

GRAFIKONOK KÉSZÍTÉSE ÉS FIZIKAI, KÉMIAI MENNYISÉGEK MEGHATÁROZÁSA EGYENESILLESZTÉSSEL

Bevezetés

A fizikai és kémiai mennyiségek gyakran függenek egymástól, melyeket kísérletileg tanulmányozhatunk, és a mérési adatokból grafikont készíthetünk. A grafikon készítésének rendszerint az a célja, hogy további fizikai vagy kémiai mennyiségeket határozzunk meg a köztük levő összefüggésekből. Az egyenes illesztése nem bonyolult feladat sem vonalzó felhasználásával, sem zsebszámológéppel, ezért a fizikai és kémiai mennyiségek közötti összefüggéseket nagyon gyakran úgy alakítjuk át, hogy egy egyenes egyenletének feleljenek meg.

A gyakorlatokon milliméter-papíron vagy más, finom beosztású négyzetrácsos papíron készítjük el a grafikont, kézzel rajzolva fel a kísérleti pontokat. Majd az egyes mennyiségek közti összefüggésből a kívánt további mennyiségeket általában egyenesillesztés segítségével tudjuk meghatározni. (Haladó szinten az ábrázoláshoz és az illesztéshez is számítógépes programokat használhatunk.)

A grafikonkészítés lépései

A függő és a független változó azonosítása A grafikonon azt tüntetjük fel, hogy az általunk szabadon megválasztott független változó különböző értékeinél mekkora függő változó értékeket mértünk. Mindig a független változó szerepel a grafikon vízszintes tengelyén, a függő változó pedig a függőleges tengelyen. Ha az y mennyiséget ábrázoljuk az x mennyiség függvényében, akkor az x mennyiség a független változó, az y mennyiség pedig a függő változó, azaz a grafikonon az x mennyiség kerül a vízszintes, míg az y mennyiség a függőleges tengelyre.

A mennyiségekben bekövetkezett változások meghatározása A mérési eredmények alapján meghatározuk a függő és a független változók minimumát és maximumát, illetve ezek alapján az egyes változók értékében bekövetkezett maximális változást.

A tengelybeosztás Először eldöntjük, hogy a milliméter-papír hosszabb vagy rövidebb oldalán legyen a vízszintes tengely, és mekkora léptéket válasszunk (a fizikai mennyiség egységnyi változása hány cm-nek vagy milliméternek feleljen meg).

Az alkalmazandó általános alapelvek:

- A milliméter-papírt a lehető legjobban használjuk ki, vagyis minél nagyobb legyen az ábra, és minél kisebb az a „holt tartomány”, amelyben nem található kísérleti pontok. Általában akkor elfogadható a grafikon, ha a milliméter-papírnak mindkét irányában több, mint a felén található kísérleti pontok.
- Az ábrát könnyen tudjuk elkészíteni, azaz ne kelljen számológéppel számolgatni, hol lesz az adott független vagy függő változó érték a tengelyen. A legcélszerűbb, ha az illető mennyiség egységnyi változása 1 mm, 10 mm (=1 cm) vagy 10 cm-nek felel meg az adott tengelyen, de célszerű a kettes vagy ötös lépték is (2 mm, 2 cm, 20 cm vagy 5 mm, 5 cm), vagyis olyan lépték, amelynek használatakor 10-zel vagy 2-vel kell osztani vagy szorozni, mert ezt fejben is gyorsan és pontosan el tudjuk végezni. Saját érdekünkben soha ne válasszunk olyan léptéket, hogy pl. 3-mal vagy 11-gyel kelljen osztani-szorozni!
- A grafikonnak nem szükséges tartalmaznia azt a pontot, ahol az illető változó értéke zérus! Mindig csak kicsivel nagyobb tartományt ábrázolunk, mint amelyben mértünk; ha a változó zérus értéke ettől távol esik, akkor azt nem tüntetjük fel az ábrán!
Például ha a változó a pH, és a mérési pontjaink pH=0,9 és 11,2 között vannak, akkor kezdhetjük az adatok ábrázolását pH=0-nál, és feltüntetethetjük a tengelyen a pH=12,0 értéket is. Ilyenkor

