

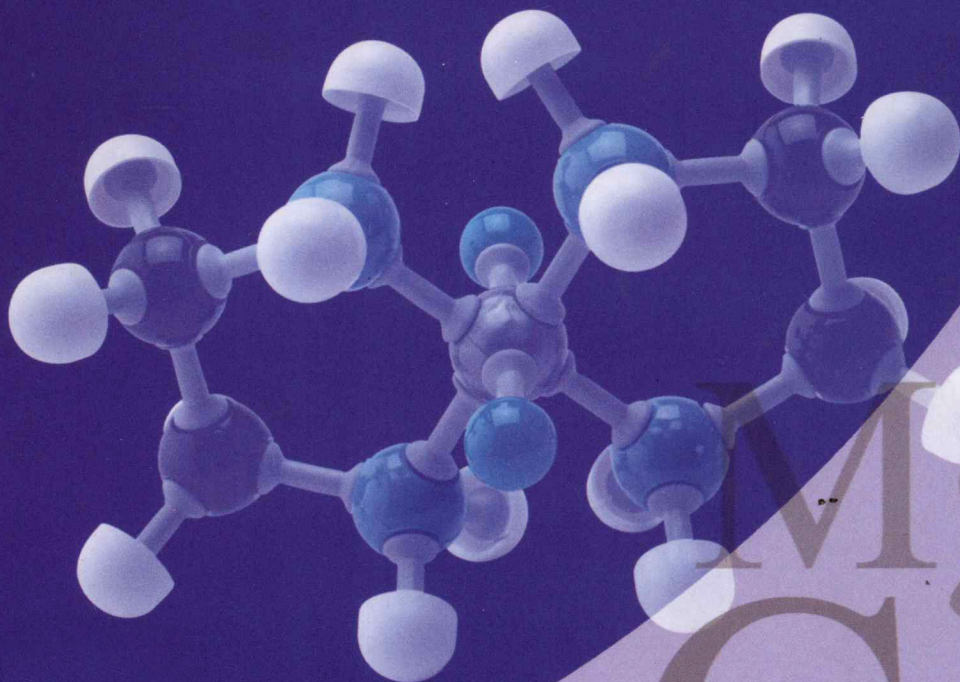


“十一五”化学类专业本科规划教材

WULI HUAXUE SHIYAN

物理化学实验

常照荣 主编



河南科学技术出版社

“十一五”化学类专业本科规划教材

物理化学实验

常照荣 主编

河南科学技术出版社

· 郑州 ·

内 容 提 要

本教材主要分为三个部分：第一部分是绪论，阐述了利用计算机软件处理实验数据内容，重点介绍了 Microsoft Excel 电子表格和 Origin 作图软件及其应用示例。第二部分是基础和综合实验，选编了 23 个基础实验和 16 个综合实验，内容涵盖了物理化学各分支学科研究方法，具有系统性和完整性，并具有较强的代表性和可操作性。实验仪器大都选用南京桑力等厂家成套的现代物理化学实验教学仪器，具有广泛的通用性。第三部分是研究设计性实验，选编了 16 个实验，内容反映了新能源、纳米材料、离子液体等当前科学研究的热点和技术。

本教材可供综合性大学、师范院校及工科院校的化学、生物和医学类等相关专业的师生使用。

图书在版编目 (CIP) 数据

物理化学实验/常照荣主编. —郑州：河南科学技术出版社，2009.8
(2010.2 重印)

(“十一五”化学类专业本科规划教材)

ISBN 978 - 7 - 5349 - 4255 - 6

I. 物… II. 常… III. 物理化学 - 化学实验 - 高等学校 - 教材
IV. 064 - 33

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2009) 第 074063

出版发行：河南科学技术出版社

地址：郑州市经五路 66 号 邮编：450002

电话：(0371) 65737028 65788629

网址：www.hnstp.cn

策划编辑：范广红

责任编辑：杨艳霞

责任校对：杨艳霞 王 欢

封面设计：张 伟

版式设计：栾亚平

责任印制：张艳芳

印 刷：河南新丰印刷有限公司

经 销：全国新华书店

幅面尺寸：185 mm × 260 mm 印张：12.75 字数：311 千字

版 次：2009 年 8 月第 1 版 2010 年 2 月第 2 次印刷

定 价：22.00 元

如发现印、装质量问题，影响阅读，请与出版社联系。

《“十一五”化学类专业本科规划教材》

编审委员会名单

主 任 吴养洁

副主任 王键吉 宋毛平 常俊标 屈凌波
王利亚

委 员 (以姓氏笔画排序)

