

F.2. A számításokhoz gyakran előforduló állandók értékei

Jel	Érték	Név vagy leírás
$c^\ominus$	1 M	standard koncentráció
F	96485 C/mol	Faraday-állandó
p_0	101325 Pa	1 atm nyomás SI-mértékegységben kifejezve (egyben a standard nyomás is)
$p^\ominus$		
R	$8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$	egyetemes gázállandó
T_0	-273,15 °C	abszolút nulla fok

FÜGGELÉK

F.1. A standard relatív atomtömegek

1		Az elemek periódusos rendszere																2	
1																		2	
3																		18	
4																		36	
5																		54	
6																		86	
7																		118	
8																		150	
9																		172	
10																		194	
11																		226	
12																		258	
13																		290	
14																		322	
15																		354	
16																		386	
17																		418	
18																		450	
19																		482	
20																		514	
21																		546	
22																		578	
23																		610	
24																		642	
25																		674	
26																		706	
27																		738	
28																		770	
29																		802	
30																		834	
31																		866	
32																		898	
33																		930	
34																		962	
35																		994	
36																		1026	
37																		1058	
38																		1090	
39																		1122	
40																		1154	
41																		1186	
42																		1218	
43																		1250	
44																		1282	
45																		1314	
46																		1346	
47																		1378	
48																		1410	
49																		1442	
50																		1474	
51																		1506	
52																		1538	
53																		1570	
54																		1602	
55																		1634	
56																		1666	
57																		1698	
58																		1730	
59																		1762	
60																		1794	
61																		1826	
62																		1858	
63																		1890	
64																		1922	
65																		1954	
66																		1986	
67																		2018	
68																		2050	
69																		2082	
70																		2114	
71																		2146	
72																		2178	
73																		2210	
74																		2242	
75																		2274	
76																		2306	
77																		2338	
78																		2370	
79																		2402	
80																		2434	
81																		2466	
82																		2498	
83																		2530	
84																		2562	
85																		2594	
86																		2626	
87																		2658	
88																		2690	
89																		2722	
90																		2754	
91																		2786	
92																		2818	
93																		2850	
94																		2882	
95																		2914	
96																		2946	
97																		2978	
98																		3010	
99																		3042	
100																		3074	
101																		3106	
102																		3138	
103																		3170	
104																		3202	
105																		3234	
106																		3266	
107																		3298	
108																		3330	
109																		3362	
110																		3394	
111																		3426	
112																		3458	
113																		3490	
114																		3522	
115																		3554	
116																		3586	
117																		3618	
118																		3650	
119																		3682	
120																		3714	
121																		3746	
122																		3778	
123																		3810	
124																		3842	
125																		3874	
126																		3906	
127																		3938	
128																		3970	
129																		4002	
130																		4034	
131																		4066	
132																		4098	
133																		4130	
134																		4162	
135																		4194	
136																		4226	
137																		4258	
138																		4290	
139																		4322	
140																		4354	
141																		4386	
142																		4418	
143																		4450	
144																		4482	
145																		4514	
146																		4546	
147																		4578	
148																		4610	
149																		4642	
150																		4674	
151																		4706	
152																		4738	
153																		4770	
154																		4802	
155																		4834	
156																		4866	
157																		4898	
158																		4930	
159																		4962	
160																		4994	
161																		5026	
162																		5058	
163																		5090	
164																		5122	
165																		5154	
166																		5186	
167																		5218	
168																		5250	
169																		5282	
170																		5314	
171																		5346	
172																		5378	
173																		5410	
174																		5442	
175																		5474	
176																		5506	
177																		5538	
178																		5570	
179																		5602	
180																		5634	
181																		5666	
182																		5698	
183																		5730	
184																		5762	
185																		5794	
186																		5826	
187																		5858	
188																		5890	
189																		5922	
190																		5954	
191																		5986	
192																		6018	
193																		6050	
194																		6082	
195																		6114	
196																		6146	
197																		6178	
198																		6210	
199																		6242	
200																		6274	
201																		6306	
202																		6338	
203																		6370	
204																		6402	
205																		6434	
206																		6466	
207																		6498	
208																		6530	
209																		6562	
210																		6594	
211																		6626	
212																		6658	
213																		6690	
214																		6722	
215																		6754	
216																		6786	
217																		6818	
218																		6850	
219																		6882	
220																		6914	
221																		6946	
222																		6978	
223																		7010	
224																		7042	
225																		7074	
226																		7106	
227																		7138	
228																		7170	
229																		7202	
230																		7234	
231																		7266	
232																		7298	
233																		7330	
234																		7362	
235																		7394	
236																		7426	
237																		7458	
238																		7490	
239																		7522	
240																		7554	
241																		7586	
242																		7618	
243																		7650	
244																		7682	
245																		7714	
246																		7746	
247																		7778	
248																		7810	
249																		7842	
250																		7874	
251																		7906	
252																		7938	
253																		7970	
254																		8002	
255																		8034	
256																		8066	
257																		8098	
258																		8130	
259																		8162	
260																		8194	
261																		8226	
262																		8258	
263																		8290	
264																		8322	
265																		8354	
266																		8386	
267																		8418	
268																		8450	
269																		8482	
270																		8514	
271																		8546	
272																		8578	
273																		8610	
274																		8642	
275																		8674	
276																		8706	
277																		8738	
278																		8770	
279																		8802	
280																		8834	
281																		8866	
282																		8898	
283																		8930	
284																		8962	
285																		8994	
286																		9026	
287																		9058	
288																		9090	
289																		9122	
290																		9154	
291																		9186	
292																		9218	
293																		9250	
294																		9282	
295																		9314	
296																		9346	
297																		9378	
298																		9410	
299																		9442	
300																		9474	
301																		9506	
302																		9538	
303																		9570	
304																		9602	
305																		9634	
306																		9666	
307																		9698	
308																		9730	
309																		9762	
310																		9794	
311																		9826	
312																		9858	
313																		9890	
314																		9922	
315																		9954	
316																		9986	
317																		10018	
318																		10050	
319																		10082	
320																		10114	
321																		10146	
322																		10178	
323																		10210	
324																		10242	
325																		10274	
326																		10306	
327																		10338	
328																		10370	
329																		10402	
330																		10434	
331																		10466	
332																		10498	
333																		10530	
334																		10562	
335																		10594	
336																		10626	
337																		10658	
338																		10690	
339																		10722	
340																		10754	
341																		10786	
342																		10818	
343																		10850	
344																		10882	
345																		10914	
346																		10946	
347																		10978	
348																		11010	
349																		11042	
350																		11074	
351																		11106	
352																		11138	
353																		11170	
354																		11202	
355																		11234	
356																		11266	
357																			

