

化学分析计算基础

王令今 编

HUAXUE FENXI
JISUAN JICHU

化学工业出版社

化学分析计算基础

王令今 编

化学工业出版社

内 容 提 要

本书对化学分析过程中出现的基本计算问题结合典型实例做了较系统的阐述。全书共分八章：第一章简单讲述了与分析化学有关的普通化学的内容；第二章概述分析化学基本知识；第三章重点讲述分析化学计算基础知识；第四章详细介绍配制各种溶液的计算及浓度换算；第五章介绍分析用试样称取量的计算；第六章介绍溶液酸度的计算及控制；第七章总结了各种分析方法所得分析结果的计算；第八章简述分析化学中误差及数据处理的基本知识。书末附有必要的数表。

本书可供化工、石油、医药、卫生、轻工、食品、环境保护等各部门从事化学分析工作的人员学习，也可供大、中专院校学生学习及教师参考。

化学分析计算基础

王令今 编

责任编辑：任惠敏

封面设计：季玉芳

*

化学工业出版社出版

(北京和平里七区十六号楼)

化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

*

开本 $787 \times 1092\frac{1}{32}$ 印张 $19\frac{1}{2}$ 字数446千字 印数1-15,670

1985年10月北京第1版1985年10月北京第1次印刷

统一书号15063·3699 定价3.80元

前 言

对于从事分析化验工作的人员和化学实验工作的人员，不仅应有一定的理论水平和熟练的实验技术，而且还必须有一定的计算知识和计算技能。这样才能更好地解决分析工作中和化学实验工作中所遇到的各种具体问题。本书就是为了提高分析化验人员和实验人员的计算知识和计算技能而编写的。

本书总结了生产、科研及教学中所经常遇到的基本计算问题，按化学分析及一般化学实验工作的顺序编排章节。每章概括讲述了有关的计算知识，从基本概念出发，导出各类问题的计算公式，并结合典型实例加以分析讨论。对于各类解题方法给予简短指导，以便提高读者分析问题和解决问题的能力。每章按讲解次序选编了一定数量的习题，用以练习。书末附有习题答案便于自学。

本书可作为广大的分析化验人员和化学实验人员自学之用，也可作为中专、大专院校的学生学习分析化学计算的指导书及教师的教学参考。对于中学化学教师也有一定的参考价值。

本书在编写过程中，得到清华大学邓勃副教授的大力支持，并且对本书作了精心的审阅，提出了很多宝贵意见，在此表示至诚的感谢。另外，得到了北京师范大学董维宪先生和迟兴婉老师及北京化工学院黄沛成老师的热情帮助，他们对本书提出许多有益建议。还有很多老师帮助计算习题核对答案。在此一并表示衷心的感谢。

由于作者水平所限，错误和不妥之处在所难免，恳切希望广大读者批评指正。

编 者

目 录

第一章 化学基础知识	1
第一节 几个基本概念	1
一、原子量和分子量	1
1. 原子量	1
2. 分子量	2
二、分子式和化学式	2
1. 分子式	2
2. 化学式	3
三、式量和克式量	3
1. 式量	3
2. 克式量	4
四、化合价和氧化数	4
1. 化合价	4
2. 氧化数	5
五、摩尔	7
六、当量	9
1. 元素的当量	9
2. 化合物的当量	14
七、分析化学中常用的计量单位	15
1. 质量和重量	15
2. 体积	16
3. 密度	17
4. 比重	17
第二节 电解质溶液中的平衡规律	18

一、质量作用定律和化学平衡	18
1. 质量作用定律	18
2. 化学平衡和平衡常数	19
3. 化学平衡的移动	21
二、弱电解质溶液的电离平衡	22
1. 弱电解质的电离常数及同离子效应	22
2. 水的离子积及pH概念	24
3. 缓冲溶液	31
4. 盐类水解	36
三、难溶电解质的溶解平衡	39
1. 溶度积原理	39
2. 溶解度和溶度积	40
3. 沉淀的生成	41
4. 沉淀的溶解	47
习题	49
第二章 化学分析概论	52
第一节 分析化学的任务	52
第二节 工业分析的任务和作用	53
第三节 化学分析的步骤	54
一、取样	54
二、试样的称取	54
三、试样水分的测定	55
四、试样的分解	55
五、干扰组分的分离	56
六、测定	56
七、结果计算及数据处理	56
第四节 化学分析主要方法概述	56
一、重量分析法	57
1. 沉淀法	57

