



Программное обеспечение
SmartSoft

Руководство по эксплуатации

2026

www.smartstat.ru

Уважаемый пользователь! Компания Electrochemical Instruments благодарит Вас за приобретение и использование научного оборудования SmartStat. В этом руководстве приведено подробное описание программного обеспечения SmartSoft, рекомендации по работе с ними, а также другая полезная информация.

Программное обеспечение SmartSoft предназначено для работы с потенциостатами SmartStat всех моделей профессиональной, лабораторной и промышленной серий. В нем пользователь создает рабочую программу, запускает ее в работу, следит за ходом эксперимента по графическим и цифровым показателям, получает экспериментальные данные и может выполнять их просмотр и автоматическую и ручную обработку.

Программное обеспечение SmartSoft ориентировано на то, чтобы опытный электрохимик мог создавать и реализовывать с его помощью самые сложные и требовательные многостадийные эксперименты благодаря мощному программатору, планировщику, а также тому, что базовые рабочие режимы также имеют один из самых широких функционалов на сегодняшний день.

В то же время, начинающему пользователю предоставляется возможность отключить все продвинутое функции и с комфортом легко освоить профессиональное оборудование используя только самые необходимые элементы управления для быстрого создания простых экспериментов. В программе SmartSoft имеется большое количество подсказок, комментариев и всплывающих сообщений. Визуальный же интерфейс организован максимально простым и удобным образом, он полностью ориентирован на удобство работы.

Настоящее руководство не описывает сами потенциостаты SmartStat, для этого предусмотрено базовое руководство по эксплуатации.

Уважаемый коллега! Если у Вас возникли вопросы или Вы не нашли, как решить Вашу задачу с использованием потенциостата SmartStat или одного из его модулей, напишите нам. Может оказаться, что задача решается уже имеющимися возможностями прибора. Возможно, она будет решена в ближайшем обновлении прибора или SmartSoft, или ожидает своего воплощения. Также мы готовы рассмотреть объективные, то есть востребованные и детализованные пожелания заказчика. Платформа SmartStat является перспективной и в ней будет еще много программных и аппаратных обновлений и дополнений, значительно расширяющих функциональность.

Содержание

1.	Основные возможности программного обеспечения SmartSoft	5
2.	Характеристики программного обеспечения SmartSoft	8
3.	Обзор программного обеспечения SmartSoft	10
4.	Описание кнопок панели управления прибором	16
5.	Пользовательская защита и атрибуты эксперимента	18
6.	Простые рабочие режимы	21
6.1.	Вкладка Прибор, редактора простых режимов	24
6.2.	Вкладка Запуск, редактора простых режимов	28
6.3.	Вкладка Условия, редактора простых режимов	30
6.4.	Вкладка Множители, редактора простых режимов	33
6.5.	Вкладка R-Омическое, редактора простых режимов	35
6.6.	Стационарный режим работы	38
6.7.	Линейная развертка	46
6.8.	Циклическая развертка	48
6.9.	Произвольный хроно-режим	50
6.10.	Режим импеданса (развертка по частоте)	52
6.11.	Режим импеданса (развертка потенциала, тока, от времени)	57
6.12.	Режим произвольного импульса	59
6.13.	Режим импульсной развертки	63
6.14.	Импульсные аналитические режимы	64
6.15.	Профессиональные импульсные аналитические режимы	68
6.16.	Прерывистое титрование	71
6.17.	Пустой режим	79
7.	Программатор SmartSoft	80
8.	Планировщик SmartSoft	86
9.	Основная диаграмма	88
9.1.	Настройки диаграммы	94
9.2.	Панель Преобразования	98
9.2.1.	Общие нормировки	99
9.2.2.	AUX нормировки	100
9.2.3.	AUX математика	101
9.2.4.	Компенсация импеданса	102
9.2.5.	IR-компенсация	103

9.2.6.	Умножение данных на величину	104
9.2.7.	Копирование блоков данных	105
9.2.8.	Обработка в тафелевских координатах	106
9.2.9.	Вычитание кривых	107
9.3.	Таблица вывода данных	114
9.4.	Отчетная таблица	116
9.5.	Гистограмма	123
9.6.	Таблица шагов	124
10.	Экспорт данных	126

1. Основные возможности программного обеспечения SmartSoft

Приемка прибора

- Подключение к потенциостату SmartSoft в операционной системе персонального компьютера
- Автоматическая проверка выбранного канала прибора
- Отображение дополнительных установленных внутренних модулей потенциостата
- Отображение имеющихся диапазонов тока и потенциала
- Ручное задание потенциала или тока с заданными настройками на внутренней или внешней ячейке
- Задание потенциала или тока на выбранном диапазоне для выполнения поверки

Создание рабочей программы

- Выбор рабочего режима – единичные режимы, программатор (50 зацикливаемых шагов), планировщик (автоматический запуск до 10 ранее созданных программаторов или простых режимов)
- Настройка параметров рабочего режима
- Наглядный визуальный прогноз программы поляризации для простых режимов
- Вывод сообщений об ошибках, рекомендаций по созданию рабочего режима, вспомогательной информации о нем и его визуализация
- Автоматические настройки диапазонов, скоростей регистрации и других параметров
- Функция отключения всех второстепенных параметров или перевод их в автоматический режим для облегчения создания программы начинающим пользователем или при создании новой рабочей программы

Расширенные профессиональные и автоматические возможности рабочих режимов

- Конфигурирование и загрузка в прибор индивидуальных атрибутов канала: пользовательских защит по току и потенциалу, названия эксперимента, количества и единиц измерения образца, настроек функции проверки разрыва цепи
- До 11 гибко настраиваемых критериев завершения выполняемого шага работы (по току, заряду, потенциалу, проценту от ранее измеренного заряда, проценту от ранее измеренного тока, по Aux-потенциалам, по всему заряду за шаг, по времени работы шага), 6 и более способов автоматического реагирования на каждый критерий (завершение шага, завершение циклом, завершение всего, переход к любому другому шагу, реверс развертки)
- Программируемое изменение выбранного параметра эксперимента (выходной потенциал или ток, скорость или предел развертки, критерий завершения и тп) путем умножения или добавления заданного значения через заданное кол-во циклов программатора
- Автоматическое (с настройками пользователя) измерение R-омического (импульсом или импедансом) в начале шага с использованием полученного значения для последующей IR-компенсации ПОС
- Выдержка и измерение потенциала РЦ до и после каждого шага работы, запуск шага при заданном значении потенциала РЦ или Aux (внешним триггером), постояннотоковое установление перед шагом
- Задание любого значения потенциала абсолютно, или относительно потенциала РЦ, или относительно последнего измеренного в предыдущем шаге работы
- Режим пошагового циклического программатора, в котором каждый шаг это простой рабочий режим, и такую последовательность шагов можно повторить нужное число раз
- Режим планировщика, в котором выполняется последовательность из не более чем 10 программаторов или индивидуальных простых режимов любого типа
- Возможность не зацикливать заданное число первых шагов программатора (выполнить их однократно)
- Возможность зациклить весь программатор - повторить его весь нужное число раз (то есть повторять всю последовательность: не зацикливаемые + зацикливаемые шаги) - макроцикл (вложенный цикл)

- Автоматический режим удержания заданной псевдопостоянной мощности или сопротивления путем программного регулирования тока в гальваностатическом режиме на уровне прибора

Выполнение работы

- Запуск созданной рабочей программы на выбранном канале прибора, экстренная остановка работы, остановка текущим циклом, немедленный переход к любому выбранному пользователем шагу программатора, загрузка данных из энергонезависимой памяти прибора
- Вывод кратких текстовых сообщений о ходе эксперимента
- Краткий отчет при завершении эксперимента – причина завершения, кол-во точек данных и использованной памяти и тп
- Отображение текущей информации в цифровом виде – ток, потенциал, заряд, время, номер цикла и тп
- Отображение информации в виде диаграмм с быстрым выбором осей:
 - Постоянноточковые данные - $E(t)$, $I(t)$, $I(E)$, $Q(t)$, $P(t)$ и другие;
 - Данные импеданса - $Im(Re)$, $Re(F)$, $Im(F)$, $|Z|(F)$, $C(F)$ и другие;
 - Смешанные данные - $Re(E)$, $Im(I)$, $|Z|(E)$, $C^{-2}(E)$, $Re(t)$, $Im(t)$ и другие;
 - Электрохимические шумы – расчет спектров СПМ и диаграмм распределения (для E и I)
- Диаграмма со второй осью для вывода комплементарных данных (ток-потенциал, действительная-мнимая часть и тп)
- Отложенный запуск работы через команду в текстовом файле управления
- Для импульсных аналитических ВА методов, вывод на диаграмму и в таблицу, как исходных данных ток-потенциал, так и данных результирующей импульсной ВА

Отображение данных

- Вывод текущих данных по выполнению эксперимента в каждом канале прибора в текстовом виде (E , I , Q , P , цикл, шаг, % памяти, состояние, цвет на диаграмме и другие) в таблицу каналов
- Вывод данных на главную диаграмму в различных координатах постоянного и переменного тока, а также смешанных. Вторая ось на диаграмме
- Вывод данных в отчетную таблицу и гистограмму с возможностью автоматического расчета по всем циклам для выбранного из списка (более 100 вариантов) особого параметра
- Вывод данных активного шага и цикла в таблицу (в том числе по разным осям E , I , Q , P , t , Im , R , C и другие)
- Отображение параметров выбранного шага и цикла в таблице шагов, наглядно визуализирующей все экспериментальные данные, возможность назначить отображение или нет на диаграмме конкретному шагу (циклу)
- Дополнительная диаграмма с таблицей для вывода данных с дополнительного оборудования (например, с термодатчика) или для амплитуд гармоник импеданса

Обработка экспериментальных данных

- Вывод в таблицу отчета, характеристик каждого выполненного шага и цикла: режим, кол-во точек данных, скорость развертки, время, заряд, потенциалы РЦ и тп
- Вывод в таблицу отчета выбранного пользователем параметра, рассчитываемого в заданном пользователем интервале времени или частот: заряд, энергия, сопротивление, а также размах, минимум, максимум, средний, наклон и тп для потенциала, тока, потенциала A_{ux} , параметров импеданса
- Автоматический расчет площадей пиков с вычитанием базовой линии в указанном интервале
- Визуализация на основной диаграмме результатов автоматических расчетов для некоторых их типов

- Вывод выбранного пользователем параметра на гистограмму в зависимости от номера цикла
- Вывод данных диаграммы и гистограммы в таблицу для быстрого экспорта
- Нормировка данных на: скорость развертки, корень из нее, кол-во образца и другие
- Программная IR-компенсация
- Добавление, вычитание, умножение и деление данных E , I , Re , Im на постоянную величину
- Компенсация реактивных компонент импеданса ячейки – параллельной емкости и последовательной индуктивности
- Автоматическая и ручная обработка в тафелевских координатах путем аппроксимации с расчетом потенциала и тока коррозии, а также уравнений аппроксимирующих прямых
- Вычитание, сложение и усреднение кривых (с автоматической интерполяцией, экстраполяцией и синхронизацией в координатах $I(t)$ и $E(t)$): ЦВА, линейных разверток, транзиентов тока
- Анализ электрохимических шумов – расчет частотных зависимостей спектральной плотности мощности по току и потенциалу с вычитанием дрейфа и автоматическим расчетом наклонов, построение диаграмм распределения для тока и потенциала, расчет статистических параметров шума (σ , σ^2 , SK , KU)

Средства вывода данных из программного обеспечения

- Автоматическое сохранение данных в файле edf (можно переименовывать в текстовый файл или открыть как текстовый файл)
- Автоматическое резервирование данных в папку AutoReservedFiles со сквозной нумерацией всех экспериментов
- Экспорт всех данных в текстовый файл txt
- Экспорт данных импеданса в файл z
- Сохранение диаграммы картинкой в bmp-формате
- Копирование в буфер обмена или сохранение в текстовый файл столбца (исходного массива) данных тока, потенциала, заряда, мощности и тп, данных импеданса (Re , Im , C , R , F и тп)
- Копирование в буфер обмена или сохранение в текстовый файл любого столбца отчетной таблицы (по шагам или циклам, любого стандартного параметра или рассчитываемого в заданном пользователем интервале)

Версия программного обеспечения:

- Настоящее руководство соответствует версии программы SmartSoft не ниже: 5.211.
- Версия прошивки (firmware) прибора SmartStat: 2-Ex2.
- Некоторые из описываемых функций актуальны только для приборов, выпущенных с апреля 2025 года. Приборы с меньшим, ранее поставленным функционалом, могут быть перепрошиты для обеспечения текущей функциональности в сервисном центре производителя.

Версия прошивки прибора выводится в программном обеспечении SmartSoft в серийном номере прибора, сразу после самого него (последовательности из 4-х чисел). Например: 110-10-12-16 **EX1**. Если после паспортного серийного номера ничего не значится, то это версия 1.EX0 или 2.EX0. Исключение составляют приборы индустриальной серии, их прошивка сразу началась с версии 2.EX2.

2. Характеристики программного обеспечения SmartSoft

Таблица 1. Характеристики программного обеспечения SmartSoft.

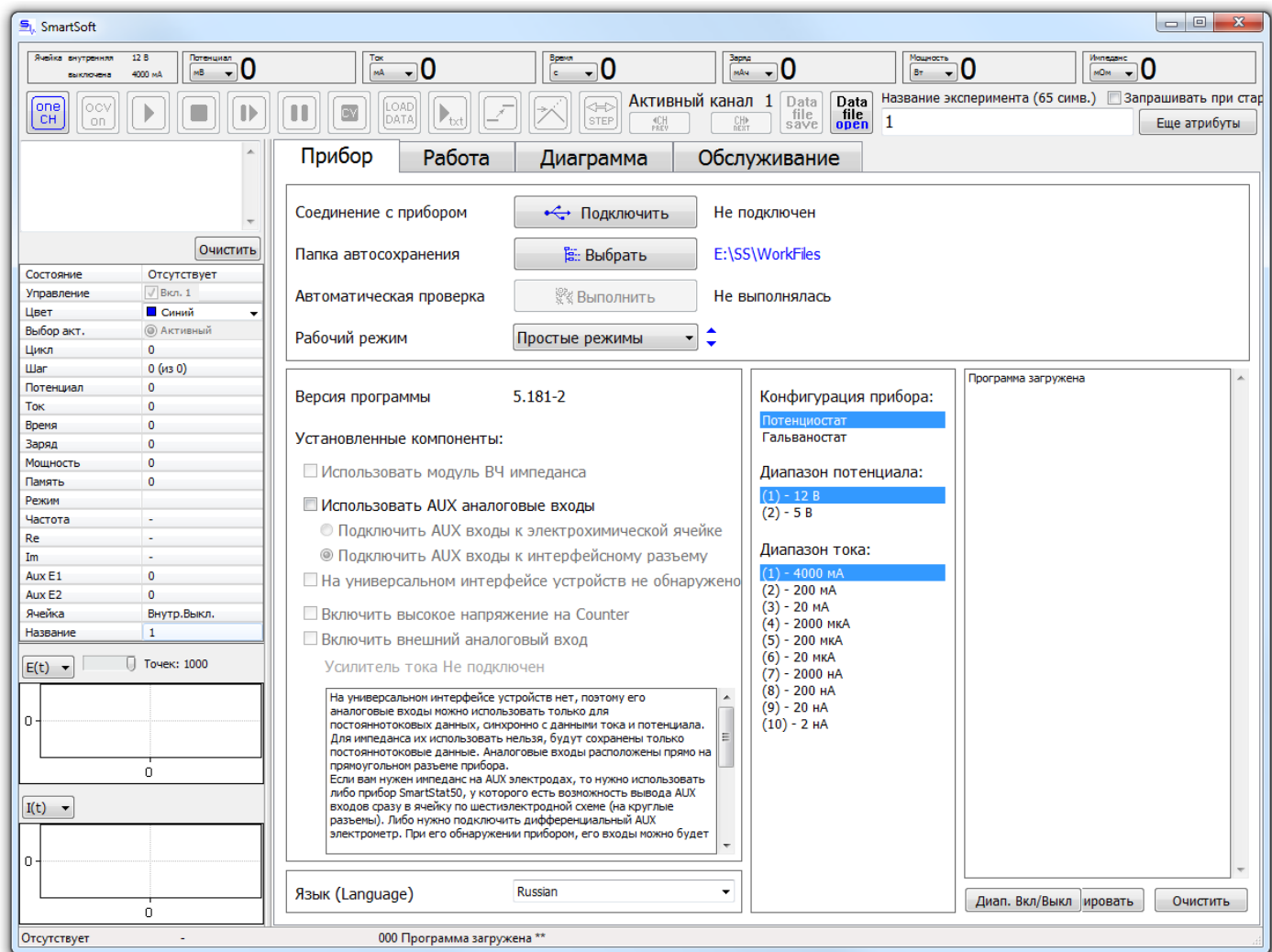
Характеристика	Значение
Рассматриваемая версия программного обеспечения не менее	5.211
Поддерживаемые модели приборов	SmartStat PS-50, PS-250, PS-20, PS-10-4, PS-10, PS-1, PS-30, PS-80, PS-60, PS-65, BPS-12, CS-12-8, CS-20-8 CS-25-8, CS-40-8, CS-45-8 CS-250, CS-400 CS-120-6
Поддерживаемая операционная система	Windows 7, 8, 10, 11
Количество каналов прибора	1 - 8
Максимальное количество программных шагов программатора	50
Максимальное количество программных циклов программатора	2000 для всех типов приборов (начиная с версии SmartSoft 5.211)
Максимальное количество физических циклов программатора	1000000 (1 миллион)
Максимальное количество файлов планировщика	10
Количество одновременно подключенных в программе приборов	1 в обычном режиме, До 8 в режиме кластера
Максимальное количество одновременно подключенных приборов к одному компьютеру	250
Количество одновременно открываемых – просматриваемых файлов (экспериментов)	1
Максимальное количество точек данных в одном шаге или цикле работы	Ограничено памятью (серией) прибора
Наибольшая длительность работы одного шага	23 дня (555 часов, 2 миллиона секунд)
Наибольшая длительность работы 100 циклов программатора	2300 дней

Таблица 2. Список поддерживаемых простых рабочих режимов (все могут выполнять работу в потенциостатическом и гальваностатическом режимах, кроме режима вольтметра в стационарных, а также импульсных ВА со стандартными защитами потенциостатическими техниками).

Рабочий режим	Краткое описание
Стационарные	Отработка постоянного значения тока или потенциала в течение заданного времени, удержание псевдопостоянных мощности или сопротивления путем регулирования тока
Линейная развертка	Развертка потенциала от-до, с заданным количеством проходов конечного значения (если используются максимумы-минимумы, то получается пилообразная форма, подобно ЦВА, но с нецелыми циклами. Данные по циклам не разбиваются)
Циклическая развертка	Традиционная ЦВА с несколькими циклами развертки с возможностью задержки в вершинах
Произвольный хроно-режим	Последовательная отработка до 15-ти заданных уровней постоянного сигнала с заданными длительностями
Импеданс от частоты	Измерение стационарного электрохимического импеданса с разверткой частоты при заданном постоянном потенциале или токе
Импеданса от потенциала, тока или времени	Измерение стационарного (квазистационарного) электрохимического импеданса на заданной частоте при ступенчатой развертке потенциала или тока, с заданной задержкой перед измерением в каждой ступени развертки
Произвольный импульс	Похож на универсальный хроно-режим, но выполняется на максимальном быстродействии прибора и может зацикливаться
Импульсная развертка	ЦВА (осциллографическая) на максимально возможных скоростях
Импульсные аналитические	Защитый набор аналитических методов: СВА, НИВА, ДИВА, КВВА с максимально простыми настройками. Имеют свою дополнительную диаграмму для автоматического построения импульсных электроаналитических вольтамперограмм. Имеется возможность быстрого экспорта и копирования как исходных данных потенциала и тока, так и импульсной электроаналитической ВА
Профессиональные импульсные аналитические	Позволяет создавать любые электроаналитические методы до 5-ти ступеней в одном импульсе, можно накладывать развертку, можно в гальваностатическом режиме. Те же возможности отображения и оперирования с данными, что и в предыдущем режиме
Прерывистое титрование	Специализированные режимы потенциостатического и гальваностатического прерывистых титрований (PIT и GIT) со своими специфическими расчетами результатов. Имеют дополнительную диаграмму для автоматического расчета и построения кривых титрования из исходных данных тока и потенциала. Имеется возможность быстрого экспорта и копирования, как исходных данных потенциала и тока, так и кривой титрования
Пустой режим	Отключает исследуемый образец от прибора на заданное время, чтобы обеспечить доступ образца для другого прибора или канала

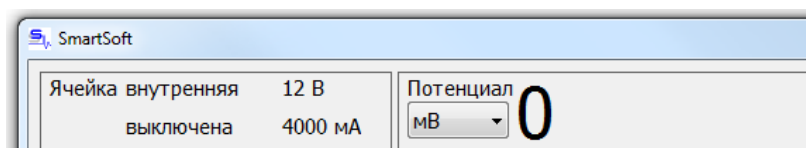
3. Обзор программного обеспечения SmartSoft

При первом запуске, программное обеспечение SmartSoft выглядит следующим образом:



Внешний вид программного обеспечения SmartSoft при первом запуске (в зависимости от версии ПО, внешний вид может несколько отличаться). Внешний вид версий ниже 180 немного отличается от представленного.

Программное обеспечение состоит из одного основного окна и практически все действия осуществляются в нем, за редким исключением. Для группирования отображаемой информации, используются вкладки. В верхней части расположена панель вывода основной текущей информации – состояние ячейки, значение потенциала, тока, времени, заряда, мощности и импеданса в настоящий момент:



Левая сторона верхней части ПО, в которой выводится информация о подключении ячейки, а также пример панели отображения информации о текущем значении потенциала.

В микропанелях вывода информации о потенциале, токе и тп можно выбирать единицы измерения, которые будут использоваться во всем ПО (как для редактирования параметров рабочих режимов, так и для отображения данных в таблицах и на диаграммах).

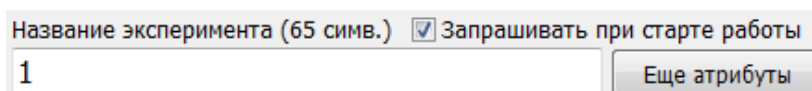
Чуть ниже расположена панель с кнопками управления прибором (все они будут подробно рассмотрены в следующем разделе):




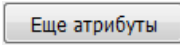
Панель с кнопками управления прибором.

В зависимости от состояния прибора, будут доступны те или иные кнопки управления. Также здесь находятся кнопки выбора активного канала для многоканального прибора. Чтобы, например, запустить выбранную и настроенную работу (или остановить ее в нужном канале), нужно выбрать активный канал и выполнить с ним необходимые пользователю действия. Помимо этого, на диаграмме для активного канала выводится больше информации.

Также в этой панели находятся кнопки ручного сохранения и открытия ранее сохраненных файлов (для просмотра и экспортирования данных). В этой же панели справа находится меню для ввода названия эксперимента:



Меню ввода названия следующего эксперимента.

Название эксперимента, который планируется запустить, рекомендуется ввести в это поле до нажатия кнопки запуска работы . Правее находится кнопка, открывающая дополнительные атрибуты эксперимента , им будет посвящен отдельный раздел.

Введенное до запуска эксперимента название, будет загружено в прибор вместе с его рабочей программой. В процессе выполнения работы, когда ПО будет скачивать из прибора экспериментальные данные, вместе с ними будет считано и это название (загрузка данных может при необходимости, по запросу пользователя, многократно выполняться и позднее, до запуска следующего эксперимента). Оно будет помещено в нижнюю часть (нередатируемой) таблицы вывода подробной информации по всем имеющимся каналам прибора. Эта таблица находится слева

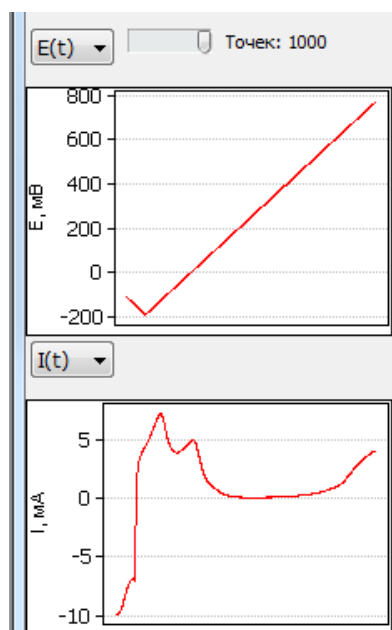
и ее можно открыть или скрыть при помощи кнопок  и .

В этой таблице пользователь также может выбрать активный канал, назначить основной цвет любому каналу, включить его или выключить. В этой таблице дублируются значения текущего тока, потенциала и тп, но, в отличие от самой верхней вытянутой панели, уже по всем каналам, а не только для активного (в приведенном ниже примере подключен одноканальный прибор). Единицы измерения в таблице не выводятся, для упрощения считывания большого числа данных из таблицы. Они наглядно показаны для всего ПО в верхней панели.

Состояние	Ожидание
Управление	<input checked="" type="checkbox"/> Вкл.
Цвет	■ Красн.
Выбор акт.	<input checked="" type="radio"/> Активный
Цикл	0
Шаг	0
Потенциал	-0,022
Ток	0
Время	0
Заряд	0
Мощность	0
Память	100
Режим	
Частота	-
Re	-
Im	-
AUX 1	-1,133
AUX 2	-0,976
Ячейка	Внутр.Выкл.
Название	1

Таблица отображения подробной информации по всем каналам подключенного прибора.

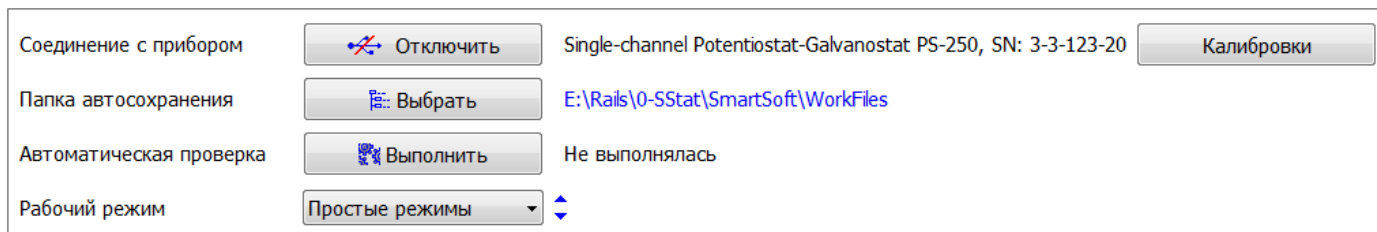
Ниже таблицы состояния прибора, находятся две вспомогательные диаграммы – осциллограммы. В них выводятся несколько сотен последних зарегистрированных точек данных (их количество выбирается здесь же) независимо от номера шага и цикла:



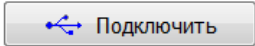
Панель осциллограмм.

В панели осциллограмм можно выбрать тип вертикальной оси (горизонтальная же ось, это всегда условное время), а также количество отображаемых точек данных. При измерении электрохимического импеданса с использованием высокочастотного модуля импеданса, в этих осциллограммах отображаются синусоидальные сигналы, поступающие на Фурье-анализ этого модуля. По ним можно визуальнo оценить степень зашумленности аналогового сигнала в ячейке.

В центральной части ПО SmartStat находится панель подключения прибора:

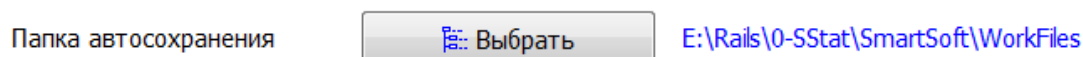


Панель подключения прибора.

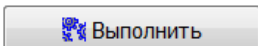
Эта панель является центральной и одной из наиболее важных. В ней пользователь выполняет подключение к прибору (до этого ПО работает с виртуальным прибором модели PS-50 для предварительной оценки пользователем возможностей ПО). Подключение осуществляется кнопкой . После успешного подключения она трансформируется в кнопку отключения (например, для смены подключенного прибора). Правее нее выводится тип и название подключенного прибора, а также его серийный номер и версия прошивки.

Кнопка открытия калибровок доступна только в инженерной версии ПО. В пользовательской версии ее нет, так как потенциостаты SmartStat не нуждаются в пользовательской калибровке. Они поступают с завода изготовителя полностью готовыми к работе и откалиброванными на высокоточном дорогостоящем специализированном оборудовании. В процессе же эксплуатации, обслуживание у пользователя с правкой калибровок, невозможно.

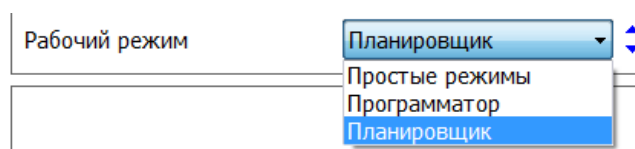
В этой же панели пользователь выбирает папку, в которую будут автоматически сохраняться файлы edf с экспериментальными данными по завершению каждого эксперимента:



Кнопка выбора папки автоматического сохранения данных.

Еще ниже находится кнопка запуска автоматической проверки активного канала прибора . Ее имеет смысл запускать каждый раз, когда у пользователя появляются сомнения в исправности прибора. Подробный отчет о проведенной проверке с заключением и рекомендациями пользователю, будут выведены внизу справа в большом поле сообщений.

В самом низу основной панели находится выпадающее меню выбора рабочего режима:



Выпадающее меню выбора режима работы прибора.

Ниже основной панели находится панель просмотра и конфигурирования подключенного к потенциостату дополнительного оборудования (внешнего и внутреннего):

Версия программы	5.145-2
Установленные компоненты:	
<input type="checkbox"/>	Использовать модуль ВЧ импеданса
<input checked="" type="checkbox"/>	Использовать AUX аналоговые входы
<input type="radio"/>	Подключить AUX входы к электрохимической ячейке
<input checked="" type="radio"/>	Подключить AUX входы к интерфейвному разъему
<input type="checkbox"/>	На универсальном интерфейсе устройств не обнаружено
<input type="checkbox"/>	Включить высокое напряжение на Counter
<input type="checkbox"/>	Включить внешний аналоговый вход
Усилитель тока Не подключен	
<input type="text" value="На универсальном интерфейсе устройств нет, поэтому его аналоговые входы можно"/>	
Язык (Language)	Russian

Панель просмотра и конфигурирования дополнительного оборудования.

В этой панели пользователь выбирает, какое из подключенного оборудования и как будет использовано в работе. Например, будет ли использован для измерения импеданса высокочастотный модуль импеданса (он повышает верхний частотный предел, но позволяет работать только с 2, 3, 4-электродным ячейками) или штатный АЦП потенциостата (он может работать по 6-ти электродной схеме с моделью PS-50, или с дифференциальным внешним усилителем до 8-ми электродов с любым потенциостатом SmartStat). В этой же панели пользователю будут выведены текстовые рекомендации о подключенном оборудовании.

Правее этой панели расположена панель отображения всех имеющихся в приборе диапазонов тока и потенциала. В ней выделены текущие диапазоны. Ниже находится панель выбора языка ПО.

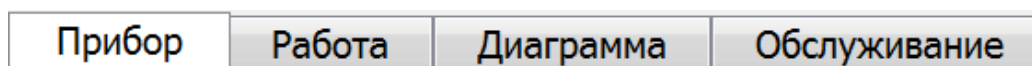
В центральной части основного окна программы SmartSoft находится панель основных вкладок, между ними пользователь переключается на различных этапах эксперимента:

Прибор (ее мы рассмотрели только, что, в ней прибор подключается к ПО и настраивается);

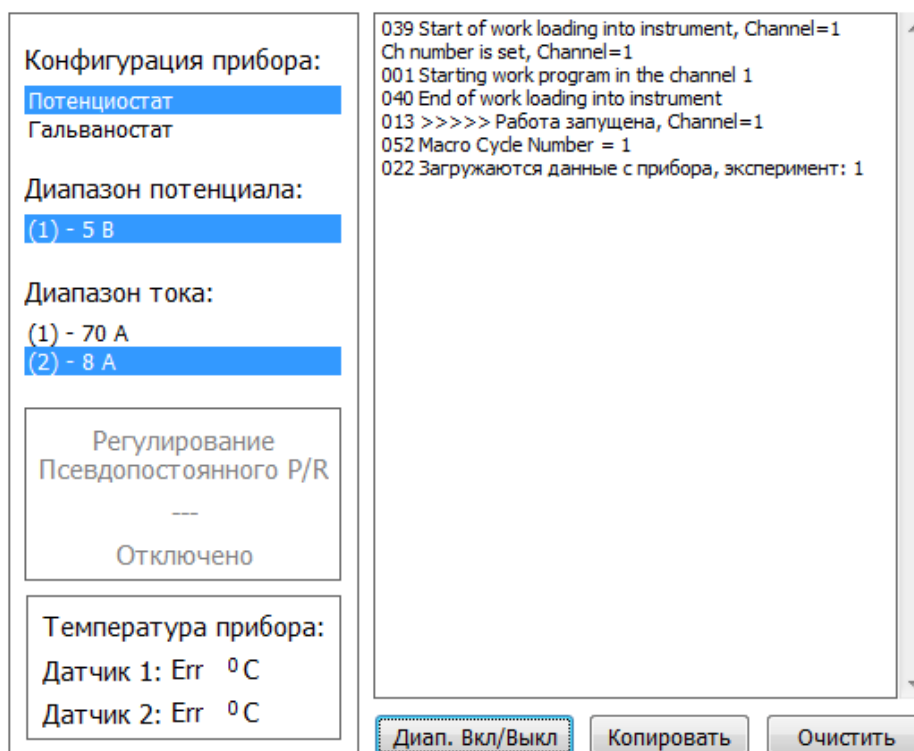
Работа (в ней создается и редактируется рабочая программа);

Диаграмма (в ней выводятся данные в ходе работы);

Обслуживание (в ней можно вручную задавать потенциалы или токи).



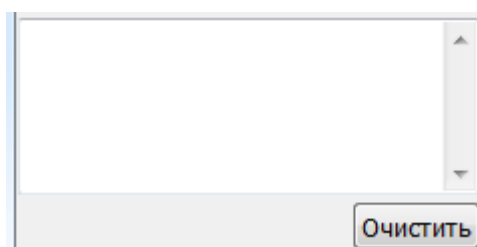
Панель основных вкладок SmartSoft.



Панель отображения текущей конфигурации прибора по диапазонам (слева), а также меню вывода сообщений (справа).

В центральной части основной вкладки «Прибор» имеется панель, в которой отображаются текущие диапазоны потенциала и тока, используемые прибором. Эту панель можно включить или выключить при помощи кнопки **Диап. Вкл/Выкл**, которая находится правее снизу. Также, если эту панель выключить, то в меню сообщений справа не будет выводиться информация о переключении диапазонов тока и потенциала во время выполнения работы. Эту панель можно в любой момент очистить или скопировать ее данные в буфер обмена, для например обращения в техническую поддержку компании-производителя.

В левой части окна программного обеспечения SmartSoft находится меню вывода информации о запуске и завершении работы:



Меню вывода информации о запуске и завершении работы.

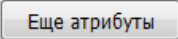
4. Описание кнопок панели управления прибором

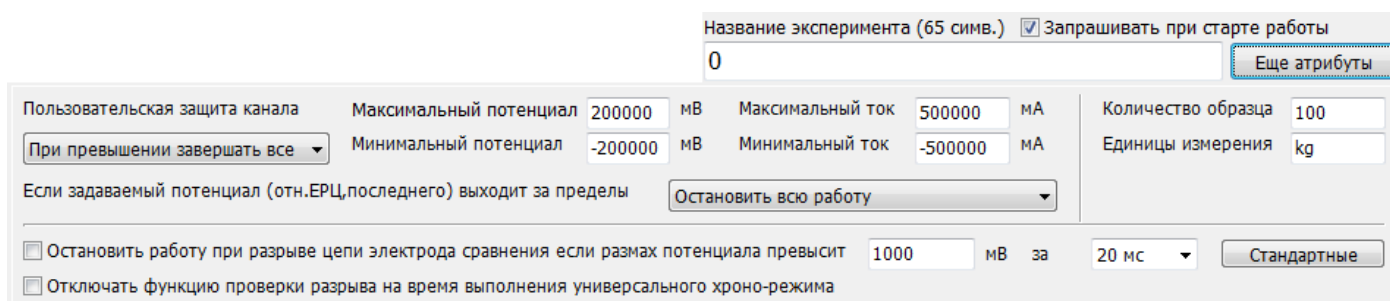
Таблица 3. Описание кнопок управления прибором.

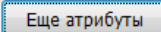
Кнопка	Описание	Активность
 	Пара взаимозаменяемых кнопок. Включает/выключает таблицу вывода всех текущих значений по всем каналам подключенного прибора. Вместе с ней становятся видны/невидны осциллограммы тока и потенциала под ней.	Кнопка активна (доступна) всегда.
 	Пара взаимозаменяемых кнопок. Включает/выключает измерение и индикацию потенциала разомкнутой цепи на подключенной к активному каналу ячейке (до или после работы).	Кнопка активна при подключенном приборе, на каналах, не выполняющих работу.
 	Кнопка запуска созданной работы в активном канале.	Кнопка активна при подключенном приборе и наличии открытой или созданной работы.
 	Немедленная остановка работы в активном канале.	Кнопка активна при выполнении любой стадии работы в активном канале.
 	Кнопка перехода к следующему этапу, шагу, циклу работы, в зависимости от текущей стадии эксперимента. Например, от установления к работе; от выдержки ЕРЦ к его измерению; от измерения ЕРЦ к установлению; от одного шага к следующему; от работы к установлению ЕРЦ после. Действие зависит от загруженной программы, в том числе может и завершить эксперимент.	Кнопка активна при выполнении любой стадии работы в активном канале.
 	При нажатии этой кнопки выполнение текущей работы будет приостановлено: ячейка будет выключена, развертка будет приостановлена, регистрация будет приостановлена. Будет выполняться отображение потенциала РЦ на подключенной ячейке. Повторное нажатие возобновит работу с остановленного момента.	Кнопка активна при выполнении любой стадии работы в активном канале. Рекомендуется только экстренное использование для устранения аварийных ситуаций.
 	Кнопка позволяет сделать текущий цикл последним. Он будет полностью закончен, но последующие циклы выполнены не будут. Если есть последующие файлы планировщика, то они будут выполнены штатно.	Кнопка активна при выполнении любой стадии работы в активном канале.
 	Загрузить данные последнего эксперимента из энергонезависимой памяти прибора. Они будут выведены в программе так, как будто были только что зарегистрированы – в диаграммы, в таблицы, будут автоматически сохранены и доступны к просмотру и для первичной обработки и тп. Обычно эта кнопка используется для загрузки данных прерванного отключением электроэнергии	Кнопка активна при подключенном приборе, на каналах, не выполняющих работу.

