

# 可編程序計算器 在化學中的應用

劉萬祺 蔡生民 編著

北京大學出版社

06  
1

# 可 编 程 序 计 算 器 在 化 学 中 的 应 用

刘万祺 蔡生民 编著

北京航空航天大学出版社

**可编程序计算器在化学中的应用**

---

**北京大学出版社出版**

(北京大学校内)

**1201 工厂印刷**

**新华书店北京发行所发行**

787×1092毫米 32开本 5.25印张 108千字

1982年3月第一版 1982年3月第一次印刷

**印数1—10000册**

---

**统一书号：13209·42 定价：0.56元**

## 前 言

本书以 Texas TI-58C 可编程序计算器为例, 介绍可编程序计算器在化学教学和科研中的应用。

一九七八年以来, 作者在北京大学化学系的教学和科研中使用了这种计算器。实践证明, 它是一种用途广泛的计算工具, 可以完成一些计算机才能完成的计算任务。同时, 采用这类计算器处理实验数据, 可以增加学生有关计算机方面的知识。

本书是通过具体例子说明如何将已知公式编成程序, 如何对化学实验数据作直线拟合、曲线拟合, 求出经验方程; 如何做数值逼近, 以及如何利用主程序库中程序(如矩阵运算、复数运算、求多项式值、求函数根等)。书中的例子偏重于物理化学方面(其中包括基础物理化学实验数据处理的大部分内容), 除了这些计算在化学中具有典型意义外, 还可供大学生在处理实验数据时的参考。希望这些例子将有助于初学者更快地掌握这类计算器的使用, 起些抛砖引玉的作用。

有关 TI-58C 型计算器各按键的功能及使用、编制程序的基本方法以及主程序库中的程序等请参阅《Texas 可编程序计算器的使用》(蔡生民译著, 北京大学出版社, 1980 年)或有关说明书。另外, 在阅读本书各例子时, 请读者注意以下几点:

1. 在计算器存储器的分配上, 凡是没有说明的, 均是指有 30 个数据存储器 and 240 个程序步的情况。

2. 每个例子的程序的输入、检查、改正等步骤都如

同例 1 所述，为节省篇幅，在其它例子中这些步骤不再重复。

3. 每个例子后面附有一组数据，只是供读者熟悉程序用的，并非实验的标准数据。所列出的计算结果大部分是计算器的显示值，并没有按实验的有效数字取舍。如果考虑有效数字，可以使用 2nd Fix 键。

4. 各例中程序、预置等均是针对具体例子编的，凡与例中条件不相符时应对预置、程序等做相应改动。

5. 对 TI-58C 所编的程序，TI-58，TI-59 均可以应用，使用方法相同。只是 TI-58C 在关机后程序存储器 and 数据存储器内容均可以保留，使用比较方便。TI-58 则无此功能。TI-59 具有能写入和读回的磁卡装置，并且存储器比 58 型多一倍，可以编更复杂的程序。在 TI-58C 的程序中，因程序步或数据存储器不够，还需要中间置入或其它手动操作步骤，若用 TI-59 则可以编入程序。三者随机所带的主程序库相同。

6. 限于篇幅，对各例中所用的原理、公式只能扼要提一下，详情请参阅有关书目。书中例子主要取自北京大学化学系物理化学教研室实验课教学组编《物理化学实验》（北京大学出版社）和复旦大学等编《物理化学实验》（人民教育出版社）。