2. 气化法 (挥发法)	58
3. 电解法	58
二、滴定分析法 (容量分析法)	59
(一) 滴定分析的特点	59
(二) 滴定分析法对化学反应的要求	59
(三) 滴定分析方式	60
1. 直接滴定法	60
2. 间接滴定法	60
(四) 滴定分析方法原理	61
1. 酸碱滴定法	61
2. 氧化还原法	67
3. 络合滴定法	70
4. 沉淀滴定法	74
5. 指示剂	76
第三章 分析化学计算基础	82
第一节 当量计算	82
一、直接求当量的方法	84
1. 酸碱当量的求法	84
2. 氧化还原当量的求法	89
二、间接求当量的方法	99
1. 根据标准溶液求当量	99
2. 根据中间产物确定当量	108
3. 根据反应关系确定当量	111
第二节 克当量和克当量数	115
一、克当量和毫克当量	115
1. 克当量	115
2. 毫克当量	116
3. 克当量与毫克当量的关系	116
二、克当量数和毫克当量数	117

1. 克当量数	117
2. 毫克当量数	118
3. 克当量数与毫克当量数的关系	118
第三节 摩尔质量和摩尔数	120
一、摩尔质量	120
二、摩尔数和毫摩尔数	121
1. 摩尔数	121
2. 毫摩尔数	122
第四节 当量定律和摩尔比关系	124
一、当量定律	124
二、摩尔比关系	127
习题	131
第四章 溶液浓度的表示及其配制计算	143
第一节 溶液浓度的表示方法	143
一、体积比浓度	143
二、百分比浓度	143
1. 重量-体积百分浓度	144
2. 重量-重量百分浓度	145
3. 体积-体积百分浓度	145
三、ppm和ppb浓度	147
四、比重	148
五、摩尔浓度	149
六、当量浓度	151
七、滴定度	153
1. 按配标准溶液的物质表示的滴定度	153
2. 按被测物质表示的滴定度	154
八、重量-体积浓度	156
第二节 各种浓度的相互换算	157
一、重量百分浓度与ppm浓度的换算	157

二、重量百分浓度与当量浓度的换算	158
三、重量百分浓度与摩尔浓度的换算	160
四、摩尔浓度与当量浓度的换算	161
五、体积比浓度与当量浓度的换算	163
六、滴定度 T_s 与当量浓度的换算	164
七、滴定度 $T_{s/x}$ 与当量浓度的换算	165
八、滴定度 T_s 与滴定度 $T_{s/x}$ 的换算	167
九、滴定度 T_{s/x_1} 与滴定度 T_{s/x_2} 的换算	168
第三节 非标准溶液的配制计算	171
一、以体积百分浓度表示的溶液的配制计算	172
1. 用固体试剂配制溶液时的计算	172
2. 用稀释法配制溶液时的计算	174
3. 用原装浓液体试剂配制溶液时的计算	175
4. 两种不同体积百分浓度的溶液混合时的计算	177
二、以重量百分浓度表示的溶液的配制计算	180
(一) 用固体配制溶液时的计算	180
(二) 用稀释法配制溶液时的计算	181
1. 称取液体试剂重量的计算	182
2. 量取液体试剂体积的计算	183
(三) 两种不同重量百分浓度的溶液混合时的计算	184
1. 称取溶液重量的计算	184
2. 量取溶液体积的计算	187
三、以体积-体积百分浓度表示的溶液的配制计算	189
1. 用原装浓液体试剂配制溶液时的计算	189
2. 用稀释法配制溶液时的计算	190
3. 两种不同体积-体积百分浓度的溶液混合时的计算	191
四、以ppm表示的溶液的配制计算	194
1. 用固体试剂配制溶液时的计算	194
2. 用液体试剂配制溶液时的计算	194

五、以当量浓度表示的溶液的配制计算	196
1. 用固体试剂配制溶液时的计算	196
2. 用稀释法配制溶液时的计算	197
3. 用原装浓液体试剂配制溶液时的计算	198
4. 两种不同当量浓度的溶液混合时的计算	200
5. 溶液的增浓计算	201
六、以摩尔浓度表示的溶液的配制计算	205
1. 用固体试剂配制溶液时的计算	205
2. 用稀释法配制溶液时的计算	205
3. 用原装浓液体试剂配制溶液时的计算	207
4. 两种不同摩尔浓度的溶液混合时的计算	208
5. 溶液的增浓计算	210
七、配制缓冲溶液的计算	215
1. 加固体试剂配制缓冲溶液时的计算	217
2. 用液体试剂配制缓冲溶液时的计算	222
3. 用固体和液体试剂配制具有一定总浓度的 缓冲溶液的计算	223
第四节 配制标准溶液的计算	225
一、直接法	226
1. 直接法配制标准溶液的条件	226
2. 直接法配制溶液的计算及配制过程	226
二、间接法(标定法)	235
(一) 间接法的基本原理及标定方法	235
1. 用基准物标定	236
2. 用已知准确浓度的标准溶液进行比较	236
(二) 以 N 表示的标准溶液的标定原理及计算方法	236
1. 计算依据	236
2. 标定步骤	237
3. 标定计算	239

