

UNIVERZITA PARDUBICE

Fakulta chemicko – technologická Katedra analytické chemie

Licenční studium chemometrie na téma

Využití tabulkového procesoru jako laboratorního deníku

Vedoucí licenčního studia Prof. RNDr. Milan Meloun, DrSc.

Semestrální práce z 2. soustředění

Věra Dvořáková
Akreditovaná zkušební laboratoř
Elektrárna Počerady, a. s.

V Teplicích, červenec 2015

Obsah

| | | |
|-----------|---|----------|
| 1. | Úloha 1 - Regresní koeficient | 3 |
| 1.1. | Zadání | 3 |
| 1.2. | Program | 3 |
| 1.3. | Postup zpracování dat | 3 |
| 1.3.1 | Tabulka naměřených hodnot stanovovaných kovů | 3 |
| 1.3.2 | Tabulka porovnání hodnot jednotlivých kovů | 4 |
| 1.3.3 | Graf | 6 |
| 1.4. | Závěr | 6 |
| | | |
| 2. | Úloha 2 - Koncentrace roztoků | 7 |
| 2.1. | Zadání | 7 |
| 2.2. | Program | 7 |
| 2.3. | Postup zpracování dat | 7 |
| 2.3.1 | Tabulka základních údajů pro výpočet titrů | 7 |
| 2.3.2 | Tabulka pro výpočet titrů | 8 |
| 2.3.3 | Tabulky pro výpočty hodnot reálných vzorků a standardů | 9 |
| 2.3.4 | Tabulka stanovení chemické spotřeby kyslíku manganistanem | 10 |
| 2.3.5 | Tabulka pro výpočet hořčíku | 10 |
| 2.4. | Závěr | 10 |
| | | |
| 3. | Úloha 3 - Absorbance | |
| 3.1. | Zadání | 11 |
| 3.2. | Program | 11 |
| 3.3. | Postup zpracování dat | 11 |
| 3.3.1 | Tabulka absorbancí za rok 2014 | 11 |
| 3.3.2 | Tabulka průměrných absorbancí v roce 2014 | 12 |
| 3.4. | Závěr | 12 |

1. Úloha 1 - Regresní koeficient

1.1. Zadání

Při stanovení kovů na atomovém spektrofotometru je před každou analýzou sestrojena kalibrační křivka. Důležitým kritériem pro vyhodnocení spolehlivosti je regresní koeficient. Tento parametr byl porovnán s hodnotami zjištěnými v předchozím roce. V našem případě se jedná o rok 2013 a rok 2014.

