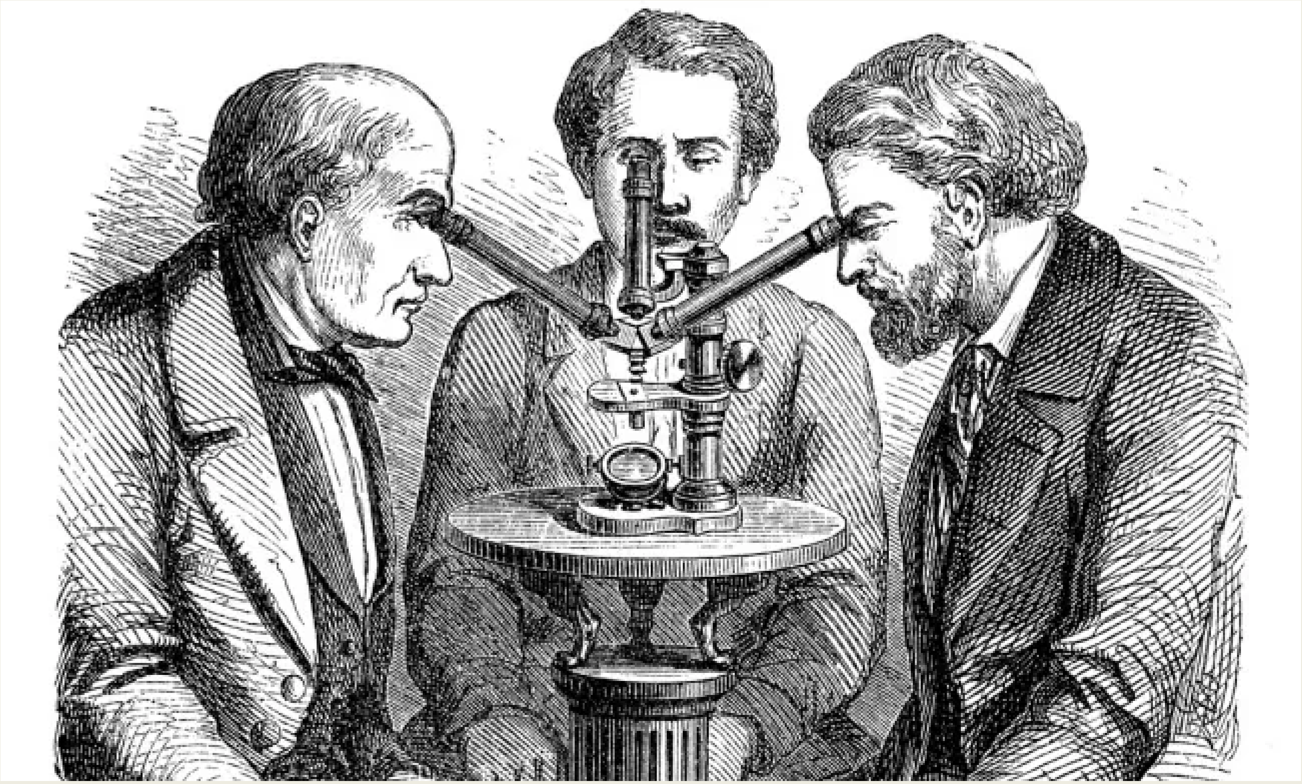
Repetitorium chemie

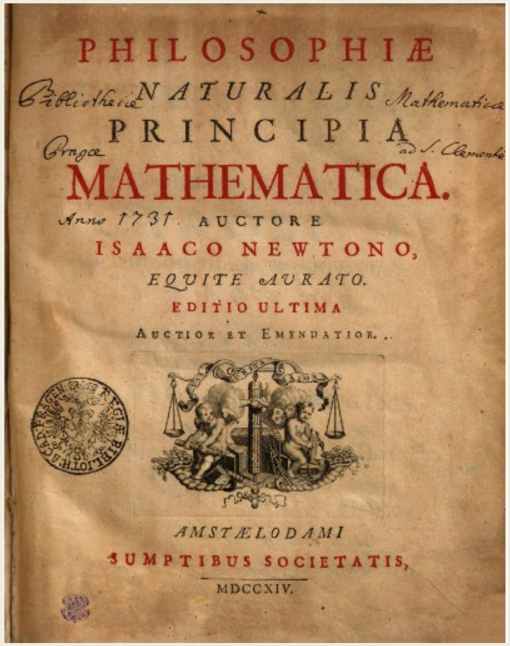


Illustrovaný „Stručný přehled potřebné matematiky“
celkem v šesti dílech (© J. Gabriel 2024)

Pro úspěšné absolvování kursu „Repetitorium chemie“ je nutná středně pokročilá znalost matematiky.
Ověřte si v následujícím dotazníku své předpoklady:

	ne	ano
1. Ovládám bezpečně umění *sčítat* a *odčítat*.	O	O
2. Také zvládám *násobit*, *dělit, umocňovat, odmocňovat.*	O	O
3. Znám slovo „*rovnice*“ a chápu smysl rovnítka.	O	O
4. Vím, co znamená slovo „*funkce*“.	O	O
5. Znám číslo Ludolfovo, Eulerovo i Belzebubovo.	O	O
6. Vím, co je „*logaritmus*“ (a taky vím, že jich je víc druhů).	O	O
7. Umím spočítat „*aritmetický průměr*“.	O	O
8. Slyšel/a jsem slova „*úměra*“ a „*trojčlenka*“.	O	O
9. Vím, *jak přepočítat přísady na 20 kg těsta na ½ kg* těsta	O	O
10. Vím, co je to „*vektor*“.	O	O
11. Zhruba chápu, co je to „*derivace*“.	O	O
12. To samé s „*integrálem*“.	O	O
13. Nebojím se kružítka, ani *zrcadla*.	O	O

Hotovo? Odpověděli-li jste alespoň 10x ano, pokračujte na další obrázek!



PHILOSOPHIÆ NATURALIS PRINCIPIA MATHEMATICA.

AUCTORE ISAACO NEWTONO, EQUITE AURATO.

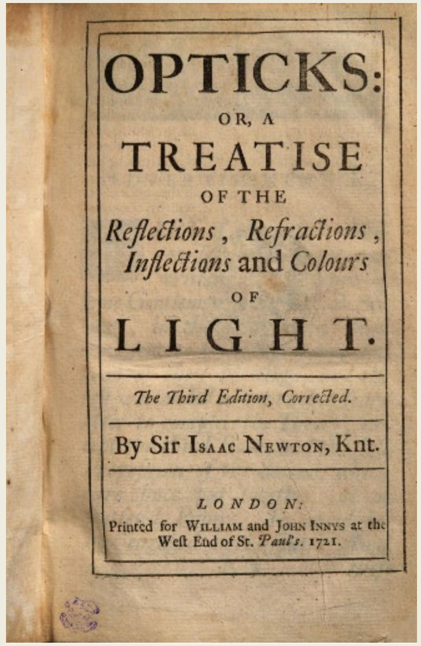
EDITIO ULTIMA

Auctior et Emendatior.

AMSTÆLODAMI

SUMPTIBUS SOCIETATIS,

MDCCXIV.



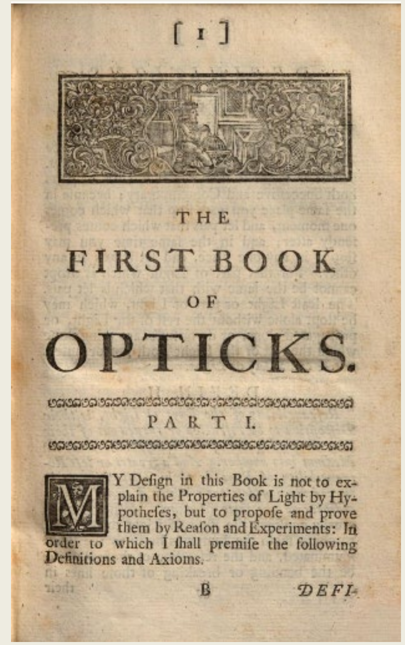
OPTICKS: OR, A TREATISE OF THE *Reflections, Refractions, Inflections* and *Colours* OF LIGHT.

The Third Edition, Corrected.

By Sir ISAAC NEWTON, Knt.

LONDON:

Printed for WILLIAM and JOHN INNYS at the West End of St. *Paul's.* 1721.



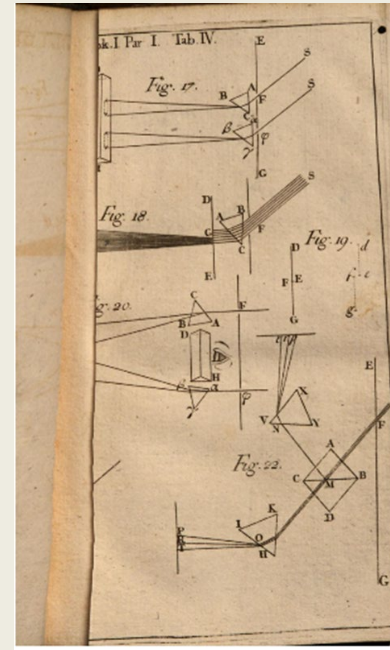
[1]

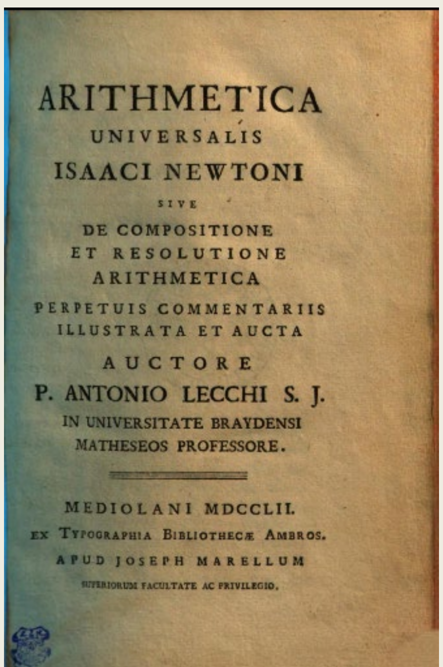
THE FIRST BOOK OF OPTICKS.

PART I.

MY Design in this Book is not to explain the Properties of Light by Hypotheses, but to propose and prove them by Reason and Experiments: In order to which I shall premise the following Definitions and Axioms.

B DEFI-





ARITHMETICA UNIVERSALIS ISAACI NEWTONI

SIVE

DE COMPOSITIONE ET RESOLUTIONE ARITHMETICA

PERPETUIS COMMENTARIIS ILLUSTRATA ET AUCTA

AUCTORE P. ANTONIO LECCHI S. J.

IN UNIVERSITATE BRAYDENSI MATHESEOS PROFESSORE.

MEDIOLANI MDCCLII.

EX TYPOGRAPHIA BIBLIOTHECÆ AMBROS.

APUD JOSEPH MARELLUM

SUPERIORUM FACULTATE AC PRIVILEGIO.

