

SMART TAFEL ANALYSIS 2018

Danijel Namjesnik, ZFK

OPIS RADA

Program je namijenjen brzoj obradi podataka iz instrumenta **Princeton Applied Research / EG&G 384 Differential Pulse Polarographic Analyzer**, no može se prilagoditi radu s outputom drugih uređaja.

Za razliku od rada drugih rješenja koji se temelje na nelinearnoj regresiji ili na odabiru povoljnih pravaca slobodnom vizualnom procjenom, ovaj program pronalazi najbolje pravce u zadanom katodnom odnosno anodnom intervalu napona. Program radi neovisno o smjeru snimanja, ulazni podatci se pri uvozu automatski sortiraju te prikaz ne ovisi o smjeru snimanja.

Metoda 1:

Tradicionalnija metoda. Kriterij najboljeg pravca je maksimalni R^2 , a vizualno ga se može pratiti na **Slici 2** kako bi se procijenila potreba za eventualnim pomicanjem granica u kojima se traže pravci. U idealnom slučaju prikaz vrijednosti koeficijenta korelacije u ovisnosti o naponu daje oblik nalik na krivulju koja postiže neku maksimalnu vrijednost u području unutar zadanih granica, no to ovisi o eksperimentalnim uvjetima i izvedbi. Pravci dobiveni na ovaj način ne sijeku se nužno u eksperimentalno dobivenoj $i_{corr.}$!

Metoda 2:

I u ovoj metodi kao i u prethodnoj koristi se R^2 kao kriterij odabira pravaca koji se uzimaju u obzir, ali ne biraju se najbolja dva pravca, nego se od skupa "dovoljno dobrih" pravaca, odnosno pravaca koji zadovoljavaju proizvoljni minimalno zadani R^2 (**Min. cath. R^2** i **Min. anod. R^2**) bira par pravaca koji daju sjecište najbliže eksperimentalno dobivenoj $i_{corr.}$. Na taj način dolazi se do kompromisnog rješenja koje daje najbolje pravce u zadanim rasponima napona, s minimalnim odstupanjem od eksperimentalno dobivenih rezultata.

Rezultati:

Rezultate obje metode lako je vizualno usporediti jer se svi rezultati prikazuju na Grafu. U idealnom slučaju rezultati se poklapaju uz minimalna odstupanja, a podešavanjem granica moguće je postići dobro slaganje ukoliko se procijeni da je potrebno. Druga metoda vjerodostojnija je no razlika između dvije metode može ukazati na probleme s podacima ili odabirom granica, te je ipak potreban konačni sud analitičara na osnovu iskustva i očekivanih rezultata.

Korisnik treba koristiti samo varijable koje su **ZELENO** obojane (ako ne želi koristiti općenite početne vrijednosti, *defaults*).

Gumb "**IMPORT & FIT**" uvozi podatke i odmah pokreće analizu. Nakon eventualne izmjene varijabli za rad na istim ulaznim podacima treba kliknuti samo na "**FIT**".

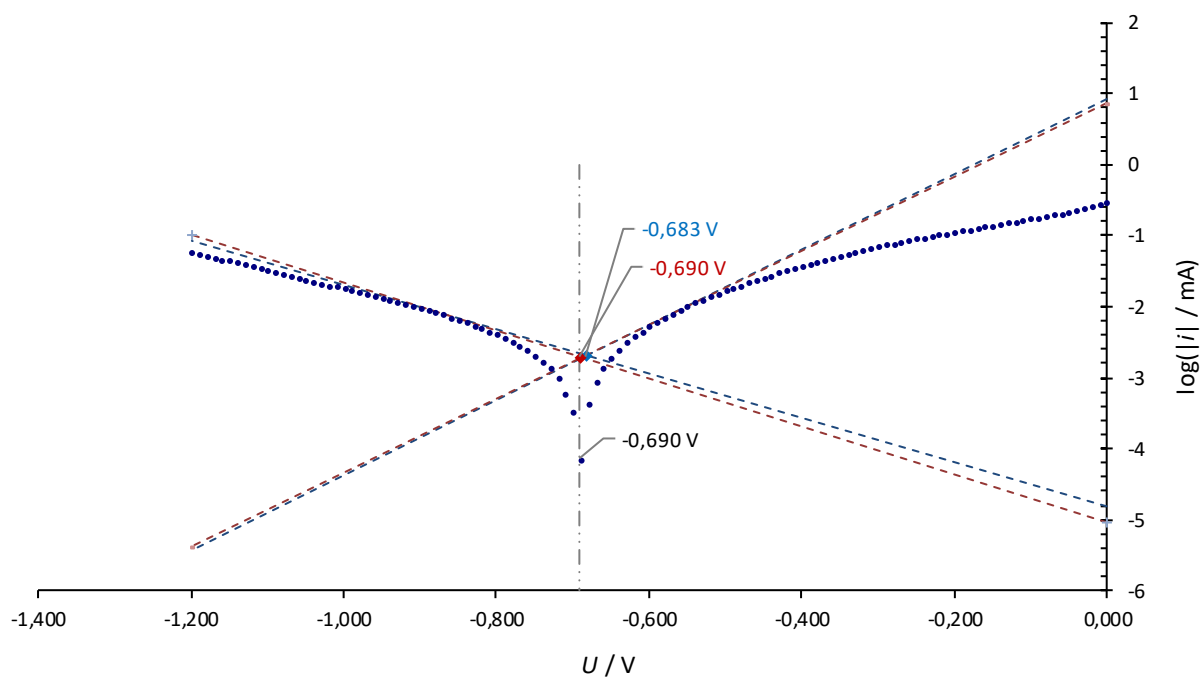
"**CLEAR ANALYSIS**" briše rezultate analize. "**CLEAR ALL**" briše i uvezene podatke i rezultate analize - nužno kliknuti prije nove analize!

"**ClearLimits**" briše postavljene granice, "**AutoLimits**" postavlja granice u "normalnom" rasponu: početak normalnih raspona 100 mV u pozitivnom i negativnom smjeru od potencijala najmanje zabilježene struje, a širina svakog raspona je 100 mV.

Os **Y** na slikama automatski se postavlja u ovisnosti o podacima i nije ju potrebno dodatno mijenjati.

Resolution je automatski izračunata iz ulaznih podataka i nije ju potrebno mijenjati.

Broj mogućih pravaca koji se ispituju ovisi o širini intervala i duljini segmenta odn. broju točaka kroz koje se provlači pravac. Kraći segment daje više pravaca.



Slika 1. Primjer izgleda slike gotove analize. **Plavi** pravci i sjecište rezultat je metode 1, dok su **crveni** pravci i sjecište dobiveni metodom 2.