1.2. Program

Microsoft Office Excel 2007

1.3. Postup zpracování dat

1.3.1 Tabulka naměřených hodnot stanovovaných kovů „list vše“

| Regresní koeficienty z AAS za rok 2013 a 2014 | | | | | | | | | | | | | | | |
|---|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Cu | | Fe | | Ni | | Pb | | Cr | | Cd | | Zn | | As | |
| 2013 | 2014 | 2013 | 2014 | 2013 | 2014 | 2013 | 2014 | 2013 | 2014 | 2013 | 2014 | 2013 | 2014 | 2013 | 2014 |
| 0,9959 | 0,9967 | 0,9975 | 0,9997 | 0,9923 | 0,9990 | 0,9987 | 0,9943 | 0,9985 | 0,9992 | 0,9954 | 0,9965 | 0,9963 | 0,9979 | 0,9848 | 0,9993 |
| 0,9977 | 0,9951 | 0,9915 | 0,9989 | 0,9939 | 0,9963 | 0,9857 | 0,9963 | 0,9969 | 0,9997 | 0,9998 | 0,9983 | 0,9955 | 0,9924 | 0,9766 | 0,9975 |
| 0,9987 | 0,9972 | 0,9936 | 0,9996 | 0,9919 | 0,9964 | 0,9922 | 0,9947 | 0,9969 | 0,9997 | 0,9981 | 0,9967 | 0,9995 | 0,9997 | 0,9906 | 0,9985 |
| 0,9964 | 0,9992 | 0,9916 | 0,9990 | 0,9986 | 0,9990 | 0,9945 | 0,9969 | 0,9983 | 0,9985 | 0,9978 | 0,9960 | 0,9981 | 0,9970 | 0,9946 | 0,9984 |
| 0,9970 | 0,9966 | 0,9990 | 0,9988 | 0,9990 | 0,9946 | 0,9984 | 0,9980 | 0,9732 | 0,9997 | 0,9972 | 0,9974 | 0,9961 | 0,9964 | 0,9987 | 0,9996 |
| 0,9997 | 0,9996 | 0,9926 | 0,9997 | 0,9884 | 0,9978 | 0,9941 | 0,9998 | 0,9911 | 0,9995 | 0,9850 | 0,9942 | 0,9988 | 0,9949 | 0,9925 | 0,9970 |
| 0,9955 | 0,9986 | 0,9988 | 0,9990 | 0,9985 | 0,9937 | 0,9912 | 0,9993 | 0,9999 | 0,9997 | 0,9989 | 0,9989 | 0,9984 | 0,9988 | 0,9955 | 0,9991 |
| 0,9981 | 0,9976 | 0,9897 | 0,9978 | 0,9959 | 0,9946 | 0,9913 | 0,9889 | 0,9995 | 0,9961 | 0,9998 | 0,9961 | 0,9982 | 0,9983 | 0,9933 | 0,9986 |
| 0,9999 | 0,9957 | 0,9971 | 0,9981 | 0,9975 | 0,9995 | 0,9990 | 0,9986 | 0,9988 | 0,9959 | 0,9990 | 0,9984 | 0,9964 | 0,9982 | 0,9983 | 0,9975 |
| 0,9948 | 0,9992 | 0,9999 | 0,9979 | 0,9991 | 0,9995 | 0,9956 | 0,9968 | 0,9992 | 0,9986 | 0,9936 | 0,9943 | 0,9934 | 0,9941 | 0,9916 | 0,9951 |
| 0,9990 | 0,9935 | 0,9980 | 0,9987 | 0,9977 | 0,9993 | 0,9933 | 0,9918 | 0,9995 | 0,9990 | 0,9983 | 0,9957 | 0,9985 | 0,9959 | 0,9959 | |
| 0,9929 | 0,9918 | 0,9984 | 0,9983 | 0,9951 | 0,9972 | 0,9994 | 0,9901 | 0,9949 | 0,9999 | 0,9984 | 0,9945 | | | | |
| 0,9989 | 0,9925 | 0,9992 | 0,9929 | | | | 0,9930 | 0,9975 | | 0,9996 | | | | | |
| 0,9978 | 0,9962 | 0,9946 | 0,9959 | | | | | | | 0,9971 | | | | | |
| 0,9958 | 0,9972 | 0,9948 | 0,9954 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9986 | 0,9913 | 0,9888 | 0,9995 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9873 | 0,9922 | 0,9958 | 0,9980 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9919 | 0,9964 | 0,9930 | 0,9987 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9911 | 0,9937 | 0,9906 | 0,9971 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9992 | 0,9957 | 0,9968 | 0,9972 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9976 | 0,9956 | 0,9995 | 0,9939 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9957 | 0,9947 | 0,9961 | 0,9948 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9980 | 0,9946 | 0,9884 | 0,9981 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9998 | 0,9981 | 0,9983 | 0,9927 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9990 | 0,9977 | 0,9903 | 0,9979 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9986 | 0,9954 | 0,9961 | 0,9970 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9953 | 0,9964 | 0,9967 | 0,9988 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9996 | 0,9947 | 0,9999 | 0,9956 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9989 | 0,9955 | 0,9984 | 0,9982 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9944 | 0,9986 | 0,9904 | 0,9956 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9992 | 0,9979 | 0,9955 | 0,9992 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9993 | 0,9978 | 0,9833 | 0,9984 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9981 | 0,9948 | 0,9984 | 0,9972 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9959 | 0,9953 | 0,9943 | 0,9935 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9995 | 0,9997 | 0,9920 | 0,9986 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9969 | 0,9994 | 0,9992 | 0,9983 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9996 | 0,9987 | 0,9909 | 0,9977 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9937 | 0,9994 | 0,9986 | 0,9918 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9961 | 0,9983 | 0,9968 | 0,9924 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9999 | 0,9951 | 0,9996 | 0,9981 | | | | | | | | | | | | |