4. 标准溶液的配制和标定实例	239
(三) 以 M 表示的标准溶液的标定原理及计算	244
习题	284
第五章 分析试样与反应试剂用量的计算	266
第一节 重量分析中试样称取量和沉淀剂用量的计算	266
一、重量分析中化学因数的计算	266
二、重量分析中试样称取量的计算	270
(一) 称量准确度的计算	271
(二) 试样称取量的计算	274
1. 确定试样称取量的出发点	274
2. 试样称取量的计算方法	275
三、重量分析中沉淀剂用量的计算	278
1. 确定沉淀剂用量的依据	278
2. 计算沉淀剂用量的方法	281
第二节 滴定分析中试样称取量与滴定剂用量的计算	285
一、滴定分析中试样称取量的计算	285
1. 滴定分析中确定试样称取量的依据	285
2. 滴定分析中计算试样称取量的方法	287
二、滴定分析中计算滴定剂用量的方法	293
习题	294
第六章 溶液酸度的计算及控制	301
第一节 溶液酸度的计算	301
一、简单体系的酸度计算	301
1. 强酸、强碱溶液酸度的计算	301
2. 一元弱酸、弱碱溶液酸度的计算	303
3. 多元弱酸、弱碱溶液酸度的计算	306
4. 多元酸酸式盐溶液酸度的计算	308
5. 水解盐溶液酸度的计算	310
二、混合体系酸度的计算	318

1. 两种强电解质混合时pH值的计算	318
2. 强电解质与弱电解质混合时pH值的计算	321
3. 缓冲体系pH值的计算	322
4. 酸碱滴定过程中pH值的计算	326
第二节 溶液酸度的控制	337
一、缓冲容量及缓冲范围	337
二、缓冲溶液的选择	343
习题	346
第七章 定量分析结果计算	354
第一节 定量分析结果的表示方法	354
一、被测组分表示形式	354
1. 按实际存在的形式表示	354
2. 按氧化物形式表示	354
3. 按元素形式表示	355
4. 按所存在的离子形式表示	355
二、被测组分含量的表示方法	355
1. 以重量百分数表示	355
2. 以体积-体积百分数表示	356
3. 以体积-重量表示	356
4. 以ppm和ppb表示	356
5. 以毫克当量/升表示	357
第二节 重量分析结果的计算	358
一、被测物质重量的计算	358
二、被测物质百分含量的计算	362
三、混合物测定结果的计算	367
1. 将混合物转化成混合称量式的计算方法	367
2. 将混合物转化为一个称量式的计算方法	368
四、湿存水测定的计算及按干物质计算组分含量	373
1. 湿存水的测定计算	373

2. 按干燥物质计算被测组分百分含量	373
五、重量分析计算的简化	376
第三节 滴定分析结果的计算	378
一、滴定分析计算的基本原则	378
1. 以当量关系进行计算的原则	378
2. 以摩尔关系进行计算的原则	380
二、直接滴定法的结果计算	382
1. 标准溶液浓度以当量浓度 N 表示时被测组分的 结果计算	382
2. 标准溶液浓度以 T_s 或 $T_{1/2}$ 表示时被测组分 的结果计算	387
3. 标准溶液浓度以 M 表示时被测组分的结果计算	393
三、间接滴定的结果计算	397
1. 返滴法的结果计算	397
2. 中间物滴定法的结果计算	412
四、混合物测定的结果计算	416
(一) 连续测定混合组分的原理和计算	416
1. 利用双指示剂连续测定法	416
2. 控制酸度连续测定法	428
(二) 用不同的分析方法分别测定混合物的几种组分的 原理和计算	429
(三) 同时测定混合物的几种组分的原理和计算	432
五、滴定分析计算的简化	437
1. 以标准溶液的体积数值直接表示出被测组分的 百分含量	437
2. 工作曲线法	440
习题	440
第八章 误差及数据处理	461
第一节 实验误差	461

