

高等学校教材

仪器分析实验

第三版

胡坪 主编
胡坪 王月荣 王氢 王燕 编

高等教育出版社

高等学校教材

仪器分析实验

YIQI FENXI SHIYAN



胡坪 王月荣 王氢 王燕 编

高等教育出版社·北京

内容提要

本书是与朱明华、胡坪主编的“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材、面向 21 世纪课程教材《仪器分析》(第四版)配套的实验教材。

全书共分十五章,包括绪论、气相色谱分析、高效液相色谱分析、电位分析和离子选择性电极、伏安分析法、库仑分析法、原子发射光谱分析、原子吸收光谱分析、可见光分光光度法、紫外吸收光谱分析、红外吸收光谱分析、荧光光谱分析、核磁共振波谱分析、质谱分析、综合实验及对比实验。在保持上一版教材实用、适用、简便、先进的基础上,根据学科发展和实验教学改革需求,对原有实验进行了调整合并,增加了新的实验内容和分析技术,删除了相对陈旧的仪器和对环境有害的实验内容。

本书可作为高等学校化工类和应用化学专业仪器分析实验教材,也可供相关专业选用和参考。

图书在版编目(CIP)数据

仪器分析实验 / 胡坪主编. --3 版. --北京:
高等教育出版社, 2016.1

ISBN 978-7-04-044375-2

I. ①仪… II. ①胡… III. ①仪器分析-实验-高等
学校-教材 IV. ①O657-33

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 287653 号

策划编辑 李 颖 责任编辑 沈晚晴 封面设计 李小璐 版式设计 马云
插图绘制 杜晓丹 责任校对 刘娟娟 责任印制 耿 轩

出版发行 高等教育出版社
社 址 北京市西城区德外大街4号
邮政编码 100120
印 刷 大厂益利印刷有限公司
开 本 787mm×960mm 1/16
印 张 18.5
字 数 330千字
购书热线 010-58581118
咨询电话 400-810-0598

网 址 <http://www.hep.edu.cn>
<http://www.hep.com.cn>
网上订购 <http://www.hepmall.com.cn>
<http://www.hepmall.com>
<http://www.hepmall.cn>
版 次 2005年5月第1版
2016年1月第3版
印 次 2016年1月第1次印刷
定 价 27.20元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换
版权所有 侵权必究
物料号 44375-00



第三版修订说明

本书自 2005 年修订出版第二版以来又过去了十年,在这十年期间,相关领域的发展需求和科技水平的迅速提高促进了仪器分析方法、技术的发展。为了满足新时期对创新人才培养的需求,各高校教学用分析仪器也进入了快速更新换代的时期,以适应不断变革的理论及实践教学。为此,有必要对本书进行再次修订,以跟进学科发展,使仪器分析实验教学在培养学生综合素质和创新能力方面发挥积极的作用。

本次修订在保持原书实用、适用、简便和先进性的基础上,根据学科的发展趋势和实验教学改革的需求,对实验部分和仪器部分都进行了较大的改动,具体修订内容如下:

1. 为与朱明华等编写的《仪器分析》(第四版)配套,同时也由于荧光分析法的用途日益广泛,本次修订新增了第十二章“荧光光谱分析”,包括基本原理,两个荧光定性、定量分析实验,仪器结构及使用方法的介绍等。在其他章节中,适当地增加了涉及新的分析技术的实验,如第二章的“毛细管气相色谱的使用和分离效能测定”,第三章的“梯度洗提法同时测定苦荞中芦丁和槲皮素的含量”,第七章的“电感耦合等离子体发射光谱法测定人发中锌、铁、铜、锰、镉”,第十四章的“高效液相色谱-串联质谱法用于水果中几种植物生长调节剂的筛查”等。

2. 新增了第十五章“综合实验及比对实验”。在这一章中设计了“洗衣粉中表面活性剂的结构分析”和“奶制品及饮料中防腐剂的 HPLC 和 GC 比对分析”两个实验,前者是将试样前处理技术和多种有机波谱方法结合用于未知试样的结构鉴定,后者则是将试样前处理技术和多种色谱分析方法相结合用于实际试样的含量测定。期望借此开拓学生的思路,培养学生综合运用所学知识分析和解决实际问题的能力。

