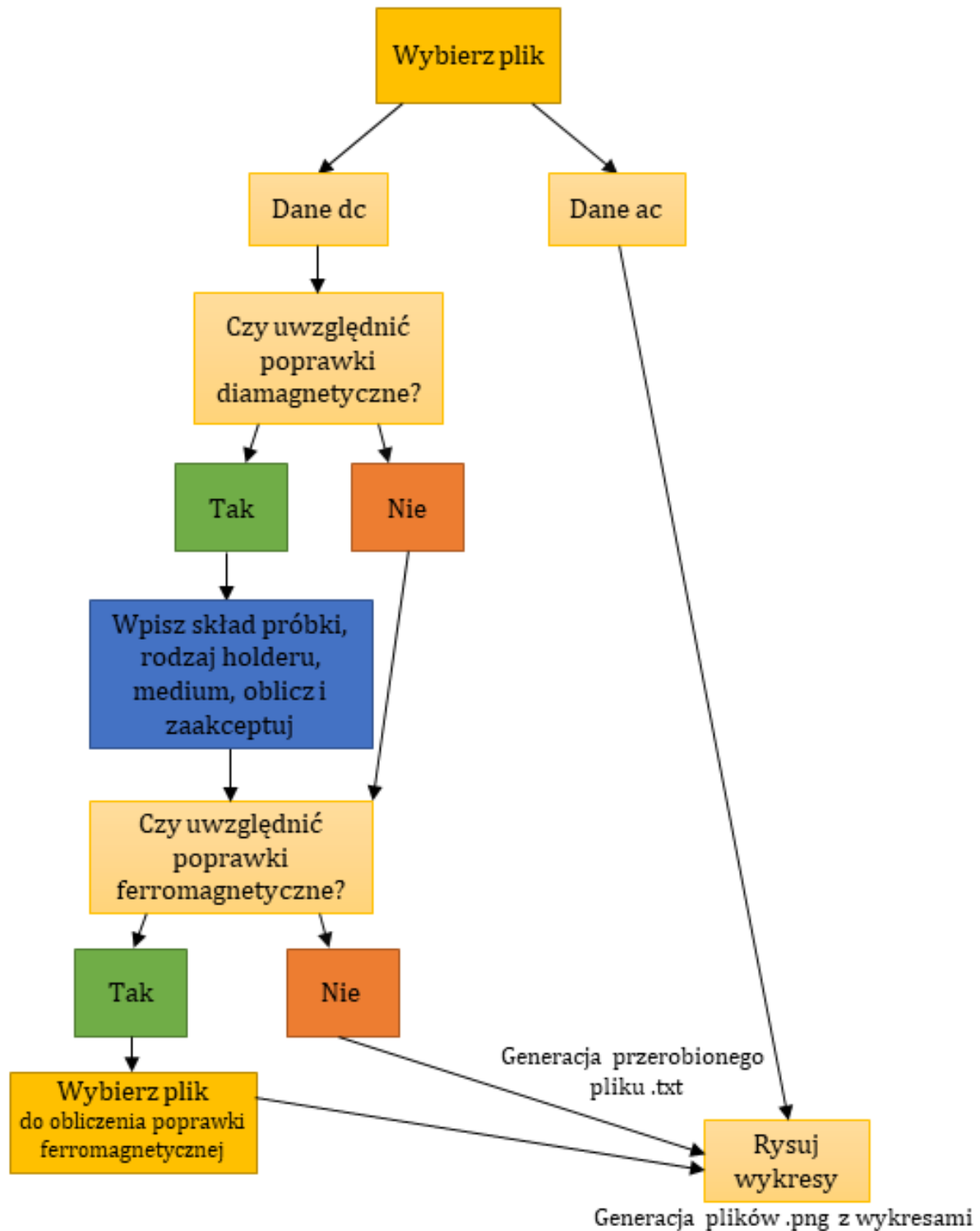


Program do przetwarzania plików z magnetometru MPMS QD 5XL

Magdalena Ceglarska

Język Python – projekt zaliczeniowy

1. Schemat działania programu.



2. Instrukcja obsługi programu (dla przykładowych plików)

- a) Uruchom program np. przez Pycharm. Wyświetli się okno: *magnetic data processing* z dwoma przyciskami: *Choose file* i *Exit*.
- b) Kliknij przycisk *Choose file*. Pojawia się okno dialogowe proszące o wybór pliku do przerobienia.
- c) Po wyborze pliku z pomiarami dc (MC4mox-2-t1k8.rso.dat, Co(NCS)₂(4-methoxypyridine)₂) program pyta się, czy uwzględnić poprawki diamagnetyczne. Jeśli tak, wpisz zgodnie z zamieszczoną instrukcją źródła diamagnetyzmu w próbce. Kliknij *Calculate*, aby obliczyć poprawkę diamagnetyczną (Co2 1 NCS1 2 Pyridine 2 O 2 C 2 H 6 delrin 45.24 wosk 1.73). Zweryfikuj, czy wartość tej podatności (w emu) jest sensowna. Jeśli tak, kliknij *Accept*, jeśli nie, masz możliwość ponownego wpisania źródeł diamagnetyzmu. Jeśli odpowiedź na pytanie o diamagnetyzm jest negatywna program przechodzi od razu do punktu d.

Po wyborze pliku z pomiarami ac (np. MC4mox-acf-h400.ac.dat) program generuje plik .txt w tym samym folderze co plik wejściowy – przejdź do punktu e.

- d) Następnie program pyta się, czy uwzględnić poprawki ferromagnetyczne. Jeśli tak, otwiera się okno dialogowe, w którym należy wybrać plik do ich obliczenia (MC4mox-2-t270.rso.dat). Po jej obliczeniu wyświetla się jej wartość (moment magnetyczny w emu). W tym momencie generowany jest przerobiony plik .txt w tym samym folderze co plik wejściowy. Jeśli odpowiedź na pytanie o ferromagnetyzm jest negatywna program przechodzi od razu do generacji pliku .txt.