Semestrální práce

| | | | | | | | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|--------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|
| 0,9986 | 0,9919 | 0,9990 | 0,9956 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9978 | 0,9998 | 0,9997 | 0,9969 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9961 | 0,9983 | 0,9970 | 0,9977 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9990 | 0,9958 | 0,9948 | 0,9995 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9900 | 0,9929 | 0,9995 | 0,9964 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9981 | 0,9954 | 0,9974 | 0,9906 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9991 | 0,9955 | 0,9967 | 0,9930 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9956 | 0,9960 | 0,9988 | 0,9946 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9994 | 0,9934 | 0,9999 | 0,9991 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9956 | 0,9941 | 0,9985 | 0,9970 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9950 | 0,9988 | 0,9979 | 0,9991 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9955 | 0,9999 | 0,9946 | 0,9954 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9944 | 0,9920 | | 0,9957 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9978 | 0,9925 | | 0,9971 | | | | | | | | | | | | |
| 0,9981 | 0,9953 | | | | | | | | | | | | | | |
| | 0,9969 | | | | | | | | | | | | | | |
| | 0,9959 | | | | | | | | | | | | | | |
| | 0,9946 | | | | | | | | | | | | | | |
| | 0,9987 | | | | | | | | | | | | | | |

Buňky v tabulce obsahují podmíněné formátování, (méně 0,9900; zvýrazněno červeným písmem)

1.3.2. Tabulka porovnání hodnot jednotlivých kovů „list RK Cu“

| Cu | | | | | |
|---------------|---------|-------------|-------------|--------------|--------------|
| RK | | | | RK průměr | |
| 2013 | 2014 | min. | max. | 2013 | 2014 |
| =vše!B4 | =vše!C4 | =vše!\$S\$3 | =vše!\$T\$3 | =vše!\$B\$63 | =vše!\$C\$63 |
| 0,9977 | 0,9951 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9987 | 0,9972 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9964 | 0,9992 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9970 | 0,9966 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9997 | 0,9996 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9955 | 0,9986 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9981 | 0,9976 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9999 | 0,9957 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9948 | 0,9992 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9990 | 0,9935 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9929 | 0,9918 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9989 | 0,9925 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9978 | 0,9962 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9958 | 0,9972 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9986 | 0,9913 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9873 | 0,9922 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9919 | 0,9964 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9911 | 0,9937 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9992 | 0,9957 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9976 | 0,9956 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9957 | 0,9947 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9980 | 0,9946 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9998 | 0,9981 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9990 | 0,9977 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9986 | 0,9954 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9953 | 0,9964 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9996 | 0,9947 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9989 | 0,9955 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9944 | 0,9986 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9992 | 0,9979 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9993 | 0,9978 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9981 | 0,9948 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9959 | 0,9953 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |

Semestrální práce

| | | | | | |
|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| 0,9995 | 0,9997 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9969 | 0,9994 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9996 | 0,9987 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9937 | 0,9994 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9961 | 0,9983 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9999 | 0,9951 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9986 | 0,9919 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9978 | 0,9998 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9961 | 0,9983 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9990 | 0,9958 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9900 | 0,9929 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9981 | 0,9954 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9991 | 0,9955 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9956 | 0,9960 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9994 | 0,9934 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9956 | 0,9941 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9950 | 0,9988 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9955 | 0,9999 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9944 | 0,9920 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9978 | 0,9925 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| 0,9981 | 0,9953 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| | 0,9969 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| | 0,9959 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| | 0,9946 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |
| | 0,9987 | 0,9900 | 0,9999 | 0,9969 | 0,9961 |

