

## Měření v chemii pomocí PC



Při mnoha fyzikálně chemických měřeních je třeba měřit a registrovat závislost určité fyzikálně chemické veličiny na čase nebo na jiné veličině, která se v čase mění s konstantní rychlostí. K tomu je nutno provádět většinou nudná měření „bod po bodu“ např. se stopkami v ruce nebo s pomocí jednoúčelových zařízení s vestavěným zapisovačem (např. polarograf, spektrometr atd.). V prvním případě je výsledkem měření obvykle „řidký“ soubor bodů o souřadnicích  $x, t$  popř.  $x, y$ , resp. dva vektory veličin  $x$  a  $t$  popř.  $x$  a  $y$ . Ve druhém případě získáme klasický spojitý záznam funkční závislosti  $y=f(t)$  či  $y=f(x)$ . Chceme-li při vyhodnocování, přípravě grafů nebo při přípravě prezentace použít perzonální počítač (PC), stojíme před problémem jak mu naměřená data dát na vědomí, tj. jak vytvořit z naměřených dat či funkčních závislostí datový soubor. Nesporně nejelegantnějším řešením je použití jednoúčelového měřicího přístroje spojeného *on line* s počítačem. Toto však bývá málokdy možné a v praxi z fyzikální chemie až na výjimky vůbec ne. Jedno z možných řešení je založeno na přímém měření, registraci a případně i řízení experimentu cestou propojení sledovaného experimentálního systému s počítačem. Pro neelektronicky orientované chemiky to není triviální úkol. Především je třeba, aby sledované veličiny (mimo čas) byly elektrickými veličinami (proud, napětí, odpor, vodivost, kapacita) nebo aby je bylo možné na elektrické veličiny převést. Dále je třeba mít k dispozici - mimo počítač sám - elektronickou desku s analogově/digitálním a digitálně/analogovým převodníkem, tzv. ADDA desku s potřebným ovládacím programem. Tato deska zajistí digitalizaci sledované veličiny, tj. měření této veličiny v pravidelných časových intervalech. Naměřená data jsou pak ukládána spolu s dalšími potřebnými informacemi v datovém souboru, kde jsou k dispozici k dalšímu zpracování v elektronické formě.

Chemické experimenty mají oproti jiným experimentům (např. ve fyzice) některé zvláštnosti:

- obvykle není nutno měřené veličiny snímat s vysokou frekvencí měření, většinou vystačíme s frekvencí do 10Hz,
- často se pracuje v agresivním prostředí kyselin, louhů a organických rozpouštědel, tomu musí být přizpůsobena konstrukce čidel.

K realizaci takových „otevřených“, počítačem podporovaných experimentálních aparatur je třeba mít k dispozici řadu technických (hardware, HW) a programových (software, SW) prostředků. Získání potřebného souboru navzájem komunikujících prostředků je možné pomocí tzv. Školního experimentálního systému ISES (Intelligent School Experimental System).

### Popis a charakteristika měřicího systému ISES



Počítačový měřicí systém ISES (Mentar s.r.o. & PC-IN/OUT, ČR) představuje školní experimentální systém, který umožňuje realizovat reálné experimenty (fyzikální, chemické, biologické a další), jejich průběh a výsledky monitorovat, zpracovávat a případně také prostřednictvím počítače řídit. Školní experimentální systém ISES je dodáván jako souprava technického vybavení (hardware) a programového vybavení (software).

## TECHNICKÉ PROSTŘEDKY



Soubor technických prostředků reprezentujících ISES jsou: AD/DA **převodníková deska** která je vsunuta do sběrnice počítače, **ovládací panel** a **měřicí moduly**. ISES je dodáván ve třech provedeních. Nejjednodušší je model **COM**, který je snadno přenosný, převodníková deska je nainstalována přímo do ovládacího panelu, který je pouze kabelem spojen s libovolným počítačem s předinstalovaným ovládacím programem. Ovládací program je však dosud vyvinut pouze ve verzi pro DOS. Další verze **STANDARD** a **PROFESSIONAL** se liší kvalitou ADDA karty. Verze **PROFESSIONAL** je vhodná pro nejnáročnější aplikace, pro sledování rychlých dějů (vzorkovací frekvence je 63 kHz). Ovládací software je vyvinut jak pro DOS tak i pro Windows. Měřicí moduly jsou k dispozici následující: **TEPLOMĚR** ( $-20^{\circ}\text{C}$  -  $120^{\circ}\text{C}$ ), **VOLTMETR** (10V, 1V, 100mV, 10mV; symetrické rozsahy:  $\pm 5\text{V}$ ,  $\pm 0,5\text{V}$ ,  $\pm 50\text{mV}$ ,  $\pm 5\text{mV}$ ), **AMPÉRMETR** (1A, 100mA, 10mA, 1mA; symetrické rozsahy:  $\pm 0,5\text{A}$ ,  $\pm 50\text{mA}$ , 5mA, 0,5mA), oba pro stejnosměrný i střídavý signál. Dále modul **OHMETR** (1,10,100k $\Omega$ , 10M $\Omega$ ), **MĚŘIČ KAPACIT** (1, 10, 100nF, 10  $\mu\text{F}$ ), **pH-METR**, **KONDUKTOMETR** (100mS, 10mS, 1mS, 0,1mS). Pro didaktické použití jsou k dispozici další moduly jako: siloměr, optická závora, snímač polohy, detektor hladiny, proudový booster, EKG, anemometr, lékařský teploměr. Sortiment je dále rozšiřován. Pozn.: **TUČNĚ** označené moduly jsou k dispozici na naší katedře.

