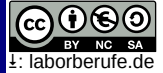


Übungsaufgaben zur Auswertung quantitativer Analysen mit Kalibriergeraden und Tabellenkalkulation



Lernvideo zur Erstellung: https://youtu.be/ee2C6_6U8r8?si



Aufgabe 1

Eine Kalibrierung mit einem Analyten ergab folgende Messwerte:

Bezeichnung	Leerwert /blank	Kalibr_I	Kalibr_II	Kalibr_III	Kalibr_IV	Kalibr_V	Kalibr_VI
Gehalt in mg/L	0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0	1,2
Messwert (Absorbanz, A)	0 (auf Null gestellt, durch Drücken von „Leerprobe messen“)	0,132	0,251	0,375	0,529	0,668	0,811

5,00 mL einer Probelösung wurden auf 100,00 mL verdünnt. Das Messwert lag dann bei $A = 0,578$.

a) Erstellen Sie ein Tabellenblatt mit Kalibrier-Datentabelle und Kalibrier-Diagramm, so dass alles sinnvoll auf 1-DINA4-Blatt (**Querformat**) passt.

- Unten rechts im Diagramm: Kalibriergeradengleichung und Bestimmtheitsmaß (R^2), alle Zahlen mit mindestens 4 Nachkommastellen.
- **Beide** Achsen sollen bei 0 beginnen und bis circa 1,3 reichen!
- In einer Zelle soll die Steigung der Näherungsgeraden angezeigt werden, die sich automatisch ändert, wenn man die Zahlenwerte verändert.
- In Zellen soll der y-Achsenabschnitt und die Steigung der Näherungsgeraden angezeigt werden. Automatische Veränderung, wenn Zahlenwerte der Tabelle verändert werden.
- In Zellen soll der Gehalt der verdünnten Lösung und des Konzentrats (Probelösung) automatisch berechnet werden, mithilfe der Steigung und des Achsenabschnitts.

Es sollen noch folgenden beiden Punkte erfüllt sein.

- Die Datenpunkte des Diagramms sollen als rote Sternchen dargestellt werden.
- Die Kalibriergerade soll als gepunktete Linie dargestellt sein.
 - Die Gitterlinien sind auf der y-Achse eingezeichnet.

b) Drucken Sie das Blatt aus und berechnen Sie auf der Rückseite händisch mit Taschenrechner die Massenkonzentration (β) der Probelösung in mg/L

Aufgabe 2

10,00 Gramm einer Probelösung wurde auf 250 mL verdünnt. Anschließend wurde der Gehalt mit einem Messinstrument analysiert. Es ergab sich ein Signal von 543 Einheiten. Für die Kalibrierlösungen ergaben sich folgende Vergleichswerte.

Messsignal-Einheiten	140,0	222,0	365,0	448,7	595,4	680,5
Gehalt in mg/L	7,4	14,8	22,2	29,6	37,0	44,4

a) Erstellen Sie mit dem Tabellenkalkulationsprogramm ein Tabellenblatt mit dem Diagramm und zur Berechnung des Gehalts der Probelösung. Beachten Sie hierbei die Vorgaben und die Schema-Abbildung (siehe unten)!

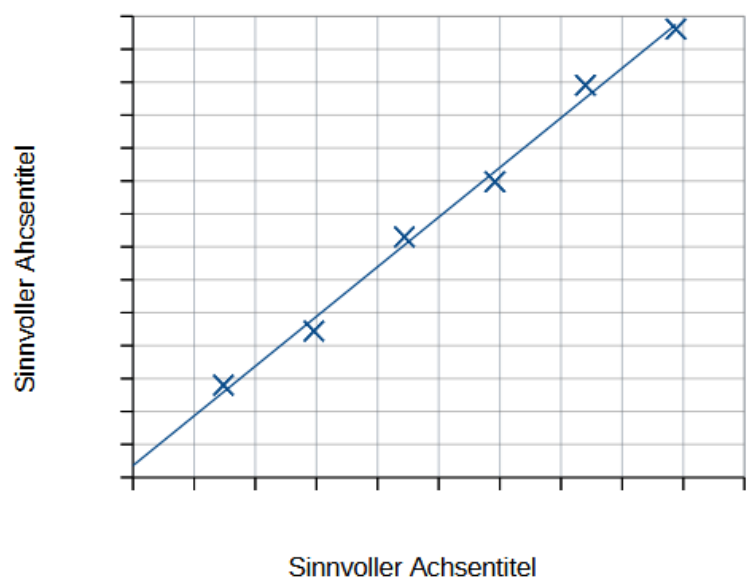
b) Berechnen Sie anschließend die Masse des Analyts in 10,00 Gramm Probelösung mithilfe des Taschenrechners.

