

普通高等教育“十三五”规划教材

Physical Chemistry Experiments

物理化学实验

同济大学 浙江大学 合编

许新华 王晓岗 王国平 主编



化学工业出版社

物理化学实验

许新华 王晓岗 王国平 主编



· 北 京 ·

《物理化学实验》分为上、中、下三篇，上篇是实验相关知识，包括“致学生——物理化学实验的课程要求和注意事项”“实验数据处理与分析”和“科学数据分析与绘图软件在物理化学实验中的应用”三章，第1章着重介绍了编者的物理化学实验教学理念，第2章着重于误差分析，第3章着重于Origin软件的实用技术。中篇和下篇分别是基础型实验和拓展型实验，包括A类实验（基础型实验）21个和B类实验（拓展型实验）12个，共计33个实验项目。每个实验项目由实验简介、理论探讨、仪器试剂、安全须知和废弃物处理、实验步骤、数据处理与结果分析、讨论与思考及附（若有）构成。

《物理化学实验》对一些经典实验项目的实验设计和理论探讨进行了拓展，对实验技术的学习提供了多层次指导和训练，强调科学数据处理软件的应用，尝试在教学实验中模拟科学研究过程。采用全彩色印刷，绘图精美，生动逼真地展现了化学实验的多姿多彩。

《物理化学实验》可作为高等院校尤其是工科院校化学及近化学类专业的物理化学实验教材，也可以作为化学类专业基础化学实验教材和化学工作者的参考书。

图书在版编目（CIP）数据

物理化学实验/许新华，王晓岗，王国平主编. —北京：化学工业出版社，2017.8
普通高等教育“十三五”规划教材
ISBN 978-7-122-29979-6

I. ①物… II. ①许… ②王… ③王… III. ①物理化学-化学实验-高等学校-教材 IV. ①O64-33

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2017）第 141349 号

责任编辑：刘俊之

文字编辑：刘志茹

责任校对：吴 静

装帧设计：关 飞

出版发行：化学工业出版社（北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011）

印 装：高教社（天津）印务有限公司

787mm×1092mm 1/16 印张24½ 字数628千字 2017年10月北京第1版第1次印刷

购书咨询：010-64518888（传真：010-64519686）

售后服务：010-64518899

网 址：<http://www.cip.com.cn>

凡购买本书，如有缺损质量问题，本社销售中心负责调换。

定 价：79.00元

版权所有 违者必究

前言

本教材从酝酿写作计划到今天完成书稿,已历时6年了。说实话,编写一本物理化学实验的教材是需要勇气的,虽然编者都是从事物理化学实验教学逾二十年的一线教师,但是面对国内各高校优秀教师们编写的上百个版本各具特色的物理化学实验教科书,仍然有无从下笔之感。对于物理化学实验,我们还有多少新“货色”可以提供给同行和学生呢?

一切的教学成果都来自于教学一线的实践,教材也不例外。当编者们还是一群“青椒”的时候,也曾一度“唯书本是从”,在实验教学中严格按照选定教材的内容、方法和教学理念去指导学生。记得有一个经典的物理化学实验项目——溶液表面吸附的测定(参见本书A18),实验原理是吉布斯等温吸附方程,其中最大吸附量的推算采用朗格缪尔吸附等温式变形的双倒数直线方程。但是在测量乙醇水溶液体系时,很多学生都得不到满意的线性拟合结果,编者当年将这种情况一律归之于学生实验完成质量差,并给予他们低等级成绩。学生都有些失落,因为他们觉得实验的重现性是不错的,数据计算也是经过仔细核对的,应该是实验本身有问题。编者当年可是拿出了好几本不同的物理化学实验教材,以此证明实验方法是得到公认的,将他们打发了事。后来在教学中偶然翻到E. A. Guggenheim研究乙醇水溶液表面吸附的经典论文,才发现该实验体系根本不符合朗格缪尔吸附等温式。对此,编者至今对那些学生怀有深深的歉意,同时也促使编者不断考虑究竟应该如何组织和编写一本物理化学实验教材。

结合多年一线教学体会,本教材主要在以下几个方面做了新的尝试。

第一,对一些经典实验项目的实验设计和理论探讨进行了拓展。

以燃烧热测定实验项目为例(参见实验A1),常规教学中一般要求学生由实测数据直接计算有机物的恒容燃烧热和恒压燃烧焓,本教材增加了实验数据的校正内容,包括温度校正、液体物质的压力校正和气态物质的理想气体状态校正,最后得到25℃时物质的标准生成焓数据。通过这种实验设计,使学生知道物质的实际状态与标准状态的差别和联系,从而加深对标准热力学函数等抽象概念的理解。除实验A1外,实验A4、A5、A6、A9、A13、A14、A17、A18和A19等也进行了类似的实验设计拓展。