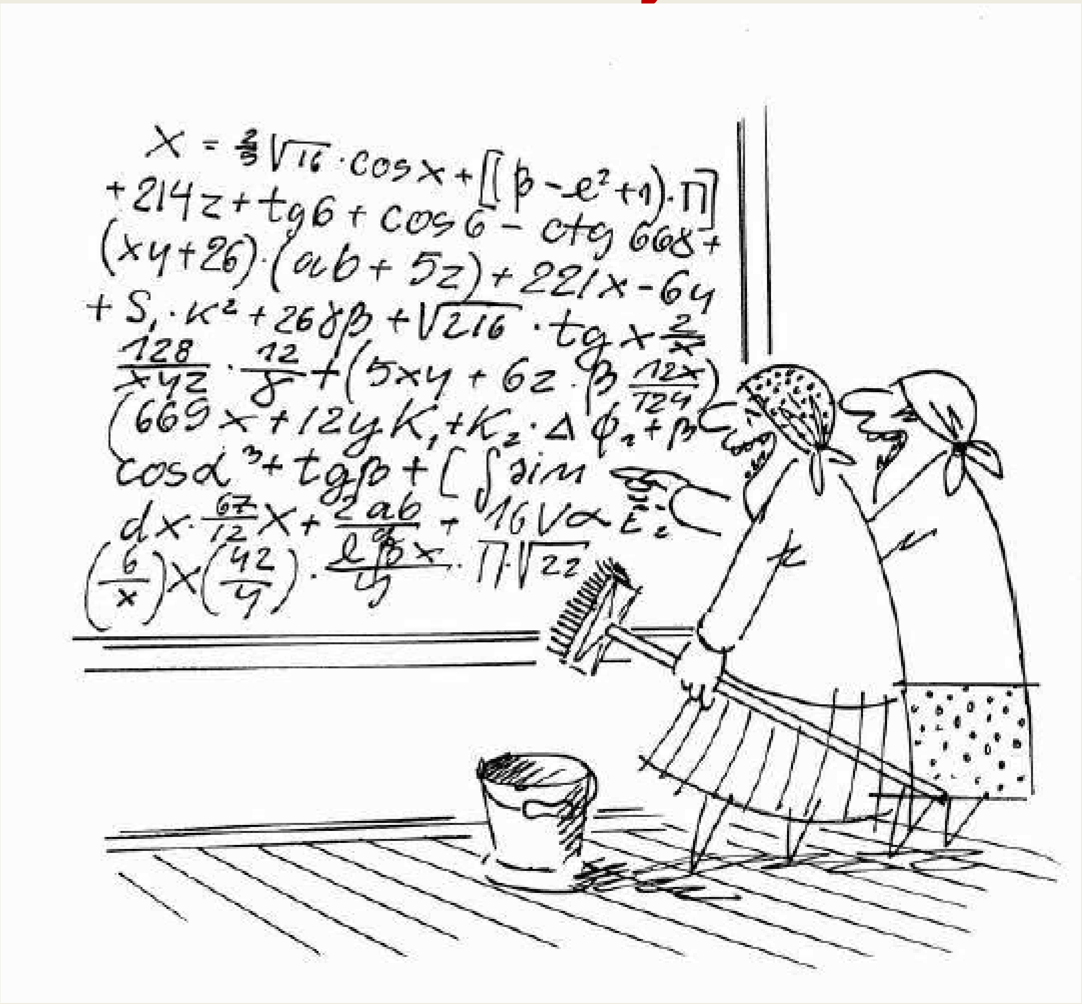
Některé tipy pro další čtení; starší, pravda, ale stále platné:

PHILOSOPHIAE NATURALIS PRINCIPIA MATHEMATICA. / Auctore Isaaco Newtono, equite aurato (1714, Compagnie Amstaelodani)

OPTICKS, OR, A TREATISE OF THE Reflections, Refractions, Inflections and Colours OF LIGHT / By Sir ISAAC NEWTON, Knt., 1721, W. aj. Innys, West End of St. Paul, London

ARITHMETICA UNIVERSALIS ISAACI NEWTONI sive de compositione et resolutione arithmetica perpetuis commentariis illustrata et aucta / IN ARITHMETICAM UNIVERSALEM ISAACI NEWTONI COMMENTARIA. LIBER I. Giuseppe Marelli, 1752 Mediolani

Matematická vsuvka I.
úměra a trojčlenka



http://www.matematika.cz/

Trojčlenka – přímá úměra

Pokud platí, že „čím více… tím více“, jedná se o přímou úměru.

- Čím více kopáčů bude kopat, a ne přihlížet, tím více toho vykopají.
- Čím více budeme sypat soli do vody, tím koncentrovanější bude roztok.

Trojčlenka – nepřímá úměra

Pokud platí, že „čím více … tím méně“, jedná se o nepřímou úměru.

- Čím více stránek knihy přečteme, tím méně nám jich zbývá do konce.
- Čím více budeme v noci mlátit do bubnu, tím méně budeme mít spokojených sousedů.

Trojčlenka – přímá úměra

Příklad: Auto spotřebuje 6 litrů benzínu na 100 kilometrů. Kolik litrů benzínu spotřebuje po ujetí 250 kilometrech?

Postup: Jako první si zapíšeme co známe. Využijeme k tomu následující tabulku, která nám zpřehlední, co známe a co chceme vypočítat:

100 km …………………6 litru

250 km…………………*x* litru

V prvním řádku máme zapsané údaje, které zcela známe. Ve druhém řádku máme na pravé straně údaj, který neznáme a na levé straně údaj, pro který chceme neznámou vypočítat. Ve sloupcích musí vždy být stejné údaje, v tomto případě ve sloupci musí být buď vždy kilometry nebo vždy litry.

Existuje pomůcka, která vám pomůže tento příklad vypočítat. Jako první nakreslete napravo šipku zdola nahoru, takto:

100 km…………………6 litru

250 km…………………*x* litru↑

Pokud se jedná o přímou úměru, pak nalevo nakreslíme stejnou šipku, zdola nahoru:

↑………………… ↑

V dalším kroku sestavíme zlomky ze sloupců ve směru šipek. Čitatel tak odpovídá číslu, kde šipka začíná a jmenovatel číslu, kde šipka končí. Tyto zlomky dáme do rovnosti. Z prvního sloupce (kilometry) tak získáme zlomek 250100 a z druhého (litry) zlomek *x*6. Zapsáno do rovnice:

250/100=*x*/6

Trojčlenka – nepřímá úměra

Příklad: Na svém počítači máte internet o rychlosti 2 MB za sekundu a záznam koncertu Dády Patrasové jste si stáhli za 450 sekund. Za jak dlouho byste stáhli stejný koncert, pokud byste měli internet o rychlosti 6 MB za sekundu?

Postup bude stejný jako u přímé úměry – zapíšeme si údaje do přehledné tabulky:

2 MB/s ……………….450 sekund

6 MB/s……………….*x* sekund

Nyní šipky. Pravá šipka bude opět zdola nahoru, tady se nic nemění. Ale protože se jedná o nepřímou úměru, půjde levá šipka opačným směrem, shora dolů.

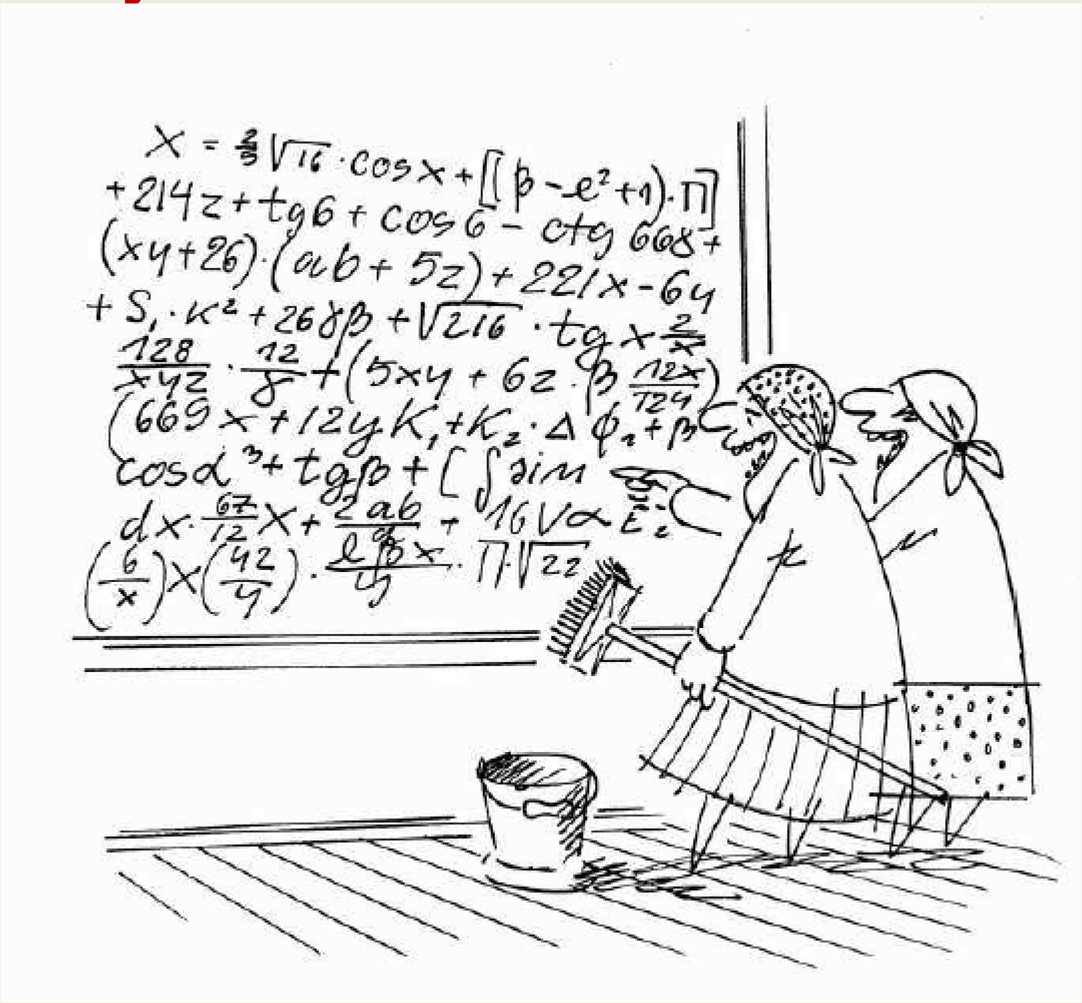
2 MB/s ……………….450 sekund

↓6 MB/s……………….*x* sekund↑

Další postup už je stejný – vytvoříme z této tabulky zlomky, opět po směru šipek. Dostaneme tak zlomky 26 a *x*450, které dáme do rovnosti:

$2/6=x/450$

Matematická vsuvka II.
jednoduchá statistika



Průměr, medián a modus

- Průměrem se rozumí klasický aritmetický průměr souboru sledovaných hodnot.
- Medián vyjadřuje prostřední hodnotu souboru dat, srovnaných od nejmenšího do největšího.
- Modus je nejčastěji se vyskytující hodnota ve zkoumaném souboru dat.

Aritmetický průměr se obvykle značí vodorovným pruhem nad názvem proměnné (nebo symbolem μ).

