

Példatár (főleg) kémiai feladatok számítógépes megoldásához

Peintler Gábor, SzTE TTIK FKAT

2024. szeptember 18.

Tartalomjegyzék

1. A „Kémiai informatika alapjai” c. tárgy (kurzuskódok: KB(N/L)090G, KBN-WM01G, KTN02G)	3
1.1. Alapvető cellahasználat az EXCEL-ben, definíciók	3
1.2. Műszaki-tudományos célú ábrák készítése EXCEL-ben	8
1.3. Egyéb fontos tudnivalók az EXCEL használatához	10
1.4. További szorgalmi EXCEL feladatok	12
1.5. Microsoft Word dokumentumok szerkesztése	14
1.6. Microsoft PowerPoint bemutatók szerkesztése	24
2. A „Mérési adatok feldolgozásának módszerei” c. tárgy (kurzuskódok: KB(N/L)007G, KTN02G)	25
2.1. Ismételt mérési adatok statisztikai jellemzése	25
2.2. Egyenes illesztése és statisztikai jellemzése táblázatkezelővel	26
2.3. Hibaterjedés számolása, használata egyenesillesztéssel együtt	29
2.4. Tömbfüggvények hisztogramokhoz	31
2.5. Mátrixműveletek, lineáris egyenletrendszer megoldás EXCEL-ben	32
2.6. Numerikus differenciálás és integrálás	32
2.7. Bevezetés a (wx)Maxima program használatába	33
2.8. Bevezetés a SciDavis/QtPlot program használatába	37
2.9. Bevezetés a Octave/MATLAB program használatába	39
Függelék	40
F1. A standard relatív atomtömegek	40
F2. A számításokban gyakran előforduló állandók értékei	41
F3. Információk az időjárási adatokról	41
F4. A (szórás/hiba)terjedés képleteinek táblázata	42
F5. Illesztett egyenes meredeksége, tengelymetszete, ezek statisztikai jellemzői	43
F5.1. A korrelációs együttható szemléltetése	45
F6. A Brønsted-egyenlet levezetése és egyszerűsített formái	47
F6.1. Az egyenlet levezetése	47
F6.2. Az egyszerűsített pH-számoló formulák gyenge sav, vagy ennek konjugált bázisa oldatában	47
F6.3. Az egyszerűsített pH-számoló formulák pufferek oldataiban	48
Korrektúrák	49

Megjegyzések mindegyik kurzushoz:

– Ez a feladatgyűjtemény a különböző típusú hivatkozásokat eltérő színekkel mutatja:

- A  szín jelzi a tartalomjegyzékbeli hivatkozásokat a dokumentum egyes részeire, kivéve a  színű hivatkozásokat, amelyek olyan alfejezetekre mutatnak, amelyek egyik kurzus teljesítéséhez sem szükségesek, csak érdeklődők számára biztosítanak további feladatokat.
- A  szín jelzi a dokumentumon belüli hivatkozásokat, akár egy részre, akár egy oldalra mutatnak.

A  szín jelzi az internet oldalakra történő hivatkozást.

A  színű linkek a dokumentumba beágyazott fájlokat jelzik. Ezek a szemináriumok segédfájljai, és megfelelő programokkal külön lementhetők a számítógépre közvetlenül ebből a fájlból.

- A feladatgyűjteményben megadott megoldások a függelékben megadott atomtömegekkel (40. oldal) és állandókkal (41. oldal) lettek számolva.

1. fejezet

A „Kémiai informatika alapjai” c. tárgy

(kurzuskódok: KB(N/L)090G, KBN-WM01G, KTN02G)

Az első három, valamint az 5–6, alfejezetek a kurzusok anyagainak példáit tartalmazza. Minden alfejezet azoknak az alapvető kulcsszavaknak a felsorolásával kezdődik, amelyek ismerete és megértése szükséges a példák Microsoft Office-szal történő megoldásához. Ezeknek a programok súgóiban, valamint internetes ismertetőik százaiban lehet utánanézni. Ha van értelme, az egyes példáknál az eredmény egy részlete meg van adva szürke színnel a feladat végén, hogy a megoldás ellenőrizhető legyen. A negyedik alfejezetről részletesebb információ annak elején található.

Segédanyagok (rengeteg van az interneten az alábbiakon túlmutatóan is!):

- A **PDFDRIVE** internet oldal egyike azon helyeknek, ahol könyveket lehet letölteni PDF formában (legtöbbet angolul), így az Excel, a Word és a PowerPoint használatát tanítókat is.
- A **GCFGlobal** egy internetes oktatással foglalkozó vállalkozás. A Microsoft Office-szal kapcsolatban korlátozás nélkül elérhető oldalai is vannak, amelyek segítségével alapszintű tudást lehet szerezni a programcsomag használatáról. A tárgy szempontjából fontos induló weboldalak a következők: **Excel**, **Excel Formulas**, **Excel Tips**, **Word**, **Word Tips**, **PowerPoint** és **PowerPoint Tips**.
- A **Microsoft Excel Felhasználói Kézikönyv** egy felnőttképzésben használt tananyag.
- Az **Excel Easy** egy egyszerű angolsággal megírt internetes bevezető az Excelbe, ami teljesen az alapok tisztázásától indul, és több száz, logikusan felépített, jól csoportosított magyarázaton és példán keresztül el lehet jutni a középszintű használatig.
- A **Microsoft Word Felhasználói Kézikönyv** egy felnőttképzésben használt többverziós tananyag.
- A **Microsoft Word 2010 jegyzet** egy ma is jól használható bevezető mindenféle feladathoz.
- A **Pont, pont, vesszőcske** egy nagyon hasznos összefoglaló az írásjelek használatáról.
- A **PowerPoint 101** internet oldal egy gyors kezdés lehet a PowerPoint használatához.

1.1. Alapvető cellahasználat az EXCEL-ben, definíciók

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

1. címsor	9. cellatartalom:	15. többsoros cellák
2. gyorselérési eszköztár	szám (formátumok),	16. cellák, cellatartományok
3. menüszalag/menülapok	szöveg, definíció	hivatkozása
4. munkafüzet	10. kijelölés	17. definíciók használata
5. munkalap, kezelése	11. oszlopszélesség- és sorma-	18. relatív hivatkozás használ-
6. cella, írásuk, módosításuk	gasság állítása	lata
7. cellatartomány	12. beillesztés, beszúrás	19. abszolút hivatkozás használ-
8. szerkesztőléc	13. # jelentése	nálata
	14. cellatartalom megjelenítése	20. számsorozatok készítése
		21. mértékegységek helye

Feladatok:

- A1. Reprodukálja a jobb oldalon lévő ábrát, természetesen a munkafüzet és a munkalap neveinek kivételével!

	A	B	C	D	E
1					
2					1,2
3	Bús Ágnes	közép	1,41421356		1,35
4	Hamar Tivadar		=GYÖK(2)		1,5
5		1,23			1,65
6		3400000	=2*3		1,8
7		3400000,0000		Mi ez?	1,95
8		3,4E+04	Hamar Tivadar	Mi ez?	2,1
9	1993. január 31.		Hamar Tivadar		2,25
10		3,40000E+04		Mi ez?	2,4
11					

- A2. A Fibonacci számsorozatot az $F_1 = 0$, $F_2 = 1$ és $F_i = F_{i-1} + F_{i-2}$ ($i \geq 3$) egyenletek definiálják. Egyik fontos tulajdonsága ennek a numerikus sornak, hogy a szomszédos elemei aránya az aranymetszés értékéhez tart:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \frac{F_i}{F_{i-1}} = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \quad (\text{ami az } x^2 - x - 1 = 0 \text{ egyenlet nagyobbik gyöke}).$$

Használja az EXCEL táblázatkezelő programot a számsorozat első 50 elemének kiszámítására! Az első oszlop tartalmazza az egyes elemek sorszámát, a második a számsorozat elemeit, míg a harmadik a sorozat két szomszédos elemének arányát (F_i/F_{i-1})! Ezek alapján adja meg, hány tagot kell a Fibonacci sorozatból kiszámolni, hogy az aranymetszés értékét 4, 9 vagy 14 értékes jegy pontossággal lehessen számolni. (kapcsolódó feladatok: A14. (9.o.) és A15. (9.o.))

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: A 23. sorszámú elem 17711, ennek és az előző elemnek az aránya 1,61803399, ami az első 9 értékes jegyre pontos arányszám.

- A3. A logaritmikus spirál (vagy ahogy Bernoulli nevezte, a „csodálatos spirál”) egy olyan görbealak, amely gyakran látható a természetben, pl. a spirál galaxisok vagy a hurrikánok karjaiban, a napraforgó magjainak sorrendjében, puhatestűek házáinak alakjában, stb.

Számolja ki egy ilyen görbének a pontjait az alábbiakban részletezett feltételekkel! Tudjuk, hogy a logaritmikus spirál polárkoordinátákkal megadott egyenlete $r = a \cdot e^{b \cdot \Theta}$, ahol r az adott pont távolsága a koordináta-rendszer origójától és Θ az adott pont és az origó által meghatározott szakasznak a vízszintes tengellyel bezárt szöge radiánban megadva. Ezen egyenlet alapján a görbe pontjai az $x = r \cdot \cos(\Theta)$ és $y = r \cdot \sin(\Theta)$ képletekkel számolhatók a Descartes-féle koordináta-rendszerben. Egy ilyen görbe pontjainak megadásához végezze el egy EXCEL munkalapon a következő számolásokat:

- Töltse fel az A-oszlopot Θ értékeivel a 0,0–31,4 tartományban, 0,1-es lépésközzel!
- A B-oszlopban számolja ki r értékeit a logaritmikus spirál egyenlete alapján, $a = 1,0$ és $b = 0,1$ paraméter értékekkel, az A-oszlopban megadott Θ értékeknél!

Megjegyzés: Ha az a és b értékek egy-egy külön cellában vannak megadva, és ezeket abszolút hivatkozásokkal érik el a B-oszlopban megadott definíciók, akkor a munkalap nemcsak egy görbe pontjainak számolására lesz alkalmas, hiszen az említett cellák tartalmát változtatva a C- és D-oszlopok tartalma automatikusan az új görbe x - és y -értékeit fogja tartalmazni.

- Számoltassa ki a görbe pontjainak x -értékeit a C-oszlopban, valamint az y -értékeket a D-oszlopban!

(kapcsolódó feladat: A16. (9.o.))

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: $\Theta=2,6$ radiánnál $r=1,30$, $x=-1,11$ és $y=0,67$.

A4. Rengeteg – köztük sok fontos, híres vagy nevezetes – szám értéke kiszámítható végtelen numerikus sor tagjainak (a_i) összegeként $\left(\text{szám} = \sum_{i=0}^{\infty} a_i\right)$, esetleg szorzataként $\left(\text{szám} = \prod_{i=1}^{\infty} a_i\right)$, csak a négy alapműveletet alkalmazva. A gyakorlatban véges, de tetszőleges pontossággal számolhatóak ezek az értékek, megfelelő számú első tagokat összeadva. A feladat végén megadott táblázat minden sora egy-egy formulát tartalmaz, amelyekkel (vagy néhányukkal) végezze el a következő számolásokat:

a) Készítsen egy munkalapot, amelynek első oszlopában az i -k értéke, a második oszlopban a numerikus sor i -edik tagjának értéke az explicit formula alapján számolva, a harmadik oszlopban szintén az i -edik tag, de a rekurzív formulával számolva, valamint a negyedik oszlopban a sor első $(i + 1)$ tagjának összege szerepel. Ez utóbbit akár a második, akár a harmadik oszlop adataiból lehet számolni. A táblázat utolsó oszlopában ($i_{\max}$) található, hogy hány tagot érdemes a végtelen sorozatból kiszámítani, vagyis hány sorban szükséges végrehajtani a számolásokat az adott konkrét feladatban.

Érdemes megjegyezni, hogy a rekurzív formula használata sokszor jóval gyorsabb, mint az explicit formula (pl. faktoriálisok számolásánál), mert a sorozat korábban kiszámolt tagjai sok részszámítást már eleve tartalmaznak. Ez hangsúlyozottan igaz az összegek számítására is a negyedik oszlopban, hiszen az $(i + 1)$ -edik összeg biztosan tartalmazza az i -edik összeget.

b) Ha lehetséges, a számolt munkalap alapján határozza meg i azon minimális értékét, ahol a fenti részösszeg legalább 3, illetve 6 értékes jegyre pontos! Az $\ln 2$ és a π esetében a különböző formulákat hasonlítsa össze, melyik konvergál gyorsabban!

szám	explicit formula	rekurzív formula ($i > 0$)	$i_{\max}$
$2 = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{2^i}$	$= \frac{1}{2^0} + \frac{1}{2^1} + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{2^3} + \frac{1}{2^4} + \dots$	$a_0 = 1, \quad a_i = a_{i-1} \cdot \frac{1}{2}$	25
$\frac{1}{2} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{(2 \cdot i + 1) \cdot (2 \cdot i + 3)}$	$= \frac{1}{1 \cdot 3} + \frac{1}{3 \cdot 5} + \frac{1}{5 \cdot 7} + \frac{1}{7 \cdot 9} + \dots$	$a_0 = \frac{1}{3}, \quad a_i = a_{i-1} \cdot \frac{2 \cdot i - 1}{2 \cdot i + 3}$	500
$0,693 \dots : \ln 2 = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i+1}$	$= \frac{1}{1} - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} - \frac{1}{6} + \dots$	$a_0 = 1, \quad a_i = a_{i-1} \cdot \frac{-i}{i+1}$	500
vagy $= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{(i+1) \cdot 2^{i+1}}$	$= \frac{1}{1 \cdot 2^1} + \frac{1}{2 \cdot 2^2} + \frac{1}{3 \cdot 2^3} + \frac{1}{4 \cdot 2^4} + \dots$	$a_0 = \frac{1}{2}, \quad a_i = a_{i-1} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{i}{i+1}$	20
vagy $= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{2 \cdot (1/3)^{2 \cdot i + 1}}{2 \cdot i + 1}$	$= \frac{2}{1 \cdot 3^1} + \frac{2}{3 \cdot 3^3} + \frac{2}{5 \cdot 3^5} + \frac{2}{7 \cdot 3^7} + \dots$	$a_0 = \frac{2}{3}, \quad a_i = a_{i-1} \cdot \frac{1}{9} \cdot \frac{2 \cdot i - 1}{2 \cdot i + 1}$	10
$2,303 \dots : \ln 10 = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{2 \cdot (9/11)^{2 \cdot i + 1}}{2 \cdot i + 1}$	$= \frac{2 \cdot 9^1}{1 \cdot 11^1} + \frac{2 \cdot 9^3}{3 \cdot 11^3} + \frac{2 \cdot 9^5}{5 \cdot 11^5} + \dots$	$a_0 = \frac{18}{11}, \quad a_i = a_{i-1} \cdot \frac{81}{121} \cdot \frac{2 \cdot i - 1}{2 \cdot i + 1}$	40
Euler szám: $e = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!}$	$= \frac{1}{0!} + \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \frac{1}{4!} + \frac{1}{5!} + \dots$	$a_0 = 1, \quad a_i = a_{i-1} \cdot \frac{1}{i}$	15
$\pi = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{4 \cdot (-1)^i}{2 \cdot i + 1}$	$= \frac{4}{1} - \frac{4}{3} + \frac{4}{5} - \frac{4}{7} + \frac{4}{9} - \frac{4}{11} + \dots$	$a_0 = 4, \quad a_i = a_{i-1} \cdot \left(-\frac{2 \cdot i - 1}{2 \cdot i + 1}\right)$	300
vagy $= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(i!)^2 \cdot 2^{i+1}}{(2 \cdot i + 1)!}$	$= 2 \cdot \left(\frac{1}{1} + \frac{1}{3} + \frac{1 \cdot 2}{3 \cdot 5} + \frac{1 \cdot 2 \cdot 3}{3 \cdot 5 \cdot 7} + \dots\right)$	$a_0 = 2, \quad a_i = a_{i-1} \cdot \frac{i}{2 \cdot i + 1}$	30
$\frac{\pi}{2} = \prod_{i=0}^{\infty} \frac{(2 \cdot (i+1))^2}{(2 \cdot (i+1))^2 - 1}$	$= \frac{2 \cdot 2}{1 \cdot 3} \cdot \frac{4 \cdot 4}{3 \cdot 5} \cdot \frac{6 \cdot 6}{5 \cdot 7} \cdot \frac{8 \cdot 8}{7 \cdot 9} + \dots$	$a_0 = \frac{4}{3}, \quad a_i = a_{i-1} \cdot \left(\frac{i+1}{i}\right)^2 \cdot \frac{2 \cdot i - 1}{2 \cdot i + 3}$	300

(kapcsolódó feladat: A17. (9.o.))

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: Az alábbiak a fenti táblázat feladatainak numerikus soraihoz tartozó elemek közül egy vagy két adatpárt, a k -adik elemet, valamint az ehhez tartozó részösszeget adja meg:

szám	k	a_k	$\sum_{i=0}^k a_i$	szám	k	a_k	$\sum_{i=0}^k a_i$ vagy $\prod_{i=0}^k a_i$
2	6	0,015625	1,984375	ln(10)	11	0,000860693	2,301172958
1/2	48	0,000104134	0,494949495	Euler szám	6	0,001388889	2,718055556
ln(2) (1. verzió)	100	0,00990099	0,698073169	π (1. verzió)	100	0,01990	3,151493401
	101	-0,009803922	0,688269248		101	-0,01970	3,131788968
ln(2) (2. verzió)	8	0,000217014	0,6929672	π (2. verzió)	12	0,000121176	3,141479649
ln(2) (3. verzió)	3	0,000130642	0,693134757	$\pi/2$	100	1,000025001	1,566893745

- A5. Töltsön fel egy EXCEL munkalapot függvényértékekkel! Az első oszlop a független változó értékeit tartalmazza 0,1-enként a 0–3 tartományban, míg a 2–9. oszlopok az $(i-1) \cdot \sqrt{x}$ értékeket, ahol i az oszlop sorszáma. A feladatot próbálják meg úgy megoldani, hogy csak egyetlen cellába kelljen beírni a függvény definícióját, majd annak vízszintes és függőleges irányú másolásával minden cellába automatikusan jó definíció kerül! (kapcsolódó feladat: A18. (9. o.))

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: A számított táblázat jobb alsó függvényértéke 13,85641.

- A6. Készítsen egy EXCEL munkalapon táblázatot, amely tartalmazza a víz sűrűségét öt értékes jegy pontossággal, a 20–23 °C-os tartományban 0,05 °C-onként! Az adatok kijelzett pontossága feleljen meg a valósnak, és az oszlopoknak legyen pontos fejléce! A

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

tapasztalati képlet öt tizedes jegy pontossággal megadja a víz sűrűségét g/cm³ mértékegységben, adott t (°C-ban megadott) hőmérsékleten a 15 °C $\leq t \leq$ 35 °C tartományban.

(kapcsolódó feladat: A19. (9. o.))

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: 20,95 °C-on a sűrűség 0,99803 g/cm³.

- A7. Hány gramm kristályos réz(II)-szulfátot (CuSO₄·5H₂O) kell egy 250 cm³-es mérőlombikban feloldani ahhoz, hogy az oldat moláris koncentrációja c legyen, ahol c értékei 0,0; valamint 0,01; 0,03; 0,05; 0,07; ...; 0,99? Az adatokat egy munkalap két oszlopába rendezze, és a bemérendő tömegeket definíciók segítségével számítsa ki! Az eredmények négy tizedes jegy pontosságúak legyenek. Az atomtömegeket az F1. alfejezet (40. o.) tartalmazza. (kapcsolódó feladat: A20. (9. o.))

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: 0,41 M oldathoz 25,5919 g kristályos só kell bemérni.

- A8. Hány gramm kristályos réz(II)-szulfátot (CuSO₄·5H₂O) kell 58 g vízben feloldani ahhoz, hogy az oldat tömegszázalékos összetétele m legyen, ahol m értékei 0; 0,5; 1,0; ...; 30,00? Az adatokat egy munkalap két oszlopába rendezze, és a bemérendő tömegeket definíciók segítségével számítsa ki! Az eredmények négy értékes jegy pontosságúak legyenek. (kapcsolódó feladat: A21. (9. o.))

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: 12,5 tömegszázalékos oldathoz 14,0986 g kristályos só kell bemérni.

- A9. Használja az EXCEL táblázatkezelő programot hígítások számítására!

a) Készítsen egy olyan munkalapot, amely tetszőleges adatokkal kiszámítja, hány cm³-t kell hígítani koncentrált, 37,0 tömegszázalékos, 1,18 g/cm³ sűrűségű sósavoldatból, hogy a szükséges koncentrációjú és térfogatú savoldatot kapjuk? Tartalmazza a munkalap B1 és B2 cellája a hígított oldat moláris koncentrációját, illetve térfogatát; a B4 és B5 cella a hígítandó tömény sav sűrűségét, illetve tömegszázalékos összetételét; valamint a B7 cellában számoltassa ki a tömény sav szükséges térfogatát! Az A és C oszlopok megfelelő celláiba olyan szövegeket írjon, amelyek egyértelművé teszik a B oszlop megfelelő adatainak kémiai jelentését és mértékegységét.

b) Készítsen munkalapokat koncentrált kénsav, salétromsav, ecetsav, foszforsav és perklórsav tetszőleges hígítására, az A9.a) feladatban megadott módhoz hasonlóan. A szükséges adatokat meg tudja keresni az InterNet segítségével.

A szükséges atomtömegeket az F1. alfejezet (40. o.) tartalmazza.

Megjegyzés: Oldatkészítéshez szükséges számításokhoz speciális online/offline programok (angolul solution calculators) is használhatók (pl. <http://www.periodni.com>). A példa megoldásához egy ilyen program segíthet akár a tömény savak adatainak megkeresésében, akár visszaellenőrizni, hogy az elkészített munkalapunk jól számol-e.

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: 250 cm^3 $0,25\text{ M}$ koncentrációjú oldat készítéséhez $5,22\text{ cm}^3$ tömény sósavat kell hígítani.

- A10. Készítsen munkalapot, amely kiszámítja egy egyértékű erős sav c koncentrációjú oldatának pH -értékét közelítő, illetve pontos formulákkal! A vízionszorzat pontos értéke $K_v=1,74\times 10^{-14}\text{ M}^2$. A munkalap tartalmazzon három oszlopot: (1) a savoldat analitikai koncentrációi a $c=1\times 10^{-5}$ – $1\times 10^{-8}\text{ M}$ tartományban, 301 adat, logaritmikusan arányosan megadva; (2) az oldatok közelítő pH -i a $pH\cong -\lg c$ összefüggés alapján; valamint (3) az oldatok pontos pH -i a $pH=-\lg[H^+]$ definíció alapján, ahol $[H^+]$ a megoldása a $c=[H^+]-[OH^-]=[H^+]-K_v/[H^+]$ anyagmérleg-egyenletnek. Ez utóbbi egyenlet átrendezve egy $[H^+]$ -ra nézve másodfokú egyenlethez vezet, ennek csak az egyik megoldása lehet kémiaiilag értelmes.

A táblázat a koncentrációk értékeit tudományos (más néven normálalakos) formában, négy értékes jeggyel mutassa; míg a pH -értékeket tizedestört alakban, három tizedes jegy pontossággal. A számolásokban használt definíciókban a vízionszorzat értékére abszolút, míg az analitikai koncentrációk értékeire relatív módon legyen hivatkozás.

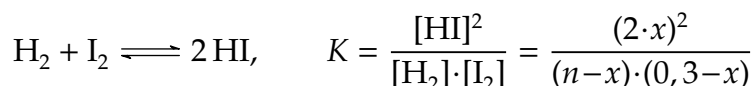
A kész táblázat alapján válaszolja meg a következő kérdéseket, egymondatos indoklást is adva:

- Melyik pH -tartományban kisebb a közelítő formula hibája $0,01\text{ pH}$ -egységnél?
- Melyik pH -tartományban nagyobb a közelítő formula hibája $0,1\text{ pH}$ -egységnél?
- Melyik az a pH -tartomány, amelyben a közelítő formula hibája egy pH -egységnél is nagyobb?

(kapcsolódó feladat: A22. (9. o.))

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: $1,380\times 10^{-8}\text{ M}$ koncentrációjú oldatban a közelítő pH értéke $7,860$, míg a pontos érték $6,857$, és ezen pH felett az eltérés nagyobb egy pH egységnél.

- A11. Egy $1,000\text{ dm}^3$ -es zárt edény kezdetben n mol hidrogéngázt és $0,300$ mol jódgőzt tartalmaz. Az edényben a két anyag között a



egyensúlyi reakció játszódik le, ahol az egyensúlyi állandó értéke $0,871$ a reakció hőmérsékletén, és x jelöli a hidrogéngáz elreagált móljainak számát. Számolják ki egy munkalapon a reakcióban részt vevő anyagok egyensúlyi koncentrációit az $n=0,02; 0,04; \dots; 1,00; 2,0; 4,0; \dots 40,0$ értékekre úgy, hogy minden n értékre kiszámítsák x értékét a fenti képletből megadható másodfokú egyenlet segítségével, majd x -ből a sztöchiometriai összefüggések alapján megadják a három anyag egyensúlyi koncentrációit a munkalap oszlopaiban. (Így a munkalapnak összesen öt oszlopa lesz.)

(kapcsolódó feladat: A23. (9. o.))

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: $n=0,4$ mol értéknél $x=0,10968553$ mol, továbbá az egyensúlyi anyagmennyiségek: $n_{\text{H}_2}=0,29031447$ mol, $n_{\text{I}_2}=0,19031447$ mol és $n_{\text{HI}}=0,21937106$ mol.