在本书编写过程中，得到北京大学技术物理系虞福春教授的热情鼓励和指导，在此表示衷心地感谢。

由于作者水平有限，实践的时间还短，书中缺点和错误在所难免，恳切希望读者批评指正。

作者

1980 年 10 月于北京大学

# 目 录

|                                                    |    |
|----------------------------------------------------|----|
| 一、根据已知公式求实验结果 .....                                | 1  |
| 例 1. 合成氨平衡常数的测定 .....                              | 1  |
| 例 2. 摩尔折射度的测定 .....                                | 2  |
| 例 3. X射线粉末图的分析 .....                               | 3  |
| 例 4. 磁化率的测定 .....                                  | 5  |
| 例 5. 电动势的测定和应用 .....                               | 8  |
| 例 6. 凝固点降低法求分子量 .....                              | 10 |
| 例 7. 燃烧热的测定 .....                                  | 13 |
| 例 8. 计算多孔物质的孔径分布 .....                             | 17 |
| 二、直线拟合 .....                                       | 23 |
| 例 9. 求符合 $y = mx + b$ 关系的一组数据的斜率、截<br>距和相关系数 ..... | 24 |
| 例 10. 溶液表面吸附的测定 .....                              | 32 |
| 例 11. 测定纯液体的饱和蒸气压 .....                            | 35 |
| 例 12. 丙酮溴化 .....                                   | 40 |
| 例 13. 环己烯的气相分解反应 .....                             | 43 |
| 例 14. 乙酸乙酯皂化 .....                                 | 47 |
| 例 15. 蔗糖转化 .....                                   | 51 |
| 例 16. 交流电桥法测定电解质溶液电导 .....                         | 56 |
| 例 17. 粘度法测定高聚物的分子量 .....                           | 66 |
| 例 18. BET 容量法测定比表面 .....                           | 72 |
| 例 19. 色谱法测定固体物质比表面 .....                           | 77 |
| 例 20. 静态重量法测定固体比表面 .....                           | 80 |
| 例 21. 氢原子光谱分析 .....                                | 83 |

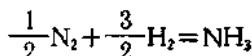
|                                                          |     |
|----------------------------------------------------------|-----|
| 例22. 偶极矩的测定 .....                                        | 85  |
| 例23. HCl 的红外光谱 .....                                     | 93  |
| 三、求经验方程(曲线拟合) .....                                      | 99  |
| 例24. 某物质溶解度、温度间关系式 .....                                 | 105 |
| 例25. 某速度常数 $k$ 与 $T$ 关系式 .....                           | 106 |
| 例26. 水的热容与温度间关系式 .....                                   | 107 |
| 例27. 某物质溶解度与溶剂组成的关系式 .....                               | 109 |
| 例28. 某催化剂催化活性与工作时间的关系式 .....                             | 111 |
| 例29. 某反应产物与反应温度间的关系式 .....                               | 113 |
| 例30. 钠原子光谱的剖析 .....                                      | 116 |
| 例31. 求 Zn-Pb 电池温度系数、热力学函数 .....                          | 118 |
| 例32. 溶液表面吸附的测定 .....                                     | 121 |
| 例33. 溶解热的测定 .....                                        | 124 |
| 例34. 沉降分析 .....                                          | 130 |
| 四、数值逼近——迭代法 .....                                        | 135 |
| 例35. 用电化学方法从弱极化区测定腐蚀电流 $I_c$ .....                       | 135 |
| 例36. $\text{CaSO}_4$ 离子对离解常数的测定 .....                    | 143 |
| 五、主程序库中程序的利用 .....                                       | 148 |
| 例37. 由质谱数据求简单混合物中化合物的百分含量<br>(02, 03号程序) .....           | 148 |
| 例38. 用红外光谱对较复杂组分作定量分析时的计算<br>(02号程序) .....               | 151 |
| 例39. 复数运算(04, 05号程序) .....                               | 152 |
| 例40. CO 和 $\text{H}_2$ 合成甲醇达平衡时 CO 的转化率<br>(07号程序) ..... | 155 |
| 例41. 计算火焰可能达到的最高温度(07号程序) .....                          | 155 |
| 例42. 计算火焰可能达到的最高温度(08号程序) .....                          | 157 |
| 例43. 求在电极表面生成晶核的座标(15号程序) .....                          | 158 |

## 一、根据已知公式求实验结果

在利用某公式进行计算求实验结果时，可以将计算编成程序。这对于计算多组重复数据很方便，同时可以避免手算时出错误。

### 例1 合成氨平衡常数的测定

利用氮的分解来测定平衡常数  $K_p$  值。由方程



可以导出

$$K_p = \frac{x}{\left[\frac{1}{4}(1-x)\right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{3}{4}(1-x)\right]^{\frac{3}{2}} P}$$

式中  $P$  为反应压力(单位为大气压)，现假设为 1 大气压； $x$  为反应达平衡时氮的摩尔分数，该值由色谱测得，将  $x$  值代入式中就可以求得  $K_p$ 。

