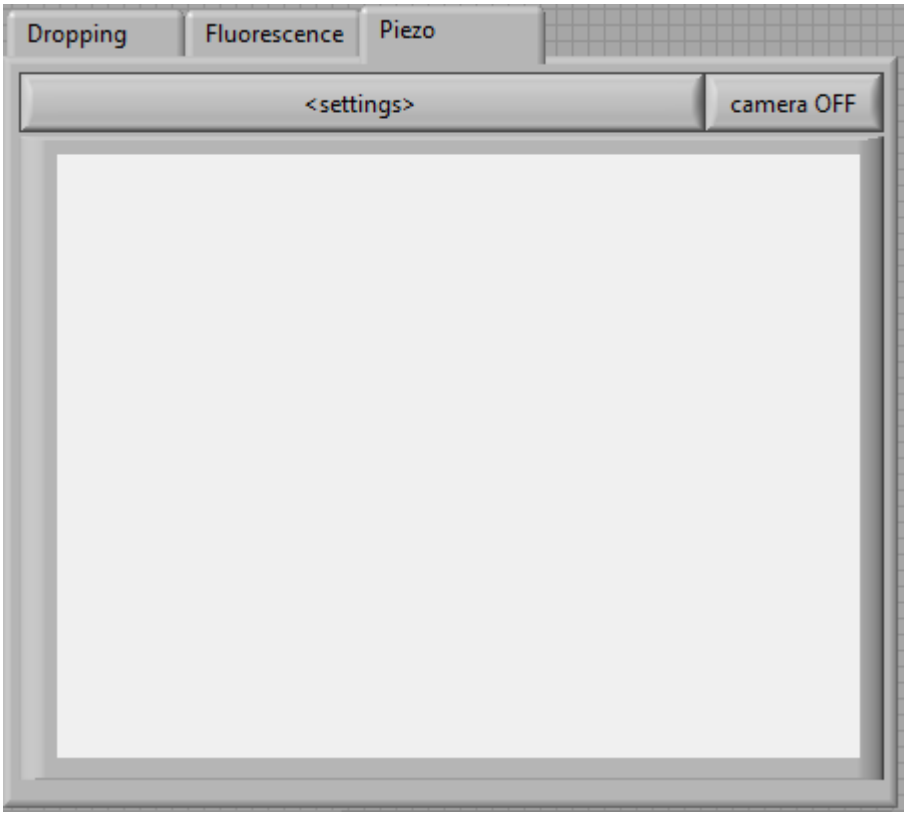
Normální mód, neboli „dropping“, má velmi málo doplňujících nastavení. Do obslužného softwaru zadáme jen čas doby pojezdu mezi dvěma spoty a velikost posunu potřebného k nanesení (rozdíl mezi výškou pojezdové hladiny a výškou hladiny nanášecí).



Obr. 13. Dropping mód.

Při módů fluorescence má obsluha aplikace možnost změřit fluorescenci daného spotu. Tento mód ještě není ve finální fázi (viz 3.2.2). Mód je do aplikace přidán, jeho základní prvky jsou funkční, ale jako celku se ho prozatím využívat nebude.

Mód nanášení pomocí piezodávkovače obsahuje, kromě tlačítka pro definici parametrů pulsu zasílaného do generátoru, i kameru. Kamera je zde důležitá proto, aby obsluha byla schopna sledovat velikost a rychlost uvolňované kapičky, což je nezbytné pro správné nastavení generovaného pulsu a následného ověření jeho správné interpretace generátorem. Tlačítko nastavení je pojato jako stavové tlačítko, tudíž přejímá do svého názvu aktuálně vybrané nastavení pulsů (podobně jako u tlačítka nastavení nanášecího rastru). Možnost, vypnout a zapnout kameru, byla přidána kvůli celkovému zrychlení aplikace.

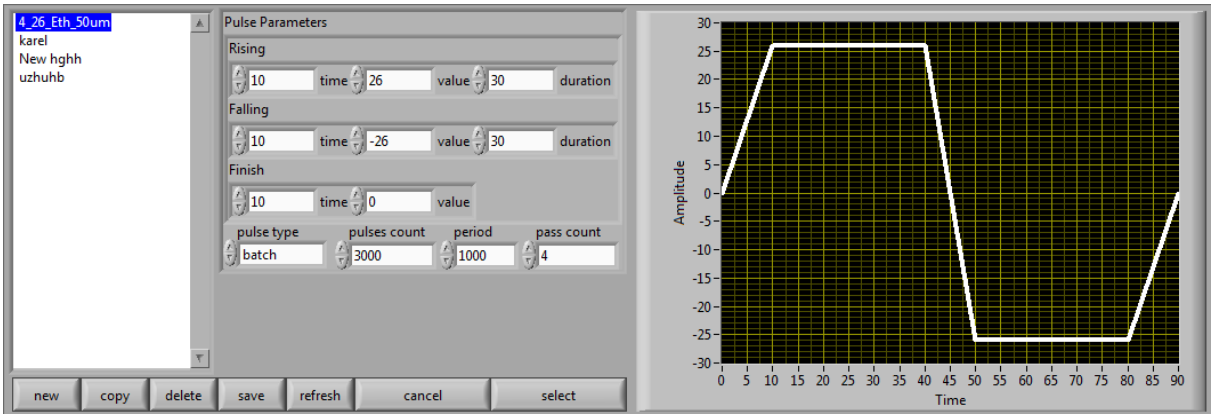


Obr. 14. Piezo mód.