Na jednotlivé listy v sešitě označené stanovovaným prvkem byly vloženy hodnoty z listu „vše“ do sloupců pomocí odkazů, např. do sloupce 2013 odkazem =vše!B4 (viz označení v buňce) a dále roztažením na celý sloupec. Následně pak stejným způsobem do ostatních sloupců (viz označení v buňkách).

Pro vyplnění všech listů s tabulkami pro jednotlivé kovy bylo vytvořeno makro s názvem „data“. Po spuštění makra proběhne doplnění parametrů v tabulkách.

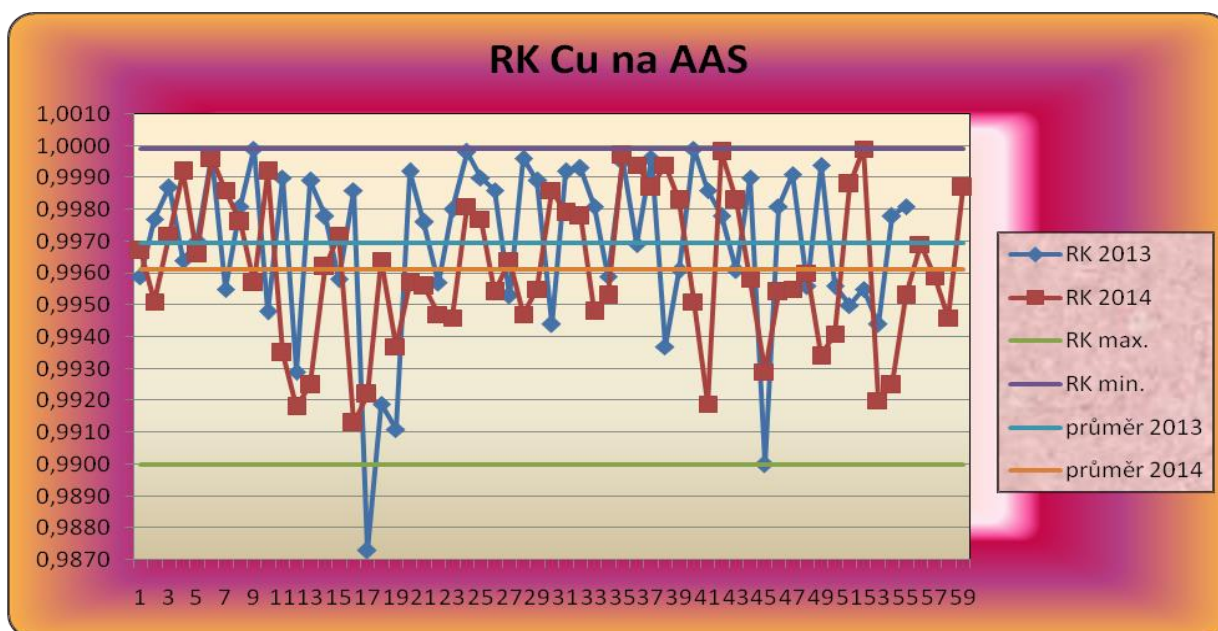
1.3.3 Graf

Pro lepší názornost zobrazení v grafu jsou v tabulkách též zadány dolní a horní limity (min. a max.) a průměrné hodnoty za každý rok.

Po zadání dat byly vytvořeny grafy k jednotlivým stanovovaným prvkům. Odkaz na příslušné grafy je pomocí tlačítka graf pod tabulkou daného kovu

graf Cu

Po stlačení se přepne na list s grafem.