### 程 序

|    | 0   | 1   | 2     | 3 | 4     | 5   | 6  | 7   | 8   | 9  |
|----|-----|-----|-------|---|-------|-----|----|-----|-----|----|
| 00 | R/S | STO | 00    | + | (     | (   | 1  | -   | RCL | 00 |
| 01 | )   | ÷   | 4     | ) | $y^x$ | ·   | 5  | ÷   | (   | (  |
| 02 | 3   | ×   | (     | 1 | -     | RCL | 00 | )   | ÷   | 4  |
| 03 | )   | )   | $y^x$ | 1 | ·     | 5   | =  | RST |     |    |

### 使用方法

1. 2nd CP，清除原程序；
2. LRN，使计算器进入程序编制状态；

3. 输入上述程序;
4. LRN, 使计算器退出程序编制状态;
5. 核对一遍程序, 以防输入程序时发生错误。发现错误应予改正。

以上五点, 是用手输入每个程序时必需做的。在以下各例的使用方法中不再重复。

6. RST, R/S。输入  $x$  值后按 R/S 键, 显示  $K_p$  值。  
例如  $x=0.011$  时,  $K_p=0.0346288606$ 。在求另一个  $x$  值对应的  $K_p$  值时, 不必再按 RST, R/S 键, 而直接将  $x$  数据输入, 再按 R/S 键即可显示  $K_p$  值。

## 例2 摩尔折射度的测定

设  $R$  代表摩尔折射度, 则

$$R = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \times \frac{M}{d}$$

式中  $n$ ,  $M$ ,  $d$  分别为待测物质的折射率、分子量(克)和密度(克/厘米<sup>3</sup>)。

## 预置

$n$ , STO 01;  $M$ , STO 02;  $d$ , STO 03。

## 程序

|    | 0              | 1   | 2              | 3 | 4 | 5   | 6  | 7 | 8   | 9  |
|----|----------------|-----|----------------|---|---|-----|----|---|-----|----|
| 00 | RCL            | 01  | X <sup>2</sup> | - | 1 | =   | +  | ( | RCL | 01 |
| 01 | X <sup>2</sup> | +   | 2              | ) | × | RCL | 02 | ÷ | RCL | 03 |
| 02 | =              | R/S | RST            |   |   |     |    |   |     |    |

## 使用方法

1. 预置。
2. 按 RST, R/S 键, 显示结果( $R$ )。
3. 求另一个数据时, 将  $n$ ,  $M$ ,  $d$  预先置入, 然后

直接按 R/S, 即显示结果。

例如, 苯  $M=78.11$ ,  $n=1.50439$ ,  $d=0.883$  ( $15^{\circ}\text{C}$ ),  
得  $R=26.21076813$ (厘米<sup>3</sup>)。

当然, 此程序也可以不要预置, 编成直接输入的形式:

### 程 序

|    | 0       | 1   | 2   | 3              | 4  | 5              | 6 | 7 | 8   | 9 |
|----|---------|-----|-----|----------------|----|----------------|---|---|-----|---|
| 00 | 2nd Lbl | A   | R/S | STO            | 01 | X <sup>2</sup> | - | 1 | =   | + |
| 01 | (       | RCL | 01  | X <sup>2</sup> | +  | 2              | ) | × | R/S | + |
| 02 | R/S     | =   | R/S |                |    |                |   |   |     |   |

### 使用方法

1. 按 A 键, 依次输入:  $n$ , R/S;  $M$ , R/S;  $d$ , R/S, 显示计算结果。
2. 求另一个数据时, 重复上述步骤。

### 例 3 X 射线粉末图的分析

在 X 射线衍射仪上拍 NaCl 图谱, 由图谱上读出各衍射线的  $2\theta$  角度, 计算各衍射线的  $\sin^2\theta$  之比, 确定 NaCl 晶体的点阵型式。

根据指标  $h$ ,  $k$ ,  $l$  及其平方和表标出各衍射线的指标, 再依公式

$$a = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} (h^2 + k^2 + l^2)^{\frac{1}{2}}$$

求出晶胞参数  $a(\text{\AA})$ 。 $\lambda$  为 X 光的波长 ( $\text{\AA}$ )。

NaCl 的密度(克/厘米<sup>3</sup>)

$$\rho = 4 \left( \frac{M}{N} \right) / a^3$$

式中  $M$ ,  $N$  分别为  $\text{NaCl}$  的分子量、阿佛加德罗常数。 $a$  应换成以厘米为单位。

### 预 置

10, STO 01;  $\lambda$ , STO 02;  $M$ , STO 03;  $N$ , STO 04; 10, STO 05;  $2\theta$  (求参数  $a$  用的  $2\theta$  值), STO 06。