Rozložení prvků v menu pro definici parametrů pulsu (viz obr. 9) je zvolené podobně, jako u výše popsaného menu pro nanášecí destičky. V levé části se nachází seznam s jednotlivými, již vytvořenými, profily a v pravé části jsou pak umístěny jejich definovaná data a graf symbolizující samotný puls.

Nastavení samotného pulsu je velmi komplexní, obsluha musí mít možnost nastavit si puls přesně podle jejich požadavků. Nastavení se skládá z určení času náběhu, hodnoty, na kterou puls roste a času, který na maximální hodnotě setrvá. Následuje poté nadefinování spodní hodnoty, které je řešeno opět dobou náběhu, minimální hodnotu a délce jejího trvání. Poslední definující parametry určují cílovou hodnotu a dobu, za kterou na ní puls klesne (vystoupá).

Poslední část nastavení zabezpečuje volbu požadovaného druhu pulsu. Celkem jsou k dispozici tři druhy: Jedna dávka (batch), frekvence (frequency) a jeden puls (1 pulse). Jedna dávka vyšle námi definovaný puls v předem nastaveném počtu. Zařízení tak provede jedno sprejování, které se bude skládat z definovaného počtu kapiček. Pokud nastavíme mód frekvence, zařízení bude provádět mód jedné dávky, opakovaný po zvoleném intervalu. Posledním možným módem je jeden puls, při kterém se vyšle pouze jeden impuls a tudíž zařízení nanese pouze jednu kapičku. Všechny tyto módy se provádí většinou při využívání nanášení rastru, tudíž předchozí hodnoty v takovém případě budou platit vždy pro právě jeden bod rastru. Poslední volbou je nastavení počtu celkového projetí rastru.



Obr. 15. Definice piezo pulsu.

6 Závěr

V práci byla řešena problematika řídícího softwaru nanášecího zařízení pro hmotnostní spektrometrii. Při práci byl kladen důraz převážně na hardwarovou nenáročnost aplikace a na její spolehlivost. Tvorbě samotné aplikace předcházela analýza stávajícího softwaru a cílem této analýzy bylo určit, jestli by aplikaci bylo možno upravit, či jestli bude třeba vytvořit aplikaci novou.

Po analýze, stávajícího softwaru a seznámení se s požadavky zadavatele, započala tvorba softwaru nového. K jeho tvorbě bylo využito vývojové prostředí National Instruments LabView. Velká většina práce byla prováděna na místě provozu zařízení a bylo tudíž možné vyvíjený software rovnou testovat na fyzickém zařízení.

V současné době je aplikace funkční a provozuschopná. Využívá se aktivně na Ústavu experimentální chemie Přírodovědecké fakulty Masarykovy university v Brně. Na aplikaci je v budoucnosti třeba zakomponovat mód fluorescence, který je aktuálně vynechán z důvodu nedostatku zdrojových informací. Jelikož je aplikace aktivně využívána, bude potřeba v budoucnosti odstranit nedostatky, které vyplynou z uživatelské interakce. Nanášecí stolek a přidružený hmotnostní spektrometr jsou stále ve vývoji a tudíž je možné, že aplikace bude muset být doplněna o nové funkce na základě nových požadavků.

Analýzou staré aplikace, tvorbou aplikace nové a jejím následným odzkoušením v provozu, byly splněny všechny body zadání. Podmínky ze strany zadavatele všechny splněny nebyly, neboť neustále přibývají nové a nové v závislosti na čase, po který je zařízení aktivně využíváno.

7 Bibliografie

[1] Standa. *Standa* [online]. 2000 [cit. 2012-05-10]. 8MT175- Motorized Linear Stages. Dostupné z: http://www.standa.lt/products/catalog/motorised_positioners?item=60? item=60

[2] Standa. *Standa* [online]. 14. leden 2008 [cit. 2012-05-10]. SMC1-USBhF – Microsto Driver with USB Interface. Dostupné z http://www.standa.lt/files/usb/8SMC1-USBhF%20Datasheet.pdf

[3] Standa. *Standa* [online]. 2000 [cit. 2012-05-10]. SMC1-USBhF – Microsto Driver (USB Interface). Dostupné z:http://www.standa.lt/products/catalog/motorised_positioners?item=175

[4] NI LabVIEW 2011 Help. *Ni.com* [online]. 27. červen 2011 [cit. 2012-05-23]. Dostupné z: http://zone.ni.com/reference/en-XX/help/371361H-01/lvconcepts/using_labview_xcontrols/

[5] Mass Spectrometry - A Textbook: Problems and Solutions: For Instructors. *Ms-textbook* [online]. 2011 [cit. 2012-05-24]. Dostupné z: http://www.ms-textbook.com/2nd/home/instructors.html

8 Seznam použitých obrázků

Obr. 1. Nanášecí stolek. 17
Obr. 2. Řízená lineární osa 8MT175-150 (Převzato z [2]). 18
Obr. 3. Mikro-krokový ovladač 8SMC1-USBhF (Převzato z [3]). 19
Obr. 4. Mikro-krokový ovladač 8SMC1-USBhF-B2-MC2 (Převzato z [3]). 20
Obr. 5. Generátor pulsů pro piezodávkovač. 21
Obr. 6. Detail na upínač nanášecího zařízení. 22
Obr. 7. Nanášecí matrice s vygravírovanými spoty (Převzato z [6]). 24
Obr. 8. Struktura kódu aplikace. 27
Obr. 9. XControl hlavních ovládacích tlačítek. 28
Obr. 10. Pohled na základní aplikaci. 29
Obr. 11. Levé část hlavní nabídky. 31
Obr. 12. Menu nastavování rastru. 31
Obr. 13. Dropping mód. 32
Obr. 14. Piezo mód. 33
Obr. 15. Definice piezo pulsu. 34