VORGABEN für das Tabellenblatt incl. Diagramm

- Die Skalierung der Achse mit den Signaleinheiten reicht von 0 bis 700. Teilstriche bei jeweils 50 Signaleinheiten.
- Die Skalierung der Achse mit dem Gehalt reicht von 0 bis 45. Teilstriche bei jeweils 5 mg/L.
- Im Diagramm sind auf beiden Achsen Hilfslinien eingezeichnet. (siehe Schema-Diagramm unten)
- Die Achsen sind sinnvoll beschriftet.
- Die Näherungsgerade beginnt vor den ersten Datenpunkt an der Achse (siehe Schema-Diagramm unten!).
- Die Geradengleichung der Näherungsgerade wird zusammen mit dem Bestimmtheitsmaß (R^2) angezeigt.
- Die Datenpunkte sind als „Kreuzchen“ (x) ausgeführt (siehe Schema-Diagramm unten)
- Das Tabellenblatt enthält ein Kalibrierdaten-Feld (siehe Schema unten unten)
- Das Tabellenblatt enthält eine Zelle, in der das Messsignal der verdünnten Probe eingetragen wird (hier: 543)
- In zwei Zellen wird die Steigung und der Achsenabschnitt hinterlegt. Ändert man die Kalibrierdaten so ändern sich die Zahlen (im Schema unten als XXXXXX symbolisiert) automatisch.
- In einer Zelle wird der Gehalt der verdünnten Lösung in mg/L automatisch mithilfe der Steigung und des Achsenabschnittes berechnet und auf exakt 3 Nachkommastellen gerundet (siehe Schema unten)

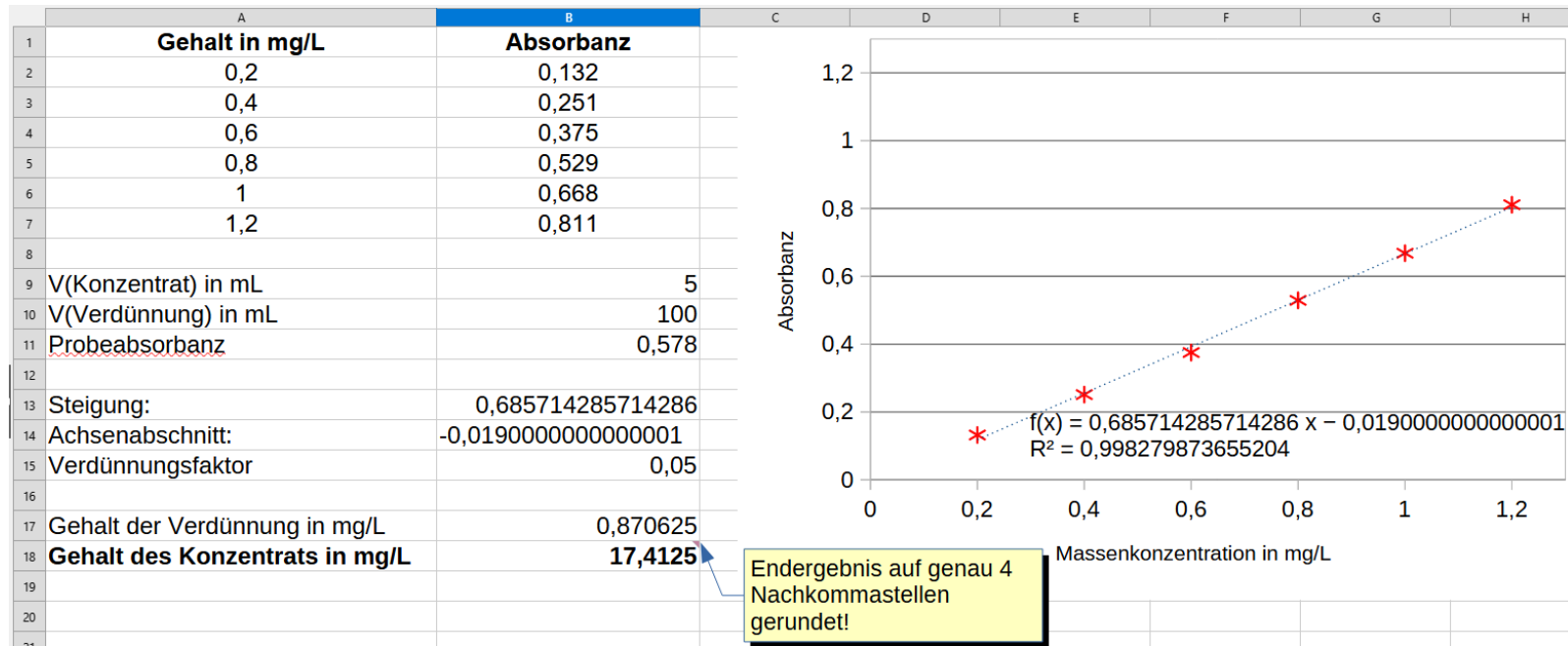
Schema-Abbildung des Diagramms:

Kalibrierdaten	Kalibrierdaten
Kalibrierdaten	Kalibrierdaten
Kalibrierdaten	Kalibrierdaten
Kalibrierdaten	Kalibrierdaten
Kalibrierdaten	Kalibrierdaten
Kalibrierdaten	Kalibrierdaten
Messsignal Probe:	543
Steigung:	XXXXXX
Achsenabschnitt:	XXXXXX
Gehalt der verdünnten Probe in mg/L:	34,811



Musterlösungen

Musterlösung Aufgabe 1



Anmerkungen zur Musterlösung

- Auf der x-Achse wird stets die Gehaltsgröße aufgetragen, auf der y-Achse stets die Messgröße!
- Der Leerwert (0/0) ist KEIN Datenpunkt und 0/0 darf nicht in die Ermittlung der Geraden eingeflossen sein! [Bgr: Dass man *geblankt* hat, ist stillschweigend schon in die anderen Messwerte (z.B. 0,132) eingeflossen. Ohne *Blanken* wären die Messwerte anders gewesen, z.B. 0,131 statt 0,132. Wenn man jetzt zusätzlich noch 0/0 als Datenpunkt aufnehmen würde, hätte dieser Wert eine zu große statistisches Gewicht gehabt, bei der Ermittlung der Geradengleichung, mehr als die anderen Punkte.]
- Das Blatt muss die A4-Seite (quer) nicht vollständig ausfüllen, die Seite muss aber sinnvoll genutzt sein.
- Die Zellen mit der Steigung und dem y-Achsenabschnitt müssen sich natürlich automatisch ändern, wenn man die Kalibrierdaten ändert! Die entsprechenden Funktionen nutzen.
- Die Berechnung des Endergebnisses erfolgt händisch auf Papier mit Stift und Taschenrechner. Ergebnis (**GERUNDET!**): **17,4125 mg/L**

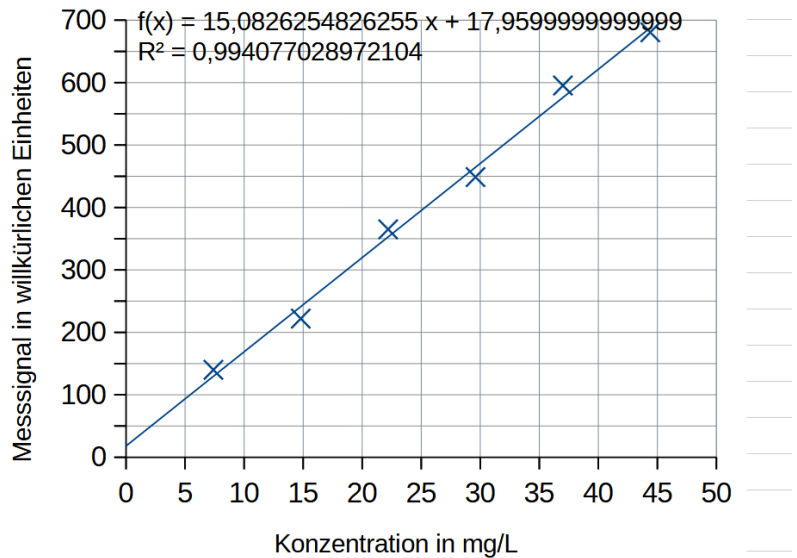
Tipp: Kalibrierdiagramm mit LibreOffice CALC erstellen: <https://youtu.be/YYPCKRYQf-w>



Musterlösung Aufgabe 2

a) **Unbedingt beachten:** Die unabhängige Variable, das ist stets der Gehalt, wird immer auf der x-Achse aufgetragen. Die vom Gehalt abhängige Größe, das ist stets das Messwert (z.B. Absorbanz beim Fotometer), wird immer auf der y-Achse aufgetragen. Umgekehrtes Auftragen (x- und y-Achse vertauscht) führt trotz folgerichtigen Weiterrechnens zum falschen Ergebnis! Je stärker R^2 von 1 abweicht, desto größer der Fehler.

Gehalt	Messsignal
7,4	140
14,8	222
22,2	365
29,6	448,7
37	595,4
44,4	680,5
Messsignal Probe:	543
Steigung:	15,0826254826255
Achsenabschnitt:	17,9599999999999
Gehalt der verdünnten Probe in mg/L:	34,811



b) In der gesamten verdünnten Probelösung (0,25 L) sind damit also gerundet 8,70 mg enthalten. Es macht kein Sinn mehr Nachkommastellen anzugeben, weil schon beim Ergebnis von a) gerundet wurde. Angeben von mehr als 2-3 Nachkommastellen sind falsch und führt zu einem Abzug!

PATENTREZEPT ZUM RUNDEN (gilt immer!): Zwischenergebnisse werden nicht oder nur sehr wenig gerundet.

Endergebnisse werden immer auf eine vernünftige Anzahl an Nachkommastellen gerundet. Gerade darüber, welche Anzahl vernünftig ist, gibt es kein Automatismus. Man muss sich am Ende jedes mal gesondert Gedanken machen. Das wird man sich nicht ersparen können.