- A12. A cukoripar egyik legfontosabb adatsora a cukor vizes oldatának sűrűsége a koncentráció és a hőmérséklet függvényében. Ezt szakzsargonban Plato-táblázatnak is nevezik, mert 1900-ban Plato készítette el az első ilyen táblázatot. Ezt az ICUMSA¹ módszertani ajánlásai alapján 1988-ban módosították. A jelenleg érvényes táblázatban megadott sűrűség értékeket öt tizedes jegy pontossággal írja le a

$$\rho_{\text{oldat}}(T, m/m\%) = \sum_{a=0}^5 \left(\sum_{b=0}^5 c_{ab} \cdot T^b \right) \cdot (m/m\%)^a$$

¹International Commission for Uniform Methods of Sugar Analysis

függvény a 10–80 °C és a 0–85 m/m%-s tartományban. Az egyenletben T a °C-ban kifejezett hőmérséklet, $m/m\%$ a tömegszázalékban megadott koncentráció, ρ_{oldat} az adott összetételű oldat sűrűsége az adott hőmérsékleten, valamint a c_{ab} értékek empirikusan meghatározott koefficiensek, amelyeket a

$\begin{matrix} c_{ab} \\ a \backslash b \end{matrix}$	0	1	2	3	4	5
0	$9,99931 \times 10^{-01}$	$3,98115 \times 10^{-03}$	$1,32357 \times 10^{-05}$	$5,37825 \times 10^{-08}$	$-1,91703 \times 10^{-10}$	$0,00000 \times 10^{+00}$
1	$4,81848 \times 10^{-05}$	$-9,18863 \times 10^{-06}$	$1,26496 \times 10^{-07}$	$-5,43168 \times 10^{-09}$	$9,72766 \times 10^{-11}$	$-5,68578 \times 10^{-13}$
2	$-7,58872 \times 10^{-06}$	$1,46603 \times 10^{-07}$	$-5,66644 \times 10^{-09}$	$2,48701 \times 10^{-10}$	$-4,62407 \times 10^{-12}$	$2,90476 \times 10^{-14}$
3	$4,55860 \times 10^{-08}$	$-1,20702 \times 10^{-09}$	$9,75602 \times 10^{-11}$	$-4,81164 \times 10^{-12}$	$9,54275 \times 10^{-14}$	$-6,28912 \times 10^{-16}$
4	$-1,65973 \times 10^{-10}$	$0,00000 \times 10^{+00}$	$-5,78623 \times 10^{-13}$	$3,80431 \times 10^{-14}$	$-8,51393 \times 10^{-16}$	$5,99843 \times 10^{-18}$
5	$0,00000 \times 10^{+00}$	$4,39863 \times 10^{-14}$	$0,00000 \times 10^{+00}$	$-8,23093 \times 10^{-17}$	$2,52225 \times 10^{-18}$	$-2,01079 \times 10^{-20}$

táblázat ad meg. Készítsen munkalapot, amely a B3 cellában kiszámítja annak a cukoroldatnak a sűrűségét, amelynek tömegszázalékos összetétele a B1, hőmérséklete pedig a B2 cellában van! Az A és C oszlop megfelelő celláiba olyan megjegyzéseket írjon, amelyek egyértelműsítik a B oszlop celláinak jelentését! (kapcsolódó feladatok: A24. (10.o.) és A39. (13.o.))

Megjegyzés: Ez a feladat sokkal nehezebb a többinél, mert a fenti függvényt megadó definíciót nagyon nehéz hiba nélkül beírni. Érdekes az empirikus együtthatókat egy mátrixba beírni, és a függvény egyes részeit több cellába definiálni, hogy átláthatóbb legyen a beírás.

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: Két sűrűség adat a legszélsőségesebb hőmérsékleteknél és koncentrációknál: $\rho_{\text{oldat}}(T=80^\circ\text{C}, m/m\%=5)=0,99065 \text{ g/cm}^3$ és $\rho_{\text{oldat}}(T=10^\circ\text{C}, m/m\%=85)=1,45130 \text{ g/cm}^3$.

1.2. Műszaki-tudományos célú ábrák készítése EXCEL-ben

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

(A bemutató függvény:

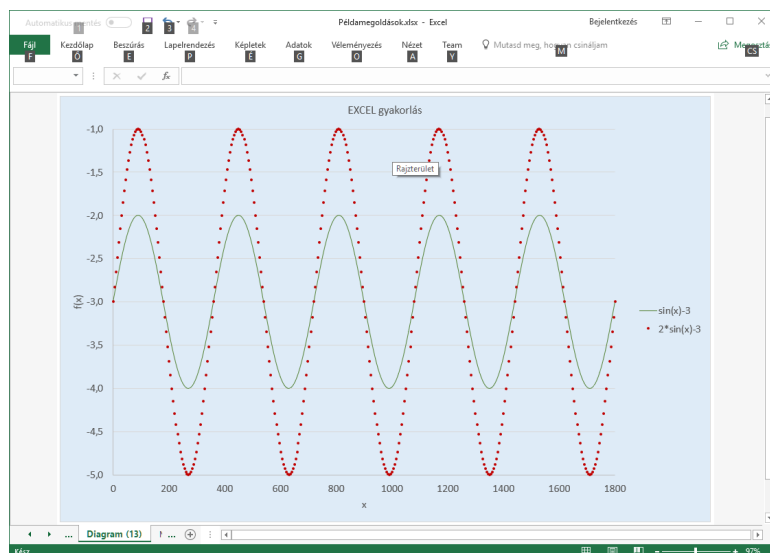
$$G(t) = 1/(1+2 \cdot \{0,1;0,01\} \cdot t) + 0,5, t=0,5 \text{ s}; 1,0 \text{ s}; \dots; 5 \text{ s}; 10 \text{ s}; \dots; 50 \text{ s}; 100 \text{ s}; \dots; 500 \text{ s}.)$$

- | | | |
|---|---|--|
| 1. manuális vs. számítógépes ábrakészítés | 6. Pont (X,Y) típus (nem ekvidisztáns adatpárok miatt!) | 13. pont- (vagy jelölő-, esetleg szimbólum-) és vonalformák beállítása |
| 2. diagramok (ábrák) típusai | 7. tengelycímek, céljuk | 14. több görbe egy ábrán |
| 3. átmeneti főmenü: Diagrameszközök (almenük célja) | 8. diagramcím, célja | 15. lineáris/logaritmikus tengelyskála |
| 4. ábrakészítés alapbeállításai | 9. jelmagyarázat blokk, automatikus jelmagyarázat | 16. tengelyek metszete |
| 5. műszaki-tudományos célú ábra készítése (színnel kiemelt részeket ellenőrizni!) | 10. rácsvonalak, céljuk | 17. görbített (simított) vonalak (használatuk sokszor elkerülendő) |
| | 11. tengelyhatárok | 18. ábra helye a munkalapon/munkafüzetben |
| | 12. beosztások felirata, formátumuk beállítása | 19. Sor/oszlopváltás jelentése |

Feladatok:

A13. Reprodukálja a jobb oldalon lévő ábrát a munkafüzet és a munkalap neveinek kivételével! Melyik gyakorlati szabályt nem veszi figyelembe az ábra? *Megjegyzések:*

- Legelőször a független változó értékeit érdemes megállapítani.
- A függvényértékek számolásához tudni kell, hogy a szinusz függvényben az EXCEL az x -értéket fokban vagy radiánban értelmezi.
- A π értékét az EXCEL-ben a „PI()” karaktersorozat adja meg. (Magyarázat a következő részben.)



- A14. Az A2. feladat (4. o.) számított adataiból készítsen egy olyan ábrát, amely a Fibonacci számsorozat elemeit mutatja az elem sorszámának függvényében! Az ábrán használjon logaritmikus skálabeosztást az y tengelyen!
- A15. Az A2. feladat (4. o.) számított adataiból készítsen egy olyan műszaki-tudományos igényességű ábrát, amely az aranymetszés számértékének közelítő értékeit mutatja a Fibonacci számsorozat elemei sorszámának függvényében!
- A16. Az A3. feladatban (4. o.) számolt y értékeket ábrázoljuk az x -értékek függvényében, betartva a műszaki-tudományos igényességű ábrakészítés szabályait!
- A17. Az A4. feladatban (5. o.) számolt munkalapok alapján az egyes numerikus sorokra külön-külön készítsen ábrákat műszaki-tudományos céllal a következő módokon:
- Minden ábra tartalmazza az összeg elemeinek sorszáma függvényében az aktuális összeget, vagyis a szám közelítését.
 - Minden ábra két görbét tartalmazzon, az előbbi pontban megadott mellett a sorszám függvényében az egyes elemeket is ábrázolja.
 - A fentieket kívül az ábrán legyen egy harmadik görbe is. Az első üres oszlopban számítsa ki a szám és az aktuális közelítés különbségét, és ezeket az adatokat is ábrázolja a sorszám függvényében!
- A18. Az A5. feladat (6. o.) számított adataiból készítsen egy olyan ábrát, amely mind a nyolc számított görbét tartalmazza! A görbéket úgy rajzolja meg, hogy azok felváltva, csak töltött körökkel és csak folytonos vonalakkal legyenek jelölve!
- A19. Az A6. feladat (6. o.) számított adataiból készítsen egy olyan ábrát, amely a $\varrho_v(t)$ görbét vonallal mutatja az adatokat jól visszaolvasható formában!
- A20. Az A7. feladat (6. o.) számított adataiból készítsen egy olyan ábrát, amely a szükséges kristályos réz(II)-szulfát tömegét ábrázolja a moláris koncentráció függvényében!

(kapcsolódó feladat: A41. (13. o.))

- A21. Az A8. feladat (6. o.) számított adataiból készítsen egy olyan ábrát, amely a szükséges kristályos réz(II)-szulfát tömegét ábrázolja a tömegszázalékos összetétel függvényében!

(kapcsolódó feladat: A41. (13. o.))

Készítsen ábrát úgy is, hogy az A8. feladatban az oldat tömegszázalékos összetételét (m) 0–80 között számolja ki 0,5-es lépésközzel. Ha tapasztal szokatlan változást a kiterjesztett tömegszázalékos tartományban ábrázolt görbén, próbálja megadni annak (kémiai) okát!

- A22. Az A10. feladat (7. o.) számított adataiból készítsen egy olyan ábrát, amelyen két görbe van az analitikai savkoncentráció függvényében! Az első a pH közelítő, míg a második a pH pontos értéke. Az ábrát a címekkel, jelmagyarázatokkal, stb. tegye könnyen átláthatóvá és érthetővé!

A23. Az A11. feladat (7. o.) számított adataiból készítsen egy olyan ábrát, amely a jódgőz és a hidrogénjodid egyensúlyi koncentrációját mutatja a hozzáadott hidrogéngáz anyagmennyiségének függvényében. Az ábrát a címekkel, jelmagyarázatokkal, stb. tegye könnyen átláthatóvá és érthetővé!

A24. Az A12. feladat (7. o.) alapján készítsen egy olyan ábrát, amely adott hőmérsékleten felrajzolja egy cukoroldat sűrűségét a koncentrációja függvényében, a 0–85 tömegszázalékos tartományban, a független változó 0, 5, 10, ..., 85 értékeinél. Az ábrát a címekkel, jelmagyarázatokkal, stb. tegye könnyen átláthatóvá és érthetővé!

Megjegyzés: Ez a feladat nehezebb a többinél, mert a hivatkozott feladatban számolt adatok nem használhatók fel közvetlenül. Az ábrázolandó adatokat előbb egyenként ki kell számolni, majd a számolt sűrűség értékeket külön oszlopba beírni az hozzá tartozó koncentrációértékekkel együtt. Ezen számolás során a hivatkozott feladat megjegyzésében leírtakat itt is érdemes figyelembe venni.

1.3. Egyéb fontos tudnivalók az EXCEL használatához

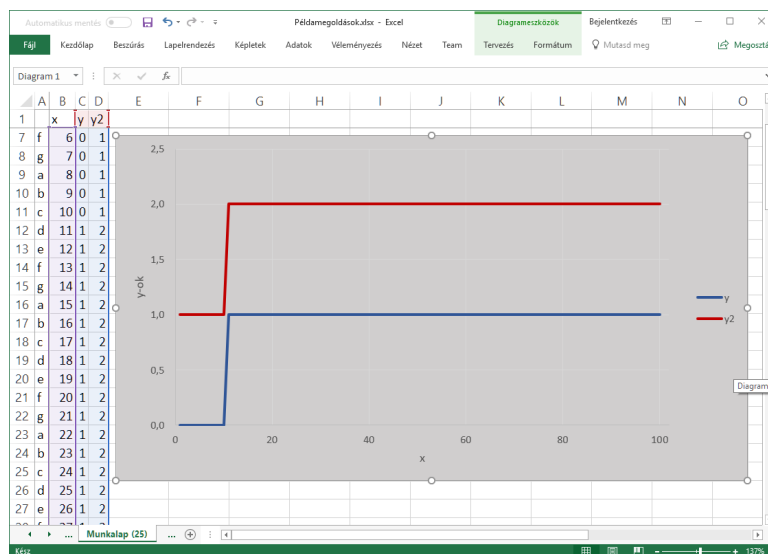
Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

(Segédadatok: a **bemutat.txt** fájl és az A12. feladat (7. o.) táblázata)

- | | | |
|---|--|--|
| 1. szöveg/adat/ASCII állomány/fájl | 7. beágyazott függvények | 14. az első sor(ok)/baloldali oszlop(ok) állandó láthatóságának beállítása |
| 2. adat bevitel/kiírása szövegfájl(ból/ba) (verziótól függő!) | 8. képletek menüszalag | 15. sorok/oszlopok elrejtése/felfedése |
| 3. szöveghatároló karakterek | 9. szám- és karaktersorozat-eredmények | 16. tizedesvessző/tizedespont |
| 4. egyszerű szövegszerkesztők (ún. editorok) | 10. matematikai függvények | 17. tizedes/értékes jegyek |
| 5. függvény, argumentumai (pl. PI(), SIN(A\$2)) | 11. logikai függvények (HA) | 18. irányított beillesztés |
| 6. fok vs. radián | 12. súgó használata | 19. érték szerinti másolás |
| | 13. rendezés, egyéni rendezés | 20. transzponálás (sor/oszlop orientált adattárolás) |

Feladatok:

A25. Reprodukálja a jobb oldalon lévő ábrát a munkafüzet és a munkalap neveinek kivételével! Milyen függvények lehetnek definiálva a C és D oszlopokban (ezért nincsenek címek)? Az ábra készítésekor mivel lehetett volna még segíteni, hogy a függvény könnyebben kitalálható legyen?



A26. A kurzus honlapján lévő **proba.txt** szövegfájl tartalmát töltse le, olvassa be egy munkalapra, az első sort oszlopcímekként, a többi adatot számként értelmezve; majd az első oszlop függvényében ábrázolja a 2–4. oszlopokat egy diagramon, szimbólumokat használva, egy műszaki-tudományos ábra igényeinek megfelelően!

Megjegyzés: A jobb oldalon a fájl pontos tartalma látható. Abban az esetben, ha a fájl nem lenne elérhető InterNeten, vagy nem menthető ki ebből a dokumentumból; akkor ezt be kell gépelni egy szövegfájlba egy tetszőleges editor segítségével. A tartalomban két speciális szimbólum látható: a „„” jelöli a beírandó szóközöket, míg a „†” a begépelendő tabulátor karaktereket. A tartalomban látható, de nem jelölt szóközöket nem kell beírni.

```

t/s.....pH1.....pH2.....pH3
.....1045†4.225†4.270†4.271
.....1285†4.215†4.258†4.263
.....1465†4.208†4.248†4.257
.....2185†4.184†4.221†4.241
.....2845†4.160†4.203†4.226
.....3925†4.130†4.138†4.174
.....5845†4.065†4.060†4.124
.....11725†3.972†3.978†4.053
.....18925†3.863†3.910†4.002
.....28345†3.791†3.870†3.967
.....38785†3.730†3.816†3.918
.....45625†3.684†3.761†3.899
.....78685†3.598†3.662†3.805
.....107305†3.496†3.528†3.683
.....207565†3.351†3.419†3.581
.....287485†3.247†3.370†3.544
.....381145†3.190†3.326†3.497
.....453505†3.154†3.316†3.485
.....557125†3.143†3.272†3.442
.....788665†3.106†3.228†3.396
.....982765†3.051†3.224†3.383
.....1227385†3.057†3.170†3.327
.....1592905†3.003†3.156†3.319
.....2078065†3.009†3.142†3.287
.....3029065†2.993†3.122†3.261

```

A27. Az A oszlop első 200 sorát töltse fel az egész számok sorozatával, 1-gyel kezdve, majd a B oszlop ugyanazon sorait töltse fel 0,0–12,0 közé eső, egyenletes eloszlású, valós véletlen számokkal. A megfelelő függvényt az EXCEL súgója segítségével keresse ki! Ezután ábrázolja a B oszlop adatait az A oszlop adatainak függvényében, vonalakat használva, egy műszaki-tudományos ábra igényeinek megfelelően! (kapcsolódó feladatok: [A28. \(11. o.\)](#) és [A42. \(13. o.\)](#))

A28. Az [A27. feladatban \(11. o.\)](#) számított adatpárokat rendezze úgy, hogy a B oszlop adatainak *értékét* másolja a C oszlopba, itt *csak* ezek növekedjenek, és az ábrázolást így végezze el! (kapcsolódó feladat: [A42. \(13. o.\)](#))

A29. Adja meg a $\sin(x)/x = e^{-x/2}$ egyenlet gyökeit négy értékes jegy pontossággal az (a) $x = (2, 0.3, 0)$, (b) $x = (6, 0.7, 0)$, valamint (c) $x = (9, 0.10, 0)$ tartományokban. A trigonometrikus függvényrészről a független változó radiánban értendő. Két módszer is választható a feladat megoldására:

- A megadott tartományokban megfelelően kicsi lépésközt választva az egyenlet két oldalának különbsége előjelet vált a gyökök helyén, ez a cellaadatokban megkereshető.
- A fenti adatokat ábrázolva, majd az ábra tengelyhatárait szisztematikusan változtatva, az ábra gyökök körüli része olyan mértékben felnagyítható, hogy a gyök egyszerűen leolvasható a kívánt pontossággal.

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: Az első gyök: $x=2,328$.

A30. Ábrázolja az $\text{abs}(x^5)$ függvényt, az $-2 \leq x \leq 2$ tartományban, a függvényértékeket $\Delta x=0,05$ -os lépésközzönként számolva! Az A oszlop a független változó adatait, míg a B oszlop a számolt függvényértékeket tartalmazza! A szükséges számításokhoz NE az EXCEL beépített abszolút érték függvényét használja, hanem a HA logikai függvényt a

$$\text{abs}(x^5) = \begin{cases} x^5, & \text{ha } x \geq 0,0 \\ -x^5, & \text{ha } x < 0,0 \end{cases}$$

definíció alapján.

A31. Ábrázolja a $(0,0;0,0)$, $(1,0;1,0)$, $(2,0;0,0)$, $(3,0;1,0)$, $(4,0;0,0)$, $(5,0;1,0)$, ... pontokat összekötő *valós* függvényt a $0,0 \leq x \leq 11,0$ tartományban, a függvényértékeket $\Delta x=0,2$ -es lépésközzönként számolva! Az A oszlop a független változó adatait, míg a B oszlop a számolt függvényértékeket tartalmazza! A függvény definícióját a megadott adatpárok alapján találja ki, és a HA, a PÁROSE és a CSOKK függvények segítségével definiálja a B oszlopban! Az EXCEL függvényeinek szintaktikáját a súgóban keresse meg!

A32. A hidrogéngáz 1 mol-ját összekeverjük n anyagmennyiségű oxigéngázzal edényben, majd elreagáltatjuk azokat. Feltételezve, hogy a reakció teljesen végbement, számoljuk ki az edényben az egyes anyagok anyagmennyiségét a reakció végbemenetele után az $n=0,00; 0,01; \dots; 1,20$ mol értékeknél, és ábrázoljuk a számolt adatokat az n függvényében!

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: Az elkészítendő táblázat egy sorának adatai: $n_{0,O_2}=0,55$ mol, $n_{\infty,H_2}=0,00$ mol, $n_{\infty,O_2}=0,05$ mol és $n_{\infty,H_2O}=1,00$ mol.

A33. Készítsen EXCEL munkalapot, amely egy adott reakció esetén kiszámítja a reakcióelegyben lévő anyagok anyagmennyiségét a reakció végén, ha adottak a kiindulási anyagok anyagmennyiségei és a reakció teljes mértékben végbemegy. A kiindulási anyagok sztöchiometrikus arányait (vagyis az esetleges felesleget) kezelje az EXCEL logikai függvényei segítségével. Néhány reakcióegyenlet:

- a) $2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$
 b) $\text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{O}_2 = 3\text{CO}_2 + 4\text{H}_2\text{O}$
 c) $2\text{H}_2\text{S} + \text{H}_2\text{SO}_3 = 3\text{S} + 3\text{H}_2\text{O}$
 d) $5\text{HI} + \text{HIO}_3 = 3\text{I}_2 + 3\text{H}_2\text{O}$
 e) $\text{Pb} + 4\text{HNO}_3 = \text{Pb}(\text{NO}_3)_2 + 2\text{NO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$
 f) $2\text{KMnO}_4 + 3\text{MnSO}_4 + 2\text{H}_2\text{O} = 5\text{MnO}_2 + \text{K}_2\text{SO}_4 + 2\text{H}_2\text{SO}_4$
 g) $2\text{KMnO}_4 + 5(\text{COOH})_2 + 3\text{H}_2\text{SO}_4 = 2\text{MnSO}_4 + 10\text{CO}_2 + \text{K}_2\text{SO}_4 + 8\text{H}_2\text{O}$

A34. Rajzolja meg 1 mol anyagmennyiségű tökéletes gáz izotermáját (a $p(V)$ függvény állandó hőmérsékleten) 0, 50 és 100 °C-on, a három görbét egy diagramon feltüntetve! A térfogat tengelyén a tartomány 0,002–0,05 m³ legyen, a nyomás tengelyén az adatokat Pa-ban kell feltüntetni.

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: A nyomások $V=0,05\text{ m}^3$ -nél: $p_0\text{ °C}=45419\text{ Pa}$, $p_{50\text{ °C}}=53733\text{ Pa}$ és $p_{100\text{ °C}}=62047\text{ Pa}$.

A35. A víz és nyolc nátrium-citrát oldat fagyáspontját megmérve a következő adatokat kaptuk:

$c/(\text{mol/dm}^3)$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40
$T_f/\text{°C}$	0,00	-0,37	-0,65	-0,95	-1,25	-1,50	-1,80	-2,00	-2,18

- a) Egy munkalap első két oszlopát töltsse fel a táblázat koncentráció, ill. hőmérséklet adataival. Gyakorlásképpen ezt végezze el mind a három lehetséges módon:
- Az adatokat közvetlenül begépelje a munkalapra.
 - Az adatokat egy egyszerű szövegszerkesztővel (pl. NotePad) egy szövegfájlba írja be, majd az adatokat importálja ebből a fájlból.
 - Az adatokat kimásolja ebből a dokumentumból a vágólapra, majd onnan illeszti be, és irányított beillesztéssel az adatokat transzponálja.
- b) Készítsen egy műszaki-tudományos ábrát, amelyen pontokkal ábrázolja a mért hőmérséklet adatokat a koncentráció függvényében. Az ábra alapján, kémiai indoklással mondja meg, feltételezhetjük-e, hogy oldatban a só teljesen disszociált?
- A36. Számolja ki és ábrázolja egy mol kripton gáz $p(V)$ izotermáját 25 °C-on mind az ideális, mind a reális van der Waals gáztörvény alapján! A két gáztörvény egyenlete:

$$\text{ideális: } p \cdot V = n \cdot R \cdot T, \quad \text{van der Waals: } \left(p + \frac{n^2 \cdot a}{V^2}\right) \cdot (V - n \cdot b) = n \cdot R \cdot T,$$

ahol p a nyomás, V a térfogat, n az anyagmennyiség, R az egyetemes gázállandó, T a termodinamikai hőmérséklet, valamint a és b anyagi minőségtől függő állandók, értékük a kripton gázra 0,2349 m⁶ Pa mol⁻², illetve 0,03978 dm³ mol⁻¹. (A többi számérték az F2. alfejezetben (41. o.) található.)

A munkalap A oszlopát töltsse fel a következő térfogat értékekkel: $V=0,055; 0,056; \dots; 0,070; 0,075; \dots; 0,10; 0,12; \dots; 0,3; 0,4; \dots; 1; 2; \dots; 10\text{ dm}^3$! A B oszlopban az ideális, míg a C-ben a van der Waals gázegyenlet alapján számoltassa a gáz nyomását a megadott térfogatoknál úgy, hogy az eredmény MPa-ban legyen megadva! A definíciókban az n , T , a és b értékeit abszolút hivatkozással használja, legyenek ezek az értékek az F1:F4 cellákban. Használja az E1:E4 és G1:G4 cellákat az állandók nevéhez és mértékegységéhez! A D oszlopban számoltassa ki az ideális és reális gázegyenletből számolt nyomások arányát, és állapítsa meg, milyen nyomásérték alatt tér el 1 %-nál kisebb mértékben az ideális gázegyenlettel számolható nyomás a valóságostól!

Az ábrát egy műszaki-tudományos ábra követelményeinek megfelelően készítse el. Szükség szerint használhat logaritmikus skálá(ka)t is, ha a két görbe közötti különbség úgy jobban szemléltethető.

Megjegyzés: Változtatva a hőmérséklet értékét (érdekes kb. -100 és 300 °C között játszani), a görbék változásából könnyen meg lehet találni a kritikus hőmérsékletet, és tanulmányozni lehet a Boyle-pont változását is.

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: Az alábbiak a számítandó táblázat két sorát adják meg:

v/dm^3	ideális p/MPa	reális p/MPa	nyomásarány
0,05	49,58	148,59	0,334
0,12	20,66	14,59	1,416

1.4. További szorgalmi EXCEL feladatok

Ez az alfejezet további feladatokat biztosít gyakorlásra, de ezek megoldása nem feltétele a kurzus kifogástalan teljesítésének. A feladatok nehézsége változó, egy-két feladat megoldása további ismereteket, Internet-en való utánanézést

igényel. Néhányuk kapcsolódik a korábbi feladatokhoz, más feladatok teljesen függetlenek, csak érdekes vagy fontos problémákhoz kapcsolódnak.

A37. Készítsen egy munkalapot, amely egy függvény Taylor-sorának első n tagját és azok összegét kiszámítja tetszőleges x helyen. Az alábbi táblázat megadja néhány függvény Taylor-sorát.

függvény	explicit formula	rekurzív formula
$e^x = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{x^i}{i!}$	$= \frac{x^0}{1} + \frac{x^1}{1} + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} + \frac{x^5}{120} + \dots$	$a_0 = 1, \quad a_i = a_{i-1} \cdot \frac{x}{i}$
$\ln x = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{2}{2 \cdot i + 1} \cdot \left(\frac{x-1}{x+1}\right)^{2 \cdot i + 1}$	$= \frac{2}{1} \cdot \left(\frac{x-1}{x+1}\right)^1 + \frac{2}{3} \cdot \left(\frac{x-1}{x+1}\right)^3 + \frac{2}{5} \cdot \left(\frac{x-1}{x+1}\right)^5 + \dots$	$a_0 = 2 \cdot \frac{x-1}{x+1}, \quad a_i = a_{i-1} \cdot \frac{2 \cdot i - 1}{2 \cdot i + 1} \cdot \left(\frac{x-1}{x+1}\right)^2$
$\sin x = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i \cdot x^{2 \cdot i + 1}}{(2 \cdot i + 1)!}$	$= \frac{x^1}{1!} - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!} - \frac{x^{11}}{11!} + \dots$	$a_0 = x, \quad a_i = a_{i-1} \cdot \frac{-x^2}{2 \cdot i \cdot (2 \cdot i + 1)}$

A számításokban tartalmazza az E1 cella az x aktuális értékét. Legyen a munkalap első oszlopában a tagok sorszáma, a második oszlopban a sor i -edik tagja az explicit formula alapján számolva, a harmadik oszlopban pedig a sor i -edik tagja a rekurzív formula alapján számítva. A táblázat negyedik oszlopának i -edik sorában legyen akár a második, akár a harmadik oszlop első i cellájának összege, ez lesz a függvény aktuális értékének közelítése a Taylor-sor első i elemének összege alapján. A definíciók az x aktuális értékét abszolút hivatkozással használják, míg a többi cella értékét relatív hivatkozással.