* Azoknak az elemeknek, amelyeknek nincs stabilis izotópjuk, a relatív atomtömegük nem adható meg. Ezen elemek esetében a leghosszabb élettartamú izotópjuk tömegszámát adtuk meg zárójelben. Ez alól három elem kivétel (a Th, Pa és U), mert ezeknek jellemző összetétele van a földkéregben, ezért a relatív atomtömegük megadható.

F.3. A kalomel referenciaelektrod potenciáljának hőmérséklet- és koncentrációfüggése

A kalomel elektrod potenciálját (E_{cal}) $\pm 0,1$ mV-os pontossággal lehet kiszámolni különböző KCl koncentrációknál a 0–70 °C-os tartományban a

$$E_{\text{cal}} = E^{25^\circ\text{C}} - \sum_{i=1}^3 a_i \cdot (t - 25^\circ\text{C})^i \quad (\text{F.1})$$

képlettel, ahol t a hőmérséklet °C-ban kifejezve és az $E^{25^\circ\text{C}}$, a_1 , a_2 , valamint a_3 empirikus állandók a következők:

[KCl]/M	lg([KCl]/M)	$E^{25^\circ\text{C}}/\text{V}$	$a_1/(\text{V}/^\circ\text{C})$	$a_2/(\text{V}/^\circ\text{C})$	$a_3/(\text{V}/^\circ\text{C})$
0,1	–1	0,3337	$8,75 \times 10^{-5}$	$3,00 \times 10^{-6}$	0
1,0	0	0,2801	$2,75 \times 10^{-4}$	$2,50 \times 10^{-6}$	4×10^{-9}
3,5	0,5441	0,2500	$4,00 \times 10^{-4}$	0	0
5,15*	0,7114	0,2412	$6,61 \times 10^{-4}$	$1,75 \times 10^{-6}$	9×10^{-10}

*A telített KCl-oldat koncentrációja 25 °C-on.

Amennyiben a KCl-oldat koncentrációja nem egyezik meg a táblázatban megadott szokásos értékekkel, akkor a négy empirikus állandó értékét a koncentráció logaritmusának függvényében interpolálni kell. Pl., ha $[KCl]=0,5$ M, akkor a koncentráció 10-es alapú logaritmusát $-0,3010$, így a

$$\frac{-0,3010 - (-1)}{0 - (-1)} = \frac{E^{25^\circ\text{C}} - 0,3337}{0,2801 - 0,3337} = \frac{a_1 - 8,75 \times 10^{-5}}{2,75 \times 10^{-4} - 8,75 \times 10^{-5}} = \frac{a_2 - 3 \times 10^{-6}}{2,5 \times 10^{-6} - 3 \times 10^{-6}} = \frac{a_3 - 0}{4 \times 10^{-9} - 0}$$

egyenleteket kell megoldani ahhoz, hogy $E^{25^\circ\text{C}}$, a_1 , a_2 , valamint a_3 megfelelő értéket megkapjuk az (F.1) egyenlet használatához.

F.4. KCl-oldatok fajlagos vezetőképessége különböző hőmérsékleteken és koncentrációknál

t/°C	18	19	20	21	22	23	24
0,01 M KCl	0,001225	0,001251	0,001278	0,001305	0,001332	0,001359	0,001386
0,1 M KCl	0,01119	0,01143	0,01167	0,01191	0,01215	0,01239	0,01264
1,0 M KCl	0,09822	0,10014	0,10207	0,10400	0,10554	0,10789	0,10984
t/°C	25	26	27	28	29	30	
0,01 M KCl	0,001413	0,001441	0,001468	0,001496	0,001524	0,001552	
0,1 M KCl	0,01288	0,01313	0,01337	0,01362	0,01387	0,01412	
1,0 M KCl	0,11180	0,11377	0,11524	–	–	–	

A táblázatban a fajlagos vezetőképességek $\Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$ mértékegységben vannak megadva.

F.5. A víz sűrűségének hőmérsékletfüggése

Öt tizedes jegy pontossággal megadja a víz sűrűségét g/cm^3 mértékegységben, adott t (°C-ban megadott) hőmérsékleten a

$$\rho_v(t) = 1,00026 - 5,08692 \times 10^{-6} \cdot t^2 \quad (\text{F.2})$$

tapasztalati képlet a $15^\circ\text{C} \leq t \leq 35^\circ\text{C}$ tartományban.

Amennyiben más hőmérséklettartomány, vagy nagyobb pontosság szükséges, akkor a következő (jóval bonyolultabb) empirikus összefüggést kell használni:

$$\rho_v(t) = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i \cdot t^i, \quad (\text{F.3})$$

ahol számoláskor a következő empirikus adatokat kell behelyettesíteni:

tartomány értékes tizedes jegy n	0–55 °C	0–31 °C	0–55 °C	0–100 °C
	4	6	5	5
	3	5	5	10
a_0	0,99987	0,9998406403	0,9998419163	0,99984014
a_1	$5,291 \times 10^{-05}$	$6,801284 \times 10^{-05}$	$6,694929 \times 10^{-05}$	$6,8755 \times 10^{-05}$
a_2	$-7,47 \times 10^{-06}$	$-9,11644 \times 10^{-06}$	$-8,91382 \times 10^{-06}$	$-9,3732 \times 10^{-06}$
a_3	$3,36 \times 10^{-08}$	$1,02356 \times 10^{-07}$	$8,77509 \times 10^{-08}$	$1,38951 \times 10^{-07}$
a_4	–	$-1,22323 \times 10^{-09}$	$-7,80638 \times 10^{-10}$	$-3,87034 \times 10^{-09}$
a_5	–	$8,11007 \times 10^{-12}$	$3,35582 \times 10^{-12}$	$1,152421 \times 10^{-10}$
a_6	–	–	–	$-2,552887 \times 10^{-12}$
a_7	–	–	–	$3,700248 \times 10^{-14}$
a_8	–	–	–	$-3,290154 \times 10^{-16}$
a_9	–	–	–	$1,623754 \times 10^{-18}$
a_{10}	–	–	–	$-3,3993 \times 10^{-21}$

