

有效數字之應用

一、概念

在獲取實驗結果後，吾人必須明白一事：除非知道某實驗數據的準確度，否則該數據是沒有價值的。因此，我們必須時常慮及實驗數據的可靠性或可信度。

實驗數據的分析及可靠性的表示，有種種繁簡不一的方法。在普通化學實驗中，我們常使用一種雖不令人滿意，但較容易表示數據品質的方法—有效數字。

有效數字與數學上的數字各有不同之含義，進行四則運算時也有不同的規範，使用前必須特別留意，以免適得其反，弄巧成拙。數學上的數字只表示大小，有效數字則不僅表示物理量的大小，以及數據的可靠性，而且反映了所用儀器和實驗方法的準確程度；因此，在記錄測量之物理量時，不能隨便亂寫，以至於誇大或縮小了數據的準確度。

二、內涵

有效數字的每一位數都有實際意義，它只有最後一位數字是可疑或不準的（一般又稱估計值）；因此須依據所用儀器和實驗方法來決定其位數，使有效數字成為一數值中的所有確定位數再加上第一個不準的位數。

“0”在有效數字中扮演著特別的角色，隨其位置不同而異，有時是有效數字，有時則否，須區分清楚：

例如0.028 g 中，只有二位有效數字，“0”不是有效數字；而在1.028 g 中，則有四位有效數字，“0”是有效數字；在0.280 g 中，則有三位有效數字，個位數的“0”不是有效數字；末位數的“0”則是有效數字。

以“0”結尾的正整數，其有效數字的位數不定，應改用科學記數法來表示，才能避免究竟是多少位有效數字之困擾。例如在1090 ml 這個數據中，有效數字的位數不定，可能有三位、四位甚至五位有效數字，

即： $1.09 \times 10^1 \text{ ml}$ 、 $1.090 \times 10^1 \text{ ml}$ 或 $1.0900 \times 10^1 \text{ ml}$ 。

此外，在化學計算中使用到的轉換係數或常數...，這些數字並非由測量獲得，可以不計其有效數字的位數，排除在運算規範之外。

例如： $1 \text{ cal} = 4.184 \text{ J}$ ； $1 \text{ m} = 100 \text{ cm} = 1000 \text{ mm} \dots \text{etc}$

三、運算規範

有效數字在執行各種數值運算時，不同於數學上的四則運算；其運算結果之位數應取幾位，因運算方法不同而異，最基本之考慮則是：不能因數值運算或處理，而使結果的準確度(或可靠性)擴大或縮小，超越了原始數據本身。現簡述如下：

(一)、加減法

對於數值加減後之結果，其有效數字的位數，由全部數值中具有最少的小數位數之數值決定，例如：

$5.3 + 0.250 + 3.21 - 1.2405 = 7.5195$ 應化簡成 7.5 才恰當。

(二)、乘除法

對於數值乘除後之結果，其有效數字的位數，由全部數值中具有最少位有效數字之數值決定。

例如：

$$745.6 \text{ mm Hg} / 760 \text{ mm Hg} = 0.98105 \text{ atm}$$

應化簡成 0.9810 atm 才恰當。

因為 $760 \text{ mm Hg} = 1 \text{ atm}$ 是被規定的轉換係數，不必考慮其有效數字的位數；而“5”在“0”之後，且為尾數，符合“4 捨6 入5 成雙”的規範而可捨去。

若欲捨去的數字等於“5”，且其後面的數字為“0”或再無數字時，則“5”之前一位數是偶數時，捨去“5”且不進位；當“5”之前一位數是奇數時，則進一位。若“5”後面尚有任何不為“0”的數字時，則不論“5”之前一位數是奇或偶數，皆進一位。此即“4 捨6 入5 成雙”的規範。實例：將下列數據化為四位有效數字：

$$\begin{array}{rcl} 0.53264 & \Rightarrow & 0.5326 \\ 0.33166 & \Rightarrow & 0.3317 \\ 99.7350 & \Rightarrow & 99.74 \\ 444.850 & \Rightarrow & 444.8 \\ 14.0252 & \Rightarrow & 14.03 \end{array}$$

除了利用“4 捨6 入5 成雙”的規範，取捨運算結果之位數外，另一個重要之取捨依據為“相對不準度”的衡量；即『結果之相對誤差大小，應與具有最大相對誤差的數值相當，前者約為後者的“0.2 倍”至“2 倍”』。

“相對不準度”一詞，係指“不準度／數值”。對於不準度不明的數值，一般採取數值之最後一位不準度為“1”；因此， 745.6 mm Hg 的相對不準度為：

$$0.1 / 745.6 = 0.00013 = 0.01 \%$$

對於執行各種數值運算，一般是先分析、化簡再運算；而非先運算再化簡，如此可避免錯誤或困擾。即

$$1.312 \times 23 \quad \text{先化簡成} \quad 1.3 \times 23 \quad ;$$

再運算得 29.9，最後得到 30 的結果。

(三)、對數及反對數

對於數值取對數後之結果，其有效數字的位數，只由其尾數部份決定；因首數部份為“10”的冪數，並非有效數字。尾數部份的有效數字之位數，應與取對數前的數值相同。

例如：

$$745.6 \quad \Rightarrow \quad \log 745.6 = 2.872506 \quad \Rightarrow \quad 2.8725$$

$$[\text{H}^+] = 1.9 \times 10^{-11} \text{ M} \quad \Rightarrow \quad \text{pH} = -\log [\text{H}^+] = 10.72$$

$$\text{pH} = 2.11 \Rightarrow [\text{H}^+] = 10^{-\text{pH}} = 7.8 \times 10^{-3} \text{ (而非 } 7.76 \times 10^{-3} \text{) M}$$

(四)、特例

對於第一位數值大於或等於“8”的數據，則其在執行各種數值運算時，其有效數字的位數可多算一位。

例如：9.27 其有效數字可多算一位，當成四位來考慮。