A kiszámolt táblázat alapján állapítsa meg, hogy a konkrét feladatban mekkorának kell lennie n értékének ahhoz, hogy a függvényérték közelítésének legalább 7 értékes jegye legyen!

(kapcsolódó feladat: A38. (13. o.))

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: Az alábbiak a fenti táblázat feladatainak numerikus soraihoz tartozó elemek közül egy adatpárt, a k -adik elemet, az ehhez tartozó részösszeget, valamint a 7 értékes jegyhez tartozó k értéket adja meg adja meg:

szám	k	a_k	$\sum_{i=0}^k a_i$	k_7 értékes jegy
e^1	4	0,046667	2,708333	9
$\ln(10)$	3	0,070126	2,218288	29
$\sin(45^\circ)$	2	0,002490395	0,7071430	4

A38. Az A37. feladatban (13. o.) számolt munkalapok alapján az egyes sorokra külön-külön készítsen ábrákat műszaki-tudományos céllal ugyanolyan módon, ahogy azt az A17. feladat előírja az A4. feladat egyes soraira.

A39. Oldja meg az A12. feladatot (7. o.) úgy, hogy EXCEL tömbfüggvényeket definiál a számolásokhoz! A tömbfüggvények használatának módját keresse ki az InterNeten, vagy az EXCEL súgójában!

(kapcsolódó feladat: A40. (13. o.))

A40. Oldja meg az A24. feladatot (10. o.) úgy, hogy az ábrázolandó adatokat az A39. feladatban (13. o.) leírt módon számolja ki, és nem egyenként, ahogy az A24. feladat eredetileg kéri.

A41. Egy kis kémia: az A20. és A21. feladatok (9. o.) és (9. o.) ábráit hasonlítsa össze, és magyarázza meg, miért „kanyarodnak” máshogy a görbék!

A42. Az A30. és A28. feladatok (11. o.) és (11. o.) „szépséghibája”, hogy a megoldás a rendezést soha nem a véletlen számok aktuális sorozatára végzi el, mert az EXCEL VÉL() függvénye a rendezéskor mindig új véletlen számokat generál. Az EXCEL SORSZÁM vagy RANG.EGY függvényének használatával ez elkerülhető. Az EXCEL súgójában keresse ki ezen függvények célját és szintaktikáját, és a hivatkozott feladatokat oldja meg úgy, hogy a rendezetlen, illetve a rendezett adatokat mutató görbék mindig ugyanazokat a véletlen számokat mutassák, mint függő változó! Ehhez nem kötelező ugyanazokat az oszlopokat használni, mint amiket az eredeti feladat előír. Célszerű a rendezetlen számokat csak vonallal összekötni, míg a rendezetteket csak jelölőkkel megrajzolni ugyanazon az ábrán (miért?).

A43. Készítsen olyan EXCEL munkalap(ka)t, amely(ek) a különböző hőmérsékleti skálákat automatikusan átszámolják egymásba. A múltban vagy jelenben fontos skálák definíciót keresse meg az InterNeten (csak felsorolásképpen a skálák nevei: Celsius /°C/, Fahrenheit /°F/, Delisle /°D/, Kelvin /K/, Newton /°N/, Rankine /°Ra/, Réaumur /°Ré/ és Rømer /°Rø/).

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: Összetartozó adatok 20 °C-on: 20 °C=68 °F=120 °D=293,15 K=6,60 °N=527,67 °Ra=16 °Ré=18,00 °Rø.

A44. Az A43. feladathoz (13. o.) megkeresett definíciók alapján ábrázolja egy diagrammon a Celsius fokok függvényében a többi skála számértékeit!

A45. $V_{A,0}=10 \text{ cm}^3$ A-oldatot titrálunk B-oldattal, minden titrálási pontban egy-egy cm^3 B-oldatot adva a titrált oldatba addig, amíg az összefogyás el nem éri a 100 cm^3 -t ($V_B=0; 1; 2; \dots; 100 \text{ cm}^3$).

- a) Számolja ki a B-oldat térfogatörtőit ($\phi_{B,1}$) a titrálási pontokban! Érdemes az első oszlopba a V_B értékeit írni, a másodikba pedig a $\phi_{B,1}$ értékeket. $V_{A,0}$ értéke legyen a G1 cellában, és használja ezt abszolút hivatkozásként a második oszlop definíciójában.
- b) Tegyük fel, hogy az előzőekben részletezett titrálást úgy hajtjuk végre, hogy minden 5 cm^3 B-oldat hozzáadása – és természetesen homogenizálása – után kiveszünk a titrált oldatból $\Delta V=5\text{ cm}^3$ -t, és így folytatjuk a titrálást. Számolja ki a B-oldat térfogatörtőit ($\phi_{B,2}$) ebben az esetben is! Legyen a C-oszlopban a titrált oldat térfogatának azon része, ami az A-oldatból megmaradt, és tartalmazza a D-oszlop a titrált oldatban lévő B-oldat térfogatát. Ezen oszlopok segítségével számolja ki $\phi_{B,1}$ értékeket az E-oszlopban! Legyen ΔV értéke adott a G2 cellában, és használják ezt abszolút hivatkozásként a definíciók.
- c) Készítsen az adott munkalapon műszaki-tudományos ábrát is, amely a mindkét módon számolt térfogatörtőket mutatja a hozzáadott B-oldat térfogatának függvényében.
- d) Egy kis kémia. Változtassa a $V_{A,0}$ értékét az $1\text{--}10\text{ cm}^3$ és/vagy a ΔV értékét $5\text{--}20\text{ cm}^3$ értékek között (az egyszerűség kedvéért csak egész számértékeket választva), és értelmezze a görbék változását!

Megjegyzés: A feladat b) része kifejezetten nehéz. Sokféleképpen meg lehet oldani, de talán a legegyszerűbb elegáns megoldás az EXCEL INT függvényének használatával érhető el.

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: Néhány (V_B ; $\phi_{B,1}$; $\phi_{B,2}$) adathármas: (5 cm^3 ; $0,33333$; $0,33333$), (10 cm^3 ; $0,50000$; $0,55556$), (20 cm^3 ; $0,66667$; $0,80247$) és (100 cm^3 ; $0,90909$; $0,99970$).

1.5. Microsoft Word dokumentumok szerkesztése

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

1. formázatlan szöveg bevitelle	7. a karakterek 3 csoportja	17. elválasztás
2. láthatatlan és formázó karakterek megjelenítése	8. csökkentett szélességű szóközök	18. fontválasztás (Times, Palatino, Book Antiqua, Cambria, Noto, DejaVu, Garamond), legyen ő, Ő, ű és Ű (!)
3. stílusok használata	9. szélesség nélküli szóközök	
4. elválasztó- vagy kötőjel, mint előjel, gondolatjel, tartományjel, stb.	10. reakcióegyenletek formázása	19. {hasábok}
5. kötött (nem törhető) szóköz	11. ionképletek írása	20. {ábrabeszúrások}
6. speciális karakterek bevitelle (ld. az alábbi táblázatot)	12. az egyenletszerkesztő (fontok!)	21. {kereszt-hivatkozások}
	13. számozás	22. {struktúra-számozása (mezők!)} 23. {véleményezés}
	14. listák formázása	
	15. táblázatok	
	16. lágjegyzetek	

Gyakran használt karakterek beviteli módjai a Libre- és Microsoft Office-ban:

karakter	billentyűzet	Unicode ($\text{␣digit+}(\text{left})\text{Alt-X})^\dagger$	ASCII kód ($(\text{left})\text{Alt+Num}$)
$\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon, \zeta$		03B1, 03B2, 03B3, 03B4, 03B5, 03B6	224† 225† 947† 235† 238† 950†
$\eta, \theta, \iota, \kappa, \lambda, \mu$		03B7, 03B8, 03B9, 03BA, 03BB, 03BC	951† 952† 953† 954† 955† 0181
$\nu, \xi, \omicron, \pi, \rho, \sigma$		03BD, 03BE, 03BF, 03C0, 03C1, 03C3	957† 958† 959† 227† 961† 229†
$\tau, \upsilon, \varphi, \chi, \psi, \omega$		03C4, 03C5, 03C6, 03C7, 03C8, 03C9	231† 965† 237† 967† 968† 969†
A, B, Γ, Δ, E, Z		0391, 0392, 0393, 0394, 0395, 0396	913† 914† 915† 916† 917† 918†
H, Θ, I, K, Λ, M		0397, 0398, 0399, 039A, 039B, 039C	919† 920† 921† 922† 923† 924†
N, Ξ, O, Π, P, Σ		039D, 039E, 039F, 03A0, 03A1, 03A3	925† 926† 927† 928† 929† 228†
T, Υ, Φ, X, Ψ, Ω		03A4, 03A5, 03A6, 03A7, 03A8, 03A9	932† 933† 232† 935† 936† 234†
$\epsilon, \vartheta, \kappa, \varsigma, \phi$		03F5, 03D1, 03F0, 03C1, 03D5	–, –, –, 962† –
$\infty, \approx, \rightleftharpoons$		221E, 2248, 21CC	236† 247†
Å, ħ, †, ° (fok)		00C5, 0127, 0142, 29B5, 00B0	0197, 295† 322† –, 0176
·, ×, ±, ∓	–, AltGr-ú, –, –	00B7, 00D7, 00B1, 2213	0183, 0215, 0177, –
–	Ctrl-(Num–)	2013	0150
–		2212	–
kötött szóköz	Ctrl-Shift-Space	00A0	0160

[†] A „␣” jel azt jelenti, hogy a begépelendő szám elé néha szóközt érdemes írni, hogy az eljárás biztosan működjön. A karakter beírása után a szóköz törölhető, de a legtöbb esetben ez az egész nem kell.

[‡] A három számjeggyel megadott kódok nem minden Word verzióban működnek megbízhatóan.

[§] Ez a karakter csak néhány fontcsaládban érhető el, pl. Cambria, DejaVu, Libertine, MS/Yu Gothic és Segoe UI.

Megjegyzés: Az A48.–A51. feladatok (15–22. o.) szövegei formázott és formázatlan módon is letölthetők vagy szerkeszthetők a csatolt DocsWord.docx fájlból.

Feladatok:

A46. Az alábbi matematikai vagy kémiai kifejezéseket szerkessze meg a Word egyenletszerkesztőjének segítségével! Különösen figyeljen arra, hogy mit jelölünk álló és dőlt betűkkel, ha a matematikai képletben megjegyzések és kémiai képletek is vannak!

- a) Az $ax^2 + bx + c = 0$ másodfokú egyenlet megoldóképlete: $x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$,
- b) az A4. feladat (5. o.) táblázatának explicit és rekurzív formulái,
- c) az A11. feladatban (7. o.) szereplő egyenletek,
- d) az A12. feladat (7. o.) egyenlete,
- e) az A30. feladatban (11. o.) szereplő matematikai kifejezés,
- f) az A36. feladatban (12. o.) szereplő egyenletek,
- g) a 2.1 alfejezet (25. o.) kezdő felsorolásának 6. pontjában szereplő matematikai kifejezés,
- h) a B12. feladatban (26. o.) szereplő két egyenlet közül az első,
- i) a B18. feladatban (27. o.) szereplő egyenlet,
- j) a B35. feladat (30. o.) középére szerkesztett egyenlete,
- k) a B36. feladat (30. o.) számozott egyenletei,
- l) a B43. feladat (32. o.) két és négyismeretlenes egyenletrendszerei,
- m) a B75. feladat (35. o.) matematikai kifejezései,
- n) a B76. feladat (35. o.) matematikai kifejezései,
- o) a B82. feladat (36. o.) középére szerkesztett egyenlete,
- p) a B84. feladat (37. o.) középére szerkesztett egyenlete,
- q) az F2. alfejezet (41. o.) táblázatának matematikai kifejezései; valamint
- r) az F6. alfejezet (47. o.) (F.5)–(F.15) egyenletei (nem könnyű!).

(kapcsolódó feladat: A52. (24. o.))

A47. Az alábbi táblázatokat készítse el a Word segítségével!

- a) Az A4. feladat (5. o.) táblázatának címsora és az alatta lévő két sor (lehet több is);
- b) az A4. feladat (5. o.) megadott eredményeinek táblázata;
- c) az A33. feladatban (11. o.) szereplő reakcióegyenletek közül hármat rendezzen el táblázatban úgy, hogy az egyenlőségek egymás alatt legyenek;
- d) az A35. feladat (12. o.) táblázata (ügyeljen a tizedesvesszők egymáshoz képesti pozíciójára);
- e) az A36. feladat (12. o.) megadott eredményeinek táblázata;
- f) ennek az alfejezetnek a fentebbi táblázata a karakterek beviteli módjairól (nem könnyű feladat!);
- g) a B5. feladat (26. o.) megoldásként megadott adatok táblázata (ügyeljen a tizedesvesszők egymáshoz képesti pozíciójára);
- h) a B8. feladat (26. o.) megadott adatainak táblázata;
- i) a B17. feladat (27. o.) táblázata;
- j) a B19. feladat (28. o.) táblázata;
- k) a B35. feladat (30. o.) táblázata;
- l) a B85. feladat (37. o.) táblázata;
- m) az F2. alfejezet (41. o.) táblázata; valamint
- n) az F4. alfejezet (42. o.) táblázata (kifejezetten nehéz!).

(kapcsolódó feladat: A53. (24. o.))

A48. Az alábbi formázatlan szöveget másolja be a Microsoft Word-be (lehetőleg a „csak a szöveg megőrzése” opcióval), majd a stílusok és a speciális karakterek használatával formázza meg úgy, hogy az a szöveg után megadott módon nézzen ki! A választott font a Palatino Linotype, esetleg a Book Antiqua legyen, ha azok rendelkezésre állnak.

Formázási beállítások: Az alapfont mérete 12 pt, a lábjegyzetekben, táblázatok fejléceiben és ábraalírásokban 10 pt. A papírméret A4-es, mind a négy oldalon 2 cm-es (0,8") margóval. A dokumentumban ne legyen élőfej és élőláb, de legyen elválasztás. A bekezdések igazítása sorkizárt legyen szimpla szóközzel, minden bekezdés után 6 pt-os, a főcím után 18 pt-os térközt tartsanak. A bekezdések első sora 0,5 cm-rel (0,2") kezdődjön beljebb. A listák bal oldali margója 0,5 cm-rel (0,2") kezdődjön beljebb a előző bekezdésnél. A listák számozásának helyzete balra zárt legyen.

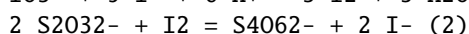
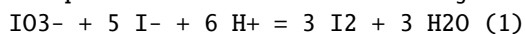
Formázatlan szöveg kezdete

Jodometria

A jodometria az egyik legfontosabb titrimetriás eljárás. Pontossága attól függ, hogy a jódot meghatározására használt nátrium-tioszulfát oldat koncentrációja mennyire pontosan ismert.

A Na₂S₂O₃-mérőoldat koncentrációjának meghatározása.

A tioszulfát mérőoldatok koncentrációja a gyakorlatban a 0,002–0,2 M tartományban változik. A Na₂S₂O₃·5H₂O közvetlen bemérésével általában nem készíthető pontos koncentrációjú oldat. Emiatt készíteni kell egy kálium-jodát törzsoldatot is – amiből egyszerűen tömeg bemérésével állítható elő pontosan ismert koncentrációjú oldat –, és ennek ismert térfogatait kell megtitrálni a



reakcióegyenletek alapján.

Kémiai megfontolások a jodometriás eljáráshoz

- Az (1) reakció sebességi egyenlete a $v = k[I^{3-}][I^-]^2[H+]^2$ összefüggéssel adható meg szokásos körülmények között, ahol a sebességi együttható értéke: $k = (1,2 \pm 0,5) \times 10^9 \text{ M}^{-4}\text{s}^{-1}$. Ebből kiszámítható, hogy az (1) reakció nem pillanatszerű. Ezzel ellentétben a (2) reakció gyors (lásd: Awtrey, A. D., Connick, R. E., Journal of the American Chemical Society, 73(3), 1341-1348 (1951). DOI:10.1021/ja01147a147), egy titrálás szokásos ideje alatt azonnal végbemegy.
- A fenti reakciók érzékenyek az oxigénre, ezért annak jelenlétét ki kell küszöbölni.
- A jódió intenzív kék színű komplexet képez a keményítővel, amit felhasználhatunk a végpont könnyebb jelzésére.

Gyakorlati kivitelezés

Egy jódszámlombikba ~20 cm³ vizet adunk, majd ~5 cm³ 10 %-os kénsav- vagy ~10 cm³ 1 M-os ecetsavoldattal megsavanyítjuk. Kb. 1 g szilárd NaHCO₃-ot adunk hozzá kiűzni az oxigént, majd a pezsgés megszűnte után ~0,3 g szilárd KI-ot oldunk fel. Az oldatba pipettázzuk az előzetesen elkészített KI₃-oldat pontos térfogatát, lezárjuk a lombikot, összerázzuk, majd negyed órára sötét helyre rakjuk, hogy a jódképződés teljesen végbemenjen. Ezután a Na₂S₂O₃ mérőoldatával a jódió színének eltűnéséig a szokásos módon titráljunk. A végpont jelzését elő lehet segíteni néhány csepp keményítő oldat hozzáadásával.

Formázatlan szöveg vége

Jodometria

A jodometria az egyik legfontosabb titrimetriás eljárás. Pontossága attól függ, hogy a jód meghatározására használt nátrium-tioszulfát oldat koncentrációja mennyire pontosan ismert.

A $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ -mérőoldat koncentrációjának meghatározása

A tioszulfát mérőoldatok koncentrációja a gyakorlatban a 0,002–0,2 M tartományban változik. A $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ közvetlen bemérésével általában nem készíthető pontos koncentrációjú oldat. Emiatt készíteni kell egy kálium-jodát törzsoldatot is – amiből egyszerűen tömeg bemérésével állítható elő pontosan ismert koncentrációjú oldat –, és ennek ismert térfogatait kell megtitrálni a



reakcióegyenletek alapján.

Kémiai megfontolások a jodometriás eljáráshoz

1. Az (1) reakció sebességi egyenlete a $v = k \cdot [\text{IO}_3^-] \cdot [\text{I}^-]^2 \cdot [\text{H}^+]^2$ összefüggéssel adható meg szokásos körülmények között, ahol a sebességi együttható értéke: $k = (1,2 \pm 0,5) \times 10^9 \text{ M}^{-4} \text{ s}^{-1}$. Ebből kiszámítható, hogy az (1) reakció nem pillanatszerű. Ezzel ellentétben a (2) reakció gyors¹, egy titrálás szokásos ideje alatt azonnal végbemegy.
2. A fenti reakciók érzékenyek az oxigénre, ezért annak jelenlétét ki kell küszöbölni.
3. A jód intenzív kék színű komplexet képez a keményítővel, amit felhasználhatunk a végpont könnyebb jelzésére.

Gyakorlati kivitelezés

Egy jódszámlombikba ~20 cm³ vizet adunk, majd ~5 cm³ 10 %-os kénsav- vagy ~10 cm³ 1 M-os ecetsavoldattal megsavanyítjuk. Kb. 1 g szilárd NaHCO_3 -ot adunk hozzá kiűzni az oxigént, majd a pezsgés megszűnte után ~0,3 g szilárd KI-ot oldunk fel. Az oldatba pipetázzuk az előzetesen elkészített KIO_3 -oldat pontos térfogatát, lezárjuk a lombikot, összerázzuk, majd negyed órára sötét helyre rakjuk, hogy a jódképződés teljesen végbemenjen. Ezután a $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ mérőoldatával a jód színének eltűnéséig a szokásos módon titrálunk. A végpont jelzését elő lehet segíteni néhány csepp keményítő oldat hozzáadásával.

¹ Awtrey, A. D., Connick, R. E., Journal of the American Chemical Society, 73(3), 1341–1348 (1951). DOI:10.1021/ja01147a147

(kapcsolódó feladat: A54. (24. o.))

Megoldás: lásd a megjegyzést a 14. oldalon!

A49. Az alábbi formázatlan szöveget másolja be a Microsoft Word-be (lehetőleg a „csak a szöveg megőrzése” opcióval), majd a stílusok és a speciális karakterek használatával formázza meg úgy, hogy az a szöveg után megadott módon nézzen ki! A választott font a DejaVu Serif Condensed legyen, ha az rendelkezésre áll.

Formázási beállítások: megegyeznek az A48. feladat (15. o.) második bekezdésében megadottakkal.

Megjegyzés: A dokumentum egy részének két hasábra szedése nem gyakori a szakdolgozatokban, diplomamunkákban, stb. Nem is lesz követelmény a dolgozatokban. Itt azért használtuk mégis, mert enélkül a szöveg nem

fért volna el egy oldalon. Rövid mondatok, bekezdések, felsorolások esetén a több hasáb sok helyet takarít meg. A formázott szöveg hasábkba tördelése a formázás utolsó lépésének kell lennie (bár kivételek mindig vannak).

Formázatlan szöveg kezdete

A kémiai reakciók csoportosítása

A reakciókat számos szempont szerint csoportosíthatjuk (a leírásban megadott számok a szöveg végén lévő táblázat példáinak sorszámát jelentik):

1. A reakció eredménye szerint:

a) Egyesülés az a kémiai reakció, amely során több anyag egy anyaggá alakul (1). Ennek is több fajtája lehet:

- addícióban két vagy több vegyület molekulája melléktermék képződése nélkül egyesül egymással (2);

- poliaddícióban egy kismolekulájú vegyület sok molekulája egyesül melléktermék keletkezése nélkül (3);

- a kondenzáció abban tér el az addíciótól, hogy melléktermék keletkezik (4); és

- a polikondenzációban a poliaddícióhoz képest szintén keletkezik egy vagy több kismolekulájú termék (5).

b) Bomlás az a reakció, amely során egy anyag több anyaggá alakul (6). Ennek speciális esete az elimináció, melyben a reagens egy sokkal kisebb molekula kilépése közben alakul át új vegyületté (a (2) visszafelé).

c) Szubsztitúció az a reakció, amelyben a vegyület egy atom(csoport)ja egy másik atom(csoport)ra cserélődik ki melléktermék képződése közben (7).

d) Izomerizáció során molekulán belül történő átrendeződés történik (8).

2. Energetikai szempontok szerint egy reakció lehet endoterm, amikor a reakcióelegy hőt vesz fel, és/vagy hőmérséklete csökken (1,6); valamint exoterm, amelyben a reakcióelegy hőt ad le és/vagy hőmérséklete nő (2,9).

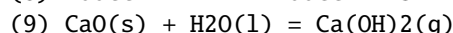
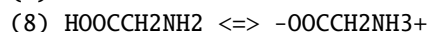
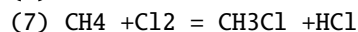
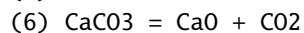
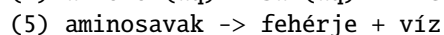
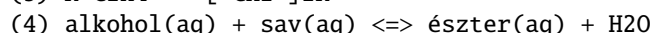
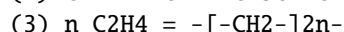
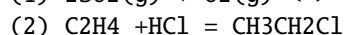
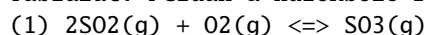
3. A fázisok száma szerint a reakció homogén, ha a reakciópartnerek azonos fázisban vannak (1,4,7), ellenkező esetben heterogén reakcióról beszélünk (9).

4. Sebesség alapján pillanatreakcióról beszélünk, ha az átalakulás folyamatát nem tudjuk követni a reakció gyorsasága miatt (8), ellenkező esetben időreakcióról van szó (1,4).

5. Egyirányú a reakció, ha a végbemenetele után a kiindulási anyagok nem mutathatók ki (sztöchiometrikus az átalakulás, pl. 2,6,9), ellenkező esetben egyensúlyi reakcióról beszélünk (1,4,8). [lábjegyzet: Azért kell így fogalmazni, mert a termodinamika szerint minden reakció egyensúlyi, legfeljebb teljesen el lehet tolva az egyik irányba.]

6. Részecske átmenetele szerint csoportosítva a sav-bázis reakciók protonátmenettel járnak (8), míg a redoxireakciók elektronátmenettel (1,7).

Táblázat: Példák a különböző reakciótípusokra.



Formázatlan szöveg vége

A kémiai reakciók csoportosítása

A reakciókat számos szempont szerint csoportosíthatjuk (a leírásban megadott számok a szöveg végén lévő táblázat példáinak sorszámaát jelentik):

1. A reakció eredménye szerint:

- a) Egyesülés az a kémiai reakció, amely során több anyag egy anyaggá alakul (1). Ennek is több fajtája lehet:
 - addícióban két vagy több vegyület molekulája melléktermék képződése nélkül egyesül egymással (2);
 - poliaddícióban egy kismolekulájú vegyület sok molekulája egyesül melléktermék keletkezése nélkül (3);
 - a kondenzáció abban tér el az addíciótól, hogy melléktermék keletkezik (4); és
 - a polikondenzációban a poliaddícióhoz képest szintén keletkezik egy vagy több kismolekulájú termék (5).
- b) Bomlás az a reakció, amely során egy anyag több anyaggá alakul (6). Ennek speciális esete az elimináció, melyben a reagens egy sokkal kisebb molekula kilépése közben alakul át új vegyületté (a (2) visszafelé).
- c) Szubsztitúció az a reakció, amelyben a vegyület egy atom(csoport)ja egy másik atom(csoport)ra cserélődik ki melléktermék képződése közben (7).
- d) Izomerizáció során molekulán belül történő átrendeződés történik (8).

2. Energetikai szempontok szerint egy reakció lehet endoterm, amikor a reakcióelegy hőt vesz fel, és/vagy hőmérséklete csökken (1,6); valamint exoterm,

amelyben a reakcióelegy hőt ad le és/vagy hőmérséklete nő (2,9).

3. A fázisok száma szerint a reakció homogén, ha a reakciópartnerek azonos fázisban vannak (1,4), ellenkező esetben heterogén reakcióról beszélünk (9).
4. Sebesség alapján pillanatreakcióról beszélünk, ha az átalakulás folyamatát nem tudjuk követni a reakció gyorsasága miatt (8), ellenkező esetben időreakcióról van szó (1,4).
5. Egyirányú a reakció, ha a végbemene-tele után a kiindulási anyagok nem mutathatók ki (sztöchiometrikus az átalakulás, pl. 2,6,9), ellenkező esetben egyensúlyi reakcióról beszélünk (1,4,8).¹
6. Részecske átmenetele szerint csoportosítva a sav-bázis reakciók protonátmenettel járnak (8), míg a redoxireakciók elektronátmenettel (1,7).

Táblázat: Példák a különböző reakciótípusokra.

