

Uniwersytet Jagielloński
PROGRAM DO OBRÓBK I WYNIKÓW POMIARÓW
FOTOELEKTROCHEMICZNYCH

Program udostępniany na zasadach:

CreativeComons - uznanie autorstwa -użycie niekomercyjne 3.0 Polska (CC BY-NC 3.0 PL)
więcej <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0/pl/>

Autorzy:

Marta Buchalska buchalskm@chemia.uj.edu.pl

Marcin Kobielsuz kobielsuz@chemia.uj.edu.pl

Michał Pacia pacia@chemia.uj.edu.pl

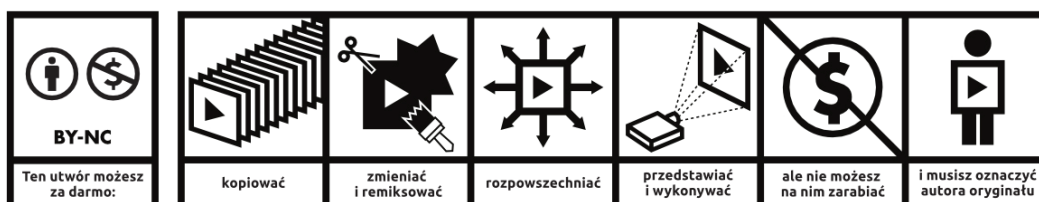
Wydział Chemii Uniwersytet Jagielloński

Tel.: + 48 12 663 2005

Współpraca:

Autorzy prowadzi prace na wieloma rozwiązaniami mogącymi usprawnić prace badawcze, udostępnianymi na zasadach wolnych licencji jak i komercyjnych. Poszukują nowych tematów, problemów i ich rozwiązań podejmując współpracę z partnerami biznesowymi oraz osobami prywatnymi. Zainteresowanych współpracą zapraszamy do kontaktu.

Instrukcja



Uznanie autorstwa-Użycie niekomercyjne 3.0 Polska – Licencja ta pozwala na kopiowanie, zmienianie, remiksowanie, rozprowadzanie, przedstawienie i wykonywanie utworu jedynie w celach niekomercyjnych. Warunek ten nie obejmuje jednak utworów zależnych (mogą zostać objęte inną licencją). <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0/pl/>

Program jest kompatybilny z aparaturą Instytutu Fotonowego i oprogramowaniem Nova (do potencjostatu Autolab firmy Metrohm). Wynikiem działania programu jest tabela z wartościami fotoprądów i odpowiadającymi im długościami fali oraz potencjałami. Program działa w pakiecie R.

- I. Przygotowanie programu (Windows XP, Vista, 7, 8, 8.1):
 1. Ściągnij i zainstaluj pakiet R. Pakiet ten jest całkowicie darmowy i dostosowany do dowolnego systemu operacyjnego. Pakiet ten najlepiej pobrać ze strony Uniwersytetu we Wrocławiu: <http://r.meteo.uni.wroc.pl/>.
 2. Pakiet R uruchamia się po kliknięciu w ikonkę „R”
 3. Przy pierwszym uruchomieniu Pakietu R należy wpisać komendę *getwd()*. Wynikiem komendy jest ścieżka katalogu roboczego Pakietu. Do tego katalogu należy skopiować program *pcm.r* obrabiający wyniki z pomiarów spektroelektrochemicznych.
 4. W przypadku niektórych komputerów przed pierwszym uruchomieniem programu należy jeszcze zainstalować pakiet rgl. Pakiet ten umożliwia wizualizację wyników w postaci trójwymiarowej mapy. Nie jest to element niezbędny do prawidłowej pracy programu jednak znacznie ułatwia on ocenę otrzymanych wyników. W przypadku niezainstalowania się pakietu należy dokonać jego ręcznej instalacji poprzez wpisanie komendy: `"install.packages('rgl',dependencies=TRUE)"`. Można również ręcznie pobrać pakiet „rgl” ze strony <http://cran.r-project.org/web/packages/rgl/index.html> i po rozpakowaniu umieścić go w folderze win-library\”wersja R”\ w folderze %USERPROFILE%\Documents\R (Windows Vista, 7, 8, 8.1) lub w %USERPROFILE%\My Documents\R (Windows XP)