### 程 序

|    | 0        | 1          | 2        | 3       | 4     | 5              | 6        | 7     | 8   | 9       |
|----|----------|------------|----------|---------|-------|----------------|----------|-------|-----|---------|
| 00 | 2nd Lbl  | A          | R/S      | +       | 2     | =              | 2nd sin  | $X^2$ | STO | 01      |
| 01 | 2nd Op   | 21         | A        | 2nd Lbl | B     | RCL<br>2nd Ind | 05       | +     | RCL | 10      |
| 02 | 2nd Op   | 25         | $\times$ | 3       | =     | R/S            | 2nd Lbl  | C     | RCL | 02      |
| 03 | +        | 2          | +        | (       | RCL   | 06             | +        | 2     | )   | 2nd sin |
| 04 | $\times$ | (          | R/S      | $X^2$   | +     | R/S            | $X^2$    | +     | R/S | $X^2$   |
| 05 | )        | $\sqrt{X}$ | =        | STO     | 07    | R/S            | RCL      | 03    | +   | RCL     |
| 06 | 04       | +          | RCL      | 07      | $y^x$ | 3              | $\times$ | 1     | EE  | 2       |
| 07 | 4        | $\times$   | 4        | =       | R/S   |                |          |       |     |         |

程序中第 000—012 步, 输入诸  $2\theta$  数据, 求出诸  $\sin^2\theta$  依次存储; 013—025 步, 将第一条衍射线( $\theta$  最小者) 定为 3, 依次求出各衍射线之比; 026—055 步, 求出  $a$  值; 056—074 步, 求出密度  $\rho$ 。

### 使用方法

1. 预置。
2. 2nd Fix 2 (保留二位小数)。
3. 按 A 键, 由小到大次序输入  $2\theta$  值:  $2\theta_1$ , R/S;  $2\theta_2$ , R/S; ... 将  $2\theta$  数据输完。  $\sin^2\theta$  依次存在 10, 11, 12, ... 存储器中。
4. 按 B 键, 显示 3, 再按 B 键, 又显示一个数值,

每按一次B均显示一个数，直到比值求完。将这些数字记下以确定点阵型式。

5. 求  $a$  时，按 C 键，输入： $h, R/S; k, R/S; l, R/S$ ，显示  $a$  值。

6. 再按 R/S 键，显示  $\rho$ 。

例如，从 NaCl 衍射图上读得  $2\theta$  角和求出的  $\sin^2\theta$  比：

| $2\theta$ | $\sin^2\theta$ 比 | $2\theta$ | $\sin^2\theta$ 比 | $2\theta$ | $\sin^2\theta$ 比 |
|-----------|------------------|-----------|------------------|-----------|------------------|
| 27.38     | 3.00             | 73.14     | 19.01            | 110.18    | 36.02            |
| 31.70     | 4.00             | 75.38     | 20.02            | 119.66    | 40.03            |
| 45.43     | 8.00             | 84.04     | 24.00            | 127.34    | 43.02            |
| 53.80     | 11.00            | 90.50     | 27.01            | 130.02    | 44.00            |
| 56.52     | 12.01            | 101.30    | 32.03            | 142.50    | 48.03            |
| 68.28     | 16.01            | 107.92    | 35.02            |           |                  |

取  $N=6.022 \times 10^{23}$ ， $\lambda=1.5405\text{\AA}$ ， $M=58.443$ ，求  $a$  用的  $2\theta=130.02$ ，相应的  $hkl$  为 622，得

$$a=5.64\text{\AA}, \rho=2.17\text{克/厘米}^3$$

#### 例 4 磁化率的测定

用古埃天平测定一些顺磁性物质的磁化率  $\chi_M$ ，推算其不成对电子数  $n$ 。所用公式如下：

$$\chi_M = \frac{2\Delta W h g M}{W H^2}$$

$$n = (\sqrt{4 + 12kT\chi_M/N\mu_0^2} - 2) + 2$$

式中， $g$  为重力加速度(厘米/秒<sup>2</sup>)， $H$  为磁场强度(高斯)， $W$ ， $M$  和  $\Delta W$  分别为试样重(克)、试样分子量和在有无磁场时试样的重量之差(克)。k， $N$ ， $T$ ， $\mu_0$  分别为玻