Pl., ha 54°C -on kell a víz sűrűsége 4 tizedes jegy pontossággal, akkor ez a

$$\rho_v(t) = 0,99987 + 5,291 \times 10^{-05} \cdot 54 - 7,47 \times 10^{-06} \cdot 54^2 + 3,36 \times 10^{-08} \cdot 54^3 = 0,9862 \text{ g/cm}^3$$

módon számolható.

F.6. A víziionszorzat hőmérséklet- és ionerősségfüggése

A víziionszorzat negatív logaritmusát két tizedes jegy pontossággal megadja adott t hőmérsékleten (°C-ban megadva) és I ionerősségnél a

$$\text{p}K_v = 13,99 - 1,02 \cdot \sqrt{I} - 0,0343 \cdot (t - 25) \quad (\text{F.4})$$

tapasztalati képlet a $15^\circ\text{C} \leq t \leq 30^\circ\text{C}$ tartományban és 0,05 M-nál kisebb ionerősségeknél.

F.7. Keményítőoldat készítése

Kb. 100 cm^3 ~0,5%-os keményítő oldat készítéséhez 0,1 g szalicilsavat oldunk 100 cm^3 forrásban lévő desztillált vízben egy ~250 cm^3 -es Erlenmeyer-lombikban. Egy kémcsőben ~0,5 g burgonyakeményítőt kb. 10 cm^3 desztillált vízzel összerázzunk, majd ezt a forrásban lévő szalicilsav oldatba öntjük. Az oldatot még addig forraljuk, amíg az áttetszően opalizáló nem lesz (ez nem több, mint két perc). Ezután az oldatot lehűtjük, és vattapamacsra leszűrjük. Az így kapott keményítőoldat hűtőszekrényben tárolva kb. két hónapig áll el. Kukoricakeményítővel dolgozva ugyanez az eljárás, de a keményítőoldat két hét után már nem használható. Amennyiben a keményítőoldatot hamar (4–5 napon belül) felhasználjuk, akkor a fenti eljárásból a szalicilsav kimaradhat, de minden egyebet ugyanúgy kell végezni.

F.8. Adatok szórása

Több gyakorlato előfordul, hogy ugyanazt az értéket, pl. egy sebességi együtthatót több mérésből is meghatározunk. Ezek az értékek mérési és egyéb bizonytalanságok miatt általában nem egyeznek meg teljesen. Tegyük fel, hogy m-szer mértünk meg egy értéket és a j-edik adatot jelöljük z_j -vel. Ekkor végső (pontosabban legvalószínűbb) értéknek az egyedi adatok számtani átlagát tekintjük, amelynek értéke ($\bar{z}$), valamint szórása (σ_z) a következő képletekkel adhatók meg:

$$\bar{z} = \frac{\sum_{j=1}^m z_j}{m} \quad \text{és} \quad \sigma_z = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^m (z_j - \bar{z})^2}{m - 1}} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^m z_j^2 - \left(\sum_{j=1}^m z_j\right)^2}{m \cdot (m - 1)}}. \quad (\text{F.5})$$

Meg kell jegyezni, hogy a statisztikában a szórás nem egyenlő a hibával, köztük az összefüggés a következő módon adható meg:

$$\text{szórás} = \sqrt{\text{szabadsági fokok száma} \cdot \text{hiba}^3}$$

ahol a szabadsági fokok száma egyszerű adathalmaz esetében eggyel kevesebb az adatok számánál ($=n-1$). Sok program csak hibát számol, ezért kell tudni a hiba ismeretében megadni a szórást.

F.9. A hiba-, ill. szórássterjedés számítása

A hibaterjedés (pontosabban a szórássterjedés, de ezt a fogalmat beszédben ritkán használjuk) számítása gyakori feladat az értékeléskor. Sokak számára csak az alapl műveletekre alkalmazható leegyszerűsített szabály ismert: a szórások abszolút értékét kell összeadni összeadás és kivonás esetén, míg szorzásnál és osztásnál a szórások relatív értékei adandók össze. Ez az eljárás azonban mindig túlbecsüli az eredmény szórását és a legegyszerűbb elemi függvényekre (pl. négyzetgyök, logaritmus) sem alkalmazható. A következőkben azokat a képleteket adjuk meg levezetések nélkül, amelyek segítségével a szórás számítása korrekt módon elvégezhető.