第二,对实验技术的学习提供了多层次指导和训练。

教材在实验A7、B3和B4中,集中研究合金相变问题,分别采用热分析、差热分析和扫描电子显微镜等技术,逐步将研究内容由宏观拓展到微观;在实验A3、B6、B9和B10中,采用差热分析技术,分别研究化学反应、简单体系相图、复杂体系相图和热动力学过程,展示了同一实验技术在不同研究工作中的运用方式;实验B3和B7则是训练学生组装与改造商品化实验仪器用于特殊研究目的等。本教材中许多实验项目在实验技术方面都存在一定的内在联系和分层递进关系。

第三,强调科学数据处理软件的应用。

教材上篇重点介绍数据分析理论和方法以及Origin软件的应用,所用案例全部来自于学生的物理化学实验报告。同时,在许多实验项目中要求学生使用相关科学数据处理软件进行误差统计、科学绘图和回归分析。以此培养学生正确处理实验数据和分析实验结果的能力。

第四,尝试在教学实验中模拟科学研究过程。

编者通过重新整理各实验项目的原始文献,追溯其由研究性课题到基础实验项目的演化路径,尽量展示其内在的科学研究特征。比如实验A13用非线性拟合法进行蔗糖酶催化转化反应动力学测定、实验A19由临界胶束浓度推算胶束热力学性质、实验B5测定生成化合物的二组分固液平衡相图、实验B10差热分析-光谱技术联用测定熔盐相变等。同时,在有些实验的讨论与思考中引入实验相关的经典文献阅读与分析等内容,并在按照科学论文格式撰写实验报告、文献查阅方法、科学道德诚信、实验室安全等方面编写了指导内容。

通过以上的 work,编者希望学生从准备实验开始,通过实验操作、结果分析,直至实验报告的撰写,在每一个物理化学实验项目的完成过程中经历一次模拟科学研究项目的训练。

本教材分为上、中、下三篇:上篇是实验相关知识,中篇和下篇分别是基础型实验和拓展型实验。上篇包括“致学生——物理化学实验的课程要求和注意事项”“实验数据处理与分析”和“科学数据分析与绘图软件在物理化学实验中的应用”三章,其中第1章着重介绍了编者的物理化学实验教学理念,第2章着重于误差分析,第3章着重于Origin软件的实用技术。中篇包括基础型实验21个,下篇包括拓展型实验12个,共计33个实验项目,每个实验项目由实验简介、理论探讨、仪器试剂、安全须知和废弃物处理、实验步骤、数据处理与结果分析、讨论与思考及附(若有)构成。

本教材所选的实验项目绝大部分都能够在一个实验班规模上进行实验教学,并针对4课时和8课时实验教学分别设计了实验内容,以满足工科实验教学和理科实验教学的不同要求。教材涉及的实验仪器以常规类型为主,部分物理化学实验仪器原理和操作介绍附于相关实验之后,或给出了相应仪器公司的网址。教材没有选入一些常见于各类实验教材中的物理化学实验项目,因为这些项目涉及中、高级的大型仪器,如傅里叶变换红外光谱仪、X射线衍射仪、核磁共振波谱仪、全自动表面吸附仪等,当前不可能满足人手(或人组)一套的实验条件,容易造成实验教学中一人动手、全体“围观”的状态,不符合我们一贯倡导的学生全体、全程动手实验的教学理念。此外,教材没有编制实验技术和标准数据等内容,因为在当今互联网资源极其丰富的背景下,学生可以、而且应该能够获得实验所需的各种资料,而查阅文献寻找准确可靠的参考数据以及对实验方法进行比较和研究,也是学生完成科学研究训练的基本内容之一。

本教材由同济大学化学科学与工程学院的许新华、王晓岗和浙江大学化学系的王国平整理编写,其中王晓岗编写了实验A7、A8、A9、A11、A12、B2、B3和B11,王国平编写了实验A10、A13、A14、A21、B1和B7,其余部分由许新华编写(实验B12由韦广丰博士提供)。本教材许多内容是在同济大学化学科学与工程学院(原化学系)物理化学教研室和浙江大学化学实验教学中心长期的实验教学改革实践基础上凝练成形的,同济大学教务处、实验室与设备管理处对本书的编写出版给予了大力支持,在此谨向他们表示衷心感谢。

由于编者水平有限,教材中各种缺点以及实验安排的不合理之处在所难免,这些问题概由编者负责,恳请同行和学生批评指正(联系邮箱:xxh01@tongji.edu.cn)。

编者

2017年3月

目 录

上篇 物理化学实验基础知识

第1章 致学生——物理化学实验的课程要求和注意事项	2
1.1 准备实验	2
1.2 进行实验	3
1.3 完成实验	4
1.4 文献资料和文献数据	5
1.5 实验诚信与道德	6
1.6 实验室安全	7
第2章 实验数据处理与分析	9
2.1 数值计算与数据表达	9
2.2 数据和结果的不确定性	11
2.3 随机误差统计处理的基本概念	15
2.4 个体标准不确定度的估算	20
2.5 合成标准不确定度：误差传递	31
参考文献	38
第3章 科学数据分析与绘图软件在物理化学实验中的应用	39
3.1 数据输入	39
3.2 图线绘制	41
3.3 线性拟合	45
3.4 图形输出	48
3.5 在已有图形中添加曲线	50
3.6 多坐标图和图层叠合技术	52
3.7 非线性拟合	57
3.8 信号处理	65
3.9 峰的拟合与分析	68

