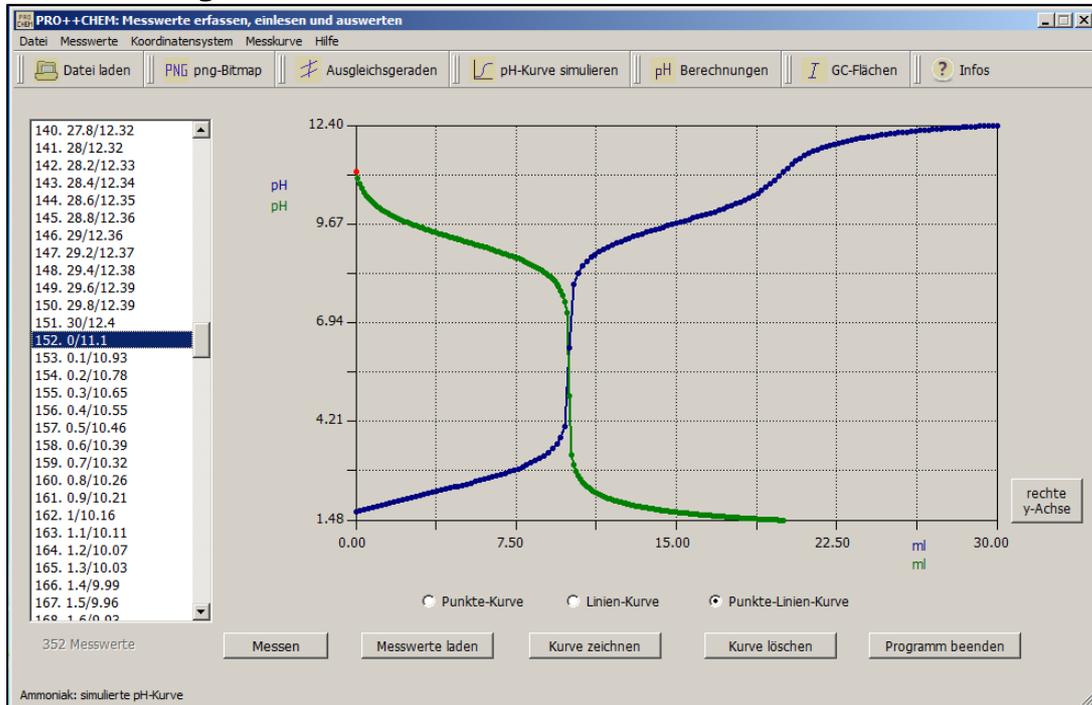


allgemeine Hinweise zu pro++chem

von Gerd Protschuk

Beispiel für eine **Programmoberfläche von PRO++CHEM:**

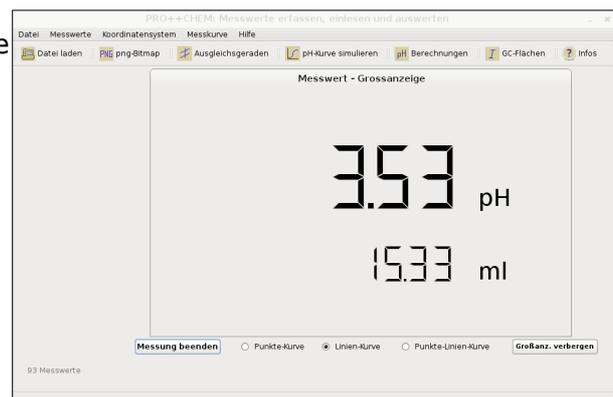


pro++chem ist kostenlos und darf weitergegeben werden.