- e) Kliknij przycisk *Draw graphs*. W folderze, gdzie znajduje się plik wejściowy wygenerowane zostają plik .png z wykresem/wykresami.
- f) Po zakończonej procedurze można przerabiać kolejny plik.

3. Szerszy opis działania programu.

Wyniki pomiarów z magnetometru MPMS QD 5XL są zapisywane do plików .dat. Pliki składają się z 30 linii komentarzy, 1 linii zawierającej nagłówki kolumn i właściwych danych. Przy imporcie danych do programu Origin (standardowy program używany w naszym laboratorium do analizy danych), taka forma pliku jest niewygodna. Pierwszą funkcją programu jest przerabianie plików na pliki .txt, których forma jest następująca: 1 linia to nagłówki kolumn (wielkości fizyczne), 2 linia to jednostki wielkości fizycznych w odpowiednich kolumnach, 3 linia to komentarze, np. masa próbki, masa holderu itp.

W zależności od typu pomiaru, dane otrzymywane z magnetometru możemy podzielić na dane dc (pomiar w stałym polu magnetycznym) i dane ac (pomiar w zmiennym polu magnetycznym).

Próbki do pomiarów pakowane są w holdery odpowiednie do specyfikacji próbki (kapsułki żelatynowe, płytki z delrinu). Dodatkowo czasem dodaje się nujol lub wosk. Te

elementy, tak jak i sama próbka, są źródłem diamagnetyzmu, na który należy skorygować moment magnetyczny w celu jego poprawnego opracowania. Podobnie, w próbce mogą pojawić się zanieczyszczenia ferromagnetyczne, na które również trzeba przyjąć korektę. Poprawki dia- i ferromagnetyczne uwzględnia się tylko dla danych dc.