egységnyi pH-változás lehet 1 cm vagy 2 cm (attól függően, hogy a pH-tengelyt a milliméter-papír rövidebb, 18 cm-es, vagy hosszabb, 27 cm-es oldalán vesszük fel); ekkor az első mért adat, $\text{pH}=0,9$ a tengelyek metszéspontjától 0,9 vagy 1,8 cm-re lesz, míg az utolsó 11,2 vagy 22,4 cm-nél. Ha azonban csak a lúgos tartományban mértünk, pl. $\text{pH}=7,3$ és $10,1$ között, a pH-tengely csak a 7,0 és 10,5 közötti tartományra terjed ki, és választhatunk pl. 1 egységnyi pH-változást 5 cm-nek, ha a milliméter-papír rövidebb oldalán lesz a pH-tengely. Vagyis a másik tengellyel való metszéspontban lesz $\text{pH}=7,0$, ettől 5 cm-re bejelölhetjük a $\text{pH}=8,0$, 10 cm-re a $\text{pH}=9,0$, 15 cm-re a $\text{pH}=10,0$ értékeket, sőt ezek között a pontok között sűrűbb beosztást is készíthetünk, pl. 5 mm-enként bejelölhetjük a tized pH-kat is a könnyebb ábrázolás érdekében, főleg ha sok kísérleti pontunk van.

Majd mind a független, mind a függő változó tengelyét berajzoljuk a milliméter-papírra a Descartes-i koordináta-rendszernek megfelelően. A legcélszerűbb léptéknek megfelelően bejelöljük a tengelyeken a beosztást egyenletesen és ráírjuk a változók jelét és mértékegységét is. Címet adunk a grafikonnak és nevünket, valamint a grafikon készítésének dátumát is feltüntetjük a grafikonon.

A kísérleti pontok ábrázolása Sorban megkeressük a megfelelő független változó értékeket a vízszintes tengelyen, és a ceruzát függőlegesen felvezetjük a hozzá tartozó függő változó értékig, majd bejelöljük a pontot egy X vagy + jellel.

A kísérleti görbe megrajzolása az ábrázolt pontokhoz illesztve Ha a pontokat rendre összekötjük, általában „cikkcakkos” görbét kapunk. Ez az esetek túlnyomó többségében a kísérleti hibák miatt van, a görbék valójában „sima” lefutásúak. Ezért a görbét nem a pontok összekötésével kapjuk meg, hanem a pontok szórását is figyelembe véve „illesztéssel”. Ha a pontok menetének görbülete van, a legegyszerűbb esetben szabadkézzel sima vonalat húzunk a pontok közé úgy, hogy lehetőleg a görbe fölött lévő pontok összes függő-változó eltérése a berajzolt görbéhez képest kb. megegyezzen a görbe alatti pontok összes eltéréseivel. Ha egyenest kell kapnunk, a vonalzót illesztjük így a pontok közé. Ha valamelyik kísérleti pontról tudjuk, hogy a méréskor valami miatt nagyobb hibát követtünk el, figyelmen kívül hagyjuk. Azt a pontot is kihagyhatjuk, amely a többihez képest sokkal jobban eltér a görbétől. Az egyenes behúzása során figyelembe nem vett pontokat bekarikázzuk, vagy egyéb módon jelezzük az illesztésből történő kihagyását. Természetesen lehetnek olyan pontok is, amelyek pontosan rajta vannak a berajzolt görbén.

További mennyiségek meghatározása a görbéből

Az egyenes paramétereinek meghatározása Az $y = ax + b$ egyenes egyenletében y a függő változót, x a független változót, míg a az egyenes meredekségét és b a tengelymetszetét jelöli.

A meredekség meghatározásához az egyenesről tetszőlegesen kiválasztunk két, az egyenes két szélén levő pontot. Célszerű olyan pontokat kiválasztani, amelyek egyszerűen leolvashatóak. Az egyenes meredeksége a két pont koordinátáiból meghatározható:

$$a = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}, \quad (1)$$

ahol y_1, x_1 és y_2, x_2 az egyik, illetve a másik ponthoz tartozó függő és független változók értéke. Vigyázzunk, hogy ne cseréljük fel a változók sorrendjét, nehogy a meredekség előjele megváltozzon, mert van negatív, és pozitív meredekségű egyenes is! Ne feledkezzünk meg a mértékegységekről sem! A tengelymetszet számítása az egyenes meredekségéből és az egyik, egyenesen levő leolvasott pont koordinátáiból számítható:

$$b = y_1 - a \cdot x_1 \quad (2)$$

További mennyiségek meghatározása az egyenesek adataiból A meredekségek és tengelymetszetek ismeretében az egyes fizikai vagy kémiai mennyiségek számíthatók.

Példa

Egy szilárd anyag oldhatósága az alábbi egyenlet szerint függ a hőmérséklettől

$$\lg x_{tel} = -\frac{\Delta H_0}{R \cdot 2,303} \frac{1}{T} + \text{konstans}, \quad (3)$$

ahol x_{tel} az anyag telített oldatban meghatározott anyagmennyiség-törtje, T a termodinamikai hőmérséklet, ΔH_0 az oldódási entalpia, és R az egyetemes gázállandó.