- II. Przygotowanie programu (Linux Ubuntu)
 1. Ściągnij i zainstaluj pakiet R – można go zainstalować z Centrum Oprogramowania Ubuntu używając funkcji „Szukaj”.
 2. System poprosi o potwierdzenie chęci instalacji poprzez wprowadzenie hasła użytkownika (jeżeli takowe istnieje).
 3. Po instalacji na bocznym pasku pojawi się ikona symbolizująca Pakiet R.
 4. Przed pierwszym uruchomieniem należy uruchomić konsolę i wpisać komendę: `„sudo apt-get install r-cran-rgl”`. Polecenie należy potwierdzić hasłem użytkownika. W tym momencie zostanie zainstalowany pakiet umożliwiający trójwymiarową wizualizację wyników.
 5. Program Photocurrentmodifier uruchamia się z poziomu pakietu R. Po włączeniu tej aplikacji, należy sprawdzić ścieżkę katalogu roboczego poleceniem: *getwd()*. Pojawi



się ścieżka do katalogu, w którym pracuje pakiet R, zalecane jest, aby właśnie tam umieścił plik o nazwie *pcm.r*. Można również utworzyć nowy katalog w katalogu domowym (np. Pakiet R), jednak ta operacja będzie się wiązała z każdorazowym podawaniem na starcie katalogu roboczego przez polecenie: *setwd()* gdzie w nawiasach umieszcza się w cudzysłowie nazwę docelowego katalogu (np. *setwd(„Pakiet R”)*).

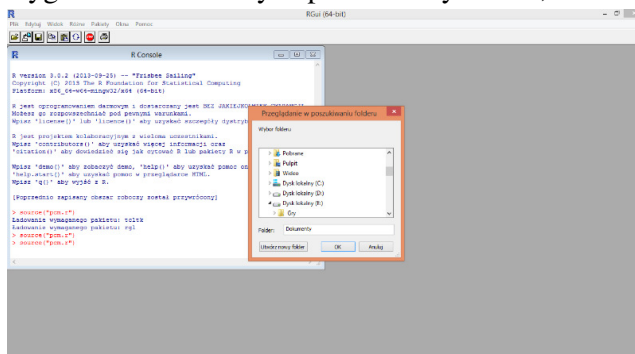
III. Obróbka wyników

Program działa prawidłowo dopiero w momencie, gdy każdy plik wynikowy zawiera tylko jedną wartość potencjału. Oznacza to, że wyniki muszą być zapisane w takiej formie, aby ilość plików była równa ilości wykonanych przełączeń potencjału w trakcie eksperymentu. Standardowo pliki są zapisywane w formie „nazwa(kolejny numer).txt”.

Program ignoruje obecność dowolnych plików z danymi o innej konstrukcji niż standardowe pliki z wynikami generowane przez program Nova.

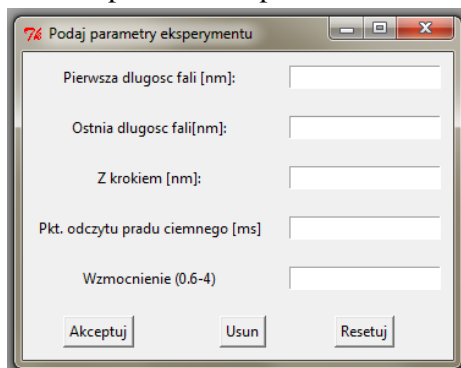
Zaleca się zapisywanie każdej serii pomiarowej w oddzielnym katalogu.

1. Uruchom pakiet R.
2. Uruchom program Photocurrentmodifier z linii komend pakietu R wpisując komendę *source(„pcm.r”)*
3. W kolejnych krokach działania programu zostaniesz poproszony o:
 - wybranie katalogu z danymi pomiarowymi (lista rozwijana);
 Jeśli w wybranym katalogu są już pliki z wynikami, program zapyta, czy należy te pliki usunąć, czy ponowić wybór katalogu. Możliwe jest także wygenerowanie nowych plików z wynikami, dla innych parametrów obróbki.