Jméno	známka		
Arnošt	1	průměr	**1,92307692**
Bedřich	3	modus	1
Cyril	1	medián	2
David	2		
Dita	1		
Dittmar	3		
Eliška	2		
Franta	1		
Jirka G.	1		
Jirka H.	2		
Karel	3		
Varel	1		
Žaba	4		

$$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$$

Rozptyl a směrodatná odchylka

- Popisují variabilitu (homogenitu) základního datového souboru.
- Rozptyl:

$$s^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(x_i - \bar{x}\right)^2$$

- Směrodatná odchylka:

(odmocnina z rozptylu)

$$s_x = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(x_i - \bar{x}\right)^2} = \sqrt{s_x^2}$$

Směrodatná odchylka se někdy značí symbolem σ

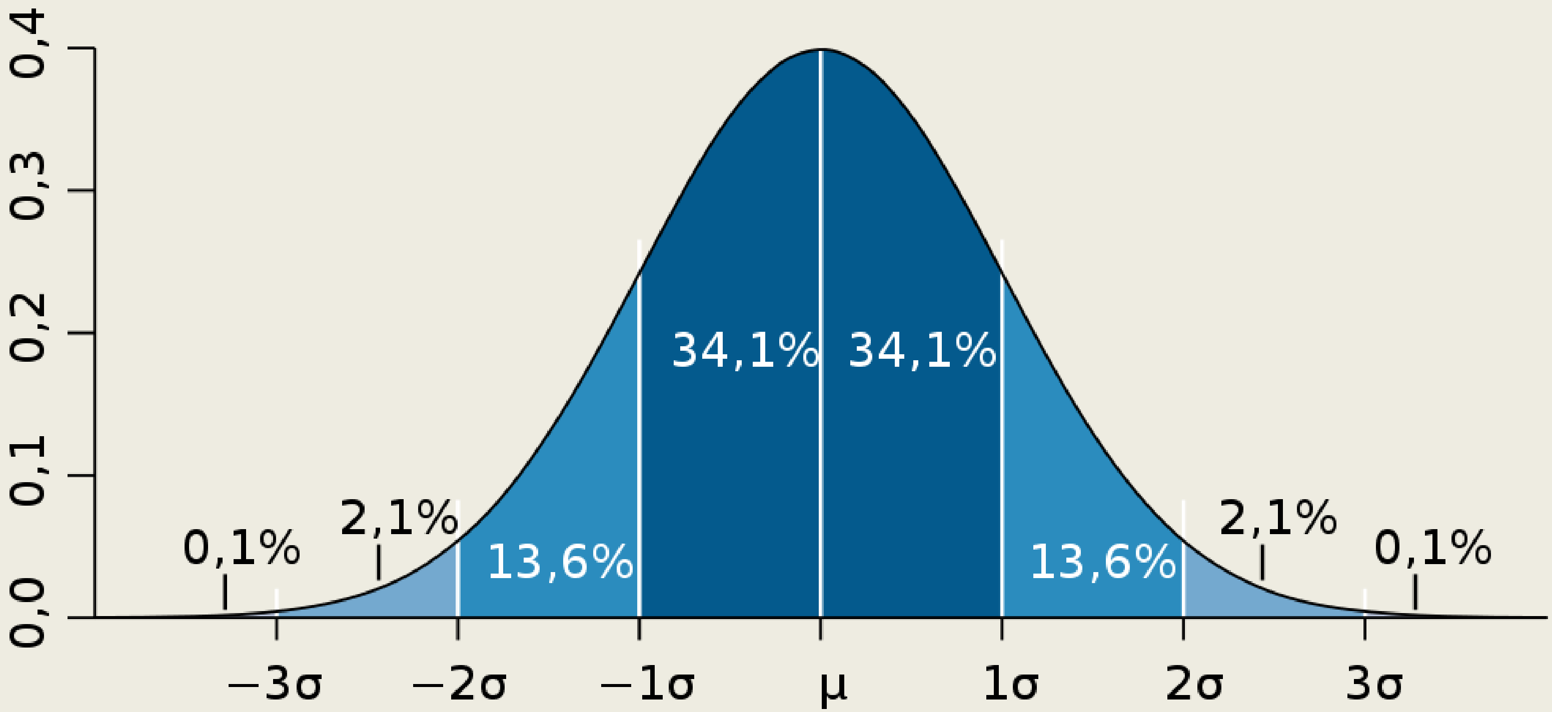
Jméno	Repetitorium	Fyzika		Repetitorium	Fyzika
Adlabert	1	4	rozptyl	0,674556213	1,786982
Bohouš	1	1	sm. odch.	0,821313712	1,336781
Cecílie	1	4			
Emerich	1	2			
Dita	1	3			
Jirka G.	1	1			
Eliška	1	4			
Kvído	1	1			
Ruprecht	1	4			
Šimon	1	1			
Valentýn	1	3			
Varel	2	1			
Žaba	4	4			

Průměrná známka z repetitoria: 1,92 ± 0,82

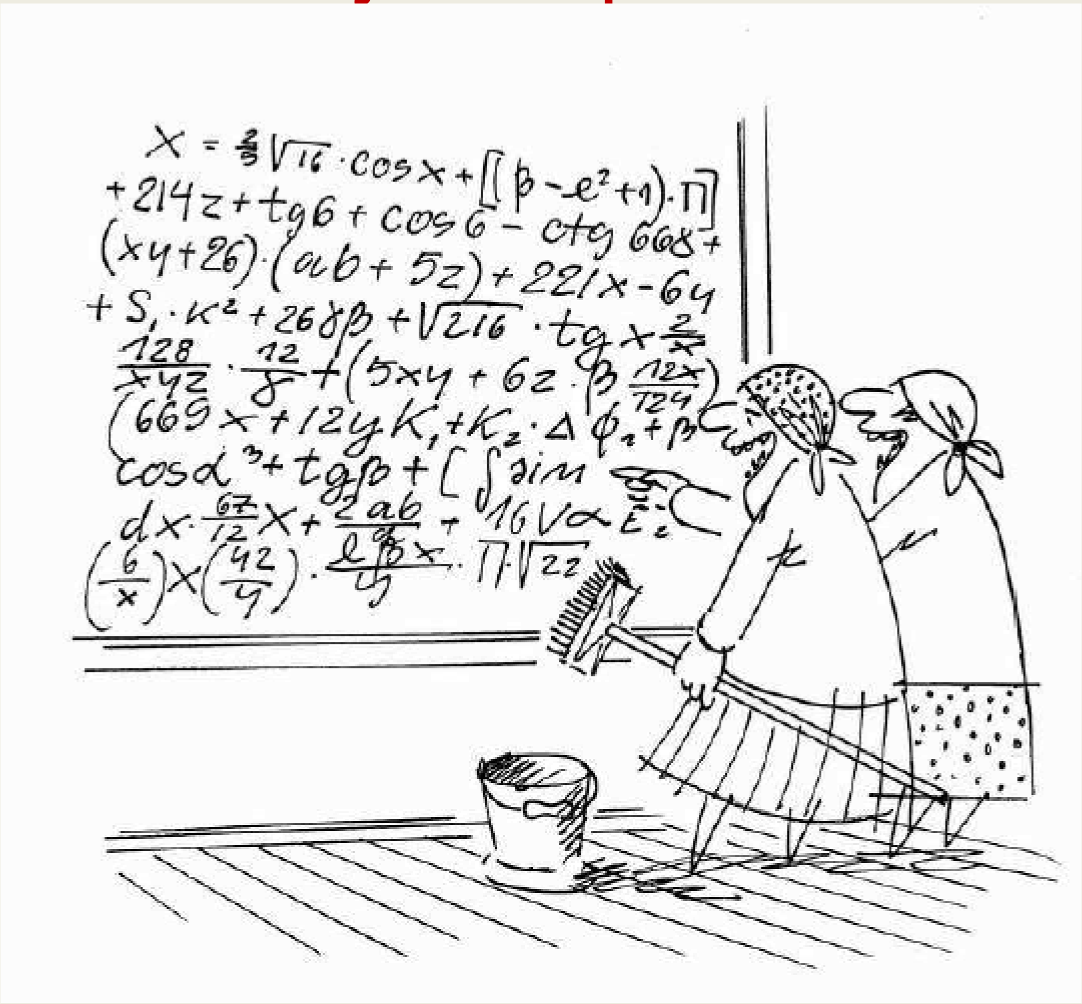
Průměrná známka z fyziky: 2,54 ± 1,34

U normálního rozložení hraje velkou roli směrodatná odchylka. Pokud máme rozložení, které je normální a má odchylku σ, pak musí platit, že 68 % hodnot se nachází v intervalu $\langle \mu-\sigma, \mu+\sigma \rangle$. Tedy 68 % hodnot se liší od průměru maximálně o jednu směrodatnou odchylku. Přibližně 95 % hodnot pak musí ležet v intervalu $\langle \mu-2\sigma, \mu+2\sigma \rangle$ a 99,7 % hodnot v intervalu $\langle \mu-3\sigma, \mu+3\sigma \rangle$.

Přehledně to znázorňuje následující obrázek:



Matematická vsuvka III.
funkce jedné proměnné

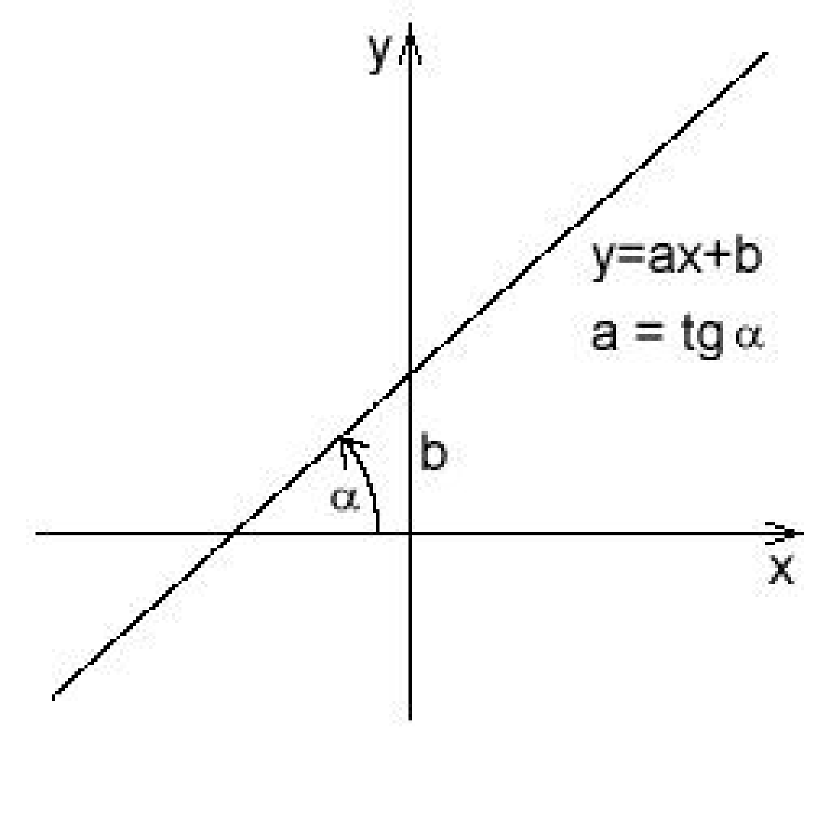


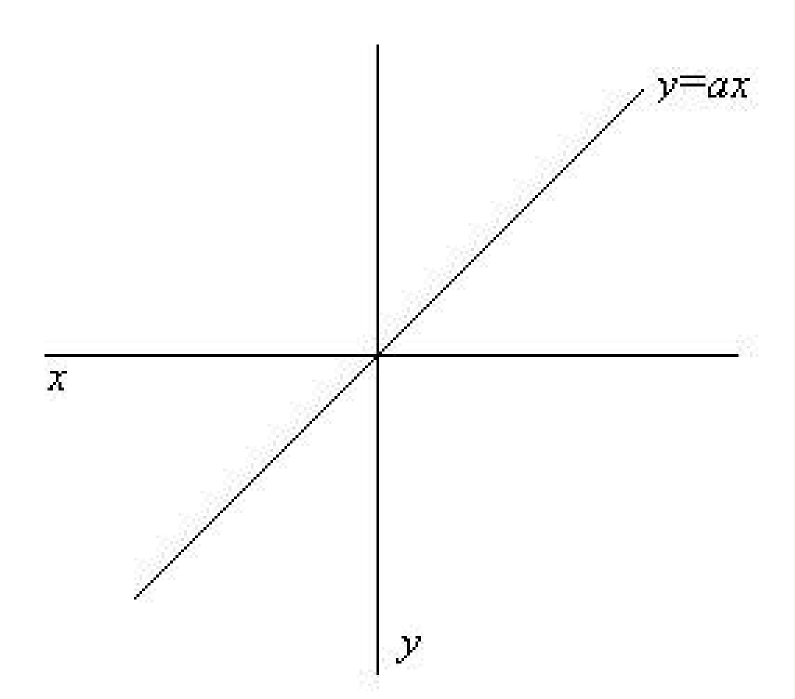
Funkce jedné proměnné

- Funkce je předpis, který každému číslu x z definičního oboru M přiřadí právě jedno y z oboru hodnot N.
- Funkci obvykle zapisujeme ve tvaru $y = f(x)$
- Funkci lze znázornit graficky v x-y, popřípadě v x-y-z souřadnicích