II 仪器分析实验

3. 为减少有害物质的排放导致的环境污染,或降低毒害物质的处理成本,删去了原书中使用汞电极作为工作电极的“极谱分析中的极大、氧波及其消除”等3个极谱分析实验,新增了采用固体电极作为工作电极的循环伏安和脉冲伏安分析实验;删去了第二章中“填充色谱柱的制备”实验。

4. 对部分实验的具体内容进行了调整合并。例如,第二章中“气相色谱定性分析——纯物质对照法”的实验内容较少,本次修订将该实验改为“气相色谱分离操作条件的优化和纯物质对照定性分析”,即将气相色谱操作条件的优化和定性分析两部分实验内容有机融合,这样不仅可以提高教学效率,更能促进实验与理论教学的紧密结合,体现理论对实践的指导作用。基于同样的考虑,在第八章中增加了条件优化实验“火焰原子吸收测试条件的选择及水样中铬的测定——标准加入法”。

5. 鉴于分析仪器更新换代的速度很快,原书中部分型号的仪器已经被淘汰,故在修订时删除了过于陈旧的仪器,代之以目前较新的、有代表性的仪器。例如,删除了第五章的883型极谱仪,新增了CHI660D电化学工作站;删除了第七章的31W_{IIA}型原子发射光谱仪及其相关的显影剂和定影液的配制及感光板的冲洗步骤等,新增Plasma 1000型ICP发射光谱仪等的使用方法;删除了第十一章中色散型红外光谱仪的介绍;在第十四章中新增了1290-6530型高效液相色谱-串联质谱联用仪,等等。此外,书中涉及的许多仪器都以较新的型号取代了旧型号,此处不再作一一列举。

参加此次修订工作的有胡坪(第一、二、三、十四、十五章)、王月荣(第五、六、十、十一、十二、十三章)、王氢(第七、八章)、王燕(第四、九章)。全书由胡坪统稿。

在本书的修订过程中,得到了华东理工大学分析化学教研部和化学实验中心各位同事的支持,在此表示衷心感谢。

修订者

于华东理工大学,上海

2015.2



第二版修订说明

本教材自 1994 年出版以来已有十年,在此期间科学技术的飞速进步大大促进了仪器分析方法、技术以及分析仪器的发展,仪器分析理论课程的教学水平正在不断提高,实验教学理应跟上形势。根据兄弟院校在使用本教材中提出的意见以及编者们在自身教学实践过程中发现的问题深感有必要对本教材进行修订,以便于跟上仪器分析学科发展的步伐,使实验教学在培养学生综合素质和创新能力方面发挥应有的作用。

本次修订在保持原教材编写的指导思想和风格,即实用、适用、简便和先进的基础上,根据学科发展趋势和实验教学的特点,将各章中的“仪器部分”作为修订重点,而“实验部分”不作太大变动。具体的增、删内容如下:

1. 鉴于分析仪器更新换代速度较快,原书中许多型号的仪器已经淘汰,故修订时删除了过于陈旧、落后的仪器,代之以目前较新的、有代表性且又适合于教学实验用的仪器。如第二章删去 GC 102G 型气相色谱仪,新增 GC-7890T 型和 GC-112A 型气相色谱仪;第三章新增 KLC 321 型和 HP 1100 型高效液相色谱仪;第四章删去 ZD-2 型酸度计,新增 pH5-3C 型酸度计;第六章新增 KLT-1 型通用库仑仪;第八章以 3200 型原子吸收光谱仪替换原有的 301 型;第九章删去 72 型分光光度计;第十章删去 751-G 型紫外分光光度计,新增 TU-1800PC 型仪器;第十一章增加 AVATAR 360 型傅里叶变换红外光谱仪、第十三章以 HP 5973 MSD 气相色谱-质谱联用仪替代原有的 M-80 型质谱仪。

2. 目前同类分析仪器的规格、型号繁多,操作步骤不尽相同,为了增加本书的适用性,修订时将原书中部分针对某一具体型号仪器(主要是一些由计算机控制的大型分析仪器)的“操作步骤”改为指出同类仪器操作中共同点的“操作要领”。如第三章中的 HP 1100 型高效液相色谱仪、第十章中的 TU-1800PC 紫外分光光度计、第十一章的 AVATAR 360 型傅里叶变换红外光谱仪、第十三章的