	длительного эксперимента.	
	Запуск эксперимента под контролем текстового файла. Подготовленный к работе эксперимент будет запущен, когда в служебном файле CfgFiles/Control/Control.txt пользователь (пользовательское ПО) изменит флаг 0 на 1.	Кнопка активна при подключенном приборе, на каналах, не выполняющих работу, при наличии открытой или созданной работы.
	Перейти к заданному значению постоянного тока или потенциала. Для ввода значения тока или потенциала появится дополнительная панель.	Кнопка активна в момент выполнения любого стационарного режима работы
	Выполнить реверс развертки в текущем цикле. В одном цикле можно выполнять сколько угодно раз. Окончанием цикла будет считаться пересечение конечного значения заданное число раз (в линейной развертке задается пользователем, в циклической всегда равно двум).	Кнопка активна при выполнении простого режима линейной или циклической развертки.
	Перейти к заданному пользователем шагу программатора. Для ввода номера шага появится дополнительное меню. Если номер шага больше текущего, то будет продолжен текущий цикл. Если номер шага меньше или равен текущему шагу, то будет начат новый цикл (если только текущий не является последним, иначе работа будет закончена).	Кнопка активна при выполнении любого программатора, в котором использовано 2 или более шагов.
	Кнопки выбора активного канала подключенного прибора.	Кнопка активна при подключении многоканального прибора.
	Сохранить экспериментальные данные в файл edf или выполнить из них экспорт в файл z или txt (появится дополнительное окно с настройками экспорта).	Кнопка активна всегда, когда имеются данные, которые можно было бы сохранить (открытые без прибора, или загруженные, или сейчас измеряемые на нем).
	Открыть ранее сохраненные данные из файла edf (Electrochemical Data File, универсальный формат сохранения данных компании Electrochemical Instruments).	Активна всегда, когда не выполняется работа на активном канале.

5. Пользовательская защита и атрибуты эксперимента

Программное обеспечение SmartSoft позволяет пользователю настраивать собственные программные пороги защит, дополнительно к защитам в прибор. Для этого служит панель настройки защит и атрибутов. Нажатие кнопки  справа от названия эксперимента, откроет ее:



Название эксперимента (65 симв.) Запрашивать при старте работы
0 

Пользовательская защита канала	Максимальный потенциал	<input type="text" value="200000"/>	мВ	Максимальный ток	<input type="text" value="500000"/>	мА	Количество образца	<input type="text" value="100"/>
<input type="button" value="При превышении завершать все"/>	Минимальный потенциал	<input type="text" value="-200000"/>	мВ	Минимальный ток	<input type="text" value="-500000"/>	мА	Единицы измерения	<input type="text" value="kg"/>

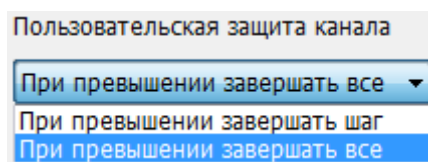
Если задаваемый потенциал (отн.ЕРЦ,последнего) выходит за пределы

Остановить работу при разрыве цепи электрода сравнения если размах потенциала превысит мВ за мс

Отключать функцию проверки разрыва на время выполнения универсального хроно-режима

Панель настройки атрибутов эксперимента.

Пользователь может выбрать, как срабатывать пользовательской защите: останавливать весь эксперимент или только прекращать выполнение текущего шага с переходом к следующему.

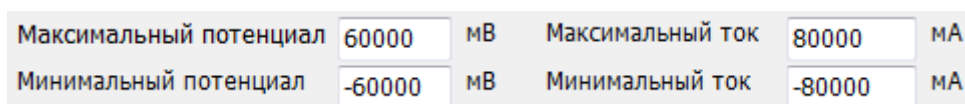


Пользовательская защита канала

- При превышении завершать все
- При превышении завершать шаг
- При превышении завершать все

Выпадающее меню, позволяющее выбрать – как срабатывать защите.

Далее можно настроить безопасные пределы по току и потенциалу:

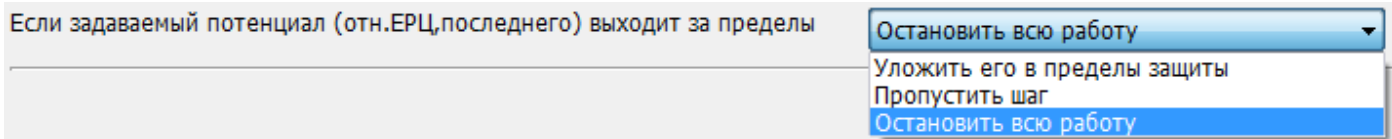


Максимальный потенциал	<input type="text" value="60000"/>	мВ	Максимальный ток	<input type="text" value="80000"/>	мА
Минимальный потенциал	<input type="text" value="-60000"/>	мВ	Минимальный ток	<input type="text" value="-80000"/>	мА

Редактор допустимых защитой пределов по току и потенциалу пользовательской защиты.

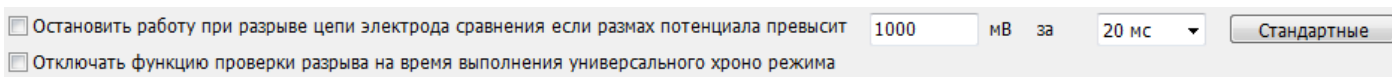
Все введенные параметры сохранятся в настройках программы до следующего ее запуска в момент закрытия программного обеспечения.

Также пользователь может выбрать, что делать прибору, если задаваемый потенциал выйдет за пределы пользовательской защиты в ходе выполнения эксперимента на этапе начала нового шага работы. Дело в том, что потенциалы можно задавать относительно потенциала разомкнутой цепи ЕРЦ. В некоторых случаях он оказывается заранее неизвестен, и прибавление к нему пользовательского значения, может привести к выходу задаваемого значения за пределы пользовательской защиты. На этот случай пользователь может выбрать, что делать прибору – остановить весь эксперимент, пропустить этот шаг и перейти к следующему, или обрезать задаваемое значение до безопасного предела, определенного пользовательской защитой:



Настройки пользовательской защиты.

Помимо этих настроек прибор имеет функцию отслеживания целостности цепи электрода сравнения. Она также работоспособна и в других схемах включения, без электрода сравнения. Для этого, ее (возможно) стоит настроить иным образом по величине перепада потенциала:



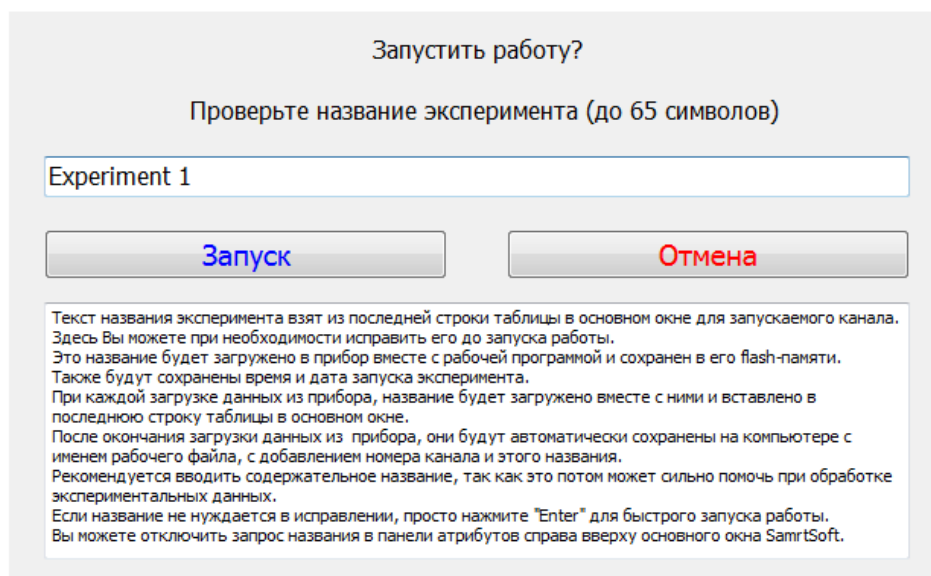
Панель настроек функции, проверяющей целостность цепи электрода сравнения.

Принцип работы этой функции основан на том, что в большинстве рабочих режимов, используемых в жидкостной электрохимии, не происходит очень резких и больших перепадов потенциала за короткий промежуток времени. Как правило, это имеет место только при обрыве цепи электрода сравнения. Описываемая функция осуществляет мониторинг данных потенциала и незамедлительно остановит эксперимент, при достижении заданного критерия, обезопасив электроды от избыточной поляризации и разрушения. Ввиду же того, что в универсальном хроно-режиме (описан далее), как раз возможно штатное возникновение таких перепадов, для него действие этой защиты можно приостанавливать, если, например, сложная программа состоит из шагов разных типов, и в каких-то из них функция проверки обрыва нужна, а в каких-то будет только мешать. Эта функция применима только к простым (потокowym) рабочим режимам – стационарным, разверткам и универсальному хроно-режиму. Она неработоспособна во всех импульсных (пакетных) режимах и импедансе.

Также в этой панели пользователь может ввести нужное количество образца и единицы измерения (например, 100 г). Эти параметры потом будет использоваться для автоматического отображения удельных параметров (индивидуально по каналам - у каждого свое количество и единицы) на диаграммах и таблицах (с указанием единиц измерения по осям).

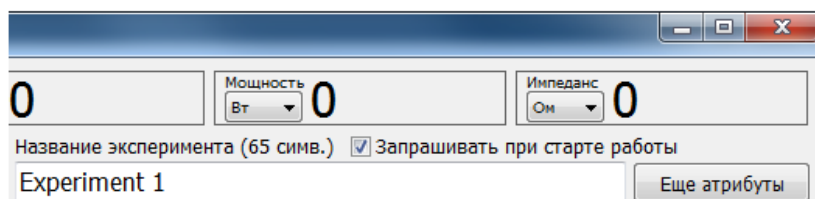
Аварийное завершение эксперимента пользовательской защитой или защитой в прибор, отключает опцию, позволяющую не выключать ячейку по завершению эксперимента (она рассмотрена далее). То есть, ячейка будет в любом случае выключена независимо от настроек пользователя.

Перед запуском работы пользователю может предлагаться ввести название последующего эксперимента. При этом будет появляться дополнительная панель с полем для названия:



Внешний вид панели для ввода названия текущего эксперимента, непосредственно перед его запуском.

Эту опцию можно включить или выключить с помощью настройки Запрашивать при старте работы, расположенной над базовым полем для ввода названия эксперимента (справа сверху основного окна программного обеспечения SmartSoft):



Правая верхняя часть основного окна программного обеспечения SmartSoft с опцией включения запроса названия эксперимента перед его запуском.

6. Простые рабочие режимы

Если в центральной панели подключения прибора, пользователь выбрал Простые режимы работы, то во вкладке Работа, будет выведен редактор простых (единичных) режимов:

The screenshot shows the 'Работа' (Work) tab of the software interface. On the left, there is a list of available modes: 'Стационарный', 'Линейная развертка', 'Циклическая развертка' (highlighted), 'Произвольный хроно', 'Импеданс (F)', 'Импеданс (E, I, t)', 'Произвольный импульс', 'Импульсная развертка', 'Импульсные аналитические', 'Импульсные аналитические рго', and 'Пустой режим'. The main area contains a parameter editor for the selected mode, with tabs for 'Основное', 'Прибор', 'Запуск', 'Условия', 'Множители', and 'R-омическое'. The 'Основное' tab is active, showing parameters like 'Стартовое значение' (0 мВ), 'Максимум' (1000 мВ), 'Минимум' (-1000 мВ), 'Плато в максимуме' (0 с), 'Плато в минимуме' (0 с), 'Скорость развертки' (20 мВ/с), 'Количество циклов' (2), 'Количество холостых циклов' (0), and 'Сохранять первый цикл из' (1). The right side features a status window with information about the selected mode, including 'Проверка циклической развертки', 'Шаг развертки 0,16787 мВ', 'Всего будет сохранено циклов 2', and 'Время работы шага: 400 с (6Мин, 40с)'. At the bottom, a graph shows a sawtooth waveform with a peak of 1000 mV and a trough of -1000 mV over a 400-second period.

Вкладка Работа с редактором простых режимов (в качестве примера выбрана циклическая развертка).

В этой вкладке слева приведен список доступных для подключенного прибора простых рабочих режимов. Выбирая один из них, справа будет отображаться набор его параметров. Параметры в свою очередь тоже состоят из нескольких вкладок:

Основное (уникальные параметры выбранного режима);

Прибор (настройки диапазонов прибора и тп);

Запуск (регистрация потенциалов до и после работы и тп);

Условия (критерии досрочного завершения эксперимента по току, заряду и тп);

Множители (изменение одного из параметров с циклами программатора);

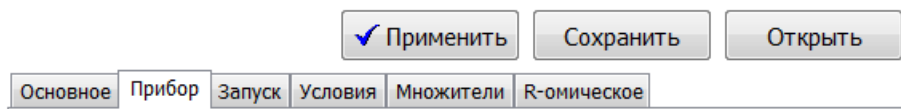
R-Омическое (измерение омического сопротивления перед работой).

Все эти вкладки далее будут рассмотрены подробнее далее.

Справа в редакторе находится меню вывода рекомендаций и сообщений об ошибках, а также отчетной информации. Внизу расположена диаграмма прогноза формы сигнала редактируемого режима. Она позволяет увидеть и проверить программу поляризации образца до запуска эксперимента. Для удобства отображения скоростных режимов, в ней можно отключить

отображение предварительных стадий установления или измерения потенциалов разомкнутой цепи (их настройки рассмотрены далее).

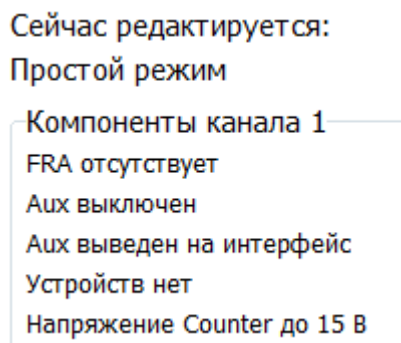
В верхней части редактора простых режимов расположены кнопки управления этим редактором:



Кнопки управления редактором простых режимов.

Любые изменения в параметрах выбранного режима необходимо проверить и применить с помощью кнопки . Только после ее нажатия изменения вступают в силу. Также вы можете сохранить (кнопка) все параметры редактируемого режима в файл swf (SmartStat Work File), чтобы использовать их в другой раз, открыв их кнопкой .

Также во вкладке редактора простых режимов слева расположена панель напоминаний (программное обеспечение выводит дублирующую информацию пользователю о том, какие дополнительные компоненты подключены к прибору и как они настроены в основной вкладке Прибор):



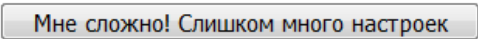
Панель напоминаний редактора простых режимов.

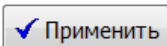
В этой панели сверху программа выводит сообщение о том, что сейчас вы редактируете простой режим. В случае же использования программатора, здесь будет указан номер редактируемого шага программатора. Его шаги являются простыми режимами и редактируются из него в принципе так же, как и простые режимы, но с некоторыми ограничениями (программатор рассмотрен далее).

В верхней правой части редактора (справа) расположена опция Проверить ЕРЦ, которая позволяет автоматически измерить потенциал разомкнутой цепи (на активном канале, если он не занят работой) при редактировании программы. Дело в том, что если в редактируемой работе, какой-либо из потенциалов задается относительно ЕРЦ, то заранее предсказать, как именно будет выглядеть рабочий режим, иногда невозможно. Чтобы внести поправку на действительность, и

нарисовать пользователю максимально реалистичный прогноз, можно включить эту опцию. Стоит, однако, учитывать, что в сложных многостадийных режимах, текущее значение ЕРЦ будет зависеть от предистории, и измерение его без предварительных (планируемых в работе других) шагов, даст неверное значение ЕРЦ и все равно может исказить прогноз. Замер потенциала РЦ происходит в момент нажатия кнопки Применить.

Поле сообщений (в правой стороне редактора) может выводить текст тремя цветами. Черный – все в порядке; красный – есть исправленные или неисправленные критические ошибки, необходимо проверить настройки, выделенные красным – они были исправлены программой. Также текст может быть оранжевым, это означает, что программе кажется, что имеются потенциальные проблемы, но на усмотрение пользователя, с ними можно работать (возможно, они являются нужными пользователю настройками).

Многие простые рабочие режимы имеют большое количество настроек и функций. Зачастую многие из них не нужны, особенно начинающему пользователю. Пройтись по ним всем и проверить, не включены ли лишние действия, это может быть сложно и неудобно даже для опытного пользователя. Поэтому в редакторе единичных режимов есть панель с кнопкой . Она расположена под окном сообщений редактора. Дважды ее нажав (второй раз для подтверждения, в течение 5-ти секунд после первого нажатия) программа выключит все второстепенные и дополнительные функции, а все возможные параметры переведет в автоматический режим. Все сброшенные или измененные параметры она подсветит желтым цветом во всех вкладках редактора, чтобы пользователь видел, где внесены изменения. Кнопку имеет смысл нажать, если вы начинаете создавать с нуля новый рабочий режим, и хотите быть уверены, что не включено ничего лишнего. После этого вы можете включить и настроить все нужные вам функции с нуля.

После сброса настроек, или любого изменения параметров работы, чтобы изменения вступили в силу, нужно нажать кнопку . Она будет моргать, информируя о наличии несохраненных и непроверенных изменений.

Далее, в настоящей документации сначала будут подробно рассмотрены вспомогательные вкладки редактора простых режимов, а затем основные параметры каждого из них.

6.1. Вкладка Прибор, редактора простых режимов

Основное | **Прибор** | Запуск | Условия | Множители | R-омическое

Вольтметр Потенциостат Гальваностат

Диапазон потенциала: 5 В

Диапазон тока: 25 А Автоматически

Минимальный д. тока: 20 мкА Автодиап. только 1й цикл

Скорость регистрации: 244,14 Т./с Автомат. норм.

IR-компенсация: 0 Ом

Не выключать ячейку после завершения редактируемого шага (режима)

Вкладка Прибор, редактора простых режимов.

В этой вкладке пользователь выбирает, в каком режиме будет работать прибор – потенциостат или гальваностат. Для стационарных режимов также доступен режим вольтметра (регистрация потенциала РЦ).

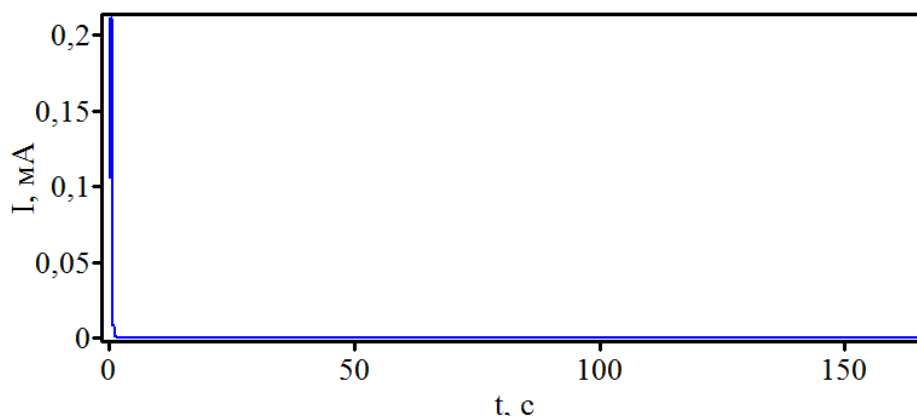
Далее выбираются диапазоны потенциала и тока. При работе в потенциостатическом режиме можно выбрать, будет ли диапазон тока автоматическим или нет. Если да, то прибору будет разрешено, при необходимости, переходить на более тонкие диапазоны тока для улучшения качества регистрируемых данных. На более грубый диапазон тока переключение происходит в любом случае обнаружения перегрузки или при приближении к ней независимо от настроек пользователя, чтобы максимально сберечь выполнения эксперимента.

При работе же в гальваностатическом режиме, автоматического диапазона потенциала нет, но если на младшем диапазоне потенциала будет обнаружена перегрузка, то прибор немедленно переключится на более грубый диапазон потенциала, если таковой имеется. В режиме ЦВА появляется дополнительная настройка Автодиап. только 1й цикл, запрещающая переход на более тонкие диапазоны тока после первого цикла. Она позволяет избежать, иногда мешающих регистрации данных, переключений на чистовых циклах (следующих после первого цикла, когда ЦВА чаще всего принимает уже относительно установившийся вид, по крайней мере по размаху тока).

Также, при активации автоматического диапазона тока, можно выбрать, до какого диапазона тока можно выполнять переключение Минимальный д. тока 20 мкА. Эта функция также позволяет избежать излишних переключений для получения данных без разрывов (разрывы появляются от переключений диапазонов), а также она бывает полезна и по другим причинам (изредка для сохранения устойчивости, снижения падения поляризующего напряжения на токоизмерительных резисторах прибора, обеспечения более надежной поляризации образца при резко меняющихся уровнях тока, для обеспечения запаса по регистрируемому току).

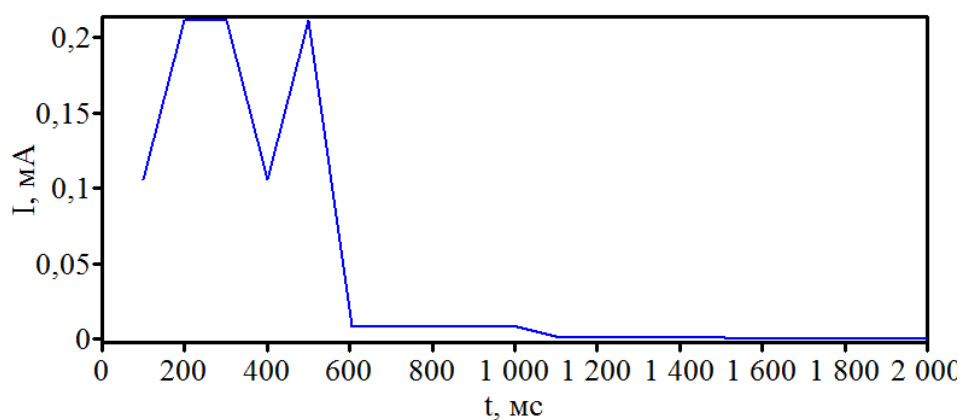
Количество доступных пользователю диапазонов тока, ограничено скоростью регистрации данных. Из-за того, что у самых тонких диапазонов имеются частотные ограничения, они не доступны на высоких скоростях, но появляются на более низких (чем медленнее эксперимент, чем ниже скорость регистрации, тем больше тонких диапазонов тока будет доступно). Часть из них недоступна в импульсных режимах и исходно ограничена в импедансе. В последнем случае прибор сам подключит (при необходимости) все требуемые диапазоны и воспользуется ими, когда дойдет до разрешенной для них рабочей частоты. То есть, фактически, при необходимости, прибор сможет и будет их использовать согласно их частотным возможностям.

Если в процессе работы отклик по току имеет следующий вид:



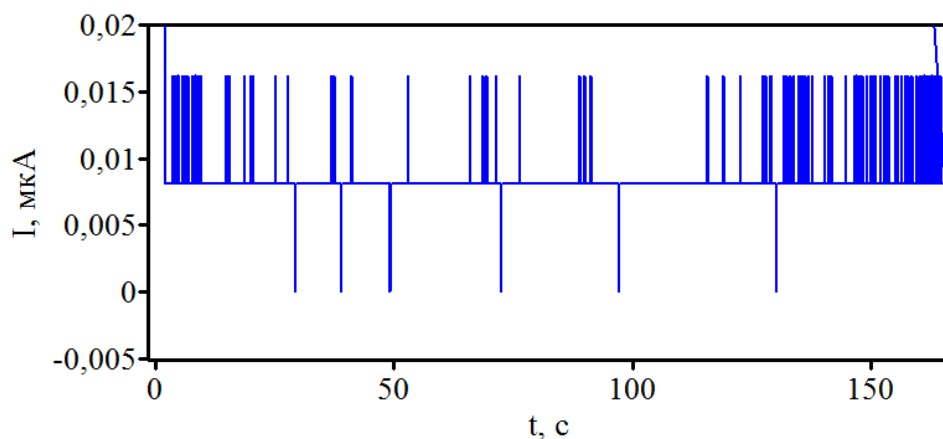
Вид отклика по току со слишком грубым стартовым диапазоном тока при включенном автоматическом диапазоне тока.

То есть, вначале наблюдается всплеск тока, а потом либо нулевая линия, либо очень малый отклик по току похожий на то, что ожидалось, то необходимо выбрать более тонкий стартовый диапазон тока (параметр «Диапазон тока»). Альтернативно можно удалить начальную область (кажущуюся всплеском) или первый цикл ЦВА, если потом их идет несколько. Эта область представляет собой результат работы прибора на грубом диапазоне тока. Если увеличить масштаб по времени, то станет видна в явном виде дискретность разрядов АЦП:



Увеличенная начальная часть эксперимента с грубым диапазоном тока: до 600 мс первый диапазон, от 600 мс до 1000 мс - второй диапазон тока, далее третий.

В процессе работы, прибор выбирает более тонкие диапазоны тока, если включены автоматические. Ему требуется время на то, чтобы убедиться в том, что действительно необходимо переключение на более тонкий диапазон, чтобы избежать ложных срабатываний. За это время он успевает зарегистрировать загрубленные данные. Если увеличить остальную область сигнала тока, кажущуюся прямой нулевой линией, то в ней тоже можно увидеть дискретность, но уже более тонких диапазонов тока. Это нормальное явление при работе любого аналого-цифрового преобразователя, если дискретность наблюдается сразу и только она, то стоит выбрать более тонкий диапазон тока, включить автоматический диапазон тока (проверить подключение образца):



Дискретность сигнала по току.

Если наблюдается картина, подобная приведенной выше, то стоит обратить внимание на вертикальную ось. В данном случае работа в показанной на этом рисунке области велась на диапазоне тока 2 мА, дискретность составила 0,01 мкА, а размах дискретности по вертикальной оси 0,001% от максимума используемого диапазона тока, что является очень малой величиной.

Переход на более грубые диапазоны тока происходит сразу, как только будет превышен определенный порог.

Далее в этой вкладке расположены параметры скорости регистрации данных. Они отсутствуют в импульсных режимах и импедансе. При автоматической настройке (рекомендуется) вы также можете выбрать ее приоритеты: на больший объем данных или на меньший, рассчитать скорость регистрации (последнее всегда снижает визуальную шумность данных, укорачивая частотный диапазон сверху, хотя на самом деле снижения шума не происходит).

Также, в этой вкладке можно включить IR-компенсацию, если она имеется в приборе. Она недоступна в импульсных режимах и импедансе. Справа от нее имеется указатель, показывающий, какой запас по компенсируемому сопротивлению имеется для выбранных диапазонов тока и потенциала. Чем грубее диапазон, тем более низкое значение сопротивления доступно к компенсации. В процессе работы это является определенным ограничением при автоматическом или защитном переключении диапазонов тока. На более тонкие диапазоны тока, как правило, переключиться не проблема, а вот переход на более грубые может вызвать сложности (и привести к аварийной остановке эксперимента), если у потенциального более грубого диапазона тока нет

возможности скомпенсировать на столько большое омическое сопротивление, как было задано пользователем, или было автоматически измерено соответствующей функцией (измерения омического сопротивления).

Помимо этих параметров, имеется также возможность сделать так, чтобы прибор не выключал ячейку (поляризующий ток или потенциал, остающиеся после завершения редактируемого шага) с помощью опции Не выключать ячейку после завершения редактируемого шага (режима) . Эту опцию необходимо использовать с осторожностью, чтобы не создать аварийную ситуацию при переключении пользователем образца, находящегося под током.

Если вы не знаете, как настроить диапазоны и скорость регистрации, ставьте их на автоматическую настройку. Практически всегда, это наиболее правильный выбор.

6.2. Вкладка Запуск, редактора простых режимов

Вкладка Запуск, редактора простых режимов.

В этой вкладке можно включить функцию выдержки и измерения потенциала разомкнутой цепи до начала работы редактируемого простого режима. В случае использования программатора, можно запретить это действие на последующих циклах программатора кроме первого (Измерять/выдерживать E PC только в первом цикле программатора).

Основную работу редактируемого режима (шага) можно запустить либо штатно после выдержки EPC, если выбрана настройка с , либо в течение этой выдержки, по критерию потенциала мВ , мВ , либо сразу как E PC станет мВ . При использовании Aux входов, их критерии также можно использовать для запуска эксперимента, например, как внешний триггер. Во всех случаях работа будет запущена, не дожидаясь окончания выдержки EPC. Измерение EPC также будет выполнено после этого:

Запуск работы по критерию потенциала PC.

Помимо этого есть возможность измерения и выдержки потенциала PC после редактируемого простого режима работы.

В нижней части вкладки Запуск, находится опция включения установления перед измерением. Это простой стационарный дополнительный режим, который в потенциостатическом или гальваностатическом режиме (как выбрано во вкладке Прибор) на заданное время установит стационарный выходной потенциал или ток, который первым будет использован в редактируемом простом режиме (например, стартовый потенциал в развертке) непосредственно перед началом

работы основного режима. Также можно сохранить данные установления, например, для точного расчета прошедшего в ходе него заряда. Для режима установления будет автоматически выбрана скорость регистрации так, чтобы на него получилось 100 точек данных. Они будут добавлены в начало основных данных редактируемого режима. Режим установления может быть полезен, чтобы убрать бросок тока, возникающий иногда в момент запуска основного рабочего режима (например, выброса первых точек данных в ЦВА).

6.3. Вкладка Условия, редактора простых режимов

Основное	Прибор	Запуск	Условия	Множители	R-омическое	
Первичные критерии:						
Осн. E	Ничего не делать			>	1800 мВ	
Осн. I	Закончить текущий шаг при			>	1000 мА	
Осн. Q	Закончить всю работу при			>	30 мКл	
Вторичные критерии:						
Осн. E	Сделать текущий цикл последним при			>	0 мВ	
Осн. I	Закончить шаг и перейти к шагу номер, при			0	<	-2000 мА
Осн. Q	Закончить текущий шаг при			<	-20 мКл	
Aux 1, 2	Сделать текущий цикл последним при AUX2			>	1000 мВ	
Критерии, проверяемые однократно при завершении шага:						
Закончить всю работу, если заряд в конце шага			>	0	мКл	
Перейти к шагу, если время в конце шага			0	>	0 с	

Вкладка Условия, редактора простых режимов (включены почти все условия).

Вкладка Условия, служит для редактирования критериев досрочной остановки эксперимента (не по заданным заранее длительности или количеству циклов, а по возникшему в ходе работы условию, тоже оговоренному заранее, но в этой вкладке). В ней имеется 6 основных критериев – 2 по потенциалу, 2 по току и 2 по заряду. Каждому из них можно выбрать действие, которое будет выполнено в случае достижения критерия:

Закончить текущий шаг при	>	0	мВ
<ul style="list-style-type: none"> Ничего не делать <li style="background-color: #e0f0ff;">Закончить текущий шаг при Закончить всю работу при Сделать текущий цикл последним при Закончить текущим циклом всю работу при Закончить шаг и перейти к шагу номер, при Реверс развертки при 			

Список действий, которые могут быть выполнены по достижению заданного критерия.

Таблица 4. Описание действий, которые могут быть предприняты при выполнении условий досрочного завершения эксперимента.

Действие	Описание
Ничего не делать	Критерий отключен
Закончить текущий шаг при	Будет досрочно закончен выполняемый шаг и совершен переход к следующему шагу или циклу программатора или файлу планировщика, или измерению ЕРЦ После, в зависимости от того, что задано следующим
Закончить всю работу при	Вся работа будет немедленно остановлена, сколько бы циклов и шагов программатора или файлов планировщика не следовало далее

Сделать текущий цикл последним при	Этот цикл программатора или ЦВА будет завершен, больше циклов этого программатора выполнено не будет. Но если после этого есть еще файлы планировщика, то они будут выполнены
Закончить текущим циклом всю работу при	То же что и предыдущий, но последующие файлы планировщика выполнены не будут
Закончить шаг и перейти к шагу номер, при	Выполняемый шаг будет остановлен досрочно, измерение и выдержка ЕРЦ после него выполнены не будут, даже если назначены. Будет выполнен переход к заданному в соседнем поле номеру шага программатора (поле для ввода номера шага появляется справа только у этого критерия). Если номер нового шага больше, чем у сейчас выполняемого, то будет продолжен тот же цикл программатора. Если же номер нового шага меньше или равен текущему шагу, то будет начат новый цикл, если текущий цикл не был последним (иначе работа будет закончена)
Реверс развертки при	При достижении заданного критерия будет выполнен реверс развертки, как будто это максимум (или минимум) развертки. Функция очень удобна, например, когда нельзя заходить выше определенных токов при выполнении развертки ЦВА, но заранее неизвестно значение потенциала, при котором такие токи могут развиваться. Это действие доступно только для линейной и циклической разверток

В качестве основных критериев завершения используются не по одному, а по два для тока, потенциала и заряда, чтобы, во-первых, для каждого из них можно было назначить разные варианты действий, а во-вторых, разные полярности для ограничения, например тока, как сверху, так и снизу.

Помимо перечисленных критериев, срабатывающих по данным тока и потенциала, имеется набор таких же действий по потенциалу для Aux входов.

Также в этой вкладке есть два специальных критерия, которые проверяются только при завершении редактируемого шага. Это критерии по общему (суммарному) заряду и общему времени, прошедшим в редактируемом шаге программатора:

Специальные критерии (условия) досрочного завершения работы по общему заряду и времени.

Специальные критерии функциональны только в режиме программатора. Критерий по общему заряду может быть полезен, например, при циклическом заряде-разряде аккумулятора или суперконденсатора. В ходе такого исследования, аккумулятор постепенно теряет емкость и имеет смысл остановить эксперимент, когда аккумулятор потеряет некоторый ее заданный процент от первоначальной. В противном случае длительное циклирование может окончательно испортить

исследуемый объект не нужными быстрыми циклами, а также регистрирует много бесполезных данных в этих последних циклах. В то же время, потеря заданной емкости может послужить критерием к завершению эксперимента вовремя, и, например, финальной автоматической регистрации спектра импеданса (или иной охарактеризации образца), если был использован планировщик с соответствующим следующим файлом измерения импеданса.

Вкладка Условия, доступна только простым потоковым режимам (стационарному, разверткам и хроно-режиму), она неактивна для импульсных режимов (в ней для них сведены параметры повторения и регистрации импульсов, их описание приведено в разделе импульсных режимов). Для импульсных аналитических режимов и импеданса она тоже недоступна.

6.4. Вкладка Множители, редактора простых режимов

Основное Прибор Запуск Условия Множители R-омическое

Включить функцию умножения-добавления для выбранного параметра

Умножать через каждые 1 циклов программатора

Значение Задаваемое значение

На 2

Скорость регистрации Разделить на то же значение

Время работы Умножить на то же значение

Функция множителей позволяет менять один выбранный параметр редактируемого простого режима работы, когда он является шагом программатора. Его можно либо умножить на заданное значение, либо прибавлять к нему определенное значение, по истечению заданного количества циклов программатора. Умножение (или добавление, в тч и отрицательного значения) может повторяться многократно в ходе раобты одного программатора. Каждый из шагов программатора выполняет функцию множителей независимо от

Вкладка Множители, редактора простых режимов

Вкладка Множители, является мощнейшим инструментом при работе с программатором (она нефункциональна в простых режимах). Она позволяет менять один выбранный параметр по ходу выполнения программатора. С ее помощью можно, через заданное количество циклов программатора добавить к выбранному параметру эксперимента заданную величину, или умножить значение выбранного параметра на определенное значение. Это очень удобно, например, при циклировании аккумуляторов набором различных скоростей с постоянным шагом (скажем, выполняется три цикла на скорости 0.5С, затем три на 1С, затем три на 2С и тд); или при охарактеризации электрода методом ЦВА при разных скоростях развертки (скажем 2 цикла на 100 мВ/с, затем 2 цикла на 50 мВ/с, затем 2 цикла на 25 мВ/с и тд). Также можно создавать ступенчатые режимы, используя стационарные режимы, добавляя на каждом новом цикле заданный шаг по потенциалу.

Меняемых на ходу параметров довольно много, их список зависит от выбранного режима работы (максимумы и минимумы разверток, критерии завершения и тп):

Не менять ни одно значение

Не менять ни одно значение

Условие завершения по потенциалу 1

Условие завершения по току 1

Условие завершения по заряду 1

Условие завершения по потенциалу 2

Условие завершения по току 2

Условие завершения по заряду 2

Стартовое значение

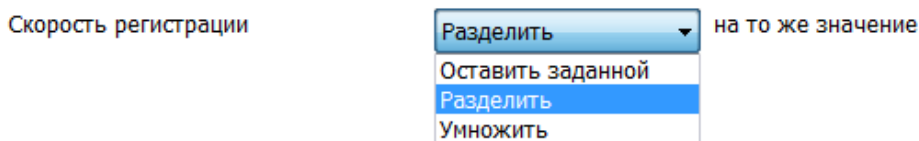
Максимум развертки

Минимум развертки

Скорость развертки

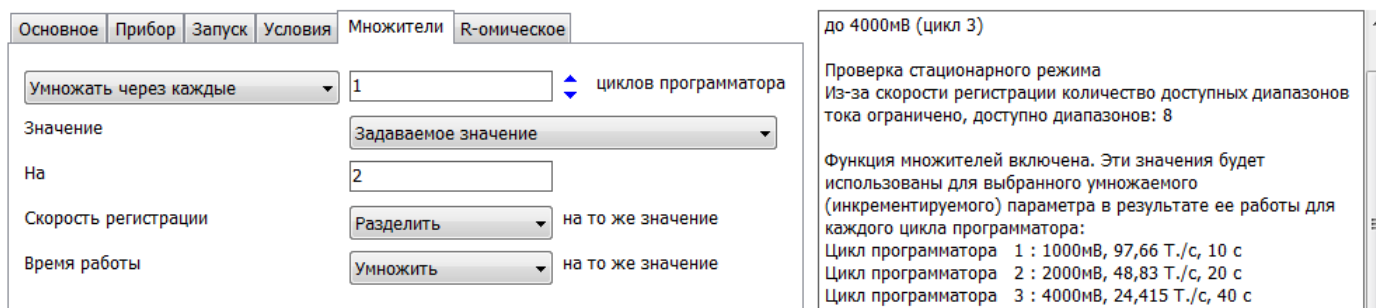
Пример списка для выбора изменяемого параметра (режим ЦВА).