Die Ausführung und Anwendung von pro++chem geschieht auf eigene Verantwortung. Für auftretende Fehler bzw. Schäden übernehme ich keine Verantwortung.

pro++chem-Funktionalität (Auszug):

- Aufnahme von Messungen (über die serielle oder USB-Schnittstelle)
- Echtzeitmessung mit Großanzeige der Messwerte (s. Abb. rechts) oder als dynamisch aufgebaute Messkurve
- Auswertung aufgenommenener oder gespeicherter Messreihen
- Äquivalenzpunkt-Bestimmung mit Hilfe der 3-Geradenmethode
- 2 Messreihen können in einem Koordinatensystem mit 2 Y-Achsen dargestellt werden
- Speichern der Messkurve als png-Bitmap
- Zeichnen von Ausgleichsgeraden mittels linearer Regression
- Anzeige der entsprechenden Koordinaten von Äquivalenz- und Geradenschnittpunkten (Mauszeiger mit Punkt zur Deckung bringen)
- Koordinaten von Äquivalenz- und Geradenschnittpunkten werden an das Ende der Messwerteliste geschrieben
- Anzeige der Geradengleichungen von Ausgleichsgeraden durch Berühren der Schnittpunkte von Koordinatenrechteck und Ausgleichsgerade mit dem Mauszeiger
- Speichern von Messreihen mit oder ohne Kommentar



- Simulation von pH-Kurven
- Löschen von einzelnen Messwerten und Messwertbereichen
Anm.: Alle Löschvorgänge finden nur auf Programmebene statt. Es werden keine Daten auf dem Speichermedium gelöscht!
- Messwertumrechnungen
- diverse pH-Wertberechnungen
- Berechnung molarer Massen

Tastaturkürzel, die auf **der Homepage** und in **der integrierten Programm-Hilfe** verwendet werden:

- **LMT** = linke Maustaste
- **LMT-Klick** = Klick mit der linken Maustaste
- **RMT** = rechte Maustaste
- **RMT-Klick** = Klick mit der rechten Maustaste

Tastaturkürzel und Funktion der Programm-Menüs:



Menü **Datei:**

- **Strg-O:** Datei öffnen
- **Strg-S:** Datei speichern
- **Strg-Q:** Programm beenden

Menü **Messwerte:**

- **Strg-L:** Messwerte laden (aus gespeicherter Datei)
- **Strg-Z:** Messkurve zeichnen
- **Strg-A:** alle Messwerte anzeigen (in einem Listenfeld)
- **Strg-K:** keine Werte anzeigen (Listenfeld wird ausgeblendet)
- **Strg-T:** Messwerte vertauschen (der Tausch betrifft Messkurve und Listenfeld)
- **Strg-R:** Messwerte umrechnen:
Die Option **Formel $X^a + b \cdot X + c$** ermöglicht komplexe Umrechnungen der X- bzw. Y-Werte.
Eingabesyntax: $^a \cdot (b) + (c)$, wobei a, b und c beliebige Zahlen, auch negative, sein können.
Bei der Eingabe von **b** und **c** müssen die Klammern gesetzt werden! Negative Vorzeichen sind nach der öffnenden Klammer anzugeben. Der Wert von **a** darf nicht in Klammern stehen! Für a, b und c sind auch Brüche als Eingaben möglich.
Über diese Option ist es möglich, bei Titrationen mit zeitlichem Verlauf (d.h. X-Werte in sec) die X-Werte nachträglich in "ml-Werte" umzurechnen. Vorausgesetzt, man verwendet für die Zugabe der Maßlösung während der Titration und bei der nachträglichen Bestimmung der Austropfdauer von 100 ml Maßlösung dieselbe [Gleichlaufbürette](#) (s. auch [Aufnahme von Messwerten](#)).

Vorgehensweise für die nachträgliche Umrechnung der X-Werte von "sec-Werten" in "ml-Werte":

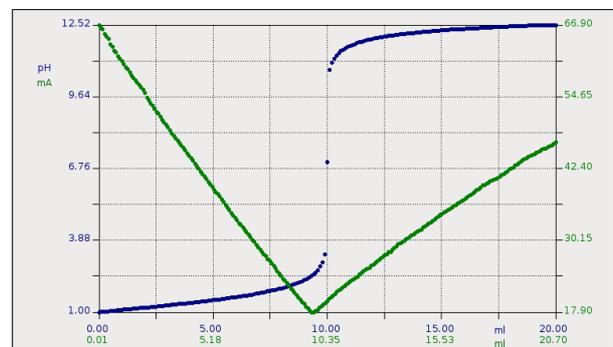
- Messwertdatei mit pro++chem laden
- im Menü 'Messwerte' die Option 'Messwerte umrechnen' wählen (Strg+R)
- im Umrechnungsfenster 'Formel $X^a+b*X+c$ ' auswählen und die Schaltfläche 'X-Werte umrechnen' mit der Maus anklicken (LMT-Klick)
- im danach geöffneten Fenster in die Eingabezeile, die nach dem Eingabeschema $X^a(b)+c$ steht, folgende Eingabe [als (b) -Term] tippen: ***(100/100ml-Zeit)**. Die Eingabe für die 100ml-Zeit muss dem ermitteltem Zeitwert in sec entsprechen.
- durch LMT-Klick auf die X-Achsenbeschriftung sec kann dann die neue Einheit ml festgelegt werden.