中篇 基础型实验

A1	氧弹量热法——固体有机物生成焓的测定	86
	附 热电阻温度传感器	95
A2	溶解热的测定	97
A3	差热分析	104
	附 恒温控制原理	110
A4	纯液体饱和蒸气压的测定	120
A5	凝固点降低法测定溶质的摩尔质量	124
A6	二元溶液的气液平衡	133
	附 折射率和阿贝折光仪	139
A7	二组分合金体系液固平衡相图的绘制	144
A8	正戊醇-乙酸-水三元体系等温等压相图的绘制	149
A9	电解质溶液电导率的测定	156
	附 电导率仪和电导池常数的标定	162
A10	希托夫法测定离子的迁移数	166
	附 铜离子标准溶液的配制和铜离子浓度的分光光度法测定	172
A11	原电池电动势的测定	173
	附 SDC- II 数字电位差综合测试仪	179
A12	建筑钢筋在混凝土模拟液中的腐蚀行为	181
A13	旋光度法测定蔗糖酸催化转化反应的速率常数	187
	附一 旋光度和旋光仪	193
	附二 变旋过程对旋光度法测量蔗糖转化反应速率的影响分析	199
A14	电导法测定乙酸乙酯皂化反应速率常数	202
	附 溶液电导率与浓度的关系	206
A15	一级可逆-连续反应动力学：谷胱甘肽还原 Cr (VI)	209
	附 一级可逆-连续反应动力学方程推导	216
A16	蔗糖酶催化蔗糖转化反应	220
A17	特性黏度法测定聚(乙烯醇)高分子链结构	226
	附 水的黏度系数	235

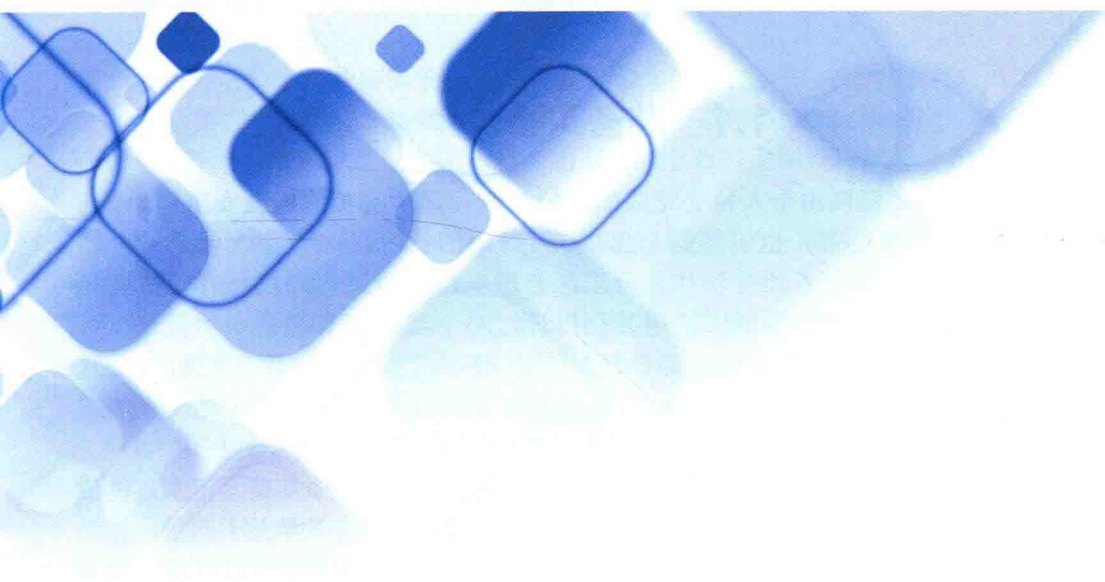
A18	溶液表面吸附的测定	237
A19	十二烷基硫酸钠胶束的热力学性质测定	245
A20	溶液法测定极性分子的偶极矩	251
	附一 PGM- II 介电常数实验装置使用说明	262
	附二 电容池底值 C_d 的测量方法	263
	附三 极性分子平均摩尔取向极化度的计算	263
A21	配合物磁化率的测定	265
	附 磁学物理量和磁学单位	274
	参考文献	278

