

Vyjádření výsledků

Literatura: František Opekar, Ivan Jelínek, Petr Rychlovský a Zbyněk Plzák:
Základní ANALYTICKÁ CHEMIE pro studenty, pro něž analytická chemie není hlavním studijním oborem, Praha 2002
Vláčil F. a kol: **Příklady z chemické a instrumentální analýzy**

1) Zaokrouhlování a platné číslice:

Zaokrouhlování: Výsledek musí obsahovat jen platné číslice

Platné číslice: Všechny jisté číslice v čísle + jedna nejistá (odhadnutá).

Experimentálně získané číslice:

jisté - jsou přímo "načárkovány" na kalibrované stupnici přístroje

nejistá - odhadujeme mezi dvěma kalibračními značkami

Pravidla pro určení počtu platných číslic:

a) Při sčítání a odečítání: Výsledek zaokrouhlit na stejný počet desetinných míst jako má číslo s nejmenším počtem desetinných míst.

Př: $2,005 + 7,1 + 0,02 = 9,125 = \mathbf{9,1}$

b) Při násobení a dělení: Výsledek zaokrouhlit tak, aby obsahoval stejný počet platných číslic jako číslo ve výpočtu s nejmenším počtem platných číslic.

Př: $24 \cdot 4,02 / 100,0 = 0,9648 = \mathbf{0,96}$

c) Při kombinacích (sčítání, odečítání, násobení a dělení): Dílčí výsledky se vyjádří číslicí mající o jedno platnou číslici víc než odpovídá jmenovaným pravidlům. Teprve konečný výsledek se zaokrouhlí na příslušný počet míst.

Př: $(35,2/10,113) \cdot (235,3 - 42,687) = 3,481 \cdot 192,61 = \mathbf{670,5}$

2) Statistické zpracování výsledků

Základní statistické hodnocení analytických výsledků:

A. Opakování analýzy téhož vzorku	
n	Počet opakovaných analýz
x_i (x_1 až x_n)	Výsledek i-tého měření
B. Vyloučení odlehlých výsledků	
$x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_{n-1} < x_n$	Deanův-Dixonův test odlehlosti – kritérium Q
R	Rozpětí; $R = x_{max} - x_{min}$ ($= x_n - x_1$)
$Q_1; Q_n$	$Q_1 = \frac{x_2 - x_1}{R}; Q_n = \frac{x_n - x_{n-1}}{R} \Rightarrow$ porovnání Q_1 a Q_n
$Q_1 > Q_k; Q_n > Q_k$	s tabelovanou hodnotou Q_k $x_1; x_n$ jsou odlehlé, pro další vyhodnocení vyloučit
C. Určení střední hodnoty x	
pro $n < 7$	Střední hodnotou je medián, \tilde{x}
pro $n > 7$	Střední hodnotou je aritmetický průměr, \bar{x}
D. Odhad směrodatné odchylky s	
pro $n < 7$	$s = k_n R$; k_n – tabelovaný koeficient pro daný počet n
pro $n > 7$	$s = \sqrt{\frac{\sum (\bar{x} - x_i)^2}{n - 1}}$
E. Variační koeficient (Relativní směrodatná odchylka v %)	
pro $n < 7$	$s_r = 100s / \tilde{x}$
pro $n > 7$	$s_r = 100s / \bar{x}$
F. Interval spolehlivosti	
pro $n < 7$	$L_{1,2} = K_n R$; K_n – tabelovaný koeficient pro daný počet n , R – rozpětí
pro $n > 7$	$L_{1,2} = ts / \sqrt{n}$; t – tabelovaný koeficient
G. Vyjádření výsledků	
pro $n < 7$	$\tilde{x} \pm L_{1,2}$ ($s_r = xy$ %) } výsledek musí být doplněn o $\bar{x} \pm L_{1,2}$ ($s_r = xy$ %) } počet paralelních stanovení, n
pro $n > 7$	

Tabulka statistických koeficientů pro testování odlehlosti, výpočet směrodatné odchylky a intervalu spolehlivosti, $\alpha = 0,05$

počet měření, n	k_n	K_n	Q_k	$\frac{t}{\sqrt{n}}$
2	0,8862	6,4	---	9,00
3	0,5908	1,3	0,941	2,48
4	0,4857	0,72	0,765	1,59
5	0,4299	0,51	0,642	1,24
6	0,3946	0,40	0,560	1,05
7	0,3698	0,33	0,507	0,92
8	0,3512	0,29	0,468	0,84
9	0,3367	0,26	0,437	0,77
10	0,3249	0,23	0,412	0,72

Vyjádření výsledků - cvičení

1. Uveďte počet platných číslic pro následující čísla:

4026 58,075 120 0,0525 14,1 14,100 $2,5 \cdot 10^3$

2. Zaokrouhlete na jedno desetinné místo:

1,63 0,551 15,890 0,06129 1,0009

3. Zaokrouhlete čísla tak, aby měla dvě platné číslice:

244 15,826 125 0,8560

4. Vyjádřete výsledky následujících početních výkonů správným počtem platných číslic:

$128,9 + 1,01 =$ $0,9877 \cdot 0,02 \cdot 25,85 \cdot 10^{-3} =$ $3,00 \cdot 1,012 =$
 $(10,5 + 1,155) \cdot 0,297 =$ $(1,25 \cdot 10^{-3} / 5) + 8 - 7,2 =$ $1,1 \cdot 6,006 =$

Statistické zpracování výsledků - cvičení

1. Při stanovení obsahu NaOH ve vzorku bylo 2,8132 g vzorku rozpuštěno v 50 ml vody, odebráno 10 ml, zředěno asi na 50 ml a alkalimetrickou titrací 0,5 M HCl ($f = 1,0127$) na fenolftalein byly zjištěny tyto spotřeby HCl pro 4 paralelní stanovení: 25,90 ml; 24,85 ml; 26,12 ml; 24,15 ml. Jaký je obsah NaOH ve vzorku?

$$M_r(\text{NaOH}) = 40$$

2. V organické látce byl nalezen tento obsah zinku: 16,84 %; 16,86 %; 16,91 %; 17,61 %. Vypočtěte průměr a interval spolehlivosti.

3. Titračním stanovením Mn ve standardním vzorku s obsahem 0,670 % Mn^{2+} bylo nalezeno:

0,69 %; 0,68 %; 0,70 %; 0,67 %; 0,67 %; 0,69 %; 0,66 %; 0,68 %; 0,67 %; 0,68 %; 0,68 %; 0,67 %; 0,69 %. Přesvědčte se, není-li titrační metoda zatížena soustavnou chybou.

$$t = 2,179$$