Во многих случаях, при изменении одного из параметров эксперимента (например, скорости развертки потенциала), целесообразно поменять и скорость регистрации данных. Чем выше скорость развертки, тем выше должна быть и скорость регистрации, поэтому ее нужно умножить на то же значение, что и скорость. То же самое и с зарядным током аккумулятора. Для этого служит следующая опция:



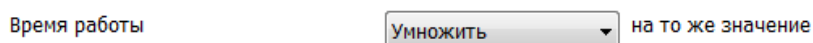
Управление скоростью регистрации данных при изменении параметров эксперимента с помощью функции множителей.

Поле сообщений справа от настроек редактора простых режимов, выведет информацию о том, какое значение будет у изменяемого параметра в каждом цикле программатора (если количество шагов программатора задано корректно):



Пример настроек функции множителей для программатора из 3 циклов.

В стационарных режимах работы, для расширения функционала, также появляется возможность умножить или разделить на множитель длительность работы:



. Эта опция появляется, когда включено умножение или деление скорости регистрации данных. В меню сообщений справа будет выведен прогноз для каждого цикла по задаваемому (умножаемому) значению, а также скорости регистрации данных и длительности работы шага.

При умножении скорости развертки режима ЦВА, рекомендуется использовать холостые циклы из настроек ЦВА, так как между ними отсутствует время переключения. Между же циклами программатора оно не нулевое, что приведет к короткой остановке развертки между циклами программатора и проседанию тока в начале каждого нового цикла программатора, если в нем используется развертка в нескольких циклах. Холостой цикл используется как черновой для подбора диапазона тока, а также для плавного перехода динамически установившегося вида ЦВА к последующему рабочему (сохраняемому) циклу.

Функция множителей неприменима ко всем импульсным режимам.

6.5. Вкладка R-Омическое, редактора простых режимов

Основное Прибор Запуск Условия Множители R-омическое

Измерить R омическое: Импедансом

Измерить Re на фиксированной частоте

Рабочая частота 1 КГц Автоматически

Амплитуда 5 мВ

Измерение R омического с помощью импеданса наиболее простое. Сканирование в диапазоне частот дает более точный результат. Выберите автоматические настройки, если не уверены какие лучше. Импеданс будет измерен при том же рабочем потенциале или токе, при котором выполнялось (бы) установление. Стационарность в предлагаемом диапазоне частот не важна. Полученные данные

Использовать измеренное R для IR-компенсации на 80%

Вкладка R-омическое, редактора простых режимов.

Вкладка измерения омического сопротивления позволяет перед установлением (если оно используется, или непосредственно перед основной работой редактируемого шага или простого режима) измерить омическое сопротивление либо импульсным методом, либо методом электрохимического импеданса. В любом случае, измерение, если оно включено, происходит сразу после включения ячейки редактируемого режима.

При использовании импульсного метода, вкладка измерения омического сопротивления выглядит следующим образом:

Основное Прибор Запуск Условия Множители R-омическое

Измерить R омическое: Импульсно

Скорость регистрации данных 4 мкс

Количество точек данных 20 Автоматически

Номер точки для расчета 11 Автоматически

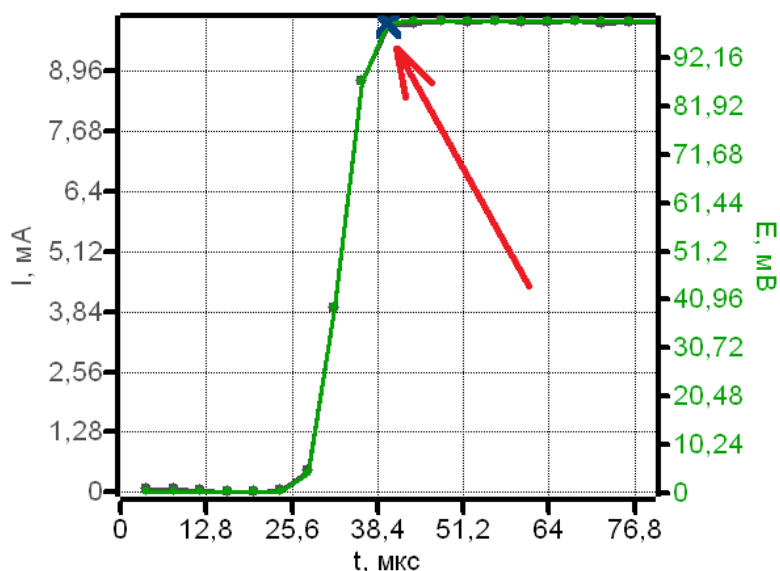
Вкладка R-омическое при использовании импульсного режима.

Обязательным условием для использования импульсного режима, является регистрация потенциала разомкнутой цепи перед работой. В момент включения ячейки, в гальваностатическом режиме, прибор сначала прикладывает нулевой ток, а затем рабочий (заданный пользователем), который должен отличаться от нулевого. Этот перепад тока (от нулевого к рабочему) создает скачек потенциала. Если при этом вести регистрацию на высокой скорости, то весь зарегистрированный

перепад потенциала будет только за счет падения напряжения на омическом сопротивлении. Из этих скачков тока и потенциала прибор и рассчитывает R-омическое.

В потенциостатическом режиме, после регистрации потенциала РЦ, прибор сначала задает потенциал равный потенциалу РЦ, а затем рабочий (пользовательский) потенциал, который должен опять же отличаться от потенциала РЦ. Теперь скачек потенциала создает перепад тока и далее все рассчитывается так же, как и в гальваностатическом режиме. Важно, чтобы в используемом рабочем режиме первый обрабатываемый (заданный пользователем) рабочий ток или потенциал выводил исследуемый объект из равновесия.

При использовании импульсного режима, пользователь задает скорость регистрации данных . Рекомендуется выбирать самый скоростной режим. Также можно задать количество регистрируемых на этой скорости точек данных. Эти данные будут добавлены в начало основного режима, и пользователь может использовать их по своему усмотрению. Важнейшим параметром, определяющим точность измерения, является номер точки для расчета. Ее нужно выбирать с помощью диаграммы, отсчитав ее номер визуально. Эта точка должна находиться не на первом плато нулевого тока, а на втором плато рабочего тока:



Внешний вид диаграммы при измерении омического сопротивления импульсным методом. Стрелкой показана точка, которую можно использовать для расчета (в данном случае это 10-я точка, но при изменении диапазона тока и рабочих токов и потенциалов, это может оказаться 11-я или 12-я точка. Если омическое сопротивление измерено неточно, показания скачут, то стоит посмотреть диаграмму с ручными пределами горизонтальной оси и подобрать номер точки, даже при автоматических настройках).


Как видно, импульсное измерение требует точной настройки и некоторого понимания процесса измерения, что бывает несколько затруднительно даже для опытного специалиста (к сожалению, в этом и заключается суть исследовательских импульсных методов). Поэтому рекомендуется использовать метод импеданса, в нем нет настолько критичных настроек:

Вкладка R-омическое при использовании метода импеданса.

Измерение с помощью импеданса проще всего выполнить на фиксированной частоте. При этом нужно будет лишь задать эту частоту и амплитуду переменного сигнала. Прибор рассчитает действительную составляющую импеданса и будет считать ее равной омическому сопротивлению.

Более точный способ, это выполнить развертку частоты от высоких частот до более низких. Прибор просканирует получившийся массив данных и найдет в нем значение действительной части, для которого равна нулю или минимальна мнимая часть, то есть, пересечение с действительной осью. В обоих случаях, спектр импеданса будет доступен пользователю в зарегистрированных данных, а поиск омического сопротивления во всех случаях (импульсно и импедансом) ведется автоматически и выводится пользователю в специальной колонке (если она включена) отчетной таблицы.

Измеренное омическое сопротивление можно использовать для автоматической его компенсации, если прибор имеет такую функцию, и она включена для редактируемого шага (или последующих шагов программатора). Для этого нужно включить опцию Использовать измеренное R для IR-компенсации на . Если она включена, и включена IR-компенсация во вкладке настроек прибора, то прибор будет использовать не заданное (во вкладке Прибор) значение R-омического, а будет использовать измеренное значение (в случае его успешного измерения). Пользователь, помимо прочего, задает в какой степени сопротивление можно компенсировать. 100% задать невозможно, тк это может привести к перекомпенсации и потере стабильности потенциостата (максимально можно задать 98%, но этого обычно достаточно).

При работе в гальваностатическом режиме, пользователю бывает сложно выбрать амплитуду переменного сигнала для измерения импеданса. В качестве небольшой помощи, прибор оценивает величину прогнозируемой амплитуды по потенциалу, беря в расчет заданную амплитуду по току и используемый диапазон тока (каждый диапазон тока годится для работы только в определенном интервале импедансов, а в гальваностате они не бывают автоматическими, только ручные, то есть заранее заданы под импеданс исследуемого объекта). Прогнозируемая амплитуда по потенциалу выводится справа от настройки амплитуды мА  ~3,749 мВ.

6.6. Стационарный режим работы

Основное | Прибор | Запуск | Условия | Множители | R-омическое

Задаваемое значение мВ

Время работы с

Использовать компрессию данных

P/R Вт

Дополнительные условия завершения для стационарных режимов

%(Q)

станет < % от модуля заряда аналогичного шага на цикле

%(I)

станет < % от модуля тока, измеренного в момент времени (с)

Основные параметры стационарного режима работы.

Стационарный режим работы является наиболее простым. В нем имеется всего два базовых параметра – задаваемое значение (потенциала или тока, выбирается во вкладке Прибор) и длительность работы. Постоянный потенциал можно задать абсолютно, относительно потенциала разомкнутой цепи (E PЦ) или относительно последнего измеренного (обычно в предыдущем шаге или цикле программатора). В качестве параметра, изменяемого с циклами программатора, во вкладке Множители доступны следующие:

- Не менять ни одно значение
- Не менять ни одно значение
- Условие завершения по потенциалу 1
- Условие завершения по току 1
- Условие завершения по заряду 1
- Условие завершения по потенциалу 2
- Условие завершения по току 2
- Условие завершения по заряду 2
- Задаваемое значение
- Время работы

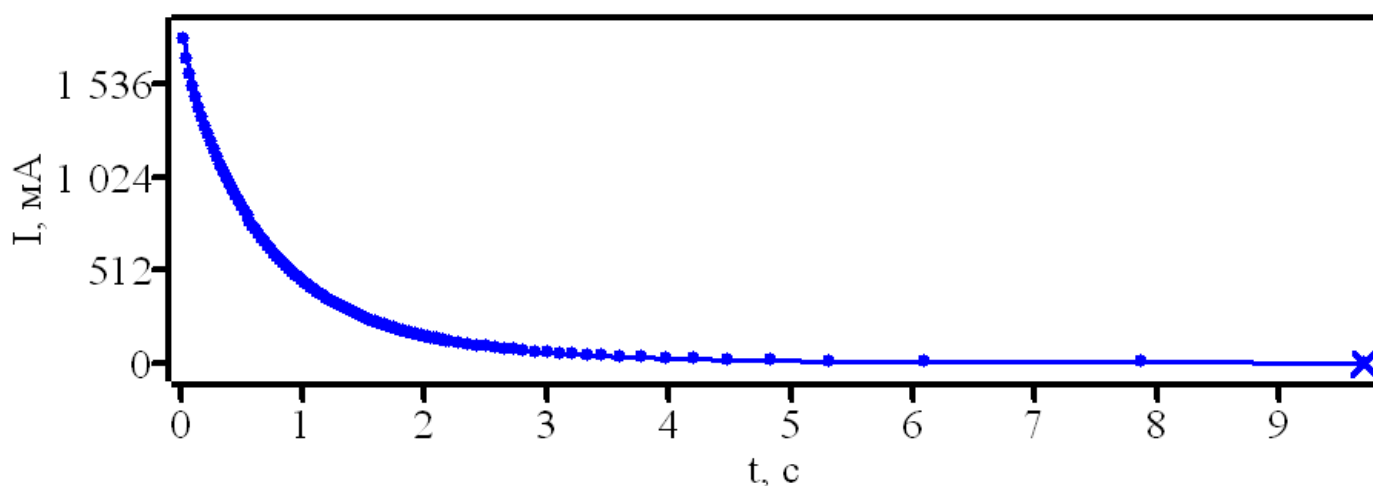
Список параметров, которые можно изменять с циклами программатора для стационарного режима.

Стационарный метод это единственный, в котором можно выбрать не только потенциостатический или гальваностатический режим работы прибора, но режим вольтметра, то есть регистрацию (запись во времени) потенциала разомкнутой цепи.

Автоматическая скорость регистрации в режиме «Нормально», рассчитывается по длительности эксперимента так, чтобы получилось 1000 точек данных. В режиме быстрого действия в 4 раза больше, в медленном – в 4 раза меньше.

Начиная с версии прошивки приборов 2.EX2 имеется возможность использовать так называемую компрессию данных. Это возможно только в стационарных режимах работы, так как остальные техники применяют динамически меняющиеся сигналы, а в стационарных режимах иногда возможен длительный выход на постоянные сигналы тока и потенциала и становится целесообразным прореживание сохраняемых точек данных. В этом случае оправдано сохранять точки данных не так часто, как в моменты более их динамичного поведения. Для этого можно включить опцию **Использовать компрессию данных**. Она отслеживает изменчивость сигналов тока и потенциала, и в случае, если каждый из них не меняется более чем на 0.025% от максимума используемого диапазона тока и потенциала в течение некоторого времени, то данные за это время будут усредняться и сохраняться в виде одной точки данных, но со своим индивидуальным приращением (значением) по времени. Усреднение происходит по точкам данных, оцифрованных на заданной пользователем скорости регистрации данных. Максимальная степень усреднения составляет 250 раз. То есть компрессия может повысить эффективность хранения данных в 250 раз в случае медленно меняющихся сигналов. Заранее предсказать изменчивость сигналов не всегда возможно, также для успешной компрессии должна быть обеспечена низкая шумность и отсутствие наводок. Компрессия, например, актуальна в режимах работы с химическими источниками тока, при длительном циклировании аккумуляторов или снятии нагрузочных кривых электрохимических генераторов (топливных элементов или электролизеров).

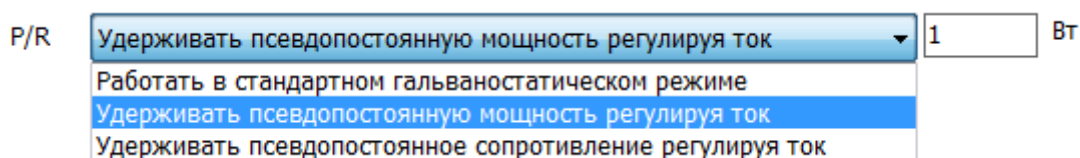
Компрессия позволяет сэкономить памяти на 50% и более. То есть можно запускать работу циклического программатора с превышением используемой памяти до 200% или даже более, сообразно опыту экспериментатора. Компрессию не стоит использовать, если полученные данные тока или потенциала будут подвергаться математической обработке, например, фурье-анализу.



Пример работы компрессии. Эксперимент при постоянном потенциале, в ходе которого ток постепенно снижается и асимптотически приближается к нулю. По мере снижения динамики изменения тока, происходит урежение регистрации данных. В данном примере сэкономлено 71% памяти прибора. Разрешение же по времени не было снижено, так как плавающая длительность для каждой точки в режиме компрессии определена с точностью до высокочастотной (изначальной,

стартовой) скорости регистрации (без компрессии), заданной пользователем в настройках прибора. То есть разрешение по времени при расчете величины протекшего заряда сохраняется высоким.

Начиная с прошивки версии 2.EX2, в гальваностатическом режиме имеется возможность удержания псевдо-постоянной мощности или сопротивления нагрузки. Эта опция становится активной только когда включен гальваностатический режим. В потенциостатическом режиме и в режиме вольтметра такой регулировки нет (они включаются во вкладке «Прибор» редактора единичных режимов).

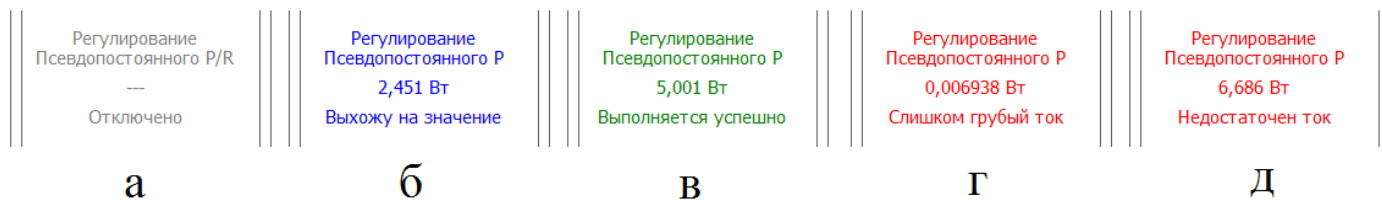


Настройки параметра удержания псевдопостоянной мощности или тока.

При включении этой опции потенциостат начинает работу как в обычном гальваностатическом режиме, включив в качестве начального приближения, заданный пользователем постоянный ток. Далее прибор будет изменять значение обрабатываемого тока (регулировать его) так, чтобы приближаться к величине мощности или сопротивления, заданного пользователем в рассматриваемых настройках Вт или Ом.

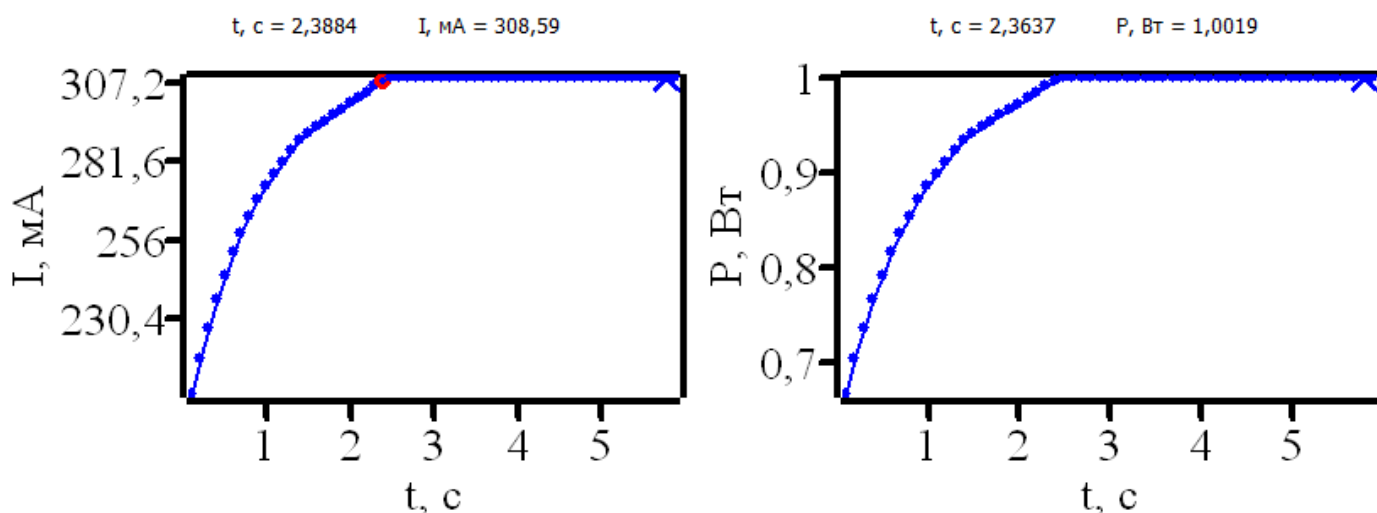
Значение тока или сопротивления задаются по абсолютной величине (по модулю). Режим нагрузки (разряда исследуемого источника тока) или активной поляризации (заряда подключенного источника тока или электролиза) будет определяться тем, какой подключен объект (в какой например, полярности) и, что самое важное, какой введен знак у стартового значения тока, заданного пользователем (прибор не будет менять знак тока при его подгонке). За несколько секунд прибор приведет значение обрабатываемого тока к такому, чтобы достичь заданного пользователем значения сопротивления или мощности, если обрабатываемый ток находится в рамках выбранного пользователем диапазона тока (не слишком велик, и не слишком мал для него). Поэтому выберите прежде всего рабочий диапазон тока во вкладке «Прибор» редактора единичных режимов.

Состояние отработки тока, будет выводиться в главной в вкладке «Прибор» программного обеспечения SmartSoft вместе со значением результирующей мощности или сопротивления (мощность и сопротивление вычисляются как формальное перемножение или деление потенциала на ток соответственно):



Панель отображения состояния прибора для процесса регулировки мощности или сопротивления (расположена в центре основной вкладки «Прибор» программного обеспечения SmartSoft):

- Опция удержания мощности отключена.
- Работа только что была запущена и прибор еще не вышел на заданную мощность.
- Прибор вышел на заданную мощность и выполняет ее удержание (задано 5 Вт).
- Выбранный диапазон тока слишком груб, чтобы поддерживать такую низкую мощность (в примере задан 1 мВт). Прибор формально поддерживает ее, но грубо. Если выбрать в следующий раз более тонкий диапазон тока, то он сможет делать это точнее, как в примере «в».
- Прибору не хватает тока, чтобы достичь заданной мощности и он держит максимально возможный ток (задано 10 Вт). Если напряжение на подключенном объекте вырастет, то возможно требуемая мощность будет достигнута.



Пример выхода на заданную мощность 1 Вт и удержания ее на псевдопостоянном уровне в режиме заряда литий-ионного аккумулятора в прямой полярности начиная с 2.38 секунды. Стартовый ток 200 мА. Далее, по мере заряда аккумулятора и роста на нем напряжения, прибор будет соответственно снижать ток.

Несколько советов и особенностей режима удержания псевдопостоянных мощности или тока:

- Чтобы прибор вышел на заданную мощность или сопротивление как можно быстрее, стартовое значение тока должно быть введено максимально осмысленно, как и выбран диапазон тока.
- Значение тока не должно быть чрезмерно мало по абсолютной величине для заданного диапазона тока, чтобы в процессе подгонки, случайно не изменилась его полярность, если задана низкая мощность или высокое сопротивление (требующие низких токов).

- В режиме удержания постоянной мощности, если выполняется режим нагрузки для тестируемого источника тока, то заданная (удерживаемая) мощность трактуется как мощность, отбираемая прибором с него.
- В режиме удержания постоянной мощности при заряде источника тока, заданная (удерживаемая) мощность трактуется как мощность, передаваемая в источник тока.
- В режиме удержания постоянного сопротивления при разряде источника тока, фактически источник тока работает на всеподостоянное сопротивление выбранного (заданного, удерживаемого) номинала.
- В режиме удержания постоянного сопротивления при заряде источника тока, физического смысла рассматриваемому сопротивлению нет, оно поддерживается прибором формально по закону Ома.
- Нужно понимать, что точность поддержания псевдопостоянных мощности и сопротивления ограничена (так как выполняется программно), по сравнению с тем, на сколько точно поддерживается приборами SmartStat постоянный ток или потенциал в соответствующих аппаратных режимах. Однако, приведенные выше примеры демонстрируют достаточно высокие возможности приборов и в этих программно-управляемых режимах (5 Вт $\pm 0.02\%$ при относительно постоянном характере поведения тестируемого объекта).
- Чем дальше измеренное значение мощности или сопротивления находится от заданного пользователем, тем более грубые приращения тока будет использовать прибор для его достижения, при этом индикатор отображения будет синего цвета. При удержании не хуже 5%, индикатор станет зеленого цвета и будет использовано минимальное приращение, для обеспечения максимальной плавности и точности регулировки.

Начиная с прошивки версии 2.EX2, стационарные режимы имеют в дополнение к базовым условиям завершения эксперимента, уникальные дополнительные. Они расположены в основной вкладке настроек стационарного режима (базовые находятся во вкладке «Условия») и выглядят следующим образом:

%(Q)	Закончить всю работу, если модуль заряда в конце шага		
станет	<	50	% от модуля заряда аналогичного шага на цикле
			2

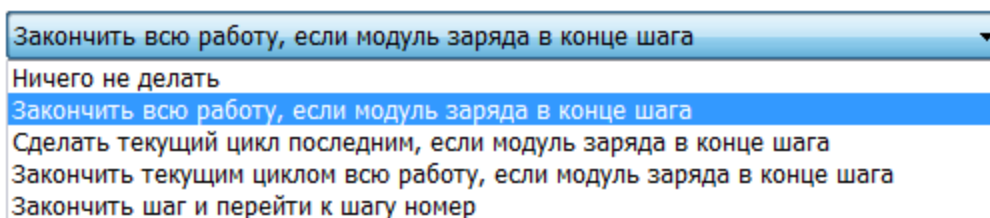
а если в качестве действия выполняется переход к определенному шагу (номер 10 в этом примере), то настройки выглядят следующим образом:

%(Q)	Закончить шаг и перейти к шагу номер		
		10	если модуль заряда за шаг
станет	<	50	% от модуля заряда аналогичного шага на цикле
			2

Настройки условия завершения эксперимента в стационарном режиме по потере емкости.

Первое из этих условий, это так называемое завершение эксперимента при потере емкости на заданную величину (это наиболее частое применение этого условия, но возможны и другие

применения-задачи, оценивающие изменения заряда от цикла к циклу в одном и том же шаге программатора). Этот критерий актуален только при работе в режиме программатора (или когда программатор входит в состав работы планировщика). В нем пользователь выбирает, на каком цикле, в рассматриваемом шаге произвести контрольное измерение величины прошедшего заряда (заряд будет измерен сразу, как только рассматриваемый-редактируемый шаг в этом контрольном цикле будет завершен, чтобы иметь полный заряд, прошедший в этом шаге). Номер цикла задается параметром **на цикле** . Далее прибор вычислит заданный пользователем процент от этого заряда используя параметр % от модуля заряда аналогичного шага на цикле . При выполнении таких же шагов (с тем же номером) в ходе последующих циклов, прибор сразу по их завершению будет сравнивать полученный в них заряд с вычисленной контрольной величиной. Исходя из этого будет приниматься решение о продолжении дальнейшей работы или нет в соответствии с определенным пользователем действием из списка:



Список действий, который можно выполнить при срабатывании условия (критерия) завершения по проценту от заряда.

Процент от величины контрольного заряда вычисляется в пределах 0.1%-3000%. То есть заряд, при котором будет остановлен эксперимент на каком-то из последующих циклов, может быть, например 30 раз больше контрольного, или в 1000 раз меньше него.

Наиболее частое применение рассматриваемого условия завершения по проценту заряда, это остановка циклирования аккумулятора, при потере им емкости более определенного процента. Например, на гальваностатическом шаге разряда, цикл номер 2 может быть выбран в качестве контрольного (а первый цикл выступает в роли формировочного, или нормализующего после предыдущего использования). Задается величина процента равная 80%. В этом случае, прибор продолжит циклирование аккумулятора после первого цикла, и как только в каком-то из последующих циклов, для стадии аналогичного этапа (шага) разряда, после его завершения, будет получен заряд, меньший 80% от ранее определенного контрольного, эксперимент будет закончен, если был выбран вариант действия «Закончить всю работу». Таким образом, исследуемый аккумулятор потеряет за эксперимент 20% емкости.

Прибор сравнивает заряды по абсолютной величине отбрасывая знак, чтобы не было сложностей при работе с отрицательными токами и зарядами, отслеживая изменения именно по абсолютной величине (по модулю). Для работы со знаковыми токами и зарядами применяются общие критерии завершения во вкладке «Условия».

В программаторе может быть использовано несколько шагов с подобными критериями завершения по проценту заряда, например для стадии заряда и стадии разряда. В этом случае, в каждом шаге будет использована своя индивидуальная величина контрольного заряда и ее процент, которая никак не скажется на работе критериев завершения других шагов.

Следующее специализированное условие завершения эксперимента в стационарных режимах, это критерий снижения или роста тока до заданного процента от величины ранее измеренного тока. Наиболее часто его используют при циклическом заряде-разряде аккумуляторов, в потенциостатической стадии дозаряда. Или его можно использовать как некоторый критерий для достижения стационарности потенциостатического режима. Его настройки выглядят следующим образом:

%(I)
станет < % от модуля тока, измеренного в момент времени (с)

а если в качестве действия выполняется переход к определенному шагу (номер 2 в этом примере), то настройки выглядят следующим образом:

%(I) если модуль тока
станет < % от модуля тока, измеренного в момент времени (с)

Настройки завершения стационарного режима работы по изменению тока в ходе его выполнения.

Рассматриваемый критерий работает следующим образом. В заданный пользователем момент времени прибор запоминает значение тока. Сразу после этого он вычисляет определенный пользователем процент от его величины % от модуля тока, измеренного в момент времени (с) . Эта величина тока будет далее использована как критерий завершения текущего шага работы. Далее работа шага продолжается, но до тех пор, пока не сработает выбранный пользователем критерий больше или меньше. После этого можно выполнить одно из следующих действий:

-
-
-
-
-
-
-

Список действий, которые можно выполнить при срабатывании условия (критерия) завершения по проценту от тока.

Рассмотрим пример циклического заряда-разряда аккумулятора. Предположим, что за 1й стадией гальваностатического заряда постоянным током следует потенциостатическая стадия (номер

2) дозаряда при постоянном напряжении. Можно использовать рассматриваемый критерий завершения для такой второй потенциостатической стадии. Положим, что на первом шаге производился заряд постоянным током 1 А. Если во 2м потенциостатическом шаге потенциал был задан как 0 относительно последнего, то стартовый ток 2го шага будет очень близок по величине именно к току 1А. Если выполнить его контрольное измерение в момент времени 0 секунд (то есть сразу) во 2м шаге, то, например 10% от него составят 0.1А. По мере удержания постоянного напряжения 2го шага, ток будет постепенно снижаться, и когда он достигнет величины 0.1А, работа шага будет завершена (или выполнено иное определенно пользователем действие).

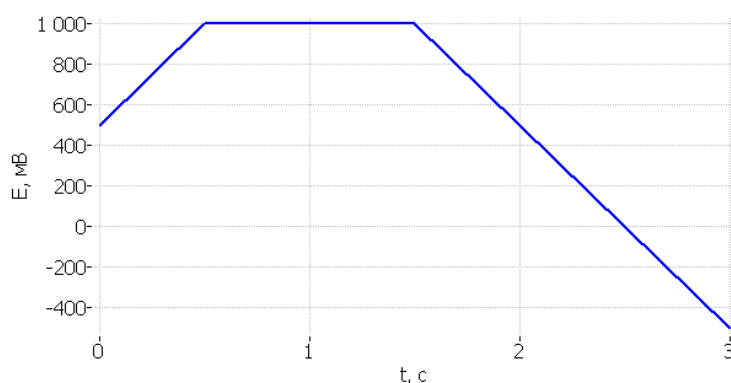
Прибор сравнивает токи по абсолютной величине отбрасывая знак, чтобы не было сложностей при работе с отрицательными токами, отслеживая изменения именно по абсолютной величине (по модулю). Для работы со знаковыми токами и зарядами применяются общие критерии завершения во вкладке «Условия».

6.7. Линейная развертка

Основное	Прибор	Запуск	Условия	Множители	R-омическое
<input type="checkbox"/> Выполнить только однократный проход от стартового значения к конечному					
Стартовое значение	0	мВ	Абсолютно		
Конечное значение	500	мВ	Абсолютно		
Максимум	1000	мВ	Абсолютно		
Минимум	-1000	мВ	Абсолютно		
Плато в максимуме	0	с	>0<		
Плато в минимуме	0	с	>0<		
Скорость развертки	1	мВ/с	↗ ↘		
Пройти конечное значение	1	Раз	↕		

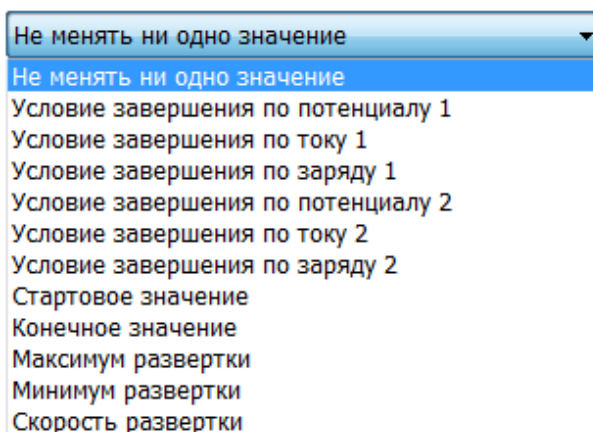
Основные параметры линейной развертки.

В этом режиме, линейная развертка потенциала (или тока) начинается от стартового значения. В положительную или отрицательную сторону она пойдет – определяется знаком скорости развертки. Развертка ограничена пределами сверху и снизу – максимумом и минимумом. В каждом из них, при необходимости, можно выждать паузу (приостановить развертку) заданной длительности. Заканчивается развертка всегда в конечном значении (в общем случае не равном стартовому значению). Конечная форма задаваемого сигнала определяется тем, сколько раз необходимо пройти конечное значение. Рекомендуем поэкспериментировать в программе, диаграмма прогноза наглядно визуализирует созданный вами рабочий режим. Это может быть одиночный проход от одного значения потенциала к другому, или более сложный пилообразный сигнал с нецелым числом периодов. Все потенциалы можно задавать (каждый независимо) как абсолютно, так и относительно ЕРЦ, или относительно последнего зарегистрированного потенциала в предыдущем шаге или цикле. Ниже показан пример диаграммы прогноза для введенных на рисунке выше параметров:





Пример формы сигнала в режиме линейной развертки потенциала с задержкой в верхнем пределе.

В качестве параметра, изменяемого с циклами программатора, во вкладке Множители, можно выбрать один из следующих:



Список параметров, один из которых можно изменять с циклами программатора для режима линейной развертки.

Автоматическая скорость регистрации данных рассчитывается в режиме Нормально так, чтобы точка данных шла на каждые 4 мВ развертки, в быстром режиме на каждые 1 мВ, в медленном режиме на каждые 16 мВ.

Чаще всего линейную развертку используют для однократного прохода от одного значения потенциала или тока, к другому. Для облегчения ввода параметров в таком, относительно простом режиме, существует опция Выполнить только однократный проход от стартового значения к конечному. Если ее включить, то все параметры, не используемые в таком режиме работы, будут отключены или настроены программой SmartSoft автоматически, чтобы не перегружать пользователя лишней информацией. Используйте знак минус, чтобы задать направление развертки вниз. Или воспользуйтесь кнопками   для быстрой смены знака и направления развертки.

6.8. Циклическая развертка

Основное	Прибор	Запуск	Условия	Множители	R-омическое
Стартовое значение	<input type="text" value="0"/>	мВ	<input type="text" value="Абсолютно"/>		
Максимум	<input type="text" value="2000"/>	мВ	<input type="text" value="Абсолютно"/>		
Минимум	<input type="text" value="-2000"/>	мВ	<input type="text" value="Абсолютно"/>		
Плато в максимуме	<input type="text" value="0"/>	с	<input type="text" value=">0<"/>		
Плато в минимуме	<input type="text" value="0"/>	с	<input type="text" value=">0<"/>		
Скорость развертки	<input type="text" value="110"/>	мВ/с	<input type="text" value="↗ ↘"/>		
Количество циклов	<input type="text" value="2"/>	▲▼			
Количество холостых циклов	<input type="text" value="0"/>	▲▼			
Сохранять первый цикл из	<input type="text" value="1"/>	▲▼			

Основные параметры циклической развертки.

В режиме циклической развертки (ЦВА), линейная развертка потенциала (или тока) начинается также от стартового значения, и на нем же всегда и заканчивается. Направление развертки определяется знаком скорости развертки. Разворачиваемый сигнал ограничен значениями максимума и минимума. При достижении любого из них, можно при необходимости приостановить развертку и выдержать паузу заданной длительности. Количество периодов развертки всегда целое. Все потенциалы можно задавать как абсолютно, так и относительно ЕРЦ или последнего зарегистрированного потенциала в предыдущем шаге или цикле работы программатора (но не в предыдущем цикле этой же развертки).

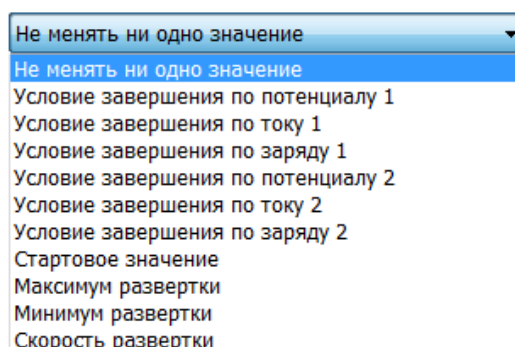
В режиме ЦВА используется от одного до 100 программных циклов, каждый из которых соответствует одному физически выполненному циклу развертки. При переходе от одного цикла к другому развертка не прерывается и не останавливается.

Ввиду того, что количество программных циклов ограничено цифрой 100, для выполнения большего количества циклов (до одного миллиона), используется параметр **Сохранять первый цикл из** ▲▼, определяющий, сколько физически выполненных циклов будет пропущено при сохранении данных. Например, если его значение равно 5, то будет сохранен 1-й цикл, затем следуют 4 не сохраняемых цикла (со 2-го по 5-й), 6-й цикл сохранен (7-10 не сохранены) и так далее. Если всего циклов будет 11, то 11-й последний цикл тоже будет сохранен.

Помимо этого, что бывает удобно в программаторе (в нем в режиме ЦВА может быть сохранен только один цикл ЦВА в одном шаге программатора) можно использовать холостые циклы **Количество холостых циклов** ▲▼. Они выполняются физически перед основными циклами, но не сохраняются. Их можно использовать для достижения установившегося вида вольтамперной

кривой. Общее количество физически выполненных циклов, равно сумме параметров
Количество холостых циклов и Количество циклов . Физически
они все выполняются идентично.

В качестве параметра, изменяемого с циклами программатора, во вкладке Множители, можно
выбрать один из следующих:



Список параметров, один из которых можно изменять с циклами программатора для режима
циклической развертки.

Автоматическая скорость регистрации данных рассчитывается в режиме Нормально так,
чтобы точка данных шла на каждые 4 мВ развертки, в быстром режиме на каждые 1 мВ, в
медленном режиме на каждые 16 мВ.

6.9. Произвольный хроно-режим

Время, мкс	Потенциал, мВ
10000	1000
10000	-1000
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0

Основные параметры произвольного хроно-режима.

В этом режиме прибор последовательно обрабатывает заданные пользователем значения (ступени) потенциала или тока (выбирается что-то одно для всего режима), каждое со своей длительностью. Минимальная длительность составляет 10 мс, максимальная 1000 с. Всего может быть выполнено от 1 до 15 ступеней. В потенциостатическом режиме все потенциалы можно задавать либо абсолютно, либо относительно ЕРЦ, либо относительно последнего зарегистрированного потенциала в предыдущем шаге или цикле работы программатора.

Фактически, по своему смыслу, произвольный хроно-режим является небыстрым импульсным режимом. Для прибора же он является последним из четырех потоковых режимов, описанных в этом и предыдущих разделах (в потоковых режимах оцифровка данных идет потоком в реальном времени, в импульсных же режимах и импедансе она идет пакетами).

