## 2017.11.07. Melléklet az "**Egyensúlyi állandó meghatározása: Spektrofotometriás mérés tervezése, kivite**lezése és kiértékelése" című gyakorlat értékeléséhez

Ez a kiegészítés akár az eredeti leírás 2. mellékletét, akár a Linux alatt GNUPlot-tal történő értékelést helyettesíti egy Octave nyelven írt program (trijodid.m)<sup>1</sup> használatával, amely a kurzus honlapjáról letölthető. A program használatához a következőkre van szükség:<sup>2</sup>

- 1. Egy telepített, 4.0.3 vagy ennél újabb verziójú Octave programra. A telepítő programok, vagy a szükséges iránymutatás a <u>https://www.gnu.org/software/octave</u> InterNet oldalon érhetők el minden operációs rendszerre.
- Az Octave-on belül egy telepített, optim nevű, nemlineáris paraméterbecslést végző Octave-csomagra. Windows alatt ez már rendelkezésre áll, ha az Octave-ot a szokványos módon telepítették. A többi rendszeren ez általában külön telepítendő az Octave-Forge rendszeren keresztül (ld. a fenti linket).

## Az értékelés előkészítése:

 A Zeiss Jena Specord S200-as spektrofotométerrel mért adatfájlokat gyűjtsük össze egy könyvtárba, aminek a neve lehetőleg ne tartalmazzon se ékezetes karaktereket, se szóközöket. Talán a legjobb választás a könyvtárnévre az a – maximálisan öt – betű, ami a méréssorozat alapneveként lett megadva a mérőprogramnak. Ezt a betűsorozatot basename-ként hivatkozza ez a melléklet a továbbiakban, a konkrét hivatkozásokban mindig ezt kell behelyettesíteni (pl. ha a méréskor a JJTJ nevet választottuk, akkor a basename minden előfordulását JJTJ-vel kell helyettesíteni).

Ha a használt számítógépen nincsenek rendszergazdai jogosultságok, akkor ezt a könyvtárat érdemes a C:\Users\Public\Documents-en belül létrehozni, itt lesznek a legkisebb valószínűséggel problémák az írásjogosultsággal.<sup>3</sup> Az Oktatási Szint gépein még jó hely a C:\OctaveWork könyvtáron belül létrehozott alkönyvtár is.

- 2. Ebbe a könyvtárba kell bemásolni a megfelelő verziójú trijodid.m fájlt is. A számolások előtt ellenőrizzük, hogy a legújabb változatot használjuk-e! A fájl utolsó soraiban megtalálható az egyes verziók dátuma és a változtatások részletezve, ez alapján eldönthető, hogy jó programot használunk-e.
- 3. Ebben a könyvtárban létre kell hozni egy szövegfájlt, kötelezően basename.cnc névvel.<sup>4</sup> Ennek a fájlnak minden sora egy-egy mért spektrumhoz tartozik és három adatot tartalmaz: az adott mért oldatban a jód és a jodid teljes koncentrációját (a 12.1 táblázat második és harmadik oszlopa), valamint a megfele-lő adatfájl nevében lévő sorszámot. A végén a fájlnak hasonlóan kell kinézni, mint a trijodid.m fájl 124–137. sorai, csak százalékjelek és pontosvesszők nélkül. A tizedesjel csak tizedespont lehet, vessző nem! Az első sornak kötelezően a referenciaspektrum adatainak kell lennie.

## Értékelés:

- 1. Indítsuk el az Octave programot.
- 2. Miután megjelenik a program ablaka, ennek bal felső részében látható File Browser segítségével navigáljunk el az adatokat tartalmazó könyvtárba.
- 3. Kétszer rákattintva, olvassuk be a trijodid.m fájlt az Octave szerkesztőjébe, ami a programablak jobb oldalán jelenik meg. A program elindítható az Editor ablakban akár az F5 billentyű megnyomásával, akár a "Save File and Run" ikonra történő kattintással.
- 4. Az indítás után egy előugró ablakban válasszuk ki a használandó nyelvet, majd kattintsunk az OK gombra. Itt meg kell jegyezni, hogy az Octave grafikája még nincs felkészítve az ékezetes betűk kezelésére, emiatt ún. repülő ékezetek biztosítják a magyar helyesírást.
- 5. A következő előugró ablakban a basename-t kell megadni. Figyelemmel kell lenni arra, hogy a kis- és

- 2 Ezen feltételek mindegyike teljesül az Oktatási Szint hallgatói számítógépein.
- 3 Ha egy magyar nyelvű Windows Intézőjében/Fájlkezelőjében dolgozunk, akkor úgy tűnhet, nincs ilyen könyvtár. Ez azonban nem igaz. Ha a Fájlkezelőben elnavigálunk a Felhasználók Nyilvános Nyilvános dokumentumok könyvtárba, majd a Fájlkezelő felső részében lévő szerkesztőlécben az utolsó " ▶" jel mögötti üres részre kattintunk, akkor megjelenik a könyvtár valós neve.
- 4 Ha a Windows Jegyzettömbjével (Notepad) hozzuk létre ezt a fájlt, akkor mentés előtt a "Fájl típusa:"-t "Minden fájl (\*.\*)"-ra kell átállítani, egyébként a Windows automatikusan hozzáfűzi a ".txt" kiterjesztést a fájlnévhez. Ha mégis rossz fájlnevet adtunk meg, akkor a Fájlkezelőben azt át kell nevezni.