Lineární funkce

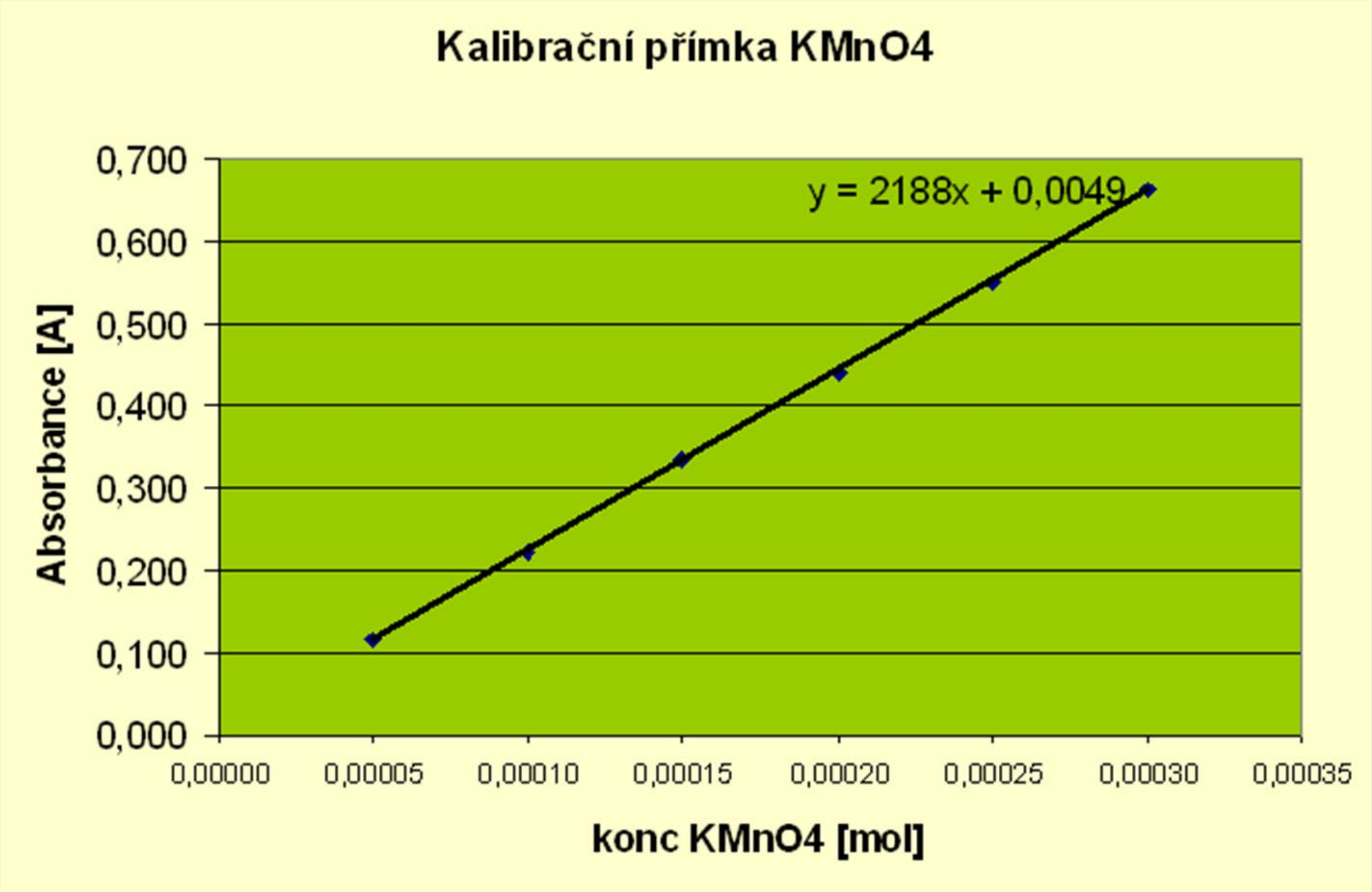
- Lineární funkce je každá funkce, která je dána předpisem y = ax + b, kde a a b jsou reálná čísla.