В качестве параметра, изменяемого с циклами программатора, во вкладке Множители, можно выбрать один из следующих:

- Не менять ни одно значение
- Условие завершения по потенциалу 1
- Условие завершения по току 1
- Условие завершения по заряду 1
- Условие завершения по потенциалу 2
- Условие завершения по току 2
- Условие завершения по заряду 2
- Задаваемые значения
- Длительности

Список параметров, один из которых можно изменять с циклами программатора для произвольного хроно-режима.

Если для вашего эксперимента требуется отдельное выделение и регистрация значений тока или потенциала в конце обработки какого-либо значения (ступени), то рекомендуем воспользоваться

профессиональным аналитическим импульсным режимом. В нем эти параметры можно настроить и выполнить выделение таких данных. Также в нем прибор может использовать в 16 раз более высокие скорости регистрации данных (до 32 кГц), однако количество ступеней (отрабатываемых значений) ограничено пятью. Также он регистрирует задаваемый сигнал (ток в гальваностате и потенциала в потенциостате) не полностью, а ограничено (как раз в конце каждой ступени). Этот режим работы описан далее.

Автоматическая скорость регистрации в режиме Нормально, рассчитывается по длительности эксперимента (всех ступеней вместе) так, чтобы получилось 1000 точек данных. В режиме быстрогодействия в 4 раза больше, в медленном – в 4 раза меньше.

6.10. Режим импеданса (развертка по частоте)

Основное | Прибор | Запуск | Условия | Множители | R-омическое

Постояннотоковое значение: -100 мВ | Абсолютно

Стартовая частота: 50 | КГц

Конечная частота: 10 | Гц

Количество частот: 50

Амплитуда: 10 мВ

Точность: Быстро

Выполнить обратный ход по частоте

Зафиксировать диапазон тока-сопротивления

Расчитать амплитуду гармоник со второй по: 4

Основные параметры режима измерения электрохимического импеданса при развертке частоты.

В методе электрохимического импеданса, прибор на стационарный потенциал или ток накладывает синусоидальное возмущение заданной частоты и амплитуды. После этого он регистрирует сигналы тока и потенциала на подключенной ячейке с помощью штатного АЦП или высокочастотного модуля FRA (в последнем случае верхний частотный предел оказывается выше, но нет возможности работать с более, чем 4-мя электродами, то есть Aux входы при использовании FRA отключены).

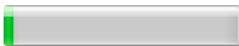
Из полученных данных тока и потенциала выделяется переменноточковая составляющая, а из нее с помощью Фурье-анализа рассчитывается комплексный импеданс исследуемого образца, состоящий из мнимой Im и действительной Re частей для каждой частоты. Для Aux электродов в многоэлектродной ячейке, также рассчитываются комплексные импедансы для Aux1 и Aux2. Все расчеты и обработка сигналов происходят незаметно для пользователя. После этого задается следующая рабочая частота. Фурье анализ выполняется в самом приборе, исходные данные синусоид тока и потенциала, используются только в нем (на компьютер, целиком они не выводятся)

Развертка частоты начинается со значения стартовой частоты. Стартовая частота 1 КГц, а заканчивается развертка конечной частотой 0,01 Гц. При этом пользователь задает количество частот (от 2 до одного миллиона). Настоятельно рекомендуется начинать развертку с высоких частот. В процессе работы, прибор подбирает диапазоны тока, отслеживает перегрузки и тп.


Высокие частоты регистрируются быстрее низких, поэтому на них у прибора раньше появляется информация об импедансе и токах на исследуемом образце, и он раньше и быстрее

сможет подобрать, при необходимости, наиболее подходящий диапазон тока, а также предотвратить развитие аварийных ситуаций. Также, измерение импеданса на частотах выше килогерца, занимает доли секунд, то есть, пользователь увидит спектр импеданса гораздо быстрее и, в случае неправильного подключения сможет быстрее принять решение о продолжении или остановке эксперимента. Помимо этого, электроды сильнее поляризуется на низких частотах, чем на высоких, что при недостаточно низкой амплитуде может вызвать в нем изменения и исказить среднечастотную часть спектра импеданса.

Одним из параметров является амплитуда переменного сигнала

Амплитуда мВ . Чем она выше, тем больше соотношение сигнал-шум (тем более гладкий получается спектр), но сильнее поляризация электродов, приводящая к необратимым искажениям спектра импеданса.

При работе в гальваностатическом режиме, пользователю бывает сложно выбрать амплитуду переменного сигнала. В качестве небольшой помощи, программа оценивает величину прогнозируемой амплитуды по потенциалу, беря в расчет амплитуду по току и используемый диапазон тока (каждый диапазон тока годится для работы только в определенном интервале импедансов, а в гальваностате они не бывают автоматическими, только ручные, то есть заранее заданы под импеданс исследуемого объекта). Прогнозируемая оценка амплитуды по потенциалу выводится справа от настройки амплитуды

Амплитуда мА  ~3,749 мВ

В процессе регистрации спектра импеданса, прибор проверяет текущее состояние ячейки по постоянноточковым параметрам – току и потенциалу. При возникновении перегрузки по току, он независимо от пользовательских настроек, переключится на более грубый диапазон. Также, он рассчитывает значение модуля импеданса, и исходя из него, также может переключить диапазон тока на более грубый. Переключение же на более тонкий диапазон допускается только если пользователем включен автоматический диапазон тока во вкладке настроек прибора. Для такого переключения необходимо несколько условий: чтобы был включен автоматический диапазон тока, чтобы постоянный ток укладывался в рамки нового диапазона, чтобы модуль измеренного импеданса также был подходящим для нового диапазона. Помимо этого, каждый диапазон тока имеет свой частотный предел сверху. Это становится заметно на низких частотах для наноамперных диапазонов. Проще говоря, текущая частота также является необходимым критерием (должна быть достаточно низкой) для перехода на более тонкий диапазон тока.

Для максимально точной регистрации спектра импеданса, настоятельно рекомендуется включение автоматического диапазона тока, так как при этом максимально задействуются интеллектуальные функции прибора, он полностью берет на себя отслеживание состояния ячейки и облегчает работу пользователя. Однако, рекомендуется максимально точно выбирать стартовый диапазон тока во вкладке настроек прибора. Для удобства выбора диапазона, в настройках импеданса, в каждом из них прописано (его центральное) значение наиболее точно измеряемого на этом диапазоне модуля импеданса.

Важнейшим условием, для точной регистрации спектра импеданса, является стационарность. То есть, на исследуемом образце должно быть достигнуто стационарное значение тока или потенциала (режим потенциостат или гальваностат соответственно). Для этого можно использовать предварительный стационарный шаг (в программаторе) и не отключать после него ячейку, но удобнее выставить значение длительности установления на необходимый для достижения стационарности временной период.

В режиме измерения импеданса не доступна IR-компенсация, нет условия по завершению эксперимента (при необходимости можно воспользоваться пользовательской защитой), невозможно автоматически измерить омическое сопротивление (соответствующая вкладка будет пуста). В функции множителей доступен только один параметр – задаваемое значение по постоянному току.

Последним параметром в режиме измерения спектра импеданса является возможность выполнить обратный ход по частоте Выполнить обратный ход по частоте . Если эта опция включена, то по завершению основного прохода от стартовой частоты к конечной, будет дополнительно в том же шаге и без пауз, немедленно выполнен дополнительный обратный проход от конечной частоты к стартовой. Количество точек данных при этом увеличится вдвое минус одна. Такой подход в работе позволяет отследить наличие или отсутствие нестационарных эффектов в исследуемой электрохимической ячейке по наличию гистерезиса в данных импеданса.

Начиная с версии прошивки 2.EX1 имеется возможность зафиксировать диапазон тока-сопротивления при помощи опции Зафиксировать диапазон тока-сопротивления . Она может быть полезна, чтобы запретить прибору использовать не совсем подходящие диапазоны-тока сопротивления, или в принципе запретить переключения на более грубые диапазоны. Прибор не будет использовать свои алгоритмы анализа ситуации по модулю импеданса, а будет поддерживать работу до тех пор, пока будут соблюдаться условия отсутствия перегрузок по постоянному току. Эта опция может быть полезна в основном в двух случаях:

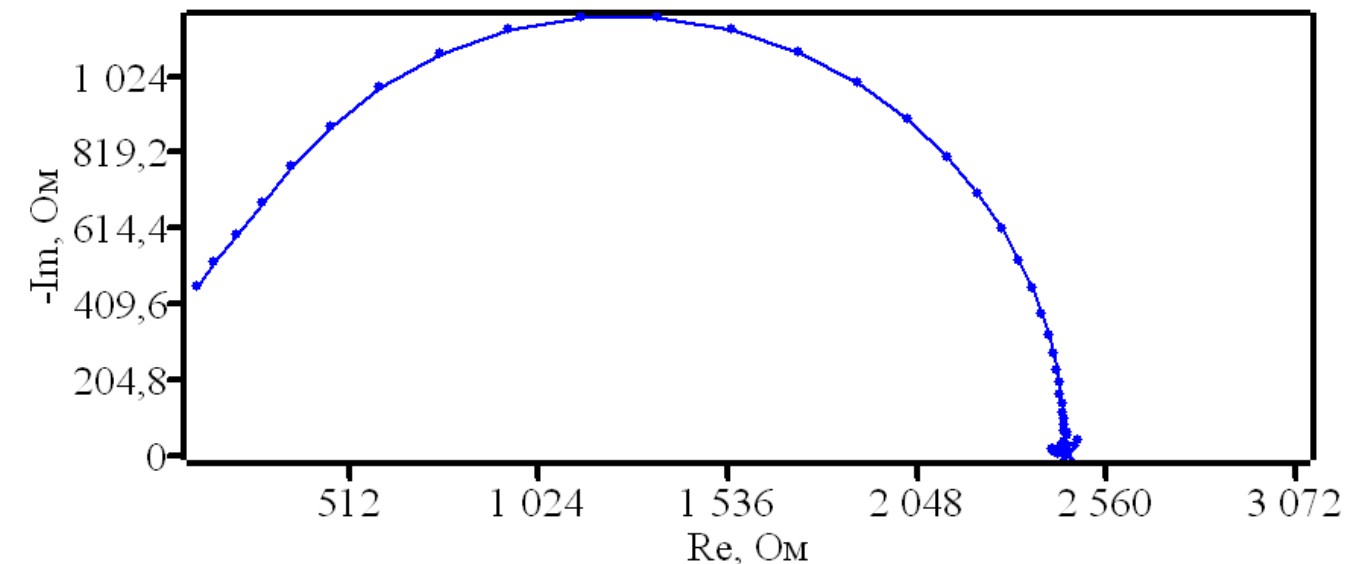
- Когда на спектре не должно быть разрывов и стыковок от переключений диапазонов, даже очень незначительных.
- Когда требуется измерение в более широкой частотной полосе, чем допускается для диапазона тока, который прибор считает наиболее подходящим по модулю импеданса. В некоторых случаях (очень редко), но имеет смысл форсировано вынудить его работать на более широкополосных диапазонах тока, например на диапазоне 200 мА, а не 2000 мА при измерении величин импедансов на уровне 2-3 Ом (в этом случае максимально допустимая частота окажется сильно выше, но достоверность результатов будет уже на усмотрение и ответственности экспериментатора).

Начиная с прошивки версии 2.EX2, в методе электрохимического импеданса имеется возможность рассчитать амплитуду гармоник со второй по 7-ю. Для этого служит опция

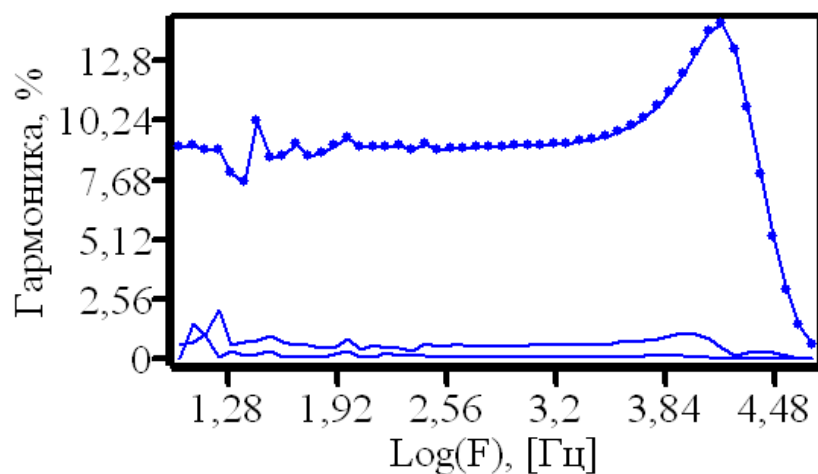
Рассчитать амплитуду гармоник со второй по . С ее помощью пользователь выбирает -

по какую гармонику необходимо произвести анализ амплитуд. Стартовой гармоникой считается вторая. Гармоники обрабатываются для каждой частоты импеданса. Для частоты 1 кГц, частота второй гармоники составит 2 кГц, третьей 3 кГц и так далее. Частота седьмой гармоники составит 7 кГц для основной частоты (так называемой базовой гармонике) 1 кГц.

Результаты анализа амплитуд гармоник выводятся графически на специальную диаграмму, которая находится под основной диаграммой в основной вкладке «Диаграмма» SmartSoft.



Показать данные с интерфейса Таблица
 Показать данные по гармоникам импеданса Выделить гармонику 2



N	F, Гц	Гарм. 2 %	Гарм. 3 %	Гарм. 4 %
1	50000	0,5697	0	0
2	42020	1,4598	0	0
3	35320	2,9741	0,16319	0
4	29683	5,233	0,23104	0,031283
5	24947	7,933	0,3316	0,06433
6	20966	10,802	0,2333	0,026358
7	17621	13,284	0,11339	0,016267
8	14810	14,386	0,4798	0,02991
9	12447	14,057	0,8398	0,04343
10	10461	13,168	1,0465	0,04178
11	8792	12,223	1,0882	0,13914
12	7389	11,425	0,949	0,13751
13	6210	10,848	0,8303	0,1581
14	5219	10,355	0,7872	0,12101
15	4386	10,001	0,7176	0,08397
16	3687	9,759	0,6912	0,03532
17	3098,4	9,546	0,6166	0,05855

Пример годографа импеданса и диаграммы с высокими амплитудами гармоник для очень нелинейной системы. В таблице справа выведены все амплитуды гармоник численно для просмотра, копирования в стороннее ПО или сохранения в текстовый файл. Для линейной системы уровень гармоник обычно не превышает 0.1-0.5%.

Выводимый пользователю результат - это отношение амплитуды базовой гармонике (на основной анализируемой частоте, к которой привязаны значения Re и Im) к амплитуде анализируемой гармоники (2й, 3й и тд), выраженное в процентах.

При работе в потенциостатическом режиме вычисляется относительный уровень гармоник для сигнала тока (сигнал потенциала прикладывается прибором и считается неискаженным

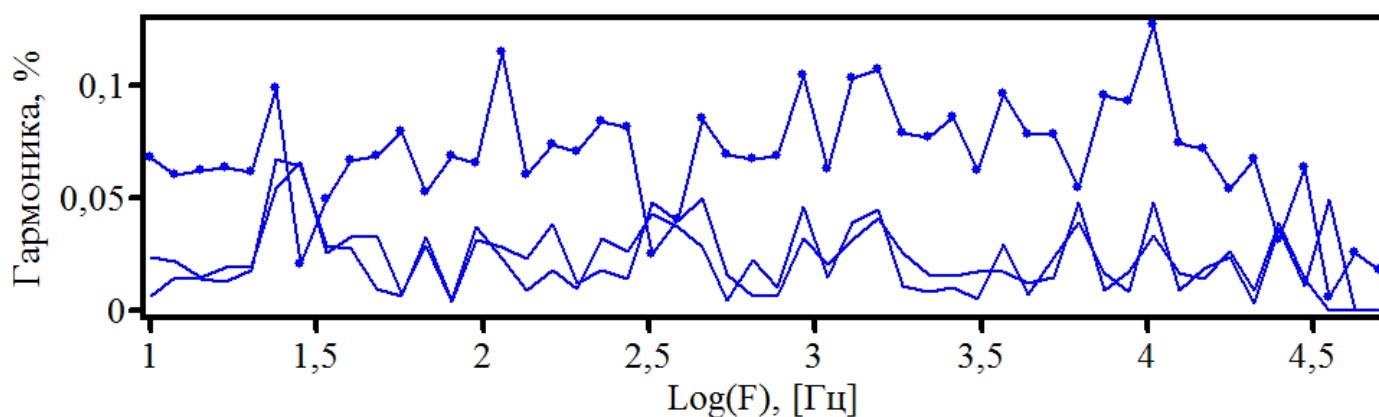
откликом изучаемой электрохимической системы), а в гальваностатическом режиме вычисляется относительный уровень гармоник по потенциалу.

В процессе анализа амплитуд гармоник, может оказаться, что их частота выходит за пределы возможности анализа. В этом случае расчет для них производится не будет, а их амплитуды будут обнулены. Для потенциостатов SmartStat профессиональной и лабораторной серий анализ гармоник выполняется только в режиме отключенного модуля FRA и максимальная частота гармоники составляет 120 кГц (выше не позволяет критерий Найквиста). Для модуля FRA анализ невозможен из-за недостаточности его разрешения по амплитуде. Для приборов индустриальной серии SmartStat максимальная частота анализируемой гармоники составляет 20 кГц.

В целом, анализ амплитуд, как правило, наибольший интерес представляет для низкочастотной области с целью анализа степени нелинейности рассматриваемой системы, а также для оценки степени корректности проводимого измерения на предмет завышенности амплитуды. На высоких частотах чаще сказываются емкостные эффекты, шунтирующие сопротивления, а они не обладают, как правило столь выраженной нелинейностью, как сопротивления.

Анализ гармоник можно использовать для численной оценки степени влияния амплитуды переменного сигнала на точность и качество регистрации спектра импеданса. Можно выполнить два или более последовательных измерения на разных амплитудах (наиболее просто в несколько шагов в программаторе) и по уровню гармоник оценить влияние амплитуды и степень нелинейности изучаемой системы. Далее полученные данные по гармоникам можно использовать для обоснования выбора амплитуды переменного сигнала в научной статье или отчете.

Анализ гармоник весьма чувствителен к наводкам, и в районе частот 50 и 100 Гц могут наблюдаться всплески уровня гармоник (если работа ведется без экрана), не отвечающие фактической нелинейности рассматриваемой системы.



Пример спектра гармоник для линейной системы (RC-цепи). Показаны гармониками со 2й по 4ю.

Наводки отсутствуют.

6.11. Режим импеданса (развертка потенциала, тока, от времени)

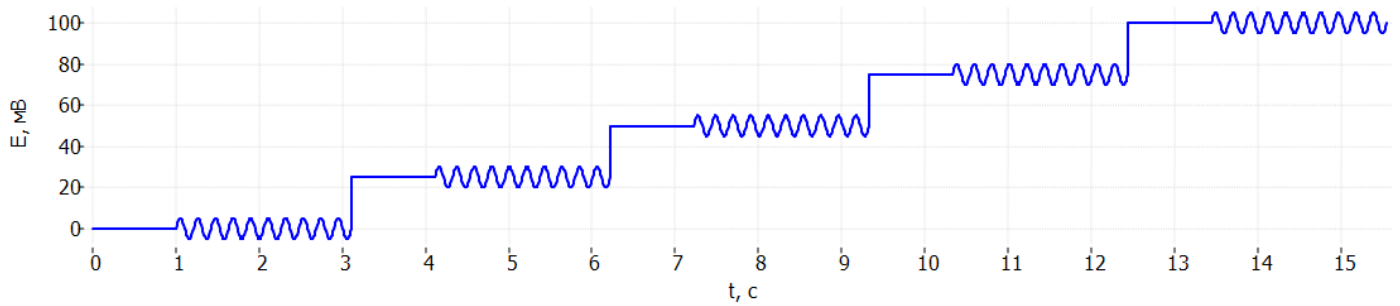
Основное	Прибор	Запуск	Условия	Множители	R-омическое
Стартовое значение	0	мВ	Абсолютно		
Конечное значение	-250	мВ	Абсолютно		
Количество точек	20				
Выдержка в каждой точке	0	с			
Частота импеданса	20	КГц			
Амплитуда	10	мВ			
Точность	Быстро				
<input type="checkbox"/>	Выполнить обратный ход по задаваемым значениям				
<input type="checkbox"/>	Зафиксировать диапазон тока-сопротивления				
<input checked="" type="checkbox"/>	Расчитать амплитуду гармоник со второй по				
			6		

Основные параметры режима измерения электрохимического импеданса при развертке потенциала, тока или от времени.

Во втором методе измерения электрохимического импеданса задается одна фиксированная частота. Частота импеданса Гц. Постоянноточковые же значения потенциала (или тока) изменяются ступенчато от заданного стартового значения. Стартовое значение мВ, к конечному значению. Конечное значение мВ. Пользователь также задает количество ступеней. Количество точек . Программа автоматически рассчитывает получающуюся высоту ступени и выводит ее значение в поле сообщений справа.

Как и в предыдущем режиме работы, измерение импеданса ведется в стационарном или квазистационарном приближении. То есть считается, что состояние исследуемого образца, за время измерения импеданса не меняется или почти не меняется соответственно. В некоторых случаях для достижения такого состояния требуется выдержка исследуемого объекта под вновь заданным потенциалом или током в течение определенного времени для достижения им стационарных условий. Для реализации этого, существует настройка. Выдержка в каждой точке с. Заданное в ней время будет выдержано в начале каждой ступени перед тем, как измерять на ней импеданс. Оно может быть нулевым.

Так как измерение ведется фактически в режиме ступенчатой развертки потенциала, скорость такой развертки оказывается зависящей от длительности выдержки и периода заданной частоты. Программа рассчитывает получающееся значение скорости развертки и выводит его пользователю в поле сообщений справа. На диаграмме прогноза внизу будет показан внешний вид программы поляризации:



Пример внешнего вид диаграммы прогноза при измерении импеданса со ступенчатой разверткой потенциала. Выдержка задана длительностью в 1 секунду, 2 секунды в каждой ступени расходуется на измерение импеданса на частоте 1 Гц (по двум периодам при максимальном быстродействии).

Помимо перечисленных настроек, пользователь задает значение рабочей частоты Частота импеданса , а также амплитуду синусоидального возбуждающего сигнала Амплитуда мВ , а также имеется настройка выбора приоритета скорости измерения Точность .

Помимо этого имеется опция Выполнить обратный ход по задаваемым значениям , включающая дополнительный обратный ход по задаваемым постоянноточковым значениям. Если она включена, то в том же шаге, без остановок, по завершению основного прохода от стартового значения потенциала или тока к конечному, будет выполнен дополнительный обратный проход от конечного значения потенциала или тока к стартовому. Количество точек данных при этом увеличится вдвое минус одна.

Пользователь может задать конечное значение потенциала или тока равным стартовому. В этом случае будет выполнена регистрация зависимости импеданса на заданной частоте от времени. Длительность между повторяющимися измерениями будет определяться значением выдержки. Общая продолжительность работы также будет пропорциональна заданному количеству точек.

Полученные результаты пользователь может наблюдать на диаграмме с самыми различными типами осей (в том числе и параметров импеданса от постоянноточковых значений тока и потенциала), например $Re(E)$, $Im(I)$, $Re(t)$, $Im(t)$, $|Z|(E)$ и многие другие, а также специальные координаты Мота-Шоттки $C^{-2}(E)$ (квадрат обратной последовательной емкости от потенциала).

Начиная с версии прошивки прибора 2.EX1 имеется возможность зафиксировать диапазон тока-сопротивления при измерении импеданса с разверткой потенциала или тока. А с версии прошивки 2.EX2 можно анализировать гармоники. Эти функции подробно описаны в предыдущем разделе про импеданс с разверткой частоты и в развертке потенциала и тока работают точно так же.

6.12. Режим произвольного импульса

Основное | Прибор | Запуск | Условия | Множители | R-омическое

Единицы времени: мкс

Обнулить все времена

Строкам с 1 по: 2

Задать время: 10

Время, мкс	Потенциал, мВ
100	0
100	-1000
100	1000
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0

Отн. Е Р.Ц.

Основные параметры произвольного импульсного режима.

Произвольный импульсный режим очень похож на произвольный хроно-режим. Разница заключается в более высоком быстродействии и, как следствие, в том, как прибор регистрирует данные, а значит и в некоторых настройках, предлагаемых пользователю.

В этом режиме прибор последовательно обрабатывает заданные пользователем значения потенциала или тока (выбирается что-то одно для всего режима), каждое со своей длительностью. Минимальная длительность составляет 10 мкс, максимальная 1 с. Всего может быть отработано от 1 до 15 выходных значений. В потенциостатическом режиме все потенциалы можно задавать либо абсолютно, либо относительно ЕРЦ, либо относительно последнего зарегистрированного потенциала в предыдущем шаге или цикле работы программатора. Набор из 1-15 отработанных ступеней таблицы, считается одним импульсом и соответствует одному программному циклу (если импульсный режим выполняется сам по себе, как простой режим работы. Или одному шагу работы, если он является шагом в программаторе).

Далее в этом разделе следует информация, общая для произвольного импульсного режима и импульсной развертки (последняя рассматривается в следующем разделе).

В импульсных режимах, вкладка «Запуск», выглядит по-другому (не как в ранее рассмотренных потоковых режимах). Вместо критериев завершения, в ней представлены настройки количества импульсов и скорости регистрации данных:

Основное	Прибор	Запуск	Условия	Множители	R-омическое
Всего выполнить импульсов			<input type="text" value="1"/>		
Сохранять первый импульс из каждых			<input type="text" value="1"/>		
Скорость регистрации и данные			Средняя скорость и объем данных (1000 точ ▾)		
Всего будет сохранено импульсов			1		
Импульсы будут сохраняться раз в			0,03		мс
Точек данных на импульс			13		
Период регистрации точек данных			4		мкс

Вкладка Условия, для произвольного импульсного режима.

Пользователь задает количество физически выполняемых на ячейке импульсов. Всего выполнить импульсов от одного до миллиона. Также имеется настройка, управляющая сохранением импульсов. Сохранять первый импульс из каждых . Импульсные режимы не являются потоковыми (в потоковых режимах, рассмотренных ранее, регистрация данных, их обработка и вывод результатов ведется в реальном времени). В импульсных же режимах, для обеспечения максимального быстродействия, обработка и вывод результатов ведутся после регистрации (а не во время нее). То есть, если физически выполняется несколько импульсов подряд, то, например, сохранение и обработка первого импульса, ведутся в момент регистрации второго (и возможно, третьего и тд). Это означает, что второй импульс никогда не может быть зарегистрирован, хотя и выполняется на ячейке физически. В зависимости от длительности импульсов и того, какой объем данных обрабатывается, для выполнения обработки и сохранения, может потребоваться длительность более одного импульса. Для управления ситуацией служит параметр Сохранять первый импульс из каждых . В нем пользователь задает, сколько импульсов будет пропущено при сохранении (вводится количество пропускаемых плюс один). Программа оценивает ситуацию, и если значение слишком мало, то она его исправляет на приемлемое. В меню сообщений справа будет выведена информация о том, какие физические импульсы будут сохранены:

Основное	Прибор	Запуск	Условия	Множители	R-омическое
Всего выполнить импульсов			<input type="text" value="101"/>		
Сохранять первый импульс из каждых			<input type="text" value="20"/>		
Скорость регистрации и данные			Средняя скорость и объем данных (1000 точ ▾)		
Всего будет сохранено импульсов			6		

Проверка произвольного импульсного режима

Будут сохранены импульсы под номерами (программный / физический)

- 1 / 1
- 2 / 21
- 3 / 41
- 4 / 61
- 5 / 81
- 6 / 101

Панель Условия, в настройках импульсного режима и меню сообщений с информацией о том, какие физически выполненные импульсы будут сохранены.

Также, пропускание некоторых, заранее оговоренных импульсов (программно - циклов) при сохранении, позволяет выполнить большое количество циклов (более 100) до миллиона, при ограничении количества сохраняемых в 100 штук.

Также в панели Условия, имеется настройка приоритета по быстродействию регистрации или объему данных на один импульс (соответствующий программному циклу при сохранении). Максимально можно сохранить 4000 точек данных на один импульс. Минимальный период регистрации составляет 4 мкс, максимальный 4096 мкс. Пользователь может выбрать один из трех приоритетов по быстродействию регистрации.

В этой же вкладке, ниже будет выведена информация о скорости регистрации (она будет рассчитана автоматически, исходя из длительности импульса и приоритетов, заданных пользователем). Также будет приведено количество точек данных на импульс.

В произвольном импульсном режиме можно пользоваться Аух входами так же, как и в потоковых режимах (стационарных и развертках). Точки данных для них будут регистрироваться синхронно с данными тока и потенциала (4 синхронных значения на каждое значение времени).

В импульсных режимах нет функции множителей и автоматического измерения омического сопротивления. Соответствующие вкладки пусты.

В режиме программатора, в универсальном импульсном режиме можно выполнить и зарегистрировать только один импульс, программно соответствующий одному шагу программатора. Стоит иметь ввиду, что длительность переключения между циклами и шагами программатора занимает время, во много раз превышающие 4 и даже 40 мкс. То есть, длительность выполнения быстрых импульсных режимов (например, менее 1 мс) может быть меньше длительности переключения шагов и циклов программатора. Поэтому, если вам нужен поток большого числа подряд идущих импульсов, то стоит использовать импульсный режим сам по себе, как простой режим, или как один файл планировщика. Или учитывать длительность переключений программатора (она не определена точно) и конструировать рабочую программу соответствующим образом. Например, для регистрации одиночного потенциостатического импульса, транзиент отклика по току которого планируется затем исследовать во временной области путем аппроксимаций и разложений, вполне может быть шагом программатора с другими подготавливающими шагами до и после него.

В импульсных режимах нет автоматических диапазонов тока. Это означает, что прибор не может переключиться на более тонкий диапазон тока. В процессе выполнения быстродействующего импульса это невозможно (длительность переключения диапазона составляет от 5 до 15 мс, а импульсный режим сам по себе может быть во много раз короче). Для максимального же сохранения работоспособности запущенной работы, прибор реагирует на перегрузки переключениями на более грубый диапазон (по току или потенциалу), если позволяет ситуация (если он успевает это сделать и есть диапазон, на который можно переключиться). То есть, после регистрации импульса, прибор сканирует полученные данные на предмет перегрузок по току или потенциалу (потенциостатический или гальваностатический режим соответственно). Если он обнаруживает перегрузку, то выполняется

переключение во время обрабатываемых, но не регистрируемых импульсов, в расчете на то, что последующие зарегистрированные импульсы, будут отработаны на новом диапазоне без перегрузок.

Импульсные режимы, это единственные режимы работы, где прибору позволяется пользоваться имеющейся у него двукратной перегрузочной способностью по току. То есть, без ущерба для себя и точности зарегистрированных данных, все потенциостаты SmartStat на всех диапазонах тока, кроме самого старшего, могут кратковременно работать с перегрузкой в два раза. Это сделано специально для корректной регистрации быстрых импульсов тока (например, регистрация кратковременного пика тока длительностью до 10 мс, амплитудой 35 мА, на диапазоне тока в 20 мА, не вызовет никаких проблем и пройдет в штатном режиме).

6.13. Режим импульсной развертки

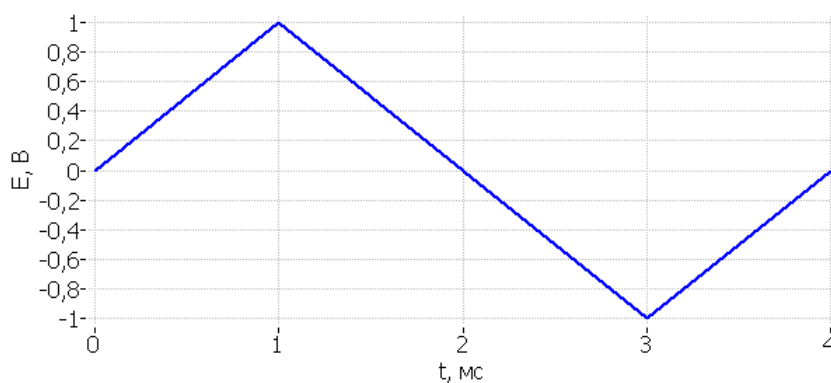
Основное	Прибор	Запуск	Условия	Множители	R-омическое
Стартовое значение	<input type="text" value="0"/>	мВ	Абсолютно		
Максимум	<input type="text" value="1000"/>	мВ	Абсолютно		
Минимум	<input type="text" value="-1000"/>	мВ	Абсолютно		
Плато в максимуме	<input type="text" value="0"/>	с	>0<		
Плато в минимуме	<input type="text" value="0"/>	с	>0<		
Скорость развертки	<input type="text" value="1000000"/>	мВ/с			

Основные параметры режима импульсной развертки.

Режим импульсной развертки похож на режим ЦВА, и используется, в общем, для тех же целей, только при больших скоростях. Второе его название - осциллографическая развертка (потенциала или тока).

Количество основных параметров здесь немного меньше, чем в обычной ЦВА, нет пауз в вершинах развертки (нет холостых циклов, а общее количество циклов-импульсов задается во вкладке Условия). Задается стартовое значение (оно же конечное), максимум и минимум, а также скорость развертки. Максимальная скорость развертки потенциала составляет 1000 В/с, минимальная 10 В/с.

Вкладка Условия, для режима импульсной развертки устроена точно так же, как и для произвольного импульсного режима. Все остальные особенности тоже, точно такие же. Вы можете ознакомиться с ними в предыдущем разделе, начиная с третьего абзаца. Одному импульсу в этом режиме соответствует один полный цикл развертки:



Один импульс – цикл развертки в режиме импульсной развертки.

6.14. Импульсные аналитические режимы

Основное | Прибор | Запуск | Условия | Множители | R-омическое

Тип работы: Квадратно-волновая ВА (КВВА)

Параметр	Значение
E0, мВ	0
Ee, мВ	1000
Es, мВ	10
f, Гц	10
Ea, мВ	10

Графическая подсказка для импульсного сигнала. Показаны уровни E0, Ea, Es, Ee и период T=1/f.

Основные параметры импульсных аналитических режимов (выбран метод КВВА).

Импульсные электроаналитические режимы имеют минимум настроек, так как они полностью ориентированы на стандартные общепринятые методы. Пользователь выбирает, каким из них он планирует воспользоваться (если нужно метода здесь нет, то можно воспользоваться профессиональным режимом, он описан далее):

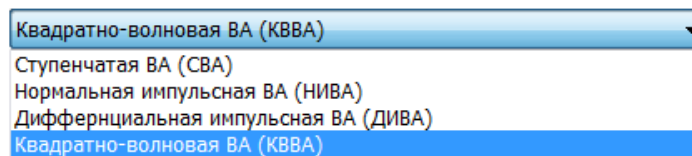


Рис. 53. Выпадающее меню выбора метода работы в импульсном электроаналитическом режиме.

После выбора методики работы, обновиться таблица параметров, которые редактирует пользователь. В ней будут отображаться только те уникальные настройки выбранного метода, которые необходимо задать. Справа от таблицы будет выводиться графическая подсказка для используемого метода, со всеми условными обозначениями, используемыми в таблице. Ниже, на диаграмме прогноза можно увидеть, как будет выглядеть выходной сигнал:

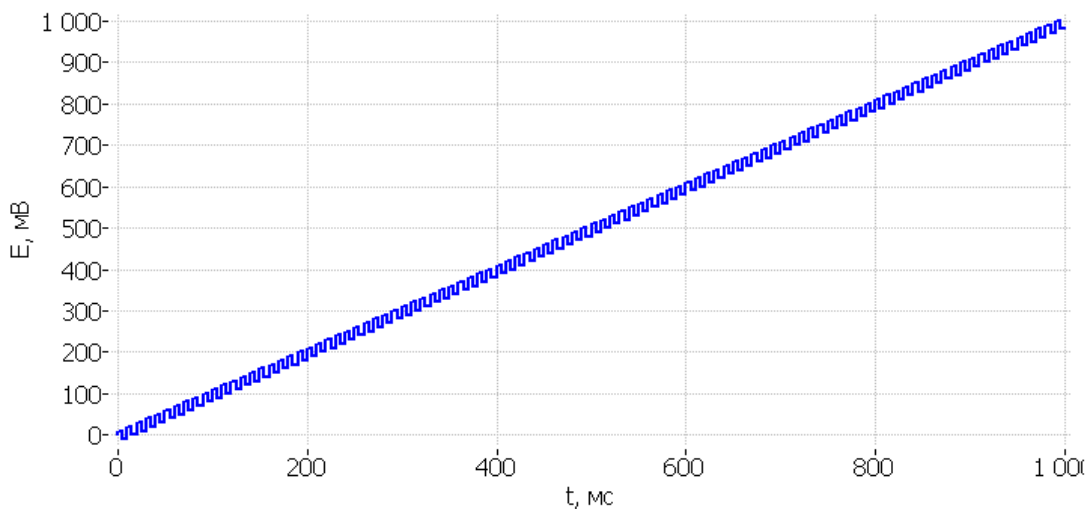


Диаграмма прогноза в импульсном электроаналитическом режиме.

В методах СВА, НИВА и ДИВА, минимальная длительность ступени составляет 0.5 мс, максимальная 1000 с. Для метода КВВА максимальная частота составляет 1 кГц, минимальная 1 Гц.

Во вкладке настроек пользователь выбирает диапазоны тока и потенциала. Работа ведется только в потенциостатическом режиме, что связано с особенностями используемых методов.

Диапазон потенциала	<input type="text" value="5 В"/>
Диапазон тока	<input type="text" value="2000 мкА"/>

Подобрать диапазон тока перед запуском импульсов

Однократное выполнение подбора диапазона тока

Настраиваемые элементы панели Прибор для импульсного электроаналитического режима.

Диапазон тока имеет смысл выбрать как можно более точно. Если в процессе работы, прибор обнаружит перегрузку по току, то он переключит диапазон тока на более грубый, и начнет развертку импульсов с начала (от стартового потенциала заново) не выключая ячейку. Зарегистрированные до этого данные не будут приниматься в расчет и не будут выведены пользователю. Переключение на более тонкий диапазон тока невозможно в процессе развертки импульсов.