(1)	$2\text{SO}_{2(g)} + \text{O}_{2(g)} \rightleftharpoons \text{SO}_{3(g)}$
(2)	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{HCl} = \text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$
(3)	$n \text{ C}_2\text{H}_4 = -[\text{CH}_2]_{2n}-$
(4)	$\text{alkohol}_{(aq)} + \text{sav}_{(aq)} \rightleftharpoons \text{észter}_{(aq)} + \text{H}_2\text{O}$
(5)	$\text{aminosavak} \rightarrow \text{fehérje} + \text{víz}$
(6)	$\text{CaCO}_3 = \text{CaO} + \text{CO}_2$
(7)	$\text{CH}_4 + \text{Cl}_2 = \text{CH}_3\text{Cl} + \text{HCl}$
(8)	$\text{HOOCCH}_2\text{NH}_2 \rightleftharpoons ^-\text{OOCCH}_2\text{NH}_3^+$
(9)	$\text{CaO}_{(s)} + \text{H}_2\text{O}_{(l)} = \text{Ca(OH)}_{2(s)}$

¹Azért kell így fogalmazni, mert a termodinamika szerint minden reakció egyensúlyi, legfeljebb teljesen el lehet tolva az egyik irányba.

(kapcsolódó feladat: A55. (24. o.))

Megoldás: lásd a megjegyzést a 14. oldalon!

A50. Az alábbi formázatlan szöveget másolja be a Microsoft Word-be (lehetőleg a „csak a szöveg megőrzése” opcióval), majd a stílusok és a speciális karakterek használatával formázza meg úgy, hogy az a szöveg után megadott módon nézzen ki! A választott font a Noto Serif legyen, ha az rendelkezésre áll.

Formázási beállítások: megegyeznek az A48. feladat (15. o.) második bekezdésében megadottakkal.

Megjegyzés: Vegyük észre, hogy a helymegtakarítás érdekében a táblázat adatai transzponálva lettek, és a mértékegységekben nem ferde vonalak, hanem negatív kitevők vannak (manapság ezt jobban érthetőnek tartják).

Formázatlan szöveg kezdete

Gázegyenletek

Számos egyenlet létezik gázok állapotának leírására, ezek közül kettő kiemelten fontos, az ideális - vagy tökéletes - gázegyenlet, valamint a Van der Waals-egyenlet, [lábjegyzet: A nevet helyesen van der Waals-nak kell írni, de mivel az irodalom túlnyomó része nagybetűt használ, itt is ezt a gyakorlatot követjük.] amit (helytelenül) néha csak reális gázegyenletnek hívnak.

Ideális gázok egyenlete

Ha a gázcseppkének térfogatát elhanyagoljuk a gáz által kitöltött térfogathoz képest; valamint feltételezzük, hogy a részecskék tökéletesen rugalmasan ütköznek mind egymással, mind a tárolóedény falával, akkor a

$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \rightarrow$ izoterma: $p(V) = n \cdot R \cdot T / V$ (1)

összefüggés vezethető le, ahol p a gáz nyomása, V a térfogata, n az anyagmennyisége, R az egyetemes gázállandó ($=8,314 \text{ J/(mol} \cdot \text{K)}$) és T a termodinamikai hőmérséklet. Ez az egyenlet független a gáz anyagi minőségétől.

Van der Waals-gázegyenlet

Ez az egyenlet számol a részecskék közötti erők egy részével és a gázok saját térfogatával. Ezek figyelembevételével az (1) egyenletből az a és b állandók bevezetésével a

$(p + n^2 \cdot a / V^2) \cdot (V - n \cdot b) = n \cdot R \cdot T \rightarrow$ izoterma: $p(V) = n \cdot R \cdot T / (V - n \cdot b) - n^2 \cdot a / V^2$ (2)

egyenlet vezethető le, ahol a arányos a részecskék közti kohéziós erővel és b az ún. kizárási térfogat.

Az állandók értéke függ a gáz anyagi minőségétől, az 1. táblázat néhány ilyen értéket tartalmaz.

A táblázat adatainak segítségével a kétféle gázegyenlet izotermái számos hőmérsékleten megrajzolhatók egy ábrán; akár egy ábrakészítő, vagy akár a Microsoft Excel segítségével.

Ezekből az ábrákból világosan látszik, hogy mindennapi körülményeink között az (1) ideális gázegyenlet jól használható; de lényegesen alacsonyabb hőmérsékleten, vagy nagyobb nyomáson már a (2) Van der Waals-gázegyenletet kell használni.

1. táblázat: A levegő és fő összetevőinek Van der Waals-állandói. További gázokra a CRC Handbook, különböző internet oldalak, valamint speciális online programok rengeteg adatot tartalmaznak.

gáz	$a \text{ ((kPa} \cdot \text{dm}^6)/\text{mol}^2)$	$b \text{ (dm}^3/\text{mol)}$
levegő	135,8	0,0364
nitrogén	140,8	0,0391
oxigén	137,8	0,0318
argon	136,3	0,0322
szén-dioxid	363,7	0,0427
vízgőz	557,3	0,0310

Formázatlan szöveg vége

Gázegyenletek

Számos egyenlet létezik gázok állapotának leírására, ezek közül kettő kiemelten fontos, az ideális – vagy tökéletes – gázegyenlet, valamint a Van der Waals-egyenlet,¹ amit (helytelenül) néha csak reális gázegyenletnek hívnak.

Ideális gázok egyenlete

Ha a gázrészecskék térfogatát elhanyagoljuk a gáz által kitöltött térfogathoz képest; valamint feltételezzük, hogy a részecskék tökéletesen rugalmasan ütköznek mind egymással, mind a tárolóedény falával, akkor a

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \rightarrow \text{izoterma: } p(V) = \frac{n \cdot R \cdot T}{V} \quad (1)$$

összefüggés vezethető le, ahol p a gáz nyomása, V a térfogata, n az anyagmennyisége, R az egyetemes gázállandó ($=8,314 \text{ J/(mol} \cdot \text{K)}$) és T a termodinamikai hőmérséklet. Ez az egyenlet független a gáz anyagi minőségétől.

Van der Waals-gázegyenlet

Ez az egyenlet számol a részecskék közötti erők egy részével és a gázok saját térfogatával. Ezek figyelembevételével az (1) egyenletből az a és b állandók bevezetésével a

$$\left(p + \frac{n^2 \cdot a}{V^2}\right) \cdot (V - n \cdot b) = n \cdot R \cdot T \rightarrow \text{izoterma: } p(V) = \frac{n \cdot R \cdot T}{V - n \cdot b} - \frac{n^2 \cdot a}{V^2} \quad (2)$$

egyenlet vezethető le, ahol a arányos a részecskék közti kohéziós erővel és b az ún. kizárási térfogat.

Az állandók értéke függ a gáz anyagi minőségétől, az 1. táblázat néhány ilyen értéket tartalmaz. A táblázat adatainak segítségével a kétféle gázegyenlet izotermái számos hőmérsékleten megrajzolhatók egy ábrán; akár egy ábrakészítő, vagy akár a Microsoft Excel segítségével. Ezekből az ábrákból világosan látszik, hogy mindennapi körülményeink között az (1) ideális gázegyenlet jól használható; de lényegesen alacsonyabb hőmérsékleten, vagy nagyobb nyomáson már a (2) Van der Waals-gázegyenletet kell használni.

1. **táblázat:** A levegő és fő összetevőinek Van der Waals-állandói. További gázokra a CRC Handbook, különböző internet oldalak, valamint speciális online programok rengeteg adatot tartalmaznak.

gáz	levegő	nitrogén	oxigén	argon	szén-dioxid	vízgőz
$a \text{ (kPa} \cdot \text{dm}^6 \text{ mol}^{-2})$	135,8	140,8	137,8	136,3	363,7	557,3
$b \text{ (dm}^3 \text{ mol}^{-1})$	0,0364	0,0391	0,0318	0,0322	0,0427	0,0310

¹ A nevet helyesen van der Waals-nak kell írni, de mivel az irodalom túlnyomó része nagybetűt használ, itt is ezt a gyakorlatot követjük.

(kapcsolódó feladat: [A56. \(24. o.\)](#))

Megoldás: lásd a megjegyzést a [14. oldalon!](#)

A51. Az alábbi formázatlan szöveget másolja be a Microsoft Word-be (lehetőleg a „csak a szöveg megőrzése” opcióval), majd a stílusok és a speciális karakterek használatával formázza meg úgy, hogy az a szöveg után megadott módon nézzen ki! A választott font a Garamond legyen, ha az rendelkezésre áll.

Formázási beállítások: megegyeznek az A48. feladat (15. o.) második bekezdésében megadottakkal.

Megjegyzések:

- A dokumentumban szereplő ábra Excel-lel készült, és onnan lett beszúrva. Az Excel-ben a függvényértékek a $0-35 r_{\text{Bohr}}$ tartományban, 0,1-es lépésközzel lettek számolva az ábrakészítéshez. Az ábrán a jelmagyarázó blokkra nincs igazából szükség, mert a tengelyfelirat színei mindent egyértelműsítene. Azért szerepel ez a blokk mégis az ábrán, hogy látható legyen, az Excel elveszíti a formázást a jelmagyarázat listaelemeiben, ábrakészítéskor erre nem lehet támaszkodni.
- Ha az ábrabeszúrás közvetlenül az Excelből történik, akkor a Word kérdés nélkül módosíthatja azt. Az ábrán látszik, hogy a tizedesjel az nem tizedesvessző a használt Excel beállításai miatt. Ha ez zavaró, akkor az ábrát érdemes inkább képként beszúrni.
- Maga az Excel fájlt letölthető vagy szerkeszthető a csatolt DocsWord.xlsx fájlból.

Formázatlan szöveg kezdete

Hidrogén 3s atompálya: hol van az elektron?

A kvantummechanika alapján, a hidrogén 3s atompályáján lévő elektron hullámfüggvénye ($\psi_{3s}(r)$), valószínűségi elektronsűrűsége ($P_{3s}(r)$) és radiális eloszlásfüggvénye ($R_{3s}(r)$) a

$$\psi_{3s}(r) = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} (27 - 18r + 2r^2) \exp(-r/3)$$

$$P_{3s}(r) = (\psi_{3s}(r))^2 = \frac{1}{81\pi} (27 - 18r + 2r^2)^2 \exp(-2r/3)$$

$$R_{3s}(r) = 4\pi r^2 (\psi_{3s}(r))^2 = \frac{4\pi}{81} r^2 (27 - 18r + 2r^2)^2 \exp(-2r/3)$$

egyenletekkel adhatók meg, [lábjegyzet:

https://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/atomic_orbitals/3s/3s_equations.html] ha az atommagtól mért távolságot Bohr-egységben ($1 r_{\text{Bohr}} \sim 5,29 \times 10^{-11} \text{ m}$) adjuk meg.

Hogy megértsük a $P_{3s}(r)$ és az $R_{3s}(r)$ függvények közötti különbséget, az 1. ábra mindkét függvényt mutatja. Látható, hogy a minimumok mindkét görbén ugyanott vannak (az $r = 0$ m-t kivéve!), de a maximumok eltolódnak és a függvényértékeik fordított irányban változnak. Ennek az oka, hogy míg a $P_{3s}(r)$ az elektron tartózkodási valószínűségével arányos egységnyi térfogatban egy adott helyén a térnek; az $R_{3s}(r)$ nem egy adott helyre, hanem egy adott távolságra vonatkozik, vagyis nem egységnyi térfogatban, hanem adott távolságban lévő gömbhéj térfogatában adja meg a tartózkodási valószínűséget. A gömbhéj térfogatának számértéke pedig a távolság 3-ik hatványával arányosan nő. Az elektron az „életének” sokkal nagyobb részét tölti $\sim 13 r_{\text{Bohr}}$ távolságra az atommagtól, mint $\sim 1 r_{\text{Bohr}}$ távolságra. Ezt alátámasztja az $\int_0^\infty 4\pi r^2 (\psi_{3s}(r))^2 dr = 1$

egyenlet érvényessége is, [lábjegyzet: Hogy érthetőbb legyen, ha az eloszlásfüggvényből számolható valószínűségeket a teljes térre kiintegráljuk, akkor annak a valószínűségi értékét kapjuk meg, hogy az elektron valahol van a térben. Ez nyilvánvalóan biztos esemény, 1 a valószínűsége.] amit sok matematikai program segítségével egyszerűen beláthatunk.

Ugyanakkor hasonló állítás nem igaz a valószínűségi elektronsűrűség-függvényre.

Az ábra mutat még egy meglehetősen állítást, $P_{3s}(r)$ szerint az elektron tartózkodhat az atommagban is. Ezzel ellentétben $R_{3s}(r)$ szerint nem. Ennek az ellenmondásnak a feloldása fontos, azonban nem fér bele a maximum egyoldalas szövegszerkesztési feladatnak a kereteibe.

----- a központosított 1. ábra helye -----

1. ábra: A hidrogén atom 3s atompályájának valószínűségi elektronsűrűség- és radiális eloszlásfüggvénye.

Formázatlan szöveg vége

Hidrogén 3s atompálya: hol van az elektron?

A kvantummechanika alapján, a hidrogén 3s atompályáján lévő elektron hullámfüggvénye ($\psi_{H,3s}(r)$), valószínűségi elektronsűrűsége ($P_{H,3s}^r(r)$) és radiális eloszlásfüggvénye ($R_{H,3s}^d(r)$) a

$$\begin{aligned}\psi_{H,3s}(r) &= \frac{1}{81\sqrt{3}\pi}(27 - 18r + 2r^2)e^{-\frac{r}{3}} \\ P_{H,3s}^r(r) &= |\psi_{H,3s}(r)|^2 = \left(\frac{1}{81\sqrt{3}\pi}(27 - 18r + 2r^2)e^{-\frac{r}{3}}\right)^2 \\ R_{H,3s}^d(r) &= 4\pi r^2 |\psi_{H,3s}(r)|^2 = 4\pi r^2 \left(\frac{1}{81\sqrt{3}\pi}(27 - 18r + 2r^2)e^{-\frac{r}{3}}\right)^2\end{aligned}$$

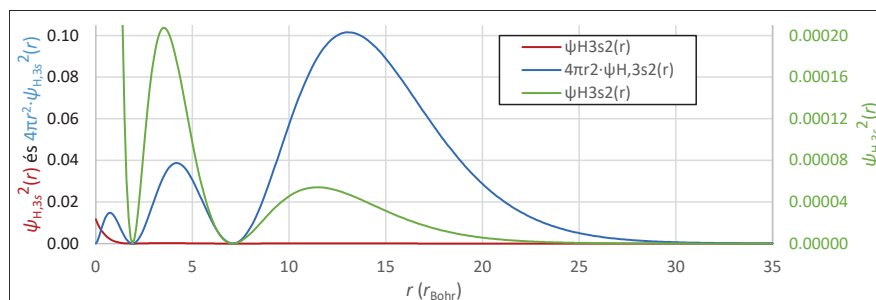
egyenletekkel adhatók meg,¹ ha az atommagtól mért távolságot Bohr-egységben ($1 \text{ } r_{\text{Bohr}} \approx 5,29 \times 10^{-11} \text{ m}$) adjuk meg.

Hogy megértsük a $P_{H,3s}^r(r)$ és az $R_{H,3s}^d(r)$ függvények közötti különbséget, az 1. ábra mindkét függvényt mutatja. Látható, hogy a minimumok mindkét görbén ugyanott vannak (az $r = 0$ m-t kivéve!), de a maximumok eltolódnak és a függvényértékeik fordított irányban változnak. Ennek az az oka, hogy míg a $P_{H,3s}^r(r)$ az elektron tartózkodási valószínűségével arányos egységnyi térfogatban egy adott helyen a térnek; az $R_{H,3s}^d(r)$ nem egy adott helyre, hanem egy adott távolságra vonatkozik, vagyis nem egységnyi térfogatban, hanem adott távolságban lévő gömbhéj térfogatában adja meg a tartózkodási valószínűséget. A gömbhéj térfogatának számértéke pedig a távolság 3-ik hatványával arányosan nő. Az elektron az „életének” sokkal nagyobb részét tölti $\sim 13 \text{ } r_{\text{Bohr}}$ távolságra az atommagtól, mint $\sim 1 \text{ } r_{\text{Bohr}}$ távolságra. Ezt alátámasztja az

$$\int_0^{\infty} 4\pi r^2 |\psi_{H,3s}(r)|^2 dr = 1$$

egyenlet érvényessége is,² amit sok matematikai program segítségével egyszerűen beláthatunk. Ugyanakkor hasonló állítás nem igaz a valószínűségi elektronsűrűség-függvényre.

Az ábra mutat még egy meglepő állítást, $P_{H,3s}^r(r)$ szerint az elektron tartózkodhat az atommagban is. Ezzel ellentétben $R_{H,3s}^d(r)$ szerint nem. Ennek az ellenmondásnak a feloldása fontos, azonban nem fér bele ennek a maximum egyoldalas szövegszerkesztési feladatnak a kereteibe.



1. ábra: A hidrogén atom 3s atompályájának valószínűségi elektronsűrűség- és radiális eloszlásfüggvénye.

¹ https://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/atomic_orbitals/3s/3s_equations.html

² Hogy érthetőbb legyen, ha az eloszlásfüggvényből számolható valószínűségeket a teljes térre kiintegráljuk, akkor annak a valószínűségi értékét kapjuk meg, hogy az elektron valahol van a térben. Ez nyilvánvalóan biztos esemény, 1 a valószínűsége.

(kapcsolódó feladat: A57. (24. o.))

Megoldás: lásd a megjegyzést a 14. oldalon!

1.6. Microsoft PowerPoint bemutatók szerkesztése

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

- | | | |
|---------------------------------------|---|--|
| 1. Word vs. Powerpoint | 6. fontválasztás (Arial, Helvetica, Noto, DejaVu, Tahoma, Verdana, Trebuchet MS), legyen ő, Ő, ú és Ű (!) | 8. diaszámozás |
| 2. cél ugyanaz, technika 90 %-ban más | 7. szövegdobozok helyének beállítása | 9. látványelemek (dekorációk, animációk) |
| 3. elektronikus könyv vs. bemutató | | 10. elválasztás kell-e |
| 4. a bemutató nem lapozható | | 11. {posztterek-készítése} |
| 5. olvashatóság | | |

Megjegyzés: A bemutatók jellegéből adódóan az alábbi feladatoknak rengeteg jó megoldása lehet, ezért csak az A54. feladathoz (24. o.) van megadva egy lehetséges megoldás. Nem biztos, hogy minden szöveget szerepeltetni kell a diákon, az előadás jellegétől függően lehet, hogy csak vázlatpontokat érdemes felírni. Egy bemutató készítésére nincsenek még olyan kialakult szabályok, mint a nyomtatott információ átadására, a diák készítésének módja mindig célfüggő.

Feladatok:

- A52. Az A46. feladatban (15. o.) Word-del megszerkesztett egyenleteket másolja át PowerPoint-ba és próbálja meg a használt fontot lecserélni valamilyen Sans betűtípusra (nem mindig jó ötlet)!
- A53. Az A47. feladatban (15. o.) Word-del megszerkesztett táblázatokat másolja át PowerPoint-ba és a használt fontot cserélje le valamilyen Sans betűtípusra! Változtassa meg a táblázatok stílusát a PowerPoint által ajánlottakra, és döntse el, melyik stílus a legérthetőbb, melyik tetszik a legjobban (sajnos a kettő nem mindig ugyanaz)!
- A54. Az A48. feladatban (15. o.) Word-del megszerkesztett dokumentumot próbálja meg 4–5 dián megvalósítani PowerPointban! A bemutató készítésénél tételjeze fel, hogy egy 5–15 perces előadásban kell a dokumentumban leírtakat megértetnie a hallgatósággal.

Egy lehetséges megoldás:

Jodometria

A jodometria az egyik legfontosabb titrimetriás eljárás. Pontossága attól függ, hogy a jód meghatározására használt nátrium-tioszulfát oldat koncentrációja mennyire pontosan ismert.

1. Kémiai megfontolások a jodometriás eljárásához

2. Gyakorlati kivitelezés

A $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ -mérőoldat koncentrációjának meghatározása

A tioszulfát mérőoldatok koncentrációja a gyakorlatban a 0,002–0,2 M tartományban változik.

A $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ közvetlen bemérésével általában nem készíthető pontos koncentrációjú oldat.

Emiatt készíteni kell egy kálium-jodát törzsoldatot is – amiből egyszerűen tömeg bemérésével állítható elő pontosan ismert koncentrációjú oldat –, és ennek ismert térfogatát kell megtitrálni a

$$\text{IO}_3^- + 5 \text{I}^- + 6 \text{H}^+ = 3 \text{I}_2 + 3 \text{H}_2\text{O} \quad (1)$$
$$2 \text{S}_2\text{O}_3^{2-} + \text{I}_2 = \text{S}_4\text{O}_6^{2-} + 2 \text{I}^- \quad (2)$$

reakcióegyenletek alapján.

Kémiai megfontolások a jodometriás eljárásához

1. Az (1) reakció sebességi egyenlete a $v = k \cdot [\text{IO}_3^-] \cdot [\text{I}^-]^2 \cdot [\text{H}^+]^2$ összefüggéssel adható meg szokásos körülmények között, ahol a sebességi együttható értéke: $k = (1,2 \pm 0,5) \times 10^3 \text{ M}^{-4} \text{ s}^{-1}$. Ebből kiszámítható, hogy az (1) reakció nem pillanatszerű. Ezzel ellentétben a (2) reakció gyors¹, egy titrálás szokásos ideje alatt azonnal végbemegy.

2. A fenti reakciók érzékenyek az oxigénre, ezért annak jelenlétét ki kell küszöbölni.

3. A jód intenzív kék színű komplexet képez a keményítővel, amit felhasználhatunk a végpont könnyebb jelzésére.

Gyakorlati kivitelezés

1. Egy jód számlombikba $\sim 20 \text{ cm}^3$ vizet adunk, majd $\sim 5 \text{ cm}^3$ 10 %-os kénsav- vagy $\sim 10 \text{ cm}^3$ 1 M-os ecetsavoldattal megsavanyítjuk.

2. Kb. 1 g szilárd NaHCO_3 -ot adunk hozzá kiűzni az oxigént, majd a pezsgés megszűnte után $\sim 0,3 \text{ g}$ szilárd KI-ot oldunk fel.

3. Az oldatba pipetázzuk az előzetesen elkészített KIO_3 -oldat pontos térfogatát, lezárjuk a lombikot, összerázzuk, majd negyed órára sötét helyre rakjuk, hogy a jód képződés teljesen végbemenjen.

4. Ezután a $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ mérőoldatával a jód színének eltűnéséig a szokásos módon titrálunk. A végpont jelzését elő lehet segíteni néhány csepp keményítő oldat hozzáadásával.

¹Awrey, A. D., Cornick, R. E., Journal of the American Chemical Society, 73(3), 1341–1348 (1951). DOI:10.1021/ja01147a147

Maga a PowerPoint dokumentum letölthető vagy szerkeszthető a csatolt DocsWord.pptx fájlból.

- A55. Az A49. feladatban (17. o.) Word-del megszerkesztett dokumentumot próbálja meg 4–8 dián megvalósítani PowerPointban! A bemutató készítésénél tételjeze fel, hogy egy 5–15 perces előadásban kell a dokumentumban leírtakat megértetnie a hallgatósággal. A csoportosításról készítsen egy vázlatos diát is, ami a definíciókat nem tartalmazza!
- A56. Az A50. feladatban (20. o.) Word-del megszerkesztett dokumentumot próbálja meg 3–4 dián megvalósítani PowerPointban! A bemutató készítésénél tételjeze fel, hogy egy 5–15 perces előadásban kell a dokumentumban leírtakat megértetnie a hallgatósággal. Az egyenletek magyarázatának diáit gondosan készítse el, minden egyenletnél legyenek ott a rövidítések jelentései is!
- A57. Az A51. feladatban (22. o.) Word-del megszerkesztett dokumentumot próbálja meg 4–6 dián megvalósítani PowerPointban! A bemutató készítésénél tételjeze fel, hogy egy 10–20 perces előadásban kell a dokumentumban leírtakat megértetnie a hallgatósággal. A Word dokumentumban megadott internet oldalt is használhatja az előadásában!

2. fejezet

A „Mérési adatok feldolgozásának módszerei” c. tárgy

(kurzuskódok: KB(N/L)007G, KTN02G)

Megjegyzések:

- A feladatok egy részének megoldása megtalálható a feladat végén, szürke színnel.
- A hivatkozások kinyomtatva nem látszanak, de rájuk kattintva a böngésző betölti a megfelelő oldalt. A bevezetéshez tartozó pdf fájlban a webcímek láthatóan is fel vannak tüntetve.
- Egyes feladatokhoz sok adat szükséges, amelyek szöveggént a **Extract_EOBS.zip** fájlban érhetőek el. Az adatok részletes leírása az **F3.** alfejezetben (41. o.) található. Azok a feladatok, amelyek ezen az adatbázison alapulnak, akkor oldhatók meg hatékonyan, ha a hallgató jól tudja használni a sorok rendezését megadott szempontok alapján, valamint a kevert statisztikai-logikai függvényeket (pl. ÁTLAGHA, SZUMHA, stb.). Arra is vigyázni kell, hogy nem minden városra teljes az adatbázis.

2.1. Ismételt mérési adatok statisztikai jellemzése

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

(Segédadat: a **onevar.xlsx** fájl)

- | | |
|--|---|
| 1. → valószínűségi változó/érték fogalma | |
| 2. → átlag: $\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$ (EXCEL-függvények: ÁTLAG, ÁTLAGA, ÁTLAGHA, ...) | 6. → korrigált tapasztalati szórás $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n - 1}}$ (EXCEL-függvény: SZÓR.M) |
| 3. → medián (EXCEL-függvény: MEDIÁN) | 7. → ferdeség (EXCEL-függvény: FERDESÉG) |
| 4. → eltérés négyzetösszeg: $\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$ (EXCEL-függvény: SQ) | 8. → csúcosság, lapultság (EXCEL-függvény: CSÚCSOSSÁG) |
| 5. → standard (néha tapasztalati) szórás: $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n}}$ (EXCEL-függvény: SZÓR.S) | 9. → momentumok (1–4.) fogalma |
| | 10. → Gauss/normál-eloszlás/függvény tulajdonságai |
| | 11. → (in)szignifikancia próbák/tesztek |
| | 12. → mintafüggetlenség?!?!? |

Feladatok:

- B1. „A matematikai statisztika elemei” c. online könyvecske 7. oldalán található adatokra (3.1. példa) számolja ki az órán tárgyalt statisztikai paraméterek értékeit!
- B2. A „Matematikai statisztika gyakorlatok” c. online könyv 4. fejezetének 4.1–4.3 gyakorlatait és 4.1–4.3 példáit oldják meg! A példákhoz tartozó, a könyvben megadott nevű adatsorok az **ezen a linken** letölthető archivált fájlban vannak a minta nevű alkönyvtárban. (Csak azokat a paramétereket kell kiszámolni, amiket az órán vettünk.)
- B3. Számolja ki a szegedi júliusi átlaghőmérsékletek átlagát és korrigált empirikus szórását! Ugyanezt tegye meg a januári adatokkal is! Szignifikáns-e az átlagok különbsége 68, 95, valamint 99,5%-os megbízhatósági szinten? Próbálja meg értelmezni is az eredményeket!

Megoldás: 1920.1.1–2022.12.31 között: $22,1 \pm 3,3$ és $-0,9 \pm 4,9$ °C; 68 és 95 %-s szinten szignifikáns a különbség, 99,5 %-nál nem.