Die Austropfdauer von 100 ml Maßlösung bestimmt man, indem man die Maßlösung in die Gleichlauf-bürette füllt und die Zeit in Sekunden ermittelt, die verstreicht, bis 10 ml der Maßlösung in einen (10 ml) Messzylinder getropft sind. Den Vorgang kann man noch 2x wiederholen und aus der gemittelten Zeit auf die 100 ml Maßlösung hochrechnen.

- **Strg-2**: X-Werte in ml-Werte umrechnen (bei Titrations und Verwendung einer Gleichlaufbürette: nachträgliche Umrechnung der X-Werte von Messungen mit zeitlichem Verlauf in ml-Werte)
- **Strg-U**: ursprüngliche (d.h. nicht umgerechnete) Messwerte zurückholen (mit Ausnahme gelöschter Werte)
- **Strg-D**: einzelnen Messwert löschen
- **Strg-B**: Messwertbereich löschen (d.h. zusammenhängender Bereich von Messwerten)

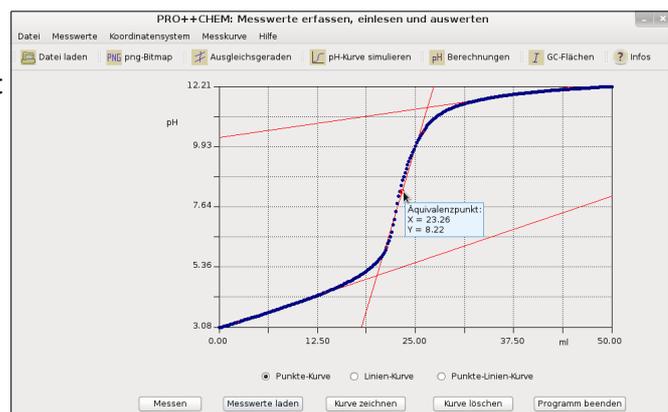
Menü **Koordinatensystem**:

- **Strg-V**: Koordinatensystem verändern (Eingabe neuer Grenzen der x- bzw. y-Achse, die gleiche Aktion löst man aus durch **RMT-Klick** auf die **Programmoberfläche**)
- **Strg-W**: ursprüngliche Koordinatenwerte (die ursprünglichen Grenzen der Achsen werden eingestellt; sie entsprechen den Minima bzw. den Maxima der Messwerte)
- **Strg-Y**: rechte Y-Achse einblenden (nur bei 2 Messkurven aktiviert, s. Abb. rechts)
- **Strg-X**: rechte Y-Achse ausblenden



Menü **Messkurve**:

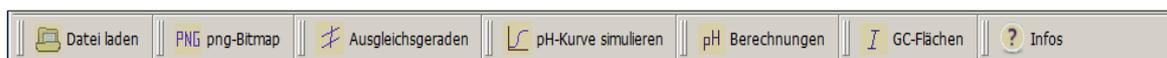
- **Strg-3**: Äquivalenzpunkt: 3-Geradenmethode (Äquivalenzpunkt mit Hilfe von 3 Ausgleichsgeraden bestimmen; die gleiche Aktion wird ausgelöst durch **LMT-Klick** auf die Schaltfläche **Ausgleichsgeraden** der **Werkzeugleiste**; s. Abb. rechts)
- **Strg-E**: Äquivalenzpunkt: Steigung (der Äquivalenzpunkt wird über das Steigungsmaximum der Messkurve bestimmt)