尔兹曼常数、阿佛加德罗常数、测定时温度(K)、玻尔磁子。 $h$  为试样管中试样高度(厘米)。

磁场强度用莫尔盐校正, 莫尔盐的磁化率

$$\chi_M = \frac{9500M}{T+1} \times 10^{-6} \quad (\text{此式中 } M \text{ 为莫尔盐分子量})$$

因此, 磁场强度

$$H^2 = \frac{2\Delta W h g (T+1) \times 10^6}{9500W}$$

### 预 置

$g$ , STO 02;  $T$ , STO 03; 9500, STO 04;  $k$ , STO 07;  $N$ , STO 08;  $\mu_n$ , STO 09。

### 程 序

|    | 0          | 1   | 2          | 3   | 4          | 5   | 6   | 7          | 8   | 9          |
|----|------------|-----|------------|-----|------------|-----|-----|------------|-----|------------|
| 00 | 2nd<br>Lbl | A   | R/S        | STO | 11         | R/S | STO | 12         | R/S | STO        |
| 01 | 13         | R/S | STO        | 14  | R/S        | SBR | =   | ×          | (   | RCL        |
| 02 | 03         | +   | 1          | )   | EE         | 8   | +   | RCL        | 04  | =          |
| 03 | STO        | 15  | $\sqrt{X}$ | R/S | 2nd<br>Lbl | D   | SBR | =          | ×   | R/S        |
| 04 | +          | RCL | 15         | =   | STO        | 10  | R/S | (          | 4   | +          |
| 05 | 1          | 2   | ×          | RCL | 07         | ×   | RCL | 03         | ×   | RCL        |
| 06 | 10         | +   | RCL        | 08  | +          | RCL | 09  | $X^2$      | )   | $\sqrt{X}$ |
| 07 | -          | 2   | =          | +   | 2          | =   | R/S | 2nd<br>Lbl | =   | RCL        |
| 08 | 14         | -   | RCL        | 13  | -          | RCL | 12  | +          | RCL | 11         |
| 09 | =          | ×   | 2          | ×   | R/S        | ×   | RCL | 02         | +   | (          |
| 10 | RCL        | 13  | -          | RCL | 11         | )   | =   | INV<br>SBR |     |            |

程序中第 000—014 步, 输入试样重量数据; 015—033 步, 求出磁场强度  $H$  ( $H^2$  存入 15 号存储器); 034—046 步, 求出  $\chi_M$ ; 047—076 步, 求出不成对电子数; 077—107 步, 为求  $2\Delta W h g / W$  的子程序。

## 使用方法

### 1. 预置。

2. 按 A 键, 先输入空管无磁场时称量的平均数值, R/S; 再输入空管在有磁场时的称量数据的平均值, R/S; 再输入加莫尔盐后在无磁场称量时的数据平均值, R/S; 最后输入加莫尔盐后在有磁场时称量数据的平均值, R/S; 再按 R/S 键, 输入莫尔盐样品高度数值, R/S, 则显示  $H$  值。

3. 求未知样品  $x_M$  和  $n$  时, 先看温度是否与校正磁场时相同, 若不同, 需将该温度值存入 03, 然后按 A 键, 像步骤 2 一样, 依次输入空管、空管加样品各在无磁场、有磁场时称量数据的平均值。四个称量数据输完后按 D 键, 再输入样品管装样高度  $h$  值, R/S; 输入样品分子量值, R/S, 则显示该物质的  $x_M$  值; 再按 R/S 键, 显示不成对电子数。

例如, 有下列数据:

| 样 品                |          | 莫 尔 盐    | $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ | $\text{K}_3\text{Fe}(\text{CN})_6$ | $\text{K}_4\text{Fe}(\text{CN})_6 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ |
|--------------------|----------|----------|-------------------------------------------|------------------------------------|--------------------------------------------------------------|
| 空<br>管<br>重<br>(克) | H = 0    | 14.03527 | 13.14618                                  | 14.03502                           | 13.14651                                                     |
|                    | H = 2189 | 14.03472 | 13.14572                                  | 14.03450                           | 13.14586                                                     |
| 管重<br>加样<br>(克)    | H = 0    | 22.54614 | 21.43184                                  | 22.83357                           | 21.67956                                                     |
|                    | H = 2189 | 22.58556 | 21.47995                                  | 22.84151                           | 21.67850                                                     |
| 温 度 (K)            |          | 304      | 303                                       | 303                                | 303                                                          |
| 样 高 (cm)           |          | 18.20    | 16.75                                     | 16.30                              | 15.55                                                        |
| 分 子 量              |          |          | 278.05                                    | 329.26                             | 422.41                                                       |
| $x_M$              |          |          | 0.0111770519                              | 0.0021126833                       | -0.000129209                                                 |
| n                  |          |          | 4.300556435                               | 1.474198721                        |                                                              |