- B4. A B3.. feladathoz (25. o.) hasonlóan, az ott számítandó értékeket számolja ki Hammerfest, Kiruna, Nizhny Novgorod, Copenhagen, Moscow, Mira, Madrid és Ierapetra esetében is! Figyeljen arra, hogy hiányzó adatok is vannak néhány városnál, ezért a definíciók automatikus másolása nem mindig működik! Válaszolja meg a következő kérdéseket:

- a) Hasonlítsa össze és értelmezze az értékeket abból a szempontból, hogy mik a lényeges különbségek a szárazföld belsejében fekvő városok (Kiruna, Nizhny Novgorod, Moscow és Madrid), illetve a vízparton lévők (Hammerfest, Copenhagen, Mira és Ierapetra) között!
- b) Egyértelmű összefüggés van-e a földrajzi szélesség és a havi átlaghőmérsékletek között?
- c) Ugyanaz a tendencia jellemző-e a januári és a júliusi átlaghőmérsékletekre a földrajzi szélesség függvényében?
- d) Igaz-e, hogy minden megbízhatósági szinten szignifikáns a különbség Hammerfest és Ierapetra között?

Az eredmény részletei a megoldás ellenőrzéshez: a) A januári és júliusi átlaghőmérsékletek közötti különbség jóval kisebb a vízparti városokban. d) Nem, 99,5 %-os szinten nem szignifikáns a különbség.

- B5. Számolja ki a szegeden júliusban mért időjárási adatok (minimális, átlag és maximális napi hőmérséklet, valamint légköri nyomás, esőmennyiség, napsugárzás teljesítmény és relatív páratartalom) átlagát, korrigált empirikus szórását, ferdeségét és csúcsosságát! Az adatok alapján válaszolja meg a következő kérdéseket:

- a) A ferdeség és csúcsosság adatok alapján döntse el, hogy mely adatok írhatók le normál eloszlással jó közelítéssel és melyek nem.
- b) Az adatok szórása összefüggésben van-e a ferdeséggel és a csúcsossággal?

Az 1920.01.01– 2022.12.31. közötti adatok számszerű részeredményei:			$T_{min}/^{\circ}\text{C}$	$T_{\text{átlag}}/^{\circ}\text{C}$	$T_{max}/^{\circ}\text{C}$	p/hPa	h/mm	$P/(\text{W}/\text{m}^2)$	$R\%$
		ÁTLAG	15,7	22,1	28,4	1014,4	1,6	260,8	65,0
		SZÓR.M	2,8	3,3	4,1	3,9	4,2	56,0	10,7
		FERDESÉG	-0,18	0,019	-0,10	-0,30	4,2	-1,04	0,22
		CSÚCSOSSÁG	-0,25	-0,39	-0,28	-0,033	24,1	0,53	-0,35

- B6. Számolja ki a Stockholm-ban és Grussian-ben mért szélesség adatok átlagát, ennek korrigált tapasztalati szórását, valamint a mért maximális szélességet! Van-e szignifikáns különbség a mért adatokban 68 %-os megbízhatósági szinten a két hely között? Lehet-e az átlagértékekből következtetni a maximális szélesség értékekre?

Megoldás: 1950.1.1–1992.12.31 között: $(3,3 \pm 1,7) \text{ m/s}$, 23 m/s , valamint $(5,2 \pm 2,3) \text{ m/s}$, 18 m/s ; nincs; nem.

- B7. Számolja ki az Amsterdam-ban és Madridban mért relatív páratartalom adatok átlagát, valamint ezek korrigált tapasztalati szórását! Van-e szignifikáns különbség a mért adatokban 68 %-os megbízhatósági szinten?

Megoldás: 1950.1.1–2022.12.31 között: $(82,6 \pm 8,6) \%$, valamint $(60,0 \pm 17,9) \%$; nincs

- B8. Egy IUPAC adatbázisban a következő adatok szerepelnek a vízionszorzat negatív logaritmusára különböző mérésekből 25°C -on, azonos egyéb körülmények között:

NaCl oldataiban	13,75	13,72	13,74	13,70	13,69	
NaClO ₄ oldataiban	13,75	13,76	13,77	13,75	14,08	13,87

Szignifikáns-e az eltérés a kétfajta só oldatában a pK_w értékek között? A kérdést válaszolja meg 68, 95, valamint 99,5 %-os megbízhatósági szinten is!

- B9. Találja meg azt az EXCEL-függvényt, amely a normáeloszlást számolja, és készítsen ábrát az $-3 < x < 3$ tartományban!
- B10. Készítsen egy olyan EXCEL-munkafüzetet kitalált adatokkal, amely világosan megmutatja az ÁTLAG, ÁTLAGA és ÁTLAGHA függvények különbségeit!
- B11. Készítsen egy olyan EXCEL-munkafüzetet kitalált adatokkal, amely világosan megmutatja a FERDESÉG és a CSÚCSOSSÁG függvények függő változója előjelének értelmét!

- B12. (matematika kedvelőknek) Bizonyítsák be a $\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{n} - \left(\frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \right)^2$ azonosságot, ahol $\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$! Mi lehet a gyakorlati jelentősége ennek az azonosságnak?

2.2. Egyenes illesztése és statisztikai jellemzése táblázatkezelővel

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

(Segédadat: a [linillbemutat.xlsx](#) fájl)

1. egyenesillesztés (lineáris paraméterbecslés, lineáris regresszió)
képletek: ezen a [webcímen](#) elérhető fájl megfelelő fejezete
2. trendvonal az EXCEL-ben
3. meredekség

4. tengelymetszet
5. korrelációs együttható (nem determinisztikus!)
6. LIN.ILL EXCEL-függvény
7. egyszerű függvény vs. tömbfüggvény a táblázatkezelőkben

8. két modell: $y = a \cdot x + b$ valamint $y = a \cdot x$
 9. szabadsági fok

10. standard hiba
 11. szórás ($= \sqrt{\text{szabadsági fok} \cdot \text{hiba}}$)

Feladatok:

B13. Reprodukálják a kiadott linillbemutat.xlsx fájl munkalapját!

B14. Házi feladat: olvassa el és próbálja megérteni a LIN.ILL függvény leírását a EXCEL súgójában a következő órára!

B15. Egy színes anyag oldatainak abszorbanciája (A) az $A = \text{állandó} \cdot c$ összefüggés szerint függ a színes anyag moláris koncentrációjától. Mekkora lenne a 0,1 mol/dm³-es oldat abszorbanciája, ha a következő adatokat mértük:

c (mmol/dm ³)	0,096	0,192	0,288	0,384	0,480	0,576	0,672	0,768	0,864	0,960
A	0,109	0,197	0,290	0,412	0,484	0,591	0,674	0,776	0,863	0,964

B16. Egy amerikai kormányhivatal jelentése szerint, egy szál eladott cigaretta átlagos kátrány és nikotintartalma a következő módon változott 1968 és 1994 között:

év	kátrány (mg/szál)	nikotin (mg/szál)	év	kátrány (mg/szál)	nikotin (mg/szál)	év	kátrány (mg/szál)	nikotin (mg/szál)
1968	21,6	1,35	1977	16,8	1,12	1986	13,4	0,93
1969	20,7	1,38	1978	16,1	1,11	1987	13,3	0,94
1970	20,0	1,31	1979	15,1	1,07	1988	13,3	0,94
1971	20,2	1,32	1980	14,1	1,04	1989	13,1	0,96
1972	19,9	1,39	1981	13,2	0,92	1990	12,5	0,93
1973	19,3	1,32	1982	13,5	0,89	1991	12,6	0,94
1974	18,4	1,24	1983	13,4	0,88	1992	12,4	0,92
1975	18,6	1,21	1984	13,0	0,89	1993	12,4	0,90
1976	18,1	1,16	1985	13,0	0,95	1994	12,1	0,90

Másolja (vagy írja) be a fenti adatokat egy EXCEL munkalapra úgy, hogy az A oszlopban az évek, a B oszlopban a kátrány, valamint a C oszlopban a nikotin adatok legyenek! Van-e lineáris összefüggés a kátrány és a nikotin-tartalom között? Lineárisan változnak-e ezek az évek teltével? Készítse el az előbbi kérdésekhez tartozó három grafikont, trendvonalakkal megrajzolva, valamint a valóban lineáris összefüggés(ek) esetén a LIN.ILL függvénnyel is kiszámolva az illesztett egyenes paramétereit! Próbálja meg értelmezni az ábrákat és a számolt adatokat!

B17. Egy elsőrendű reakció sebességi állandóját (k) megmértük különböző hőmérsékleteken. Az alábbi mérési adatokból határozzuk meg az Arrhenius-egyenlet $\left(k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}\right)$ alapján a reakció aktiválási energiáját (E_a) és a preexponenciális együttható (A) értékét! A számítást a fenti egyenlet linearizált alakja $\left(\ln k = -\frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T} + \ln A\right)$ segítségével végezzük, vagyis az abszolút hőmérséklet reciprokának függvényében ábrázolva az adott hőmérsékleten érvényes sebességi együtthatók természetes alapú logaritmusát, az illesztett egyenes meredekségéből az aktiválási energia, tengelymetszetéből pedig a preexponenciális tényező számítható. Az egyenes illesztése során a nyilvánvalóan kiugró pontokat hagyjuk el! Készítsünk ábrát is, amely a kiugró ponto(k)a)t is tartalmazza! $R=8,314 \text{ J/mol/K}$ és $0^\circ\text{C}=273,15 \text{ K}$. Az adatok:

$T/^\circ\text{C}$	k/s^{-1}	T/K	T^{-1}/K^{-1}	$\ln(k/\text{s}^{-1})$
2,5	$3,5 \times 10^{+2}$			
7,5	$4,2 \times 10^{+2}$			
13,8	$7,1 \times 10^{+2}$			
16,9	$1,1 \times 10^{+3}$			
22,0	$1,3 \times 10^{+3}$			
28,8	$2,8 \times 10^{+3}$			
32,7	$9,8 \times 10^{+3}$			
38,7	$4,4 \times 10^{+3}$			
42,6	$5,6 \times 10^{+3}$			
47,4	$7,7 \times 10^{+3}$			

B18. A Daniell-elem elektromotoros erejét a Nernst-egyenlet

$$E_{ME} = \left(E_{\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}}^0 - E_{\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}}^0\right) + \frac{RT}{2F} \ln \frac{[\text{Cu}^{2+}]}{[\text{Zn}^{2+}]}$$

speciális formája adja meg. A

[Zn ²⁺]/M	[Cu ²⁺]/M	mért E_{ME}/V értékek				
1,00	1,00	1,0967	1,0905	1,0908	1,0946	1,0967
0,500	1,00	1,1050	1,1007	1,1085	1,1015	1,1050
0,333	1,00	1,1077	1,1047	1,1113	1,1051	1,1077
0,250	1,00	1,1035	1,1083	1,1105	1,1075	1,1035
1,00	1,00	1,0981	1,0950	1,0982	1,0990	1,0971
1,00	0,500	1,0889	1,0725	1,0821	1,0990	1,0864
1,00	0,250	1,0818	1,0605	1,0775	1,0662	1,0652
1,00	0,125	1,0698	1,0525	1,0655	1,0530	1,0700

táblázat az általános kémiai laboratóriumi gyakorlatok során egy csoport által mért összes adatot tartalmazza 23 °C hőmérsékleten. (a) Határozzák meg a standard cellapotenciál értékét a *szórásával* együtt, egyenes illesztésével, a tengelymetszetből háromféle módon: először csak az állandó [Zn²⁺]-nál mért adatokat vegyék figyelembe, másodsor csak az állandó [Cu²⁺]-nál mért adatokkal számoljanak, végül minden adatot vegyenek figyelembe úgy, hogy a két fémion koncentrációinak arányából számolják a független változó értékét! (b) A meredekség értéke és szórása alapján döntsék el, hogy a meredekség szignifikánsan különbözik-e az elméleti $RT/(2F)$ értéktől 68, 95 és 99,5 %-os megbízhatósági szinten!

A számolások során ne átlagoljanak adatokat, de a kiugró értékeket hagyják ki az egyenes illesztéséből!

- B19. Egy anyag elsőrendű kinetika szerint bomlik, miközben gáz halmazállapotú termék képződik 1:1 sztöchiometriai arányban. A fejlődő gáz térfogatát mérve, a következő adatokat kapták három különböző hőmérsékleten:

T (°C)	37,7				42,1				46,1			
V_{∞} (cm ³)	36,3				35,3				38,0			
	t (s)	V (cm ³)	t (s)	V (cm ³)	t (s)	V (cm ³)	t (s)	V (cm ³)	t (s)	V (cm ³)	t (s)	V (cm ³)
	0	0,0	1041	8,5	0	0,0	605	8,5	0	0,0	295	8,5
	34	0,5	1103	9,0	47	0,5	646	9,0	13	0,5	309	9,0
	77	1,0	1175	9,5	81	1,0	684	9,5	31	1,0	349	10,0
	125	1,5	1246	10,0	116	1,5	720	10,0	40	1,5	397	11,0
	204	2,0	1323	10,5	148	2,0	768	10,5	60	2,0	444	12,0
	268	2,5	1470	11,5	185	2,5	813	11,0	79	2,5	490	13,0
	328	3,0	1646	12,5	210	3,0	909	12,0	94	3,0	541	14,0
	393	3,5	1796	13,5	245	3,5	997	13,0	105	3,5	582	15,0
	459	4,0	1966	14,5	275	4,0	1101	14,0	122	4,0	642	16,0
	522	4,5	2113	15,5	309	4,5	1207	15,0	144	4,5	692	17,0
	583	5,0	2251	16,5	351	5,0	1318	16,0	160	5,0	752	18,0
	649	5,5	2617	19,0	392	5,5	1424	17,0	178	5,5	820	19,0
	712	6,0			416	6,0	1536	18,0	196	6,0	885	20,0
	784	6,5			449	6,5	1663	19,0	214	6,5	958	21,0
	846	7,0			487	7,0	1799	20,0	232	7,0	1034	22,0
	911	7,5			534	7,5			253	7,5	1110	23,0
	980	8,0			568	8,0			271	8,0	1200	24,0

Az elsőrendű kinetikából következik, hogy a $\ln(V_{\infty} - V) = \ln(V_{\infty} - V_0) - k \cdot t$ linearizált összefüggés írja le az adatokat.

(a) Egyenes illesztésével határozzák meg az elsőrendű sebességi állandó értékét a szórásával együtt, külön-külön mind a három hőmérsékleten!

(b) A számolt sebességi állandók és a megadott hőmérsékletek felhasználásával, az Arrhenius összefüggés alapján határozzák meg a reakció aktiválási energiáját, valamint annak szórását!

(c) Számolják ki, hogy a különböző hőmérsékleteken melyik időpillanatban éri el a fejlődő gáz térfogata a 30,0 cm³-t! Az időpont szórását is adják meg!

- B20. Ábrázolják az 1950–2019 között júliusban mért szegedi átlaghőmérsékleteket az évszám függvényében és az adatokra illesszenek egyenest! Igazolható-e az illesztett egyenes paramétereivel, hogy 70 év alatt az átlaghőmérséklet több, mint egy °C-kal emelkedett?
- B21. A B20.. feladatot (28. o.) végezzék el az 1985–2019 közötti adatokkal is. A két egyenesillesztést összehasonlítva igazolható-e az az állítás, hogy Szegeden a hőmérséklet emelkedése gyorsul.
- B22. A B20.. és B21.. feladatokat (az előző kettő) hajtsák végre az egész évi adatokkal is. A kapott eredmények ugyanazt sugallják-e, mint a júliusi adatok, vagy van szignifikáns különbség az eredményekben?
- B23. A B20.–B22.. feladatokat (az előző három) más városok adataival is végezzék el. Létezik-e jelentős különbség a hőmérséklet-emelkedés szempontjából az európai városok között?

2.3. Hibaterjedés számolása, használata egyenesillesztéssel együtt

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

→ szórás- és/vagy hibaterjedés számolása

képletek: a függelék második alfejezetében található táblázat (42. oldal)

Feladatok:

B24. A fentebb megadott függelék első táblázatának példáit a szórás megadására kézzel vagy számológéppel számolják végig!

B25. Számítsák ki a következő táblázat egy-egy cellájában megadott kifejezések értékeit és azok szórását, majd hasonlítsák össze az adott cellában lévő műveletek eredményeit és értelmezzék a változásokat!

$\ln((2,000 \pm 0,002) \times 10^{12})$	$10^{2 \cdot (-7,000 \pm 0,001)}$	$(2,000 \pm 0,001)^6$	$\lg(4,000 \pm 0,004) - \frac{1,000 \pm 0,001}{(2,000 \pm 0,002)^2}$
$\ln((2,00 \pm 0,02) \times 10^{12})$	$10^{2 \cdot (-7,00 \pm 0,01)}$	$(2,00 \pm 0,01)^6$	$\lg(4,00 \pm 0,04) - \frac{1,00 \pm 0,01}{(2,00 \pm 0,02)^2}$
$\ln((2,0 \pm 0,2) \times 10^{12})$	$10^{2 \cdot (-7,0 \pm 0,1)}$	$(2,0 \pm 0,1)^6$	$\lg(4,0 \pm 0,4) - \frac{1,0 \pm 0,1}{(2,0 \pm 0,2)^2}$
$\ln((2 \pm 2) \times 10^{12})$	$10^{2 \cdot (-7 \pm 1)}$	$(2 \pm 1)^6$	$\lg(4 \pm 4) - \frac{1 \pm 1}{(2 \pm 2)^2}$
$\ln((2,000 \pm 0,002) \times 10^9)$	$\frac{2}{2,000 \pm 0,002}$	$\frac{x \cdot \arctg(0,1 \pm 0,01)^{\ddagger}}{180^\circ/\pi}$	$\sin^2(x) + \cos^2(x)^*$ $*x = 30,000^\circ \pm 0,003^\circ$
$\ln((2,000 \pm 0,002) \times 10^6)$	$\frac{2}{2,00 \pm 0,02}$	$\frac{x \cdot \arctg(1 \pm 0,1)^{\ddagger}}{180^\circ/\pi}$	$\sin^2(x) + \cos^2(x)^{\dagger}$ $^{\dagger}x = 30,00^\circ \pm 0,03^\circ$
$\ln((2,000 \pm 0,002) \times 10^3)$	$\frac{2}{2,0 \pm 0,2}$	$\frac{x \cdot \arctg(10 \pm 1)^{\ddagger}}{180^\circ/\pi}$	$\sin^2(x) + \cos^2(x)^{\ddagger}$ $^{\ddagger}x = 30,0^\circ \pm 0,3^\circ$
$\ln((2,000 \pm 0,002) \times 10^0)$	$\frac{2}{2 \pm 2}$	$\frac{x \cdot \arctg(100 \pm 10)^{\ddagger}}{180^\circ/\pi}$	$\sin^2(x) + \cos^2(x)^{\S}$ $^{\S}x = 30^\circ \pm 3^\circ$

(az első és ötödik sor eredményei balról jobbra, valamint a nyolcadik sor harmadik eredménye:

$28,324 \pm 0,001$, $(1,0000 \pm 0,0046) \times 10^{-14}$, $64,00 \pm 0,19$, $0,35206 \pm 0,00071$, valamint $21,416 \pm 0,001$, $1,000 \pm 0,001$, $0,0522 \pm 0,0052$ (vagy $2,99^\circ \pm 0,30^\circ$), $1,000000 \pm 0,000064$ és $0,82 \pm 0,52$ (vagy $46^\circ \pm 30^\circ$)

B26. A B3.. és B4.. feladatok (25. o.) és (25. o.) néhány város júliusi és januári átlaghőmérsékletét, valamint azok korrigált empirikus szórásait számoltatták ki. A hibaterjedés szabályainak megfelelően számolják ki a városok ezen két hónap átlaghőmérsékleteinek különbségét, valamint azok szórását! A kiszámolt adatok alapján válaszolják meg a következő kérdéseket:

a) Van-e összefüggés az átlaghőmérsékletek különbsége, valamint a városok éghajlata (mennyire óceáni/szárazföldi) között? Ha igen, akkor mi ez az összefüggés?

b) A hőmérséklet-különbségek szórása korrelál-e a városok éghajlatával?

(néhány $\Delta T/^\circ\text{C}$ érték: $22,7 \pm 5,8$ (Szeged), $27,0 \pm 7,9$ (Moscow) és $14,9 \pm 3,4$ (Ierapetra))

B27. Mekkora a hidroxidion koncentrációja, valamint annak szórása egy $(0,00103 \pm 0,00002)$ M sósav oldatban, ha a vízionszorzat negatív logaritmus $pK_v = 13,76 \pm 0,03$ az adott hőmérsékleten.

$((1,7 \pm 0,1) \times 10^{-11} \text{ M})$

B28. A B8.. feladat (26. o.) számolt pK_v adataiból és szórásaikból számolják ki a K_v adatokat és szórásaikat!

B29. A B15.. feladatban (27. o.) mekkora a $0,1 \text{ mol/dm}^3$ -es oldat abszorbanciájának szórása?

B30. A B17.. feladatban (27. o.) illesztett egyenes meredekségéből, tengelymetszetéből, valamint ezek szórásaiból számolják ki az aktiválási energia (E_a) és a preexponenciális együttható szórásait!

B31. Az oxálsav első (K_1^d) és második (K_2^d) savi disszociációs állandóját pH-metriás titrálásokról meghatározták, és a következő eredményeket kapták: $pK_1^d = 0,92 \pm 0,03$, valamint $pK_2^d = 3,57 \pm 0,05$ ($pX = -\lg X$). (a) Határozzák meg K_1^d és K_2^d értékeit a szórásaikkal együtt, vigyázva arra, hogy megfelelő számú értékes jegye(ke)t adjanak meg! (b) Számolják ki a stabilitási szorzatok ($\beta_1 = 1/K_2^d$ és $\beta_2 = 1/(K_1^d \cdot K_2^d)$), valamint a tizes alapú logaritmusaik számértékét és szórását!

B32. A malonsav első és második savi disszociációs állandóját pH-metriás titrálásokról meghatározták, és a következő eredményeket kapták: $pK_1^d = 2,573 \pm 0,011$, valamint $pK_2^d = 4,958 \pm 0,006$. (a) Határozzák meg K_1^d és K_2^d értékeit a szórásaikkal együtt, vigyázva arra, hogy megfelelő számú értékes jegye(ke)t adjanak meg! (b) Számolják ki a stabilitási szorzatok ($\beta_1 = 1/K_2^d$ és $\beta_2 = 1/(K_1^d \cdot K_2^d)$), valamint a tizes alapú logaritmusaik számértékét és szórását! (c) Az előző pontban leírt számolást végezzék el legalább három különböző számolási sorrendben, és győződjenek meg arról, hogy a végeredményként kapott szórás független a számolási sorrendtől!

- B33. Egy elsőrendű reakciót ($A \xrightarrow{k} C$, $[A]_t = [A]_0 \cdot e^{-k \cdot t}$) hétszer megismételve, mindig a 120-adik másodpercben a reakciót befagyasztva, majd mintát véve meghatároztuk a reaktáns koncentrációját. A következő értékeket kaptuk: 0,0289, 0,0278, 0,0280, 0,0286, 0,0285, 0,0291 és 0,0288 mol/dm³. A kezdeti koncentráció minden esetben 0,0671 mol/dm³ volt. Számolják ki a reakció sebességi állandóját és szórását úgy, hogy az ismételten koncentráció adatok korrigált empirikus szórását használják a szórásterjedés számításának kezdőértékeként!
- B34. Egy malachitöld indikátor oldat koncentrációját szeretnénk meghatározni. Ennek érdekében készítettünk egy ismert koncentrációjú oldatsorozatot és 560 nm-es hullámhosszon megmértük az oldatok abszorbanciáit (A):

c (mol/dm ³)	A	c (mol/dm ³)	A	c (mol/dm ³)	A
$2,558 \times 10^{-6}$	0,028	$2,046 \times 10^{-5}$	0,273	$3,837 \times 10^{-5}$	0,550
$5,116 \times 10^{-6}$	0,064	$2,302 \times 10^{-5}$	0,319	$4,092 \times 10^{-5}$	0,581
$7,673 \times 10^{-6}$	0,097	$2,558 \times 10^{-5}$	0,358	$4,348 \times 10^{-5}$	0,609
$1,023 \times 10^{-5}$	0,130	$2,814 \times 10^{-5}$	0,400	$4,860 \times 10^{-5}$	0,674
$1,279 \times 10^{-5}$	0,160	$3,069 \times 10^{-5}$	0,444	$5,371 \times 10^{-5}$	0,738
$1,535 \times 10^{-5}$	0,187	$3,325 \times 10^{-5}$	0,484	$5,883 \times 10^{-5}$	0,801
$1,790 \times 10^{-5}$	0,245	$3,581 \times 10^{-5}$	0,511	$6,394 \times 10^{-5}$	0,875

Megmértük az ismeretlen koncentrációjú oldat abszorbanciáját is, ami 0,574-nek adódott. A Lambert-Beer törvény értelmében ($A = \varepsilon \cdot l \cdot c$, ahol ε az egységnyi koncentrációjú oldat abszorbanciája és l az optikai úthossz) a koncentráció egyenesen arányos az abszorbanciával. Számolják ki az ismeretlen oldat koncentrációját, és annak szórását!

- B35. Az általános kémiai laboratóriumi gyakorlaton 10 hallgató a tiokénsav savas közegű bomlásának hőmérsékletfüggését tanulmányozta. Az oldatok opalizálásának kezdetéhez szükséges időt (Δt) mérték állandó nátrium-tioszulfát (c), valamint állandó sav koncentrációnál, de különböző hőmérsékleteken. A következő adatokat kapták:

T (°C)	Δt (s)	T (°C)	Δt (s)	T (°C)	Δt (s)	T (°C)	Δt (s)	T (°C)	Δt (s)
12	284	12	340	0	494	0	560	11	337
22,5	177	22,5	220	20	190	23	149	24	173
32	122	32	125	30	133	30	102	31,8	99
41	96	42	75	40	69	40	88	41	73
51	66	52	60	50	60	50	64	50	71
11	293	11	293	0,5	494	10,5	315	10	358
22,5	170	22,5	170	23,5	190	24,2	181	24	192
33	177	33	117	29	133	30,8	115	33	90
41,5	81	41,5	81	42	69	40,6	79	43	70
52	46	52	46	50	60	50,3	48	52	45

Feltételezve, hogy a bomlás elsőrendű kinetika szerint zajlik, a reakció sebességi állandójának (k) hőmérsékletfüggését az Arrhenius-egyenlet $\left(k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{R \cdot T}}\right)$ adja meg, amelyben a jelölések a reakció aktiválási energiáját (E_a), a preexponenciális együttható értékét (A), az abszolút hőmérsékletet (T) és az egyetemes gázállandót (R) jelentik. Ha feltételezzük, hogy a tiokénsav koncentrációjának változása (Δc) minden kísérletben azonos az opalizálás észleléséig, akkor a sebességi egyenletből a következő közelítő egyenlet adható meg: $\frac{\Delta c}{\Delta t} = -k \cdot c$. Ebből k -t behelyettesítve az Arrhenius-egyenletbe, átalakítás után a

$$\ln \Delta t = \ln \left(-\frac{\Delta c}{c \cdot A} \right) + \frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T}$$

egyenlethez jutunk, vagyis az $\ln \Delta t$ -t az $1/T$ függvényében ábrázolva egy egyenest kapunk, amely meredekségének R -szerese adja meg az aktiválási energia értékét. A feladat ennek meghatározása a szórásával együtt. Az egyenes illesztése során a nyilvánvalóan kiugró pontokat hagyjuk el! Készítsünk ábrát is, amely a kiugró ponto(ka)t is tartalmazza! $R=8,314$ J/mol/K és $0^\circ\text{C}=273,15$ K.

