

Technická zpráva – Software

Autoři: Jan Fišer, Michal Příbyl

Umístění: Vysoká škola chemicko technologická v Praze

Název: Program pro vyhodnocení dat cyklické voltametrie

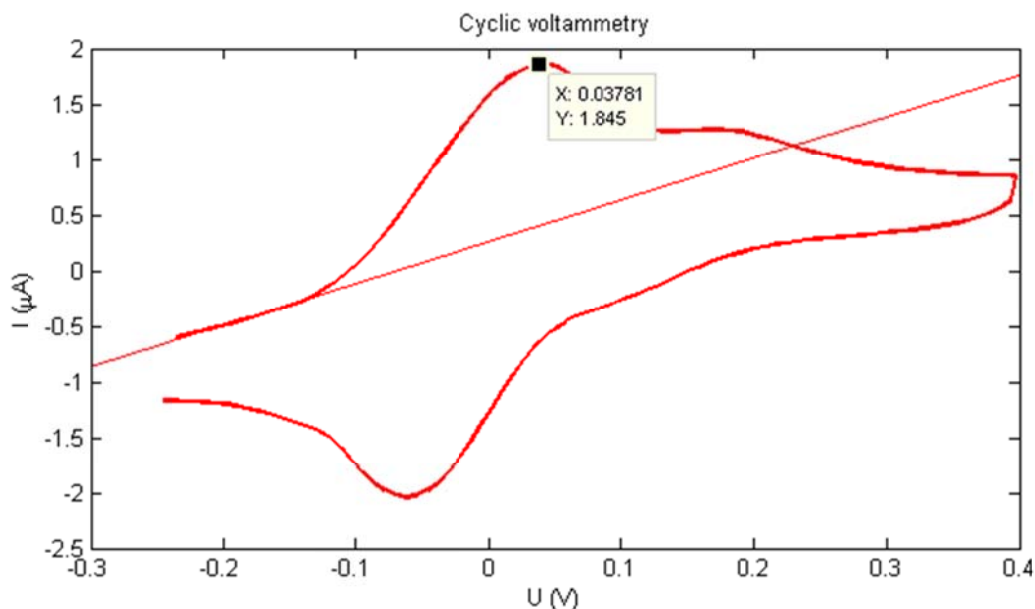
Identifikační kód: Software_CV

Příložený program vyvinutý v prostředí Matlab umožňuje interaktivní vyhodnocení dat, která jsou získána z měření cyklické voltametrie. Ač existují komerční programy na vyhodnocování dat z cyklické voltametrie v řadě případů neumožňují další zpracování dat jako je to možné s toolboxy, které jsou obsaženy ve vývojovém prostředí Matlab. Z tohoto důvodu byl vyvinut jednoduchý program/skript, který umožňuje jednoduše a interaktivně zpracovávat i větší množství naměřených dat. Interaktivnost výběru je nezbytná, neboť grafy cyklické voltametrie mohou být často složité s velkým množstvím píku. Uživatel tedy může vybrat oblast, která je předmětem jeho zájmu.

Typický graf cyklické voltametrie je získán vkládáním napětí s periodickým průběhem do reakčního systému a měřením proudové odezvy. Tento elektrický proud vzniká vložení napětí na elektrochemickou celu, ve které probíhá elektrochemická reakce. Data získaná programem jsou hodnoty elektrického proudu v naměřeném píku s odečtenou hodnotou proudového pozadí. Takto je získán proud odpovídající pouze elektrochemické reakci, i_p . Tento údaj je obvykle použit ve spojení s Randlesovou – Ševčíkovou rovnicí

$$i_p = 2,68 \cdot 10^5 n^{3/2} A D^{1/2} C_{redox} v^{1/2} \quad (1)$$

kde A je plocha elektrod, n je počet elektronů vyměněných při oxidačně redukční reakci, v je rychlost vkládaného napěťového signálu, D je difúzní koeficient a C_{redox} je koncentrace oxidované látky. Pomocí rovnice (1) může být například zjištěna efektivní plocha elektrod.



Obr. 1 Typický graf získaný cyklickou voltametrií zobrazuje závislost měřeného elektrického proudu na vloženém napětí.

Technická zpráva – Software

Autoři: Jan Fišer, Michal Příbyl

Umístění: Vysoká škola chemicko technologická v Praze

Název: Program pro vyhodnocení dat cyklické voltametrie

Identifikační kód: Software_CV

Odečet proudu i_p je založený na označení píku a dvou bodů v lineární oblasti cyklického voltamogramu, kde není předpokládán významný příspěvek elektrochemické reakce, ale pouze přítomnost proudového pozadí. Skript k těmto účelům používá funkci polyfit, která je zodpovědná za proložení proudové odezvy v lineární oblasti voltamogramu bez chemické reakce. Následně program využívá funkcí, které součástí vývojového prostředí Matlab, jsou to především funkce get a set. Program byl vyvinut ve verzi Matlab 7.12.0 (R2011a).

Návod pro použití programu

Program zpracovává data získaná z měření přístrojem Autolab společnosti Metrohm v ascii formátu (typ souboru *.txt). Spolu s programem je v internetové příloze dodán také soubor s naměřenými hodnotami vzorového voltamogramu. Po spuštění programu jsou data načtena z ascii souboru a je zobrazen voltamogram závislosti proudu v mikroampérech na vloženém napětí, obr. 1.

Klíčovými parametry programu jsou hodnoty PocetPiku a PocetGrafu, které musí uživatel změnit podle předpokládaného množství píků na voltamogramu, resp. podle počtu zpracovávaných grafů.

Program následně vyzve uživatele, aby označil oblast lineárního nárůstu proudu způsobeného vloženým napětím, kde nedochází k chemické reakci. Uživatel může k výběru dat použít myš nebo šipky. Každý zadaný bod musí uživatel potvrdit označením klávesou Enter. Dále uživatel označí pík v grafu cyklické voltametrie. Následně se zobrazí přímka linearizace procházející částí s lineárním nárůstem proudové odezvy bez chemické reakce. Tento postup uživatel provede tolikrát, kolik činí hodnota parametru PocetPiku. Výstupem programu je vektor obsahující hodnoty proudů v píku i_p .