HP 5973 MSD 气相色谱-质谱联用仪等。

3. 计算机技术的快速发展,使微机大量应用于分析仪器的控制和数据处理。修订时注意选择部分由计算机控制的比较先进的仪器,如 GC-112A 气相色谱仪、HP 1100 型高效液相色谱仪、TU-1800PC 紫外分光光度计、AVATAR 360 型傅里叶变换红外光谱仪、HP 5973 MSD 气相色谱-质谱联用仪等。并介绍了计算机进行数据处理的一般技术。如在第一章中增加了有关 Microsoft Excel 软件应用的基本知识,而删去“微处理机与袖珍计算机在分析化学中的应用概述”一节;在第二章中介绍了色谱工作站;在第十三章中介绍了质谱工作站等。

4. 在实验内容方面适当增加了涉及新的分析技术的实验。新增实验有:第二章的“香水成分的毛细管气相色谱法分析”,第八章的“石墨炉原子吸收光谱法测定菜叶中铅的含量”,第十二章的“氢核磁共振谱法定量测定乙酰乙酸乙酯互变异构体”,第十三章的“气相色谱-质谱联用定性鉴定混合溶剂的成分”。在选用分析对象方面更多地考虑与环保、食品及药物有关的试样,如第三章的“高效液相色谱法测定饮料中的咖啡因”,第八章的“石墨炉原子吸收光谱法测定菜叶中铅的含量”,第九章的“洋葱皮中总黄酮的分析”等。

5. 在保持实验内容基本不变的情况下,用较为安全的试剂和试样替代一些毒性较大的试剂和试样。如在实验 2-2、2-4、2-5、2-7 用脂肪族化合物正己烷、正庚烷、丁酮等替代苯等芳香族化合物;在实验 10-3 中用乙醇替代甲醇为溶剂等,使实验过程更加安全并尽可能减少对环境的污染。

除此之外还对书中的内容细节、文字表述及附图、附表等作了全面修订。

参加修订工作的有张济新(第一章)、胡坪(第二章和第三章)、王氢(第四章~第六章)、章建康(第七章和第八章)和苏克曼(第九章~第十三章)。全书由苏克曼和张济新统稿整理。

在本书修订过程中,得到了华东理工大学化学实验中心仪器分析实验室各位同事的支持;修订稿由《仪器分析》编者,华东理工大学朱明华教授审阅,并对书稿提出了宝贵的意见和建议,在此一并表示衷心的感谢。

修订者

于华东理工大学,上海

2004.9



第一版前言

我校在为应用化学等专业开设仪器分析课程的同时,十多年来陆续编写、修订和扩充《仪器分析实验讲义》,本教材就是在该讲义的基础上,汲取和参考兄弟院校的教学经验整理编写而成的。本教材可与朱明华编《仪器分析》(第二版)(高等教育出版社出版)教材配套使用。

随着科研和生产的发展,仪器分析方法在分析检测工作中的比重越来越大,因而仪器分析课程在化学、应用化学专业、化工类专业及其他有关专业教学计划中的地位日益显得重要。为适应这一需要,本书在编写过程中力图通过实验训练,使学生加深理解各种仪器分析方法的基本原理、初步熟悉各类典型仪器的基本构造并掌握其操作方法,以期达到对学生进行应有素质和技能的培养。

本书对实验内容的选择,主要依据以下几个原则:

1. 实用 除少数验证性实验外,对于涉及含量测定的实验尽量选用各实验室实际使用的常规的分析方法;
2. 适用 选择实验时考虑到多数院校实验室现有的设备条件,或采用易于自行装配的较为简单的设备,以便各校开出尽可能多的实验;
3. 简便 对于可达到同一要求的内容相近的实验,我们尽量选取其中比较简便而易于准备的实验;
4. 先进 考虑到科学技术的发展,适当安排一些使用较高档次的精密仪器进行实验,或可组织一些参观及示范实验,以利学生开阔眼界。

鉴于仪器分析实验与该课的课堂讲授进度往往不能同步,本书在编写时,于各章开头扼要介绍某类分析方法的基本原理和特点,并于每一实验前再阐明有关实验的要领和具体细节,以便读者通过预习,对实验内容有比较清晰的了解,以期取得良好的实验效果。

在处理实验数据时,本书特意介绍与安排一些用 BASIC 语言编制的计算程

II 仪器分析实验

序,供有条件的实验室使用,以发挥计算机辅助教学的作用,促进教学手段的革新与提高。

本书第一、四、五、六、九章由张济新编写,第二、三、七、八、十、十一、十二、十三章由孙海霖编写,全书由朱明华、张济新统稿整理。在编写过程中编者曾得到华东化工学院分析化学教研组诸同事的支持。本书初稿承全国工科应用化学专业教材委员会委员王耀光教授和张世森教授审阅和该委员会中有关分析化学的委员的集体讨论,又经北京大学技术物理系和化学系部分专家的审阅,在审阅过程中,各位专家提出了许多宝贵的意见和建议,对本书的质量起到很好的保证作用,对此一并表示诚挚的谢忱。