下篇 拓展型实验

B1	简单离子晶体的晶格能与水合热测定与计算	280
	附 关于电学公式中国际单位制与高斯单位制的换算问题	284
B2	混合熵的测定	286
B3	简易差热分析装置组装及二元合金相变过程的测定	293
	附 热电偶温度计	300
B4	扫描电子显微镜对二元合金相结构的观察与分析	305
B5	苯酚-叔丁醇固液平衡相图的绘制	314
B6	差热分析法测定 NaNO_3 - KNO_3 固液平衡相图	318
B7	简易流动色谱法 BET 装置测定固体物质比表面积	326
B8	酶反应—— α -糜蛋白酶催化有机酯水解反应动力学	335
B9	热力学分析：固体分解反应活化能的测定	345
B10	差热分析-拉曼光谱联用测定液固相变	352
B11	循环伏安法测定电极过程动力学参数	362
B12	H_2 分子在 $\text{Ag}(111)$ 表面势能面的构建	375
	参考文献	382
	元素周期表	383

| 上 篇 |

物理化学实验基础知识



第1章

致学生

——物理化学实验的课程要求和注意事项

在所有化学专业实验中，物理化学实验综合程度高，实验技术多样，实验组织安排复杂，实验数据处理和结果分析要求精细。每一个物理化学实验项目的完成，都可以看作一个模拟科研工作，你们将经历实验前的预案准备，实验中的操作测量，以及实验后的数据处理和结果讨论，并撰写完成实验报告。虽然大部分类型的化学实验课程都能够列出类似的教学过程，但是物理化学实验绝对与你们曾经完成的其他实验课程不同，因为通过实验，我们希望同学们能够在思维方式和行为举止上向科学家或者工程师的要求靠拢，尽管各位的研究能力还需要后续学习进一步磨炼。因此，物理化学实验课程将会提出很高的要求，请仔细阅读下面的文字。

1.1 准备实验

虽然大部分实验都是可以由个人独立完成的，但是物理化学实验的标准安排是2人一组合作完成，若选课人数过多，也可能偶尔出现3人一组的情况。实验小组就是一个团队，这种组织形式提供了实验者相互协作、分工，合理安排实验进程，以及有价值地相互讨论的机会。合作者的交流、提醒、评论甚至批评，对于我们自身都是一面镜子，可以用来自省。实验分组将根据教务处选课系统的名单进行，一般不鼓励自行组合（开放实验除外），因为在实际工作中，有时我们也是无法预先挑选搭档的，希望大家能够适应。

在到实验室进行相关实验之前，请仔细阅读该实验的资料。准备一个实验笔记本，将预习实验的内容写在实验记录本上。很多时候，物理化学实验课程与理论教学并不同步，甚至实验课程的内容超前于理论教学，但是这并不影响你顺利完成实验，须知实验教学也是学习物理化学的一条重要途径，其功能和作用与理论课听讲和完成作业是一样有效的。在这种情况下，物理化学实验的预习重点是实验方法、仪器操作和实验步骤，这些内容即使没有学习过相关课程的理论和原理，也能够通过阅读实验资料弄明白，换句话说，实验预习重点在于弄清楚实验怎么做，测量哪些物质的什么性质等等。**作为预习是否有效的一个检验标准，请设想你在进入实验室时只携带了实验笔记本，没有携带任何其他有关实验的书面或电子资料，你的预习内容必须能够帮助你完成整个实验工作。**

请按上述要求完成每个实验的预习工作，我们将抽取部分实验项目，规定除实验笔记本外，不得携带任何实验资料进入实验室，以强化实验训练。

1.2 进行实验

做任何事情都需要天赋，做实验也不例外，就像弹钢琴或者踢足球一样。不可否认，有极少部分学生完全没有实验细胞，最后只能去从事理论工作。但是，绝大部分学生是能够学会实验的技能，进而体会到实验工作的乐趣的，当然需要经常进行练习，由简到繁，由易到难，就像弹钢琴或者踢足球也得天天训练一样。

实际进行的实验过程可能与你的预习内容有所差别，比如仪器的型号改变了，指导教师调整了试剂的浓度或数量，实验内容增加或减少了，等等。应该在实验笔记本上据实完整地记录实验者在实验室中所做的全部工作。实验笔记本是实验室与外部世界之间的纽带，是你进行实验观察的原始记录，对实验笔记本内容的核心要求是完整性和可理解性，而不是优雅美观、组织严密，检验实验笔记本是否合格的标准是：任何经过训练的人员都能够根据这个记录，重复完成这个实验。注意不要将“实验笔记本”与“最终实验报告”混为一谈，实验笔记本不是实验报告，它只提供你得出结论及组织撰写最终报告的信息。

请记住，没有实验笔记本的实验科学家是不称职的。实验笔记本及其记录有以下要求。

① 使用带封皮的软脊本子或者硬面抄，以便任何一页都可以平摊在桌面上，不要使用页面容易脱落的本子（如活页夹等），页面上最好有印刷的页码和宽度合适的横格线，横格线可以方便数据排列，也能够方便在笔记本上绘制实验曲线草图。

② 用黑色墨水笔进行记录。错误的记录用单线划除，不要用墨团涂黑，在错误记录旁边应注明更改记录的理由。

③ 将姓名、学号及实验安排表布置在笔记本的前几页中。

④ 从第一个实验记录开始，笔记本不要空页（实验记录完成除外），每个实验的记录从新的一页开始，**单面记录**，在新实验开始页的右上角写上实验日期及合作者，每页的记录不要过于拥挤。