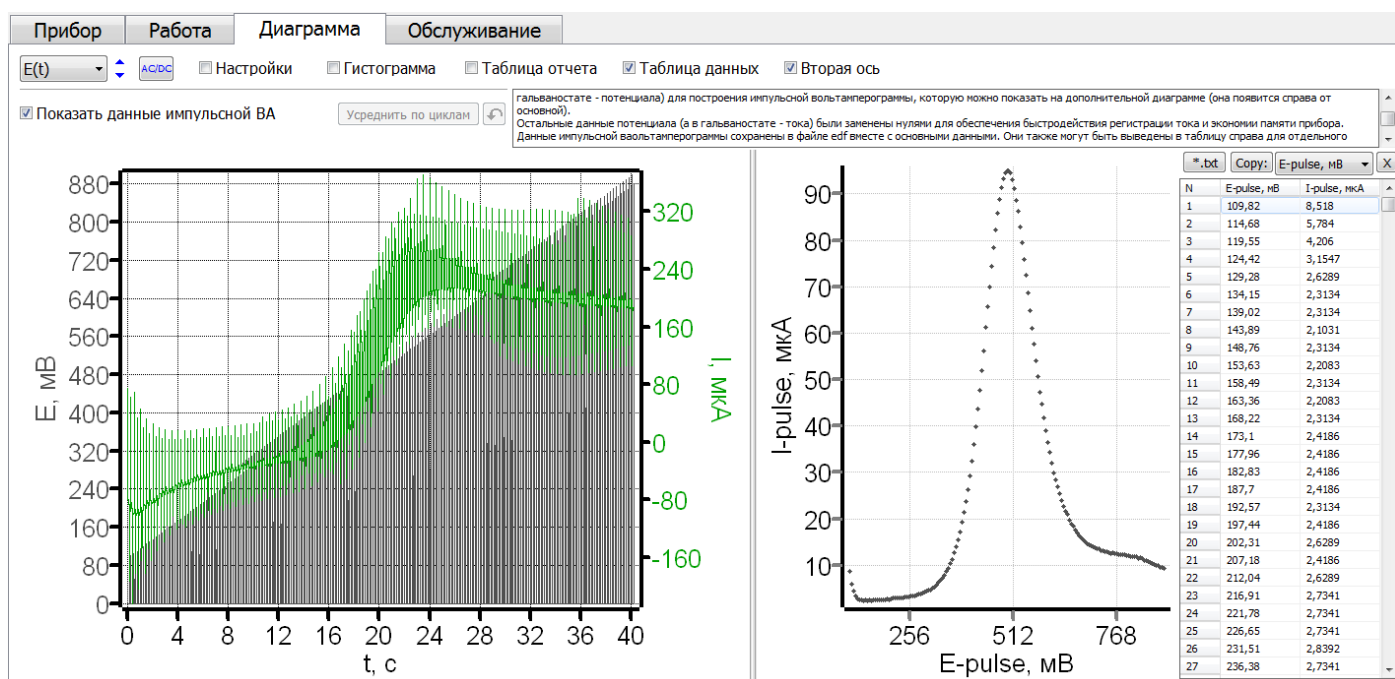
Если диапазон тока заранее неизвестен, то можно включить опцию Подобрать диапазон тока перед запуском импульсов . Она запустит процедуру подбора диапазона тока перед разверткой импульсов. К сожалению, ее возможности ограничены, так как она не должна сильно поляризовать рабочий электрод и менять состояние его границы с электролитом, поэтому все, что она может, это выполнить один пробный импульс и подобрать диапазон тока на нем. Поэтому она не гарантирует выбор наиболее подходящего диапазона тока. Другая настройка Однократное выполнение подбора диапазона тока актуальна только в режиме программатора. Если импульсный электроаналитический режим является одним шагом программатора, а другие шаги не используются (или настроены специальным образом для корректного возврата от конечного потенциала развертки импульсов к стартовому значению), а количество циклов программатора составляет более одного, то можно использовать режим накопления данных для получения более качественных (менее зашумленных) импульсных вольтамперограмм. В этом случае нет необходимости в каждом цикле (в каждом новом проходе импульсной ВА) переподбирать диапазон тока, и можно включить эту опцию.

В процессе работы любого импульсного электроаналитического метода, прибор регистрирует данные тока все время потоком. При необходимости, скорость регистрации при этом поднимается до 32 кГц для быстрых режимов. Для обеспечения быстродействия, данные потенциала регистрируются только в моменты, в которые для построения канонической импульсной ВА предполагается регистрация тока (в конце плато импульса, зависит от выбранной методики, в КВВА, например, ток

регистрируется дважды и вычитается). Остальные данные потенциала заполняются нулями и не соответствуют фактическому потенциалу.

В результате работы, прибор выводит исходные данные тока, и описанным выше способом полученные данные потенциала на общей диаграмме, чтобы пользователь мог их пронаблюдать и при необходимости выбрать другой диапазон тока, внести коррективы в настройки быстрого действия выбранного режима (например, если замечен недостаточный спад тока заряжения к концу плато). Также исходные данные тока могут быть очень полезны в образовательных целях или для разработчиков электрохимических методов.

Помимо этого, справа от основной (традиционной для приложения SmartSoft) диаграммы, будет показана специальная диаграмма импульсной вольтамперограммы (если включена соответствующая галочка Показать данные импульсной ВА над основной диаграммой. Она появится над ней, когда из прибора будут получены данные импульсной ВА). На ней будет построена традиционная, общепринятая импульсная ВА, согласно выбранной методике работы:



Внешний вид вкладки Диаграмма, приложения SmartSoft при выводе данных импульсной ВА: Слева – исходные данные (показаны в двух осях), посередине – импульсная ВА (в данном случае КВВА), справа – таблица с данными импульсной ВА (в этом примере в ней выведены потенциалы и токи КВВА) для просмотра, копирования и экспорта.

Для активации режима накопления по нескольким циклам, служит кнопка , расположенная над импульсной ВА. При ее нажатии, данные нескольких ВА по циклам будут поточечно усреднены и сведены в цикле номер 1. Все накопленные циклы данных будут отображаться на правой диаграмме и на левой (можно показать и только один цикл, выбирается в настройках диаграммы). Операция усреднения обратима, для возврата к исходным данным служит соседняя кнопка .

При необходимости, в атрибутах эксперимента можно выбрать в качестве количества образца, площадь рабочего электрода. Если после этого включить опцию нормировки на количество (в настройках диаграммы, описано в соответствующем разделе), то используя единицы площади или нет, можно легко перестроить обе диаграммы на единичную (нормированную) площадь, например, в ходе калибровки аналитической установки.

Импульсные ВА, в которых может использоваться линейная развертка потенциала (исторически она была именно линейной при, например, изобретении КВВА, а прямоугольные импульсы создавались отдельным генератором и накладывались на линейный аналоговый сигнал, формируемый крутящимся барабаном) используют (как и практически во всех современных аналого-цифровых потенциостатах) горизонтальные плато, а сканирование потенциала создается за счет приращения импульсов. Различные литературные источники, поэтому трактуют одни и те же методы, на самом деле по-разному (в более современных источниках полочки импульсов горизонтальные, а в более ранних - наклонные, что является исключительной заслугой влияния зарубежного приборостроения, так как авторы современных книг, в отличие от более ранних – классических, ссылаются в основном на производителей приборов, а не на классическую литературу по электроаналитике с аналоговыми сигналами, формируемыми полярографами). Потенциостаты SmartStat используют также горизонтальные плато, тк это проще и в случае цифрового синтеза, мене зашумлено (и даст результаты, более схожие с европейским оборудованием). Однако, потенциостаты SamrtStat позволяют создавать эти же режимы с истинно линейной разверткой (с наклонными плато). Для этого, существуют профессиональные импульсные электроаналитические режимы с гораздо большим количеством настроек и возможностей.

Вкладки множителей, условий и измерения омического сопротивления, в аналитических импульсных режимах не активны.

Скорость регистрации данных выбирается прибором автоматически сообразно длительности самой короткой ступени выбранного метода, для обеспечения максимального качества регистрируемой импульсной ВА.

6.15. Профессиональные импульсные аналитические режимы

Основное | Прибор | Запуск | Условия | Множители | R-омическое

В этом режиме повторяются импульсы. Каждый импульс состоит из 1-5 ступеней:

Параметры	Ступень 1	Ступень 2	Ступень 3	Ступень 4	Ступень 5
Высота, мВ	20	0	0	0	0
Приращение, мВ	0	0	0	0	0
Длительность, мс	10	20	0	0	0
Регистрация E	+ к средним	Нет	Нет	Нет	Нет
Регистрация I	+ к сумме	- к сумме	Нет	Нет	Нет

Наложить на импульсы линейную развертку мВ/с

Стартовое значение мВ

Задать окончание количеством импульсов

Задать окончание конечным значением мВ

После завершения задать стартовое значение

Основные параметры профессионального электроаналитического режима.

Профессиональный импульсный режим работы создан для расширения электроаналитических возможностей потенциостатов SmartStat. В нем можно реализовать, например, реверсивную импульсную ВА, в которой используются трехступенчатые импульсы, а также многое другое, включая истинно-линейную развертку, на которую накладываются импульсы. Пример такого режима работы показан ниже, для приведенных на предыдущем рисунке параметров:

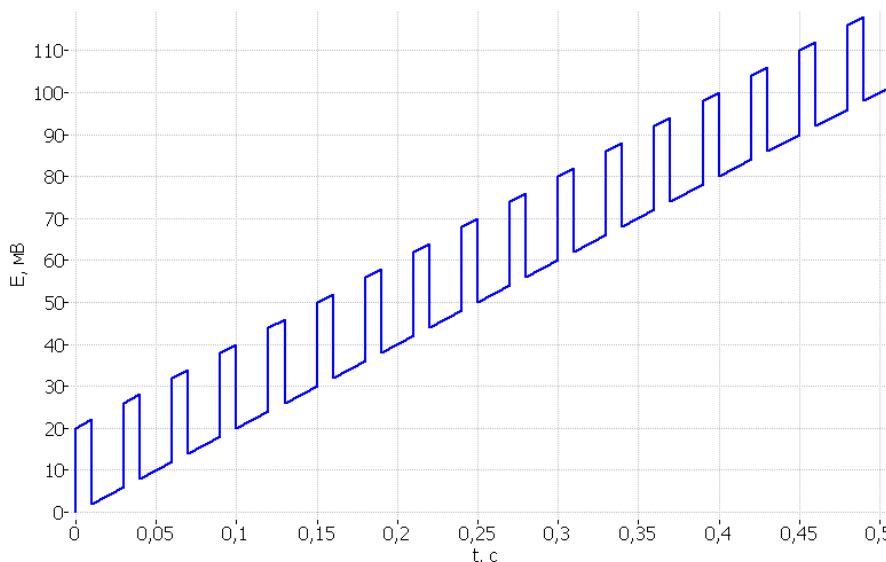


Диаграмма прогноза выходного сигнала в качестве примера реализации профессионального электроаналитического импульсного режима (непрактично узкий интервал сканируемых потенциалов выбран для наглядности наклонных плато импульсов).

В профессиональном электроаналитическом режиме пользователь может использовать от 1 до 5 уровней-ступеней сигнала в одном импульсе. Их параметры задаются с помощью таблицы. Ступени в одном импульсе обрабатываются последовательно друг за другом, если длительность

ступени больше нуля (всего от 1 до 5 ступеней). Для каждой ступени задается свое начальное значение в первом импульсе, а также величина приращения в каждом импульсе. Развертка импульсов накладывается на величину стартового значения мВ.

Минимальная длительность ступени составляет 1 мс, максимальная 1000 с. Благодаря столь широким возможностям, повышенным (до 32 кГц) скоростям регистрации данных, удобству синхронизированной по концу ступени регистрации импульсных данных, возможности работы в гальваностатическом режиме, профессиональные импульсные методы можно использовать для решения самого широкого круга задач (в том числе и как обычные импульсные методы вместо универсального хроно-режима).

Помимо этого, пользователь выбирает параметры регистрации данных для каждой ступени. Можно регистрировать потенциал или нет, можно регистрировать ток положительно или отрицательно или не регистрировать в выбранной ступени. Выводимые на результирующую импульсную ВА, значения тока и потенциала, считаются как среднее для всех отработанных ступеней (свое среднее в каждом отработанном импульсе по всем использованным ступеням, согласно правилам усреднения для каждой ступени, выбранным пользователем). По потенциалу, пользователь может выбрать, для какой ступени к среднему прибавить потенциал, а для какой нет. По току, дополнительно для каждой ступени выбирается знак тока – прибавить его к среднему или вычесть. Значения потенциала и тока измеряются в конце каждой ступени.

Фактически, пользователь может самостоятельно собрать любой электроаналитический метод работы, в том числе и описанные в предыдущем разделе. Или можно их модернизировать. Для этого можно наложить на импульсы без приращений (или с ними), линейную развертку заданной скорости

Наложить на импульсы линейную развертку

мВ/с

. Эта развертка будет создаваться цифровыми методами, но при помощи высокоточного ЦАП (разрядностью 20 или 18 бит, зависит от комплектации прибора) с ультрамалым шагом (10 или 40 мкВ), что эквивалентно линейной аналоговой развертке и недоступно большинству коммерческих потенциостатов. Диапазон скоростей развертки может быть от 1 мкВ/с, до 50 В/с (как в обычных режимах с развертками).

Количество отработанных импульсов (и соответственно интервал сканируемых потенциалов) может быть задано количеством импульсов напрямую

Задать окончание количеством импульсов

или значением конечного потенциала

Задать окончание конечным значением

мВ

или тока, если используется

гальваностатический режим, который возможен в профессиональном режиме наряду с потенциостатическим. После окончания сканирования выбранного интервала потенциалов (или токов), потенциостат может вернуться к стартовому значению

После завершения задать стартовое значение

Вкладка настроек прибора в профессиональных аналитических режимах выглядит точно так же, как и в обычных аналитических режимах (описана выше). Остальные особенности других вкладок тоже такие же. Исключение составляет лишь возможность работы в гальваностатическом

режиме. В нем, теперь данные потенциала регистрируются полностью, а данные тока только в моменты фиксации конченного тока каждой ступени (в начале и середине ступени потенциалы не регистрируются в гальваностате, для обеспечения максимального быстродействия и считается, что ток в них постоянен, то есть ситуация полностью симметрична потенциостатическому режиму). Автоматический диапазон тока в гальваностатическом режиме невозможен, диапазонам потенциала предписано автоматическое закругление до старшего диапазона (если таковой имеется) с перезапуском развертки тока от стартового значения. Вкладки множителей, условий и измерения омического сопротивления, в профессиональных аналитических импульсных режимах не активны.

Так же, как и в простых аналитических режимах, в профессиональных доступно накопление по циклам программатора с усреднением.

Скорость регистрации данных выбирается прибором автоматически согласно длительности самой короткой ступени для обеспечения максимального качества регистрируемой импульсной ВА.

6.16. Прерывистое титрование

Программное обеспечение SmartSoft позволяет выполнять потенциостатическое прерывистое титрование (ПИТ, Potentiostatic Intermittent Titration, PIT), и гальваностатическое прерывистое титрование (ГИТ, Galvanostatic Intermittent Titration, GIT). Настройки этих двух методов работы довольно сильно различаются, так как различны и сами обрабатываемые режимы. Поэтому сначала каждый из них будет рассмотрен по отдельности в плане их настроек. Оба режима доступны из списка простых режимов под названием Прерывистое титрование. Режим ПИТ или ГИТ выбирается в настройках прибора во вкладке Прибор, путем выбора режима потенциостат или гальваностат соответственно.

Способы выделения результатов в этих режимах также различаются. В самом простом виде, у каждого из методов (ПИТ или ГИТ) существует один свой общепринятый способ выделения данных, необходимый для расчета коэффициентов диффузии. Получение зависимости коэффициента диффузии от степени разреженности электрода и является основной классической задачей методов ПИТ и ГИТ. Однако, кроме них, имея те же исходные данные потенциала и тока, можно получать дополнительные электрохимические зависимости (например, значений потенциала или их приращений), которые используют при изучении, например, структурных изменений, происходящих внутри электрода в ходе его заряда или разряда. Программное обеспечение SmartSoft предоставляет пользователю крайне удобную возможность автоматически рассчитывать такие данные на этапе просмотра получаемых результатов на диаграмме. Это осуществляется элементарным выбором осей дополнительно строящейся диаграммы, предназначенной для отображения кривой титрования (целевого результата всей работы ПИТ или ГИТ). Имеется 10 предустановленных вертикальных осей (методов расчета результатов) и 5-ти горизонтальных, как для ПИТ, так и для ГИТ. Эти особенности будут рассмотрены далее, после рассмотрения параметров режимов.

Основное	Прибор	Запуск	Условия	Множители	R-омическое
Потенциостатическое прерывистое титрование					
Стартовый потенциал	<input type="text" value="0"/>	мВ	<input type="button" value="Отн. Е Р.Ц."/> ▼		
Конечный потенциал	<input type="text" value="600"/>	мВ	<input type="button" value="Отн. Е Р.Ц."/> ▼		
Высота ступени потенциала	<input type="text" value="50"/>	мВ			
Длительность релаксации	<input type="text" value="1"/>	с			
Длительность поляризации	<input type="text" value="1"/>	с			
<input checked="" type="checkbox"/> Выполнить обратный ход					
Результаты титрования и выбор их типа, будут предложены на диаграмме в ходе работы					

Параметры режима потенциостатического прерывистого титрования.

В потенциостатическом (ПИТ) режиме работы, прибор обрабатывает фактически ступенчатый режим от стартового значения потенциала к конечному значению потенциала. Перед каждой ступенью потенциала выполняется релаксация (отключение ячейки) заданной длительности (обычно – минуты, десятки минут). Длительность релаксации 1 с. Каждая ступень потенциала длится также определенное заданное время Длительность поляризации 1 с (тоже обычно минуты-десятки минут). Оба этих параметра влияют в конечном счете на длительность всего эксперимента. Помимо них, пользователь также задает и шаг потенциала между его ступенями Высота ступени потенциала 50 мВ (обычно милливольты-десятки милливольт). Сам эксперимент может длиться несколько десятков часов (в настоящем же руководстве приведены утрированно более простые примеры со значительно более короткими временами для наглядности. Фактические кривые с реальными промерами на аккумуляторах, можно найти в дополнительной документации на сайте www.smart-stat.ru).

Помимо прямого прохода от стартового потенциала к конечному (например, заряда электрода), также можно выполнить дополнительно и обратный ход Выполнить обратный ход, по завершению прямого прохода, с возвращением к стартовому потенциалу. В этом случае, схематично вся программа поляризации выглядит следующим образом:



Схематическое изображение программы поляризации в потенциостатическом прерывистом титровании. Потенциалу РЦ соответствует нулевой уровень потенциала.

Основное **Прибор** Запуск Условия Множители R-омическое

Гальваностатическое прерывистое титрование

Стартовый потенциал мВ Отн. Е Р.Ц.

Конечный потенциал мВ Отн. Е Р.Ц.

Высота импульса тока мА

Длительность релаксации с

Длительность поляризации с

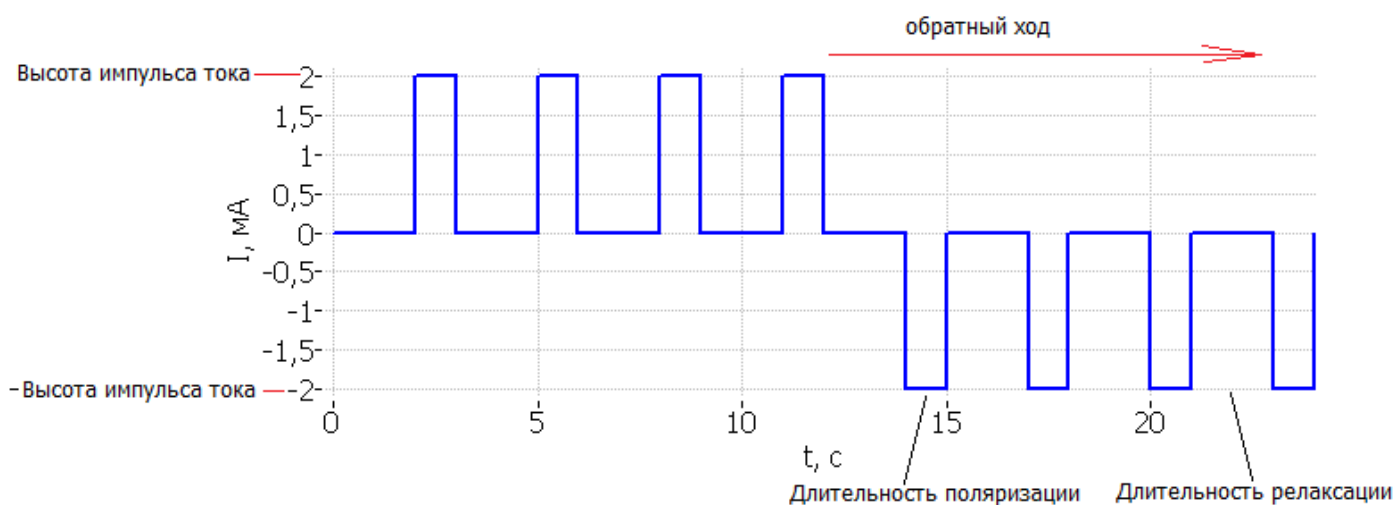
Общий таймаут по времени с

Выполнить обратный ход

Результаты титрования и выбор их типа, будут предложены на диаграмме в ходе работы

Параметры режима гальваностатического прерывистого титрования.

В режиме же гальваностатического прерывистого титрования (ГИТ), прибор обрабатывает одни и те же импульсы тока заданной амплитуды Высота импульса тока мА и длительности Длительность поляризации с. Они чередуются с паузами релаксации, также определенной длительности Длительность релаксации с. Эти импульсы тока прикладываются к образцу до тех пор, пока не будет достигнуто заданное конечное значение потенциала Конечный потенциал мВ. При его достижении эксперимент завершается, либо выполняется обратный ход Выполнить обратный ход, который длится до тех пор, пока не будет достигнуто значение стартового потенциала Стартовый потенциал мВ. В ходе выполнения обратного хода, знак тока автоматически меняется на противоположный. Фактически, на прямом ходу происходит заряд электрода, а на обратном его разряд (или наоборот. В ПИТ тоже происходит заряд-разряд). Схематично и упрощенно программа работы выглядит следующим образом:



Схематическое изображение программы поляризации в гальваностатическом прерывистом титровании.

Ввиду того, что управляющей программе и прибору, не известны параметры образца, например по его емкости, он не может рассчитать сколько времени потребуется на работу. Поэтому, чтобы в случае аварии или иных непредвиденных обстоятельств, эксперимент не длился до истощения памяти прибора, необходимо также задать таймаут по длительности работы

Общий таймаут по времени

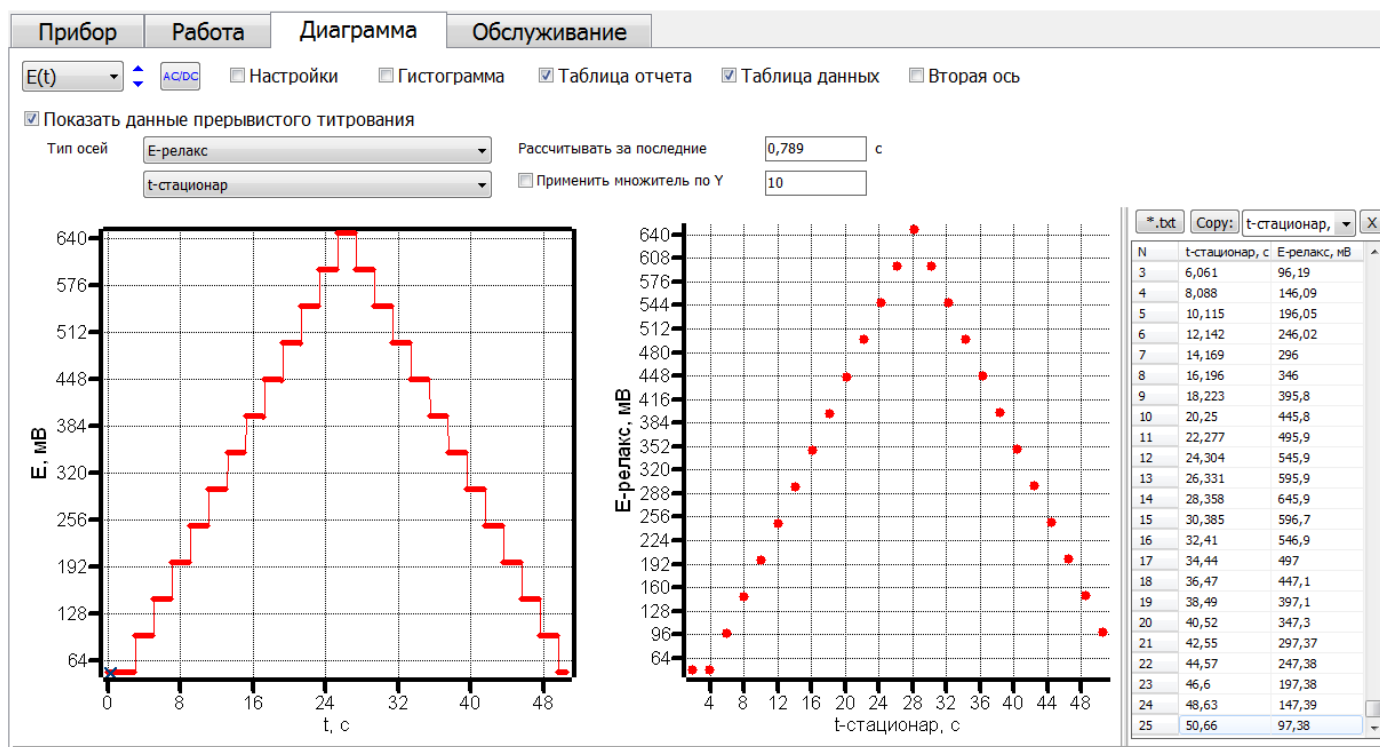
с.

В потенциостатическом прерывистом титровании такого параметра нет, так как он точно прогнозируется по времени, а гальваностатический режим нет.

В обоих режимах можно пользоваться условиями досрочного завершения эксперимента во вкладке Условия. Потенциалы в обоих режимах можно задавать как абсолютно, так и относительно потенциала разомкнутой цепи, или последнего отработанного в предыдущем цикле или шаге работы. Сами по себе режимы ПИТ и ГИТ весьма длительны и продолжаются по несколько часов, поэтому вряд ли их будут ставить в программатор. По этой же причине в них отсутствуют функции множителей. Помимо этого, в них весьма нетривиальна первичная обработка данных.

Небольшая рекомендация по выбору параметров. Длительность релаксации и поляризации зависит от скорости диффузии. Обычно 10-15 минут оказывается достаточно. Для получения же хорошо проработанной выходной кривой титрования, чтобы на ней можно было различить, например, эффекты изменений потенциала, нужно иметь на ней не менее 50 точек. Если же их будет слишком много, то эксперимент займет больше времени (тк каждый зарядный импульс тока сопровождается релаксацией, в ходе которой ток не идет и прогресса по заряду электрода нет). Разумно ограничиться количеством импульсов тока в 100 на один проход. Если в режиме ПИТ все легко посчитать (программа сама выведет в поле сообщений - сколько получится импульсов), то в режиме ГИТ нужно ориентироваться на емкость образца. Обычно она известна или прогнозируема. Например, нам нужно испытать аккумулятор емкостью 1100 мАч. При такой емкости, его омическое сопротивление будет составлять несколько десятков миллиом. Поэтому работа в потенциостатическом режиме вызвала бы слишком большие броски тока. Значит лучше использовать режим ГИТ. Допустим мы хотим получить 60 точек, а длительность релаксации и заряда выберем 10 минут. Если выбрать высоту импульса тока в $C/10$, в нашем случае это 110 мА, (округлим до 100 мА), то на весь заряд аккумулятора потребуется 11 часов (при токе 100 мА для аккумулятора 1100 мАч). На обратный ход еще 11 часов. И еще вдвое больше из-за релаксаций, тк они тоже все по 10 минут. Итого, 44 часа. Так как рабочий ток составляет $C/11$, и длиться каждый импульс тока будет 10 минут, то есть $1/6$ часа, то всего будет приложено $11*6=66$ импульсов на один проход. Вполне пригодное для работы значение. Таймаут можно выставить на уровне 60-70 (или даже 100) часов. Дополнительно можно порекомендовать стандартизировать для одного класса образцов рабочий ток, выбрав его из интервала $C/10 - C/20$ и использовать его всегда. Также, для обеспечения воспроизводимости, перед началом титрования, всегда нужно приводить образец к эталонному состоянию, полностью его зарядив (можно и разрядив, если это не принесет ему вреда).

Во время выполнения прерывистого титрования (ПИТ или ГИТ, далее не важно), прибор регистрирует массивы данных тока и потенциала одним неразрывным массивом (одним шагом и циклом, то есть в принципе титрование без проблем можно поставить в программатор, например с предшествующими стадиями заряда до эталонного состояния). Для того же, чтобы автоматически выделить из них целевые данные, необходимые пользователю для построения кривой титрования, потенциостат вносит в эти массивы специальные маркеры для фиксации моментов начала каждого импульса, его конца и то же самое для фаз релаксации. Эти маркеры незаметны для пользователя, но сохраняются в файле edf вместе с исходными данными тока и потенциала для дальнейшей обработки. Благодаря им, программа SmartSoft автоматически строит пользователю кривую титрования на дополнительной диаграмме во вкладке диаграммы (вторая диаграмма подобным же образом появляется и у импульсных аналитических режимов):



Внешний вид вкладки Диаграмма в процессе (или после) выполнения режима ПИТ или ГИТ. Исходные данные тока и потенциала показаны на диаграмме слева. В центральной диаграмме построена кривая титрования, а справа приведены данные точек на этой диаграмме, для копирования и сторонней обработки. Данные показаны схематично, для упрощения демонстрации работы программного обеспечения.

При детектировании маркера в данных тока и потенциала, загружаемых с прибора, программа SmartSoft выводит в верхней части вкладки Диаграмма, небольшую специальную панель. С ее помощью пользователь выбирает - показывать кривую титрования или нет, а также задает другие настройки, требуемые для расчета данных этой кривой:

Показать данные прерывистого титрования

Тип осей
E-релакс
t-стационар

Рассчитывать за последние 0,789 с
 Применить множитель по Y 10

Панель управления выводом результатов прерывистого титрования.

Если отключить опцию Показать данные прерывистого титрования, то вторая диаграмма с кривой титрования будет скрыта, а в таблице данных справа будут показаны точки данных для основной диаграммы (ток, потенциал, заряд и тп).

Далее следуют два выпадающих меню, в которых пользователь выбирает – какие данные необходимо автоматически рассчитать и вывести на кривую титрования:

Тип осей

E-релакс E-релакс E-стационар I-стационар Delta(E-стационар) Delta(E-под током) Delta(E-релакс) [Delta(E-стац)/Delta(E-под током)]2 [Delta(E-релакс)/Delta(E-под током)]2 dE/d[(t)1/2] d[log(i)]/dt	t-стационар t-стационар E-стационар Заряд SOC 100%-SOC
---	---

Содержимое выпадающих меню для выбора вертикальной оси (рассчитываемых данных кривой титрования) и горизонтальной оси (в зависимости от чего она будет построена).

Для некоторых типов рассчитываемых данных, справа от выпадающего меню, станет активным поле для ввода интервала времени **Рассчитывать за последние** 0,789 с. Эта настройка задает то, в каком интервале времени необходимо производить расчет, отсчитывая это время от конца импульса тока в ПИТ или степени потенциала в ГИТ. Например, если ввести значение 700 с при длительности поляризации 1000 с, то расчет будет вестись от 300 до 1000 секунды, для каждого импульса тока. К таким данным относятся два последних типа расчетов, связанных с вычислением наклонов. Ввиду того, что наклон можно вычислить для разных временных отрезков, пользователю предлагается ввести это значение самостоятельно или подобрать наиболее подходящее. Обычно оно составляет около половины длительности нахождения образца под током. Классический метод расчета, используемый для определения коэффициента диффузии, в потенциостатическом прерывистом титровании, подразумевает использование наклона логарифма тока от времени, в гальваностатическом – наклона потенциала от корня из времени. Но возможны и другие варианты. Ниже приведен список автоматически рассчитываемых программой SmartSoft параметров, с их описанием.

Таблица 5. Типы данных, рассчитываемые для построения кривой прерывистого титрования.

Тип рассчитываемого параметра	Описание
E-релакс	Значение потенциала в момент окончания фазы релаксации (потенциал релаксации)
E-стационар	Значение потенциала в момент окончания фазы поляризации (ступени потенциала или импульса тока), (стационарный потенциал)
I-стационар	Значение тока в момент окончания фазы поляризации, (стационарный ток)
Delta(E-стационар)	Перепад стационарного потенциала между соседними импульсами тока
Delta(E-под током)	Изменение потенциала за одну фазу поляризации (изменение потенциала за один импульс тока)
Delta(E-релакс)	Изменение потенциала релаксации за одну фазу релаксации (изменение потенциала за одну релаксацию)
$[\Delta(E\text{-стац})/\Delta(E\text{-под током})]^2$	Отношение перепадов соответствующих потенциалов в квадрате
$[\Delta(E\text{-релакс})/\Delta(E\text{-под током})]^2$	Отношение перепадов соответствующих потенциалов в квадрате
$dE/d[(t)1/2]$	Наклон потенциала в зависимости от корня из времени. Отсчет времени для расчета этого типа, начинается с нуля, индивидуально для каждого импульса тока (моменту начала каждого импульса назначается время = 0 при выполнении этого расчета для каждого импульса. Сам же наклон считается в интервале, заданном пользователем)
$d[\log(i)]/dt$	Наклон десятичного логарифма тока от времени

Для горизонтальной оси пользователь также может выбрать наиболее удобный ее тип для вывода кривой титрования:

- **t-стационар** – значение времени в момент окончания импульса тока (ступени потенциала);
- **E-стационар** – значение потенциала в тот же момент;
- **Заряд** – значение заряда в тот же момент;
- **SOC** – State Of Charge. Степень заряженности образца. Принимается, что ста процентам SOC соответствует заряд на момент, перед самым началом обратного хода (или сразу после

окончания прямого хода). Все промежуточные и последующие значения SOC рассчитываются как отношение текущего значения заряда к заряду при SOC_{100%}. На обратном ходу SOC убывает.

- **100%-SOC** – перевернутые по горизонтальной оси данные по сравнению с предыдущей осью. Полезно для более удобного отображения процентов SOC для ситуации, когда исходно аккумулятор был заряжен, и на прямом ходу он разряжается.

Для дополнительного удобства, пользователь может включить использование нормирующего коэффициента и ввести его Применить множитель по Y для расчета и вывода на диаграмму того или иного параметра сразу в нужных ему единицах (например, в виде того же коэффициента диффузии, однако сами единицы измерения от этого на вертикальной оси не изменятся, но все рассчитываемые значения будут умножены). После этого, можно сделать принтскрин диаграммы с кривой титрования и сохранить или скопировать из таблицы справа сами данные для сторонней обработки .

Программное обеспечение SmartSoft не рассчитывает коэффициенты диффузии напрямую в их единицах измерения ввиду того, что методики ПИТ и ГИТ являются не самыми простыми. Ученые же, использующие их, как правило, являются хорошими специалистами и лучше знают, какой расчет и как применить, для максимально точного описания именно их электрохимической системы. Также программе неизвестны некоторые, необходимые для таких расчетов, параметры образца. Если Вы являетесь одним из таких специалистов, и Вам необходим метод расчета, отсутствующий в SmartSoft, напишите нам в службу поддержки по адресу potentiostat@mail.ru приложив Ваши методы расчетов и статьи с ними (статьи любых авторов необходимы для обоснования). Мы обязательно разберемся в них и постараемся включить их в SmartSoft, поставив в план на ближайший апгрейд программного обеспечения.

Сами по себе режимы ПИТ и ГИТ, альтернативно, можно при желании собрать в программаторе SmartSoft, а используя возможности отчетной таблицы, построить и кривую титрования. Однако, отдельный специализированный режим понятнее и удобнее в работе. Помимо этого, при необходимости, ПИТ можно использовать для создания простого ступенчатого потенциостатического режима и регистрации стационарной ВАХ вместо кривой титрования, а также для других, подходящих под программы поляризации ПИТ и ГИТ целей.

6.17. Пустой режим

The screenshot shows a software window titled '6.17. Пустой режим'. At the top, there are several tabs: 'Основное', 'Прибор', 'Запуск', 'Условия', 'Множители', and 'R-омическое'. The 'Основное' tab is selected. Below the tabs, there is a label 'Время работы' followed by a text input field containing the number '1' and a unit 'с'. Below this is a checkbox labeled 'Регистрировать данные', which is currently unchecked. A large text area below contains the following text: 'Это пустой режим. В нем прибор переключится на внутреннюю ячейку, полностью отключившись от внешней, чтобы с ней мог безопасно работать другой прибор или канал. Данные могут регистрироваться на внутренней ячейке в количестве 100 точек на всю длительность работы, или нет. На внутренней ячейке будет выбран потенциостатический режим 0 В.'

Параметры пустого режима.

Пустой режим существует для того, чтобы освободить подключенную к потенциостату электрохимическую ячейку для другого прибора на заданное время. Потенциостат при этом переключится на внутреннюю ячейку. Исследуемый объект же станет доступен для другого прибора и не будет подключен к рассматриваемому каналу SmartStat. В качестве такого прибора также может выступать другой канал (гальванически развязанный или нет) этого же потенциостата. До этого, наоборот он может находиться в исполнении пустого режима.

Единственным параметром пустого режима является длительность его работы. В ходе нее потенциостат задаст на внутренней ячейке потенциостатический сигнал 0 мВ. При этом он может регистрировать данные для синхронизации с остальными данными, или нет (со скоростью регистрации из расчета 100 точек данных на весь интервал пустого режима).

7. Программатор SmartSoft

Шаг	Описание шага	Время, с	Память, %	Повторение в циклах
1	Стационарный: Гальваностат, -3000 мА, 6000 с. Закончить текущий шаг при < 2800 мВ	600000	7,322	Во всех циклах
2	Стационарный: Потенциостат, 0 мВ, 100 с	10000	7,322	Во всех циклах
3	Стационарный: Гальваностат, 3000 мА, 6000 с. Закончить текущий шаг при > 4250 мВ	600000	7,322	Во всех циклах
4	Стационарный: Потенциостат, 0 мВ, 10 с	1000	1,9051	Во всех циклах
5				Не выполняется
6				Не выполняется
7				Не выполняется
8				Не выполняется
9				Не выполняется
10				Не выполняется
11				Не выполняется

<input type="button" value="Редактировать шаг"/> <input type="button" value="Удалить шаг"/> <input type="button" value="Удалить все"/>	Всего будет сохранено циклов 100 Будут сохранены циклы под номерами (программный / физический): 1 / 1 2 / 2 3 / 3 ... 98 / 98 99 / 99 100 / 100 Время работы программатора: 1211000 с (336Час,
<input type="button" value="Копировать ш."/> <input type="button" value="Вставить шаг"/> <input type="button" value="Вставить в след."/>	
Количество циклов программатора: <input type="text" value="10"/>	
Сохранять первый цикл из каждых <input type="text" value="1"/>	
Не зацикливать первых шагов <input type="text" value="0"/>	
Повторить весь программатор раз <input type="text" value="10"/>	
<input checked="" type="button" value="Применить"/> <input type="button" value="Сохранить"/> <input type="button" value="Открыть"/>	

Программатор SmartSoft.