Dane dc (rozszerzenia plików: .dc.dat i .rso.dat): Program przelicza moment magnetyczny na odpowiednie wielkości, w zależności od typu pomiaru (Tab. 1.). Zanim jednak to zrobi, użytkownik zostaje zapytany, czy chce, aby przed przeliczeniem zostały uwzględnione poprawki diamagnetyczne. Jeżeli tak, pojawia się lista z symbolami do wpisania składu próbki, materiału, z którego wykonany jest holder i dodatkowego medium (nujol lub воск). Skład próbki należy wpisać rozbijając na odpowiednie części. Wartości podatności magnetycznej wybranych części próbki zostały wprowadzone do programu na podstawie [1]. Części próbki zostały tam podzielone na 6 kategorii: kationy, specyficzne wiązania, atomy w otoczeniu kowalencyjnym, aniony, ligandy, rozpuszczalniki. Lista symboli jest konieczna, ponieważ znaczenie mają nie tylko same pierwiastki w próbce, ale także ich otoczenie, rodzaj wiązania, czy wartościowość atomu/ionu. Przykładowo, w kategorii wiązań, wiązanie potrójne zostało oznaczone jako t (triple), podwójne d (double), pojedyncze s (single). Słowniki z symbolami są skonstruowane w taki sposób, że wartość przypisana do odpowiedniego symbolu jest dopiero później, przy przeliczeniu kolumn mnożona przez 10^{-6} i -1 (oprócz symboli z kategorii wiązania), a także przeliczana na masę próbki (patrz pkt. 4a). Poprawki diamagnetyczne są ujemne, niektóre poprawki na wiązania są dodatnie, ale mają one znikomy wkład, dlatego całkowita poprawka na próbkę będzie ujemna. Przykładowo, związek $\text{Co}(\text{NCS})_2(4\text{-chloropyridine})_2$ należy wpisać w następujący sposób: „Co2 1 NCS1 2 Cl1 2 Pyridine 2”. „Co2” oznacza kation Co^{2+} , „NCS1” oznacza anion NCS^- , „Cl1” anion Cl^- , „Pyridine” oznacza pirydynę. Liczba po każdej z części próbki to jej odpowiednia ilość. W przypadku takich części jak „Pyridine”, jednocześnie uwzględniana jest poprawka od ligandu i od specyficznych wiązań. Jednocześnie, w tym samym polu wpisuje się także materiał holderu i medium i ich masę w mg. Kolejność wprowadzania nie ma znaczenia. Po wprowadzeniu wszystkich źródeł diamagnetyzmu i kliknięciu przycisku „Calculate” program pokazuje sumaryczną wartość poprawki diamagnetycznej wyliczonej jako podatność – można wtedy łatwo zweryfikować, czy wartość ma sens. Podatność jest później przeliczana na magnetyzację w emu poprzez przemnożenie przez pole w Oe.

Po uwzględnieniu poprawki diamagnetycznej program pyta użytkownika czy uwzględnić poprawki ferromagnetyczne. Aby je uwzględnić, trzeba mieć wyniki pomiaru momentu magnetycznego w wysokiej temperaturze od pola magnetycznego.. Standardowo wykonuje się pomiar powyżej 200 K w zakresie pól od 5 do -5 kOe. Po wyrażeniu zgody na uwzględnienie poprawki ferromagnetycznej wybieramy odpowiedni plik. Przerabiany jest on tak jak plik wejściowy (bez poprawek diamagnetycznych, ale również jest zapisywany do pliku .txt). Następnie do tych danych fitowane są dwie proste: do 4 pierwszych i 4 ostatnich punktów. Z wartości bezwzględnej różnicy wyrazów

wolnych podzielonej przez dwa uzyskujemy poprawkę ferromagnetyczną. Poprawka ferromagnetyczna jest dodatnia.