王利亚	王国庆	王敏灿	王键吉
方少明	尹志刚	石秋芝	卢会杰
吉保明	刘寿长	杜玲枝	李德亮
吴养洁	宋毛平	张继昌	张福捐
卓克垒	屈凌波	赵文献	赵俊廷
贾春晓	贾晓红	徐 琰	徐茂田
徐翠莲	郭彦春	唐明生	黄建华
常俊标	常照荣	渠桂荣	路纯明
缪 娟	潘振良		

《物理化学实验》编委名单

主 编 常照荣

副主编 关新新 冯国利 赵艳茹

编 委 (以姓氏笔画排序)

冯国利 刘向云 刘朝辉 关新新

邱明艳 张心宽 张虎成 赵艳茹

赵培正 姜志红 徐周庆 曹益林

常照荣

前 言

近年来,随着我国高等教育体制改革的深入和国家对高等教育投资的大幅度增加,全国各高校办学条件有了很大改善,长期制约实验教学的实验仪器得到了更新换代,实验室面貌发生了很大改观,这为现代化实验教学提供了有力的物质基础。为了更好地实施高等学校本科教学质量与教学改革工程,河南科学技术出版社组织河南省高校专家和教师考察了全国大部分高校的物理化学实验开设情况,并结合我省高校实际情况,编写了本实验教材。本教材可供综合性大学、师范院校及工科院校的化学、生物和医学类等相关专业的师生使用。

本教材分为三个部分:第一部分是绪论,阐述了利用计算机软件处理实验数据的内容,重点介绍了 Microsoft Excel 电子表格和 Origin 作图软件及其应用示例。第二部分是基础和综合实验。编者在考察全国大部分高校物理化学实验的基础上,结合我省高校实际情况,加大了综合性实验的比例,选编了 23 个基础实验和 16 个综合实验(带“*”的为综合实验)。这些实验涵盖了物理化学各分支学科研究方法,具有系统性和完整性,以及较强的代表性和可操作性。第三部分是研究设计性实验。编者尝试编写了 16 个研究设计性实验,内容反映了新能源、纳米材料和离子液体等当前科学研究的热点和技术,供各校参考。另外,在仪器的选配方面,力求多样化、现代化和通用化,使学生通过实验尽可能多地接触各种现代实验研究仪器。仪器大多选用南京桑力和南京多助等厂家的成套物理化学实验教学仪器,具有较大的通用性。参照全国各高校选用的仪器和实验内容及要求,建议每个基础实验为 4 学时,每个综合实验为 6 学时,设计实验为 24 学时。

本教材在编写过程中,参考了国内外部分高校的物理化学实验教材,吸收了兄弟院校的许多先进经验和技術,在此表示诚挚的谢意。本教材充分考虑到各校普遍已采用的仪器型号,使实验教材具有较大的适应性,各校可根据实际情况选择。

参加本教材编写的有郑州大学、河南师范大学、郑州轻工业学院、河南农业大学、河南理工大学、商丘师范学院、许昌学院、新乡学院、平顶山工学院和安阳工学院等院校的部分实验教师。常照荣教授对全部书稿进行了修改、编排整理,任本教材主编。