- B36. Egy összetettebb, „éleltszagúbb” feladat. Egy kristályvizet tartalmazó kálium szulfidot tartalmazó vegyszeres üveg feliratán olvashatatlan a kristályvíz sztöchiometriai száma, ezt kell meghatározni (vagyis x -et az $K_2S \cdot xH_2O$ összetételben). Az üvegből eltérő tömegű mintákat (w) mindig pontosan $m_{v0}=50,00$ g vízben oldottak, majd az oldatok fagyáspontját megmérve a következő kísérleti adatokat kapták:

w/g	1.02	1.52	1.99	2.46	3.01	4.00	5.00	5.97	7.11	7.99
$\Delta T/^\circ\text{C}$	-0.57	-0.83	-1.09	-1.33	-1.64	-2.17	-2.65	-3.16	-3.72	-4.15

A táblázatban megadott hőmérsékleti adatok jele azért ΔT , mert ezek valójában a fagyáspontcsökkenés értékei, hiszen a víz fagyáspontja 0°C . A fagyáspont csökkenés számolható is a Blagen törvény alapján:

$$\Delta T = -i \cdot K_F \cdot m_B = -i \cdot K_F \cdot \frac{\frac{w}{M_s + x \cdot M_v}}{\left(m_{v0} + \frac{x \cdot M_v}{M_s + x \cdot M_v} \cdot w\right)} \cdot 1000 \text{ g/kg}, \text{ ahol} \quad (2.1)$$

i egy molekula oldott anyagból származó ionok száma disszociáció esetén (értéke 3 a K_2S -re),
 K_F az oldószer krioszkópos állandója, vagyis a molális fagyáspontcsökkenése (értéke a vízre $1,86^\circ\text{C/mol}\cdot\text{kg}$),
 m_B az oldat Raoult-koncentrációja (vagyis molalitása) mol/kg mértékegységben megadva,
 M_s a vízmentes kálium szulfid relatív moláris tömege (110,26), valamint
 M_v a víz relatív moláris tömege (18,02).

A konkrét számértékeket a (2.1) egyenletbe helyettesítve, majd egyszerűsítve a

$$\Delta T = \frac{-5580}{\left(\frac{5513 + x \cdot 901}{w} + x \cdot 18,02\right)} \quad (2.2)$$

összefüggéshez jutunk, ami könnyen átalakítható linearizált formába:

$$\frac{1}{\Delta T} = -\frac{5513 + 901 \cdot x}{5580} \cdot \frac{1}{w} - \frac{18,02 \cdot x}{5580}. \quad (2.3)$$

A (2.3) egyenlet alapján, ha a fagyáspontcsökkenés értékeinek a reciprokát ábrázoljuk a bemért sőtömeg reciprokának a függvényében, akkor egy egyenest kapunk, amelynek a meredeksége az egyszer aláhúzott rész az egyenletben, míg a tengelymetszete a kétszer aláhúzott rész. Ezek szerint az x értéke akár a meredekségből, akár a tengelymetszetből meghatározható.

a) Illesszenek egyenest a LIN.ILL tömbfüggvény segítségével a (2.3) összefüggés alapján! Határozzák meg a meredekség és a tengelymetszet értékét, valamint a szórásait!

(meredekség= $-1,784 \pm 0,017$ és tengelymetszet= $-0,0193 \pm 0,0080$)

b) Készítsék el az egyenesillesztéshez tartozó ábrát is, a műszaki-tudományos ábrakészítés szabályainak megfelelően!

c) Mind a meredekségből, mind a tengelymetszetből számítsák ki x értékét és szórását!

(meredekségből: $x=4,93 \pm 0,11$, valamint tengelymetszetből: $x=6,0 \pm 2,5$)

d) A készített ábra segítségével magyarázzák meg, miért lehet x értékét sokkal pontosabban meghatározni a meredekségből, mint a tengelymetszetből? Az ábrát nézve gondolják meg, hogy milyen hatása van annak akár a meredekségre, akár a tengelymetszetre, ha egy-egy mérési pontot a kísérleti bizonytalanságon belül megváltoztatunk?

e) A meredekségből kapott x -érték és annak szórása alapján döntsék el, hogy 68 %-os megbízhatósági szinten állíthatjuk-e, hogy a kristályvizek száma nem lehet egész szám?

Megjegyzés: Valaki gondolhatná, hogy a fenti eljárás túl bonyolult, egy egyszerű szárazra párlás jobb módszer lenne. Ez erre a vegyületre azonban nem igaz, mert magasabb hőmérsékleten a kálium szulfid reagál a vízzel a $\text{K}_2\text{S} + 2\text{H}_2\text{O} = 2\text{KOH} + \text{H}_2\text{S}$ egyenlet szerint.

2.4. Tömbfüggvények hisztogramokhoz

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

1. hisztogram
2. GYAKORISÁG EXCEL-függvény
3. Solver és Analysis ToolPak bővítmények (2010 vs. 2016, ZH-ban nem kell)
4. Angol/magyar függvénynevek az EXCEL-ban ((Open/Libre)Office-ban is) pl. **ezen a webcímen**

Feladat:

- B37. Az mosn0020.csv fájl adataira úgy is alkalmazzák a GYAKORISÁG függvényt, hogy nem hagyják el az $x=-2-7$ tartomány adatait. Hasonlítsák össze az így kapott hisztogramot az órán bemutatottal, és értelmezzék a különbségeket!
- B38. A GYAKORISÁG függvény használatával számolja ki adott átlaghőmérsékletű napok gyakoriságát a $-38,5 - 32,0^\circ\text{C}$ tartományban, $0,5^\circ\text{C}$ szélességű tartományokban! A számolásokat a januári és júliusi adatokra végezze el Szeged, Hammerfest és Nizhny Novgorod esetében. A kapott gyakorisági adatokból készítsen hisztogramokat, amelyek

világosan mutatják a különböző éghajlatú városok közötti eltéréseket. Mennyire vannak összhangban az elkészített ábrák a korábban számolt (B5.. és B26.. feladatok, (26. o.) és (29. o.)) statisztikai jellemzőkkel (átlag, szórás, ferdeség, csúcsosság)?

- B39. A B38.. feladathoz (31. o.) hasonló módon, készítsen hisztogramokat Szeged januári és júliusi (1) légköri nyomására (tartomány: 984–1047 hPa, felosztás 1 hPa-onként), (2) csapadék mennyiségére (tartomány: 0,5–48,5 mm, felosztás 0,5 mm-enként) és (3) napsugárzás teljesítményére (tartomány: 0–400 W/m², felosztás 5 W/m²-enként). Mennyire vannak összhangban az elkészített ábrák a B5.. feladatban (26. o.) számolt statisztikai jellemzőkkel (átlag, szórás, ferdeség, csúcsosság)?
- B40. A B6.. feladathoz (26. o.) kapcsolódóan, számolja ki a GYAKORISÁG függvény használatával az adott szélességű napok gyakoriságát Stockholm-ban és Grussian-ben, a 0–27 m/s tartományban, 1 m/s szélességű tartományokban! A kapott gyakorisági adatokból készítsen egy ábrát, amely mindkét hisztogrammot mutatja. Az ábra elemzésével válaszolja meg, hogy mi bizonyítja, Grussian sokkal szelesebb hely, mint Stockholm, annak ellenére, hogy az átlagok különbsége nem szignifikáns.
- B41. A B7.. feladathoz (26. o.) kapcsolódóan, számolja ki a GYAKORISÁG függvény használatával az adott relatív páratartalmú napok gyakoriságát Amsterdam-ban és Madridban, a 0–100 % tartományban, 1 % szélességű tartományokban! A kapott gyakorisági adatokból készítsen egy ábrát, amely mindkét hisztogrammot mutatja. Az ábra elemzésével válaszolja meg, hogy mi bizonyítja, Madrid sokkal szárazabb hely, mint Amsterdam, annak ellenére, hogy az átlagok különbsége nem szignifikáns.

2.5. Mátrixműveletek, lineáris egyenletrendszer megoldás EXCEL-ben

1. → Egy érthető összefoglaló letölthető itt PDF fájlban.
2. → Az alkalmazható függvények **A** és **B** mátrixokra:
A·**B** vagy **B**·**A** → MSZORZAT,
A^T → TRANSZPONÁLÁS,
A⁻¹ → INVERZ.MÁTRIX és
DA → MDETERM (ez nem tömbfüggvény, csak fontos).

Feladatok:

- B42. Van három mátrix: $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix}$, $B = \begin{bmatrix} 7 & 8 & 9 \\ 10 & 11 & 12 \end{bmatrix}$, valamint $C = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ -3 & 4 & 2 \\ 5 & 2 & 1 \end{bmatrix}$. Az EXCEL mátrixokat kezelő (tömb)függvényeinek segítségével számolják ki az **A+B^T**, **A^T-B**, **A·B** és **B·A** mátrixokat, valamint a **C** mátrix inverzét és determinánsát!
- B43. Az EXCEL mátrixokat kezelő függvényeinek segítségével oldják meg a következő lineáris egyenletrendszereket:

$$\begin{array}{rcl} x_1 + 2x_2 = -3 & & 2x + y + z - u = 1 \\ 4x_1 + 5x_2 = -6 & \text{és} & x - y + 3z - 3u = 2 \\ & & 2x - 5y + 7z = -6 \\ & & x + 8y + 17z + 5u = 0 \end{array}$$

$$(x_1=1, x_2=-2; x=-\frac{467}{873}, y=\frac{802}{873}, z=-\frac{14}{291}, u=-\frac{349}{291})$$

2.6. Numerikus differenciálás és integrálás

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

- | | |
|--|---|
| 1. → analitikus vs. numerikus differenciálás és integrálás | 7. → képletekben Δx általában állandó (ekvidisztáns beosztás) |
| 2. → differenciálhányados vs. differenciahányados | 8. → nem stabil (pl. numerikus differenciálás) és stabil (pl. numerikus integrálás) számítási eljárások |
| 3. → kétpontos differenciálás | 9. → összefoglaló: ezen a webcímen elérhető fájl |
| 4. → többpontos differenciálás | 2–3. oldalai |
| 5. → integrálás trapékszabállyal | 10. → simító spline-ok (nem kell a ZH-ban) |
| 6. → integrálás Romberg módszerével (nem kell a ZH-ban) | |

Feladatok:

- B44. Az arzenit és hexciano-ferrát(III) ionok közötti reakcióban az utóbbi reaktáns koncentrációja az alábbi táblázat szerint változott $[\text{AsO}_3^{3-}]_0=0,0364 \text{ M}$, $[\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}]_0=0,001 \text{ M}$ és $[\text{NaOH}]_0=0,182 \text{ M}$ kiindulási koncentrációk mellett egy hallgatói mérésben:

t (s)	c (mol/dm ³)	t (s)	c (mol/dm ³)	t (s)	c (mol/dm ³)	t (s)	c (mol/dm ³)	t (s)	c (mol/dm ³)
0	$1,00 \times 10^{-3}$	70	$5,24 \times 10^{-4}$	180	$1,88 \times 10^{-4}$	280	$7,55 \times 10^{-5}$	420	$1,86 \times 10^{-5}$
30	$7,57 \times 10^{-4}$	80	$4,78 \times 10^{-4}$	200	$1,57 \times 10^{-4}$	300	$6,18 \times 10^{-5}$	450	$1,37 \times 10^{-5}$
40	$6,91 \times 10^{-4}$	100	$3,97 \times 10^{-4}$	220	$1,29 \times 10^{-4}$	320	$5,40 \times 10^{-5}$	480	$1,27 \times 10^{-5}$
50	$6,25 \times 10^{-4}$	120	$3,30 \times 10^{-4}$	240	$1,09 \times 10^{-4}$	360	$3,53 \times 10^{-5}$	540	$7,85 \times 10^{-6}$
60	$5,75 \times 10^{-4}$	150	$2,49 \times 10^{-4}$	260	$8,83 \times 10^{-5}$	380	$2,84 \times 10^{-5}$	600	$5,89 \times 10^{-6}$

Pseudo-elsőrendű kinetikát feltételezve az adatokat a $0,001000 \cdot e^{-0,00926 \cdot t}$ egyenlet írja le.

- A mérési időpontokban számítsák ki az illesztett görbe analitikus deriváltjának a használatával a differenciálhányadosok számértékét! Jelölje ezeket az értékeket l_i az i -edik időpontban.
- Számítsák ki kétpontos numerikus differenciálással a differenciahányadosok értékét a mért időpontoknál; az adott időponthoz tartozó, valamint az ettől jobbra lévő adatpárokat felhasználva (az utolsó pontban nyilván nem kell számolni)! Jelölje ezeket az értékeket a_i az i -edik időpontban.
- Számítsák ki (kvázi)hárompontos numerikus differenciálással a differenciahányados értékét a mért időpontoknál; az adott időponttól balra, valamint a jobbra lévő adatpárokat felhasználva (az első és utolsó pontban nyilván nem kell számolni)! A továbbiakban ezeket is a_i -vel jelöljük az i -edik időpontban.
- A differencia- és differenciálhányadosok eltérését jellemezzék a következő módon:
 - Számolják ki a $\frac{100}{25} \sum_{i=1}^{25} \left| \frac{a_i - l_i}{l_i} \right|$ kifejezés számértékét mind a **b)**, mind a **c)** pontokban számolt differenciahányadosokkal. Ez a kifejezés megadja a differencia- és differenciálhányadosok átlagos relatív eltérését százalékban kifejezve.
 - A két számolt adat összehasonlításával adják, meg melyik a pontosabb módszer numerikus differenciálásra.
 - A két számolt adat abszolút értékének értelmezésével magyarázzák meg, miért nem stabil eljárás a numerikus differenciálás!
- A mérési időpontokban számítsák ki az illesztett görbe analitikus határozott integráljának használatával a határozott integrálok számértékét! Jelölje ezeket az értékeket p_i az i -edik időpontban.
- Számítsák ki a határozott integrál számértékét a mért időpontoknál a trapézszabály használva! Jelölje ezeket az értékeket t_i az i -edik időpontban.
- Hasonlóan a **d)** pontban leírt módhoz, számolják az átlagos relatív eltérést százalékban, csak az l_i helyett a p_i , illetve az a_i helyett a t_i értékeket használják. Ezt a értéket hasonlóan a differenciálásnál kapottakkal, magyarázzák meg, miért stabil eljárás a numerikus integrálás!

2.7. Bevezetés a (wx)Maxima program használatába

Telepítés, leírások:

Windows: **Ezen a webcímen** érhetők el a telepítő programok. Érdemes az SBCL vagy GCL fordítóval előállított programokat használni, ezek gyorsabbak a többinél. Jelenleg (2023.03.28) az 5.46.0-ás verziószámú változatot érdemes használni. Régi, lassú gépeken az 5.28.0-ás verziószámú változatot érdemes használni.

Linux: A legtöbb disztribúció tartalmazza a (wx)Maxima csomag nem túl régi változatát, így a legkényelmesebb a csomagkezelővel (package manager) telepíteni. Újabb változatokat vagy **ezen a webcímen** keresztül, vagy **Blahota István ppa-ján** keresztül lehet telepíteni Ubuntura és sok más Linux változatra.

Mac OS X: A telepítő csomagok **ezen a webcímen** keresztül érhetők el.

Android: Play Áruház (ez „csak” a Maximát telepíti, a grafikus felület nem a (wx)Maxima), csak hasonló.

Font a matematikai képletekhez: A **jsMath fontcsalád**ot érdemes telepíteni a szebb matematikai képletekhez. Az újabb változatok ezt automatikusan elvégzik, a régebbiekénél kell csak az előbbi honlapot használni a letöltéshez.

Segédanyagok:

- A kurzuson szükséges tudás összegezve van a maxima_intro.wxmx fájlban. Az ebben szereplő parancsokat, függvényeket, változókat, jelöléseket kell ismerni és használni a ZH-ban. Konkrétan:
 - (parancs)függvények: assume, bfloat, charat, charlist, define, diff, draw2d, bf_find_root, cos, find_root, float, integrate, kill, lhs, limit, load, log, plot2d, rhs, romberg, sconcat, sin, solve, sqrt, string, tan, taylor, wxdraw2d, wxplot2d,
 - rendszer változók: fpprec, fpprintprec, functions, maxima_tempdir, ratprint, values,
 - jelölések: $;$, $\$$, $\%$, $\%in$ (n egy egész szám), $\%on$ (n egy egész szám), $\%pi$, $\%e$, $\%i$, $:$, $=$, $:=$, a $[]$ zárójelpár, a $""$ idézőjelpár,
- Összegző weboldal**, ami összegyűjti az elérhető dokumentációkat mind a (wx)Maxima-val, mind a Maxima-val kapcsolatban.

- **Maxima by Example** című könyv PDF formában.
- **Összegző weboldal**, ami összegyűjti az elérhető dokumentációkat a Maxima-val kapcsolatban.
- **Magyar nyelvű bevezető jegyzet** a (wx)Maxima 5.28-as verziójának használatába, Blahota István tollából.

Feladatok (Megjegyzések: (1) Sok feladat az első féléves matematika szeminárium anyagából lett kölcsönözve. (2) Minden feladatot a (wx)Maxima programmal kell megoldani. (3) Sok feladathoz kellene relatív atomtömegek és egyéb állandók, ezek a fizikai kémiai laboratóriumi gyakorlatok függelékében találhatók meg. A megadott végeredmények 0,01 pontosságú atomtömegekkel lettek kiszámolva.):

- B45. 1,5 kg 90 %-os alkoholt mennyi vízzel hígíthatunk 50 %-osra? (1,2 kg víz)
- B46. Van 2,5 kg 5 %-os oldatunk. Mennyi 20 %-os oldatot kell hozzáadni, hogy 12 %-osat kapjunk? (2,1875 kg oldat)
- B47. Mennyi 10 %-os és 25 %-os oldatot kell összekeverni, hogy 2 kg 20 %-os oldatot kapjunk?
(2/3 kg 10 %-os és 4/3 kg 25 %-os oldat)
- B48. Egy karbonsav 11,0 mólszázalékos vizes oldata 24,0 tömegszázalékos. Melyik ez a karbonsav?
- B49. Hány gramm ammónium-nitrátot kell 100,0 gramm ammónium-szulfáttal összekeverni, hogy a kapott keverék 24,0 tömegszázalékos legyen nitrogénre nézve? (25,46 g ammónium-nitrát)
- B50. Hány gramm As_2S_3 -ot tartalmaz 100,00 g $\text{As}_2\text{S}_3/\text{As}_2\text{S}_5$ keverék, ha a 100,00 g anyag mind arzénre, mind kénre nézve 50,00–50,00 tömeg%-os? $A_r(\text{As})=74,92$ és $A_r(\text{S})=32,07$. (13,45 g arzén-triszulfid)
- B51. A nátrium-nitrát oldáshője 20,81 kJ/mol. Mekkora hőmérsékletre hűl le 1,00 dm³, 25,0 °C-os, 0,997 g/cm³ sűrűségű víz, ha 50,0 g 25,0 °C-os NaNO_3 -ot oldunk fel benne? Az oldat közepes fajhője 4,193 J/g/K. (22,2 °C)
- B52. Összeöntünk 200,0 cm³ 0,150 M nátrium-szulfát és 100,0 cm³ 0,600 M sósavoldatot. Mennyi lesz a kapott oldatban a pH értéke, ha a HSO_4^- savi disszociációs állandójának értéke 0,07 M? (pH=0,872)
- B53. Fenolt és vizet 1:1 tömegarányban összekeverünk. Két elkülönülő fázis keletkezik, amelyek 8,12 tömeg%, illetve 72,37 tömeg% fenolt tartalmaznak. Számítsuk ki a két fázis tömegeinek arányát a fenolban gazdagabb fázisra vonatkoztatva! (0,534 a tömegarány)
- B54. Mennyi az oxálsav ($\text{H}_2(\text{COO})_2$, a továbbiakban H_2A) 0,12 M koncentrációjú oldatában a pH értéke? Adják meg az oxálsav eltérő mértékben deprotonált formáinak egyensúlyi koncentrációit is! $K_1^{\text{ox}}=0,038 \text{ M}$, $K_2^{\text{ox}}=0,00005 \text{ M}$
(pH=1,29, $[\text{A}^{2-}]=5,0 \times 10^{-5} \text{ M}$, $[\text{HA}^-]=5,1 \times 10^{-2} \text{ M}$ és $[\text{H}_2\text{A}]=6,9 \times 10^{-2} \text{ M}$)
- B55. 60,0 g, 16,0 tömegszázalékos sóoldatból 20,0 g tömegű részletet átöntünk 180 g tömegű, x tömegszázalékos, azonos sóból készült sóoldatba. Alapos összekeverés után most ebből veszünk ki 20,0 g tömegű részletet, és visszaöntjük a maradék 16,0 tömegszázalékos oldatba. Az öntögetések és a keverés eredményeként az eredetileg 16,0 tömegszázalékos oldat töménysége 13,0 tömegszázalékra csökkent. Hány tömegszázalékos volt a kiindulási 180 g tömegű oldat az összeöntés előtt? (6,00 tömegszázalékos oldat kell)
- B56. Az egyik legismertebb magyar ételízesítő nátrium-klorid-tartalmát a következőképpen határoztuk meg:
A sűrítmény 20,00 g-ját desztillált vízzel főztük, lehűlés után aktív szén hozzáadásával elszíntelenítettük, majd le-szűrtük, és a szűrlet térfogatát desztillált vízzel 100,0 cm³-re állítottuk be. A szűrletből 10,00 cm³ mintát vettünk, ezt desztillált vízzel 100,0 cm³-re hígítottuk, majd ebből az oldatból vettünk 10,00 cm³-es mintákat, melyekhez 8,45 cm³ 0,06000 M koncentrációjú ezüst(I)-nitrát-oldatot, valamint salétomsavat és kálium-nitrátot adtunk. Forraltuk, hogy az ezüst-klorid-csapadék tömörödjön, majd vas(III)-nitrát indikátort adtunk az oldathoz. Az ezüst(I)-ion feleslegét 0,01000 M kálium-tiocianát-oldattal (KSCN) titráltuk, melyből átlagosan 26,65 cm³ fogyott. Hány tömegszázalékos a népszerű ételízesítő nátrium-kloridra nézve?
(7,03 tömegszázalékos volt a nátrium-klorid a sűrítményben)
- B57. Fémcinket oldottunk kénsavoldatban. A reakció után kivált kristályvíztartalmú vegyület kéntartalma 11,15 tömegszázalék. Hány mol vizet tartalmaz a kristályvíztartalmú vegyület egy mola? Elvileg hány tömegszázalékos kénsavoldatban kell a cinket feloldanunk ahhoz, hogy ha a H_2SO_4 -tartalommal sztöchiometrikus mennyiségű cinket oldunk, akkor a hidrogéngáz eltávozása után az oldat egésze kikristályosodjék? (7 kristályvíz és 43,75 tömegszázalékos oldat kell)
- B58. A kalcium atomsúlyának (értsd abban az időben: hidrogénhez viszonyított relatív atomtömegének) meghatározásához Berzelius 1843-ban kalcium-oxidot alakított át kalcium-szulfáttá kénsavas kezeléssel úgy, hogy a kénsav feleslegét hevítéssel eltávolította. Egyik kísérlete során a kiindulási anyag 25,04 g-jából 60,36 g termék képződött. Mennyinek találta Berzelius a Ca atomsúlyát ezen mérés alapján, ha a tudós akkori ismerete szerint a kén atomsúlya 32,40 volt, míg az oxigéné 16,03? (41,03 a kalcium atomsúlya Berzelius szerint)
- B59. Egy fémötvözet alumíniumot, vasat és ezüstöt tartalmaz. Az ötvözet 0,4938 g-ját 0,1 M HCl -ban oldva 268,90 cm³, 23,50 °C-os, 1,053 bar nyomású gáz fejlődik. Ha az ötvözet 0,4743 g-ját 0,1 M NaOH -oldatban oldjuk, akkor 108,58 cm³, 23,50 °C-os, 1,032 bar nyomású gáz keletkezik. Mi volt a keverék tömegszázalékos és mólszázalékos összetétele?
(17,23 tömeg% Al, 76,35 tömeg% Fe és 6,42 tömeg% Ag, illetve 30,92 mól% Al, 66,20 mól% Fe és 2,88 mól% Ag)
- B60. Adott nyomású, szobahőmérsékletű, metánt és acetilént tartalmazó gázelegy 63,0 cm³-ének tökéletes elégetése után a kapott gáz térfogata a kiindulási nyomáson és hőmérsékleten 96,0 cm³. Mi volt a gázelegy mól- és térfogatszázala-

lékos összetétele?

(47,6 % metán és 52,4 % acetilén mindkét koncentráció-mértékegységben)

- B61. Egy porkeverék alumíniumot, rezet és inert szennyeződést tartalmaz. Ha a porkeverék 0,1000 g-ját 300,0 cm³ 0,0100 M sósavoldathoz adjuk, akkor az oldatban a pH értéke 2,678 lesz a gázfejlődés befejeződése után. Ezután a rendszerhez 200,0 cm³ 0,03 M salétromsavoldatot adva, a nitrogén-dioxid fejlődés után az oldat pH-értéke 2,347-re változik. Adjuk meg a porkeverék tömegszázalékos összetételét!

(21,32 tömegszázalék Al, 69,60 tömegszázalék Cu és 9,08 tömegszázalék inert anyag)

- B62. Kalcium-karbonátot használunk egy sósavoldat, valamint egy lúgoldat pontos koncentrációinak meghatározásához. 1,000 g CaCO₃-ot 49,85 cm³ HCl-oldatban oldunk. A sav feleslegének visszatitrálásához 6,32 cm³ NaOH-oldat fogy. Külön kísérletben titrálunk 50,00 cm³ HCl-oldatot, erre 48,95 cm³ NaOH-oldat fogy. Számítsuk ki a HCl- és a NaOH-oldatok pontos koncentrációját!

($c_{\text{sav}}=0,4605$ M és $c_{\text{bázis}}=0,4704$ M)

- B63. 5,000 g, kalcium-karbonátból és fémkalciumból álló porkeveréket oldunk feleslegben lévő 1,0 M sósavoldatban. Az oldás eredményeként 1,783 dm³ 37,30 °C-os, 1,000 bar nyomású gáz keletkezik. Mennyi volt a porkeverék tömegszázalékos és a fejlődött gázelegy térfogatszázalékos összetétele? (74,43 tömeg% CaCO₃, 25,57 tömeg% Ca; 53,82 térfogat% ? gáz és 46,18 térfogat% ? gáz)

- B64. Vas(II)-karbonátból és fémvasból álló keverék 6,223 g-ját oldjuk feleslegben lévő sósavoldatban, miközben 1,873 dm³ normálállapotú gáz keletkezik. Mennyi volt a keverék tömegszázalékos összetétele? Mi a keletkezett gázelegy térfogatszázalékos összetétele?