Tételezzük fel, hogy van két adatunk, amelyeknek a szórása is ismert: $X \pm \sigma_X$ és $Y \pm \sigma_Y$. Ezen adatok valamelyikének vagy mindkettőnek a felhasználásával akarunk egy eredményt (Z) kiszámolni és tudni akarjuk Z szórását (σ_Z) is. Az F.1 táblázatban összefoglaljuk, hogy az alapl műveletek és a legfontosabb függvénytranszformációk esetén milyen képletek alkalmazásával lehet az eredmény szórását megadni. Ha az eredmény több alapl művelet vagy függvénytranszformáció alkalmazását igényli, akkor a táblázatban megadott képleteket egymás után többször alkalmazva juthatunk el a végeredményhez. Például:

$$\begin{aligned} \ln(2,0 \pm 0,1) + (0,4 \pm 0,02)^{0,5} &= \left(\ln 2 \pm \frac{0,1}{2} \right) + \left(0,4^{0,5} \pm (|0,5 \cdot 0,02 \cdot 0,4^{-0,5}|) \right) \\ &= (0,693 \pm 0,050) + (0,632 \pm 0,016) \\ &= (0,693 \pm 0,632) + \left(\sqrt{0,05^2 \pm 0,016^2} \right) \\ &= \underline{\underline{1,34 \pm 0,05}} \text{ (vagy } 1,336 \pm 0,052) \end{aligned}$$

F.10. Illesztett egyenes meredeksége, tengelymetszete, ezek statisztikai jellemzői

A gyakorlatok során meghatározandó értékeket legtöbbször egy egyenes illesztésből kapott meredekség és/vagy tengelymetszet értékéből számoljuk. Ebben a

³Fontos kiemelni, hogy sok program (így pl. az EXCEL sok verziója is) pontatlanul használja a szabadsági fokok számát, sok esetben egyszerűen az adatok számával teszi egyenlővé. Ez nagy adatszám esetén elhanyagolható változást okoz a szórások számértékében, kis adatszám esetén azonban a változás akár 20% is lehet. A laboratóriumi gyakorlatokon elfogadható a szórást az EXCEL függvényei által számolt hibaértékből a fenti képlet alapján kiszámolni.

F.1. táblázat. A szórás számítása az alapl műveletek és a legfontosabb függvénytranszformációk esetén. A következő képletekben a -val jelöljük az állandó, szórás nélküli értékeket, és a trigonometrikus függvényeknél a szög és a szórása radiánban értendő. A többi jelölés magyarázatát lásd a szövegben.

művelet vagy függvény	eredmény szórással ($Z \pm \sigma_Z$)	példa
szorzás a -val	$(a \cdot X) \pm (a \cdot \sigma_X)$	$3 \cdot (1,2 \pm 0,3) = (3 \cdot 1,2) \pm (3 \cdot 0,3) = \underline{\underline{3,6 \pm 0,9}}$
összeadás	$(X+Y) \pm \left(\sqrt{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2} \right)$	$(2,2 \pm 0,3) + (8,4 \pm 0,5) = (2,2+8,4) \pm (\sqrt{0,3^2+0,5^2}) = \underline{\underline{10,6 \pm 0,6}}$
kivonás	$(X-Y) \pm \left(\sqrt{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2} \right)$	$(3,2 \pm 0,3) - (2,4 \pm 0,5) = (3,2-2,4) \pm (\sqrt{0,3^2+0,5^2}) = \underline{\underline{0,8 \pm 0,6}}$
szorzás	$(X \cdot Y) \pm \left(\sqrt{Y^2 \cdot \sigma_X^2 + X^2 \cdot \sigma_Y^2} \right)$	$(2,2 \pm 0,2) \cdot (8,4 \pm 1,0) = (2,2 \cdot 8,4) \pm (\sqrt{8,4^2 \cdot 0,2^2 + 2,2^2 \cdot 1,0^2}) = \underline{\underline{18,5 \pm 2,8}}$
osztás	$\left(\frac{X}{Y} \right) \pm \left(\sqrt{\frac{Y^2 \cdot \sigma_X^2 + X^2 \cdot \sigma_Y^2}{Y^4}} \right)$	$(22,0 \pm 2,0) / (8,4 \pm 1,0) = \left(\frac{22,0}{8,4} \right) \pm \left(\sqrt{\frac{8,4^2 \cdot 2,0^2 + 22,0^2 \cdot 1,0^2}{8,4^4}} \right) = \underline{\underline{2,6 \pm 0,4}}$
reciprok	$\left(\frac{1}{X} \right) \pm \left(\frac{\sigma_X}{X^2} \right)$	$\frac{1}{(0,44 \pm 0,12)} = \left(\frac{1}{0,44} \right) \pm \left(\frac{0,12}{0,44^2} \right) = \underline{\underline{2,3 \pm 0,6}}$
hatványozás	$(X^a) \pm (a \cdot \sigma_X \cdot X^{a-1})$	$(3,0 \pm 0,5)^{1,2} = (3,0^{1,2}) \pm (1,2 \cdot 0,5 \cdot 3,0^{1,2-1}) = \underline{\underline{3,7 \pm 0,7}}$
exponenciális függvények	$(e^X) \pm (\sigma_X \cdot e^X)$ $(10^X) \pm (\ln(10) \cdot \sigma_X \cdot 10^X)$	$e^{(2,0 \pm 0,5)} = (e^{2,0}) \pm (0,5 \cdot e^{2,0}) = \underline{\underline{7,4 \pm 3,7}}$ $10^{(1,3 \pm 0,1)} = (10^{1,3}) \pm (2,3 \cdot 0,1 \cdot 10^{1,3}) = \underline{\underline{20 \pm 5}}$
logaritmus függvények	$(\ln X) \pm (\sigma_X / X)$ $(\lg X) \pm \left(\frac{\sigma_X}{\ln(10) \cdot X} \right)$	$\ln(2,0 \pm 0,1) = (\ln(2,0)) \pm (0,1/2,0) = \underline{\underline{0,69 \pm 0,05}}$ $\lg(20 \pm 10) = (\lg(20)) \pm (10/(2 \cdot 20)) = \underline{\underline{1,3 \pm 0,2}}$
trigonometrikus függvények	$(\sin X) \pm (\cos X \cdot \sigma_X)$ $(\cos X) \pm (\sin X \cdot \sigma_X)$ $(\tg X) \pm \left(\frac{\sigma_X}{(\cos X)^2} \right)$	$\sin(60^\circ \pm 5^\circ) = \left(\sin \frac{\pi}{3} \right) \pm \left(\left \cos \frac{\pi}{3} \right \cdot \frac{5 \cdot \pi}{180} \right) = \underline{\underline{0,87 \pm 0,04}}$ $\cos(60^\circ \pm 5^\circ) = \left(\cos \frac{\pi}{3} \right) \pm \left(\left \sin \frac{\pi}{3} \right \cdot \frac{5 \cdot \pi}{180} \right) = \underline{\underline{0,5 \pm 0,08}}$ $\tg(45^\circ \pm 5^\circ) = \left(\tg \frac{\pi}{4} \right) \pm \left(\frac{5 \cdot \pi}{180} \cdot \left(\cos \frac{\pi}{4} \right)^2 \right) = \underline{\underline{1,0 \pm 0,2}}$
inverz trigonometrikus függvények	$(\arcsin X) \pm \left(\frac{\sigma_X}{\sqrt{1-X^2}} \right)$ $(\arccos X) \pm \left(\frac{\sigma_X}{\sqrt{1-X^2}} \right)$ $(\text{arctg} X) \pm \left(\frac{\sigma_X}{1+X^2} \right)$	$\arcsin(0,87 \pm 0,08) = \left(\arcsin(0,87) \right) \pm \left(\frac{0,08}{\sqrt{1-0,87^2}} \right) \cdot \frac{180}{\pi} = \underline{\underline{60^\circ \pm 9^\circ}}$ $\arccos(0,5 \pm 0,08) = \left(\arccos(0,5) \right) \pm \left(\frac{0,08}{\sqrt{1-0,5^2}} \right) \cdot \frac{180}{\pi} = \underline{\underline{60^\circ \pm 5^\circ}}$ $\text{arctg}(1,0 \pm 0,2) = \left(\text{arctg}(1,0) \right) \pm \left(\frac{0,2}{1+1,0^2} \right) \cdot \frac{180}{\pi} = \underline{\underline{45^\circ \pm 6^\circ}}$