我们恳切希望读者对书中不妥之处,不吝提出批评和建议,以促进教材质量的不断提高,编者谨致谢意。

编 者

于华东化工学院,上海

1992. 1



目 录

第一章 绪论	1
1.1 仪器分析实验的目的和要求	1
1.2 误差	2
1.3 数据处理	3
1.3.1 有效数字及其运算规则	3
1.3.2 可疑数据的取舍	4
1.3.3 平均值的置信区间	5
1.3.4 实验数据的表示方法	7
1.4 分析方法的基本评价指标	12
参考资料	14
第二章 气相色谱分析	16
2.1 概述	16
2.2 实验部分	17
实验 2-1 填充色谱柱的柱效测定	17
实验 2-2 气相色谱中色谱柱的 $H-u$ 曲线的测绘	19
实验 2-3 气相色谱分离操作条件的优化和纯物质对照定性分析	21
实验 2-4 混合烷烃的定量校正因子测定和校正归一化定量	24
实验 2-5 乙酸正丁酯中杂质的气相色谱分析——内标标准曲线法 定量	26
实验 2-6 毛细管气相色谱仪的使用和分离效能测定	29
实验 2-7 程序升温气相色谱法分离分析白酒中的两种微量香气组分	32

II 仪器分析实验

2.3 仪器部分	34
2.3.1 气相色谱仪及主要部件	34
2.3.2 典型气相色谱仪的操作方法	41
2.3.3 气相色谱仪的使用注意事项	46
参考资料	48
第三章 高效液相色谱分析	49
3.1 概述	49
3.2 实验部分	50
实验 3-1 高效液相色谱柱效能的测定	50
实验 3-2 饮料中咖啡因的高效液相色谱分析——外标法定量	52
实验 3-3 梯度洗提法同时测定苦荞中芦丁和槲皮素的含量	54
实验 3-4 离子色谱法测定水样中 F^- , Cl^- , NO_2^- , PO_4^{3-} , Br^- , NO_3^- 和 SO_4^{2-} 含量	56
3.3 仪器部分	62
3.3.1 高效液相色谱仪及主要部件	62
3.3.2 典型仪器的操作方法	68
3.3.3 高效液相色谱仪的使用注意事项	71
参考资料	71
第四章 电位分析和离子选择性电极	73
4.1 概述	73
4.2 实验部分	74
实验 4-1 乙酸的电位滴定分析及其解离常数的测定	74
实验 4-2 硫酸-磷酸混合酸的电位滴定	77
实验 4-3 用氟离子选择性电极测定水中微量氟离子——标准曲线法	79
实验 4-4 氯离子选择性电极测定水中氯含量——多次标准加入的迭代回归法	82
实验 4-5 氯离子选择性电极选择性系数的测定	86
4.3 仪器部分	90
4.3.1 常用电极及使用注意事项	90
4.3.2 酸度计及使用维护	93
参考资料	98

第五章 伏安分析法	99
5.1 概述	99
5.2 实验部分	101
实验 5-1 微分脉冲伏安法测定水样中的微量铜	101
实验 5-2 阳极溶出伏安法测定水样中的铜、镉含量	103
实验 5-3 循环伏安法测定铁氰化钾的电极反应过程	106
5.3 仪器部分	108
5.3.1 电化学分析仪及其主要部件	108
5.3.2 CHI660D 电化学工作站的使用方法及注意事项	109
参考资料	110
第六章 库仑分析法	111
6.1 概述	111
6.2 实验部分	112
实验 6-1 库仑滴定法测定微量肼	112
实验 6-2 库仑滴定法标定 $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ 溶液的浓度	114
6.3 仪器部分	117
6.3.1 库仑仪及主要部件	117
6.3.2 KLT-1 型通用库仑仪的使用方法	117
参考资料	119
第七章 原子发射光谱分析	120
7.1 概述	120
7.2 实验部分	121
实验 7-1 原子发射光谱分析测定矿泉水样中的微量金属元素	121
实验 7-2 电感耦合等离子体发射光谱法测定人发中锌、铁、铜、锰、镉	125
7.3 仪器部分	129
7.3.1 经典原子发射光谱分析仪及新型台式、便携式全谱直读 仪器简介	129
7.3.2 电感耦合等离子体光源及现代 ICP 发射光谱仪	129
7.3.3 现代 ICP 发射光谱仪的使用方法	132
参考资料	137