Další důležitou technickou součástí ISESu je ovládací panel. Umožňuje pohodlné měření, případně ovládání experimentů. Prostřednictvím patnácti pinových konektorů se k němu připojují měřicí moduly (vstupní kanály). Signál je možné přivést připojením i pomocí klasických svorek - banánků. Na panelu jsou k dispozici i výstupní kanály. Správná činnost kontrolního panelu je signalizována svítícími červenými indikátory (LED diody). Kontrolní panel je kabelem propojen s ADDA deskou v počítači. Panel automaticky detekuje všechny připojené moduly soupravy ISES a nastavení jejich rozsahů.

## PROGRAMOVÉ VYBAVENÍ



Pro soupravy ISES **STANDARD** a **PROFESSIONAL** jsou vyvinuty verze ovládacího software pro DOS i pro Windows. V dalším textu bude pojednáno pouze o verzi pro MS Windows. Jedná se o verzi ISES v. 2.0 pro Windows 3.1 a vyšší. Software je trvale nainstalován na disku v adresáři C:\ISESWIN. Data jsou ukládána do adresáře C:\ISESWIN\DATA\dalsi\_adresar.

V dalším textu je podrobněji popsána práce s programem ISES, jeho možnosti a postupy při realizaci experimentů. Od posluchačů je očekávána znalost ovládání operačního systému Windows a filozofie práce s programy pracujícími pod tímto systémem.

Prostředí programu ISES principiálně umožňuje:

- zakládání-plánování nového *experimentu*, *ukládání* výsledků do souboru, *tisk* zvolených výsledků, *export* dat,
- *měření* v rámci nového nebo v rámci dříve naplánovaného *experimentu* a sledování průběhu experimentu na monitoru,
- zobrazení dat získaných v rámci *měření*, definování vzhledu *panelů* a grafů, způsob definice zobrazení naměřených dat, popis dostupných funkcí atd., zvětšování a zmenšování libovolné části pracovní plochy, tj. funkce „zoom“ či „lupa“,

- nezanedbatelnou součástí programu ISES jsou nástroje pro dodatečné zpracování naměřených dat jako: odečet hodnot, určité integrály, integrace závislosti, derivace závislosti, vyhlazování křivek atd.

## ZÁKLADNÍ TERMINOLOGIE



**Organizace dat.** Veškerá data zpracovávaná programem ISES, lze chápat jako hodnoty veličin, získaných (naměřených) jejich odečtem z měřicí aparatury. Data přicházejí do kontrolního panelu vstupem, který budeme označovat *kanál* a jednotlivé kanály jsou označené písmeny *A, B, C* atd. shodně s označením na kontrolním panelu. Pozn.: Kanály rozlišujeme na *vstupní* a *výstupní*, podle směru toku dat. *Měřením* rozumíme data, která vznikla současným načítáním a záznamem hodnot z jednoho nebo více kanálů. Měření je charakterizováno základními údaji o frekvenci odečítání těchto hodnot, a době trvání měření, o měřených modulem, použitých kanálech atd.

Základní organizační a pracovní jednotkou programu ISES je „*experiment*“. Experiment obsahuje:

- jedno nebo více měření,
- informace o organizaci měření,
- informace pro zobrazení,
- informace o zobrazení dat a manipulaci s nimi.

Všechny uvedené informace tvoří *datový soubor experimentu*, mohou se uložit do souboru *<zvolený\_název.IEX>*. Vlastní experimentální data mohou být k dalšímu elektronickému zpracování exportována do jiných volitelných formátů, mimo jiné do formátu programu Excel (.XLS), který je čitelný např. i pro Grapher pro Windows (Golden Software).

**Zobrazení dat.** Základem pro zobrazení dat je *okno experimentu*. Okno experimentu může být rozděleno do několika samostatných ploch - *panelů*. Každý z panelů představuje samostatnou plochu pro zobrazení příslušných dat a je nezávislý na ostatních panelech. V každém panelu může být zobrazeno několik tzv. *zobrazení*. K zobrazení *X* lze přiřadit data z jednoho nebo více kanálů podle definice:

$$X = A \text{ nebo } X = A + B \quad (0.1.)$$

kde *X* je označení zobrazení a *A, B* jsou označení kanálů s daty.

**Experiment.** Experiment představuje kompletní soubor dat a informace o jejich zobrazení a o zobrazení dat vzniklých jejich dodatečným zpracováním. K tomu je nutno použít buď již dříve realizovaného (definovaného) experimentu, založit experiment nový včetně parametrů měření. Parametry měření je vhodné uložit na disk do souboru *<jméno\_souboru.IMC>*, tak aby jej bylo možné použít opakovaně.

---

**ORIENTAČNÍ ZNAČKY:**

---



Úvod k skupině laboratorních úloh



Teorie a vztahy k vyhodnocení úlohy



Úkol (otázka na níž odpovídá závěr laboratorní úlohy)



Přístroje, potřeby a chemikálie potřebné k provedení úlohy



Důležitá informace nebo upozornění



Pracovní postup



Způsob vyhodnocení



Co nezapomenout uvést v protokolu (viz obecná osnova v kap. 13)

---