一、产生误差的原因	461
1. 系统误差 (可测误差)	462
2. 随机误差 (偶然误差)	463
二、准确度和精密度	464
1. 准确度	464
2. 精密度	466
3. 准确度和精密度的关系	468
4. 用准确度和精密度评价分析结果	469
5. 公差	473
第二节 实验数据的正确记录和计算	474
一、正确记录和计算实验数据的意义	474
1. 正确记录数据的意义	474
2. 正确计算数据的意义	475
二、有效数字及其运算	476
1. 有效数字的意义和位数	476
2. 有效数字运算法则	477
三、正确记录常用仪器测量值的方法	480
1. 天平	480
2. 滴定管	481
3. 移液管	482
4. 容量瓶	482
四、具体实例	483
第三节 数据处理	486
一、精密度的计算	487
1. 单次测量值精密度的计算	487
2. 平均值精密度的计算	493
3. 分析结果的置信界限	494
二、分析数据的检验	497
1. t 检验法	497

2. F 检验法	502
三、可疑数据的舍弃	504
1. Q 检验法	504
2. T 检验法	506
习题	509
附表	515
附表一 国际原子量表 (1979)	515
附表二 化合物式量表	517
附表三 物质的当量表	522
(一) 酸碱当量	522
(二) 氧化还原当量	525
附表四 弱酸、弱碱在水中的离解常数 (25℃)	529
(一) 弱酸的离解常数	529
(二) 弱碱的离解常数	534
附表五 难溶化合物的溶度积常数 (18~25℃)	535
附表六 重要化合物在水中的溶解度 (克/100克水,℃)	541
附表七 金属氢氧化物沉淀的 pH	545
附表八 常用的指示剂	547
(一) 常用的酸碱指示剂	547
(二) 常用的混合指示剂	548
(三) 常用的几种氧化还原指示剂	550
(四) 常用的吸附指示剂	551
(五) 常用的金属指示剂	552
附表九 常用酸碱试剂的浓度与比重对照表 (20℃)	556
(一) 常用酸试剂的浓度与比重对照表	556
(二) 苛性碱和氨溶液的百分浓度与比重对照表	559
附表十 酸、碱溶液的体积比 (1:X) 与当量浓度的换算表	560
附表十一 常用的缓冲溶液的配制	561

附表十二	制备 $x\% \left(\frac{W}{W_0} \% \right)$ 溶液所需溶质的重量	562
附表十三	定性分析试剂配制方法	569
	(一) 阳离子试液 (10毫克阳离子/毫升)	569
	(二) 阴离子试液 (10毫克阴离子/毫升)	570
附表十四	市售酸、碱试剂的浓度及比重 (近似值)	570
附表十五	一些酸、碱水溶液的pH值 (室温)	571
	(一) 一些酸水溶液的pH值	571
	(二) 一些碱水溶液的pH值	571
附表十六	化学因数	572
附表十七	标准电极电位 (18~25℃)	576
附表十八	某些氧化还原电对的克式量电位	580
附表十九	EDTA与各种常见金属离子的络合物的 稳定常数	581
附表二十	EDTA络合剂的 $\log a_y$ 值	582
习题答案		583
主要参考书		609

第一章 化学基础知识

第一节 几个基本概念

一、原子量和分子量

1. 原子量

物质是由分子、原子构成的。由于物质具有一定质量，所以分子、原子也有一定质量。

原子质量非常小，例如：

$$1 \text{ 个 C 原子质量} = 1.992 \times 10^{-23} \text{ 克}$$

$$1 \text{ 个 H 原子质量} = 1.67 \times 10^{-24} \text{ 克}$$

$$1 \text{ 个 O 原子质量} = 2.656 \times 10^{-23} \text{ 克}$$

显然，这么小的数字，使用和计算都不太方便，所以需采用相对质量。它们的相对质量取决于以什么原子作为比较标准。很早以前以氧为比较标准，1961年后，国际上采用 ^{12}C 原子质量的十二分之一作为量度原子量的质量单位的标准。这种特殊的质量单位称为碳单位。用碳单位表示 1 个原子的相对质量，称为原子量。

$$1 \text{ 个碳单位} = \frac{1 \text{ 个碳原子质量}}{12}$$

$$= \frac{1.992 \times 10^{-23}}{12} = 1.66 \times 10^{-24} \text{ (克)}$$