részben levezetés nélkül összefoglaljuk azokat a képleteket, amelyek egy egyszerű számológéppel is lehetővé teszik az illesztett egyenes paramétereinek, valamint

azok szórásainak számolását. Mielőtt azonban megadnánk a képleteket, két fontos megjegyzést kell tenni:

1. Az itt megadott képletek első látásra riasztóan bonyolultnak tűnhetnek, azonban a használatuk valójában egyszerű. Ezt könnyű belátni, ha az olvasó az F.2. táblázatban részletezett példát (F.8. oldal) egy számológép segítségével saját maga végigszámolja. További könnyebbség lehet, hogy a tudományos számológépek többsége már számol statisztikai függvényeket. Ezekkel a számolások még gyorsabbá tehetők, mert a tudományos számológépek statisztikai módja a számolások során szükséges részeredményeket automatikusan megadja.
2. Nagyon sok speciális és általános program (pl. a táblázatkezelők) képes egyenes paramétereinek illesztésére. A laboratóriumi gyakorlatok során valószínűleg ezek használata lesz a gyakoribb. Ezek a programok azonban a legtöbbször *nem* a meredekség és a tengelymetszet szórását, hanem azok hibáját adják meg statisztikai paraméterként, pedig a kettő nem ugyanaz! Néha az is előfordul, hogy a leírás szerint a program szórást számol, de valójában hibát ír ki. A szórás és a hiba közötti kapcsolatot a

$$\text{szórás} = \sqrt{\text{szabadsági fokok száma} \cdot \text{hiba}^2}$$

összefüggés adja meg. Ha n adatpárra illesztünk egyenest, akkor a szabadsági fokok száma $(n-2)$, amennyiben mind a meredekség, mind a tengelymetszet értékét illesztjük. A szabadsági fokok száma $(n-1)$, ha csak a meredekséget illesztjük és a tengelymetszet értékét nullának tekintjük.

A képletekben a következő rövidítéseket használjuk:

- n az illesztés során használt adatpárok száma,
- x_i a független változó értéke az i -edik adatpárban ($i = 1 \dots n$),
- y_i a függő változó értéke az i -edik adatpárban ($i = 1 \dots n$),
- a az illesztett egyenes meredeksége ($y = a \cdot x + b$ vagy $y = a \cdot x$),
- b az illesztett egyenes tengelymetszete ($y = a \cdot x + b$),
- σ_a az illesztett egyenes meredekségének szórása és
- σ_b az illesztett egyenes tengelymetszetének szórása.

A képletek sokkal egyszerűbbé tehetők a következő rövidítések bevezetésével:

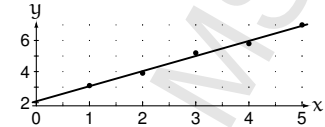
S_x és S_y az x_i és az y_i adatok összege; S_{xy} az x_i és y_i adatok páronkénti szorzatainak összege; S_{xx} az x_i adatok négyzeteinek összege, valamint S_Δ az y_i adatok, valamint a meredekségből és tengelymetszetből számolható függő változók $(a \cdot x_i + b)$ eltérései négyzeteinek összege:

$$S_x = \sum_{i=1}^n x_i, S_y = \sum_{i=1}^n y_i, S_{xy} = \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i, S_{xx} = \sum_{i=1}^n x_i^2 \text{ és } S_\Delta = \sum_{i=1}^n (y_i - a \cdot x_i - b)^2.$$

F.2. táblázat. Az egyenesillesztés számolási technikájának részletes bemutatása egy példán keresztül az $y = a \cdot x + b$ egyenlet alkalmazásával. A következőkben az F.7. oldaltól kezdődően definiált jelöléseket használjuk.