1.4. Závěr

Dle grafického znázornění průměrných hodnot regresního koeficientu za rok 2014 došlo ke zlepšení oproti roku 2013 u těchto kovů: Fe, Ni a Pb, výrazněji u Cr (z 0,9957 na 0,9988) a As (z 0,9920 na 0,9981). Naopak zhoršení, i když jen nepatrné vykazují tyto kovy: Cu, Cd a Zn (v průměru o 0,0006). V roce 2014 byla pouze jedna hodnota pod dolním limitem a to v případě kalibrační křivky pro stanovení Pb. V roce 2013 se pod tímto limitem nacházelo celkem 10 hodnot a to u všech kovů kromě Zn. Nejvíce těchto hodnot celkem 4x vykazovalo Fe.

2. Úloha 2 – Koncentrace roztoků

2.1. Zadání

V laboratoři je 1x týdně kontrolována hodnota titrů odměrných roztoků. Tyto hodnoty jsou vnášeny do tabulky, která je následně využívána pro výpočty při analýzách.

2.2. Program

Microsoft Office Excel 2007

2.3. Postup zpracování dat

2.3.1 Tabulka základních údajů pro výpočet titrů

„list vzorce a konstanty“

| odměrný roztok | rovnice | Konstanta pro titr | Mezní hodnota | základní látka | | |
|--------------------------------|----------------|--------------------|-----------------|--|-------------------|--------------------|
| | | | | vzorec | C ₀ /M | V ₀ /ml |
| 0,01 M kyselina chlorovodíková | 20*0,005/V1 | =G6*F6 | 0,0099 - 0,0101 | Na ₂ CO ₃ | 0,005 | 20 |
| 0,1 M hydroxid sodný | 20*0,1/V1 | 2 | 0,0990 - 0,1010 | KHC ₈ H ₄ O ₄ | 0,1 | 20 |
| 0,05 M chelaton | 20*0,025/V1 | 0,5 | 0,0490 - 0,0510 | CaCl ₂ | 0,025 | 20 |
| 0,02 M dusičnan stříbrný | 10*0,02/V1 | 0,2 | 0,0190 - 0,0210 | NaCl | 0,02 | 10 |
| 0,01 M dusičnan olovnatý | 2*0,01/V1 | 0,02 | 0,0099 - 0,0101 | Na ₂ SO ₄ | 0,01 | 2 |
| 0,002 M manganistan draselný | 5*0,005*0,4/V1 | 0,01 | 0,0019 - 0,0021 | šřavelan sodný | 0,005 | 5 |

„Tabulka základních údajů“ obsahuje názvy odměrných roztoků, rovnice/vzorce, výpočet konstanty pro titr (viz označení v buňce), mezní hodnoty a údaje základní látky pro výpočet titrů odměrných roztoků.

