

A gyakorlat célja, hogy a kémia alapszakos hallgatók tantervében szereplő kötelező analitika, fizikai kémia, valamint kémiai technológia tárgyú laboratóriumi gyakorlatokhoz szükséges értékelő módszereket megismertesse és használatukat gyakoroltassa; többnyire egy táblázatkezelő program segítségével, néhány esetben más, speciális program használatával. A részletesen tárgyalt részek hetekre bontott tervezete a következő (először a szakmai részeket, majd a használandó programokat érintő részeket felsorolva):

1. Bevezetés, tematika és követelményrendszer ismertetése.
Ismételt mérési eredmények statisztikai jellemzése. Átlag- és szórásadatok számítása, értelmezése; valamint a nagy mintaszám esetén használható statisztikai paraméterek (ferdeség, lapultság) megértése. Az egyszerű függvények kezelése az EXCEL-ben.
2. Mérési adatpárok értékelése, statisztikai jellemzése. Az egyenesillesztés és a kapcsolódó statisztikai paraméterek számolása, értelmezése.
3. A hibaterjedés számolása, a számolt adatok pontosságának állítása az EXCEL munkafüzetében és ábráin. Sűrűség- és eloszlásfüggvények számolása, ábrázolása, értelmezése. A tömbfüggvények megértése és kezelése az EXCEL-ben.
4. Csak gyakorlás.
5. Csak gyakorlás.
6. Numerikus differenciálás (érintő- és szelőmódszer, másodfokú közelítések). A módszerek érzékenysége a kísérleti hibákra. Numerikus integrálás (téglalap- és trapékszabály, Simpson-formula). A módszerek stabilitása.
Celladefiníciók gyakorlása az EXCEL-ben, építve a „Bevezetés a kémiai informatikába” során tanultakra.
7. I. zárthelyi dolgozat, majd bevezetés egy matematikai program használatába.
A (wx)Maxima használatának első lépései, beépített grafikus lehetőségek.
8. Gyökkeresés a matematikai programokba beépített eljárások segítségével.
A (wx)Maxima használata (im/ex)plicit egyenletek gyökeinek megkeresésére.
Az ún. image kezelésben és mérési adatok feldolgozásában használt alapvető mátrixműveletek.
A (wx)Maxima használata a legegyszerűbb mátrixmanipulációkra.
9. Ábrakészítés speciálisan erre a célra fejlesztett program(ok) segítségével. Több ábra együttes kezelése, pontos és érthető ábrák készítésének technikái.
A SciDavis/Qtiplot programok használata publikációra is alkalmas ábrák készítésére.
10. Csak gyakorlás.
11. Csak gyakorlás.
12. II. zárthelyi dolgozat.
13. Javító dolgozatok.

Ajánlott irodalom:

A gyakorlat alapvetően online elérhető segédanyagokra épít, amelyeket mindig az adott héten megoldandó példákkal együtt adunk meg az első évben.

Szeged, 2024. február 12.

Peintler Gábor
egyetemi docens