第八章 原子吸收光谱分析	138
8.1 概述	138
8.2 实验部分	139
实验 8-1 原子吸收光谱法测定自来水中钙、镁含量——标准 曲线法	139
实验 8-2 火焰原子吸收测试条件的选择及水样中铬的测定——标准 加入法	142
实验 8-3 石墨炉原子吸收光谱法测定菜叶中铅含量	146
8.3 仪器部分	149
8.3.1 原子吸收分光光度计及其主要部件	149
8.3.2 原子吸收实验条件的选择	152
8.3.3 典型原子吸收分光光度计的操作步骤	154
参考资料	160
第九章 可见光分光光度法	161
9.1 概述	161
9.2 实验部分	162
实验 9-1 邻二氮菲分光光度法测定微量铁的实验条件研究	162
实验 9-2 邻二氮菲分光光度法测定微量铁	164
实验 9-3 土壤中有效磷的测定	167
实验 9-4 铝的二元与三元配合物的某些性质及其比较	170
实验 9-5 洋葱皮中总黄酮的分析	173
实验 9-6 磺基水杨酸合铁(Ⅲ)配合物的组成及稳定常数的测定	176
9.3 仪器部分	180
9.3.1 分光光度计及其主要部件	180
9.3.2 分光光度计的操作步骤	182
9.3.3 分光光度计使用注意事项	183
参考资料	184
第十章 紫外吸收光谱分析	185
10.1 概述	185
10.2 实验部分	186

实验 10-1 有机化合物的紫外吸收光谱及溶剂效应	186
实验 10-2 利用紫外吸收光谱检查物质的纯度	190
实验 10-3 紫外吸收光谱测定蒽醌粗品中蒽醌的含量和摩尔吸收 系数 κ	193
10.3 仪器部分	195
10.3.1 紫外-可见分光光度计及其主要部件	195
10.3.2 紫外-可见分光光度计的使用及注意事项	196
参考资料	200
第十一章 红外吸收光谱分析	201
11.1 概述	201
11.2 实验部分	202
实验 11-1 聚乙烯和聚苯乙烯膜的红外吸收光谱测绘——薄膜法 制样	202
实验 11-2 苯甲酸红外吸收光谱的测绘——KBr 压片法制样	204
实验 11-3 间、对二甲苯的红外吸收光谱定量分析——液膜法制样	207
11.3 仪器部分	210
11.3.1 红外光谱仪及其主要部件	210
11.3.2 Nicolet FTIR 380 型傅里叶变换红外光谱仪的操作及注意 事项	212
11.4 萨特勒红外标准光谱图的查阅方法	214
附表 红外光谱中一些常见基团的吸收频率区域	216
参考资料	218
第十二章 荧光光谱分析	219
12.1 概述	219
12.2 实验部分	220
实验 12-1 分子荧光分光光度法测定维生素片中维生素 B ₂	220
实验 12-2 荧光分析法鉴定和测定邻羟基苯甲酸和间羟基苯甲酸	223
12.3 仪器部分	226
12.3.1 分子荧光分光光度计及其主要部件	226
12.3.2 F-4600 型荧光分光光度计的使用及注意事项	227
参考资料	229

第十三章 核磁共振波谱分析	230
13.1 概述	230
13.2 实验部分	233
实验 13-1 混合标样和乙苯等试样的氢核磁共振谱测绘和谱峰 归属	233
实验 13-2 氢核磁共振波谱法定量测定乙酰乙酸乙酯互变异构体	236
13.3 仪器部分	239
13.3.1 傅里叶变换核磁共振谱仪及其主要部件	239
13.3.2 AVANCE III 400 MHz 超导核磁共振谱仪的使用及注意事项	241
参考资料	243
第十四章 质谱分析	244
14.1 概述	244
14.2 实验部分	245
实验 14-1 固体试样的质谱测定——直接进样法	245
实验 14-2 气相色谱-质谱联用定性鉴定香水中的主要成分	250
实验 14-3 高效液相色谱-串联质谱法用于水果中几种植物生长 调节剂的筛查	253
14.3 仪器部分	258
14.3.1 质谱仪及其主要部件	258
14.3.2 典型仪器的操作方法	263
参考资料	268
第十五章 综合实验及比对实验	269
15.1 概述	269
15.2 实验部分	270
实验 15-1 洗衣粉中表面活性剂的结构分析	270
实验 15-2 奶制品及饮料中防腐剂的 HPLC 和 GC 比对分析	273
参考资料	280