⑤ 每个实验笔记的开头部分应简要总结实验的目的、原理，并简单勾勒实验装置的图样，篇幅不超过16开本子的半页。

⑥ 与实验相关的所有信息（数据、计算、注释语、评论、文献来源、草图等）均应记录在案，比如温度变化波动的幅度、试剂配制的方案、使用仪器的型号规格等；当离开主要实验位置进行其他操作（如称量、配制溶液），应随身携带实验笔记本，不要将测量数据记录在其他纸片上，然后再抄写到实验笔记本上。

⑦ 所有原始数据应当场记录，不要事后补记，所进行的计算过程也应清晰明了地书写在笔记本上。物理化学实验中，往往需要测量变量之间的一系列关系，比如温度与压力的关系等，此时应在实验过程中将已经测出的数据按要求**即时**在笔记本或坐标纸上画出草图，不要等到实验完成后再进行这些工作。实验不应盲目进行，即时作图可以帮助发现实验中可能存在的问题；当然，也应防止已有的实验结果误导你的观察。若用坐标纸画草图，坐标纸应粘贴在记录本相应部位。

⑧ 采用计算机记录时，应将数据保存路径记录在案。所有计算机记录与处理的实验数据一律上传至化学实验中心网站的专用数据库中，实验后可以通过网络下载使用。**实验室所有联网计算机的USB接口全部禁用，防止病毒侵入，请自觉抵制U盘等移动数据载体接入实验室计算机。**

⑨ 如果实验小组的实验数据记录在一个实验笔记本上，其他成员可以采用复写、复印

或者拍照方式转录实验数据, 不要采用誊抄方式, 以免引起抄录错误, 复印或打印件请粘贴在实验记录本上。

⑩ 实验完成后, 指导教师会在该实验记录的最后一页签字。

物理化学实验会涉及许多仪器, 请爱护使用, 以保证其他实验班同学也能正常完成实验。请注意预先学习相关仪器的知识, 准确学习指导教师的示范讲解, 并像对待自己的数码产品一样对待实验仪器。实验过程中发现仪器不能正常进行测量的, 及时与指导教师沟通解决。

1.3 完成实验

实验工作的重点在做完实验以后才真正开始, 这就是处理实验数据, 撰写实验报告。你是仅仅提交了一份学生实验报告, 还是进行了一次科学论文的写作训练, 抑或是仅仅给出了实验的结果, 还是进行了一次模拟科研工作, 都取决于你如何完成这个阶段的任务。请记住, 我们希望各位是能够成为科学家和工程师的, 所以请按照这个标准来要求自己。

(1) 实验课程完成要求

- ① 每个实验都要提交实验报告;
- ② 实验报告的提交时间是下一次实验时, 最后一次实验的报告于考核时提交;
- ③ 每个实验都是两人合作, 但是实验报告必须独立完成, 并分别提交;
- ④ 每个同学准备一个实验笔记本, 并独立完成实验预习和实验记录, 实验结束后交教师签阅。参加每个实验前应预习相关内容, 并将实验要点记录在实验记录本上, 没有预习记录的同学不能参加当次实验, 且该实验评分为0。

⑤ 实验笔记本于最后一次提交实验报告时一并上交。

(2) 实验课程评分标准

实验和实验报告	70%
测试考核	20%
实验笔记本	10%

若实验课程中未安排测试考核, 第一部分“实验和实验报告”占85%, 第三部分“实验笔记本”占15%。

(3) 实验报告的要求

评价一个实验工作的水平主要依靠所写作的书面报告的内容和质量。事实上, 科学事业的进步主要也是依靠书面信息的交流, 只有将实验结果准确恰当地报道出来, 一个实验工作才算完成。这类报告必须很好地组织文字, 使之具有可读性, 以保证不熟悉该实验的人能够根据报告所呈现的内容, 对实验如何进行以及所获得的结果有清晰的了解。

科学实验的报告应努力使用科学写作的文体和风格, 而不是文学写作的文体与风格。语句通顺、用词准确、语法正确是基本要求。报告应简洁明了, 实事求是, 不含糊其辞。数学公式是科学报告中不可或缺的内容, 应书写正确, 并配以足够清楚的文字说明。

实验报告及其图表的要求请参阅以下文献。

- ① 美国化学会科学论文写作指南: *The ACS Style Guide—A Manual for Authors and Editors*.
- ② 美国化学会《物理化学》期刊“*The Journal of Physical Chemistry (A)*”作者须知: *JPC Author Guide*, 下载网址: http://pubs.acs.org/paragonplus/submission/jpchax/jpchax_authguide.pdf.

③ 中国化学会、北京大学主编《物理化学学报》征稿简则和论文模板, 下载网址: <http://www.whxb.pku.edu.cn/CN/column/column84.shtml>.

④ Robinson M. S., Stoller F. L., Costanza-Robinson M. S., Jones J. K. *Write Like a Chemist—A Guide and Resource*. New York: Oxford University Press, Inc., 2008.