由于编者水平有限,书中存有的不足或错误,敬请读者批评指正。

编 者
2009 年 3 月

目 录

1 绪论	(1)	实验 6 金属相图绘制* ...	(42)
1.1 物理化学实验的目的和 要求	(1)	实验 7 双液系的气—液平衡 相图绘制	(45)
1.1.1 实验目的	(1)	实验 8 分配系数与化学平衡 常数的测定	(49)
1.1.2 实验要求	(1)	实验 9 甲基红电离常数的 测定	(52)
1.2 实验数据的处理	(2)	实验 10 差热分析*	(55)
1.2.1 列表法	(2)	2.2 电化学	(58)
1.2.2 作图法	(2)	实验 11 原电池电动势的 测定	(58)
1.2.3 利用计算机软件进行 数据处理	(4)	实验 12 交流电桥法测 定乙酸电离 常数	(62)
1.3 物理化学实验的安全与防护	(12)	实验 13 离子迁移数的测 定(一)—— 希托夫法	(67)
1.3.1 仪器的使用与 维护	(12)	实验 14 离子迁移数的测 定(二)—— 界面移动法	(70)
1.3.2 安全用电常识 ...	(12)	实验 15 电动势法测定 热力学函数* ...	(72)
1.3.3 高压储气瓶的使用与 防护	(13)	实验 16 碳钢在碳酸氢铵溶 液中的极化曲线的 测定—— 恒电位法	(74)
1.3.4 三防(防爆, 防火, 防水) 常识	(15)	实验 17 镍氢电池充放电曲 线测定实验* ...	(77)
2 基础和综合实验	(16)	实验 18 电势 - pH 值曲线的	
2.1 热力学	(16)		
实验 1 恒容量热法—— 燃烧热的测定 ...	(16)		
实验 2 中和热的测定 ...	(21)		
实验 3 溶解热的测定 ...	(27)		
实验 4 液体饱和蒸气压的 测定——静态法 ...	(34)		
实验 5 凝固点降低法测定 溶质摩尔质量 ...	(37)		

测定及其应用* … (79)	实验 33 固体比表面测定 (二)
实验 19 氢超电势的	——BET 法* … (132)
测定* …… (82)	实验 34 固体物质的粒径
2.3 化学动力学 …… (85)	分布测定* …… (136)
实验 20 蔗糖转化反应的	实验 35 电导法测定表面
速率常数测定 … (85)	活性剂的临界胶
实验 21 过氧化氢分解反	束浓度* …… (143)
应速率常数的	2.5 结构化学 …… (148)
测定 …… (88)	实验 36 偶极矩的测定 … (148)
实验 22 电导法测定乙酸乙	实验 37 磁化率——络合物的
酯皂化反应速率	结构测定 …… (156)
常数 …… (92)	实验 38 小分子的分子轨道
实验 23 丙酮碘化反应速率	及电子参数
方程的确定 …… (95)	计算 …… (165)
实验 24 三草酸根合铁络离子	实验 39 X 射线衍射法测定
光化学反应速率和	晶胞常数——
级数的测定* … (98)	粉末法* …… (169)
实验 25 弛豫法测定铬酸	3 研究与设计性实验 …… (174)
根—重铬酸根	实验 40 镍氢电池正极材料
离子反应的速率	氢氧化镍的制备和
常数* …… (101)	表征 …… (174)
实验 26 甲醇分解催化剂	实验 41 氢氧化镍的电化学
活性测定* …… (105)	性能评价 …… (175)
实验 27 BZ 振荡反应* … (108)	实验 42 锂离子电池正极材
实验 28 气相色谱法测定	料的合成与结构
催化剂的活性与	表征 …… (175)
选择性* …… (112)	实验 43 纳米金属氧化物的
2.4 表面与胶体 …… (116)	水热合成 …… (176)
实验 29 界面电泳法测	实验 44 太阳能电池基本特性
定胶体的电动	测定 …… (177)
电位 …… (116)	实验 45 半导体发光材料的
实验 30 溶液表面张力的	制备和表征 … (177)
测定——最大	实验 46 离子液体的合成和
压力气泡法 … (119)	表征 …… (178)
实验 31 高聚物相对分子	实验 47 纳米非晶合金材料
质量的测定——	的制备与表征 … (179)
黏度法 …… (124)	实验 48 TiO_2 光催化剂的制
实验 32 固体比表面测定 (一)	备、结构表征及光
——吸附法* … (129)	催化性能研究 … (179)

实验 49	绿色催化酯化反应 及动力学研究…(180)	实验 53	表面活性剂溶液临 界胶束浓度的 测定 …………… (183)
实验 50	溶解度法测定碘在 水溶液中的热力学 数据 …………… (181)	实验 54	正负离子表面活性 剂混合体系双水相 性质的测定 … (184)
实验 51	温度滴定法测定 弱酸的离解热…(182)	实验 55	洗涤剂的配制…(185)
实验 52	酸度法测定乙酸乙 酯皂化反应速率常 数和活化能 … (182)	附录	…………… (186)
		参考文献	…………… (195)