$$\text{rovnice } c_1 = V_0 * c_0 * f / V_1$$

$$\text{konstanta} = V_0 * c_0 * f$$

c₁ - titr = skutečná koncentrace stanovovaného odměrného roztoku

V₀ - objem odměrného roztoku základní látky

c₀ - koncentrace základní látky

f - přepočítávací faktor pro stanovení manganistanu = 2/5

V₁ - spotřeba roztoku, jehož titr se stanovuje

2.3.2 Tabulka pro výpočet titrů „list roztoky – titry“

| Název roztoku nebo činidla | Mezní hodnota | Spotřeba ml | Spotřeba | Konstanta | Titr |
|--------------------------------------|-----------------|-------------|--------------|-------------------------|-------------|
| | | | průměr | | koncentrace |
| Titr manganistanu draselného 0,002 M | 0,0019 - 0,0021 | 4,98 | =průměrC6/C7 | =vzorce a konstanty!C11 | =E6/D6 |
| | | 4,95 | | | |
| Titr kyseliny chlorovodíkové 0,01 M | 0,0099 - 0,0101 | 9,93 | 9,940 | 0,1 | 0,0101 |
| | | 9,95 | | | |
| Titr hydroxidu sodného 0,1 M | 0,0990 - 0,1010 | 20,00 | 20,010 | 2 | 0,1000 |
| | | 20,02 | | | |
| Titr chelatonu 0,05 M TVRDOST | 0,0490 - 0,0510 | 9,93 | 9,940 | 0,5 | 0,0503 |
| | | 9,95 | | | |
| Titr chelatonu 0,05 M VÁPNIK | 0,0490 - 0,0510 | 9,91 | 9,915 | 0,5 | 0,0504 |
| | | 9,92 | | | |
| Titr dusičnanu stříbrného 0,02 M | 0,0190 - 0,0210 | 10,24 | 10,010 | 0,2 | 0,0200 |
| | | 10,26 | | | |
| | slp | 0,24 | | | |
| Titr dusičnanu olovnatého 0,01 M | 0,0099 - 0,0101 | 2,03 | 2,020 | 0,02 | 0,0099 |
| | | 2,01 | | | |

Ve sloupci spotřeba v ml je zapisována hodnota pomocí tlačítka

vlož data

, která jsou zaznamenána v „Tabulce naměřených dat“ zjištěných při kontrole titrů odměrných roztoků. Ve vedlejším sloupci se vypočítává průměrná spotřeba (viz označení v buňce).

| tabulka naměřených dat |
|---------------------------|
| 4,98 |
| 4,95 |
| 9,93 |
| 9,95 |
| 20,00 |
| 20,02 |
| 9,93 |
| 9,95 |
| 9,91 |
| 9,92 |
| 10,24 |
| 10,26 |
| 0,24 |
| 2,03 |
| 2,01 |

Ve sloupci konstanta se odkazem doplní hodnota z „Tabulky základních údajů pro výpočet titrů“ (viz označení v buňce). Výsledná hodnota koncentrace – titru se dopočítá v posledním sloupci dle $c_1 = \text{konstanta}/V_1$ (viz označení v

buňce). Tlačítko smaž data odstraní hodnoty z předchozí zkoušky.

2.3.3 Tabulka pro výpočty hodnot reálných vzorků a standardů „list titrace“

| parametr | spotřeba | | titr | výsledek | | | ředění | |
|----------|----------|--------------|-------------------|-----------|----------|-------|--------|------|
| | ml | průměr ml | | vzorek | standard | | mmol/l | mg/l |
| | | | | mmol/l | mg/l | | | |
| KNK(p) | 6,70 | =průměrB7/B8 | =roztoky-titry!F8 | =C7*D7*10 | | | | |
| | 6,68 | | | | | | | |
| ZNK (p) | 0,04 | 0,035 | 0,1000 | 0,03 | | | | |
| | 0,03 | | | | | | | |
| m | 16,26 | 16,245 | 0,0101 | 1,63 | | | | |
| | 16,23 | | | | | | | |
| Tc | 3,10 | 3,100 | 0,0503 | 1,56 | | | 2 | 3,12 |
| | 3,10 | | | | | | | |
| Ca | 2,19 | 2,190 | 0,0504 | 1,10 | 44 | 44,3 | 4 | 4,42 |
| | 2,19 | | | | | | | |
| solnost | 3,31 | 3,320 | 0,1000 | 3,32 | 117,6 | 117,6 | | |
| | 3,33 | | | | | | | |
| sířany | 1,05 | 1,045 | 0,0099 | 1,03 | 99,4 | 99,39 | | |
| | 1,04 | | | | | | | |
| chloridy | 4,28 | 4,030 | 0,0200 | 0,81 | 28,5 | 28,54 | 100 | 80,5 |
| | 4,30 | | | | | | | |
| SP | 0,26 | | | | | | | 2854 |