Az egyenlet alapján, ha $\lg x_{tel}$ -t ábrázoljuk az $1/T$ függvényében, akkor egy egyenest kapunk és az oldódási entalpia az egyenes meredekségéből számítható:

$$a = -\frac{\Delta H_0}{R \cdot 2,303}, \quad \text{azaz} \quad \Delta H_0 = -R \cdot 2,303 \cdot a. \quad (4)$$

A gyakorlat során a hallgatók különböző hőmérsékleten határozták meg egy szilárd anyag anyagmennyiség-törtjét az adott hőmérsékleten telített oldatban, melyet az 1. táblázat első két oszlopában összegeztünk.

1. táblázat. A példában alkalmazott adatok.

$t/^\circ\text{C}$	x_{tel}	T/K	$1/T/\text{K}^{-1}$	$\lg x_{tel}$
47,5	0,001135	320,7	0,003118	-2,945
44,7	0,001015	317,9	0,003146	-2,994
42,3	0,000886	315,5	0,003170	-3,053
37,8	0,000798	311,0	0,003215	-3,098
34,0	0,000690	307,2	0,003255	-3,161
28,1	0,000566	301,3	0,003319	-3,247

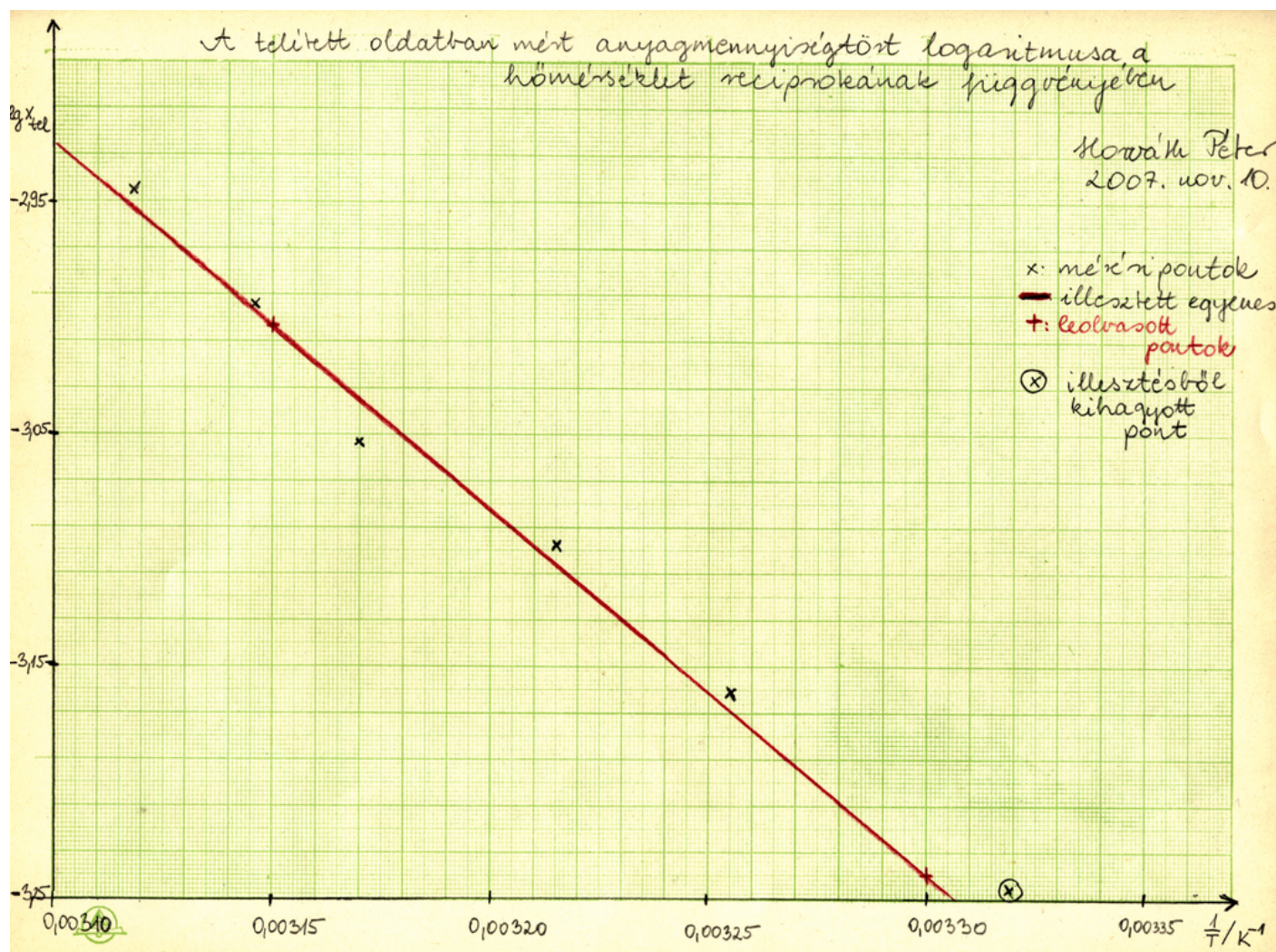
A függő és a független változó azonosítása A (3) egyenletben a függő változó $\lg x_{tel}$, amely az 1. táblázat 5. oszlopában, míg a független változó $1/T$, amely a 4. oszlopában található.