Режим программатора служит для последовательного выполнения нескольких простых режимов. Они при этом называются шагами программатора. Всю последовательность шагов (можно и не всю) можно повторить несколько раз. Каждый такой повтор называется циклом работы. Максимальное количество шагов составляет 50.

В верхней части программатора расположена таблица, которую пользователь заполняет нужными ему шагами (можно с пропусками, но крайне нежелательно, тк при просмотре и обработке будет сложно разбираться в полученных данных). Чтобы отредактировать нужный шаг, можно выделить его строку и нажать кнопку . Или можно просто сделать двойной щелчок мышью по нужной строке. При этом окно программатора скроется, а вместо него появится редактор простых режимов работы, но в нем при этом будет (в верхней его части) указано, что сейчас

Сейчас редактируется:

редактируется такой-то шаг программатора Шаг программатора N 1. Отредактировав выбранный простой

режим (шаг) работы, нужно нажать, как обычно, кнопку в редакторе, а затем можно

перейти обратно в программатор, нажав кнопку :

Сейчас редактируется:
Шаг программатора N 1

Компоненты канала 1
FRA отсутствует
АиХ выключен
АиХ выведен на интерфейс
Интерфейс не подключен

Стационарный

Вернуться в программатор

✓ Применить

Сохранить

Открыть

Основное **Прибор** Запуск Условия Множители R-омическое

Задаваемое значение мВ

Отн.последнего

Время работы с

Редактор простых режимов при создании или правке шага программатора.

В нижней части программатора находится шесть кнопок манипуляций с ним – удаления шага, копирования и тп. Перед выполнением действия с шагом, сначала нужно выбрать его строку. После окончания редактирования рабочей программы, нужно нажать кнопку **✓ Применить**. Как и с простыми режимами, собранный программатор можно сохранить **Сохранить** для дальнейшего использования или загрузки в планировщик (он описан далее).

Количество циклов программатора задается в поле **Количество циклов программатора** . Максимальное количество физически выполняемых циклов составляет один миллион. Программно же может быть сохранено только 500 или 2000 циклов (зависит от сери прибора SmartStat). Часть циклов будет выполнена физически, но не сохранена (будут регулярно пропущены при сохранении). Для задания их количества служит опция **Сохранять первый цикл из каждых** . В окне сообщений, справа от этих элементов, будет выведена информация о том, какие номера физических циклов будут сохранены:


Редактировать шаг	Удалить шаг	Удалить все	Всего будет сохранено циклов 100 Будут сохранены циклы под номерами (программный / физический): 1 / 1 2 / 2 3 / 3 ... 98 / 98 99 / 99 100 / 100 Время работы программатора: 1211000 с (336Час,
Копировать ш.	Вставить шаг	Вставить в след.	
Количество циклов программатора	<input type="text" value="10"/>	▲▼	
Сохранять первый цикл из каждых	<input type="text" value="1"/>	▲▼	
Не зацикливать первых шагов	<input type="text" value="0"/>	▲▼	
Повторить весь программатор раз	<input type="text" value="10"/>	▲▼	
✓ Применить	Сохранить	Открыть	



Нижняя часть программатора (в этом примере будут выполнены, но не будут сохранены четные циклы).

Помимо этого, несколько первых шагов могут быть выполнены только в первом цикле работы программатора, а в остальных циклах эти шаги повторяться (зацикливаться) не будут. Для этого служит опция **Не зацикливать первых шагов** . Ее текст синего цвета, чтобы соответствующие первые шаги (при необходимости, их может быть и ноль) тоже для наглядности выделялись синим цветом на фоне зацикливаемых черных, в таблице программатора. В этой

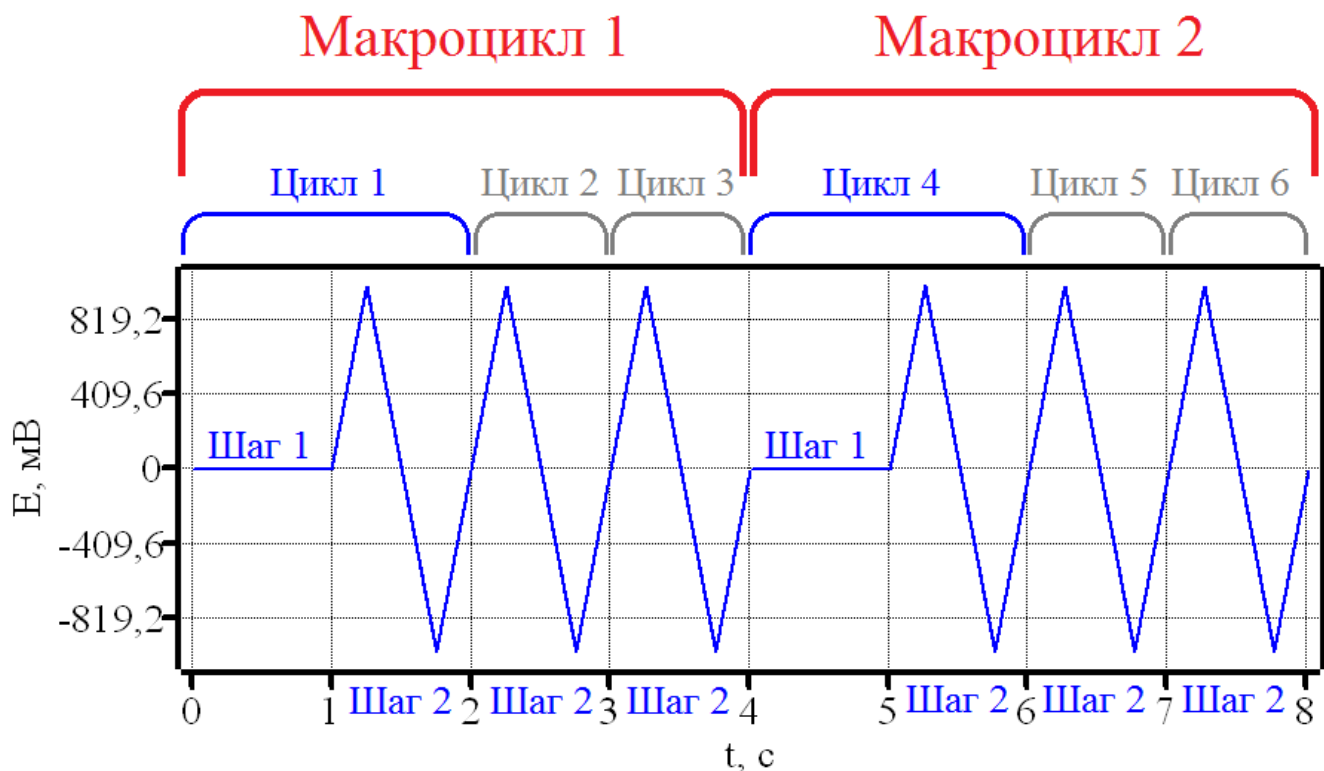
таблице будет также указано, зацикливается шаг или нет. Кроме этого, в ней будут приведены количества расходуемых на шаг памяти и времени работы.

Если программа использует много шагов, то загрузка их в прибор при запуске работы, может занимать некоторое время (первично, у пользователя даже может создаться впечатление, что программа подвисла, хотя на самом деле это не так).

Начиная с версии прошивки приборов 2.EX2 имеется возможность повторить заданное число раз сам программатор. Эти повторы называются макроциклами. Один макроцикл представляет собой работу всего программатора в том виде, как это было описано до сих пор - незацикливаемые шаги + повторенная нужное число раз последовательность зацикливаемых шагов. Параметр **Повторить весь программатор раз**  позволяет задать количество макроциклов, то есть то, сколько раз нужно повторить весь программатор. Итоговое количество циклов будет равно: количество циклов программатора умножить на количество макроциклов (пропуски сохранения будут рассчитываться на это итоговое количество циклов). В самом простом случае, когда используется только один макроцикл, получается режим обычного программатора.

Режим с макроциклами может быть полезен, например, при состаривании (циклировании) аккумуляторов. Положим, в качестве первых нескольких шагов используется некая тестовая последовательность: измерение импеданса, снятие нагрузочной характеристики или иная техника, позволяющая оценить состояние аккумулятора измерив основные его параметры каким-то относительно сложным или длительным методом, который нет смысла повторять на каждом цикле состаривания. Далее идет последовательность шагов состаривания, состоящая из циклического заряда-разряда, повторенная (зацикленная) параметром **Количество циклов программатора** ) например 10 раз. Этот пример представляет собой пока один макроцикл. Его можно повторить, например 100 раз с помощью параметра **Повторить весь программатор раз** . В итоге получится 1000 циклов состаривания и через каждые 10 из них будет выполнена диагностика, построенная на незацикливаемых шагах.

Далее приведен пример настроек программатора с макроциклами и диаграмма работы, получившаяся в результате его выполнения. В этом примере создан программатор, в котором первый шаг, это стационарный режим, повторяемый один раз (незацикливаемый). В качестве второго шага использован один цикл циклической развертки потенциала, который уже повторяется три раза (в циклах 1, 2 и 3 в качестве 2го шага). Задано два макроцикла, то есть два повтора всего программатора. В результате первый макроцикл состоит из трех циклов, и только в первом из них повторяется стационарный режим, который находится в первом цикле в качестве первого шага. В первом цикле также находится и второй шаг - ЦВА. В последующих циклах 2 и 3, первого стационарного шага нет, есть только по одному циклу ЦВА. Второй макроцикл идентичен первому.



Шаг	Описание шага	Время, с	Память, %	Повторение в циклах
1	Стационарный: Потенциостат, 0 мВ, 1 с	1	0,1142	Только в цикле 1
2	Циклическая развертка: Потенциостат, Старт=0мВ, Макс=1000мВ, Мин=-1000мВ, Развертка=4000мВ/с	6	0,6852	Во всех циклах
3				Не выполняется
11				Не выполняется

Количество циклов программатора:

Сохранять первый цикл из каждых:

Не зацикливать первых шагов:

Повторить весь программатор раз:

Всего будет сохранено циклов 6

Будут сохранены циклы под номерами (программный / физический):

1 / 1

2 / 2

3 / 3

4 / 4

5 / 5

6 / 6

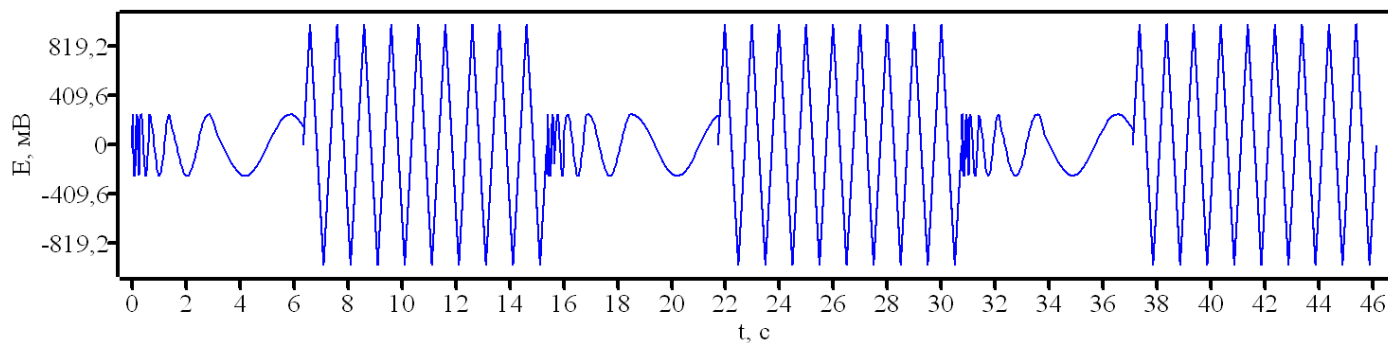
Время работы программатора: 7 с

Использовано памяти (%): 0,7994

Пример настроек программатора и результата его работы.

В более сложном случае, количество циклов программатора может быть увеличено до 10-100 (и более, до 1 миллиона), а в качестве первого шага может быть использован режим измерения импеданса, выполняемый с целью оценки состояния подключенного объекта, меняющегося в ходе циклирования. Количество макроциклов также может быть задано (к примеру) от 10 до 100 (и более - до 500 для профессиональных и лабораторных серий, и 2000 для индустриальной серии SmartStat). Незацикливаемых шагов может быть несколько.

Ниже приведен еще один пример работы программатора с макроциклами:



Пример результата работы программатора, в котором первый незацикливаемый шаг - это электрохимический импеданс (амплитуда для наглядности сильно завышена), далее следуют 9 циклов ЦВА в качестве второго шага, то есть параметр «Количество циклов программатора» имеет значение 9. И всего сделано 3 повтора программатора, то есть выполнено 27 циклов ЦВА.

Некоторые простые режимы (которые сами по себе могут состоять из нескольких циклов), при использовании их в программаторе, имеют ограничение по объему их выполнения. К ним относятся режим ЦВА и оба импульсных режима – произвольный импульс и импульсная развертка. Все эти три режима, при использовании их в программаторе, смогут выполнить только по одному циклу (или импульсу), в противном случае было бы непонятно, о какой цикле идет речь - о цикле развертки или цикле программатора. Если вам не подходят указанные ограничения, воспользуйтесь режимом планировщика (он описан далее).


Переключение между циклами и шагами программатора занимает некоторое (не всегда точно определенное, от 1 до 10 мс) время. Оно нужно для считывания параметров шага из памяти, их обработку и загрузку нужных параметров в процессор развертки (управления ЦАП-ом) для выполнения следующего шага. Это обстоятельство необходимо учитывать при использовании скоростных режимов. По этой причине, например, несколько выполненных подряд циклов ЦВА из простого режима ЦВА, это не совсем то же самое, что те же циклы ЦВА (с теми же параметрами), но выполненные в качестве шагов программатора. При выполнении подряд нескольких циклов ЦВА (из одного простого режима), развертка никогда не останавливается. При выполнении же шагов или циклов программатора, она будет останавливаться между шагами и циклами, что приведет к спаду тока и искажению вольтамперограммы в начале ее выполнения на каждом цикле.

Если в программаторе подряд выполняются два шага или цикла в одном и том же режиме прибора (например, оба потенциостатические, не важно стационарный или развертка или иной был до или после), и в последующем цикле (шаге) используется автоматический диапазон тока, то в нем будет использован диапазон тока от предыдущего шага (цикла), чтобы минимизировать количество переключений.

Для программатора становится актуален режим задания потенциалов относительно последнего . Потенциал, заданный таким образом, будет задаваться относительно последнего потенциала, зарегистрированного в предыдущем шаге или цикле работы (причем не важно, например, стартовый ли это потенциал развертки или ее вершина). Например, ведется заряд

аккумулятора до потенциала 4200 мВ. По каким-то причинам (задали недостаточно времени или аккумулятор испорчен), на первом гальваностатическом шаге этот потенциал не был достигнут, и шаг закончился на потенциале лишь в 4000 мВ (округлим для примера). Если в последующем потенциостатическом дозарядном шаге пользователь введет абсолютно 4200 мВ, то получится резкий скачек потенциала в 200 мВ, что может быть плохо как для прибора (возможна перегрузка по току на аккумуляторе с низким импедансом), так и для аккумулятора (это может вызвать в нем необратимую деградацию). Если же использовать потенциостатическую дозарядную стадию с потенциалом 0 мВ относительно последнего (зарегистрированного, который был 4000 мВ), то прибор задаст 4000 мВ (с точностью до небольшой погрешности) и никаких скачков тока не возникнет. Также, такие шаги не зависят, как правило, от того, выполняются ли они на зарядном или разрядном ходе, поэтому их удобно копировать друг в друга на стадии создания программы.

В только что запущенном программном обеспечении SmartSoft, не использованный до этого программатор, в качестве исходных параметров шагов, будет использовать параметры этих же простых режимов, когда они были созданы сами по себе, без программатора. Если же шаг программатора был создан и применен, то программатор будет редактировать именно его до перезапуска программы.

Если в программаторе используются однотипные шаги (например, измерение идентичных спектров импеданса при разных значениях потенциала, или просто друг за другом, например по ходу разрядной кривой аккумулятора через заданное количество пропущенного заряда), то их удобно клонировать при помощи кнопки  (вставить в следующий). Выбранный шаг при этом автоматически перейдет в следующий шаг и скопирует в него выделенный шаг (перед нажатием этой кнопки, нужно выбрать копируемый шаг).

8. Планировщик SmartSoft

Прибор Работа **Диаграмма** Обслуживание

В планировщике каждая строка соответствует одному рабочему файлу единичного режима (*.swf) или файлу программатора (*.spf).
Эти файлы необходимо предварительно создать и сохранить в редакторе единичных режимов или в программаторе для подключенного прибора.
Созданная в планировщике суммарная рабочая программа будет вся загружена в прибор при запуске работы.
Прибор автоматически последовательно выполнит все открытые файлы.
В процессе работы, на диаграмме и в памяти программного обеспечения будут присутствовать данные, соответствующие работе только одного последнего выполняемого рабочего файла.
Данные, зарегистрированные для каждого рабочего файла, будут автоматически сохранены в своем отдельном файле данных *.edf.
В название каждого файла данных *.edf будет автоматически добавлено название выполняемого файла (единичного режима или программатора).

Номер	Файл	Время, с	Память, %
1		0	0
2		0	0
3		0	0
4		0	0
5		0	0
6		0	0
7		0	0
8		0	0
9		0	0
10		0	0

Выбрать файл Удалить файл Планировщик пуст

Внешний вид планировщика.

Внешне планировщик похож на программатор. В нем каждая строка соответствует одному рабочему файлу работы, который был ранее создан и сохранен либо в редакторе простых режимов (файл swf – SmartStat Work File) или в программаторе (файл spf – SmartStat Programmer File). Для того, чтобы добавить файл в строку, нужно выбрать строку и нажать кнопку либо сделать двойной щелчок по нужной строке. Выделенную строку с файлом можно удалить . Важно, чтобы строки были заполнены без пропусков.

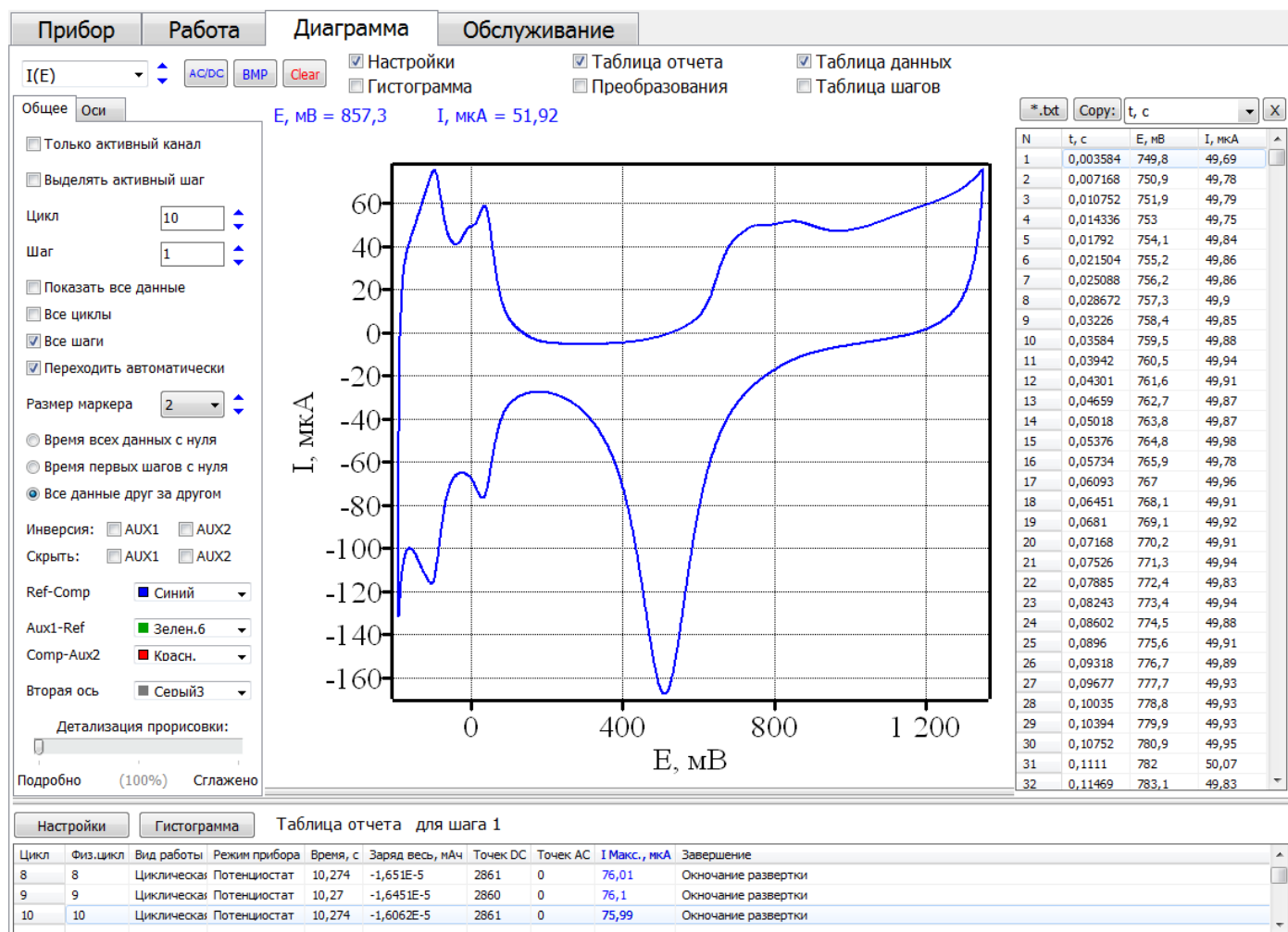
При запуске работы, программа SmartSoft загрузит в прибор выбранные программы (это может занять время, прогресс загрузки будет выводиться в виде сообщений на основной вкладке Прибор, которую пользователь видит при запуске программы). Далее прибор начнет по очереди выполнять каждый загруженный файл работы. При этом на диаграмму будут выводиться регистрируемые данные, а по завершению каждого загруженного в планировщик файла работы, они будут сохраняться и резервироваться (как обычно под сквозным номером). Сохранение будет выглядеть следующим образом: в назначенной папке автосохранения, программой будет создана папка с названием эксперимента. В нее будут сохраняться файлы с данными, индивидуально для каждого выполненного рабочего файла планировщика. При этом название каждого файла будет составлено из общего для всех названия, заданного пользователем, и названия рабочего файла планировщика. Как только данные одного рабочего файла будут загружены, работа этого файла завершена и данные сохранены, программное обеспечение будет очищено от этих данных, и

начнется выполнение следующего рабочего файла, и на диаграмме будут только данные этого следующего файла. По окончании всей работы, на диаграмме, таким образом, будут представлены данные только последнего файла планировщика. В поле же сообщений (меню в верхней части программного обеспечения слева, над таблицей каналов в версии 2.180 и выше) будет выведена информация о завершении работы и сохранении данных каждого рабочего файла:



Поле сообщений, в котором выводится информация о завершенном эксперименте.

9. Основная диаграмма






Внешний вид основной диаграммы с панелью настроек (слева), таблицей данных (справа) и отчетной таблицей (внизу).

Основная диаграмма служит для отображения всех данных, полученных в последнем (текущем) эксперименте (или открытых из файла данных). Пользователь может выбрать любой из следующих видов осей диаграммы (более 40 видов):

А	Б	В
I(E)	Re(F)	SPD-E(F)
E(t)	Im(F)	SPD-I(F)
I(t)	Im(Re)	logSPD-E(F)
E(I)	Z (F)	logSPD-I(F)
I(E)	Phase(F)	Distrib(E)
P(t)	C--(F)	Distrib(I)
Q(t)	C (F)	
P(E)	R (F)	
Q(E)	Re(E)	
E(Q)	Im(E)	
E (log(I))	Re(I)	
log(I) (E)	Im(I)	
log(E) (t)	Z (E)	
log(I) (t)	Z (I)	
log(I)log(E)	1/C2(E)	
E([t]1/2)	Re(t)	
I([t]1/2)	Im(t)	
	Z (t)	
	log Z (F)	

Меню выбора осей диаграммы. Весь список разделен для наглядности на три части – по постоянному току (А) и по переменному току (Б), анализ электрохимических шумов (В).

Среди возможных типов осей сначала идут постоянноточковые (ток, потенциал, заряд и тп), а затем оси для отображения переменноточковых - импеданса (мнимая и действительная части, емкости и тп) и результатов анализа электрохимических шумов. Между ними можно быстро переключаться при помощи кнопки . Программное обеспечение помнит о том, какие оси в последний раз использовались в текущем ее запуске для отображения постоянноточковых данных, а какие для переменноточковых, и нажатие этой кнопки будет приводить к быстрой их смене друг на друга.

При помощи кнопки  можно сохранить текущий внешний вид диаграммы в bmp-файл картинкой. Кнопка  позволяет удалить все данные из активного канала, в случае, например, если они более не представляют интереса и мешают просмотру данных с других каналов.

Существует 10 типов осей, которые тракуются программой как переменноточковые, хотя содержат оба типа данных (DC и импеданс) и строят зависимости параметров импеданса (мнимой и действительной части, модуля и фазы, а также квадрата обратной последовательной емкости) от постоянноточковых значений (тока и потенциала, а также времени).

На диаграмме можно выделить нужную область для более детального просмотра (зума). Для этого выделение нужно выполнять движением указателя мыши из левого верхнего угла в правый нижний. Обратное движение вернет диаграмму в исходный вид. Зум можно выполнить только когда не выполняется работа. Во время же выполнения работы, программа перерисовывается принудительно автоматически, для вывода вновь поступающих данных на автоматический масштаб всех имеющихся данных. При необходимости, вы можете вручную задать нужные вам пределы осей в настройках диаграммы в любой момент (будет описано далее).

В левой части вверху диаграммы выводятся координаты точки, в которой был произведен последний клик мышью: $t, c = 2,2238$ $E, mB = -53,73$. То есть вы можете просто кликнуть мышью в любую точку на диаграмме (или даже в пустое место на ней) и программа выдаст вам ее координаты в текущих основных осях (для основной оси, расположенной слева. Правая ось, если и видна, то таким образом не обрабатывается).

В зависимости от того, какой тип осей выбран, пользователю иногда будет предлагаться вывод данных со второй вертикальной осью. В некоторых случаях, комплементарных данных (ток – потенциал, действительная – мнимая части импеданса, емкость – сопротивление) это бывает удобно. При этом дополнительно будет появляться быстрая настройка Вторая ось . Она расположена в одну линию с меню выбора типов осей, справа (если выбранные основные оси не предполагают второй оси, то эта опция будет скрыта, как на рисунке выше). Каждая ось будет выделена своим цветом, выбранным пользователем в настройках диаграммы слева от нее. Этим же цветом будут изображены на диаграмме и данные, соответствующие ей.

После данных импеданса следует 6 типов осей для анализа электрохимических шумов. Если выбрать один из них, то исходно никаких данных отображено не будет, так как их сначала нужно рассчитать (лучше это делать по завершению эксперимента или для открытых данных). Для этого

появится небольшая дополнительная панель (справа сверху над диаграммой)

Расчет СПМ: Период (точек) Вычисть дрейф

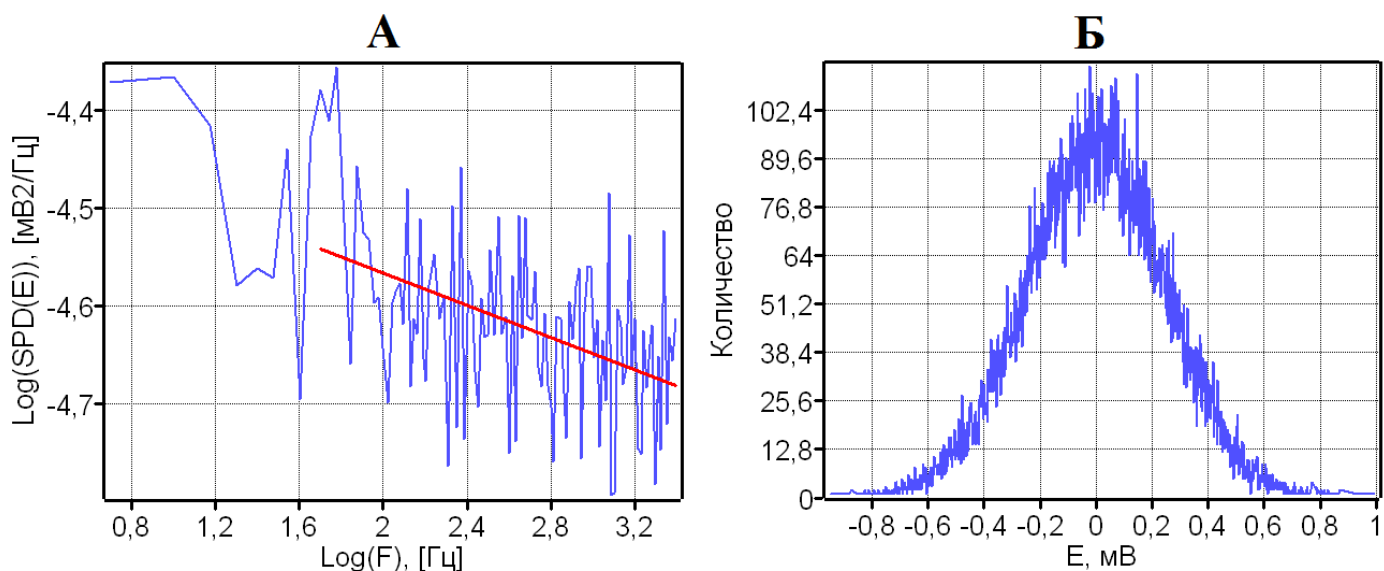


. Перед выполнением расчета необходимо выбрать длину усредняемого периода и при необходимости включить вычитание

дрейфа. После этого можно нажать кнопку и расчет будет произведен (это может занять время и визуально при этом ненадолго подвесить программу).

По его завершению соответствующие результаты будут выведены на диаграмму и в таблицу данных справа, если она включена (из нее вы потом сможете скопировать все рассчитанные данные для сторонней обработки). Анализировать можно данные по току и потенциалу. Нажатие кнопки расчета приводит к расчету сразу всех 6 видов диаграмм (то есть, после одного выполненного расчета, вы сможете свободно переключаться между

всеми шестью типами осей анализа шумов). При нажатии кнопки будет выполнен расчет по всем имеющимся данным активного канала (по всем шагам во всех циклах, в которых количество точек данных больше одной). Если имеются данные по Аух каналам, то они тоже будут обработаны.



Примеры диаграмм с результатами обработки электрохимических шумов: А - частотная зависимость спектральной плотности мощности (СПМ) шумов по потенциалу (красная линия аппроксимации настраивается и выводит значение своего наклона в таблице отчета под диаграммой). Б – диаграмма распределения шумов по потенциалу.

Выбор значения параметра Период при расчете СПМ: в этом случае данные одного шага и цикла (например, второй шаг пятого цикла или любой другой, данные которого вас интересуют) рассматриваются программой SmartSoft как один обрабатываемый массив. Он делится ею на отрезки, длина которых равна периоду (который и задает пользователь). Расчет спектра СПМ (путем Фурье-анализа) выполняется в каждом отрезке индивидуально, а потом, полученные спектры усредняются и отображаются на диаграмме. Чем короче период, тем больше усреднений и тем менее зашумленным получается спектр (обычно приемлемый вид спектров получается при усреднениях выше 10). Но длина периода также обратно пропорциональна минимальной частоте в спектре

(коэффициент пропорциональности при этом, это скорость регистрации обрабатываемых данных, ее можно взять из таблицы данных справа, как обратное значение времени между соседними точками), то есть, чем короче период, тем выше усреднение, но и выше нижний частотный предел. Разумный подход состоит в том, чтобы выбрать сначала нижний частотный предел, сообразно тому, какие данные вы исследуете (на сколько они стационарны, то есть, на сколько целесообразен тот или иной нижний частотный предел для рассмотрения), затем подобрать скорость регистрации данных (еще перед измерением) и длину массива. Верхний частотный предел при этом обратно пропорционален удвоенному периоду регистрации данных (равен половине скорости регистрации). Также рекомендуется выполнить несколько вариантов расчетов с разными параметрами периода и выбрать лучший по приемлемой зашумленности и максимально низким нижним частотным пределом.

Выбор значения параметра «Период» при расчете данных диаграммы распределения: в этом случае, в ходе выполнения расчетов, программой SmartSoft на первой стадии выполняется разбиение всего динамического диапазона (вычисленного размаха от минимума до максимума) исследуемого сигнала в массиве данных на сегменты, количество которых, равно параметру Период. Далее программа сканирует исследуемый массив, и в зависимости от того, в какой сегмент попадает та или иная точка данных, инкрементируется количество (отображаемое на вертикальной оси) для того или иного сегмента. Далее программа строит эти количества по вертикальной оси, а значения (по потенциалу или току) сегментов по горизонтальной (а также выводит полученные цифры в таблицу данных справа от диаграммы). То есть, чем длиннее период, тем лучше разрешение по горизонтальной оси, но тем зашумленнее получается диаграмма распределения. Рекомендуется подобрать этот параметр самостоятельно под заданный тип исследуемых объектов и количество точек данных.

Обработку методами электрохимических шумов рекомендуется использовать на массивах, длиной от 10 тысяч точек данных. Длинные массивы дольше обрабатываются. Во время обработки (выполнения расчета после нажатия кнопки его запуска) в левой части диаграммы, над ней будет отображаться номер выполняемого усреднения, а по окончании выведено сообщение об окончании расчетов: **Закончил! Всего усреднений: 30** .

Элемент управления **Вычитать дрейф** используется при расчете СПМ следующим образом, когда он включен: в каждом усредняемом отрезке выполняется индивидуальная аппроксимация прямой, после чего полученная прямая вычитается из данных этого отрезка. Эта процедура продлевается в каждом усредняемом отрезке индивидуально. При расчете данных диаграммы распределения, такая же линейная аппроксимация выполняется один раз на всем обрабатываемом массиве данных (индивидуально в каждом шаге и цикле). В случае диаграмм распределения, она при этом оказывается центрирована относительно нуля по горизонтальной оси (если, конечно, она симметрична).

Степень адекватности вычитания дрейфа таким способом, зависит от длины периода, который задает пользователь. При его подборе рекомендуется постепенно повышать длину периода от

некоторого стартового значения (например, 100 для массива из 10 тысяч точек, что соответствует усреднению в 100 раз и размаху частотного диапазона спектра в 50 раз) и следить за низкочастотным поведением спектра (нижний частотный предел будет постепенно опускаться вниз по мере удлинения периода в проведении нескольких последовательных пробных расчетов). С того момента, как он начнет заметно искажаться (сильно меняться его наклон, автоматически вычисляемый из таблицы отчета), продвижение вниз по частоте стоит остановить и откатить до момента, пока еще искажения были приемлемы или их не было (уменьшить величину параметра Период).

Забегая вперед, стоит упомянуть, что такие параметры шума, как среднеквадратичное отклонение, дисперсию, эксцесс и асимметрию (последние два явно характеризуют диаграмму распределения, а первые два - уровень спектра СПМ) автоматически рассчитывает таблица отчета в качестве одного из вариантов специального параметра. Подробное описание приведено в соответствующем разделе настоящего руководства. Там же описано и то, как выполнять автоматическую аппроксимацию наклонов спектров СПМ прямыми.

Спектральный анализ шумов можно применять к любым данным для поиска в них наводок, которые проявят себя как острые пики на частотах 50 и 100 Гц. В плохих случаях эти пики расплзутся и могут даже слиться друг с другом.

Независимо от того, какой основной тип обработки электрохимических шумов вы используете (в ходе последующей самостоятельной обработки), рекомендуется в первую очередь проверить ваши данные на спектральном анализе на предмет наличия в них наводок.