1 绪 论

1.1 物理化学实验的目的和要求

物理化学实验是化学专业学生一门重要的基础实验课。一方面，它与物理化学和结构化学课程内容紧密相连；另一方面，它又综合了化学各学科领域的基本实验方法。因此，物理化学实验是一个理论性、实践性和技术性很强的综合技能实验课。

1.1.1 实验目的

通过物理化学实验的学习和操作，使学生系统地掌握物理化学各分支学科的基本实验技术和技能，学会重要的物理化学参数测定方法；掌握常见仪器的性能、原理、用途和使用方法，以及选择使用仪器设计实验的能力；培养学生仔细观察实验现象，正确记录数据和对实验数据分析归纳、从中找出规律以加深对物理化学基本原理的理解，增强解决实际问题的能力，为日后从事教学工作和科学研究工作打下初步的基础。

1.1.2 实验要求

进行物理化学实验，一般要经过实验预习、实验操作和写实验报告三个环节，具体要求是：

1. 实验预习 要求学生在进入实验室之前对要做的实验充分预习，仔细阅读实验教材的有关内容，了解实验目的和实验所依据的原理，明确需要测量的物理量和应该记录的数据，并据此写出预习报告，做到心中有数，有备而来。预习报告内容一般包括：实验题目、实验目的，实验所依据的简单原理和主要操作步骤，并拟定原始记录表格。无预习报告者不准进入实验室。

2. 实验操作 在实验操作过程中，应认真按照操作规程进行，严格控制实验条件，仔细观察实验现象，将实验数据完整准确地记录在预习报告所拟定的记录表格中。整个实验过程中不仅要有严谨的科学态度，做到一丝不苟，有条不紊，清洁整齐，实事求是，还要积极思维，善于发现和解决实验中出现的各种问题。实验结束，应将实验数据交老师检查，合格后方可将实验装置复原，仔细清洗仪器和实验台面，经老师同意后方可离开实验室。值日生负责整个实验室卫生清洁，并检查水电开关。

3. 写实验报告 写实验报告不仅能培养学生分析归纳和总结并正确表达实验结果的能

力, 而且还能加深对实验原理和实验设计思想的理解, 实现认识的新飞跃, 因此学生必须认真写好实验报告。实验报告内容一般包括: 实验目的, 实验原理, 仪器装置示意图, 数据记录与处理, 以及问题讨论等。实验数据应以表格形式列出, 作图需要用坐标纸。问题讨论实际上是做好实验的心得体会, 主要针对实验过程中观察到的特殊现象的分析和解释, 影响实验结果的原因, 对仪器和实验装置的改进意见等。实验报告必须个人独立完成, 要求叙述清楚、语言简练、字迹工整和干净整洁。

1.2 实验数据的处理

物理化学实验结束后, 要求实验者能将实验数据正确地记录下来, 加以整理、分析和归纳, 并正确地表达出实验所获得的规律。实验数据一般是利用列表法和作图法进行表达。

1.2.1 列表法

列表法就是将有关实验数据用表格形式表达出来。该方法简单方便, 无需特殊工具, 数据简单明了, 便于数据的进一步分析、整理和归纳, 进而得出结论。

运用列表法表达实验数据时, 通常列出自变量 X 和因变量 Y 之间的相应数值。每一个表格都应有简明完备的名称。在表的每一行或每一列上, 都应该详细地标出该行 (或列) 表示的含义 (或名称)、数量单位和因次。在表中的数据应化为最简单的形式, 公共因次可以在第一栏的名称下注明。自变量的选择可以是时间、组成、浓度、温度、压力等变量, 选择的原则是最好能使数值变化具有一定的规律, 如递增、递减等。在每一行或列中, 数字的排列要整齐, 小数点、位数要对齐, 有效数字或偏差的表示应一致。

如果原始数据不具备等间隔变化的特征, 而又要选择依次均匀递增或递减自变量的表示方法, 通常是将原始数据先按自变量和因变量的关系作图, 画出光滑的曲线, 排除一些偶然误差, 然后从曲线上选取适当的变量间隔, 用列表法列出相应因变量的数值来。这种方法在测定随时间不断改变的物理量时非常有用。