Příklad: Lambert-Beerův zákon

$A = \varepsilon . c . l$ Absorbance jako funkce koncentrace

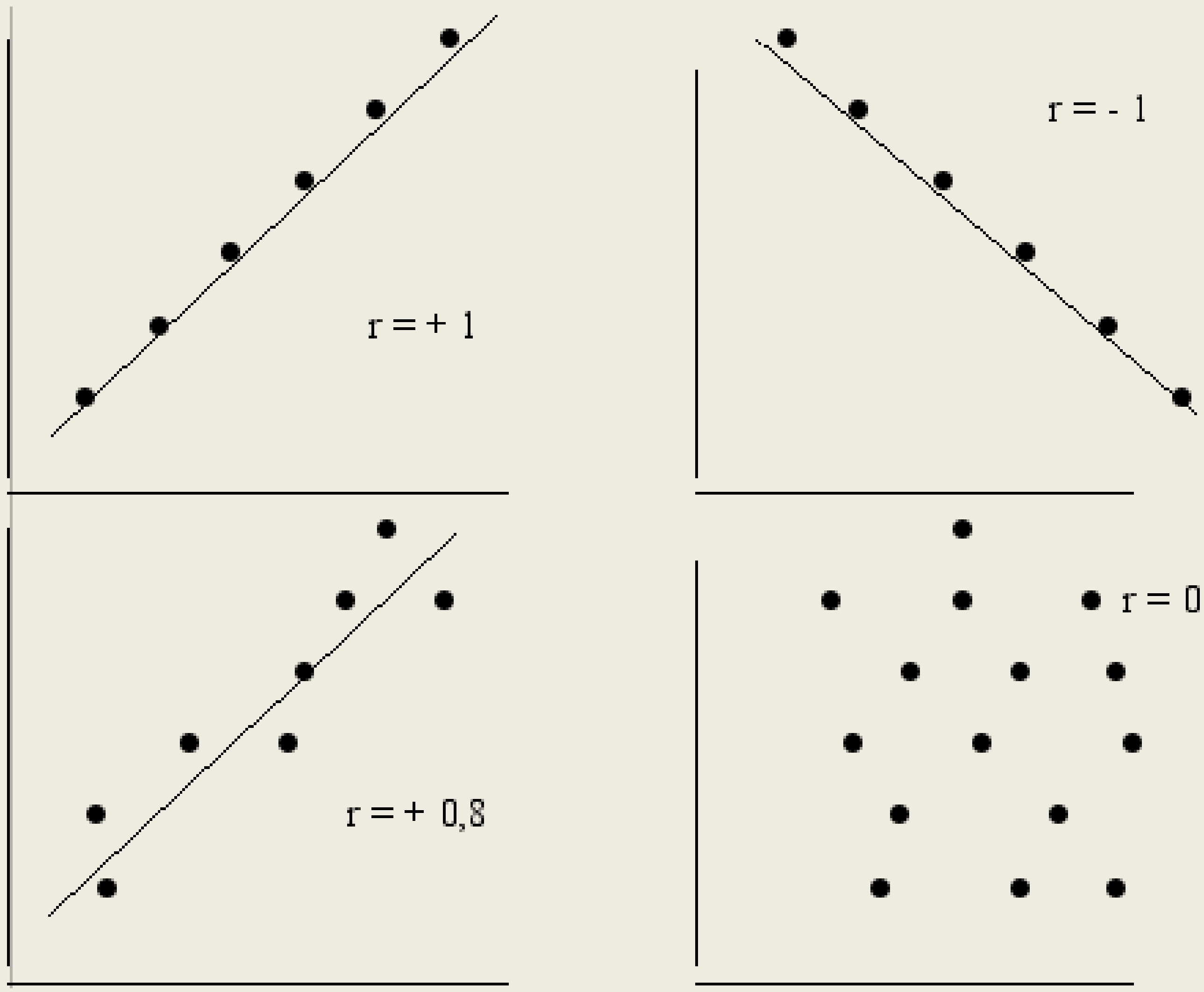


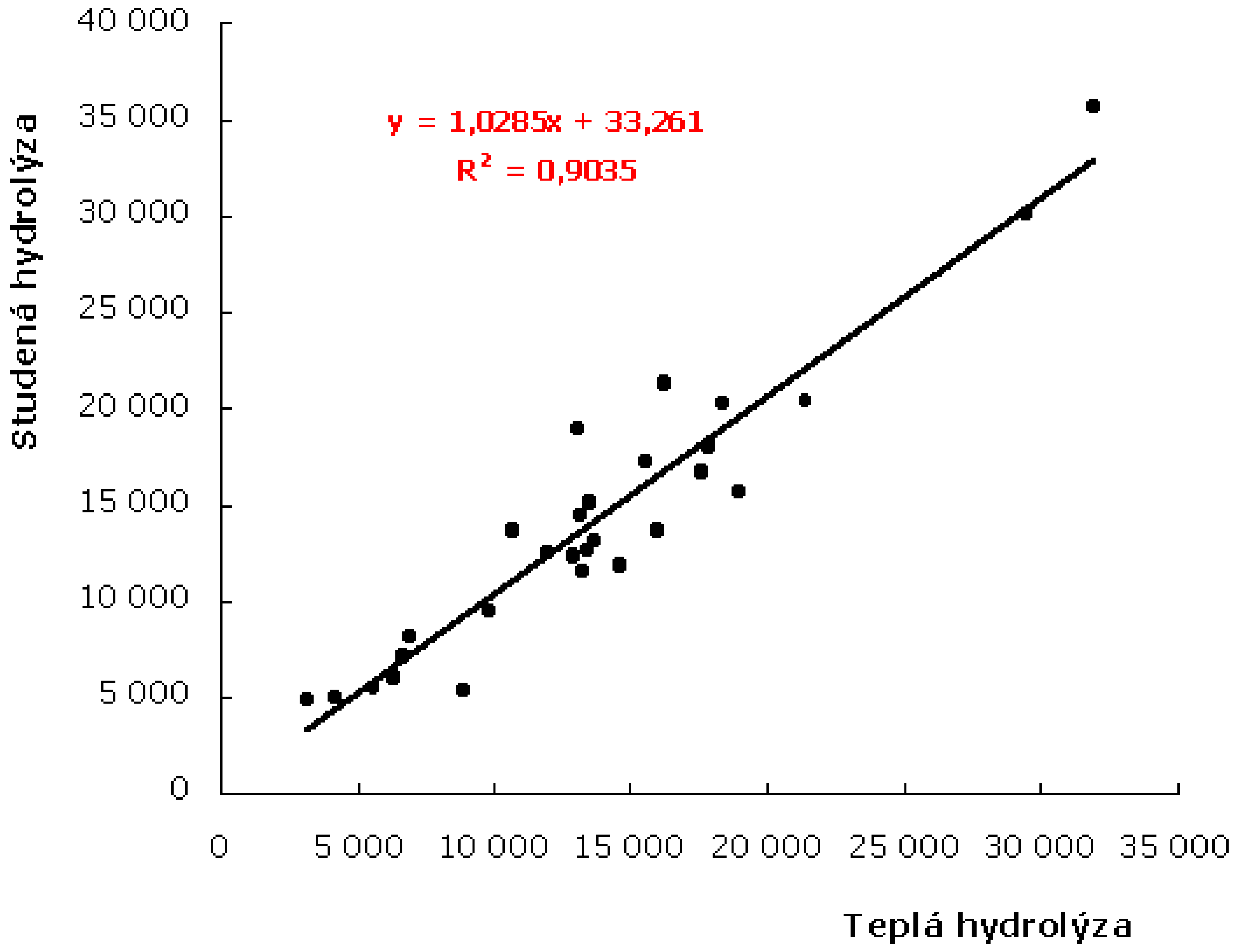
Lineární funkce

- Korelační koeficient dvojice dat: -1,000 … 1,000

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}}$$

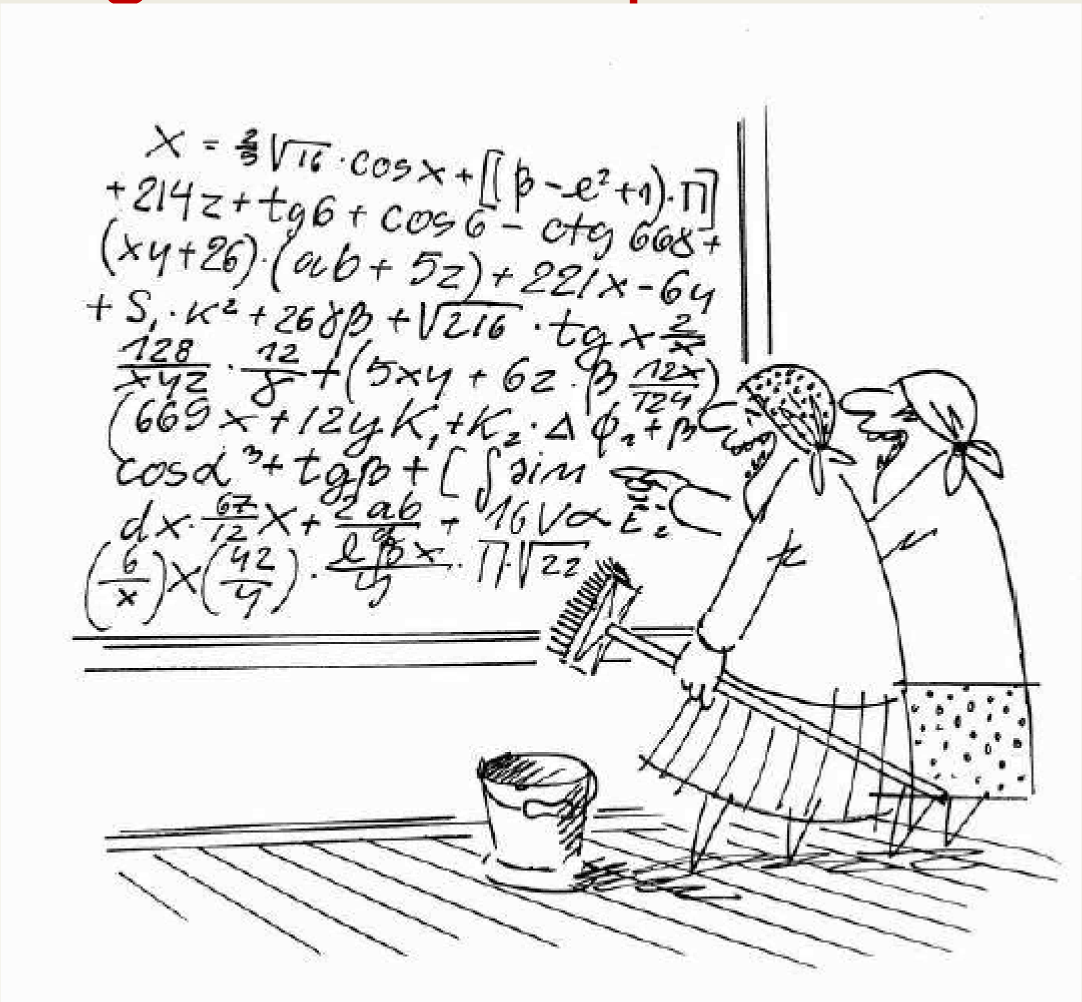
Lineární funkce





y = 1,0285x + 33,261
R² = 0,9035
Studená hydrolýza
Teplá hydrolýza
40 000
35 000
30 000
25 000
20 000
15 000
10 000
5 000
0
0
5 000
10 000
15 000
20 000
25 000
30 000
35 000

Matematická vsuvka IV.
logaritmus a exponenciála



http://www.matematika.cz

Funkce jedné proměnné

- Funkce je předpis, který každému číslu x z definičního oboru M přiřadí právě jedno y z oboru hodnot N.
- Funkci obvykle zapisujeme ve tvaru $y = f(x)$
- Funkci lze znázornit graficky v x-y, popřípadě v x-y-z souřadnicích

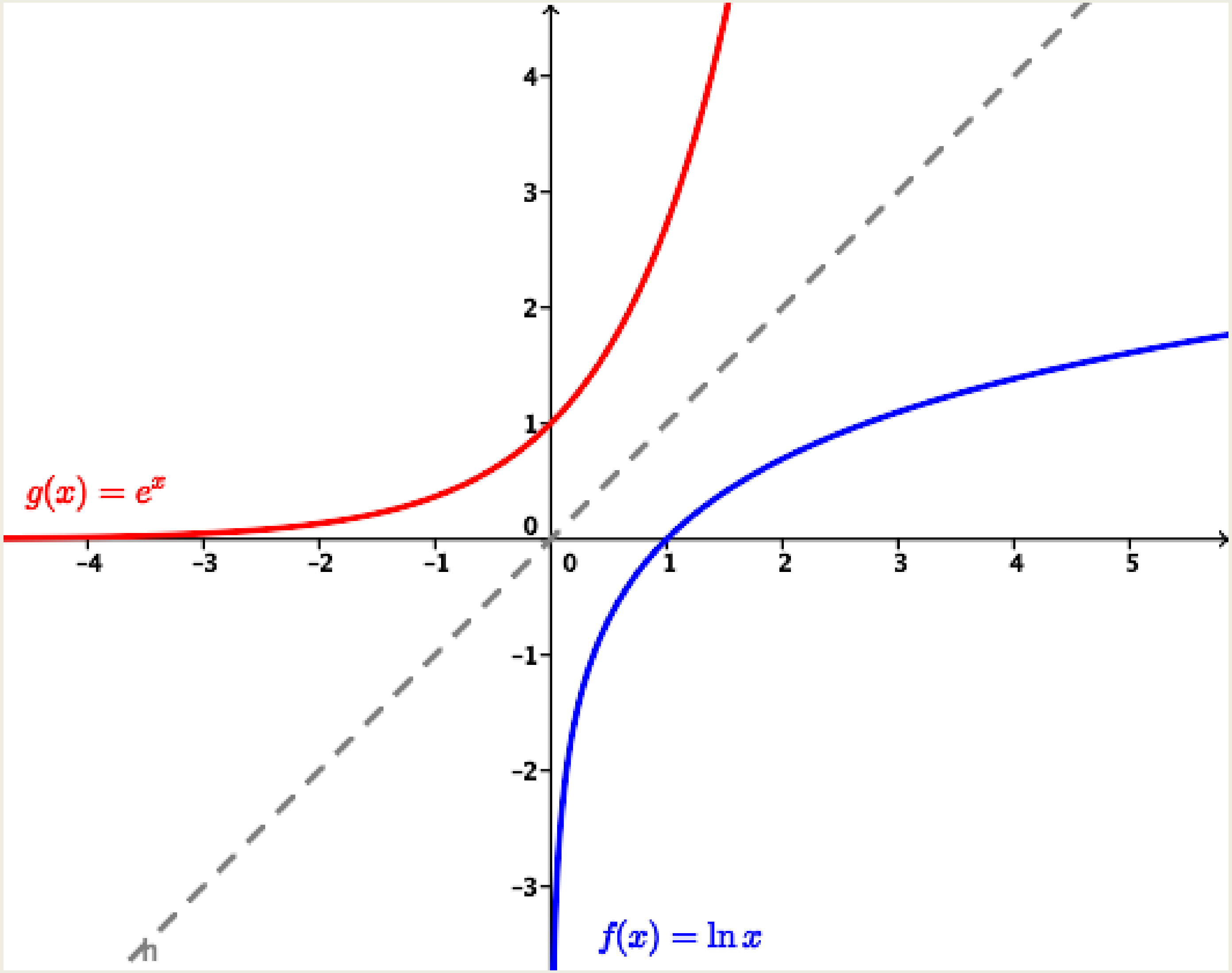
Logaritmy

- Logaritmus je exponent (y), na který musíme umocnit základ (a), abychom získali argument (x).

- Logaritmickou funkci zapisujeme slovem log (základ 10, Henry Briggs), pokud se jedná o přirozený logaritmus, tak jej značíme ln (základ e, John Napier).

$$\mathbf{y = \log_a x \quad \Leftrightarrow \quad a^y = x}$$

Logaritmus a exponenciála



Exponenciálně se například množí bakterie v živném roztoku (dokud mají co žrát)

Použití v chemii

- Dekadické logaritmy – např. výpočet pH

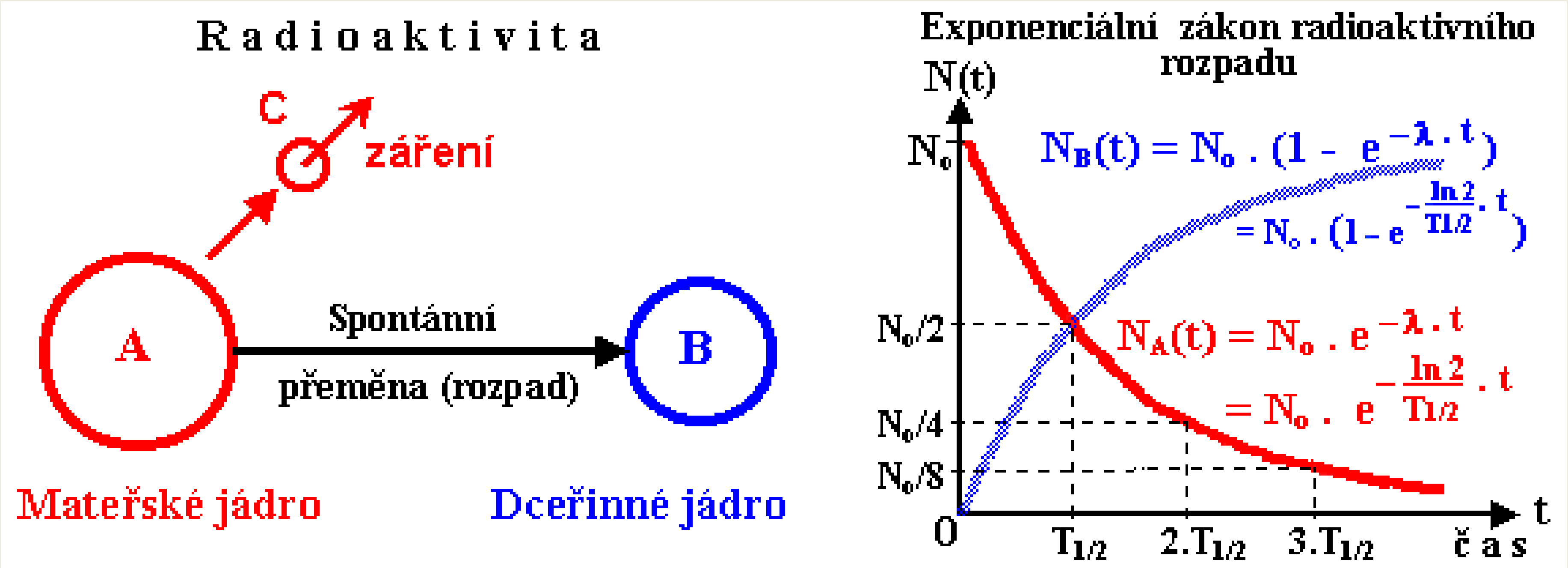
$$\mathbf{pH = - \log c\,[H^+]}$$

(kde c [H⁺] je koncentrace vodíkových iontů)