取  $k = 1.381 \times 10^{-16}$  尔格·度<sup>-1</sup>,  $N = 6.022 \times 10^{23}$ ,  $\mu_B$

$$=9.273 \times 10^{-21} \text{ 尔格/高斯}, g=981 \text{ 厘米/秒}^2$$

$$\text{求得 } H=2.1891485 \times 10^3 \text{ 高斯}$$

### 例 5 电动势的测定和应用

用甘汞电极做参考电极, 测定 Cu, Zn 电极势; 计算 Cu-Zn 电池电势; 用电化学方法测定 AgCl 的溶度积和溶解度。

根据公式

$$\varepsilon_{M/M^{+2}}^{\circ} = \varepsilon + \varepsilon_{\text{甘汞}} - \frac{RT}{2F} \ln a_{M^{+2}}, \quad (a_{M^{+2}} = \gamma_{\pm} \cdot C)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_{\text{Zn/Zn}^{+2}}^{\circ} - \varepsilon_{\text{Cu/Cu}^{+2}}^{\circ} + \frac{RT}{2F} \ln \frac{\gamma_{\pm(\text{Zn})}}{\gamma_{\pm(\text{Cu})}} \quad (C_{\text{Cu}} = C_{\text{Zn}})$$

当 AgNO<sub>3</sub>, KCl 溶液浓度均为 0.01N 时, AgCl 的溶度积  $K_{sp}$  为:

$$\ln K_{sp} = \ln (0.902 \times 0.01) + \ln (0.901 \times 0.01) + \frac{\varepsilon F}{RT}$$

式中  $\varepsilon$  为电池电势(伏),  $R$  为气体常数,  $F$  为法拉第常数,  $\varepsilon^{\circ}$  为标准电极势,  $T$  为测量时温度(K)。饱和甘汞电极电势  $\varepsilon_{\text{甘}} = 0.2444 - 6.6 \times 10^{-4}(t - 25)$ , 其中  $t$  为摄氏温度。

### 预 置

$\varepsilon_{\text{甘}}$ , STO 02;  $T$ , STO 03;  $F$ , STO 07;  $R$ , STO 08。

### 程 序

|    | 0          | 1   | 2          | 3   | 4   | 5   | 6   | 7   | 8          | 9   |
|----|------------|-----|------------|-----|-----|-----|-----|-----|------------|-----|
| 00 | 2nd<br>Fix | 3   | 2nd<br>Lbl | A   | R/S | +   | RCL | 02  | -          | RCL |
| 01 | 08         | ×   | RCL        | 03  | +   | 2   | +   | RCL | 07         | ×   |
| 02 | (          | R/S | ×          | R/S | )   | lnx | =   | R/S | 2nd<br>Lbl | B   |

|    | 0   | 1   | 2   | 3          | 4   | 5          | 6          | 7   | 8   | 9   |
|----|-----|-----|-----|------------|-----|------------|------------|-----|-----|-----|
| 03 | R/S | -   | R/S | +          | RCL | 08         | ×          | RCL | 03  | +   |
| 04 | 2   | +   | RCL | 07         | ×   | (          | R/S        | +   | R/S | )   |
| 05 | lnx | =   | R/S | 2nd<br>Lb1 | C   | INV        | 2nd<br>Fix | EE  | .   | 9   |
| 06 | 0   | 2   | ×   | .          | 0   | 1          | =          | lnx | +   | (   |
| 07 | .   | 9   | 0   | 1          | ×   | .          | 0          | 1   | )   | lnx |
| 08 | +   | RCL | 07  | ×          | R/S | +          | RCL        | 08  | +   | RCL |
| 09 | 03  | =   | INV | lnx        | R/S | $\sqrt{X}$ | R/S        |     |     |     |