(48,27 tömeg% FeCO₃, 51,73 tömeg% Fe és 68,98, valamint 31,02 térfogat%-ok a fejlődő gázokra)

- B65. Egy ötvözet a periódusos rendszer két egymást követő alkáliföldféméből áll. Az ötvözet 4,500 g-ját sósavban feloldva 3,332 dm³ standardállapotú H₂ fejlődik. (a) Mi az ötvözetet alkotó két fém? (b) Mi az ötvözet tömeg-, illetve mólszázalékos összetétele?

(32,85 tömeg% és 44,64 mól% a kisebb moláris tömegű fémre)

- B66. 0,5000 g kloridot, bromidot és inert anyagot tartalmazó mintából 0,9000 g, AgCl-ot és AgBr-ot tartalmazó csapadékkeveréket választottunk le. Ha ezt a csapadékot klóráramban hevítjük, a csapadék súlyvesztése 0,1000 g. Számítsuk ki, hogy hány tömegszázalék kloridot, illetve bromidot tartalmazott a minta! (23,63 tömegszázalék klorid és 35,95 tömegszázalék bromid)

- B67. Hány tömegszázalék szenet tartalmaz az a Mg₂C és MgC₂-ből álló karbidkeverék, melynek 0,8500 g-ját elhidrolizáltatva, majd a képződött gázt elégetve 0,4779 g víz képződik. A karbidok hidrolízise során 1 mol Mg₂C-ből 1 mol CH₄, illetve 1 mol MgC₂-ből 1 mol C₂H₂ képződik.

(24,15 tömegszázalék szén)

- B68. Egy szilárd minta két vízmentes ezüst-halogenid keverékéből áll. A minta 0,3236 g-nyi mennyiségét 50,00 cm³ 0,1810 M kálium-cianid-oldatban oldottuk. A feleslegben maradt cianidot 28,14 cm³ 0,1010 M ezüst-nitrát mérőoldattal mértük vissza. Számítsuk ki a keverék tömegszázalékos ezüsttartalmát! Feltételezve, hogy a két halogenid a klorid és a jodid volt, számítsuk ki a mintában a klorid és a jodid tömegét is.

(56,10 tömegszázalék ezüst, 0,0277 g klorid és 0,1144 g jodid)

- B69. Egy nátriumot és káliumot is tartalmazó amalgám 1,0000 g-ját 150,0 cm³ desztillált vízbe tesszük és rázatjuk. Az alkálifémek kioldódása után a maradék higany tömege 0,9187 g. Az oldat 20,00 cm³-ét 0,0500 M sósavoldattal megtitrálva 8,22 cm³ sav fogy. Mennyi volt az eredeti amalgám mólszázalékos összetétele? (31,78 mólszázalék Na, 8,45 mólszázalék K és 59,77 mólszázalék Hg)

- B70. Hány gramm kristályvizet (CuSO₄·5H₂O) kell egy 250 cm³-es mérőlombikban feloldani ahhoz, hogy az oldat moláris koncentrációja c legyen, ahol c értéke 0,00–0,99 M között változhat? Készítsen egy olyan ábrát a Maxima program segítségével, amely a szükséges kristályvíz tartalmú réz(II)-szulfát tömegét ábrázolja a moláris koncentráció függvényében!

- B71. Hány gramm kristályvizet (CuSO₄·5H₂O) kell 58 g vízben feloldani ahhoz, hogy az oldat tömegszázalékos összetétele m legyen, ahol m értéke 0–10,00 (m/m)% között változhat? Készítsen egy olyan ábrát a Maxima program segítségével, amely a szükséges kristályvíz tartalmú réz(II)-szulfát tömegét ábrázolja a tömegszázalékos összetétel függvényében!

- B72. A Maxima segítségével rajzolja meg 1 mol anyagmennyiségű tökéletes gáz izotermáját (a $p(V)$ függvény állandó hőmérsékleten) 0, 50 és 100 °C-on, a három görbét egy diagramon feltüntetve! A térfogat tengelyén a tartomány 0,002–0,05 m³ legyen, a nyomás tengelyén az adatokat Pa-ban kell feltüntetni.

- B73. Számolják ki az $f(x) = 4^{-4x+3}$ függvény felezési idejét! ($T=?$; $f(t+T) = f(t)/2$ bármely t esetén) (T=1/8)

- B74. Számolják ki az $f(x) = 8^{3x+1}$ függvény duplázási idejét! ($T=?$; $f(t+T) = 2f(t)$ bármely t esetén) (T=1/9)

- B75. Határozzák meg a következő sorozatok határértékét:

$$(a) a_n = \frac{3n-4}{n+4}, (b) a_n = \left(1 + \frac{3}{n}\right)^5, (c) a_n = \frac{\sqrt{n^2} - \sqrt{5n}}{3n^4}, (d) a_n = \sqrt{n^2 + 4n + 1} - \sqrt{n^2 - 4n + 1} \text{ és } (e) a_n = \frac{\sqrt{3^n} - \sqrt{2^n}}{5n}!$$

B76. Határozzák meg az alábbi határértékeket:

$$(a) \lim_{x \rightarrow 4} \frac{x^2 - 4}{x^2 - 16}, (b) \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{x^2 - 5x}{1 - 3x^2}, (c) \lim_{x \rightarrow -\infty} \sqrt{x^2 + x} + x, (d) \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}, (e) \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin 3x}{\sin 4x},$$

$$(f) \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\ln(1+x)}{x}, (g) \lim_{x \rightarrow 0+} x^2 \ln x, (h) \lim_{x \rightarrow 0+} \tan x \ln x \text{ és } (i) \lim_{x \rightarrow 0+} x^x!$$

B77. Végezzenek számolásokat annak bizonyítására, hogy a mosogatás (vagy hígítás) sokkal hatékonyabb, ha a mosogató/hígító folyadékot nem egyszerre, hanem több kisebb részletben használják fel.

Egy kémcsőben 1,0 M FeCl_3 -oldat van. Kiöntve a folyadékot, 0,1 cm³ oldat marad vissza a kémcsőben. Összesen 5 cm³ víz áll rendelkezésre a kémcső tisztítására.

- Mekkora lesz a maradék oldat vas(III)-koncentrációja, ha az 5 cm³ víz egyszerre lesz felhasználva?
- Mekkora lesz a maradék oldat vas(III)-koncentrációja, ha az 5 cm³ víz két lépésben, egyidejűleg 2,5 cm³-es részekben lesz felhasználva?
- Hatékonyabb-e a mosogatás/hígítás, ha nem egyforma térfogatú részeket használunk a b) részhez? Számítással bizonyítsa állítását!
- Mekkora lesz a maradék oldat vas(III)-koncentrációja, ha az 5 cm³ víz összesen öt lépésben, egyidőben 1 cm³-es részekben lesz felhasználva?
- Ha nem 5, hanem 2 cm³ víz áll összesen rendelkezésre a tisztításhoz, akkor ezt végtelen sok piciny részletben felhasználva mi az elérhető legkisebb koncentráció? (A megoldáshoz a Maxima limit függvényét érdemes használni.)
- A limit függvény a feladat teljesen általános megoldására is használható. Legyen a kémcsőben lévő oldat moláris koncentrációja c , a kiöntés után a kémcsőben maradt oldat maradék térfogata V_r , míg a mosogatóra/hígításra használható oldószer összes térfogata V_t . Melyik képlet számolja ki a kémcsőben maradó oldat minimális koncentrációját?
- Az f) pontban levezetett képlet alapján elérhető-e elméletileg, hogy az oldott anyag koncentrációja nulla legyen a hígítások elvégzése után?

$$(c_a=0,01961 \text{ M}, c_b=0,001479 \text{ M}, \text{ nem lesz hatékonyabb (pl. } 4+1 \text{ cm}^3 \text{ használata esetén } c_c=0,002217 \text{ M}), c_d=6,209 \times 10^{-6} \text{ M}, c_e=2,061 \times 10^{-9} \text{ M}, c \cdot e^{-V_t/V_r} \text{ és nem.)}$$

B78. Számolják ki az e^x , e^{2x} , $\ln x$, $\ln(2x)$, $\tan x$ és $\tan(2x)$ függvények Taylor-sorainak első 10 tagját!

B79. Határozzák meg a következő függvények differenciálját:

$$(a) \sqrt{x} + \frac{1}{x^3}, (b) x^5 5^x, (c) \frac{\ln x - 1}{\tan x}, (d) \frac{2x}{x^2 + 1}, (e) \frac{1}{\ln x}, (f) 2^{\frac{2x}{x+1}}, (g) \ln(1 + \sin \sqrt{x}), (h) x^{\sqrt{x}},$$

$$(i) x^{\sin x} \text{ és } (j) (\ln x)^x!$$

B80. Határozzák meg a következő határozatlan integrálok függvényalakját:

$$(a) \int \frac{1}{x} dx, (b) \int \frac{1}{\sqrt[5]{x}} dx, (c) \int \frac{2x+3}{3x+2} dx, (d) \int \frac{1+\cos x}{\sin x} dx, (e) \int 10^x e^x dx, (f) \int \frac{1}{5+x^2} dx, (g) \int \frac{1}{x \ln x} dx, (h) \int \ln x dx, (i) \int x^2 e^{3x} dx \text{ és } (j) \int \frac{1}{x^2 + x^4} dx!$$

B81. Határozzák meg a következő határozott integrálok számértékét:

$$(a) \int_1^3 x dx, (b) \int_0^{10} 2^x dx, (c) \int_0^1 \ln(x+1) dx, (d) \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx \text{ és } (e) \int_0^\infty e^{-x} dx!$$

B82. Mennyi egy $c_s=3,8 \times 10^{-7}$ M koncentrációjú gyenge sav (HA) oldatában a pH három tizedes jegy pontossággal, ha a savi disszociációs állandó értéke $K_s=2,1 \times 10^{-7}$ M? Ilyen körülmények között a Brønsted egyenlet

$$[\text{H}^+] = K_s \frac{c_s - [\text{H}^+] + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}}{[\text{H}^+] - \frac{K_v}{[\text{H}^+]}}$$

formája érvényes. (Érdemes ábrázolni az egyenlet jobb- és baloldalának különbségét a hidrogénion koncentrációjának függvényében, hogy megtaláljuk azt a koncentrációtartományt, amelyen belül keressük a gyököt.) $pK_v=13,76$. ($pH=6,609$)

B83. Egy oldaton áthaladt összes töltésmennyiséget a $Q = \int_0^t I(t) dt$ összefüggéssel tudunk kiszámolni. Mennyi az áthaladt összes töltésmennyiség, ha az elektrolízist 2 óra 30 percre végezzük; és az áramerősség az $I(t) = \frac{1,07 \times 10^3}{1,12 \cdot t + 2,16}$ függvény szerint változik az idő függvényében, ha az időt másodpercben és az áramerősséget amperben adjuk meg.

- Határozzák meg a töltésmennyiséget a Maxima integrate függvényének segítségével!

- b) Határozzák meg a töltésmennyiséget a trapézszabály segítségével úgy, hogy a függvényértékeket (1) percenként, (2) másodpercenként, valamint (3) tized másodpercenként számolják ki! A trapézszabály alkalmazásához használják mind a Maxima sum függvényét, mind az Excel-t. Melyik program a hatékonyabb a gyakorlatban? ((1) 20150,3 C, (2) 8092,1 C és (3) 8071,5 C)
- c) Készítsék el az $I(t)$ függvény ábráját, és ennek alapján magyarázzák meg, miért kell olyan sűrűn függvényértéket számolni a trapézszabály alkalmazásakor. hogy pontos integrálértéket kapjunk?
- d) A fentiek alapján javasoljanak módot arra, hogyan lehetne a trapézszabályt hatékonyabban alkalmazni!
- B84. A hidrogénatom 4s pályafüggvényének négyzete megadja az elektron tartózkodási valószínűségét az atommagtól való távolság függvényében egy adott irányban (más néven elektronsűrűség):

$$\Psi^2(r) = \left(\frac{1}{1536 \sqrt{\pi}} \cdot (192 - 144r + 24r^2 - r^3) \cdot e^{-r/4} \right)^2,$$

ahol r az atommagtól mért távolság Bohr-egységben. Számítsák ki azokat a távolságokat, ahol az elektronsűrűség maximumot mutat! A három távolságot a 2,0–5,0, a 7,0–12,0 és a 16,0–30,0 Bohr-egység tartományokban keressék! (Ennek megértéséhez érdemes ábrázolni a függvényt az $r=0$ –30 Bohr-egység tartományban.) (3,420, 9,904, 22,676 Bohr-egység)

2.8. Bevezetés a SciDavis/QtiPlot program használatába

Telepítés, leírások:

SciDavis ([honlap](#)):

Windows: a [scidavis.2.8.0-win-dist.msi](#) fájl a [ebben a könyvtárban](#).

Linux: a legtöbb disztribúció tartalmazza a SciDavis csomagot, így a legkényelmesebb a csomagkezelővel (package manager) telepíteni.

Mac OS X: a [scidavis-2.8-mac-dist.dmg](#) fájl [ebben a könyvtárban](#).

QtiPlot (a [hivatalos honlapon](#) keresztül a demo és fizetős verziók bármelyik operációs rendszerre letölthetők):

Windows: A [legális és ingyenes verziók](#) közül érdemes a [0.9.8.9 verziót](#)¹ telepíteni. Ebből a telepítőtől sajnos hiányzik a python27.dll fájl, ami viszont benne van a régebbi [0.9.8.3 verzióban](#)², vagy külön letölthető pl. [ezen a webcímen](#) keresztül (bármelyik 32 bites verzió megfelel). Ezt a fájlt be kell másolni abba a könyvtárba, ahol a qtiplot.exe van.

Linux: A legtöbb disztribúció tartalmazza a QtiPlot csomagot, így a legkényelmesebb a csomagkezelővel (package manager) telepíteni.

Mac OS X: <http://www.macupdate.com/app/mac/18834/qtiplot> (2018-ban működött, de kicsit régi, 2019-re eltűnt, jelenleg csak a demo és fizetős verziók érhetők el.)

Segédanyagok:

- A SciDavis angol nyelvű leírása [online és letölthető formában](#).
- A QtiPlot angol nyelvű leírása [online formában](#), valamint [letölthető PDF formátumban](#).

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

- függvényábrázolás
- nemlineáris illesztés/paraméterbecslés/regresszió
- alapelemek a QtiPlot/SciDavis programban (táblázat/table, ábraablak/plot window, megjegyzés/note, eredményablak/result log window, projektablak/project manager)

Feladatok:

- B85. Az argon gáz van der Waals állandóinak meghatározásához 1,00 mol anyagmennyiségű, tiszta, -72°C -os gáz térfogatát különböző értékekre beállítva mérték a gáz nyomását. A következő adatokat kapták:

¹Ez egy 7-Zip programmal tömörített fájl, amit a Windows nem tud kezelni, de több ingyenes és szabadon letölthető fájlkezelő (többek között a Total Commander, Multi Commander, Far, vagy akár a 7-Zip) igen.

²Ez szintén egy tömörített fájl, de ZIP formátumban, így a Windows Explorer/Intéző is használható a kibontására.

V/m^3	5.0×10^{-5}	5.1×10^{-5}	5.2×10^{-5}	5.3×10^{-5}	5.4×10^{-5}	5.5×10^{-5}	5.6×10^{-5}
p/Pa	$3.87 \times 10^{+7}$	$3.59 \times 10^{+7}$	$3.37 \times 10^{+7}$	$3.16 \times 10^{+7}$	$2.95 \times 10^{+7}$	$2.79 \times 10^{+7}$	$2.65 \times 10^{+7}$
V/m^3	5.7×10^{-5}	5.8×10^{-5}	6.0×10^{-5}	6.1×10^{-5}	6.5×10^{-5}	7.0×10^{-5}	7.4×10^{-5}
p/Pa	$2.54 \times 10^{+7}$	$2.41 \times 10^{+7}$	$2.21 \times 10^{+7}$	$2.03 \times 10^{+7}$	$1.85 \times 10^{+7}$	$1.63 \times 10^{+7}$	$1.49 \times 10^{+7}$
V/m^3	7.9×10^{-5}	9.0×10^{-5}	1.01×10^{-4}	1.19×10^{-4}	1.40×10^{-4}	1.60×10^{-4}	1.80×10^{-4}
p/Pa	$1.36 \times 10^{+7}$	$1.22 \times 10^{+7}$	$1.11 \times 10^{+7}$	$9.63 \times 10^{+6}$	$8.69 \times 10^{+6}$	$7.65 \times 10^{+6}$	$7.13 \times 10^{+6}$
V/m^3	2.01×10^{-4}	2.21×10^{-4}	2.41×10^{-4}	2.60×10^{-4}	2.80×10^{-4}	3.01×10^{-4}	
p/Pa	$6.52 \times 10^{+6}$	$6.24 \times 10^{+6}$	$5.80 \times 10^{+6}$	$5.42 \times 10^{+6}$	$4.84 \times 10^{+6}$	$4.62 \times 10^{+6}$	

Határozzák meg az argon gáz van der Waals állandóit (a és b) a

$$\left(p + \frac{n^2 \cdot a}{V^2}\right) \cdot (V - n \cdot b) = n \cdot R \cdot T \quad \longrightarrow \quad p(V) = \frac{n \cdot R \cdot T}{V - n \cdot b} - \frac{n^2 \cdot a}{V^2}$$

van der Waals gázegyenlet jobboldali formája alapján a QtiPlot (vagy SciDavis, esetleg a Maxima) program segítségével, nemlineáris paraméterbecsléssel! $R=8,314 \text{ J/mol/K}$ és $0^\circ\text{C}=273,15 \text{ K}$.

$$(a=(0,1367 \pm 0,0008) \text{ Pa m}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ és } b=(3,211 \pm 0,0008) \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{mol})$$

(Csak érdekességként egy szerves kémiai kérdés: Vajon miért éppen -72°C -on lehetett ezeket az adatokat megmérni?)

- B86. A QtiPlot/SciDavis kézikönyvének 1.3 alfejezetét értsék meg az 1.3.2 és 1.3.3 szakaszok kivételével!
- B87. A QtiPlot/SciDavis kézikönyvének 2.1, valamint 2.3 alfejezeteit értsék meg, és az ebben lévő ábrákat reprodukálják a programban!
- B88. Rajzolják meg a B70.–B72.. feladatokhoz (35. o.) és (35. o.) levezetett függvényeket a (wx)Maxima, QtiPlot vagy SciDavis programok segítségével!
- B89. Rajzolják meg a B79.. feladatban (36. o.) megadott függvényeket a (wx)Maxima/QtiPlot/SciDavis programok segítségével!
- B90. Rajzolják meg a B83.. feladat (36. o.) szövegében megadott áramerősség – idő függvényt a (wx)Maxima/QtiPlot/SciDavis programok segítségével!
- B91. Rajzolják meg a B84.. feladat (37. o.) szövegében megadott tartózkodási valószínűség – távolság függvényt a (wx)Maxima/QtiPlot/SciDavis programok segítségével, a függő változó tengelyén logaritmikus beosztást használva!
- B92. Rajzolják meg a B16.. feladat (27. o.) szövegében megadott kátrány- és nikotin mennyiségeket az évek számának függvényében a QtiPlot/SciDavis programok segítségével úgy, hogy a baloldali függőleges tengelyen a nikotin-, a jobboldali függőleges tengelyen pedig a kátránytartalmat tüntetik fel!
- B93. A B17.. feladatban (27. o.) megadott adatokból a QtiPlot/SciDavis programok segítségével határozzák meg nemlineáris paraméterbecsléssel az Arrhenius-egyenlet $\left(k(T) = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}\right)$ paramétereinek értékét és szórását!
- B94. A B19.. feladatban (28. o.) megadott adatokból a QtiPlot/SciDavis programok segítségével határozzák meg nemlineáris paraméterbecsléssel a k , V_0 és V_∞ paraméterek értékét és szórását mind a három megadott hőmérsékleten, tudva, hogy a $V(t) = V_\infty + (V_0 - V_\infty) \cdot e^{-k \cdot t}$ összefüggés érvényes a mért térfogat – idő adatpárookra!
- B95. A B36.. feladatot (30. o.) oldják meg a QtiPlot/SciDavis programok valamelyikének használatával úgy, hogy a program nemlineáris paraméterbecslési képességeit használják a feladatban megadott adatokra, modellként a 31. oldalon található (2.2) egyenletet alkalmazva! Természetesen linearizálás nélkül csak egyféle módon számolható az eredmény. Vigyázni kell arra is, hogy a feladatban a meghatározandó adatot x jelöli, míg ez a jelölés a fenti programokban a független változónak van fenntartva. Hasonlítsák össze a linearizálással és a nemlineáris paraméterbecsléssel kapott eredményeket, különös tekintettel a szórásaikra, és próbálják értelmezni az eltéréseket!
- ($x=5,001 \pm 0,013$)
- B96. Egy szerves kémiai reakcióban a termék szigorúan elsőrendű kinetika szerint képződik. A reakcióelegyből időnként (t) mintát véve meghatározták a konverzió százalékos értékét (vagyis az elméletileg várható érték hány százaléka képződött az adott pillanatig), és a következő adatokat kapták:

t/perc	5	30	60	120	240	360	1440
%-os konverzió	2	11	22	36	48	56	63

Az elsőrendű kinetika miatt a konverziófok egy adott pillanatban a $\%_{\max} \cdot (1 - e^{-k \cdot t})$ kifejezéssel adható meg, ahol $\%_{\max}$ a konverzió maximális foka és k az elsőrendű sebességi állandó. A táblázat adatai és a megadott kifejezés segítségével határozzák meg a kifejezésben található két paramétert, a QtiPlot/SciDavis programok (esetleg a Maxima) valamelyikének nemlineáris illesztési képességeit alkalmazva.

$$(\%_{\max}=62 \pm 1 \text{ és } k=(0,0068 \pm 0,0003) \text{ min}^{-1})$$

2.9. Bevezetés a Octave/MATLAB program használatába

Octave telepítése, leírások: Honlap: <https://www.gnu.org/software/octave/>

Windows: A <https://ftp.gnu.org/gnu/octave/windows/> könyvtárban vannak a telepítő fájlok.

Linux: A legtöbb disztribúció tartalmazza az Octave csomagot, így a legkényelmesebb a csomagkezelővel (package manager) telepíteni. Ez általában régebbi verziókat telepít, ha a legújabbat akarjuk, kövessük a <https://wiki.octave.org/Category:Installation> internet oldal utasításait.

Mac OS X: Utasítások a https://wiki.octave.org/Octave_for_macOS internet oldalon vannak.

Segédanyagok:

- Az octave_matlab_bevezet.m fájlban szereplő parancsokat, függvényeket, változókat, jelöléseket lehet használni a ZH-ban. Konkrétan:

függvények: abs, cos, exp, fsolve, hist, inv, linspace, log, ode15s, num2str, ones, pi, plot, prod, rand, randn, sin, size, sqrt, text, ylim,

parancsok: end, endfunction, for, function, grid, pause, hold,

jelölések: ,, ;, %, :, =, +, -, *, /, ^, .+, .-, .*, ./, .^, ' és a [] zárójelpár.

- www.gnu.org/software/octave/octave.pdf

- Keressen az „octave manual” kifejezésre, az első 20–30 találat 90 %-a jó.

MATLAB telepítése: <https://u-szeged.hu/download.php?docID=105051>

Néhány, az internetről legálisan letölthető könyv:

- Svein Linge, Hans Petter Langtangen, *Programming for Computations – MATLAB/Octave*, Springer Open
- Alfio Quarteroni, Fausto Saleri, Paola Gervasio, *Scientific Computing with MATLAB and Octave*, 4th edition, Springer
- Jesper Schmidt Hansen, *GNU Octave Beginner's Guide*, Packt Publishing Open, 2011
- Andreas Stahel, *Octave at BFH-TI Biel*, 2017
- Jason Lachniet, *Introduction to GNU Octave*, 3rd edition, 2020
- Jim Sizemore, John Paul Mueller, *MATLAB For Dummies*, Wiley, 2015

Fogalmak, definíciók, kulcsszavak:

- „fejlett grafikus számológép”
- mátrixorientált számolások
- programozhatóság

Feladatok:

B97. Az Octave/MATLAB program segítségével határozzák meg a $\text{Pb} + \text{O}_2 = \text{Pb}_3\text{O}_4$ reakcióegyenlet sztöchiometriai együtthatóit!

B98. Az Octave/MATLAB program plot parancsának segítségével rajzolják meg a B79.. feladatban megadott függvényeket!

B99. Az Octave/MATLAB program fsolve függvényének segítségével oldják meg a a B45.–B74.., B82.. és B84.. feladatokat (34. o.)–(35. o.), (36. o.) és (37. o.)!