- **Strg-Ä**: Messpunktgröße ändern; in einer Auswahlbox kann die Größe der Messpunkte mit verschiedenen Werten zwischen 4 und 10 belegt werden
- **Strg-M**: Messwerteinheiten setzen (die Einheiten der x- und y-Achse können neu eingegeben werden; die gleiche Aktion wird ausgelöst durch **LMT-Klick** auf eine der **angezeigten Messwerteinheiten**)
- **Strg-F**: Flächeninhalte bestimmen (Ermittlung der Flächeninhalte eines GC-Spektrums; die gleiche Aktion wird ausgelöst durch **LMT-Klick** auf die Schaltfläche **GC-Flächen** der **Werkzeugleiste**)
- **Strg-I**: Informationen zur Messreihe (es werden die in der Messwerte-Datei gespeicherten Zusatzinformationen angezeigt)
- **Strg-N**: Messkurve löschen (alle Messwerte und die Messkurve werden auf Nachfrage gelöscht bzw. ein Löschvorgang verworfen), eine bestimmte, wählbare oder alle Kurven
- **Strg-G**: Geradengleichung/en anzeigen (Anzeige der Geradengleichungen von Ausgleichsgeraden: Schema $y = a \cdot x + b$)
- **Strg-7**: Kurve verbergen (Anzeige eines Fenster zur Auswahl der zu verbergenden Messkurve)
- **Strg-8**: verborgene Kurve anzeigen (alle verborgenen Messkurven werden wieder sichtbar)

Menü **Hilfe**:

- **Strg-H**: Hilfe (Anzeige der Online-Hilfe von pro++chem)
- **Strg-P**: Info über pro++chem (Anzeige der Programm-Lizenz)



Schaltflächenleiste (die Schaltflächen sind nur bei geladener Messreihe aktivierbar):

An ihrem linken Rand besitzen die einzelnen **Schaltflächen** eine senkrechte Doppellinie. Erfasst man sie dort mit gedrückter LMT, dann kann man sie an eine beliebige Stelle auf der Bildschirmfläche **verschieben**.

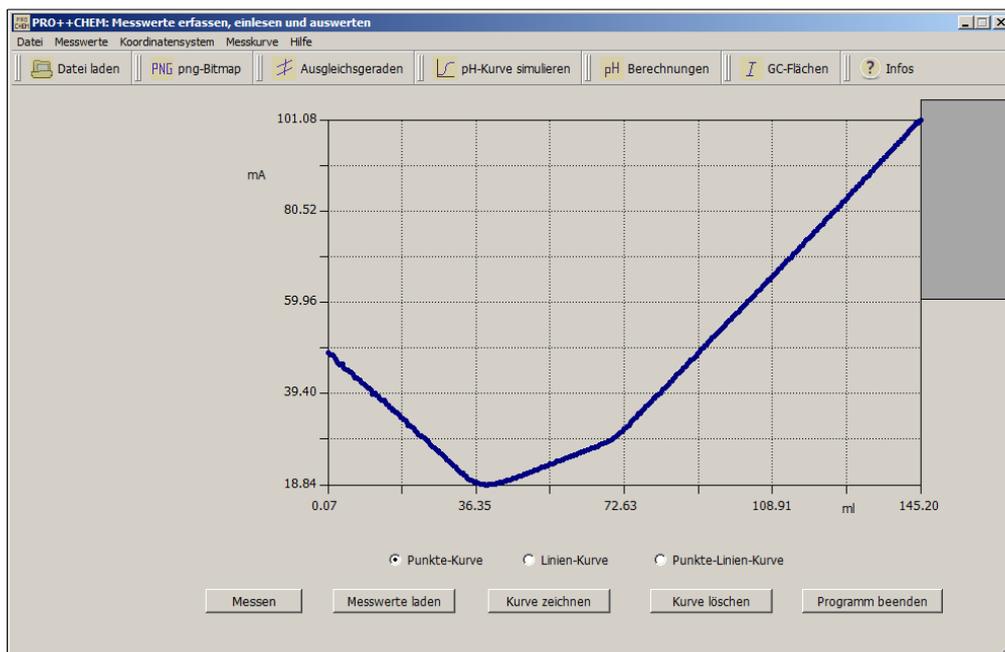
- **Datei laden**: ein LMT-Klick erlaubt das Einlesen gespeicherter Dateien mit Messdaten als Inhalt
- **png-Bitmap**: ein LMT-Klick auf die Schaltfläche fordert dazu auf, den Grafikbereich mit Hilfe der Maus bei gedrückter LMT zu markieren (Festlegung des Grafikausschnittes per Maus-Dragging). Nach dem Freigeben der LMT wird der gewählte Ausschnitt der Messkurve als png-Grafik gespeichert. Anschließend öffnet sich ein Fenster mit dem Hinweis, dass die Grafik unter der Bezeichnung '*Dateiname.png*' (*Dateiname* = vom Benutzer festgelegte Dateibezeichnung) im aktuellen/gewählten Verzeichnispfad gespeichert wurde.
- **Ausgleichsgeraden**: LMT-Klick → es können bis zu 3 Ausgleichsgeraden durch eine Menge frei wählbarer Messpunkte gelegt werden (wichtig zur Ermittlung von Äquivalenzpunkten und bei der Auswertung von Leitfähigkeitskurven). Die Koordinaten der Geradenschnittpunkte werden angezeigt, wenn man sie mit dem Mauszeiger 'berührt'.
- **pH-Kurve simulieren**: ein LMT-Klick startet die Simulation einer pH-Kurve. Es wird die Neutralisation einer wählbaren Säure (Natronlauge als Titrator) bzw. Base (Salzsäure als Titrator), dargestellt als pH-Kurve, simuliert.