Adatok:

i :	1	2	3	4	5
x_i :	1,0	2,0	3,0	4,0	5,0
y_i :	3,1	3,9	5,2	5,8	7,0



Részeredmények:

$$S_x = 1,0 + 2,0 + 3,0 + 4,0 + 5,0 = 15,0$$

$$S_y = 3,1 + 3,9 + 5,2 + 5,8 + 7,0 = 25,0$$

$$S_{xy} = 1,0 \cdot 3,1 + 2,0 \cdot 3,9 + 3,0 \cdot 5,2 + 4,0 \cdot 5,8 + 5,0 \cdot 7,0 = 84,7$$

$$S_{xx} = 1,0^2 + 2,0^2 + 3,0^2 + 4,0^2 + 5,0^2 = 55,0$$

$$n \cdot S_{xx} - (S_x)^2 = 5 \cdot 55,0 - 15,0^2 = 50,0$$

Meredekség és tengelymetszet értéke (F.7a), valamint (F.8a) alapján:

$$a = \frac{5 \cdot 84,7 - 15,0 \cdot 25,0}{50,0} = 0,97 \text{ és } b = \frac{55,0 \cdot 25,0 - 15,0 \cdot 84,7}{50,0} = 2,09$$

Részeredmény:

$$S_\Delta = (3,1 - 0,97 \cdot 1,0 - 2,09)^2 + (3,9 - 0,97 \cdot 2,0 - 2,09)^2 + (5,2 - 0,97 \cdot 3,0 - 2,09)^2 + (5,8 - 0,97 \cdot 4,0 - 2,09)^2 + (7,0 - 0,97 \cdot 5,0 - 2,09)^2 = 0,091$$

Meredekség és tengelymetszet szórásának értéke (F.7b), valamint (F.8b) alapján:

$$\sigma_a = \sqrt{\frac{5^2 \cdot 0,091}{5 \cdot 2 \cdot 50,0}} = 0,12 \text{ és } \sigma_b = \sqrt{\frac{5 \cdot 55,0 \cdot 0,091}{5 \cdot 2 \cdot 50,0}} = 0,41$$

Megjegyzés: Sok program (köztük az EXCEL is) kicsit más eredményeket ad a szórásokra: $\sigma_a = 0,095$ és $\sigma_b = 0,32$. Ennek az az oka, hogy ezek a programok egyszerűsített képleteket használnak a hibák és a szórások számolására, konkrétan az (F.6b), az (F.7b), valamint az (F.8b) képletekben a nevezőkben szereplő $n-1$ és $n-2$ kifejezések helyett csak n -nel számolnak.

Az illesztett egyenes meredeksége (a), valamint a meredekség szórása (σ_a), amennyiben *nincs* tengelymetszet ($b=0$):

$$a = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = \left(\sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i \right) / \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right) \quad (\text{F.6a})$$

$$\sigma_a = \sqrt{\frac{n^2 \cdot S_\Delta}{n \cdot S_{xx} - (S_x)^2}} = \sqrt{\frac{n^2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - a \cdot x_i)^2}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}} \quad (\text{F.6b})$$

Az illesztett egyenes meredeksége (a), valamint a meredekség szórása (σ_a), amennyiben *van* tengelymetszet ($b \neq 0$):

$$a = \frac{n \cdot S_{xy} - S_x \cdot S_y}{n \cdot S_{xx} - (S_x)^2} = \frac{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} \quad (\text{F.7a})$$

$$\sigma_a = \sqrt{\frac{n^2}{n-2} \cdot \frac{S_{\Delta}}{n \cdot S_{xx} - (S_x)^2}} = \sqrt{\frac{n^2}{n-2} \cdot \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - a \cdot x_i - b)^2}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}} \quad (\text{F.7b})$$

Az illesztett egyenes tengelymetszete (b), valamint a tengelymetszet szórása (σ_b):

$$b = \frac{S_{xx} \cdot S_y - S_x \cdot S_{xy}}{n \cdot S_{xx} - (S_x)^2} = \frac{\left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^n y_i \right) - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i \right)}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} \quad (\text{F.8a})$$

$$\sigma_b = \sqrt{\frac{n \cdot S_{xx}}{n-2} \cdot \frac{S_{\Delta}}{n \cdot S_{xx} - (S_x)^2}} = \sqrt{\frac{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2}{n-2} \cdot \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - a \cdot x_i - b)^2}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}} \quad (\text{F.8b})$$

F.11. Műszaki-tudományos ábrák készítése

Mind a kézzel, milliméterpapíron elkészített, mind a számítógépes ábrákkal szemben ugyanazok a követelmények:

- Lehetőleg minden mért adat, vagy azok transzformáltjai szerepeljenek az ábrán.
- Legyen megfelelő – szükség esetén mértékegységgel ellátott – címe mind a tengelyeknek, mind az ábrának. A feliratok mind szakmai, mind nyelvtani szempontból legyenek helyesek. Lehetőleg név és dátum is szerepeljen az ábrán.
- A tengelyek beosztásának és a címkefeliratoknak olyanoknak kell lenniük, hogy az adatok könnyen ábrázolhatók és visszaolvashatók legyenek, és minimalizálják az ábra haszontalan területeit. Ezt az elvet mindig a konkrét feladatra kell alkalmazni, pl. egyenesillesztés esetén néha szükséges, hogy a tengelymetszet akkor is rajta legyen az ábrán, ha kívül esik a mért adatok tartományán.
- Görbeillesztés esetén az ábrának tartalmaznia kell mind az illesztett, mind az illesztésből kihagyott adatokat (megkülönböztetett jelzéssel!), valamint az illesztett görbét is, az illesztett paraméterek értékével együtt.

- Több görbe és/vagy adatsor együttes ábrázolása esetén az egyes görbék vagy adatsorok legyenek világosan elkülöníthetők.

Természetesen lehetnek egyéb elvárások is a konkrét feladattól függően. Ritkán a követelmények egyike-másika nem teljesíthető 100 %-osan (pl. ha egy rossz pont nagyságrendekkel különbözik a többitől, az teljesen eltorzíja az ábrát), de az esetek túlnyomó többségében a fentiek betartása elegendő hibátlan ábrák készítéséhez.

Az eddigiekből is kitűnhet, hogy az ábrakészítő programok felületes ismerete sokszor nem elég. *Általában nem lehet elfogadni kész ábraként, amit egy program az adatok bevitel után az alapbeállításával felrajzol a képernyőre, hanem olyan szinten kell megtanulni az alkalmazott program kezelését, hogy a fenti követelmények teljesíthetők legyenek!* A tudományos életben ezt fokozottan kell hangsúlyozni, mert a legtöbb kereskedelem-ben lévő program (főleg a táblázatkezelők) a közgazdasági és prezentációs célokra készített ábrákhoz igazítja az alapbeállításokat, és nem a tudományos életben fokozottabban megkövetelt pontosság és teljesség igényéhez.