第一章 绪 论

1.1 仪器分析实验的目的和要求

仪器分析作为现代的分析测试手段,日益广泛地为众多领域内的科研和生产提供大量的物质组成、含量、结构以至微区内元素的空间分布状态等方面的信息,因而已成为高等学校中许多专业的重要课程之一。要学好仪器分析,必须认真做好仪器分析实验,“纸上得来终觉浅,绝知此事要躬行”。通过仪器分析实验,可以使学生加深理解有关仪器分析的基本原理,并掌握必要的实验基础知识和基本操作技能;同时学习实验数据的处理方法,正确地表达实验结果。这些都是化学工作者及有关科技人员应该具备的能力,通过实验也对学生进行了应有素质的培养,因此必须充分重视仪器分析实验课的教学。

由于实验室不可能购置多套同类仪器设备,仪器分析实验教学一般多采用轮转的方式,因而实验安排与讲课内容通常不能同步进行。在这种情况下,对实验前的预习就提出更高的要求。为此,本书在每章开头,扼要介绍某类仪器分析的基本原理和特点,并且在每个实验之前,再进一步阐明该实验的要点及数据处理方法,以便读者自学,做到在实验之前就能对实验内容有较为清晰的了解,做好各项准备工作,心中有数地走进实验室。

学生在实验中应认真地观察实验现象,准确地记录实验数据与分析结果,积极思考,注意手脑并用,善于发现和解决实验过程中出现的问题,养成良好的实验习惯。

撰写实验报告是完成实验的一个必不可少的重要环节。实验报告应包括以下项目:实验名称、实验日期、简明实验原理、实验仪器类型与型号、主要实验步骤或主要实验条件、实验数据及其处理过程,以及结果、讨论等。对实验结果的分析与讨论是实验报告的重要部分,其内容虽无固定模式,但是可涉及诸如对实验原理的进一步深化理解,做好实验的关键,失败的教训及自己的体会,实验现象的分析和解释,结果的误差分析,以及对该实验的改进意见等各个方面。以上内容学生可就其中体会较深者讨论一项或几项。

1.2 误差

在分析测试过程的各个环节中,有很多因素影响所得实验结果的准确程度,即人们不能得到绝对无误的真值,只能对测试对象作出相对准确的估计。因此要求分析工作者必须有正确的误差概念,能够判断误差的种类,找出产生误差的原因,然后有针对性地采取措施,以减小误差,提高测定的准确度。

鉴于在基础化学分析课程中已经详细阐述过分析测量误差的基本知识,因此在本书中仅对有关内容作提纲挈领式的概述,以便读者复习和运用。

1. 误差分类

实验误差由系统误差与随机误差两部分所组成。

2. 误差的来源

(1) 由方法、仪器、试剂和个人等比较确定的、经常性的因素引起的系统误差。

(2) 由偶然的、无法控制的因素引起的随机误差。

3. 减免误差的措施

(1) 通过标准方法、标准试样、空白试验、对照试验和仪器校正等途径检出和减免系统误差。

(2) 通过在一定范围内,增加平行测定的次数,减少随机误差。

4. 准确度和精密度

(1) 准确度是指测定值 x 与真值 μ 相符合的程度。

(2) 精密度是指单次测定值 x_i 与 n 次测定平均值 \bar{x} 的偏差程度。

通常用平均偏差 \bar{d} 和标准偏差 σ 、 s 表示测定的精密度,计算式为

$$\bar{d} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |x_i - \bar{x}| \quad (1-1)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2} \quad (n \rightarrow \infty) \quad (1-2)$$

$$s = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \quad (n \text{ 为有限次数}) \quad (1-3)$$

标准偏差能够比平均偏差更加灵敏地反映测定数据之间的彼此符合程度。

在一般的分析结果报告中,只需列出 n (测定次数), \bar{x} (测定平均值) 及 s (标准偏差) 三项即可反映出测定数据的集中趋势或各次测定数据的分散情况,而不必一一列出全部数据。