- Přirozené logaritmy – např. výpočet radioaktivity

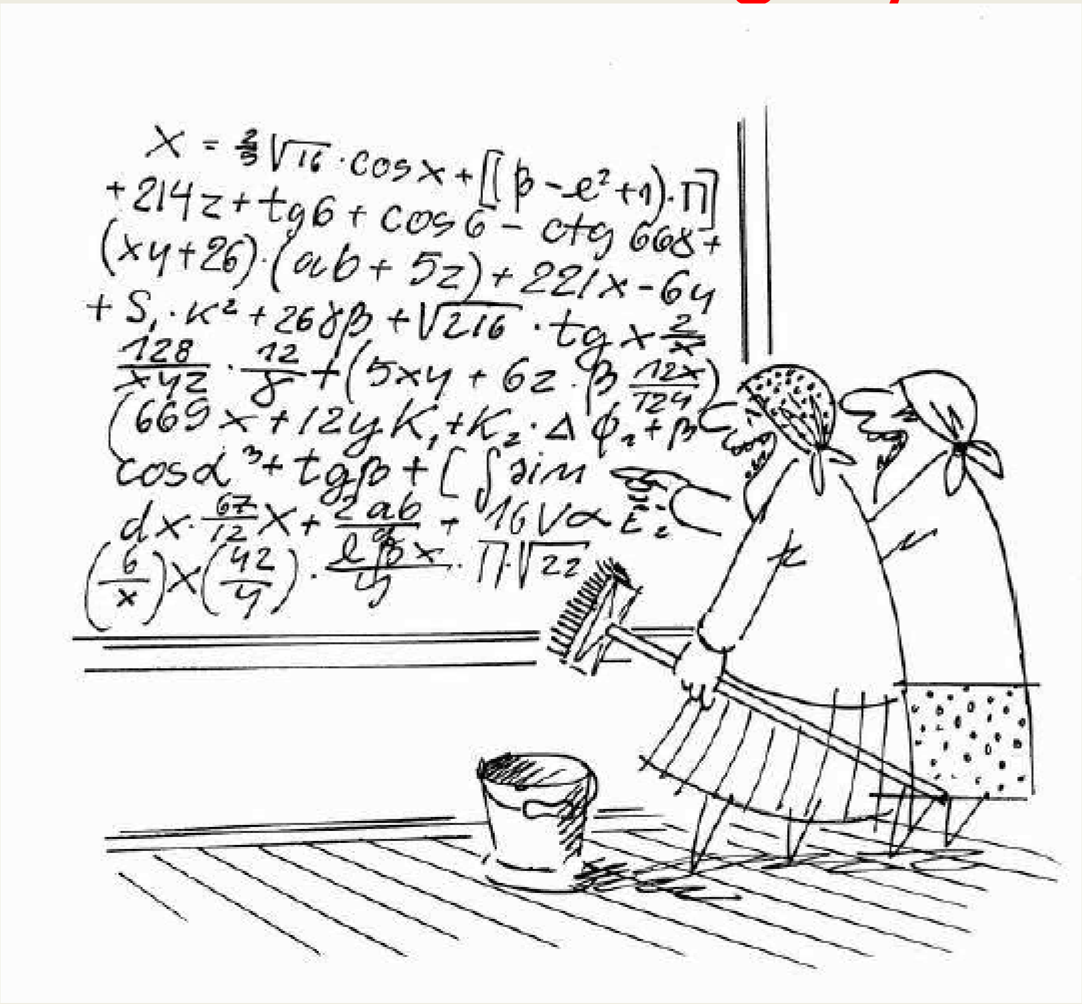
$$N = N_o e^{-\lambda t} = N_o\, 2^{-\frac{t}{T}}$$

(kde T je poločas rozpadu)



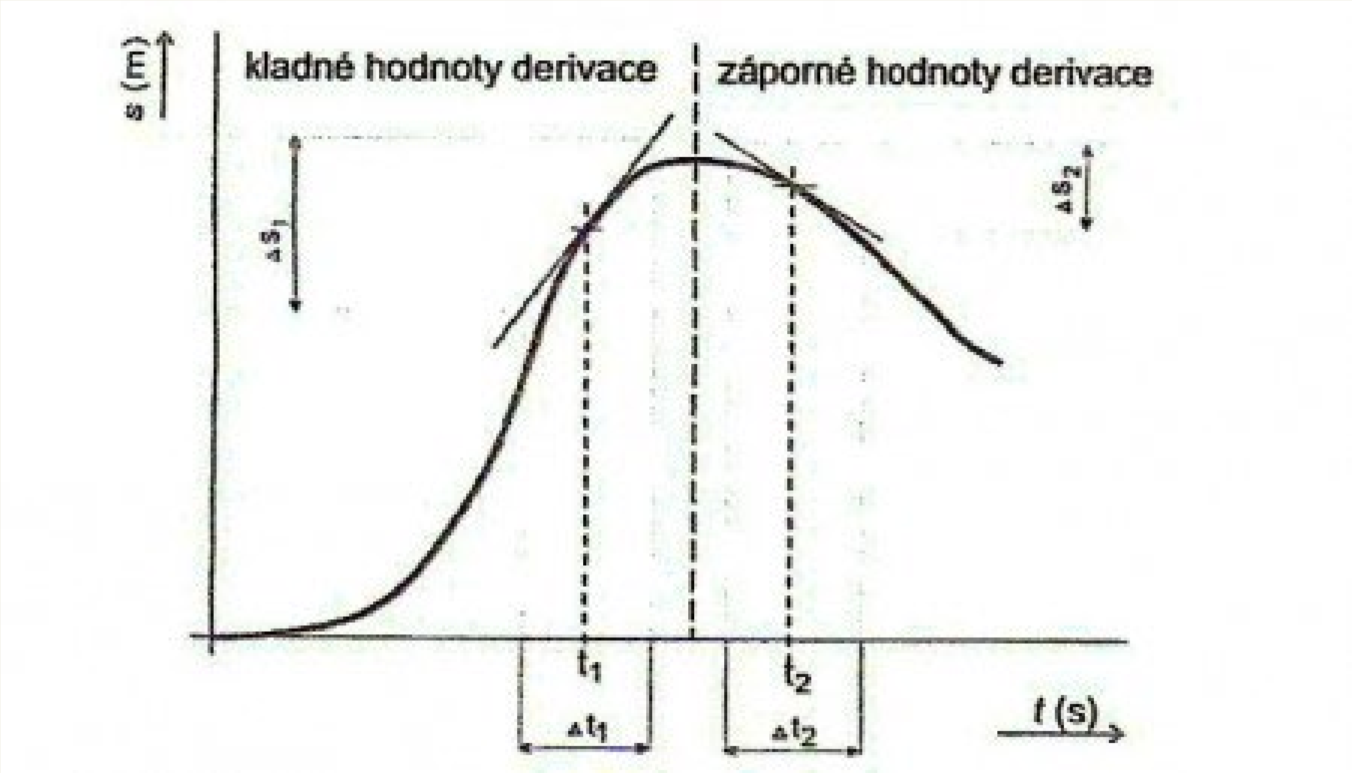
$$\ln \frac{N}{N_0} = -\frac{\ln 2}{T} \cdot t$$

Matematická vsuvka V.
derivace a integrály

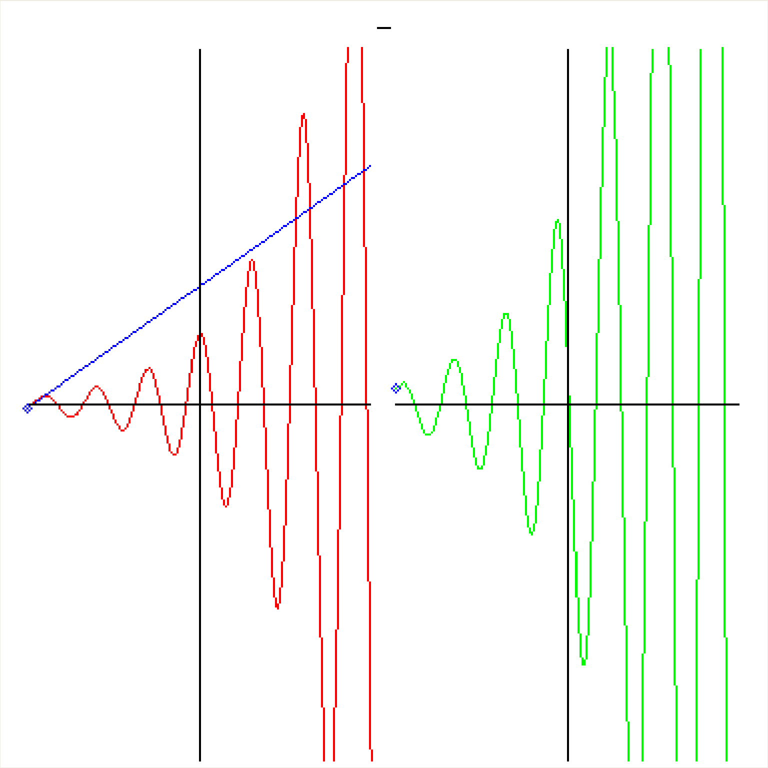


http://www.matematika.cz

Derivace a integrály



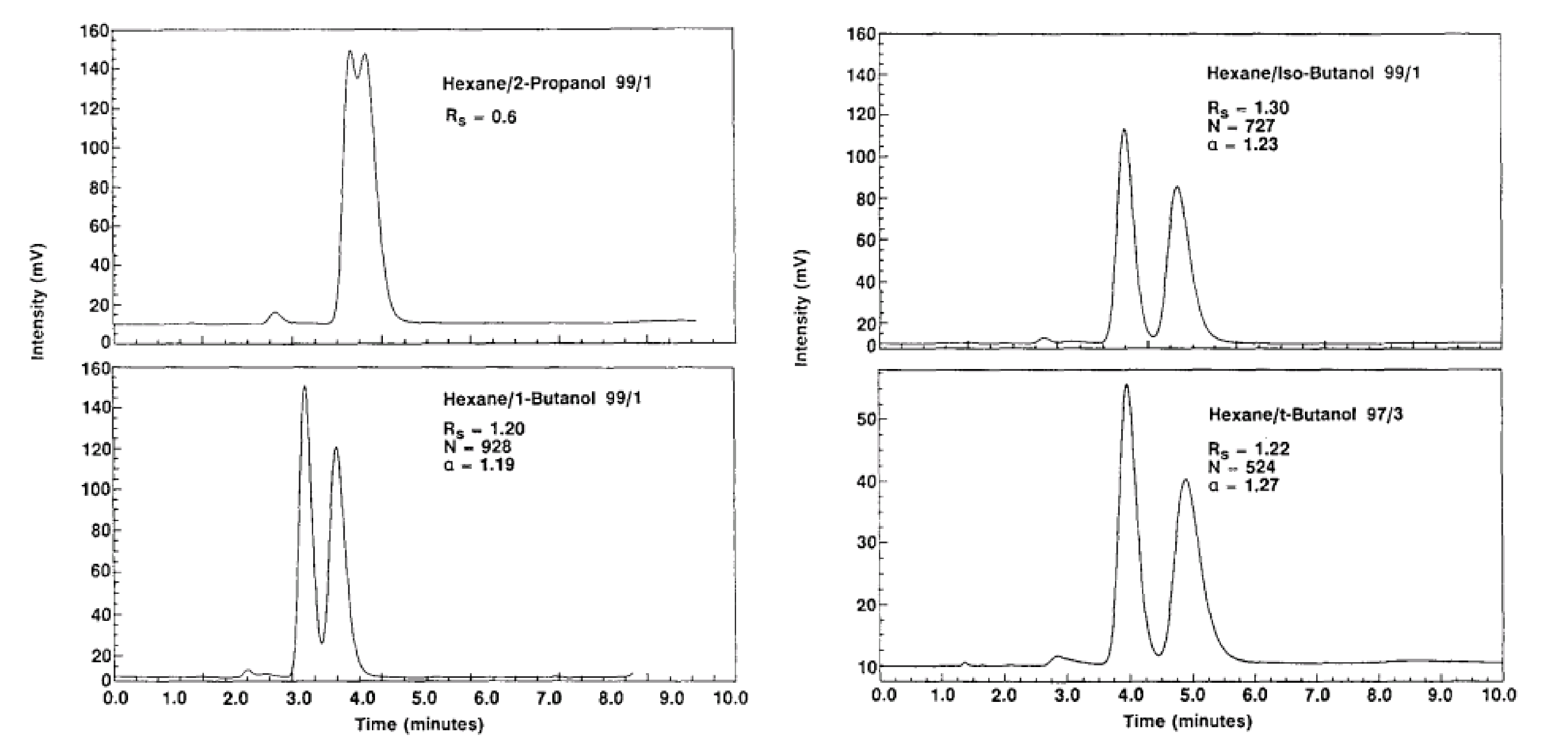
Určení lokálního maxima – první derivace je zde nulová (tečna je rovnoběžná s osou x)