Az alábbiak egy példán keresztül mutatják be azokat a jellemző hibákat, amiket a leggyakrabban szoktak elkövetni számítógéppel történő ábrakészítés során. Az F.1 és F.2 ábrák ugyanarra az adatsorra történő egyenesillesztést illusztrálják. Az F.1 ábra teljes mértékben megfelel a fentebb részletezett követelményeknek, míg az F.2 ábra a – tapasztalat szerint – leggyakrabban előforduló hibákat mutatja. Ezek könnyen elkerülhetők a használt program megfelelő szintű ismeretével. A függelék ezen szakaszának további része a két ábra összevetésével segíteni igyekszik a következő típusú hibák és hiányosságok elkerülését:

Automatikus pontösszekötés. Majdnem minden program alapbeállítása az, hogy a bevitt pontokat valamilyen szimbólummal jelöli és azokat egyenes szakaszokkal köti össze. Az összekötésnek a legtöbb esetben nincs értelme, csak a „szem vezetésére” szokták használni tendenciák bemutatására, főleg közgazdasági grafikonokon. Tudományos ábrákon vonallal illesztett görbét szokás jelölni, így a mért pontok összekötése félrevezető. Ráadásul érthetetlen ábrákhoz vezethet, ha az adatok nincsenek szigorúan növekvő vagy csökkenő sorrendben, pl. az F.2 ábrán egyetlen nem sorrendben lévő pont egy felesleges vonalat ad.

Rossz tengelytartomány. Néhány program automatikusan ráteszi az ábrára a koordináta-rendszer origóját. Az ábrázolandó pontok tartományától függően ez ahhoz vezethet, hogy az ábra kicsiny részére zsúfolódik össze minden pont, azok menete kivehetetlen lesz.

Egyenetlen tengelybeosztáshoz vezet sok program azon tulajdonsága, hogy a tengelyek minimális és maximális értékét az adatsorokból kapható minimális és maximális értékhez rendeli. Az F.2 ábrán az y-tengely beosztása rossz, mert a 13–120 tartományt nem lehet jól felosztani tíz részre. Ráadásul a beosztások feliratai pontatlanok, csak egész értékre vannak megadva. Emiatt hibás a visszaolvasás, azonos hosszúságú tartományokhoz eltérő értékek tartoznak (pl. 120–109≠109–99)! A felhasználónak tudnia kell, hogyan lehet beállítani a tengelyek minimális és maximális értékeit, a beosztás sűrűségét és a beosztások helyét jelző számok kiíratási formátumát!

Automatikus tengelyválasztás miatt rossz beosztás, értelmetlen vagy hiányzó címek és beosztásfeliratok lehetnek a tengelyeken. Az F.2 ábrán hiányoznak az x-tengely beosztásainak feliratai, a semmitmondó automatikus tengelycímek az adatállomány nevéből és a felhasznált oszlopok sorszámából adódnak, a szélső adatok pedig szinte „lelőgnak” az ábráról.

Semmitmondó főcím nehezíti az ábra megértését, főleg ha az értelmezés és a készítés között sok idő telik el. Sok program alapértelmezése, hogy főcímként a grafikus beállításokat tartalmazó állomány nevét definiálja.

Név, cím vagy dátum hiánya szintén bosszantó információvesztés lehet. Példánkban a rossz ábrán a dátum hiányzik.

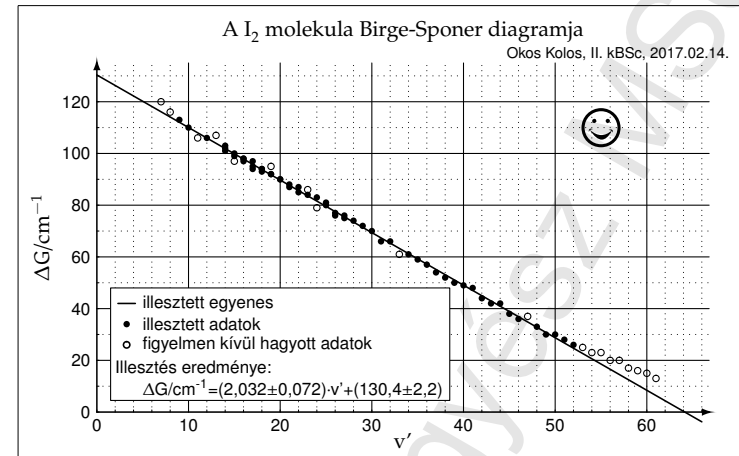
Rossz pozicionálás az ábra valamely részén szerencsésebb esetben csak komikus, rosszabb esetben információvesztéshez vezethet. Esetünkben a jelmagyarázó blokk annyira rossz helyen van az F.2 ábrán, hogy a fele lemaradt.

Automatikus jelmagyarázó blokk (angolul legend) általában semmit sem mond. Vagy egyáltalán ne használjunk ilyen blokkot, vagy pontosan töltsük ki! A jelmagyarázó blokknak akkor van értelme, ha egy ábrán több görbét tüntetünk fel és rövid utalásokkal akarjuk segíteni az ábra megértését.