Po wyliczeniu poprawek, poprawki te są odejmowane od momentu magnetycznego próbki (poprawka diamagnetyczna jest najpierw mnożona przez pole, bo jest wyliczana jako podatność; poprawka ferro jest wyliczana od razu jako moment magnetyczny). Można również odpowiedzieć „nie” na pytania o poprawki dia- i ferromagnetyczne, lub uwzględnić tylko jedną z nich.

Po uwzględnieniu (lub nie) poprawek wyliczane są odpowiednie wielkości fizyczne (w zależności od rodzaju pomiaru, Tab. 1.) i dodawane jako kolejne kolumny do danych. Po tych przeliczeniach generowany jest plik .txt. Jest on zapisywany w tym samym folderze co plik wejściowy.

Dane ac (rozszerzenie plików: .ac.dat): dla danych ac nie uwzględnia się poprawek, dlatego też po wyborze pliku ac, od razu generowany jest plik .txt.

Następnie użytkownik może kliknąć przycisk „Draw graphs”, który wygeneruje pliki .png, również w tym samym folderze, z odpowiednimi wykresami.

Po tych operacjach, użytkownik może wybrać kolejny plik do przerobienia i zacząć procedurę raz jeszcze.

4. Typy danych

Podczas pomiarów magnetycznych w naszym laboratorium używamy odpowiednich skrótów, aby potem łatwo rozpoznać, jaki pomiar znajduje się w pliku.

Tabela 1. Wykaz skrótów nazw pomiarów. (χ – podatność magnetyczna, M - magnetyzacja)

| <i>Skrót pomiaru</i> | <i>Mierzona wielkość</i> | <i>Rysowane wykresy</i> |
|-----------------------------|---|--------------------------------|
| h1000, h100, itp. | Moment magnetyczny od temperatury w stałym polu magnetycznym (równym tyle O_e , ile liczba w skrócie). | $\chi(T)$, $\chi T(T)$ |
| t1k8, t2k, t3k itp. | Moment magnetyczny od pola magnetycznego w stałej temperaturze (w K – 1k8 – 1.8 K, 2k = 2 K). | $M(H)$ |
| zfcfc | Moment magnetyczny od temperatury dla próbki chłodzonej bez pola (zfc = zero field cooling) i w polu (fc = field cooling) | $\chi(T)$, |

| | | |
|-------|--|---------------------------------------|
| act | Zmiennoprądowa podatność magnetyczna (moment magnetyczny) w stałym polu magnetycznym (lub bez) dla różnych częstotliwości w zależności od temperatury. | $\chi', \chi''(T)$ |
| acf-h | Zmiennoprądowa podatność magnetyczna (moment magnetyczny) w różnych stałych polach magnetycznych w stałej temperaturze. | $\chi', \chi''(f)$ $\chi''(\chi')$ |
| acf-t | Zmiennoprądowa podatność magnetyczna (moment magnetyczny) w różnych stałych temperaturach w stałym polu magnetycznym (lub bez). | $\chi', \chi''(T)$ $\chi''(\chi')$ |

5. Uwagi

- Masa próbki i jej masa molowa powinny znajdować się w wyjściowym pliku z magnetometru, wartości te powinny zostać wpisane w programie obsługującym pomiary przy instalacji próbki.
- Program i komentarze w kodzie są po angielsku, żeby zapewnić uniwersalność.
- Dane ac nie są rozdzielane na poszczególne temperatury/pola/częstotliwości.
- Do programu dołączone są 3 przykładowe pliki: MC4mox-2-t1k8.rso.dat, MC4mox-2-t270.rso.dat, MC4mox-acf-h400.ac.dat.

Referencje wykorzystane przy implementacji kodu:

- [1] Bain G., Berry J., Journal of Chemical Education, Vol. 85 No. 4, 2008, *Diamagnetic Corrections and Pascal's Constants*.
- [2] Dokumentacja bibliotek: numpy, pandas, matplotlib, tkinter.
- [3] Notatki z zajęć.