

Spis funkcjonalności programu

Miareczkosoft 16

Amadeusz Oleszczak

*Uwaga! Program jest kompatybilny tylko z wersją MATLAB'a R2015a (lub wyższe).
Otworzenie go w wersjach poprzednich może spowodować niespodziewany efekt.*

Program pobiera od użytkownika dane z pliku(bądź kilku plików) w postaci tabeli gdzie umieszczone będą wartości objętości dodanego titranta ($V_{titranta}$) oraz wartości pH zmierzone podczas miareczkowania potencjometrycznego.

Na podstawie tych danych program wylicza V_{sr} dodanego titranta, oraz wyszukuje maksimum funkcji $\frac{\Delta pH}{\Delta V} = f(V_{sr})$, czyli pierwszej pochodnej wykresu $pH = f(V)$.

Program z założenia ma być nieskomplikowany dla użytkownika, stąd obsługujący nie będzie świadom dokonywanych w nim obliczeń i sposobu ich wykonania. Program zwróci jedynie wykres zależności pH r-r od objętości dodanego titranta z zaznaczonym punktem przegięcia i wartość pK_a znajdującą się w pobliżu wykresu. Będzie istniała również możliwość zapisu otrzymanych danych i bardziej szczegółowych wyników obliczeń do pliku.

Punkty zaznaczone rzymskimi **I-IV** to funkcje programu z którymi użytkownik ma realny program.

Punkty **a)-f)** to funkcje które nie są dostępne dla użytkownika i dzieją się „wewnątrz” programu.

I. Pobranie danych od użytkownika

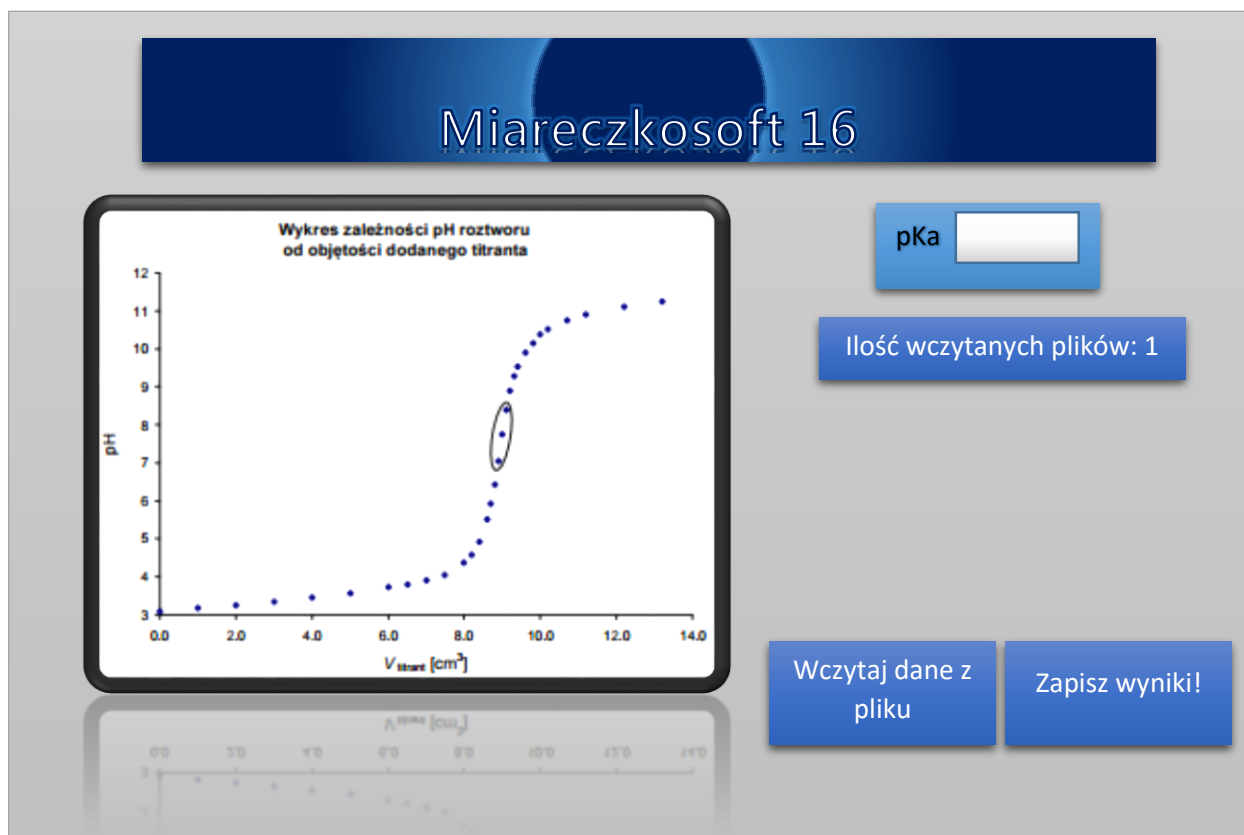
- Zamiana tabeli danych na macierz czytelną dla środowiska MATLAB.
- Dodanie do macierzy kolumn z wyliczonymi wartościami ΔV , V_{sr} , ΔpH , $\left(\frac{\Delta pH}{\Delta V}\right)_{V_{sr}}$
- Stworzenie wykresu $pH = f(V)$
- Stworzenie funkcji $\frac{\Delta pH}{\Delta V} = f(V_{sr})$
- Wyszukanie maksimum funkcji z pkt. d)
- Pobranie wartości $V_{titranta}$ w maksimum i zaznaczenie jej na wykresie c)

II. Wyświetlenie wykresu $pH = f(V)$ z zaznaczonym punktem przegięcia czytelnym dla użytkownika.

III. Wyświetlenie wartości $pK_a = pH = f\left(\frac{1}{2}V_{titranta \text{ w max}}\right)$

IV. Możliwość zapisu wyników analiz do pliku w postaci tabeli ze wszystkimi wyliczonymi wartościami.

Szkic interfejsu



Instrukcja obsługi

Program współpracuje z plikami skoroszytu Microsoft Excel (pliki z rozszerzeniem .xlsx)

Aby plik został odczytany prawidłowo musi zawierać kolejno: kolumnę z nr pomiaru, kolumnę z objętością dodanego titranta oraz kolumnę z pH dla danej objętości.

Aby pobrać plik z danymi użytkownik wciska przycisk Wczytaj Dane.

Po prawidłowym odczytaniu pliku w białym polu pojawi się wykres zależności pH od V_{titrant} . Aby mieć pogląd na wykres pochodnej wystarczy wcisnąć przycisk pod białym polem w lewym dolnym rogu. Użytkownik ma możliwość swobodnego przełączania wykresów w dowolnej chwili.

Wyliczona wartość pKa może zostać odczytana z pola w lewym górnym rogu.

W programie istnieje możliwość wczytania dowolnej liczby plików, ich lista pojawia się w pop-up menu („Wybierz plik z rozwijanej listy”) znajdującym się pod polem z pKa. Dzięki temu użytkownik w każdej chwili może wybrać z którym plikiem chce mieć do czynienia obecnie.

Aby zapisać plik z dodatkowymi danymi niezbędnymi do analizy, kolejno (różnica objętości dodanego titranta 'dV', różnica pH 'dpH', pochodna dpH po dV 'dpHdV', V średnie 'Vsr'), wystarczy wcisnąć przycisk „Zapisz dane!” oraz wybrać ścieżkę zapisu.

Schemat blokowy