Tato tabulka slouží pro výpočty běžných stanovení titračními metodami. Do

sloupce spotřeba v ml je zapisována hodnota pomocí tlačítka , která jsou zaznamenána v „Tabulce naměřených dat“ při titracích vzorků. Ve vedlejším sloupci se vypočítává průměrná spotřeba (viz označení buňce). Hodnota titru je zaznamenávána odkazem na „Tabulku pro výpočet titrů“ (viz označení v buňce). Konečný výsledek se spočítá dle rovnice $c_1 = \frac{V_0 * C_0 * 1000}{V_1}$ (viz označení v buňce, ve vzorci je již pokrácen objem základního roztoku $V_1 = 100$ ml, v případě sířanů $V_1 = 10$ ml). V „Tabulce pro zadání ředění“ je zapisováno v jakém poměru byl vzorek ředěn.

Tlačítko odstraní data z předchozího stanovení.

| Tabulka naměřených dat |
|------------------------|
| 6,70 |
| 6,68 |
| 0,04 |
| 0,03 |
| 16,26 |
| 16,23 |
| 3,10 |
| 3,10 |
| 2,19 |
| 2,19 |
| 3,31 |
| 3,33 |
| 1,05 |
| 1,04 |
| 4,28 |
| 4,30 |
| 0,26 |

| Tabulka pro zadání ředění |
|---------------------------|
| 2 |
| 0,00 |
| 4 |
| 0,00 |
| |
| |
| |
| 100 |
| 0,0 |

2.3.4 Tabulka stanovení Chemické spotřeby kyslíku manganistanem „list titrace“

| parametr | spotřeba | | slepý pokus | faktor | výsledek (mg/l) | |
|--------------------|----------|-----------|-------------|--------|---------------------|----------|
| | ml | průměr ml | ml | | vzorek | standard |
| CHSK _{Mn} | 2,51 | 2,50 | 0,02 | 4,95 | =((C32-D32)*16)/E32 | 8,0 |
| | 2,48 | | | | | |

Do sloupce spotřeba v ml, slepý pokus a faktor je zapisována hodnota pomocí

tlačítka , která jsou zaznamenána v „Tabulce naměřených dat“ při titracích vzorků. Ve sloupci průměr ml se vypočítává průměrná spotřeba a ve sloupci výsledek se spočítá dle rovnice $CHSK = \frac{(V_v - V_0) * f}{V_1}$

(viz označení v buňce, ve vzorci je již pokrácen objem základního roztoku $V_1 = 100$ ml). V „Tabulce pro zadání ředění“ je zapisováno v jakém poměru byl vzorek ředěn.

V_v - spotřeba manganistanu při titraci v ml

V_0 - spotřeba manganistanu při titraci slepého stanovení

f - přepočítavací faktor 16 (výpočet uveden v ČSN)

V_1 - spotřeba manganistanu při zpětné titraci v ml

Tlačítko odstraní data z předchozího stanovení.

| Tabulka naměřených dat | | | |
|------------------------|------|------|------|
| 2,51 | 2,50 | 0,02 | 4,95 |
| 2,48 | | | |

2.3.5 Tabulka pro výpočet hořčíku „list výpočet hořčíku“

| Mg | | |
|----------|--------------|------------|
| parametr | mmol/l | mg/l |
| Tc | =titrace!E13 | |
| Ca | =titrace!F15 | |
| Výsledek | =B6-B7 | =B8*24,305 |

Tabulku pro dopočet hořčíku z rozdílu výsledků stanovení tvrdosti, tedy sumy vápníku a hořčíku a stanovení vápníku (viz odkazy v buňkách). Přepočet na hodnotu v mg se provede vynásobením výsledku v mmol molekulovou hmotností hořčíku.

2.4. Závěr

Všechny listy jsou uzamčeny proti případnému přepsání pevných údajů v buňkách. Heslo pro odemknutí listů je „titr“. Uvolněny jsou buňky, do kterých se zadávají naměřená data.