Függelék

F1. Az elemek standard relatív atomtömegei a periódusos rendszerben

1

IA

1

1,0080
±0,0002
hidro-
gén

2

IIA

2

6,94
±0,06
lítium

3

IIIB

3

22,990
±0,001
nátrium

4

IIIV

4

24,305
±0,002
magné-
zium

5

VB

5

44,956
±0,001
szkan-
dium

6

VI

6

47,867
±0,001
titán

7

VII

7

50,942
±0,001
vanádi-
um

8

VIII

8

51,996
±0,001
króm

9

IIIX

9

54,938
±0,001
man-
gán

10

IX

10

55,845
±0,002
vas

11

X

11

58,933
±0,001
kobalt

12

XI

12

58,693
±0,001
nikkel

13

IIIX

13

63,546
±0,003
réz

14

XII

14

65,38
±0,02
cink

15

IIIX

15

69,723
±0,001
gallium

16

XIII

16

72,630
±0,008
germán-
ium

17

XIV

17

74,922
±0,001
arzen

18

XV

18

78,971
±0,008
szelén

19

XVI

19

79,904
±0,003
bróm

20

XVII

20

83,798
±0,002
kripton

21

XVIII

21

85,468
±0,001
rubídi-
um

22

XIX

22

87,62
±0,01
stronci-
um

23

XX

23

88,906
±0,001
ittrium

24

XXI

24

91,224
±0,002
cirkóni-
um

25

XXII

25

92,906
±0,001
nióbi-
um

26

XXIII

26

95,95
±0,01
molib-
dén

27

XXIV

27

(97)
0,13 Ps
techné-
cium

28

XXV

28

101,07
±0,02
ruténi-
um

29

XXVI

29

102,91
±0,01
ródium

30

XXVII

30

106,42
±0,01
palládi-
um

31

XXVIII

31

107,87
±0,01
ezüst

32

XXIX

32

112,41
±0,01
kadm-
ium

33

XXX

33

114,82
±0,01
indium

34

XXXI

34

118,71
±0,01
ón

35

XXXII

35

121,76
±0,01
anti-
mon

36

XXXIII

36

127,60
±0,03
tellúr

37

XXXIV

37

126,90
±0,01
jód

38

XXXV

38

131,29
±0,01
xenon

39

XXXVI

39

132,91
±0,01
cézium

40

XXXVII

40

137,33
±0,01
bárium

41

XXXVIII

41

138,91
±0,01
lantán

42

XXXIX

42

178,49
±0,01
hafni-
um

43

XL

43

180,95
±0,01
tantál

44

XLI

44

183,84
±0,01
volfrám

45

XLII

45

186,21
±0,01
rénium

46

XLIII

46

190,23
±0,03
ozmi-
um

47

XLIV

47

192,22
±0,01
íridium

48

XLV

48

195,08
±0,02
platina

49

XLVI

49

196,97
±0,01
arany

50

XLVII

50

200,59
±0,01
higany

51

XLVIII

51

204,38
±0,01
tallium

52

XLIX

52

207,2
±1,1
ólom

53

L

53

208,98
±0,01
bizmut

54

XI

54

(209)
4,0 Gs
polóni-
um

55

XII

55

(210)
29 ks
asztáci-
um

56

XIII

56

(222)
0,33 Ms
radon

57

XIV

57

(223)
1,32 ks
franci-
um

58

XV

58

(226)
50 Gs
rádium

59

XVI

59

(227)
0,69 Gs
aktíni-
um

60

XVII

60

(267)
58 ks
ruther-
fordium

61

XVIII

61

(268)
58 ks
dubni-
um

62

XIX

62

(269)
0,84 ks
szibor-
gium

63

XX

63

(270)
0,14 ks
bohri-
um

64

XXI

64

(269)
12 s
hassi-
um

65

XXII

65

(278)
4 s
meitné-
rium

66

XXIII

66

(281)
14 s
darm-
stadt-
ium

67

XXIV

67

(282)
0,12 ks
röntgé-
nium

68

XXV

68

(285)
30 s
koper-
nícium

69

XXVI

69

(286)
9,5 s
nihóni-
um

70

XXVII

70

(289)
2,1 s
fleróvi-
um

71

XXVIII

71

(290)
0,65 s
mosz-
kóvium

72

XXIX

72

(293)
70 ms
liver-
mórium

73

XXX

73

(294)
51 ms
tenesz-
sium

* Azoknak az elemeknek, amelyeknek nincs stabilis izotópjuk, a relatív atomtömegük nem adható meg. Ezen elemek esetében a megerősítetten leghosszabb élettartamú izotópjuk tömegszáma van megadva zárójelben, és ennek felezési ideje másodpercben a megfelelő SI prefixummal. Ez alól négy elem kivétel (a Bi, Th, Pa és U), mert ezeknek jellemző összetétele van a földkéregben, ezért a relatív atomtömegük megadható. A teljesség kedvéért ezen négy izotóp tömegszáma és a felezési ideje a következő: $t_{1/2}({}^{209}\text{Bi})=0,63\text{ Rs}$, $t_{1/2}({}^{232}\text{Th})=0,44\text{ Es}$, $t_{1/2}({}^{231}\text{Pa})=1,0\text{ Ts}$, valamint $t_{1/2}({}^{238}\text{U})=0,14\text{ Es}$.

F2. A számításokban 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
$p^\ominus$		(egyben a standard nyomás is [†])
R	8,314 $\frac{\text{J}}{\text{mol K}}$	egyetemes gázállandó
T_0	-273,15 °C	abszolút nulla fok

[†]Ez azonban egyáltalán nem egyértelmű. Ez az érték érvényes a NIST és az EPA szervezetek, valamint 1982-ig a IUPAC szerint is. Ezután a IUPAC megváltoztatta a definícióját 100000 Pa-ra, de a többi nem, mert az a régebbi, atmoszféra nyomásegységen alapuló adatgyűjteményeket (pl. CRC Handbook) használhatatlanná teszi. A példák megoldásában a 101325-ös számértéket használjuk, mert az elérhető feladatgyűjtemények többsége ezt használja.

F3. Információk az időjárási adatokról

Statisztikai számolásokat a legtöbbször csak rengeteg adat alapján érdemes számolni. Egy mindenki számára nyilvános adatbázis az **európai időjárás napi adatai** 1950 óta.¹ Ez az adatbázis több tucat Gbyte-nyi adatot tartalmaz speciálisan tömörített formában. Az adatok kinyeréséhez speciális számítógépes tudás szükséges, ezért néhány választott európai település esetében az adatokat lementettük szövegfájlok formájában, és **egyetlen tömörített fájlban** érhetők el a kurzus honlapján. A városokat² a következő megfontolások alapján választottuk:

Szeged(Hungary) és Budapest(Hungary) nyilván a legfontosabb városok számunkra.

Hammerfest(Norway) hivatalosan Európa legészakibb városa a Golf-áramlás végénél.

Kiruna(Sweden) szintén északi város, de már a Skandináv-hegység másik oldalán.

Murmansk(Russia) a világ legnagyobb városa az északi sarkkör felett.

Reykjavik(Iceland) és Stockholm(Sweden) a világ legészakibb fővárosai, valamint Stockholm az egyik legkevesbé szeles város.

Ierapetra(Greece) és Limassol(Cyprus) Európa legdélibb városai, attól függően, hogy Ciprust Ázsiához vagy Európához soroljuk.

Nizhny Novgorod(Russia) a legszárazföldibb éghajlatú nagyváros az adatbázisban.

Dundee(United Kingdom) Gyakorlatilag azonos szélességi körön van, mint Nizhny Novgorod, de óceáni éghajlattal rendelkezik.

Moscow(Russia) és Madrid(Spain) szárazföldi éghajlatú nagyvárosok, emellett Madridban van az egyik legalacsonyabb páratartalom.

Copenhagen(Denmark) és Mira(Portugal) óceáni éghajlatú városok azonos szélességi körön, mint Moscow és Madrid.

Athens(Greece), Rome(Italy) és Napoli(Italy) dél-európai nagyvárosok, emellett Athens a legmelegebb város nyáron Európában.

Grussian(France) Európa egyik legszelesebb települése.

Amsterdam(Netherlands) az egyik legnagyobb páratartalmú város az európai kontinensen.

Minden szövegfájl egy adott város napi időjárási adatát tartalmazza 1920. január 1-étől 2022. december 31-éig, habár sok adat hiányzik, egyes városok esetében akár teljes adatsorok is. Az adat lehet napi átlag, maximum vagy minimum hőmérséklet, valamint átlagos légköri nyomás, csapadékmennyiség, napsugárzás teljesítmény, szélesebbség vagy relatív páratartalom. A fájlok neve jelzi az adatot és a várost is. Minden fájl szerkezete a következő:

- Az első sor mutatja, hogy milyen adatról és melyik városról van szó, valamint megadja a város tengerszint feletti magasságát, földrajzi szélességi és hosszúsági körét.
- A második sor a címsor az adatokhoz.
- Minden további sorban öt adat van, az év, hónap és nap, a mérés dátuma ún. EXCELtime formában, valamint a mért adat. Ha ezeket az adatokat importáljuk az EXCEL-be és a negyedik oszlop adatainak formátumát dátumformára állítjuk, akkor az az adott nap dátumát adja meg.
- Ha vannak hiányzó adatok, akkor azt a fájl utolsó sora jelzi.

¹Az adatok egy része 1920-tól is elérhető.

²A városok neve itt és a feladatokban is angolul van megadva úgy, ahogy az az eredeti E-OBS adatbázisban is szerepel.

F4. A (szórás/hiba)terjedés képleteinek táblázata

F.1. táblázat. A szórás- és/vagy hibaterjedés számolásához szükséges összefüggések. A következő képletekben a kiindulási adat(ok), amely(ek)nek a szórása is ismert: $X \pm \sigma_X$ és $Y \pm \sigma_Y$. Ezen adat(ok) felhasználásával a számolt eredmény Z , és ennek szórása σ_Z . Az állandó, szórás nélküli értékek jele a . A trigonometrikus függvényeknél a szög és a szórása is radiánban értendő. Az adatokban egy „ $\pm$ ” jel választja el az adat értékét és szórását.

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

A szórás-terjedés számítása gyakori feladat az értékeléskor. A szórás fogalma sokszor keveredik a hibáéval, pedig a kettő nem ugyanaz, közöttük a kapcsolatot a

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

összefüggés adja meg (ld. részletesebben az F5 részben).

Sokak számára csak az alpműveletekre 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. Az F.1 táblázatban azokat a képleteket adjuk meg levezetések nélkül, amelyek segítségével a szórás számítása korrekt módon elvégezhető. Formailag teljesen azonos képletek vonatkoznak a hibaterjedésre is, csak a szórásokat a hibák értékeivel kell helyettesíteni.

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 alpműveletek és a legfontosabb függvénytranszformációk esetén milyen képletek alkalmazásával lehet az eredmény szórását megadni. Ha az eredmény több alpművelet vagy függvénytranszformáció alkalmazását igényli, akkor a táblázatban megadott képleteket egymás után többször alkalmazva juthatunk el a végeredményhez. Például:

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

F5. Illesztett egyenes meredeksége, tengelymetszete, ezek statisztikai jellemzői

A gyakorlatok során meghatározandó értékeket legtöbbször egy egyenes illesztéséből kapott meredekség és/vagy tengelymetszet értékéből kell számolni. Ez a rész levezetés nélkül összefoglalja azokat a képleteket, amelyek egy egyszerű számológéppel is lehetővé teszik az illesztett egyenes paramétereinek, valamint azok szórásainak számolását. Előbb azonban két fontos megjegyzést kell tenni:

- 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 (44. 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.
- Nagyon sok speciális és általános program (pl. a táblázatkezelők) képes egyenes paramétereinek illesztésére. A laboratóriumi gyakorlatok során 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

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

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,
- σ_b az illesztett egyenes tengelymetszetének szórása, és
- R^2 az illesztés korrelációs együtthatója.

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; S_{yy} az y_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:

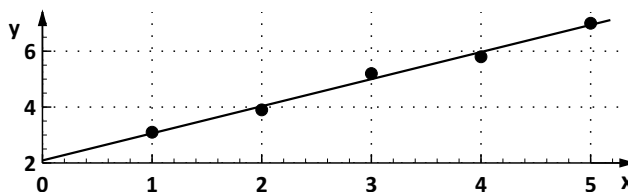
$$S_x = \sum_{i=1}^n x_i, S_y = \sum_{i=1}^n y_i, S_{xy} = \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i, S_{xx} = \sum_{i=1}^n x_i^2, S_{yy} = \sum_{i=1}^n y_i^2 \text{ és } S_\Delta = \sum_{i=1}^n (y_i - a \cdot x_i - b)^2.$$

³Sok 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.2. táblázat. Az egyenesillesztés számolási technikájának részletes bemutatása egy példán keresztül az $y=a \cdot x+b$ egyenlet alkalmazásával. A következőkben a 43. 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:

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

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

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

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

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

Merekség és tengelymetszet értéke (F.2a), valamint (F.3a) alapján:

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

Részeredmény:

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

Merekség és tengelymetszet szórásának értéke (F.2b), valamint (F.3b) alapján:

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

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.1b), az (F.2b), valamint az (F.3b) képletekben a nevezőkben szereplő $n-1$ és $n-2$ kifejezések helyett csak n -nel számolnak.

Részeredmény:

$$S_{yy} = 3,1^2 + 3,9^2 + 5,2^2 + 5,8^2 + 7,0^2 = 134,5$$

Korrelációs együttható értéke (F.4):

$$\underline{\underline{R^2}} = \frac{(5 \cdot 84,7 - 15,0 \cdot 25,0)^2}{(5 \cdot 55,0 - 15,0^2) \cdot (5 \cdot 134,5 - 25,0^2)} = \underline{\underline{0,990421}}$$

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

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

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

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

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

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

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

$$b = \frac{S_{xx} \cdot S_y - S_x \cdot S_{xy}}{n \cdot S_{xx} - (S_x)^2} = \frac{\left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^n y_i \right) - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i \right)}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} \quad (\text{F.3a})$$

$$\sigma_b = \sqrt{\frac{n \cdot S_{xx}}{n-2} \cdot \frac{S_\Delta}{n \cdot S_{xx} - (S_x)^2}} = \sqrt{\frac{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2}{n-2} \cdot \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - a \cdot x_i - b)^2}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}} \quad (\text{F.3b})$$

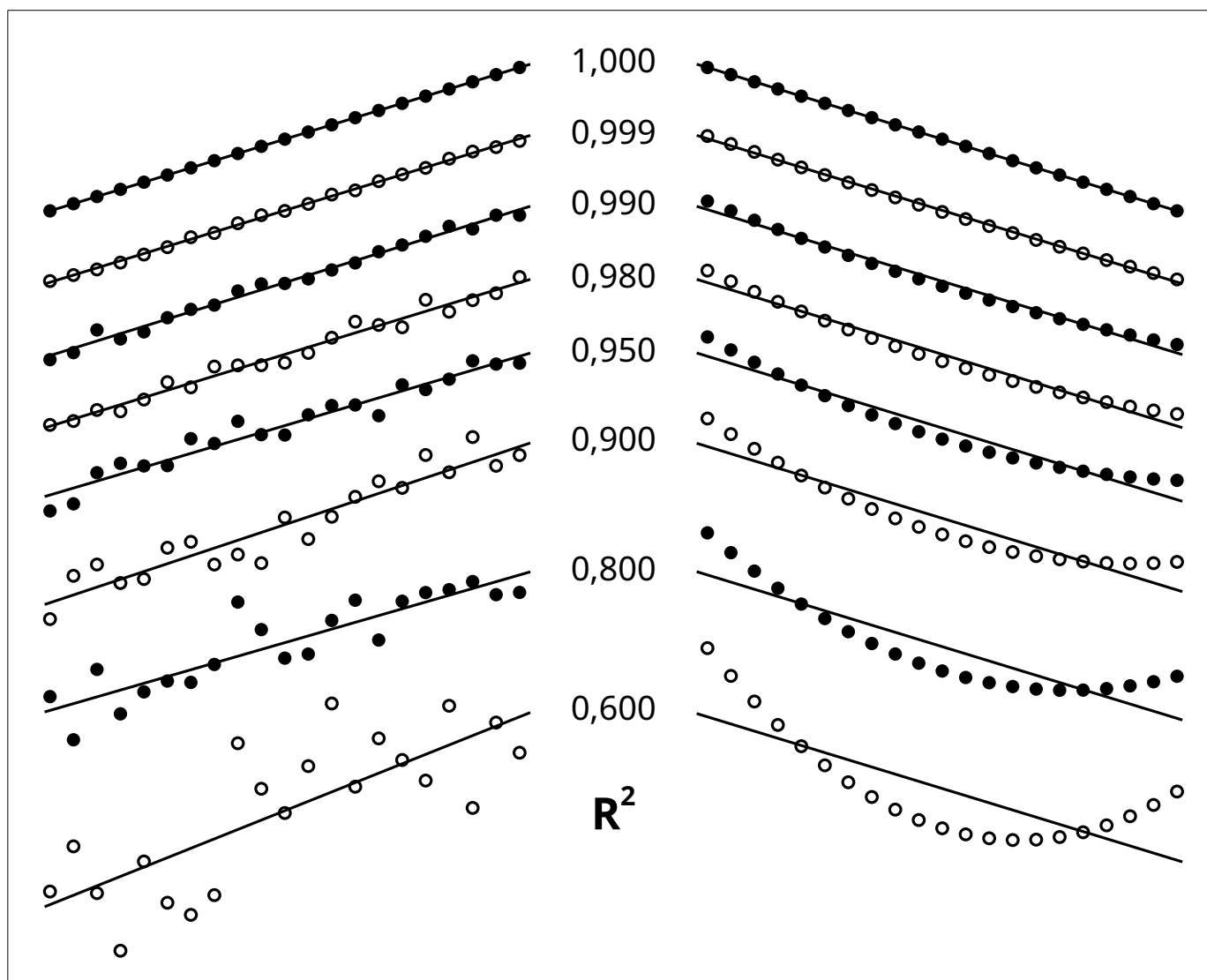
Az illesztés korrelációs együtthatója (R^2):

$$R^2 = \frac{(n \cdot S_{xy} - S_x \cdot S_y)^2}{(n \cdot S_{xx} - (S_x)^2) \cdot (n \cdot S_{yy} - (S_y)^2)} = \frac{\left(n \cdot \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^n y_i \right) \right)^2}{\left(n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 \right) \cdot \left(n \cdot \sum_{i=1}^n y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)^2 \right)} \quad (\text{F.4})$$

F5.1. A korrelációs együttható szemléltetése

A korrelációs — vagy más neven determinisztikus vagy meghatározási — együttható azt fejezi ki, hogy az egyenes, mint az adatok közötti összefüggést megadó modell, milyen mértékben képes leírni az (x_i, y_i) adatpárok összefüggését, így az illeszkedés mértékének egyik mérőszáma. Másképp fogalmazva R^2 azt mondja meg, hogy milyen erős a lineáris kapcsolat a függő és független változók adatai között. Minél közelebb van R^2 értéke egyhez, annál valószínűbb a lineáris kapcsolat. A közel szót komolyan kell venni! Szemléletesen pl. a 0,95-ös érték is közel van 1-hez, de ha R^2 értéke ennyi, akkor a lineáris kapcsolat már nehezen valószínűsíthető, vagy az adatok nagy szórása, vagy azok menete miatt (ld. az F.1. ábrát a 46. oldalon). Általánosságban az mondható, hogy 10–20 mért adat és három értékes jegyre pontos mérések esetén 0,995 vagy nagyobb érték valószínűsíti a lineáris összefüggést, míg 0,98 alatti érték már pontatlanabb mérések esetén is kérdőjelessé teszi azt. Jóval több adat (több, mint 100) esetén a fenti határok 1–2%-kal csökkenhetnek.

Az F.1. ábra (46. oldal) jól szemlélteti a leírtakat. Az ábrázolt 16 adatsor x_i értékei és a függő változók tartománya ugyanaz, csak az y_i értékekben változik a véletlen hibák nagysága, vagy a görbék hajlásának erőssége a kívánt R^2 -nek megfelelően.



E.1. ábra. A korrelációs együttható (R^2) értékeinek értelmezése. A bal oldalon normális eloszlású hibákkal terhelt, lineáris összefüggésben lévő pontokra illesztett egyenesek láthatók; míg a jobb oldalon azonos R^2 értékű, de parabolák egyes részeinek pontjaira illesztett egyenesek vannak feltüntetve.

F6. A Brønsted-egyenlet levezetése és egyszerűsített formái

Jelölések:

- S egy egyértékű gyenge sav (az esetleges töltések nincsenek jelölve),
 B a gyenge sav konjugált bázisa (deprotonált formája, az esetleges töltések is sincsenek feltüntetve),
 [S] a sav egyensúlyi koncentrációja,
 [B] a bázis egyensúlyi koncentrációja,
 c_S a sav bemérési (más néven analitikai) koncentrációja,
 c_B a bázis bemérési (vagy analitikai) koncentrációja,
 $[H^+]$ a hidrogénion (vagy pontosabban hidroxóniumion) egyensúlyi koncentrációja,
 $[OH^-]$ a hidroxidion egyensúlyi koncentrációja,
 K_v a vízionszorzat,
 K_d a gyenge sav disszociációs egyensúlyi állandója, valamint
 $pH = -\lg[H^+]$.

A Brønsted-egyenlet segítségével kiszámolhatjuk olyan oldatok hidrogénion koncentrációját, – vagy ami ezzel egyenértékű, a pH-ját, – amelyekben az oldott anyag egy egyértékű gyenge sav és/vagy annak konjugált bázisa. Az ilyen oldatokban a következő két egyensúly játszik szerepet: $S \rightleftharpoons B + H^+$ (vagy más formában $S + OH^- \rightleftharpoons B + H_2O$), valamint $H^+ + OH^- \rightleftharpoons H_2O$.

F6.1. Az egyenlet levezetése

Az oldatban érvényes anyagmérleg egyenletek:

$$c_S = [S] + [H^+] - [OH^-] \quad \text{és} \quad c_B = [B] + [OH^-] - [H^+], \quad (F.5)$$

valamint az egyensúlyokat leíró tömeghatás egyenletek:

$$K_d = \frac{[H^+] \cdot [B]}{[S]} \quad \text{és} \quad K_v = [H^+] \cdot [OH^-]. \quad (F.6)$$

Az (F.6) első egyenletéből a hidrogénion koncentrációját kifejezve, majd az (F.5) egyenletekből a sav és a bázis egyensúlyi koncentrációit behelyettesítve, és végül a hidroxidion koncentrációját a vízionszorzatot megadó egyenletből kifejezve:

$$[H^+] = K_d \cdot \frac{[S]}{[B]} = K_d \cdot \frac{c_S - [H^+] + [OH^-]}{c_B + [H^+] - [OH^-]} = [H^+] = K_d \cdot \frac{c_S - [H^+] + \frac{K_v}{[H^+]}}{c_B + [H^+] - \frac{K_v}{[H^+]}} \quad (F.7)$$

ahol a bekeretezett rész a Brønsted-egyenlet. Megfelelő átalakításokkal ennek polinomiális formáját is megkaphatjuk (szintén bekeretezve az alábbi egyenletek között). Ha ennek az egyenletnek a bal oldalát függvényként fogjuk fel, akkor annak deriváltjai segítségével a Brønsted-egyenlet tulajdonságai könnyen elemezhetők.

$$\begin{aligned} f([H^+]) &= [H^+]^3 + (c_B + K_d) \cdot [H^+]^2 - (K_v + K_d \cdot c_S) \cdot [H^+] - K_d \cdot K_v = 0 \\ f'([H^+]) &= 3 \cdot [H^+]^2 + 2 \cdot (c_B + K_d) \cdot [H^+] - (K_v + K_d \cdot c_S) \\ f''([H^+]) &= 6 \cdot [H^+] + 2 \cdot (c_B + K_d) \end{aligned} \quad (F.8)$$

F6.2. Az egyszerűsített pH-számoló formulák gyenge sav, vagy ennek konjugált bázisa oldatában

Gyenge sav oldatában nincs oldott bázis és a hidrogénion koncentrációja mellett a hidroxidioné elhanyagolható:

$$[H^+] = K_d \cdot \frac{c_S - [H^+] + \frac{K_v}{[H^+]}}{\cancel{c_B} + [H^+] - \frac{K_v}{[H^+]}} \longrightarrow [H^+]^2 + K_d \cdot [H^+] - K_d \cdot c_S = 0 \quad (F.9)$$

Ha még a disszociáció mértéke is kicsi (nem több 1–2 %-nál), akkor a hidrogénion koncentrációja is elhanyagolható a gyenge sav analitikai koncentrációjához képest, és a röviden gyökös képletnek nevezett összefüggés lesz érvényes:

$$[\text{H}^+] = K_d \cdot \frac{c_s - \cancel{[\text{H}^+]} + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}}{\cancel{c_B} + [\text{H}^+] - \frac{K_v}{[\text{H}^+]}} \longrightarrow \boxed{[\text{H}^+] = \sqrt{K_d \cdot c_s}}. \quad (\text{F.10})$$

A konjugált bázisok oldataiban hasonló módon lehet az egyszerűsített formulákat megkapni. Gyenge bázis oldatában nincs oldott sav és a hidrogénion koncentrációja hanyagolható el a hidroxidioné mellett:

$$[\text{H}^+] = K_d \cdot \frac{\cancel{c_s} - \cancel{[\text{H}^+]} + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}}{c_B + \cancel{[\text{H}^+]} - \frac{K_v}{[\text{H}^+]}} \longrightarrow \boxed{\begin{array}{l} c_B \cdot [\text{H}^+]^2 - K_v \cdot [\text{H}^+] - K_d \cdot K_d = 0 \\ \text{vagy } [\text{OH}^-]^2 + \frac{K_v}{K_d} \cdot [\text{OH}^-] - \frac{K_v}{K_d} \cdot c_B = 0 \end{array}}. \quad (\text{F.11})$$

Ha még a hidrolízis mértéke is kicsi (nem több 1–2 %-nál), akkor a hidroxidion koncentrációja is elhanyagolható a gyenge bázis analitikai koncentrációjához képest, és a gyökös képlet módosított formája lesz érvényes:

$$[\text{H}^+] = K_d \cdot \frac{\cancel{c_s} - \cancel{[\text{H}^+]} + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}}{c_B + \cancel{[\text{H}^+]} - \frac{K_v}{[\text{H}^+]}} \longrightarrow \boxed{[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_d \cdot K_v}{c_B}} \quad \left(\text{vagy } [\text{OH}^-] = \sqrt{\frac{K_v}{K_d} \cdot c_B} \right)}. \quad (\text{F.12})$$

F6.3. Az egyszerűsített pH-számoló formulák pufferek oldataiban

A hozzáadott bázis visszaszorítja a gyenge sav disszociációjának mértékét, ezért a $0,1 < c_s/c_B < 10$ tartományban a bemérési koncentrációkhoz képest mind a hidrogén, mind a hidroxid egyensúlyi koncentrációja elhanyagolható (egyszerű pufferképlet):

$$[\text{H}^+] = K_d \cdot \frac{c_s - \cancel{[\text{H}^+]} + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}}{c_B + \cancel{[\text{H}^+]} - \frac{K_v}{[\text{H}^+]}} \longrightarrow \boxed{[\text{H}^+] = K_d \cdot \frac{c_s}{c_B}}. \quad (\text{F.13})$$

Egyéb arányoknál az így számolt hidrogénion koncentráció csak közelítő. Ha ez az érték savas oldatra utal, akkor csak a hidroxidion koncentrációja hanyagolható el, és a pontosabb, ún. másodfokú pufferképletet kell használni:

$$[\text{H}^+] = K_d \cdot \frac{c_s - [\text{H}^+] + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}}{c_B + [\text{H}^+] - \frac{K_v}{[\text{H}^+]}} \longrightarrow \boxed{[\text{H}^+]^2 + (K_d + c_B) \cdot [\text{H}^+] - K_d \cdot c_s = 0}. \quad (\text{F.14})$$

Ha az egyszerű pufferképletből számolt hidrogénion lúgos kémhatást jelez, de kívül vagyunk a fent jelzett koncentráció-tartományon, akkor csak a hidrogénion koncentrációja hanyagolható el, és egy pontosabb, szintén másodfokú egyenletet kell megoldani:

$$[\text{H}^+] = K_d \cdot \frac{c_s - \cancel{[\text{H}^+]} + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}}{c_B + \cancel{[\text{H}^+]} - \frac{K_v}{[\text{H}^+]}} \longrightarrow \boxed{\begin{array}{l} c_B \cdot [\text{H}^+]^2 - (K_v + K_d \cdot c_s) \cdot [\text{H}^+] - K_d \cdot K_v = 0 \\ \text{vagy } [\text{OH}^-]^2 + \left(\frac{K_v}{K_d} + c_s \right) \cdot [\text{OH}^-] - \frac{K_v}{K_d} \cdot c_B = 0 \end{array}}. \quad (\text{F.15})$$

Korrektciók

2024. február 12-e óta a következő változtatások történtek:

2024.02.13: A korrelációs együtthatót magyarázó F5.1 fejezet be lett illesztve, így a régi jegyzetre való hivatkozások eltűntek a kurzus honlapjáról.

A második fejezet címének kurzuskódjai pontosítva lettek.