程序中第 000—001 步, 使显示数字保留小数点后第三位; 002—027 步, 求出  $\varepsilon^\circ$ ; 028—052 步, 求 Cu-Zn 电池电势  $\varepsilon$ ; 053—094 步, 求出  $K_{sp}$ ; 095—096 步, 求出 AgCl 的溶解度。

### 使用方法

#### 1. 预置。

2. 按 RST, R/S 键, 求电极电势  $\varepsilon^\circ$ ; 输入  $\varepsilon$ , R/S;  $\gamma_{\pm}$ , R/S; 浓度  $C$ , R/S, 显示  $\varepsilon^\circ$  值。

求第二个  $\varepsilon^\circ$  时, 按 A 键, 然后输  $\varepsilon$ , R/S,  $\gamma_{\pm}$ , R/S,  $C$ , R/S; 求第三个, 第四个, ..., 同求第二个  $\varepsilon^\circ$  一样的方法。

3. 求 Cu-Zn 电池电势, 按 B 键, 依次输入:  $\varepsilon_{Zn/Zn^{2+}}^\circ$ , R/S,  $\varepsilon_{Cu/Cu^{2+}}^\circ$ , R/S,  $\gamma_{\pm(Zn^{2+})}$ , R/S,  $\gamma_{\pm(Cu^{2+})}$ , R/S, 显示计算值  $\varepsilon$ 。求第二个时, 按 B 键, 按上述次序输入相应值。

4. 求 AgCl 溶度积时, 按 CLR, C 键, 输入:  $\varepsilon$ , R/S, 显示  $K_{sp}$ ; 再按 R/S 键, 显示溶解度。

例如, 以饱和 KCl 溶液做盐桥, 测定下列电池电势:

(1)  $Zn | 0.1mZnSO_4 ||$  饱和甘汞电极

(2)  $Zn | 0.01mZnSO_4 ||$  饱和甘汞电极

(3) 饱和甘汞电极  $| 0.1mCuSO_4 | Cu$

(4) 饱和甘汞电极 | 0.01mCuSO<sub>4</sub> | Cu

(5) Zn | 0.1mZnSO<sub>4</sub> || 0.1mCuSO<sub>4</sub> | Cu

(6) Zn | 0.01mZnSO<sub>4</sub> || 0.01mCuSO<sub>4</sub> | Cu

(7) Ag | KCl<sub>0.01m</sub> 与饱和AgCl溶液 || 0.01mAgNO<sub>3</sub> | Ag  
(饱和NH<sub>4</sub>NO<sub>3</sub>盐桥)

| 电 池 号                           | 1      | 2      | 3     | 4     | 5      | 6      | 7      |
|---------------------------------|--------|--------|-------|-------|--------|--------|--------|
| 测得电势<br>$\varepsilon$ (伏)       | -1.082 | -1.078 | 0.042 | 0.022 | -1.105 | -1.105 | -0.324 |
| 电极电势<br>$\varepsilon^\circ$ (伏) | -0.759 | -0.758 | 0.344 | 0.342 |        |        |        |
| $\varepsilon$ (计算)              |        |        |       |       | -1.104 | -1.103 |        |

室温 15°C (288K),  $F=96500$  库仑,  $R=8.314$  焦耳/摩度, 离子平均活度系数  $\gamma_{\pm}$ : 0.1m 的 CuSO<sub>4</sub> 是 0.16, 0.1m 的 ZnSO<sub>4</sub> 是 0.150, 0.01m 的 CuSO<sub>4</sub> 是 0.40, 0.01m 的 ZnSO<sub>4</sub> 是 0.387。计算 Cu-Zn 电池电势时取  $\varepsilon_{Zn/Zn^{2+}}^\circ = -0.763$  (伏),  $\varepsilon_{Cu/Cu^{2+}}^\circ = 0.34$  伏,  $\varepsilon^\circ = 0.251$  伏。

由电池(7)求得

$$K_{sp} = 1.7338176 \times 10^{-10}$$

溶解度为  $1.3167451 \times 10^{-5}$  (摩·升<sup>-1</sup>)

### 例 6 凝固点降低法求分子量

以苯为溶剂, 求萘分子量  $M$  及相对误差  $\frac{\sigma_M}{M}$ 。

根据公式

$$M = K_f \frac{1000W_2}{\Delta T_f W_1}$$

式中  $K_f$ ,  $W_2$ ,  $W_1$ ,  $\Delta T_f$  分别为凝固点降低常数、溶