⑤ 罗伯特·戴, 巴巴拉·盖斯特尔. 如何撰写和发表科技论文(第六版, 影印版). 北京: 北京大学出版社, 2011.

实验报告是文字、图、表的混合体, 应呈现为一种连续的信息流。报告中图表均应编号, 并在文字部分引用这些编号, 必须注意到报告文字部分的一个重要内容就是介绍这些图表的内容, 以使读者明了其含义。为保证阅读的连贯性, 段落或句子不要以符号、数字或图表等元素开头。报告应基本按逻辑顺序排列相关内容: 实验原理和方法, 所获实验数据, 计算的结果和对结果的讨论等。短表和简图可以直接插入报告相应位置, 长表和正规图谱可在报告最后另外附页。

实验绘图建议使用专业科学绘图和计算软件, 如 Excel、Origin 等。

实验报告的文字风格应清晰简单, 一般不以第一人称写作。报告要求用中文撰写, 请注明实验合作者, 每份实验报告请附加 200 字以内的中、英文摘要及关键词, 鼓励用全英文撰写实验报告。

实验报告手写稿和打印稿均可提交, 若为打印稿请将电子版同时在课程网站提交。手写稿请使用专用实验报告纸, 单面书写; 打印稿请使用 A4 纸单面打印, 格式要求参见上述文献③。

实验报告最重要的问题是原创性, 从教科书、书面材料或其他人的报告中复制、影印或者抄写大段内容是禁止的行为, 包括实验原理、方法部分的写作也是如此。直接引用文献内容应加标引用号, 并注明文献出处。实验教材关于实验原理和仪器方法的详细解释是帮助你们学习和完成实验的, 不是用于抄写到实验报告中的, 这些内容应在实验报告中做出简单的归纳叙述。

再次重申: 虽然实验是合作完成的, 但是实验报告和实验笔记本均必须独立完成。鉴于每个人的观察角度与行文方式的独特性, 不可能有两份雷同的实验报告及记录。显系拷贝的材料将被退回重写, 并扣除相应的 30% 评分; 再次提交仍然不合格的, 该实验评分为 0。拷贝实验小组外其他成员材料的, 该实验直接评定为 0 分。

1.4 文献资料和文献数据

物理化学实验涉及的文献资料和文献数据可以通过以下途径查询。

① David R. L., ed., *CRC Handbook of Chemistry and Physics, Internet Version 2005*, <<http://www.hbcpnetbase.com>>, CRC Press, Boca Raton, FL, 2005.

CRC 物理化学手册。

② Speight J. G., ed., *Lange's Handbook of Chemistry* (16th edition), McGraw-Hill Co., Inc., NY, 2005.

兰氏化学手册。

③ <https://www.nist.gov/services-resources>

美国国家标准局网站, “服务-资源”分项。在其中的数据“Data”栏目中, 与物理化学实验内容相关的文献数据有以下几个部分:

化学 <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

物理学 <https://www.nist.gov/pml/productservices/physical-reference-data>, 物理学常数和国际单位制规则可以在这里查询。

标准参考数据 <https://www.nist.gov/srd>

④ <https://iupac.org/what-we-do/journals/> 和 <https://iupac.org/what-we-do/databases/>

国际纯粹与应用化学联合会期刊与数据库。

⑤ <http://aip.scitation.org/toc/jpr/current>

美国物理学会 (AIP) 期刊: Journal of Physical and Chemical Reference Data, 发表各种物理化学性质及参数。

⑥ <http://pubs.acs.org/>

美国化学会 (ACS)。与物理化学实验相关的期刊有:

Journal of the American Chemical Society, JACS, 网址 <http://pubs.acs.org/journal/jacsat>

The Journal of Physical Chemistry, JPC, 网址 <http://pubs.acs.org/journal/jpcafh>, 该期刊分为 A、B、C 三个子刊, 可在上述网页上切换。

Journal of Chemical Education, JCE, 网址 <http://pubs.acs.org/journal/jceda8>

⑦ <http://www.cas.cn/ky/kycc/kxsjk/index.shtml>

中国科学院科学数据库。需注册后使用, 与物理化学实验相关的有以下几个部分:

化学专业数据库 <http://www.organchem.csdb.cn/scdb/default.asp>

理化性能及分析数据库 <http://www.chemicalphysics.csdb.cn/>

⑧ <http://www.cnki.net/>

中国知网。国内期刊论文、毕业论文等资料。

物理化学实验报告中引用的文献及文献数据必须以权威数据库和公开发表的专业期刊论文为准, 不允许使用百度等搜索引擎获得的网页内容。

1.5 实验诚信与道德

现实社会应该建立在互相信任的基础上, 从看似很小的每天的日常活动到政治事务的决策, 道德的引导作用都很巨大。然而不幸的是, 这世界到处都是亵渎信任的例子, 使得有时候很难区分对与错。