3. Úloha 3 - Absorbance

3.1. Zadání

1x ročně jsou vyhodnocovány naměřené absorbance koncentrací kalibračních křivek pro stanovení kovů na atomovém spektrofotometru. Průměrné hodnoty, jako předpokládané absorbance, jsou vnášeny do tabulky, která slouží k informativnímu porovnání zjištěných absorbancí v následujícím roce. V našem případě byl vyhodnocen rok 2014 pro porovnávání v roce 2015.

3.2. Program

Microsoft Office Excel 2007

3.3. Postup zpracování dat

3.3.1 Tabulka absorbancí za rok 2014

Do tabulky u jednotlivých stanovovaných kovů byly doplněny naměřené hodnoty absorbance pro jednotlivé koncentrace v roce 2014 (viz např. "list arsen").

„list arsen“

| koncentrace | | | | | |
|---------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| | 0 | 15 | 50 | 75 | 100 |
| absorbance | | | | | |
| | 0,003 | 0,057 | 0,120 | 0,175 | 0,225 |
| | 0,000 | 0,023 | 0,065 | 0,115 | 0,152 |
| | 0,003 | 0,036 | 0,111 | 0,147 | 0,194 |
| | 0,000 | 0,040 | 0,118 | 0,170 | 0,239 |
| | 0,000 | 0,042 | 0,124 | 0,181 | 0,241 |
| | 0,008 | 0,050 | 0,122 | 0,163 | 0,222 |
| | 0,007 | 0,048 | 0,158 | 0,217 | 0,284 |
| | 0,005 | 0,050 | 0,128 | 0,208 | 0,278 |
| | 0,007 | 0,052 | 0,146 | 0,226 | 0,291 |
| | 0,005 | 0,046 | 0,124 | 0,182 | 0,223 |
| | 0,001 | 0,040 | 0,121 | 0,167 | 0,225 |
| průměr | 0,004 | 0,044 | 0,122 | 0,177 | 0,234 |

Poznámka:

Hodnota koncentrace je uváděna v jednotkách ug/l.

3.3.2 Tabulka průměrných absorbancí v roce 2014

| | | | | | | |
|----------------|--------------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| arsen | koncentrace | 0 | 15 | 50 | 75 | 100 |
| | absorbance | =arsen!B15 | 0,044 | 0,122 | 0,177 | 0,234 |
| chrom | koncentrace | 0 | 1 | 4 | 7 | 10 |
| | absorbance | 0,003 | 0,019 | 0,061 | 0,101 | 0,138 |
| kadmium | koncentrace | 0 | 0,5 | 4 | 7 | 10 |
| | absorbance | 0,004 | 0,031 | 0,157 | 0,240 | 0,305 |
| měď | koncentrace | 0 | 0,5 | 3 | 6 | 10 |
| | absorbance | 0,004 | 0,014 | 0,047 | 0,087 | 0,139 |
| nikl | koncentrace | 0 | 1,5 | 5,25 | 9,75 | 15 |
| | absorbance | 0,003 | 0,014 | 0,042 | 0,075 | 0,112 |
| olovo | koncentrace | 0 | 1 | 3 | 6 | 10 |
| | absorbance | 0,012 | 0,021 | 0,034 | 0,054 | 0,077 |
| zinek | koncentrace | 0 | 0,8 | 3,2 | 5,6 | 8 |
| | absorbance | 0,014 | 0,145 | 0,419 | 0,630 | 0,797 |
| železo | koncentrace | 0 | 1 | 8 | 15 | 20 |
| | absorbance | 0,016 | 0,045 | 0,121 | 0,206 | 0,266 |

Z předchozí tabulky se odkazem doplňují průměrné hodnoty absorbancí kalibračních křivek pro jednotlivé koncentrace kalibračních křivek do buňky příslušného kovu (viz označení v buňce).

3.4. Závěr

Takto zpracovaná tabulka předpokládaných absorbancí se využívá pro informativní porovnávání zjištěných absorbancí v roce 2015.