<sup>1</sup> Aktuális verzió: 0.02.11/06/2017, ami a fájl végén ellenőrizhető.

nagybetűk nem azonosak az Octave számára! Az OK gomb lenyomása után lehet, hogy akár egy-két percet is várni kell, amíg az első ábra és a következő előugró ablak megjelenik, de a további használat alatt a működés már gyors lesz.<sup>5</sup>

Ha két percnél is többet kellene várni, akkor ellenőrizzük, hogy van-e hibaüzenet a "Command Window" ablakban. Ha igen, akkor a hibát meg kell keresni, és újrakezdeni az értékelést. Ilyen hiba lehet pl., hogy az a PDF fájl, amit a program írni akar, már nyitott egy másik programban.

- 6. A várakozás után megjelenik egy ábra, amely az összes mért, referenciával már korrigált spektrumot mutatja. Emellett megjelenik egy új előugró ablak is, amely segítségével a számolásokban használandó hét hullámhossz nm-ben kifejezett számértékét kell megadni. Ha ezeket a hullámhosszakat a gyakorlatvezető nem adta meg, akkor a hét hullámhosszat most kell kiválasztani a leírásban részletezett megfontolásoknak megfelelően. A kiválasztásban segít, hogy az egérmutató pontos helyét az ábra ablaka mindig mutatja. Az előugró ablak addig ismétlődik, amíg a hét hullámhossz nincs helyesen megadva. Figyelemmel kell lenni arra is, hogy nem biztos, hogy minden hullámhosszon van mért adat. Ha a program emiatt áll le, akkor a "Command Window" ablakban a w változóban nézzük meg a használható hullámhosszakat, majd indítsuk újra az értékelést.
- 7. A hullámhosszak kiválasztása és megadása után a program függőleges vonalakkal megjelöli az ábrán a választott hullámhosszakat, táblázatos formában megadja a mért abszorbanciákat (gyakorlatilag a 12.1 táblázatot), és automatikusan elmenti az ábrát PDF formában, basename\_curves.pdf néven. Erről meggyőződhetünk az Octave File Browser ablakában, ahol a fájlra kétszer kattintva az megjeleníthető.
- 8. Az újonnan előugró ablakban először kilenc lehetőség jelenik meg, amelyekkel elvégezhetjük az öszszes szükséges számolást, amelyekhez a program a szükséges kezdeti értékeket automatikusan választja ki. Érdemes a nemlineáris paraméterbecsléseket sorban végrehajtani.
- 9. Az egy hullámhosszon történő illesztések eredményeit a program egy-egy ábrán foglalja össze, amelyen a mért adatok és az illesztett görbe vannak feltüntetve. Hogy a görbék kezdeti, meredek szakaszán is érzékelhető legyen az illeszkedés mértéke, a görbéket megrajzoltunk mind lineáris, mind logaritmikus *x*-tengelyen. A mért és számolt adatok közötti átlagos eltérés, valamint az eredményként kapott egyensúlyi állandó és moláris abszorbanciák az alsó ábrán láthatók a standard hibáikkal együtt. Az előugró ablak OK gombjára kattintva a program az ábrát elmenti basename\_???nm.pdf néven, ahol a

kérdőjelek helyén a hullámhossz számértéke szerepel. Ha az illesztés sikertelen volt, akkor ábra nem jelenik meg, csak egy információ a tényről. Ebben az esetben is az OK gomb megnyomásával mehetünk tovább.

- 10. Ha néhány hullámhosszon történő számolás során kiderül, hogy valamelyik spektrummal baj van, akkor ellenőrizzük még egyszer, jól vannak-e megadva a teljes koncentrációk. Az esetleges hibát korrigáljuk a basename.cnc fájlban, vagy ha nem találjuk a hiba okát, akkor az adott sort töröljük ebből a fájlból. Ezekben az esetekben kezdjük elölről az értékelést az 1-es ponttól.
- 11. Az összes hullámhosszon történő illesztés hasonló az előzőekhez, csak az illesztett paraméterek nincsenek feltüntetve az ábrán, és a mentett ábra neve basename\_all.pdf.
- 12. Ha mind a nyolc illesztést elvégeztük, akkor két újabb menüpont jelenik meg a "Számolások" ablakban. Az elsővel az eredmények összefoglaló táblázatát kapjuk meg a basename\_results.txt nevű szövegfájlban, még a másikkal a mérés pontosságát illusztráló grafikont, basename\_distribution.pdf néven. Ez utóbbiban a felső ábra az összes mérést tartalmazza, akkor is ha egy-egy pont nagyon hibás és eltorzítja az ábrát; míg az alsó ábra függő változójának tartománya rögzített a –0,1 – 1,1 értékre.
- 13. Az értékelés befejeztével zárjuk be az Octave programot (sok memóriát fogyaszt!).
- 14. A program elkészít minden ábrát és táblázatot, amit a leírás kér. Ezek elemzésével, értelmezésével és a következtetésekkel fejezzük be a jegyzőkönyvet egy részletes diszkusszióval, a leírásnak megfelelően. Az előírt ábrákat elegendő fekete-fehér nyomtatásban mellékelni, nem kell színesben nyomtatni.

<sup>5</sup> A szokatlan várakozásnak két oka van. Egyrészt, az Octave csak az első ábra készítésekor inicializálja a grafikus részeket, nem a program indulásakor. Másrészt, ez alatt az idő alatt a trijodid.m program az összes mért adatot beolvassa és olyan formára hozza, hogy a továbbiakban gyorsan lehessen számolni velük.