Moc pěkná videa, která ilustrují průběh derivací jsou na adrese dole:

https://matematika.cuni.cz/dl/analyza/maple/07-der/funkce-derivace/funkce-derivace.html

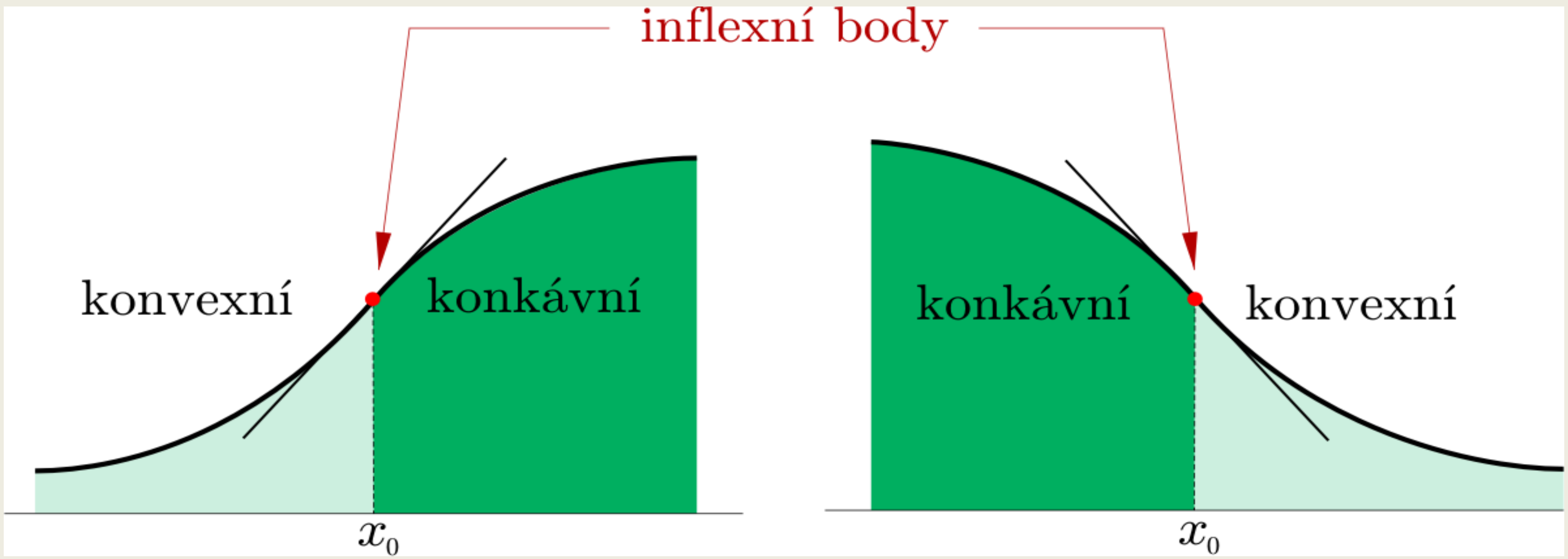
Derivace a integrály



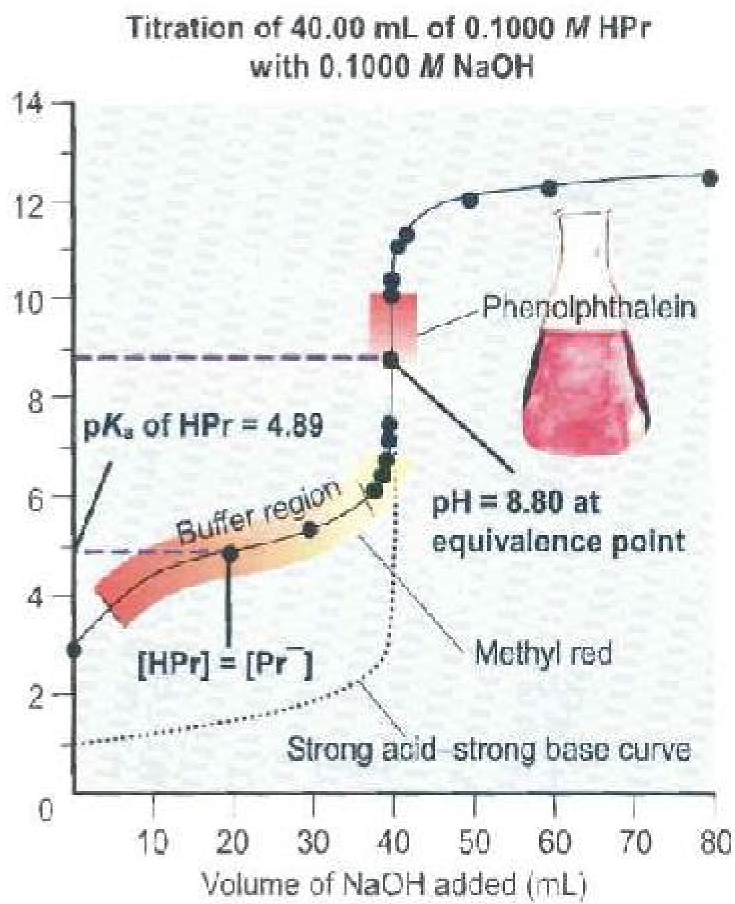
Využití např. při počítačových analýzách chromatografických záznamů: potřebujeme vědět přesně, kde má křivka („vrchol píku“) maximum (v jakém čase)

Derivace a integrály:

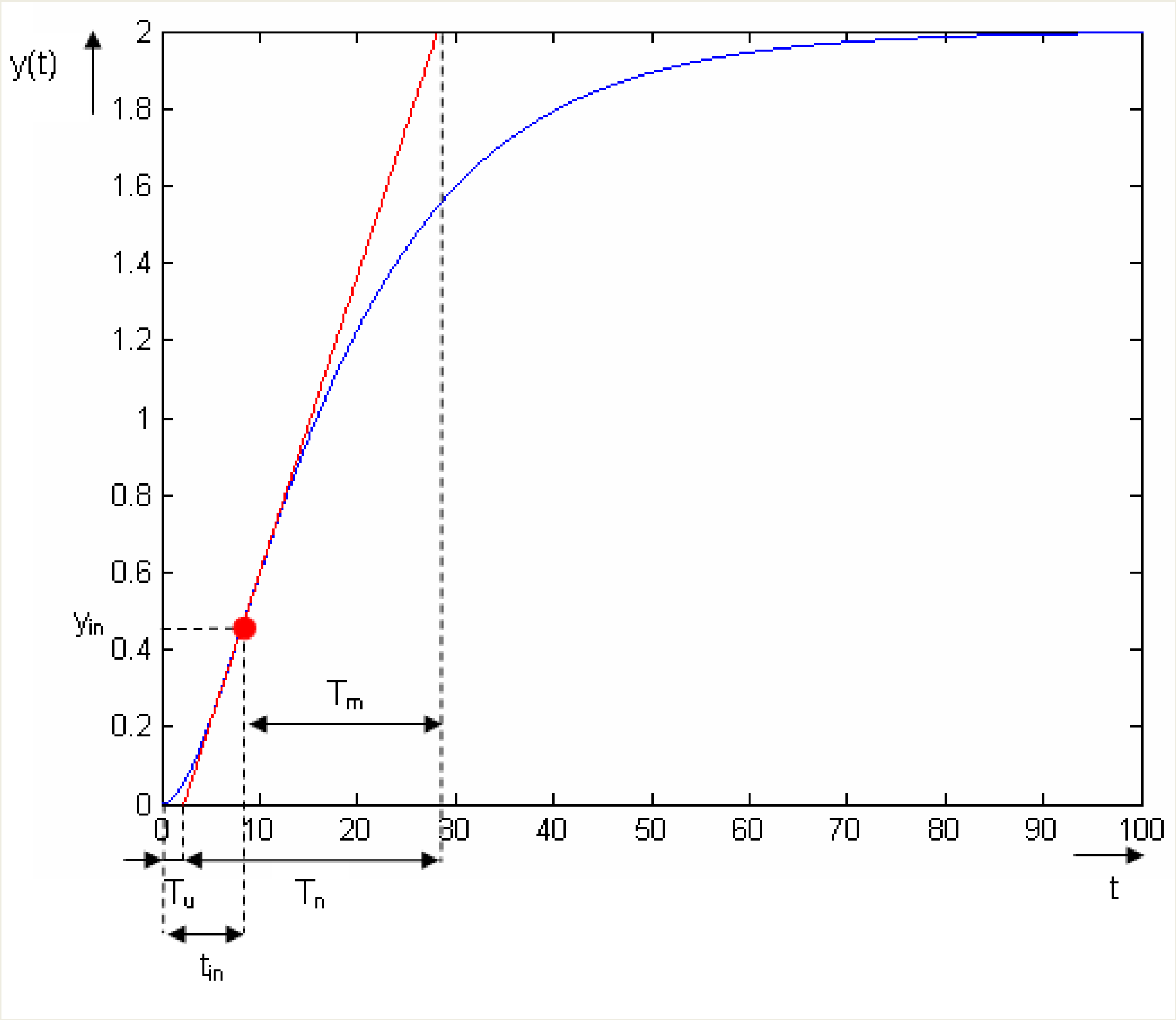
1. Definice Přechází-li graf spojité funkce f(x) v bode B = [x0, f(x0)] z jedné strany tečny na druhou, říkáme, že f(x) má v bode B (tj. pro x0) inflexní bod.