幸运的是, 在实验室课程中很容易就能区分对与错, 对不正当学术行为有很严厉的政策, 我们设想所有参加课程的学生都有很严肃认真的目的, 并希望他们对自己有很高的道德和诚信要求, 能对自己的个人行为负责。欺骗、剽窃、未被授权的行动、故意干扰别人工作的完整性、编造篡改数据以及其他形式的学术上不诚实的行为被认为是严重的违规, 将受到强制惩罚。

科学实验工作要求背景知识 (我们为什么要做这个实验, 我们要从中得到什么)、实验技术 (我们怎样做)、科学道德规范 (我们通过它提供的信息可以做什么, 如果实验失败了怎么办, 等等)。来到实验室的学生有各种动机, 研究的动机、学习的动机、发现的动机, 甚至是获得一个好的评分的动机。缺少动机是实验失败的一个主要原因, 尤其是在实验室做实验的过程中。这种对动机的缺乏通常会伴随着后台准备的缺乏, 对实验技术和流程的忽视, 并且在某些情况下伴随着不道德行为。动机是个性化的东西, 它不能由别人提供和教给你。另外, 你做实验所需的背景知识可以通过学习得到, 在实验的过程中可以学习实验技

巧。良好的动机、足够的背景知识和熟练的实验技能是构成一个人科学道德行为的基础。

不道德科学行为有很多形式,比如编造数据和结果(造假)、篡改或是谎报数据和结果(歪曲)、使用他人的观点而没有给出适当的说明(剽窃)以及对科学和社会价值核心的攻击等等。这些不同形式的不道德科学行为导致了很多不同程度的后果,应视其违反道德的严重性而定。比如,抄袭同学的实验报告或是在考试中作弊会导致课程的失败,在科学杂志等出版物上的数据伪造将导致失去信誉名声,甚至对整个科学生涯的破坏,隐藏关键信息将导致大量的经济损失甚至生命的浪费。相关信息可以参阅以下文献:

① 美国国家科学学会,美国国家工程师协会,美国国家医学会. *On Being a Scientist—A Guide to Responsible Conduct in Research* (3rd Ed.). Washington D.C.: National Academies Press

② 《同济大学研究生学术行为规范》《同济大学学生违反校纪校规处分条例》(因尚未有针对本科生的相关规范,以此对照参考)

挫折对每个学生或者是科学家来说都不陌生,第一次、第二次甚至有时第三次失败是很正常的事。有时实验中收集的数据并不能像我们想象中的一样给出解释,或是得到的物质并不会表现出我们想象的样子或性质。在这些情况下,什么行为是可以接受的,而什么行为是不可接受的呢?不去花时间重复一个失败的实验,甚至要忍受这个实验的反复失败,而去伪造拼凑数据,甚至是从同学那里抄袭数据可能会很诱人,有些人会争辩“这只是一份实验报告”,但是很显然上述不端正的态度将破坏学术系统的根基,应该很严肃地对待。好的科学行为的构建贯穿了一个科学家、医生、工程师、或是一个商人的整个形成过程,这适用于学术、工程、商业以及生活的各个方面。

同课堂学习不同的是,在实验室中的表现能够且一般都影响你的同学。想象一下,如果你很偶然地污染了一个试剂的溶液,而你的同学将在你之后使用它,你会不会通知你的指导教师,哪怕为此会失去一些得分?或是你保持沉默,而让同学用你污染的试剂继续进行实验?再比如你失手将有毒有害的物质(如汞)洒漏在实验室不为人注意的角落中,你会不会立即通知其他人注意并且花费时间进行仔细的清理?或是你仍然保持沉默,使这种无形的危害长期存在于公共实验室之中?有些情况下,采取不道德行为看上去是很容易摆脱困境的,而且有些学生认为他们可以很侥幸地逃脱惩罚。那当然不是理由,我们将尽我们所能保护那些为做好学术而诚实工作的学生所付出的努力。

1.6 实验室安全

化学实验会涉及各种类型的危险和危害,每一个进入化学实验室进行实验的人都必须意识到可能的安全问题。意识到安全问题是第一位的,因为一旦你觉察到某个实验过程蕴含的特定危险或危害,出于自我保护的本能,你将有足够的动力去防止这些问题发生。严重的危险常常来自于对问题的忽视或健忘。

以下强调几点实验室工作的基本安全原则,详细的安全规程可登录各自学校的安全管理网站查询,比如同济大学实验室安全教育与管理网的网址为:

<http://shbc.tongji.edu.cn/sysaq/net/foreground/index.jsp>

① 确定潜在的潜在危险危害,并在实验开始前确认合适的的安全操作程序。

② 了解安全设备和设施的位置和使用方法,如灭火器、报警装置、急救包、安全冲淋器、洗眼器、紧急出口等。

③ 对发现的不安全情况及时提醒,别人造成的事故同样可能对你自身造成损害。

④ 插入电源插头前检查电气设备，检查或更改电气线路前拔出电源插头，确保仪器没有任何暴露在外的电高压电组件。

⑤ 不要用嘴将溶液吸入移液管。

⑥ 进入实验室必须始终穿着实验服，佩戴防护目镜和丁腈橡胶手套。

⑦ 禁止戴实验防护手套在实验室外游荡，接触电梯按钮、门窗把手、楼梯扶手、电话机等公共物品。

⑧ 以下人员不得进入实验室进行实验工作：披肩长发者，穿着裙子、短裤者，穿拖鞋、凉鞋、浅口鞋、高跟鞋者。

⑨ 遵守实验废弃物处理规则，将实验废弃物分别放入指定的回收容器中，不得随意丢弃或冲入下水道，以防止安全危害和环境污染。

⑩ 不要单独一人在实验室做实验。

⑪ 不要在实验室里饮食。

每个实验资料中都包括涉及的危险危害内容和注意事项。建议实验前通过材料安全性数据表(material safety data sheet, MSDS)查验相关安全信息。MSDS是一个在化工领域被广泛使用的用来描述化学试剂和化学混合物的系统编录，MSDS信息包含安全使用化学品的指引、潜在的可能由化学品引发的威胁，MSDS应在使用化学品的任何地方找到。该数据库的官方网站为：<https://www.msds.com>。

在国内查阅MSDS相关数据有以下几种方法。

① 中国科学院科学数据库中有MSDS专项子库，网址http://www.organchem.csdb.cn/scdb/main/msds_introduce.asp。

② <http://www.flinnsci.com/msds-search.aspx>，能够提供大部分实验室使用试剂的英语MSDS信息。

③ 比较权威的英语MSDS表格可以从Sigma-Aldrich公司的官方网站进行检索，网址为：<http://www.sigmaaldrich.com/china-mainland.html>。首先输入试剂名称（中文名称亦可）进行搜索，找到产品后在“文档与安全信息”中找到“安全技术说明书”，即为MSDS表格，可选择不同语言。

另外，一个比较有效的查阅MSDS数据的网站是：<http://www.msdsolnline.com/>。该网站需免费注册后才能正常使用，在搜索栏中输入相应化合物的英文名称等就可以查询了。不过，英文名称搜索的结果涵盖面很大，包括该化合物的海量衍生物，如果想快速达到目标，建议输入物质的CAS号码或者商品序列号，这样可以有效缩小搜索范围。

建议查阅英文版MSDS信息，以确保获得信息的完整性。根据查阅获得的信息，考虑适当的防护措施。

一般来说,进行物理化学实验的目标是获得一个或几个数值结果。在记录测量数据与报告最终结果之间,必须进行一系列的数值计算,比如取平均值、平滑测量数据等,更多的时候,会用到由理论推导出的各种公式和方程。有些工作可以依靠手工计算完成(加上科学计算器),有些则必须依靠专业的数学计算和绘图软件,如Excel、Origin等。

当获得了感兴趣的数值结果时,对于实验数据的处理还没有结束,还必须评价数值结果的好坏,如果无法评价的话,则数值结果几近无用。对实验结果好坏的评价常归属于实验精确性或准确度的范畴,但是它实际上表达了实验结果的不确定性。如果把这个问题提到实验开始之前,那就是首先需要确定究竟希望获得一个多好的实验结果,而这一点将对实验的设计、仪器的选择以及个人做出的努力产生重大影响。

下面将就实验数值结果的计算、误差的产生与结果精确性两个方面进行讨论。

2.1 数值计算与数据表达

对测量数据进行数学计算的过程可以获得所希望的结果。在物理化学实验中,一般获得的实验数据都是一系列实验观测点 (x_i, y_i) ,而在自变量 x_i 与应变量 y_i 之间存在内在的数值运算关系。应变量 y 还可能是多个变量的函数,比如 y 可以是变量 x 和 z 的函数。运用数值计算可以把数据拟合成函数形式,比如在 x - y 图上通过实验点的最佳曲线 $y(x)$,或者在三维坐标系中绘制出的最佳曲面 $y(x, z)$ 。在此基础上,进一步的数值分析可以获得所需要的各种参数和结果。

2.1.1 有效数字

无论在文献中还是日常活动中,许多数值数据并不带有明确的不确定性说明。从定性的角度看,测量数据的不确定性可以用所取数值的位数来表达,而能够完全表达数值的准确度或精确度的数字称为有效数字(significant figures)。比如,数字5632和2.079都具有4位有效数字,而数字5632000和0.0002079则很难认定为是否具有相同的有效数字,因为前置或拖尾的数字0一般仅表示数字大小,与精确度没什么关系。为消除歧义,可以采用指数表示法处理拖尾的数字0,比如 5.632×10^4 是四位有效数字,而 5.6320×10^4 是五位有效数字。在化学实验中,某些对数值(如pH、pK等)的有效数字位数仅取决于小数部分的数字位数,比如pH=2.70为两位有效数字。此外,如果一个数值的最大位数字大于等于8,则有效数字位数可增加一位,比如8.37可以认为接近10,为四位有效数字。