A mennyiségekben bekövetkezett változások meghatározása A független változó értékek benne vannak a $0,00310 \text{ K}^{-1} - 0,00335 \text{ K}^{-1}$ tartományban, ahol a változás $2,5 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$. A függő változó értékei $-2,945$ és $-3,247$ között vannak, így az összes változás $-0,302$. A grafikonon célszerű az ennél kicsivel nagyobb, de kerekesebb számokat tartalmazó $-2,94$ és $-3,25$ közé eső tartományt ábrázolni, amelyben az összes változás $-0,31$.

A tengelybeosztás A milliméter-papír hosszabb oldalán vesszük fel a vízszintes tengelyt, amelyen az $1/T$ célszerű léptéke, ha $1 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ -nyi változásának 10 cm -t feleltetünk meg. Átszámítva azt kapjuk, hogy 1 mm a vízszintes tengelyen $1 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ -nyi változást jelent. Az első beosztás a tengelyen $0,0031 \text{ K}^{-1}$ -nél van; ettől 10 cm -re lesz $1/T=0,0032 \text{ K}^{-1}$, 20 cm -re $0,0033 \text{ K}^{-1}$, és 25 cm -re lesz $1/T=0,00335 \text{ K}^{-1}$. A függőleges tengelyen célszerű, hogy a legalsó pont legyen $\lg x_{tel} = -3,25$, 5 cm -rel feljebb $-3,15$, 10 cm -nél $\lg x_{tel} = -3,05$, 15 cm -nél $-2,95$, tehát $0,1$ változás 5 cm -t jelent, melyből 1 mm a függőleges tengelyen $2 \cdot 10^{-3}$ változást jelöl.

A kísérleti pontok ábrázolása

A kísérleti görbe megrajzolása az ábrázolt pontokhoz illesztve A pontok ábrázolása után meghúzzuk az egyenest. Az utolsó mérési pont kilóg, ezért azt bekarikázzuk és az illesztésből kihagyjuk. A grafikonon feltüntetjük az egyes szimbólumok jelentését is.



1. ábra. A kézzel rajzolt grafikon.

Az egyenes paramétereinek meghatározása A meredekség meghatározásához kiválasztunk két tetszőleges pontot az egyenesen. Az első pont legyen $x_1=0,00315 \text{ K}^{-1}$ -nél. Olvassuk le a hozzá tartozó függő változó értéket, $y_1=-3,003$. A második pontot jelöljük ki pl. $x_2=0,00330 \text{ K}^{-1}$ -nél, ahol $y_2=-3,240$. Az egyenes meredeksége az (1) egyenletbe behelyettesítve

$$a = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} = \frac{-3,240 - (-3,003)}{0,00330 \text{ K}^{-1} - 0,00315 \text{ K}^{-1}} = \frac{-0,237}{0,00015 \text{ K}^{-1}} = -1580 \text{ K}.$$

A tengelymetszet kiszámítása a (2) egyenlet szerint:

$$b = y_1 - a \cdot x_1 = -3,003 - (-1580 \text{ K}) \cdot 0,00315 \text{ K}^{-1} = 1,974$$

Az egyenes egyenlete tehát

$$\lg x_{tel} = -1580 \text{ K} \frac{1}{T} + 1,974$$

További mennyiségek meghatározása az egyenesek adataiból Az egyenes meredekségéből ki lehet számolni az oldódási entalpiát a (4) egyenlet szerint:

$$\Delta H_0 = -R \cdot 2,303 \cdot a = -8,314 \text{ J}/(\text{K} \cdot \text{mol}) \cdot 2,303 \cdot (-1580 \text{ K}) = 30252 \text{ J/mol} = 30,3 \text{ kJ/mol}.$$