Derivace a integrály

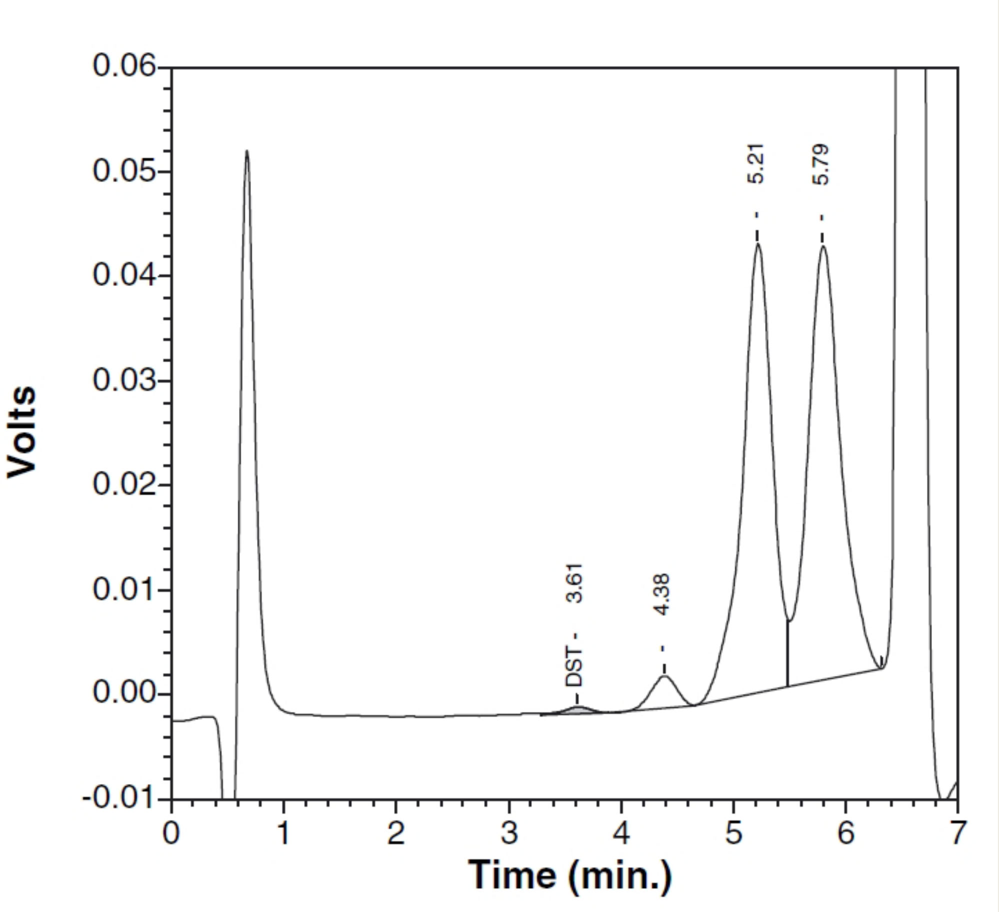


Určení inflexního bodu – hodnota první derivace je zde maximální



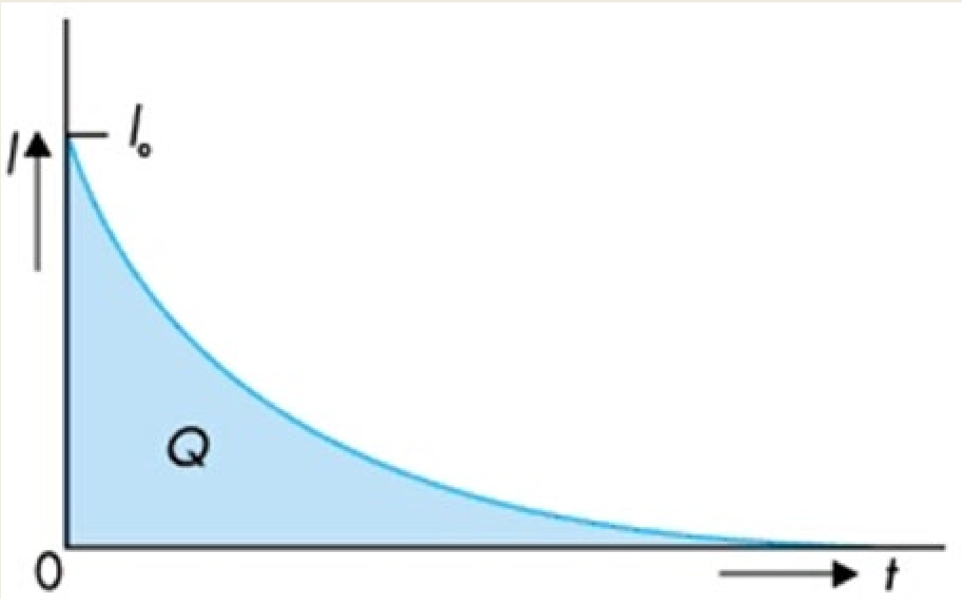
Inflexní bod: hodnota 1. derivace je zde maximální

Derivace a integrály



Určení plochy pod křivkou: „plocha píku“ je v tomto případě úměrná koncentraci látky, charakterizované „retenčním časem píku“, tj. časem lokálního maxima křivky.

Derivace a integrály



Určení plochy pod křivkou je také nezbytné například v coulometrii (zjišťuje se náboj *Q* prošlý mezi elektrodami, daný integrálem uvedeným níže). Měří se úbytek proudu *I* v čase *t*.
Z vypočtené hodnoty náboje lze spočítat buďto hmotnost přeměněné látky v roztoku *m*, nebo počet vyměněných elektronů při reakci *n*.

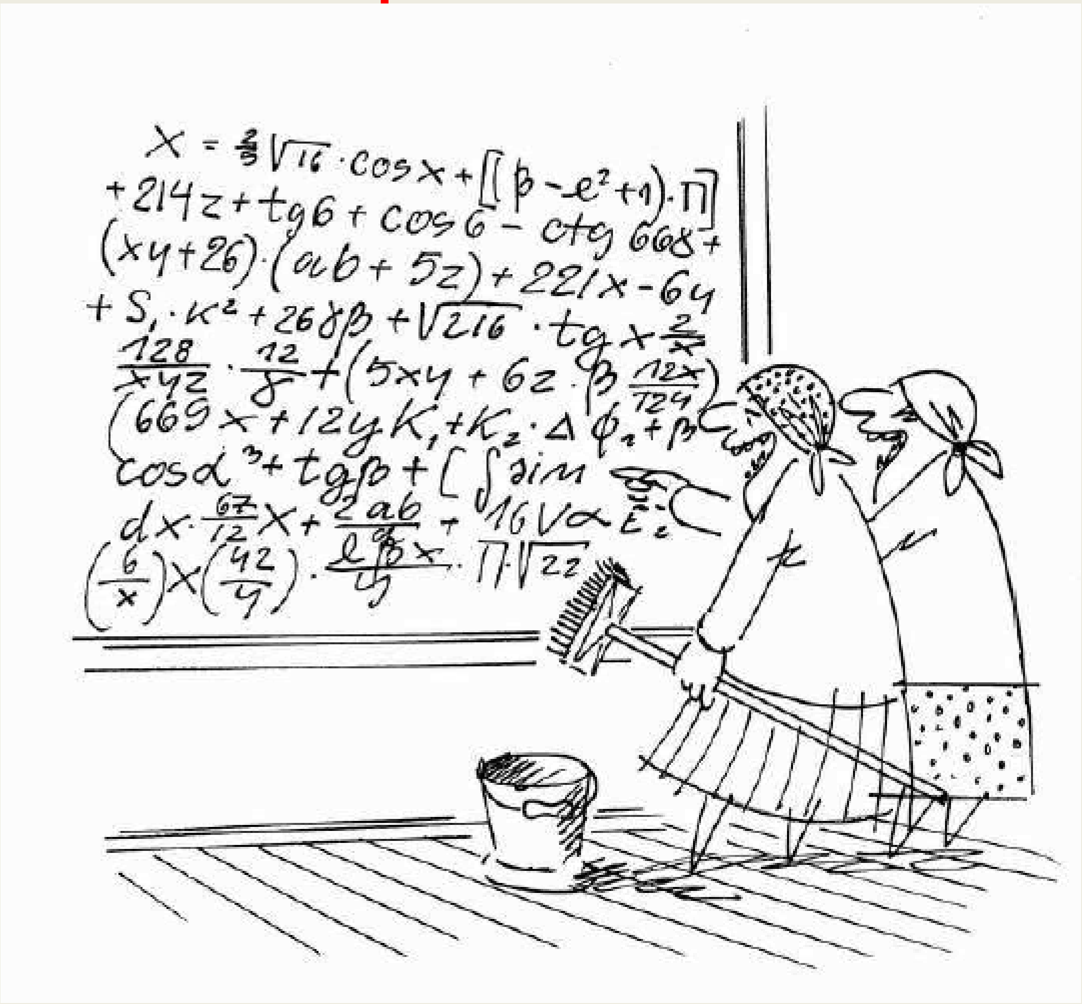
$$Q=\int_0^t I(t)\,dt$$

t
Náboj prošlý elektrolyzérem se zjišťuje inegrátorem

$$m=\frac{MQ}{nF}$$

F – Faradayova konstanta, 96 485,34 C.mol
M – molární hmotnost g/mol
Q – prošlý náboj e
n – počet vyměněných elktronů při elemetární reakci

Matematická vsuvka VI.
poslední



http://www.matematika.cz

Vyšší dívčí: operátory

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z}\mathbf{k}$$

$$\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

„nabla“ – první derivace funkce podle souřadnic

$$\Delta = \nabla^2$$

„nabla na druhou je lapla“

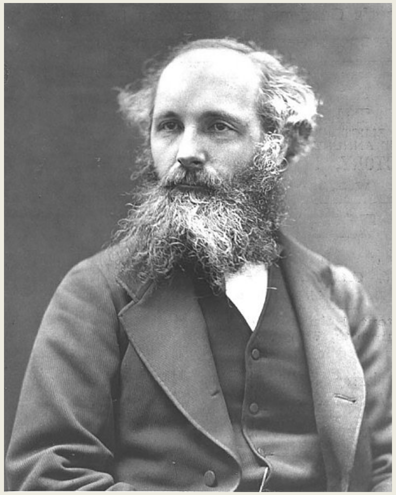
$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

„lapla“ – druhá derivace funkce podle souřadnic

Vektorové operátory: divergence (tryskání) a rotace (otáčení)

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = \rho, \qquad \operatorname{rot} \boldsymbol{H} = \boldsymbol{j} + \frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t},$$

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}, \qquad \operatorname{div} \boldsymbol{B} = 0.$$



Maxwellovy rovnice popisující vlastnosti elektromagnetického pole

Matematické universum a zároveň krásno:

$$e^{i\pi}+1=0$$

Eulerova rovnice

Leonhard Euler; 1748, **Introductio in analysin infinitorum**

(Úvod do analýzy nekonečna)

$$e = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} = \frac{1}{0!} + \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \frac{1}{4!} + \cdots$$ = 2,7182818284….

$$e^x = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{x^j}{j!},$$

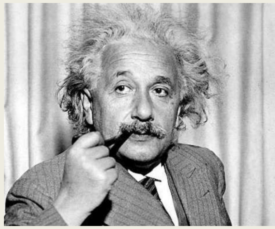
$$e^{i\pi}+1=0$$

Výše uvedený vztah je považován za krásný z několika hledisek: obsahuje pět důležitých konstant ($0,1,e,i,\pi$) a tři základní aritmetické operace (sčítání, násobení, umocnění).

Benjamin Peirce k němu řekl svým studentům následující:

Gentlemen, we have not the slightest idea what this equation means, but we may be sure that it means something very important.

Víte, že?



Albert Einstein přednášel
i v budově PřF UK ve Viničné 7?

- Přímou úměru a trojčlenku budete nejčastěji potřebovat při řešení problémů typu „kolik musím odvážit g látky, abych dostal/a roztok o koncentraci…“? Ale jde to i prostou úvahou.
- Existují i jiná rozdělení hodnot než normální (tj. Gaussovo)?
- Průměr z experimentálních dat se vždy vyjadřuje ve formě $\mu \pm \sigma$?
- Eulerovo číslo objevil r. 1683 fyzik Jacob Bernoulli při zkoumání výpočtu úroku?
- Veškerá vyhodnocení experimentálních křivek provádí za nás už počítač, ale všechno se kdysi dělalo ručně, s pravítkem a tužkou. Ale jestlipak přijdete na to,

co potřebujete k zjištění plochy pod křivkou za krejčovské a kuchyňské potřeby?

Tento materiál je určen pouze pro výuku studentů.

This presentation has been scheduled for educational purposes only.

Pokud má někdo dojem, že použité obrázky (jiné než moje vlastní) jsou kryty copyrightem, nechť mi dá vědět.

If somebody believes, that pictures or figures in this presentation are covered by copyright, please let me know.

Jiří Gabriel (gabriel@biomed.cas.cz)

Karbonizujeme koksohydráty! Termujeme nukleáry!
Akcelerujeme moderáty!
A při ohřívání párku se těšíme na další přednášku.