За дополнительными разъяснениями о том, как измерять и обрабатывать электрохимические шумы, вы можете обратиться к следующим публикациям (или в техническую поддержку SmartStat):

1. E. A. Astafev, A. E. Ukshe, E. V. Gerasimova, Yu. A. Dobrovolsky, R. A. Manzhos, Electrochemical noise of a hydrogen-air polymer electrolyte fuel cell operating at different loads, *Journal of Solid State Electrochemistry*, (2018), V. 22. Issue 6. P. 1839-1849, DOI 10.1007/s10008-018-3892-4
2. E. A. Astafev, A. E. Ukshe, Yu. A. Dobrovolsky, The Model of Electrochemical Noise of a Hydrogen-Air Fuel Cell, *Journal of The Electrochemical Society*, 165 (9) (2018), F604-F612, DOI: 10.1149/2.0251809jes
3. E. A. Astafev, Electrochemical noise measurement of a Li/SOCl₂ primary battery, *Journal of Solid State Electrochemistry*, (2018), V. 22. Issue 11. P. 3569-3577, DOI: 10.1007/s10008-018-4067-z
4. E. A. Астафьев, А. Е. Укше, Л. С. Леонова, Р. А. Манжос, Ю. А. Добровольский, Детрендинг и другие особенности обработки данных при измерении электрохимических шумов, *Электрохимия*, 2018, Т. 54, № 8S, с. S48-S58, DOI: 10.1134/S0424857018120034 [E. A. Astafev, A. E. Ukshe, L. S. Leonova, R. A. Manzhos, Yu. A. Dobrovolsky, Detrending and Other Features of Data Processing in the Measurements of Electrochemical Noise, *Russ. J. Electrochem.*, 2018, Vol. 54, No. 12, p. 1117-1125, DOI: 10.1134/S1023193518120030]
5. E.A. Astafev, Electrochemical Noise Measurement Methodologies of Chemical Power Sources, *Instrumentation Science and Technology*, 2019, Volume: 47, Issue: 03, pages 233 – 247, DOI: 10.1080/10739149.2018.1521423
6. E. A. Астафьев, Программные и аппаратные способы повышения разрешения при регистрации электрохимических шумов, *Электрохимия*, 2018, Т. 54, № 12, с.1055-1069, DOI: 10.1134/S0424857018130078 [E.A. Astafev, Software and instrumentation methods of enhancing the resolution in electrochemical noise measurement, *Russ. J. Electrochem.*, 2018, Vol. 54, No. 11, p.1031-1044, DOI: 10.1134/S1023193518130050]
7. E. A. Астафьев, Сравнение метода и аппаратуры электрохимического импеданса с методом измерения и анализа электрохимических шумов, *Электрохимия*, 2018, Т. 54, № 12, с. 1044-1054, DOI: 10.1134/S0424857018130066 [E.A. Astafev, Comparing the method and hardware for electrochemical impedance with the method of measuring and analyzing electrochemical noise, *Russ. J. Electrochem.*, 2018, Vol. 54, No. 11, p. 1022-1030, DOI: 10.1134/S1023193518130049]

8. E.A. Astafev, Wide frequency band electrochemical noise measurement and analysis of a Li/SOCl₂ primary battery, *Journal of Solid State Electrochemistry*, 2019, V. 23. Issue 2. P. 389-396 DOI: 10.1007/s10008-018-4151-4
9. E.A. Astafev, A.E. Ukshe, Peculiarities of Hardware for Electrochemical Noise Measurement in Chemical Power Sources, *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 2019, vol. 68, issue 11, pp 4412-4418. DOI: 10.1109/TIM.2018.2889232
10. Astafev E.A., The instrument for electrochemical noise measurement of chemical power sources, *Review of Scientific Instruments* (2019), vol. 90, issue 2, 025104-1–025104-7 doi: 10.1063/1.5079613
11. Astafev E.A., Electrochemical noise of a Li-ion battery: measurement and spectral analysis, *Journal of Solid State Electrochemistry*, 2019, Volume 23, Issue 4, pp 1145–1153, DOI: 10.1007/s10008-019-04209-5
12. Е.А. Астафьев, Измерение и анализ электрохимических шумов литий-ионного аккумулятора, *Электрохимия*, 2019, Т. 55, № 6, P. 654-662. DOI: 10.1134/S0424857019060033 [E.A. Astafev, Measurement and analysis of electrochemical noise of Li-ion battery, *Russ. J. Electrochem.*, 2019, Vol. 55, No. 6, P. 488-495. DOI: 10.1134/S102319351906003X]
13. Astafev E.A., Electrochemical noise of Li-ion battery: measurement with load-interrupt technique, *Journal of Solid State Electrochemistry*, 2019, Vol. 23, Number 5. P.1505-1512. DOI: 10.1007/s10008-019-04249-x
14. Astafev E.A., State of charge determination of Li/SOCl₂ primary battery by means of electrochemical noise measurement. *Journal of Solid State Electrochemistry*, 2019, Vol. 23, Number 5. P.1493-1504. DOI: 10.1007/s10008-019-04251-3
15. Astafev E.A., Wide frequency band measurement and analysis of electrochemical noise of Li/MnO₂ primary battery. *Journal of Solid State Electrochemistry*, 2019, Vol 23 issue 6 pp 1705-1713. DOI: 10.1007/s10008-019-04274-w
16. E.A. Astafev, Electrochemical noise measurement of a lithium iron(II) phosphate (LiFePO₄) rechargeable battery, *Instrumentation Science and Technology*, 2020, Vol. 48, N. 1, P. 75-85. DOI: 10.1080/10739149.2019.1658601
17. E.A. Astafev, Electrochemical noise of a lithium-ion battery during the charging process, *Instrumentation Science and Technology*, 2020, Vol. 48, N. 2, P. 162-172. DOI: DOI: 10.1080/10739149.2019.1674327
18. E.A. Astafev, Yu.A. Dobrovolsky, Relaxation electrochemical noise of Li/SOCl₂ and Li/MnO₂ primary batteries / *Journal of Solid State Electrochemistry*. – 2019. Vol. 23, Number 12, P. 3319-3328. – <https://doi.org/10.1007/s10008-019-04425-z>
19. Е.А. Астафьев, Сравнение различных подходов в анализе электрохимических шумов на примере водородно-воздушного топливного элемента, *Электрохимия*, 2020, Т. 56, № 2, P. 167-174, DOI: 10.31857/S0424857020020036 [E.A. Astafev, Comparison of Approaches in Electrochemical Noise Analysis Using an Air-Hydrogen Fuel Cell, *Russ. J. Electrochem.*, 2020, Vol. 56, No. 2, P. 156-162. DOI: 10.1134/S1023193520020032]
20. E.A. Astafev, The measurement of electrochemical noise of a Li-ion battery during charge-discharge cycling, *Measurement*, 2020, vol 154, DOI: 10.1016/j.measurement.2020.107492

9.1. Настройки диаграммы

Общие **Оси**

Только активный канал

Выделять активный шаг

Цикл ▲▼

Шаг ▲▼

Показать все данные

Все циклы

Все шаги

Переходить автоматически

Размер маркера ▲▼

Время всех данных с нуля

Время первых шагов с нуля

Все данные друг за другом

Инверсия: AUX1 AUX2

Скрыть: AUX1 AUX2

Ref-Comp ▼

Aux1-Ref ▼

Comp-Aux2 ▼

Вторая ось ▼

Детализация прорисовки:

(100%)

Подробно Сглажено

Панель настроек диаграммы, вкладка общих параметров.

Панель настроек диаграммы находится слева от нее и состоит из двух вкладок – общих параметров и параметров осей.

В общих параметрах первая опция **Только активный канал** управляет тем, будут ли отображаться данные всех каналов, или только активного канала. При одновременном отображении данных всех каналов, иногда бывает сложно в них разобраться и удобнее работать только с одним активным.

Следующая опция **Выделять активный шаг** управляет тем, будут ли данные активного шага выделены точками или нет. Все данные выводятся линиями, и только данные активного шага и цикла могут быть выделены точками.

Далее следует меню отображения и задания активного шага и цикла (в них пользователь может менять номера активного шага и цикла, или программа будет делать это сама по ходу эксперимента, это настраивается далее):

Цикл ▲▼

Шаг ▲▼

Меню отображения и изменения номеров активного шага и цикла.

Опция Все циклы управляет тем, будут ли отображены все циклы для активного канала, или только активный. На самом деле программа ограничена в одновременном выводе большого числа циклов данных и может вывести только по 5 циклов вперед и назад относительно активного цикла (например, от первого до 11-го цикла, если активен цикл номер 5).

Схожая опция Все шаги управляет тем, будет ли показан только активный шаг или все имеющиеся для активного цикла шаги.

Опция Переходить автоматически разрешает (когда включена) или запрещает (чтобы пользователь мог задать их сам) программе автоматически менять номера активных цикла и шага на используемые в данный момент в измерении (регистрируемые в работе в настоящий момент) в двойном меню, показанном на рисунке выше.

С помощью выпадающего меню Размер маркера можно быстро поменять толщину линий всех кривых на диаграмме, а также размер круглых маркеров (точек) активного шага и цикла.

Далее следуют три параметра, определяющие, как будут отображаться данные, состоящие из нескольких шагов и циклов, если горизонтальная ось это время. Если выбран вариант Время всех данных с нуля, то все имеющиеся шаги и циклы будут начинаться с нуля и будут выведены параллельно друг другу. Вариант Время первых шагов с нуля означает, что циклы, даже если они состоят из нескольких шагов, будут начинаться с нуля, а шаги в каждом цикле будут изображены последовательно друг за другом, согласно тому, как они выполнялись во времени. Вариант Все данные друг за другом означает, что все имеющиеся шаги и циклы будут выведены на диаграмму последовательно друг за другом по мере того, как они выполнялись во времени.

Опция Инверсия AUX данных позволяет умножить на минус единицу все данные (постоянноточковые и импеданса), соответствующие Aux входам. Необходимость этого действия зависит от того, как на исследуемой ячейке подключены потенциальные электроды.

Опция Не показывать Aux данные отключает отображение данных, полученных для Aux входов (постоянноточковых и переменноточковых). Это бывает нужно, когда данных очень много и они имеют сложную форму. Либо у них очень разный масштаб и просмотр всех их одновременно не удобен.

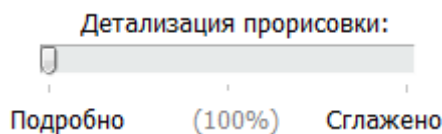
Далее следует несколько элементов, задающих цвета данных на диаграмме:

Ref-Comp	<input type="text" value="Серый2"/>
Aux1-Ref	<input type="text" value="Красн."/>
Comp-Aux2	<input type="text" value="Синий"/>
Вторая ось	<input type="text" value="Зелен.6"/>

Элементы выбора цветов данных на диаграмме.

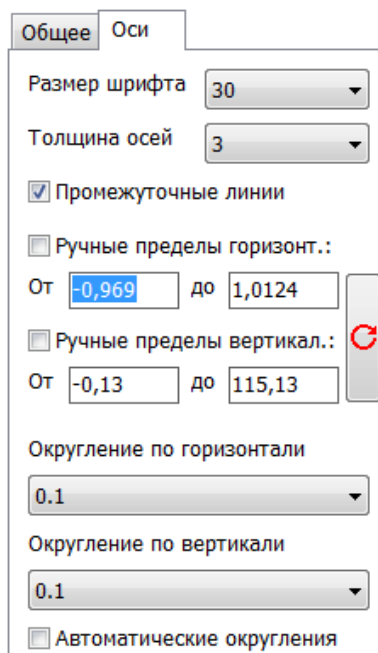
Основной цвет Ref-Comp также может быть выбран в таблице вывода подробной информации по всем каналам (он индивидуален для каждого из каналов подключенного прибора).

В том случае, когда имеется много зарегистрированных данных, их вывод на диаграмму и перерисовка может занимать заметное время. Чтобы ускорить этот процесс, можно отображать не все данные. Для этого используется опция:



Настройки отображения детализации диаграммы. При выбранном левом положении регулятора отображается максимальное количество данных. Справа - минимальное. Степень подробности отображается по середине в виде процента.

А их данные выводятся только для активного канала, так как вывод их для всех каналов, делает диаграмму нечитаемой из-за слишком большого количества одновременно отображаемых зависимостей.



Панель настроек диаграммы, вкладка настроек осей.


На следующей вкладке расположены элементы управления, отвечающие за то, как будут выглядеть оси на диаграмме.


Элемент **Размер шрифта** (30) задает размер всех шрифтов на диаграмме – названий осей и подписей маркеров на осях.

Элемент **Толщина осей** (4) задает толщину линий всех осей и маркеров на них.

Следующий элемент **Промежуточные линии** определяет, будут ли отображаться на плоскости диаграммы штриховые промежуточные линии от меток осей или нет.

Следующий набор элементов позволяет задать и настроить пределы осей вручную или автоматически:

Ручные пределы горизонт.:
От до 

Ручные пределы вертикал.: 
От до

Элементы настройки ручных пределов осей. Вертикальная кнопка справа позволяет перерисовать диаграмму с измененными пределами.

Далее следуют два однотипных элемента, позволяющих выбрать, до какой степени будут

Округление по горизонтали

округлены подписи меток горизонтальной оси и вертикальной оси

Округление по вертикали

. Соседняя с ними опция Автоматические округления позволяет сделать так, чтобы программа выбирала округления сама автоматически.

9.2. Панель Преобразования

Общие нормировки | AUX нормировки | AUX математика | Компенсация импеданса | IR-компенсация | Умножение | Добавление | Копирование | Тафель | Вычитание

Нормировки позволяют разделить все параметры, привязанные к количеству (ток, заряд, энергию, мощность, импеданс, сопротивление) на выбранный нормирующий коэффициент

Нормировать на количество образца (из атрибутов) (100 kg)

Дополнительная нормировка на: Ничего (отключена)

Отнормировать необратимо Необратимая нормировка выполняется для всех данных активного канала

Панель Преобразования, вкладка общих нормировок.

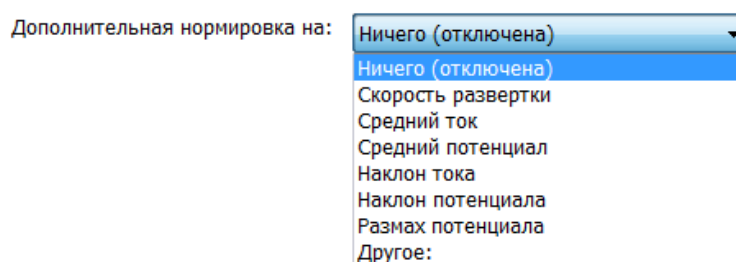
Панель Преобразования - это элемент обработки данных, который в более ранних версиях программного обеспечения SmartSoft находился во вкладке Нормировки настроек диаграммы. Он был выведен в самостоятельную панель, находящуюся под основной диаграммой для текущего и будущего расширения функционала обработки данных.

Панель Преобразования выводится под диаграммой, альтернативно таблице отчета. Она включается элементом Преобразования, который находится над диаграммой. Это достаточно мощный элемент управления внешним видом данных, представленных на диаграмме. Его настройки могут очень сильно изменить цифры, представленные на диаграмме.

9.2.1. Панель преобразования – Общие нормировки

Первая вкладка Общие нормировки, имеет единственную опцию Нормировать на количество образца (из атрибутов) (1 kg), связанную с атрибутами эксперимента – количеством образца и его единицами измерения (описаны выше, они вводятся перед запуском эксперимента, если нужны). При включении этой опции, все экстенсивные значения (ток, заряд, мощность, сопротивление, емкость и тп) выводятся на диаграмму и в таблицы нормированными (поделенными) на заданное перед экспериментом количество образца. Все подписи этих данных будут выведены на диаграмму и в таблицы, как удельные единицы (с выводом единиц измерения образца, например А/кг). Исходные данные при этой нормировке не затрагиваются и будут сохранены (при ручном сохранении) в исходном виде. Экспортировать же из таблиц можно отнормированные данные, так как действия нормировок распространяются и на них тоже.

Также из вкладки общих нормировок можно выполнить дополнительную нормировку данных:



Дополнительные нормировки: содержимое выпадающего меню со списком величин, на которые можно выполнить нормировку.

На рисунке выше показан список того, на какие величины может быть выполнена нормировка экстенсивных параметров при выводе на диаграмму и в таблицу. Исходные данные при этой нормировке не затрагиваются и будут сохранены (при ручном сохранении) в исходном виде. Экспортировать же из таблиц можно отнормированные данные.

Помимо этого, имеется возможность выполнить нормировку с преобразованием исходных данных, нажав кнопку Отнормировать необратимо. Необратимо отнормированные данные будут сохранены отнормированными.

9.2.2. Панель Преобразования – AUX нормировки

Следующий набор нормировок позволяет пользователю создать свои индивидуальные калибровки для постоянноточковых данных Aux входов. Это может быть полезно, например, если к ним (на прямоугольный разъем) подключено другое оборудование, сигналы или данные с которого нужно синхронизировать с данными тока и потенциала в ячейке.

Общие нормировки | **AUX нормировки** | AUX математика | Компенсация импеданса | IR-компенсация | Умножение | Добавление | Копирование | Табель | Вычитание

Нормировки для DC AUX (позволяют пересчитать напряжение, оцифрованное с внешнего устройства входом AUX, в единицы, соответствующие этому устройству):

Сдвиг AUX1 на Умножение AUX1 на

Сдвиг AUX2 на Умножение AUX2 на

Эти нормировки выполняются для всех данных всех каналов прибора

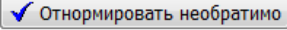
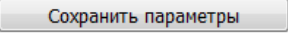
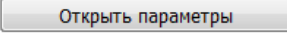

Калибровки постоянноточковых данных Aux входов в панели Преобразования.

При калибровке сигналов от внешних приборов и устройств, сначала нужно подобрать нули (сдвиг) при нулевом сигнале от внешнего устройства, чтобы данные Aux тоже отображались нулевыми. Затем на внешнем приборе необходимо задать какое-либо ненулевое значение, близкое к максимуму или половине полного размаха сигнала (разумеется, с учетом возможностей Aux входов, чтобы их не перегружать) и подобрать параметр умножения. Исходные данные при этой нормировке не затрагиваются и будут сохранены (при ручном сохранении) в исходном виде. Экспортировать же из таблиц можно отнормированные данные. Также, при необходимости, можно выполнить необратимую нормировку (пересчет) исходных данных, нажав кнопку и после этого вручную сохранить пересчитанные данные. Кнопка принудительно перерисовывает диаграмму и пересчитывает таблицы с обновленными параметрами этой вкладки. Вы можете сохранить (обязательно рекомендуется!) параметры Aux калибровок и использовать их в будущем с помощью кнопок .

9.2.3. Панель Преобразования – AUX математика

Следующая вкладка позволяет вычитать данные по потенциалу и импедансу для Aux входов и основных данных потенциала и импеданса друг из друга разными способами:

Настройки математических операций при отображении Aux данных. Внешний вид элементов и выпадающее меню с вариантами выбора математических операций.

Эта опция воздействует на данные потенциала и импеданса. Выбор того или иного варианта ее использования определяется тем, как к исследуемой ячейке подключены потенциальные электроды. Исходные данные при включении этих настроек не затрагиваются и будут сохранены (при ручном сохранении) в исходном виде. Экспортировать же из таблиц можно пересчитанные данные. Также, при необходимости, можно выполнить необратимый пересчет исходных данных, нажав кнопку  **Отнормировать необратимо** и после этого вручную сохранить пересчитанные данные. Вы можете сохранить (обязательно рекомендуется!) параметры Aux математики и использовать их в будущем с помощью кнопок  **Сохранить параметры**  **Открыть параметры**. Кнопка  принудительно перерисовывает диаграмму и пересчитывает таблицы с обновленными параметрами этой вкладки.

9.2.4. Панель Преобразования – Компенсация импеданса

Следующая вкладка позволяет скомпенсировать паразитные составляющие импеданса:

Общие нормировки | AUX нормировки | AUX математика | **Компенсация импеданса** | IR-компенсация | Умножение | Добавление | Копирование | Табель | Вычитание

	Входная индуктивность	Входная емкость	Все что до активной точки
<input checked="" type="checkbox"/> Компенсировать основные данные	1	0	Заменить активной точкой
<input checked="" type="checkbox"/> Компенсировать AUX1 данные	-220	2	Заменить активной точкой
<input checked="" type="checkbox"/> Компенсировать Aux2 данные	-120	2	Заменить активной точкой

Только активный шаг и цикл Применить ко всем данным

компенсировать со знаком + Компенсировать со знаком -

Вкладка компенсации паразитных составляющих импеданса.

Компенсировать можно последовательную с ячейкой индуктивность и параллельную емкость. Сначала нужно ввести компенсирующие значения (можно индивидуальные значения для основных и обоих Aux данных). Затем выбрать какие из данных компенсировать (основные и/или Aux), и нажать кнопку компенсации компенсировать со знаком + .

Выполненную только что вручную компенсацию можно фактически отменить, нажав кнопку Компенсировать со знаком - . Сохраняются данные в файл (и потом открываются) скомпенсированными (такими, как вы их видите на диаграмме и в таблицах), то есть позже, после открытия данных, их можно скомпенсировать еще раз. Последовательно выполненные компенсации складываются (скомпенсировать 1 раз по 10 пФ, эквивалентно одному разу в 100 пФ).

9.2.5. Панель Преобразования – IR-компенсация

Очень похожим образом строена вкладка компенсации падения потенциала на омическом сопротивлении:

The screenshot shows a software interface with a menu bar at the top containing: "Общие нормировки", "AUX нормировки", "AUX математика", "Компенсация импеданса", "IR-компенсация", "Умножение", "Добавление", "Копирование", "Табель", and "Вычитание". The "IR-компенсация" tab is active. Below the menu bar, there is a text field with the value "11" and a unit "Ом". Below this, there are several checkboxes: "Компенсировать основные данные" (checked), "Компенсировать AUX1 данные" (unchecked), and "Компенсировать Aux2 данные" (checked). There are also radio buttons for "Только активный шаг и цикл" (unchecked) and "Применить ко всем данным" (checked). At the bottom, there are two buttons: "компенсировать со знаком +" (checked) and "Компенсировать со знаком -" (checked).

Вкладка компенсации омического сопротивления.

Пользователь вводит ранее измеренное значение омического сопротивления и нажимает кнопку . Перед этим нужно выбрать - какие из данных компенсировать (основной потенциал или Aux).

Выполненную только что вручную компенсацию можно фактически отменить, нажав кнопку . Сохраняются данные в файл (и потом открываются) скомпенсированными (такими, как вы их видите на диаграмме и в таблицах), то есть позже, после открытия данных, их можно случайно скомпенсировать еще раз. Последовательно выполненные компенсации складываются (скомпенсировать 1 раз по 10 Ом, эквивалентно одному разу в 100 Ом).

9.2.6. Панель Преобразования – Умножение данных на величину

Следующий тип преобразований это умножение данных на заданную величину:

Общие нормировки | AUX нормировки | AUX математика | Компенсация импеданса | IR-компенсация | **Умножение** | Добавление | Копирование | Тафель | Вычитание

Выполнить **Деление** ↓ ↑ Данные **Потенциала** ↓ ↑ на **Значение** ↓ ↑ 909

Выполнить с основными данными
 Выполнить с Aux1 данными
 Выполнить с Aux2 данными

Только активный шаг и цикл Применить ко всем данным

Выполнить

Вкладка умножения данных.

Сначала пользователь выбирает, будет ли он умножать или делить данные на заданную величину с помощью опции **Выполнить** **Умножение** ↓ ↑. После этого, с помощью выпадающего меню **Данных** **Потенциала** ↓ ↑ необходимо выбрать – с какими данными будет выполняться операция: потенциала, тока, действительной или мнимой частями импеданса. Также пользователь вводит множитель (делитель).

Умножение можно выполнять как с основными данными, так и с любыми данными Aux. Для того, чтобы отменить умножение, проще всего выполнить деление на ту же величину быстро переключившись кнопками ↓ ↑ и нажав кнопку **Выполнить**.

Очень похоже выглядит вкладка добавления:

Общие нормировки | AUX нормировки | AUX математика | Компенсация импеданса | IR-компенсация | Умножение | **Добавление** | Копирование | Тафель | Вычитание

Выполнить **Добавление** ↓ ↑ к данным **Тока** ↓ ↑ **Значения** ↓ ↑ -0,1 мА

Выполнить с основными данными
 Выполнить с Aux1 данными
 Выполнить с Aux2 данными

Только активный шаг и цикл Применить ко всем данным


Выполнить

Вкладка добавления к данным.

Здесь пользователь также сначала выбирает тип действия – добавление или вычитание. После этого выбирает с какими данными будет выполняться преобразование: потенциал, ток, действительная или мнимая часть импеданса, и вводит добавляемую величину **Значения** ↓ ↑ 1000 мВ, которая может быть как положительной, так и отрицательной. Как и для предыдущей вкладки, для отмены преобразования можно выполнить обратное действие (например, вычитание для отмены сложения или наоборот).

9.2.7. Панель Преобразования – Копирование блоков данных

Следующая довольно простая вкладка позволяет скопировать данные тока или потенциала:

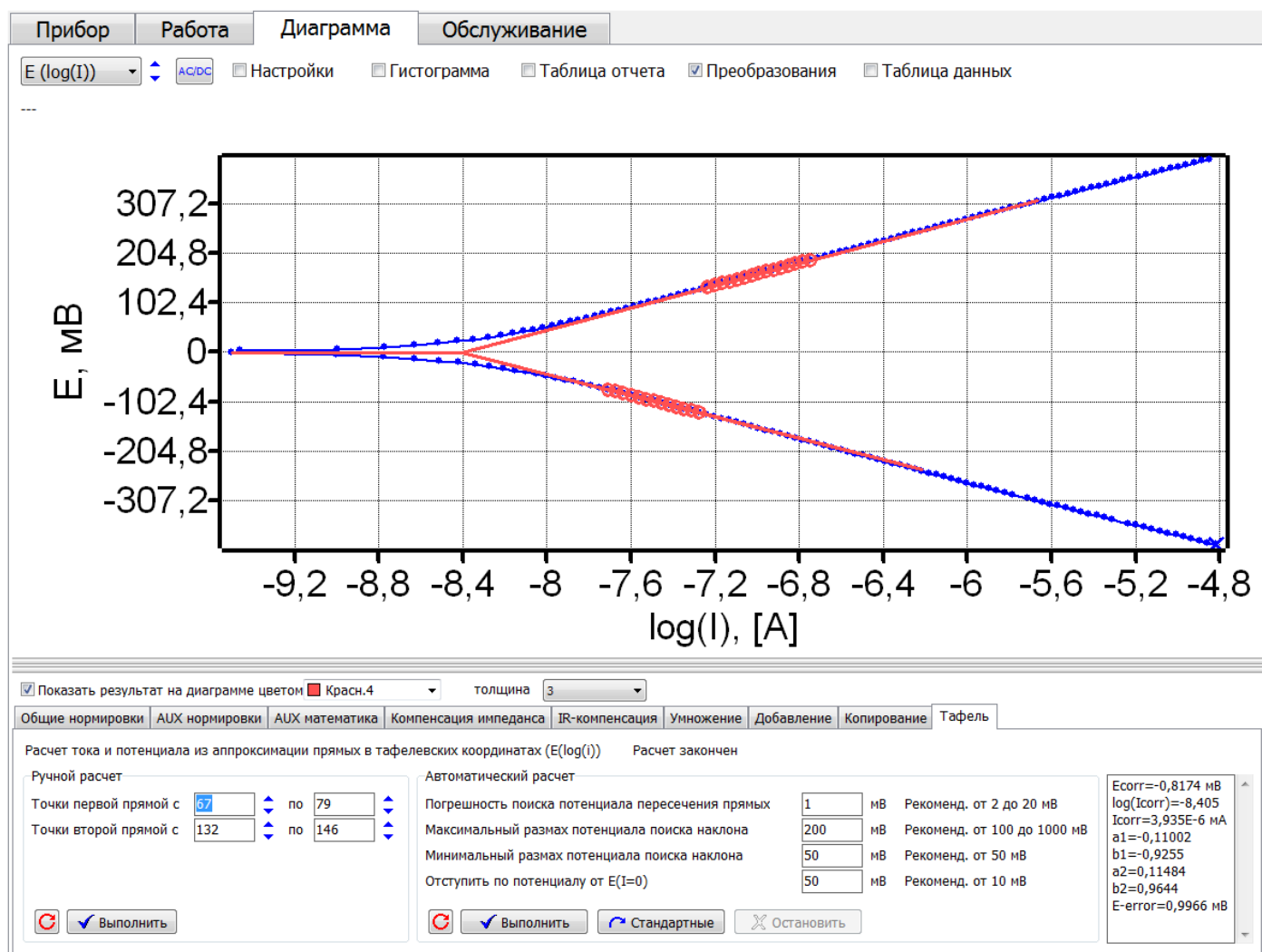
Общие нормировки	AUX нормировки	AUX математика	Компенсация импеданса	IR-компенсация	Умножение	Добавление	Копирование	Табель
Копировать данные можно только между синхронными массивами (с равным количеством точек данных)								
Скопировать данные из	Канал 1	Потенциал	в	Канал 1	Ток			
	<input type="button" value="✓ Выполнить"/>							

Вкладка копирования данных.

Здесь можно скопировать данные тока в данные потенциала или наоборот, причем между каналами. По сути, она нужна только в одном случае, чтобы скопировать данные тока первого канала в данные тока второго канала в режиме измерения вольтметра, когда данных тока для второго канала нет, для спектральной обработки данных электрохимических шумов.

9.2.8. Панель преобразования – Обработка в тафелевских координатах

Следующая вкладка позволяет выполнять обработку экспериментальных данных в тафелевских координатах:



Обработка экспериментальных данных в тафелевских координатах.

Чаще всего обработку в тафелевских координатах (зависимость потенциала от десятичного логарифма тока) ведут в коррозионных задачах для определения потенциала и тока коррозии. Для этого измерение выполняют в режиме линейной развертки потенциала (со скоростью 5-50 мВ/с), применив однократный проход по потенциалу, стартуя от -300 (-500) мВ, заканчивая при +300 (+500) мВ относительно потенциала разомкнутой цепи, которому предварительно дают установиться. В результате, в тафелевских координатах, при низких или скомпенсированных значениях омического сопротивления, в идеале получаются зависимости, как на последнем рисунке. После этого два линейных участка аппроксимируются прямыми, пересечение которых дает значения потенциала и тока коррозии.

Аппроксимацию можно выполнить вручную, самостоятельно по точкам задав интервалы для аппроксимации каждой прямой:

Ручной расчет

Точки первой прямой с по

Точки второй прямой с по

Настройки для ручной аппроксимации.

Задав интервалы вручную, можно нажать кнопку , после чего будет произведен достаточно быстрый расчет и в поле справа выведены результаты – потенциал и ток пересечения прямых, а также коэффициенты a и b для аппроксимирующих уравнения прямых. Если включить опцию Показать результат на диаграмме цветом толщина , то можно настроить то, как будет отображаться результат аппроксимации визуально на диаграмме.

Но гораздо практичнее, проще и точнее выполняется автоматическая аппроксимация. В ней пользователь задает определенные настройки и получает автоматический расчет тех же параметров:

Автоматический расчет

Погрешность поиска потенциала пересечения прямых	<input type="text" value="1"/>	мВ	Рекоменд. от 2 до 20 мВ
Максимальный размах потенциала поиска наклона	<input type="text" value="200"/>	мВ	Рекоменд. от 100 до 1000 мВ
Минимальный размах потенциала поиска наклона	<input type="text" value="50"/>	мВ	Рекоменд. от 50 мВ
Отступить по потенциалу от $E(I=0)$	<input type="text" value="50"/>	мВ	Рекоменд. от 10 мВ

Настройки автоматического расчета при обработке в тафелевских координатах.

Если пользователь не уверен - какие параметры лучше задать, можно нажать кнопку и программа сама задаст рекомендуемые стандартные настройки. Автоматический расчет будет запущен по нажатию кнопки . С большим количеством точек данных он может занять некоторое время, и при необходимости его можно прервать, нажав кнопку для сужения окна аппроксимации, которое будет показано на основной диаграмме во время выполнения расчетов (они могут выполняться от нескольких секунд до минуты).

Параметрами автоматической обработки являются:

1. Погрешность поиска потенциала пересечения прямых мВ Рекоменд. от 2 до 20 мВ - то, на сколько допустимо отклониться по потенциалу пересечения прямых от потенциала минимального (нулевого) тока (самой левой точки на диаграмме рис. 89).

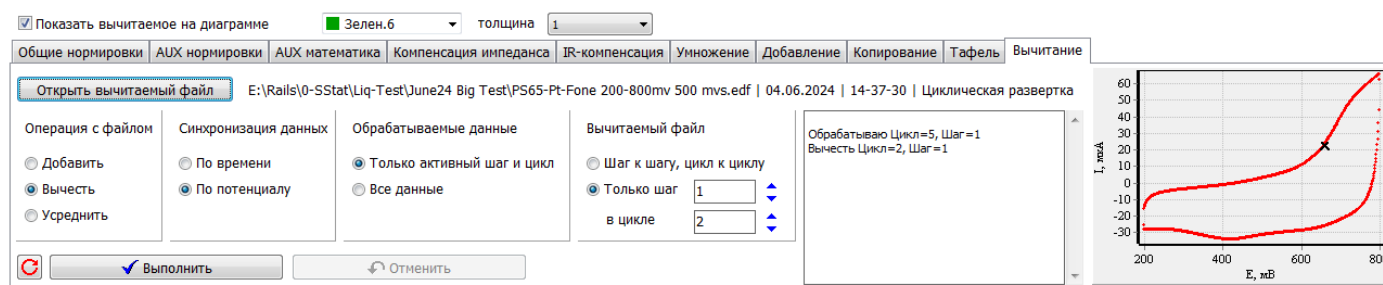
2. Максимальный размах потенциала поиска наклона мВ Рекоменд. от 100 до 1000 мВ - интервал потенциалов, в котором будет выполняться поиск наилучшего наклона для каждой прямой.
3. Минимальный размах потенциала поиска наклона мВ Рекоменд. от 50 мВ - минимальный интервал потенциалов, в котором будет выполняться поиск наилучшего наклона.
4. Отступить по потенциалу от $E(I=0)$ мВ Рекоменд. от 10 мВ - то, на сколько необходимо отступить по потенциалу от точки с минимальным током. На таких диаграммах всегда имеется отклонение от линейной зависимости при малых токах (при приближении к потенциалу минимума тока, или в которой он равен нулю), этот параметр задает отступ от этой точки, где искать наклоне не нужно.

После завершения расчетов, результат будет выведен на диаграмму визуально в виде пересекающихся прямых. Также будут кружками подсвечены точки, которые программа выбрала для аппроксимируемых отрезков. Помимо этого, будет выведена вся текстовая информация: уравнения прямых, а также потенциал и ток пересечения (коррозии) в виде логарифма и в выбранных для программы единицах тока. Также, номера (подобранных в автоматическом расчете) крайних аппроксимируемых точек будут выведены в параметры ручного расчета, чтобы пользователь мог при необходимости вручную скорректировать и пересчитать результаты.

При необходимости работы с плотностью тока, пользователь может выполнить необратимую нормировку тока или деление на площадь поверхности в других вкладках перед выполнением аппроксимации в тафелевских координатах. Аппроксимация в тафелевских координатах отключит все временные нормировки, если они были включены.

9.2.9. Панель Преобразования – Вычитание кривых

Следующая вкладка Вычитание предназначена для вычитания (или добавления, или усреднения) одних вольтамперных кривых из других. Она выглядит следующим образом:



Внешний вид вкладки вычитания одних кривых из других в панели преобразований.

В этой вкладке вы можете:

- Вычесть фоновую ЦВА кривую из ЦВА кривой с реагентом, чтобы убрать фоновый ток заряжения;
- Вычесть линейную (однопроходную) квазистационарную развертку из ЦВА кривой, чтобы скомпенсировать в последней побочный фарадеевский ток (например, от непродутого кислорода в водном растворе);
- Вычесть одну линейную развертку из другой, также для компенсации емкостных или фарадеевских эффектов, в зависимости от того, как эти кривые были получены (при разных скоростях развертки потенциала);
- Вычесть фоновый транзиент тока из рабочего транзиента с реагентом, чтобы скомпенсировать токи заряжения (в стационарном потенциостатическом режиме);
- А также выполнить другие действия, связанные с (данные будут синхронизированы по потенциалу, то есть вычитание выполнено в координатах ток от потенциала): вычитанием ЦВА кривой из ЦВА; вычитанием ЦВА из линейной развертки; линейной развертки из ЦВА; линейной развертки из другой линейной развертки. А также (данные будут синхронизированы по времени) любые кривые друг из друга в координатах ток от времени.

Вычитаются, складываются или усредняются всегда данные тока. В дальнейшем рассмотрении этой инструкции, для ясности всегда будет фигурировать термин вычитание, но все то же самое справедливо и для сложения и усреднения. Разработчики SmartStat также могут добавить ваш метод обработки, в дополнение к вычитанию, сложению или усреднению. Для этого напишите в наш отдел тех поддержки.

Обратим внимание на некоторые особенности вычитания:

- При вычитании ЦВА кривой из ЦВА, независимо от первого направления каждой из них (катодного или анодного, то есть вверх или вниз пойдет самая первая развертка), катодный ход одной кривой, вычитается из катодного хода другой кривой. Аналогично - анодный ход вычитается из анодного. Проще говоря, на примере рис. 93 верхняя часть гистерезиса будет вычтена из верхней, а нижняя из нижней, так, что результат (гистерезис) станет уже как сверху, так и снизу.

- Если из ЦВА вычитается линейная развертка, то последняя будет вычтена как из катодного, так и из анодного хода обрабатываемой ЦВА. Проще говоря, после вычитания просядет вся ЦВА кривая.
- Вычитание ЦВА из линейной развертки в общем не имеет большого смысла. Программа выберет данные вычитаемой ЦВА кривой, идущие от минимума потенциала к максимуму.
- При вычитании одной линейной развертки из другой, не важно если их направления будут разными (в одной катодный ход, а в другой анодный).

В качестве первого действия с настройками панели вычитания кривых, пользователю необходимо выбрать файл с данными, который будут вычитаться из основных открытых или только что измеренных данных (отображаемых на главной диаграмме). Для этого нужно нажать кнопку

Открыть вычитаемый файл

. После этого, справа от нее появится полное название и путь к этому файлу, а также будут приведены дата и время его создания. Помимо этого будет указан тип работы, соответствующий данным этого файла, например, циклическая или линейная развертка.

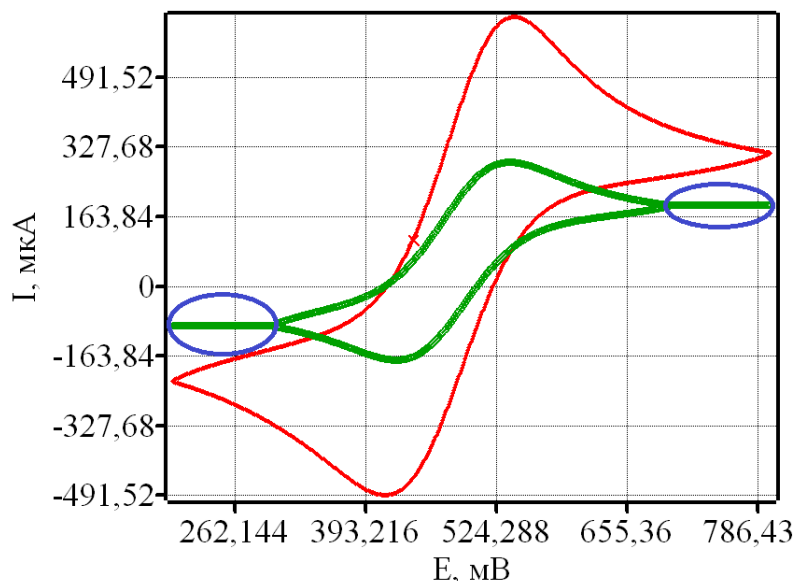
Следующим действием пользователь выбирает, какую операцию он будет выполнять (рис. 93 (а)): можно вычесть один открытый в этой панели файл из основных данных; можно эти кривые сложить; и можно усреднить (сложить и разделить на 2).

(а)	(б)	(в)	(г)
Операция с файлом	Синхронизация данных	Обрабатываемые данные	Вычитаемый файл
<input type="radio"/> Добавить <input checked="" type="radio"/> Вычесть <input type="radio"/> Усреднить	<input type="radio"/> По времени <input checked="" type="radio"/> По потенциалу	<input checked="" type="radio"/> Только активный шаг и цикл <input type="radio"/> Все данные	<input type="radio"/> Шаг к шагу, цикл к циклу <input checked="" type="radio"/> Только шаг <input type="text" value="1"/> ▲▼ в цикле <input type="text" value="2"/> ▲▼

Настройки панели вычитания кривых друг из друга.