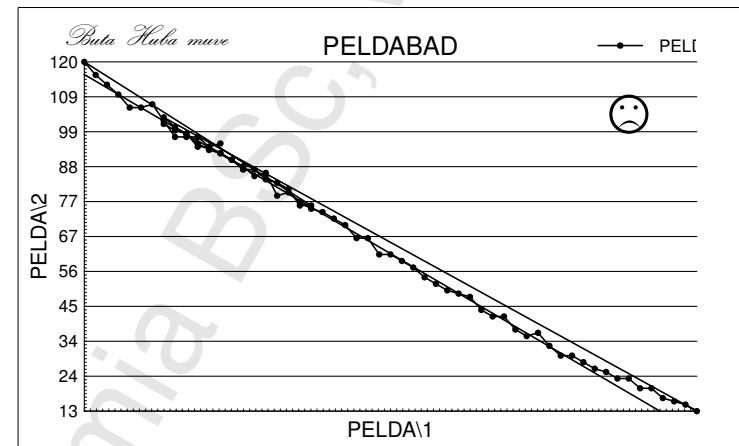
Rácsozatot, ha van, gondosan kell beállítani. Nem segíti az ábra olvasását a túl sűrű rácsozat, mert az szinte elfedi a görbéket. A ritka rácsozat sem jó, mivel a függvényértékeket nagyon nehéz visszaolvasni ilyen esetekben. Sokszor tisztább az ábra, ha egyáltalán nincs rácsozat. Az biztosan nem jó, ha vagy csak a vízszintes, vagy csak a függőleges rácsvonalak vannak feltüntetve, ahogy azt a rossz ábra mutatja.

Nem megfelelő betűtípus és/vagy betűnagyság használata jobb esetekben csak csúnya vagy komikus feliratokhoz vezet, rosszabb esetben félreértésre is alkalmat adhat. Az F.2 ábrán a név értelmetlenül csicsás és nem ékezetes betűkkel készült. Ábrákon általában érdemes egyszerű vonalvezetésű és vastagabb betűtípusokat használni (pl. Swiss, Arial, Helvetica, Tahoma, Verdana, Calibri, stb. típusok).

Az elhagyott pontok nem szerepelnek az ábrán, vagy jelöletlenek. Ha nem tüntetjük fel az ábrán az illesztésnél figyelmen kívül hagyott pontokat, akkor információt veszünk a mérések valódi pontosságáról és a pontelhagyások okairól. Ha a rossz pontokat az illesztettekkel azonos módon jelöljük (ahogy ez a rossz ábrán látható), akkor a számított adatok reprodukálása lesz nehéz.



F.1. ábra. Egy kifogástalanul elkészített számítógépes ábra.



F.2. ábra. Egy tipikus hibákat bemutató számítógépes ábra.

FELHASZNÁLT IRODALOM

- [1] P. W. Atkins: Fizikai kémia, I–III. kötet, Tankönyvkiadó, Budapest, 1998.
P. W. Atkins: Physical Chemistry, 6th edition, Oxford University Press, 1998.
- [2] Erdey-Grúz Tibor, Schay Géza: Elméleti fizikai kémia, I–III. kötet, Tankönyvkiadó, Budapest, 1962.
- [3] G. M. Barrow: Physical Chemistry, McGraw-Hill Book Co., Inc, New York, 1961.
- [4] Lengyel Béla, Proszjt János, Szarvas Pál: Általános és szervetlen kémia, egyetemi tankönyv, Tankönyvkiadó, Budapest, 1954.
- [5] D. D. Ebbing: General Chemistry, Houghton Mifflin Company, Boston, 1984.
- [6] C. R. Dillard, D. E. Goldberg: Kémia: reakciók, szerkezetek, tulajdonságok, Gondolat Kiadó, Budapest, 1982.
- [7] Burger Kálmán: A mennyiségi analízis alapjai: kémiai és műszeres elemzés, Semmelweis kiadó, Budapest, 1992.
- [8] Schulek Elemér, Szabó Zoltán: A kvantitatív analitikai kémia elvi alapjai és módszerei, Tankönyvkiadó, Budapest, 1973.
- [9] Erdey-Grúz Tibor, Schay Géza: Fizikai-kémiai praktikum, I–II. kötet, Tankönyvkiadó, Budapest, 1965.
- [10] Bevezetés a fizikai kémiai mérésekbe, I–II. kötet, szerk. Kaposi Olivér, Tankönyvkiadó, Budapest, 1988.
- [11] Fizikai-kémia laboratóriumi gyakorlatok II. éves gyógyszerészhallgatók számára, szerk. Szivovics Lajos, SZOTE Gyógyszerésztudományi Kar, Szeged, 1987.
- [12] Fizikai-kémiai laboratóriumi gyakorlatok, szerk. Peintler Gábor, JATEPress, Szeged, 1998.
- [13] Haladó fizikai-kémiai laboratóriumi gyakorlatok, szerk. Peintler Gábor, JATEPress, Szeged, 2000.
- [14] Magyar Gyógyszerkönyv VIII. kiadás (Ph. Hg. VIII. és Ph. Eur. 4, 4.1, 4.2), Medicina Könyvkiadó, Budapest, 2006.
- [15] Németh Béla: Kémiai táblázatok, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1979.
- [16] Dobos Dezső: Elektrokémiai táblázatok, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1984.
- [17] Analitikai zsebkönyv, szerk. Mázor László, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1978.
- [18] CRC Handbook of Chemistry and Physics, 47th edition, The Chemical Rubber Co., 1966.
- [19] A. C. Norris: Computational Chemistry, John Wiley & Sons, New York, 1981.
- [20] W. Dimoplon, Jr.: Estimating specific heat of liquid mixture, Chemical Engineering, 1972, 79, 64–66.
- [21] L. Pauling: General Chemistry, Chapter 10: Chemical Thermodynamics, Dover Publication Inc., San Francisco, 1970.
- [22] Takácsné Novák K., Völgyi G.: A fizikai-kémiai jellemzés helye és módszerei a gyógyszerkutatásban, Magyar Kémiai Folyóirat, 2005, V111, 169–176.
- [23] A. Venkataratnam, R. J. Rao, C. V. Rao: Ternary liquid equilibria, Chemical Engineering Science, 1957, 102–110.
- [24] IUPAC. Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the "Gold Book"). Compiled by A. D. McNaught and A. Wilkinson. Blackwell Scientific Publications, Oxford (1997). XML on-line corrected version: <http://goldbook.iupac.org> (2006-) created by M. Nic, J. Jirat, B. Kosata; updates compiled by A. Jenkins. ISBN 0-9678550-9-8. doi:10.1351/goldbook.