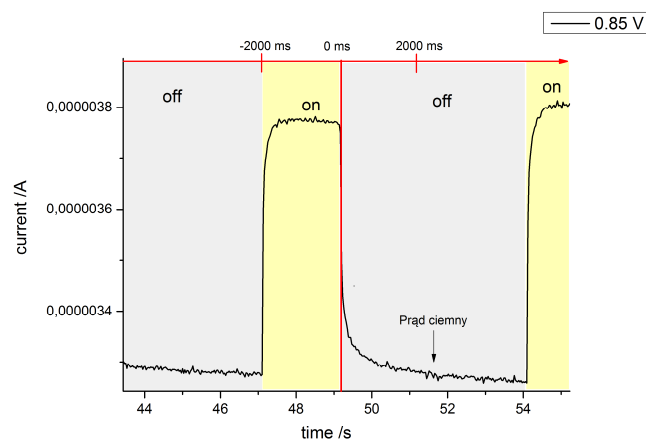


Uznanie autorstwa-Użycie niekomercyjne 3.0 Polska – Licencja ta pozwala na kopiowanie, zmienianie, remiksowanie, rozprowadzanie, przedstawienie i wykonywanie utworu jedynie w celach niekomercyjnych. Warunek ten nie obejmuje jednak utworów zależnych (mogą zostać objęte inną licencją). <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0/pl/>

– Podanie parametrów pomiaru w oknie



- zakres długości fali,
- kroku pomiarowego,
- punktu, w którym jest zbierany tzw. prąd ciemny, określonego jako czas po zamknięciu migawki; prąd ciemny należy wyznaczyć dla każdej serii pomiarowej przed uruchomieniem programu

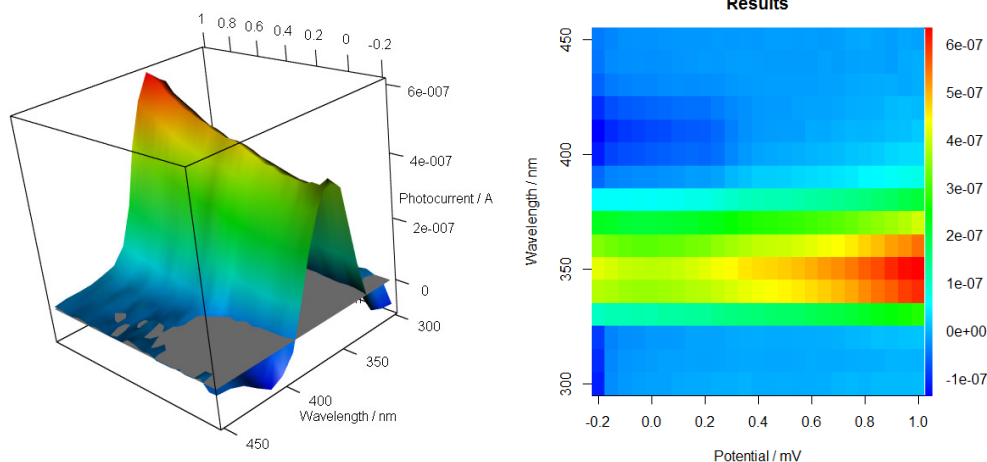


- poziomu redukcji szumów (określone jako średnia wartości minimalnej i maksymalnej w podanym zakresie prądu ciemnego); średnia wartość szumów zostanie wyświetlona na ekranie po zakończeniu obliczeń dla wybranej wartości S sprawdzany jest warunek: $S \cdot \text{fotoprąd} < \text{szum}$; wartości spełniające ten warunek są zerowane
 UWAGA: Zaleca się wykonanie pierwszej obróbki bez redukcji szumów (np. dla $S = 10$), po czym wykonać drugi skan dla odpowiednio dobranych niższych wartości S .