Следующий набор настроек (рис. 93 (б)) позволяет настроить то, как данные будут вычитаться друг из друга, как они будут синхронизированы: по времени (кривые вычитаются в координатах ток от времени); или по потенциалу (кривые вычитаются в координатах ток от потенциала). В обоих случаях, математика вычитания будет интерполировать вычитаемые значения для синхронизации вычитаемых данных с основными. Дело в том, что значения, например потенциала точек одной кривой, на практике никогда не совпадут со значениями потенциалов другой кривой. Даже если эти кривые сняты в идентичных условиях. Целесообразно синхронизировать по времени транзиенты тока, полученные в стационарных режимах, в импульсных. Целесообразно синхронизировать по потенциалу кривые ЦВА и с линейной разверткой. Если вычитаемая кривая будет уже по, например потенциалу, чем обрабатываемая, то вычитаемая кривая будет экстраполирована из своих крайних точек. То же самое и по времени, если вычитаемая кривая скажем, кончится раньше обрабатываемой, то будет выполнена экстраполяция (будут вычитаться значения последней точки данных вычитаемой кривой). То же самое и с началом кривой.

Например, в координатах ток от потенциала при вычитании одной ЦВА из другой (пример утрирован для наглядности):



Основная диаграмма: красная ЦВА – обрабатываемые только что измеренные данные. Зеленая кривая – пример вычитаемой кривой, открытой во вкладке Вычитание. Синие области – экстраполированные данные зеленой (вычитаемой) кривой, так как она уже по потенциалам.

Следующий набор настроек (рис. 93 (в)) позволяет выбрать – с какими из открытых основных данных будет выполняться вычитание. Можно обработать только активный шаг активного цикла, или можно обработать все открытые данные (например, все циклы ЦВА).

Следующий набор настроек (рис. 93 (г)) задает уже вычитаемые данные. Предположим, что имеются измеренные рабочие данные, один открытый файл, в котором пять циклов ЦВА, различающихся только скоростями развертки. А также есть вычитаемый файл, полученный точно так же, но в фоновом растворе, также для тех же пяти скоростей и в том же интервале потенциалов. И необходимо элиминировать емкостной отклик (вычесть фоновые кривые из всех ЦВА). В этом случае используется вариант Шаг к шагу, цикл к циклу . Выбрав его, программа вычтет первый цикл фона из первого рабочего цикла, второй цикл фона из второго рабочего цикла и так далее сколько циклов есть всего. То есть фоновая кривая при скажем скорости 500 мВ/с будет вычтена из кривой с той же скоростью для рабочего раствора. То же самое и для другой скорости, например 100 мВ/с и так далее. Важно! Программа не проверяет скорость развертки, она только выполняет вычитание одних данных из других, как ей указано. Задача пользователя – снять рабочие и фоновые кривые максимально идентичными, то есть с абсолютно теми же настройками рабочего режима (в данном случае ЦВА). То есть, в первом цикле обоих файлов должны быть одна и та же скорость развертки. Во вторых циклах может быть своя (другая), но тоже одинаковая скорость и тд. Различаться они будут только откликами тока. При этом допустимо, но весьма нежелательно, чтобы:

- Обрабатываемые данные и вычитаемые имели немного разные скорости регистрации данных;
- Были в немного разных интервалах потенциалов (пределах развертки);

Чем сильнее будут сделаны эти допущения, тем менее качественно будет выполнено вычитание, но на алгоритме программы это не скажется. Поэтому в идеале, снимайте фоновую кривую с помощью того же файла программатора, что и для рабочего раствора.

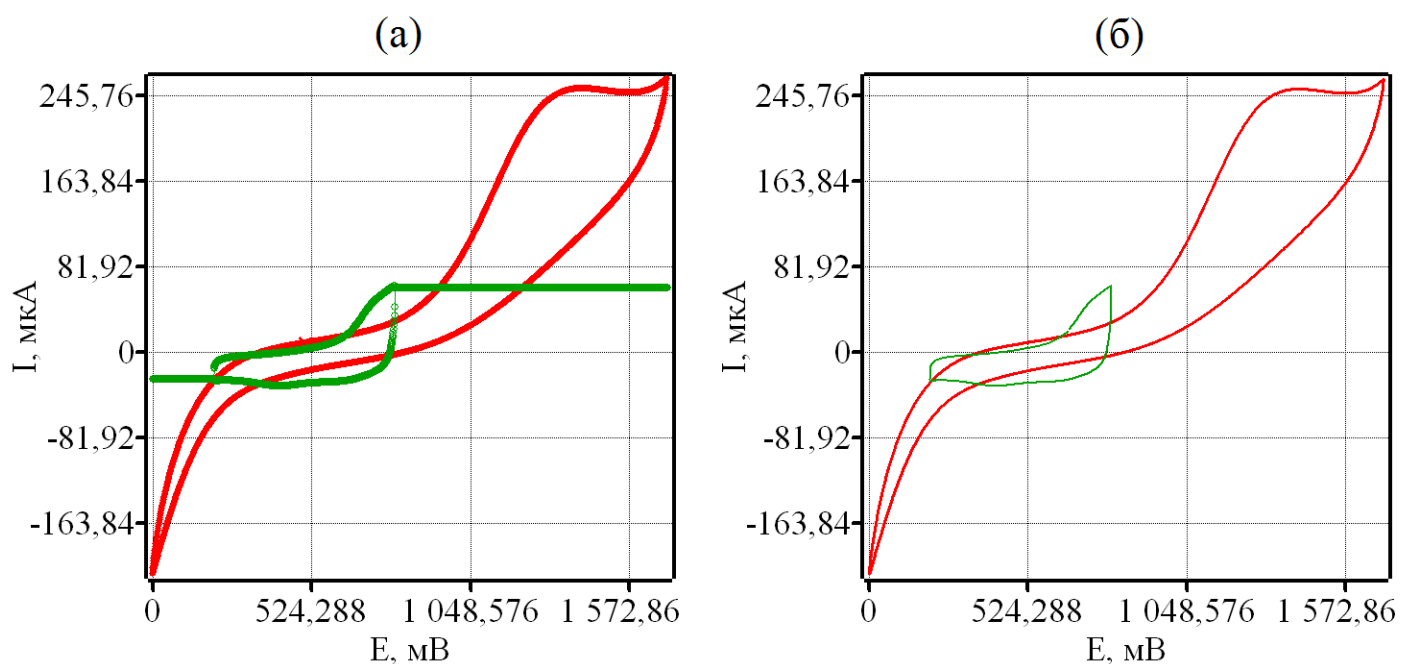
Не имеет значения (никак вообще не скажется) если:

- Обрабатываемые и вычитаемые кривые будут сняты на разных диапазонах потенциала или тока, или на разных приборах или в разные дни;
- Если потенциалы старта ЦВА кривых будут различны;
- Стартовые направления разверток будут различаться.

Второй вариант выбора вычитаемых данных, это вычитать один конкретный шаг и цикл вычитаемых данных из (всех данных или одного шага и цикла) исходных данных. Для этого

Только шаг
 в цикле

включают настройку . Выбранный вычитаемый массив данных (с заданными этой же настройкой номерами цикла и шага) будет вычтен из выбранных исходных данных. С помощью этих же настроек, можно выбрать для просмотра вычитаемые данные (номер шага и цикла), которые отобразятся справа в панели вычитания кривых. В этой вспомогательной диаграмме по вертикальной оси всегда отложен ток, а по горизонтальной - время или потенциал, что определяется настройкой синхронизации данных (рис. 93 (б)).



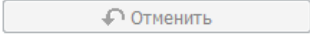
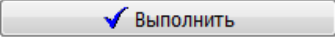
(а) - отображение вычитаемой (зеленой) кривой с экстраполируемыми участками – для главной диаграммы включена опция выделения активного шага. (б) – опция выделения активного шага отключена, экстраполируемые участки не показаны.

На основной диаграмме можно включить отображение вычитаемых данных с помощью опции

Показать вычитаемое на диаграмме толщина , которая находится слева

вверху панели Преобразования. Если на основной диаграмме включено выделение активного шага,

то помимо самой вычитаемой кривой, программа покажет кружками и экстраполируемые участки, если таковые имеются. Отображение вычитаемой кривой возможно только в соответствии с синхронизацией, то есть показать вычитаемую кривую можно только в координатах тока от потенциала, если выбрана синхронизации по потенциалу. При синхронизации же по времени, вычитаемая кривая будет отображена только в координатах ток от времени.

Если операция вычитания была выполнена неудачно, то можно отменить последнее вычитание кнопкой  , расположенной внизу. Левее нее находится кнопка собственно запуска выполнения вычитания  .

9.3. Таблица вывода данных

*.txt Copy: t, c X				*.txt Copy: t, c X			
N	t, c	E, мВ	Q, мКл	N	t, c	E, мВ	I, mA
1	0,000512	739	0	1	0,000512	739	0,25132
2	0,001024	740,1	0,0001292	2	0,001024	740,1	0,25248
3	0,001536	741,1	0,0002592	3	0,001536	741,1	0,25382
4	0,002048	742,1	0,0003896	4	0,002048	742,1	0,25464
5	0,00256	743,1	0,0005206	5	0,00256	743,1	0,25579
6	0,003072	744,2	0,0006522	6	0,003072	744,2	0,25719
7	0,003584	745,2	0,0007845	7	0,003584	745,2	0,25825
8	0,004096	746,3	0,0009172	8	0,004096	746,3	0,25928
9	0,004608	747,3	0,0010503	9	0,004608	747,3	0,25993
10	0,00512	748,4	0,0011843	10	0,00512	748,4	0,26163
11	0,005632	749,4	0,0013184	11	0,005632	749,4	0,26203
12	0,006144	750,5	0,0014531	12	0,006144	750,5	0,26309
13	0,006656	751,5	0,0015886	13	0,006656	751,5	0,26451
14	0,007168	752,5	0,0017244	14	0,007168	752,5	0,26523
15	0,00768	753,5	0,0018607	15	0,00768	753,5	0,26635
16	0,008192	754,6	0,0019976	16	0,008192	754,6	0,2673
17	0,008704	755,6	0,0021348	17	0,008704	755,6	0,26801
18	0,009216	756,7	0,0022726	18	0,009216	756,7	0,26911
19	0,009728	757,7	0,0024108	19	0,009728	757,7	0,26993
20	0,01024	758,8	0,0025494	20	0,01024	758,8	0,27068

Два примера внешнего вида таблицы данных. Слева выбраны координаты ток-заряд, справа – ток-время.

В таблицу данных (расположена справа от диаграммы), выводятся исходные значения точек данных, видимых на диаграмме для активного шага и цикла, то есть времени, тока и потенциала если для диаграммы выбраны такие же оси. Если же, например, на диаграмме построены данные заряда или мощности, то соответствующие данные поточечно будут выведены и в таблицу. Аналогичная ситуация и с данными импеданса. То есть, в таблицу могут быть выведены и расчетные данные – заряд, мощность, а для импеданса модуль импеданса, сдвиг фаз, емкости и сопротивления и другие.

Это сделано для просмотра данных на диаграмме, так как, выбрав строку в таблице, можно посмотреть значения активной точки на диаграмме. Она выделяется крестиком. Помимо этого, данные таблицы можно копировать буфер обмена колонками, воспользовавшись кнопкой и выпадающим меню . Также их можно экспортировать в текстовый файл, нажав кнопку . Сохранен или скопирован будет столбец, выбранный в выпадающем меню. После этого их можно использовать в любом другом приложении для обработки данных, удобство же заключается в том, что не нужно самостоятельно рассчитывать колонки заряда, мощности, параметров импеданса и других.

При работе с импульсными электроаналитическими методами, в дополнение к основной диаграмме исходных данных тока и потенциала (или иных осей), появляется диаграмма с расчетными данными, то есть собственно импульсная вольтамперограмма в традиционном виде (описание приведено в разделе, рассматривающем импульсные ВА режимы работы). Таблица данных тоже будет трансформирована под вывод импульсной ВА, чтобы пользователь, при необходимости,

мог скопировать или экспортировать ее данные для сторонней обработки .

Если работа велась с накоплением по циклам и усреднением, то можно точно так же выбрать первый цикл, в котором будут сведены усредненные по циклическому накоплению данные.

При выполнении обработки данных методами анализа электрохимических шумов, в таблице данных будут выводиться соответствующие этим результатам данные – значения СПМ, или количества отсчетов для диаграммы распределения, в зависимости от выбранного типа диаграммы.

Таблица данных открывается опцией Таблица данных в строке над основной диаграммой.


9.4. Отчетная таблица

Настройки Гистограмма Таблица отчета для шага 3

Цикл	Физ.цикл	Вид работы	Режим прибора	Время, с	Заряд весь, мАч	Точек DC	Точек AC	КПД (по энергии), %	Завершение
1	1	Стационарн	Потенциостат	21	-5,047	42	0	87,1	Закончил шаг по условию процента от тока
2	2	Стационарн	Потенциостат	25,5	-5,755	51	0	89,09	Закончил шаг по условию процента от тока
3	3	Стационарн	Потенциостат	25,5	-5,751	51	0	89,22	Закончил шаг по условию процента от тока
4	4	Стационарн	Потенциостат	26	-5,907	52	0	88,4	Закончил шаг по условию процента от тока
5	5	Стационарн	Потенциостат	26	-5,844	52	0	88,49	Закончил шаг по условию процента от тока
6	6	Стационарн	Потенциостат	26	-5,863	52	0	89,17	Закончил шаг по условию процента от тока
7	7	Стационарн	Потенциостат	26	-5,883	52	0	89,09	Закончил шаг по условию процента от тока
8	8	Стационарн	Потенциостат	26	-5,898	52	0	88,93	Закончил шаг по условию процента от тока

Отчетная таблица (в показанном примере в ее настройках выбран вариант - показать все циклы для шага номер 3, альтернативно можно вывести все шаги для n-го цикла).

Отчетная таблица является мощнейшим элементом первичной и наиболее рутинной обработки данных. В ней (на выбор пользователя в ее настройках) каждой строке соответствует цикл активного шага или шаг активного цикла. В нее можно вывести различную информацию о прошедшем эксперименте, ее примеры показаны на рисунке выше. Активный шаг или цикл можно задать в настройках диаграммы слева от нее, или кликнув по строке в этой таблице.

Кроме стандартных параметров, пользователь может выбрать в настройках таблицы отчета (настройки появятся по нажатию кнопки ) специальный параметр (за него в таблице отвечает столбец синего цвета), который по постоянному току рассчитывается в заданном над таблицей интервале времени, или в интервале частот, если это параметр импеданса. Панель настроек таблицы появляется поверх всего программного обеспечения SmartSoft и выглядит следующим образом:

Настройки таблицы отчета

В строках циклы для выбранного шага
 В строках шаги для выбранного цикла

Шаги заряда с по ($E = 12172 \text{ Вт}\cdot\text{с}$)

Шаги разряда с по ($E = -10760 \text{ Вт}\cdot\text{с}$)

Показать результат расчета на диаграмме --- Толщина

Длина усредняемого периода (точек данных)

Физический N цикла

Прошедший заряд

Потенциал PЦ до

Параметр на выбор (считается в интервале)

Вид работы

Количество точек DC

Потенциал PЦ после

DC Analytical AC (Z) ECN

Режим прибора

Количество точек AC

Потен-л установления

Время работы

Количество точек AUX

Ток установления

Считать этот параметр как

Скорость развертки

R омическое

Панель настроек таблицы отчета, первый вариант (панель показана с настройками для КПД и кулоновской эффективности в качестве специального параметра - для них нужно выбрать номера шагов заряда и разряда).

Настройки таблицы отчета X

В строках циклы для выбранного шага
 В строках шаги для выбранного цикла

Интервал времени для выбираемого параметра От t1= с До t2= с
 Интервал частот для выбираемого параметра От F1= Гц До F2= Гц

Показать результат расчета на диаграмме ---
 Длина усредняемого периода (точек данных) Толщина

Физический N цикла Прошедший заряд Потенциал PЦ до Параметр на выбор (считается в интервале)
 Вид работы Количество точек DC Потенциал PЦ после DC Analytical AC (Z) ECN
 Режим прибора Количество точек AC Потен-л установления
 Время работы Количество точек AUX Ток установления Считать этот параметр как
 Скорость развертки R омическое

Панель настроек таблицы отчета, второй вариант (панель показана с настройками выбора интервала времени или диапазона частот для расчета специального параметра. Они применимы ко всем параметрам кроме КПД и кулоновской эффективности).

В панели настроек можно выбрать, какие параметры показывать, а какие нет. Также в ней задается, что будет в строках таблицы – шаги для активного цикла или циклы для активного шага.

Помимо этого, в настройках пользователь выбирает тип специального параметра, рассчитываемого в заданном интервале Параметр на выбор (считается в интервале). Для удобства, типы специального параметра разбиты по четырем наборам DC Analytical AC (Z) ECN, то есть: постоянноточковые, импульсные аналитические, импеданс, электрохимический шум. При смене типа набора, выпадающее меню выбора рассчитываемого параметра, будет перезаполнено набором соответствующих параметров.

Постоянноточковые данные обрабатываются в интервале времени, данные импеданса в интервале частот, импульсные данные не привязаны к интервалу и для них расчет ведется для всех импульсных данных рассматриваемого шага. Данные электрохимических шумов рассчитываются в интервале времени, а также для них активируются строка дополнительных параметров [Длина усредняемого периода \(точек данных\)](#) Вычесть дрейф.

Набор импульсных параметров Pulse функционален, только если выполнялась работа в аналитическом импульсном режиме или профессиональном импульсном аналитическом режиме. Только в этих случаях будут иметься соответствующие данные. Аналогично и с импедансным набором параметров AC (Z), он функционален, только если регистрировался спектр импеданса (или с помощью импеданса измерялось омическое сопротивление). Анализ электрохимических шумов можно использовать всегда, так как он обрабатывает данные тока и потенциала.

Помимо этого, если в таблице выводятся циклы для одного шага, то можно выбрать то, как специальный параметр будет рассчитываться: в виде самого значения, как процент от

максимального значения по циклам, или процент от значения в предыдущем цикле, или разница с предыдущим циклом в процентах.

(а)	(б)	(в)	(г)
Заряд Энергия R поляризионное E Макс. E Мин. E Средний E Конечный E Размах E Наклон I Макс. I Мин. I Средний I Конечный I Размах I Наклон Заряд положит-й Заряд отрицат-й Ашх1 Макс. Ашх1 Мин. Ашх1 Средний Ашх1 Конечный Ашх1 Размах Ашх1 Наклон Ашх2 Макс. Ашх2 Мин. Ашх2 Средний Ашх2 Конечный Ашх2 Размах Ашх2 Наклон E(I макс.) E(I мин.) E(I макс.)-E(I мин.) I(E макс.) I(E мин.) I(E макс.)-I(E мин.) log(I) Макс. log(I) Мин. log(I) Средний log(I) Конечный log(I) Размах log(I) Наклон E ([t]1/2) наклон I ([t]1/2) наклон P Макс. P Мин. P Средний P Конечный P Размах Заряд/(E Размах) Площадь пика тока Кулон.Эффектив-ть КПД (по энергии)	Epulse max Epulse min Ipulse max Ipulse min E(Ipulse max) E(Ipulse min) I(Epulse max) I(Epulse min)	Re(Im=0) F(Im=0) Re(F1) Im(F1) Re(Макс.Im) Im(макс.Re) Re Макс. Im Макс. Re Размах Im Размах Im(Re) Наклон Re средний Im средний	E Ср.кв.отклонение E Дисперсия E Асимметрия E Экссесс I Ср.кв.отклонение I Дисперсия I Асимметрия I Экссесс Наклон log(СПМ-E) Наклон log(СПМ-I)

Выпадающее меню выбора специального параметра, рассчитываемого в заданном интервале времени или частот. Приведены все четыре варианта наборов параметров:

- (а) постоянноточковые;
- (б) импульсные электроаналитические (доступны только в импульсных аналитических режимах);
- (в) данные импеданса (доступны только для режимов измерения импеданса);
- (г) данные для анализа электрохимических шумов.

Если при расчете в заданном интервале (времени или частоты) заданная пользователем граница расчета оказывается вне зарегистрированных данных (например, правая граница времени больше длительности шага), то за эту границу будет принята граница зарегистрированных данных (в приведенном примере, этой правой границе расчета будет соответствовать вся длительность обрабатываемого шага).

Заряд рассчитывается как интеграл тока по времени.

Энергия рассчитывается, как интеграл мощности по времени.

R поляризационное рассчитывается, как коэффициент наклона (a в уравнении $y=ax+b$) при аппроксимации прямой в координатах потенциал от тока.

Конечные значения рассчитываются, как значение точки данных в правой заданной пользователем границе (или последней точки в шаге, если правая граница проходит дальше длительности шага по времени).

Наклоны рассчитываются как коэффициент наклона при аппроксимации прямой в координатах (обрабатываемая величина) от времени.

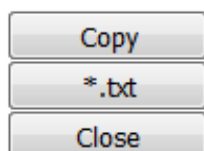
Размахи рассчитываются как максимум минус минимум для обрабатываемой величины (потенциала, тока и других).

Параметр **Заряд/(E размах)** фактически соответствует фарадам (кулон на вольт) и введен специально для обработки данных по суперконденсаторам (ионисторам) или обычным конденсаторам (или иным объектам тестирования, для которых такой параметр актуален).

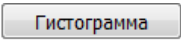
Данные по **кулоновской эффективности и КПД** рассчитываются с применением дополнительных настроек, с помощью которых пользователь выбирает - какие шаги служили для заряда источника тока, а какие для его разряда. Для всех шагов одного цикла выводится одно и то же значение этих параметров, если все эти шаги завершены. Если же какие-то из них еще не завершены (например, во время измерения), то по такому циклу КПД и кулоновская эффективность рассчитаны не будут и их величины будут недоступны для всех шагов такого цикла. Кулоновская эффективность рассчитывается как отношение суммы всех зарядов разрядных шагов к сумме зарядов всех зарядных шагов. С КПД расчет осуществляется точно так же, но по суммарным энергиям, а не по зарядам.

Данные из отчетной таблицы можно колонками копировать в буфер обмена или экспортировать в текстовый файл для сторонней обработки. Для этого нужно нажать правой кнопкой по нужному столбцу и поверх него появится панель локального экспорта данных, например для столбца заряда:

Заряд весь, мКл



Панель локального экспорта столбца данных из таблицы отчета. Все параметры рассчитываются и обновляются автоматически во время работы и всегда доступны к локальному экспорту.

Выбранный параметр, рассчитываемый в интервале, можно вывести на гистограмму, нажав кнопку . Гистограмма появится вместо основной диаграммы.

Также, программное обеспечение SmartSoft имеет возможность визуализации на основной диаграмме некоторых из расчетов. Например, оценить точность расчета при вычислении какого-либо

наклона, на глаз, бывает очень сложно. Поэтому, если выбрать в качестве специального параметра какой-либо наклон, и координаты диаграммы будут подходящими для его демонстрации (как на примере ниже: выбран наклон тока и координаты тока от времени), то станет активной опция Показать результат расчета на диаграмме ■ Толщина 6. В ней можно выбрать – показывать результат или нет, а также каким цветом и какой толщины должна быть показана линия или площадь для демонстрации результата расчета.

I(t) AC/DC Настройки Гистограмма Таблица отчета Таблица данных Вторая

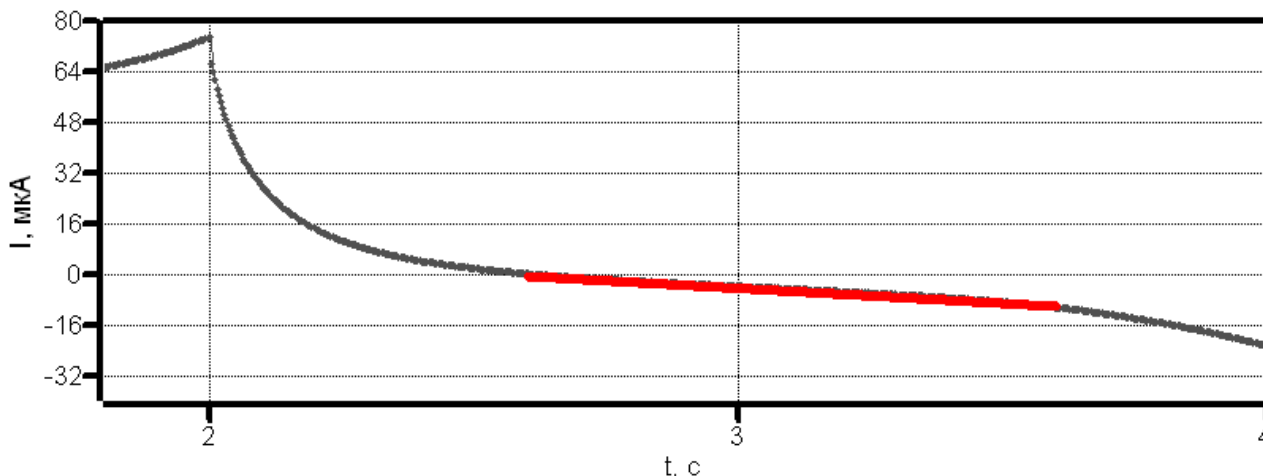
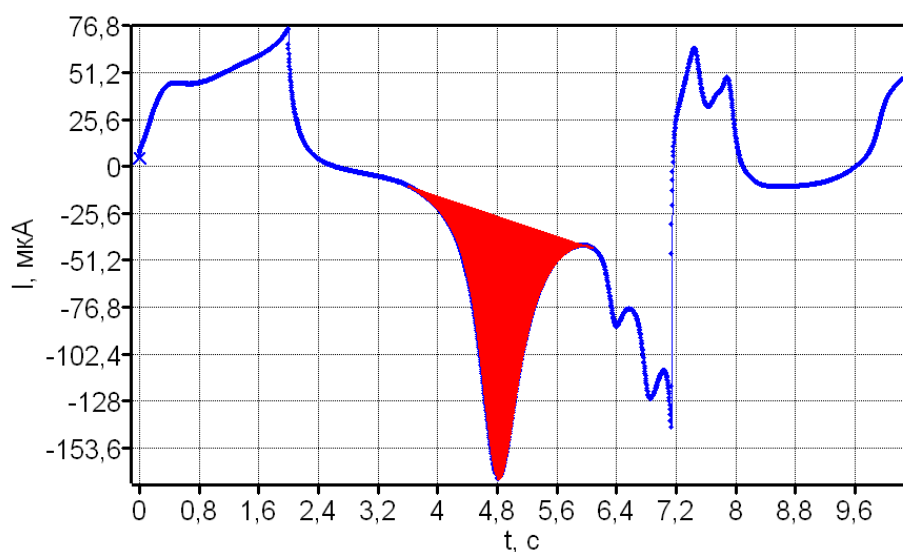


Таблица отчета для шага 1

Настройки Интервал времени для выбираемого параметра От t1= с До t2= с
Гистограмма Интервал частот для выбираемого параметра От F1= Гц До F2= Гц
 Показать результат расчета на диаграмме ■ Толщина 6

Пример диаграммы, на которой визуализирован результат расчета наклона в качестве специального (выбираемого) параметра автоматической (отчетной) обработки данных.



Пример диаграммы с визуализацией расчета площади пика тока. В качестве специального параметра выбран «Площадь пика тока» в настройках таблицы отчета, а также задать тип осей - ток от времени (границы расчета пика задаются по времени).

При обработке данных статистическими методами электрохимических шумов (первые 8), пользователь, как и в случае постояннотокового набора параметров, задает интервал по времени, в котором будет производиться расчет

Интервал времени для выбираемого параметра От t1= 0 с До t2= 50 с . Помимо него, также задается Длина усредняемого периода (точек данных) 1000 . Обработываемый отрезок данных разбивается на сегменты длиной в заданные периоды (например, по 1000 точек как здесь). Расчет выбранного пользователем параметра (например, эксцесса для тока) выполняется на каждом таком сегменте индивидуально, а затем полученные результаты усредняются. Как и в случае расчета спектров СПМ на диаграмме, этот параметр (период) выступает в качестве фильтра высоких частот (не рассчитывает все данные ниже частоты, определяемой длиной заданного периода).

Второй параметр Вычесть дрейф позволяет выполнить индивидуальную аппроксимацию прямой на каждом усредняемом отрезке с вычитанием результата аппроксимации перед расчетом заданного параметра. Такой подход наиболее эффективно и аккуратно элиминирует дрейф реальных электрохимических систем при измерении в стационарных (или квазистационарных) условиях.

При автоматическом расчете наклонов спектров СПМ (выполняется путем аппроксимации по МНК), можно задать интервал частот (как и в случае обработки импеданса)

Интервал частот для выбираемого параметра От F1= 50 Гц До F2= 7500 Гц . А также можно включить отображение результата на диаграмме

Показать результат расчета на диаграмме --- Красн. Толщина 3 . Эта опция становится активной (как и во всех остальных случаях подобной визуальной обработки) только когда для заданного параметра, например наклона логарифма СПМ по потенциалу, выбраны и соответствующие координаты диаграммы – зависимость логарифма СПМ по потенциалу от частоты. В других координатах результат не может быть отображен и эта опция будет неактивна. Значение наклона будет выведено в таблице отчета в соответствующей колонке. Значению минус один соответствует хорошо известному фликкер шуму – довольно часто встречающемуся явлению. Также могут иметься более высокие по модулю значения, обычно до минус 2, а иногда и выше (при сильных нестационарностях или других эффектах). Значению минус 2 соответствует работа классического RC-фильтра в области высокочастотного спада частотной характеристики. Значения, близкие к нулю (меньше 0.1 по модулю, с точностью до аккуратности эксперимента и расчета) соответствуют белому шуму (или низкочастотным плато на спектрах).

Перед использованием методов обработки электрохимических шумов – наклонов спектров СПМ, сами спектры необходимо сначала рассчитать в основной диаграмме (выбрав перед этим координаты диаграммы для вывода данных электрохимического шума). Для вычисления же статистических параметров шума, такой расчет не требуется.

К статистическим параметрам шума относятся (рассчитываются для тока или потенциала):

- Среднеквадратичное отклонение, характеризующее амплитуду шума практически в явном виде. Для гауссовского шума (имеющего нормальную диаграмму распределения), этот параметр обычно примерно в 7-8 раз ниже амплитуды шума от пика до пика (который можно вычислить в DC параметрах, как размах потенциала или тока, с точностью до наличия при этом тренда и единичных случайных всплесков в относительно некачественном эксперименте).
- Дисперсия – квадрат среднеквадратичного отклонения. Удобно сопоставлять с уровнем спектров СПМ (так как тоже в квадрате вольт или ампер), особенно при выходе их на низкочастотное плато, путем пересчета значений СПМ на исследуемую полосу (при этом и получается значение дисперсии).
- Асимметрия – характеризует диаграмму распределения шума в плане ее симметрии. Для симметричных диаграмм равна нулю. Для относительно симметричных распределений обычно меньше 0.1 по абсолютному значению. Положительным значениям соответствует смещение вправо, отрицательным – влево. Англоязычное название Skewness (используется в англоязычной настройке ПО SmartSoft). Безразмерная величина.
- Эксцесс – характеризует остроту диаграммы распределения. Для нормального распределения равен значению 3 (SmartSoft вычисляет так называемое ненормированное значение эксцесса, в отличие, например от MS Excell, в котором перед выводом пользователю вычитается величина, близкая к 3, зависит от длины выборки). Отличие на более чем 0.2-0.5 в любую сторону можно считать признаком некоторого отклонения от гауссовского шума. Англоязычное название Kurtosis (используется в англоязычной настройке ПО SmartSoft). Безразмерная величина.

Для получения дополнительной информации о методах измерения и обработки электрохимических шумов вы можете обратиться к списку публикаций, приведенному выше, в разделе 9 - Основная Диаграмма.

9.5. Гистограмма

Гистограмма служит для графического вывода значения специального выбираемого параметра из таблицы отчета, в зависимости от номера цикла:



Пример внешнего вида гистограммы.

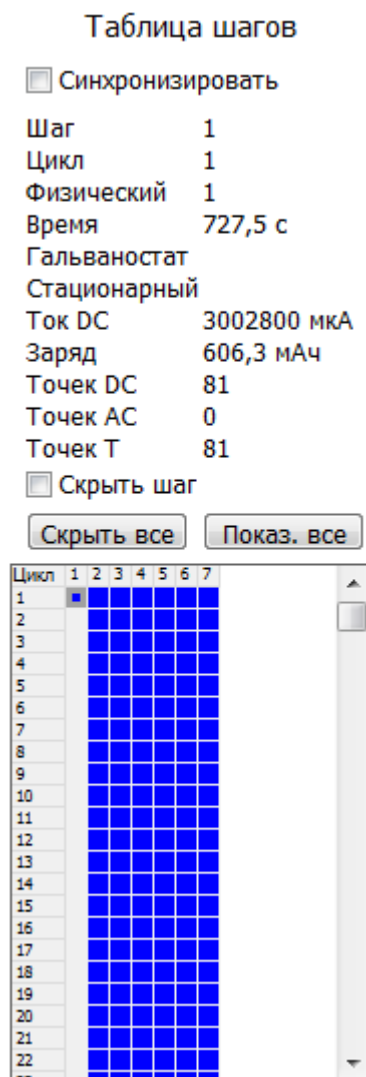
Пользователь выбирает тип рассчитываемого параметра в таблице отчета, задает ему интервалы для расчета. Затем можно включить гистограмму с помощью опции **Гистограмма**, расположенной над основной диаграммой. При этом гистограмма отобразится вместо основной диаграммы. В ней будет выведено значение специального параметра в зависимости от номера цикла.

Таблица вывода информации справа, при этом будет трансформирована для вывода цифр, отображаемых на гистограмме. Вы можете их оттуда быстро скопировать или сохранить в текстовый файл для сторонней обработки. Все это можно делать во время измерения в любом активном канале подключенного прибора. Также можно отображать и данные для ранее сохраненного файла или после завершения работы.

Также гистограмму можно включить в настройках таблицы отчета кнопкой

9.6. Таблица шагов

Для удобной навигации по данным сложного эксперимента, имеющего большое количество выполненных шагов и циклов, имеется таблица шагов. Она находится справа от основной диаграммы и включается вместо (альтернативно) таблицы данных текущего шага. С ее помощью очень удобно осуществлять навигацию по сложным экспериментам - какие шаги есть, а каких нет, а также можно быстро получить наиболее важную информацию по каждому шагу.



Внешний вид таблицы шагов.

В нижней части находится сама таблица. В ней горизонтально отображаются шаги, а вертикально циклы. Каждый шаг отображается клеткой с текущим цветом активного канала. Если данных в шаге нет (он не выполнялся), то его клетка будет отображаться серым цветом, как и границы таблицы (шаг номер 1 в приведенном выше примере, для всех циклов, кроме первого).

Над таблицей находятся элементы управления ею и вывода основной информации, по выбранному в таблице шагу и циклу. С помощью опции Синхронизировать можно назначить - будет ли таблица шагов синхронизирована с основной диаграммой и остальными элементами выбора активного шага и цикла в программном обеспечении SmartSoft, или нет. Если эта опция включена, то

с помощью таблицы шагов можно выбирать активный шаг и цикл. Если же она отключена, то координата клетки таблицы не влияет на номер активного шага и цикла и отображение основной диаграммы. В этом случае навигация по таблице происходит значительно быстрее, так как не нужно перерисовывать активный шаг и цикл на основной диаграмме при каждом выборе новой клетки в таблице шагов.

Далее находятся строки, в которых выводится информация о выбранной клетке, например: Точек DC 4332 .


Еще ниже имеется настройка Скрыть шаг . С ее помощью можно любым выбранным шагам (клеткам) запретить отображаться на диаграмме. В этом случае, клетка такого шага будет иметь белый цвет, например:

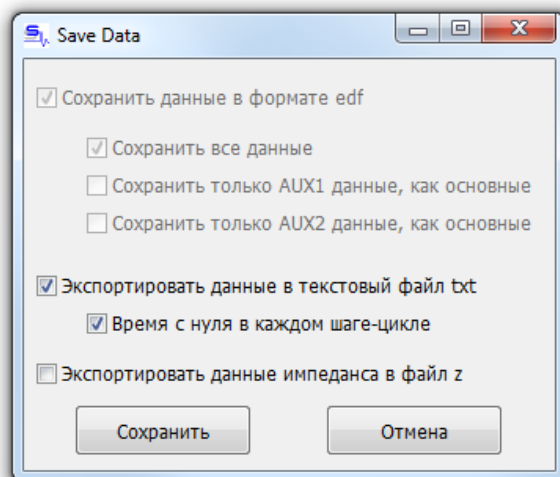
Цикл	1	2	3	4	5	6	7
1	■	■	■	■	■	■	■
2	■	■	■	■	■	■	■
3	■	■	■	■	■	■	■
4	■	■	■	■	■	■	■
5	■	■	■	■	■	■	■
6	■	■	■	■	■	■	■

Пример фрагмента таблицы шагов. Скрыты на диаграмме шаги с 3-го по 7-й для цикла номер 2 (отображены белым цветом). Выбранный для вывода информации шаг отображается квадратом ■ с автоматически выбираемым ПО альтернативным цветом. 1-й шаг отсутствует для цикла 2 и далее (отображены серым цветом).

Можно быстро назначить отображение или запретить отображение всем данным при помощи кнопок .

10. Экспорт данных

При нажатии кнопки  (расположена вверху основного окна SmartSoft) появится окно сохранения и экспорта данных.



Окно сохранения и экспорта данных.

Программа всегда выполняет сохранения данных в формат edf. При это можно выбрать, будут ли также дополнительно сохранены в отдельные файлы Aux данные. Дело в том, что программа SamrtSoft имеет возможность только для просмотра и первичной обработки данных, но не имеет возможности их глубокой обработки и редактирования, так как создана прежде всего для проведения сложных экспериментов. Роль редактирования и глубокой обработки данных компания Electrochemical Instruments отводит программному обеспечению ES8 предыдущего поколения. Оно поддерживает формат данных edf и имеет огромные средства обработки данных и их визуализации. Но оно не может работать с Aux данными. Чтобы загрузить их в него, нужно сохранить их как обычные основные данные в программном обеспечении SmartSoft. Для этого и существуют опции Сохранить только AUX1 данные, как основные и Сохранить только AUX2 данные, как основные, которые становятся активны при наличии Aux данных.

Помимо этого пользователь может выбрать опцию Экспортировать данные в текстовый файл txt для сохранения данных в простом формате txt в виде колонок без служебной информации, содержащейся в файле edf.

Также можно выбрать экспорт в формат данных импеданса z Экспортировать данные импеданса в файл z.

Помимо приведенных средств экспорта, в настоящем руководстве выше, описаны множественные способы экспорта и копирования массивов первичных, пересчитанных и обработанных по циклам данных.

Опция Время с нуля в каждом шаге-цикле позволяет выбрать - начинать ли с нуля каждый новый шаг и цикл при экспорте, или вести сквозное (общее) время через все шаги и циклы.

Высокоточное оборудование для электрохимических исследований SmartStat®
Россия, Московская область, г. Черноголовка
Телефон: 8(495)720-31-57
Адрес тех. поддержки: potentiostat@mail.ru
www.smartstat.ru