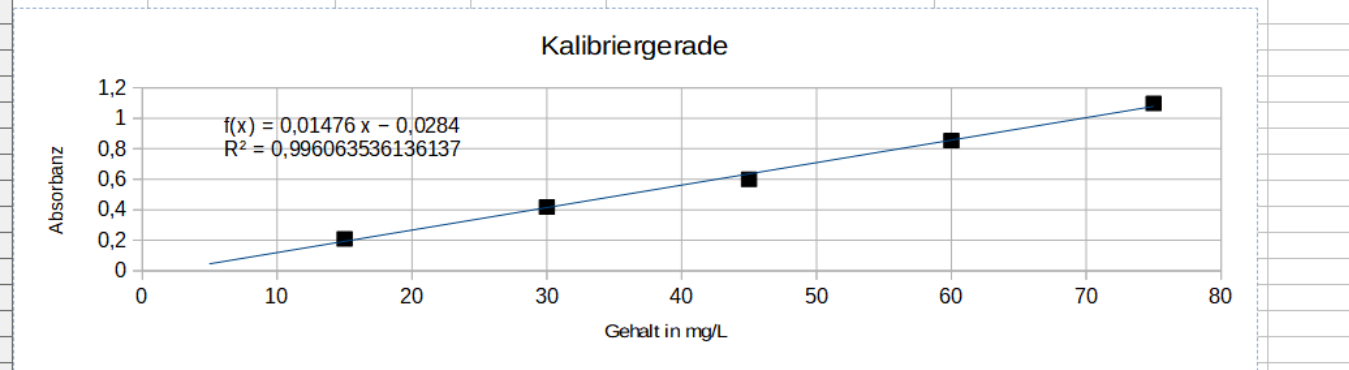


Kalibriergeraden erstellen mit einem Tabellenkalkulationsprogramm

Beispiel einer mit einem mit Tabellenkalkulationsprogramm erstellten Kalibriergerade (incl. Interpolation):

A	B	C	D	E	F	G
	Gehalt in mg/L	Absorbanz			Durch Funktion angezeigter Wert	
Kalibr 1	15	0,209		Steigung	0,01476	
Kalibr 2	30	0,418		y-Achsenabschnitt	-0,0284	
Kalibr 3	45	0,6		Erwartete Absorbanz für Probe 1	0,330268	
Kalibr 4	60	0,854		Erwarteter Gehalt für Probe 2	39,0749066075371	
Kalibr 5	75	1,098				
Probe1	24,3 siehe rechts					
Probe2	siehe rechts	0,548				



Statt auf Millimeterpapier selbst eine Kalibriergerade zu erstellen, ist es genauer, diese durch ein Computerprogramm erstellen zu lassen. Tabellenkalkulationsprogramme wie LibreOffice Calc können nicht nur Näherungsgeraden, sondern bei Bedarf auf Näherungskurven erstellen. Bei der Ermittlung der Näherungsfunktion (Regression) wird die Funktion, z.B. eine Gerade, so gelegt, dass etwas vereinfacht gesprochen, die Abstände zu den Messpunkten minimiert werden (streng genommen: Summe der quadratischen Abweichungen).

Vorgehensweise zur Erstellung

Vorbereitung: Installieren Sie LibreOfficePortable6.1.2.exe-Datei auf den lokalen Desktop oder Ihren USB-Stick ODER kopieren Sie den LibreOfficePortable-Ordner (Größe: ca. 550 MB) auf Ihren Massenspeicher (z.B. USB-Stick) oder auf den lokalen Desktop. Starten Sie die Datei LibreOfficeCalcPortable.

Zuerst erstellt man eine Tabelle mit den Messpunkten. Spalte links: Gehalt (z.B. mg/L oder % o.ä.). Spalte rechts daneben: Messwert (z.B. Absorbanz, Dicht o.ä.). Anschließend in Menüleiste durchklicken: → Einfügen → Diagramm erstellen → XY-Streudiagramm → Datenbereich angeben → Diagramm fertig stellen lassen.

Durch Doppelklick auf das Diagramm mit anschließendem Rechtsklick auf einen Datenpunkt kann man sich eine **Trendlinie einfügen** (= Kalibriergerade) und auch die Geradengleichung anzeigen lassen. Weitere Möglichkeiten betreffen das Verlängern der Gerade über den ersten und letzten Messpunkt hinaus. Lassen Sie auch das **Bestimmtheitsmaß (R²)** anzeigen. Es ist ein Maß, wie gut der lineare Zusammenhang ist. Idealwert bei absolut linearem Zusammenhang: 1,0000.

Weitere nützliche Funktionen in Libreoffice Calc sind **STEIGUNG (SLOPE^{*})** und **ACHSENABSCHNITT (INTERCEPT^{*})**, mit denen man sich diese Werte der Geradengleichung in Zellen anzeigen lassen kann. So können Sie z.B. zum Weiterrechnen benutzt werden. Sehr wichtig ist auch die Funktion **ERWARTUNG (FORECAST^{*})**, mit der man Werte interpolieren kann. Das ist das, was man händisch auf der Kalibriergeraden durch *Lot fällen* auf die x-Achse oder auf die y-Achse ermitteln kann. Hat die Probe 1 z.B. den Gehalt 24,3 mg/L (**siehe Abb.**), so kann man die dazugehörige Absorbanz auf ca. 0,330268 (**siehe Abb.**) interpolieren lassen. Vertauscht man die x-Datenreihe und die y-Datenreihe, so kann man für eine gegebene Absorbanz der Probe 2 den Gehalt interpolieren lassen (**siehe Bsp. in Abb: ca. 39,07 mg/L**). Dies entspricht der typischen Erfordernissen einer Versuchsauswertung! Alle drei Funktionen greifen direkt auf die Daten zu, eine Darstellung eines Diagramms ist nicht erforderlich.

Aufgabe: Programmieren Sie das oben gezeigte Beispiel exakt nach und nutzen Sie zur Berechnung der Zahlenwerte die oben vorgestellten Funktionen.

**Je nach installierter Sprache werden die deutschen oder die in Klammern angegeben englischen Funktionsnamen angezeigt.*