- **Berechnungen:** ein LMT-Klick ermöglicht die Auswahl und Durchführung diverser pH-Berechnungen (von sauren/alkalischen Lösungen und von Pufferlösungen), Gehaltsberechnungen und die Berechnung molarer Massen.
- **GC-Flächen:** ein LMT-Klick ermöglicht die Flächenbestimmung in GC-Spektren (von maximal 5 Flächen).
- **Infos:** beim Berühren der Schaltfläche mit dem Mauszeiger bzw. durch einen LMT-Klick werden Informationen zu der/den dargestellten Messreihe/n angezeigt: Anzahl der Messkurven, die zugehörige Farbe, sowie die Anzahl und der Bereich der Messwerte.

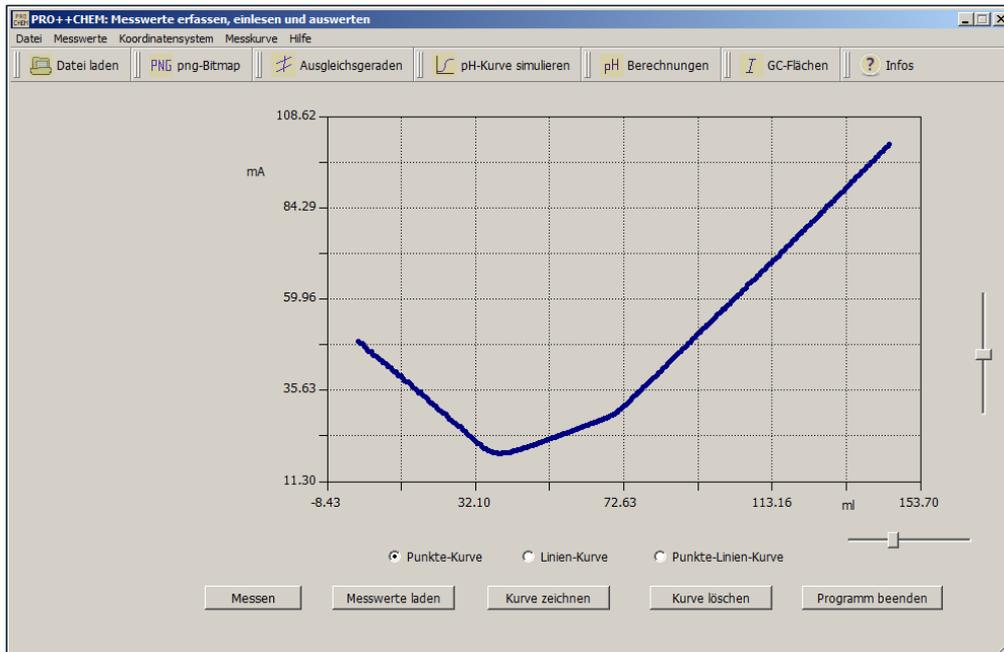


Die Schaltflächen von pro++chem:

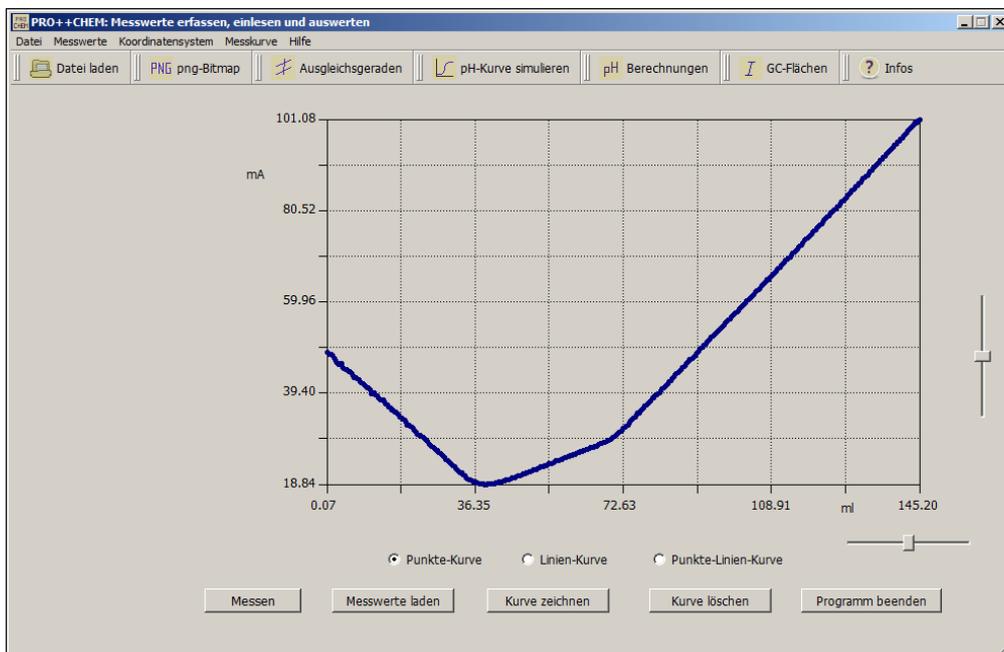
- **Messen:** ein LMT-Klick erlaubt die Einstellung der Parameter für die Aufzeichnung von Messwerten und den Start einer Messung.
- **Messwerte laden:** ein LMT-Klick erlaubt das Einlesen von Messdaten aus gespeicherten Dateien.
- **Kurve zeichnen:** ein LMT-Klick zeichnet eine Messkurve, entsprechend der aktivierten Option Punkte-Kurve, Linien-Kurve oder Punkte-Linien-Kurve.
- **Kurve löschen:** ein LMT-Klick löscht eine einzelne, wählbare Messkurve oder alle dargestellten Messkurven.
- **Programm beenden:** ein LMT-Klick beendet pro++chem auf Nachfrage.
- **Koordinatensystem skalieren:** (ab den Programmversionen vom 19.8.2015) ein LMT-Klick auf einen nicht sichtbaren Bereich (→ grau markiertes Rechteck rechts oben in folgender Abb.) der Programmoberfläche blendet Schieberegler ein bzw. aus, mit deren Hilfe das Koordinatensystem *einer* angezeigten *Kurve* skaliert werden kann.



Ein LMT-Klick in die (im Programm nicht hervorgehobene) Rechteckfläche blendet zwei Schieberegler zur Skalierung des Koordinatensystems ein:



Die Skalierung selbst nimmt man durch mehrere LMT-Klicks auf die Achse eines Schiebereglers vor bzw. aktiviert sie durch einen LMT-Klick auf den Reglerknopf mit anschließender Betätigung der Cursortasten.



Ein LMT-Klick in den sensitiven Rechteckbereich der Programmoberfläche blendet die Schieberegler wieder aus.

Ein erneuter LMT-Klick holt die ursprüngliche Koordinateneinstellung zurück und zeigt die Schieberegler in ihren Ausgangspositionen wieder an.