Uznanie autorstwa-Użycie niekomercyjne 3.0 Polska – Licencja ta pozwala na kopiowanie, zmienianie, remiksowanie, rozprowadzanie, przedstawienie i wykonywanie utworu jedynie w celach niekomercyjnych. Warunek ten nie obejmuje jednak utworów zależnych (mogą zostać objęte inną licencją). <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0/pl/>

4. Po zakończeniu pracy program wizualizuje uzyskane wyniki w postaci wykresów (wykres 3D można obracać):



Do

datkowo wyświetli się zapytanie czy otrzymane wyniki są satysfakcjonujące. Na tym etapie działania programu można jeszcze zdecydować czy zapisywać pliki z wynikami (patrz pkt. 5). W przypadku wybrania „nie” wyniki nie zostaną zapisane, a program będzie można uruchomić ponownie z innymi parametrami.

5. Wynikiem działania programu są trzy pliki zawierające zestawienie zależności wartości fotoprądu [A], potencjału [V] oraz długości fali [nm], różniące się tylko formą prezentowania danych, oraz plik z tabelą zawierającą zestawienie zależności wartości prądu [A], potencjału [V] oraz czasu [min].
6. Po zakończeniu pracy, program jest gotowy do ponownego uruchomienia.

IV. Błędy:

W przypadku wystąpienia błędu, przed ponownym uruchomieniem programu należy zamknąć i ponownie otworzyć R.

1. Błąd może być spowodowany obecnością pików, które nie zawierają danych pomiarowych, a konstrukcja nazwy wskazuje na plik pomiarowy.

Błąd w pot[j] = potencjał: zamiana ma długość zero

Dodatkowo: Komunikat ostrzegawczy:



Uznanie autorstwa-Użycie niekomercyjne 3.0 Polska – Licencja ta pozwala na kopiowanie, zmienianie, remiksowanie, rozprowadzanie, przedstawienie i wykonywanie utworu jedynie w celach niekomercyjnych. Warunek ten nie obejmuje jednak utworów zależnych (mogą zostać objęte inną licencją). <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0/pl/>

In `is.na(x)` : `is.na()` zastosowane do nie-listy lub nie-wektora typu 'NULL'

2. Błąd może być spowodowany wyborem katalogu niezawierającego wyników (plików o odpowiedniej konstrukcji):

Błąd w `file(file, "rt")` : nie można otworzyć połączenia

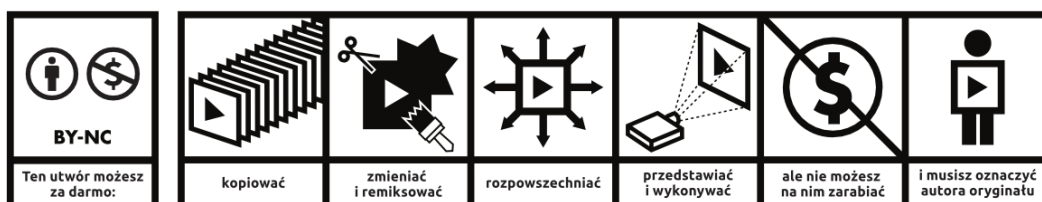
Dodatkowo: Komunikat ostrzegawczy:

In `file(file, "rt")` :

nie można otworzyć pliku '...'

Wpisując w program komendę „kotek[j]” można uzyskać informację który plik został przetwarzany jako ostatni co może pomóc ustaleniu z którym plikiem był problem.

Najprostszym sposobem częściowego rozwiązania problemu jest zmiana nazwy wadliwego pliku (usunięcie nawiasu). Plik nie będzie brany pod uwagę w obróbce. Jeśli problem się powtarza należy sprawdzić ustawienia aparatury pomiarowej.



Uznanie autorstwa-Użycie niekomercyjne 3.0 Polska – Licencja ta pozwala na kopiowanie, zmienianie, remiksowanie, rozprowadzanie, przedstawienie i wykonywanie utworu jedynie w celach niekomercyjnych. Warunek ten nie obejmuje jednak utworów zależnych (mogą zostać objęte inną licencją). <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0/pl/>