1.2.2 作图法

利用作图法来表达物理化学实验数据时有许多优点, 首先能清楚地显示出所研究数据变化的规律与特点, 如极大值、极小值、转折点、周期性、线性关系、数量的变化速率等重要性质。如利用足够点组成的光滑曲线, 可求算图形面积或切线斜率, 进行图解微分和图解积分。有时还可作图外推或内插以求得实验难于获得的量。

1. 主要应用

(1) 求内插值: 根据实验所得的数据, 作出函数间相互关系的曲线, 然后找出与某函数相对应的物理量的值。例如在溶解热测定中, 根据不同浓度时的积分溶解热曲线, 可以直接找出该种盐溶解在不同量的水中时所放出的热量。

(2) 求外推值: 在某些情况下, 测量实验数据间的线性关系可用于外推至测量范围以外, 求某一函数的极限值。这种方法叫外推法。例如, 无限稀释强电解质溶液的摩尔电导 Λ_{∞} 的值不能通过实验直接测得, 因为无限稀释溶液本身就是一种极限情况, 并不实际存

在,但是可以测定一系列准确浓度溶液的摩尔电导,然后作图外推至浓度为0,即得无限稀释溶液的摩尔电导。外推法不可随便应用。外推时外推范围距实际测量的范围不能太远,且其测量数据间的函数关系是线性的或可以转化为线性的。

(3) 作切线求函数的微商:从曲线的斜率求函数的微商在物理化学实验数据处理中是经常应用的。例如利用积分溶解热的曲线作切线,从其斜率可求出在一指定浓度下溶液的微分溶解热的值。

(4) 求经验方程式:如反应速率常数 k 与活化能 E 的关系式,即阿伦尼乌斯公式: $k = A_e \cdot e^{-E/RT}$,若根据不同温度下 k 值,作 $\ln k - \frac{1}{T}$ 的图,则可得一条直线,分别由直线的斜率和截距可求得活化能 E 和碰撞频率 A 的值。

(5) 由面积计算相应的物理量:比如在差热分析中,需要根据差热峰的面积来求算差热峰所对应热效应的大小。

(6) 求转折点和极值:例如电位滴定和电导滴定时等摩尔点的求得,相图中最高和最低恒沸点和恒沸组成的确定等都是应用作图法解决的。

2. 注意事项

(1) 坐标系的选择:通常的直角坐标系可以满足大多数的要求。有时也用极坐标系或是三角坐标系。比如在绘制三元体系相图的时候常常选用的是三角坐标系。

(2) 坐标尺的选择:一般习惯上用横坐标表示自变量,纵坐标表示因变量。两个变量的全部变化范围应可以在两个坐标轴上表示出来,表示要相近,不可悬殊。否则图形会扁平或细长,甚至不能正确地反映图形特征。特别是对于曲线的一些特殊性质,如极大值、极小值、转折点等,坐标选择不当,会使图形不能清晰地显示所表示的规律。可以把图形按照一定比例适当缩小或放大,坐标也可以不从零开始。坐标尺的选择应遵循下列原则:

1) 要能准确地表示出全部的有效数字,以便使作图法求出的物理量的精确度与测量的精确度相一致。为此一般将测量误差较小的量取较大的比例尺。

2) 图纸的每一小格所对应的数值应便于迅速、简便地读数和计算;坐标分度要合理,一般进行2、5等分,切忌3、7、9或小数等分。

3) 在上述条件下,要充分利用图纸的面积,使全图布局均匀、合理。

4) 若曲线为直线,则比例尺的选择应使直线的斜率接近于1。

(3) 符号表示:当图形有多个因变量的时候,可以采取不同的符号代表不同的物理量以示区别,并在图上或图外说明各符号代表的含义。比如可以采取▲、△、●、□、+、×、*等来表示不同的物理量。绘图描点时符号大小应适当,不可过大或过小,并粗略地遵从测量的误差范围。

(4) 图形的绘制:作曲线时,首先应具有合理数量的数据点,过少则往往不能反映变化规律。根据所描数据点,借助曲线尺或直尺描成光滑、圆润的曲线。在曲线不能完全通过所有实验点时,实验点应该平均地分布在曲线的两侧,或使所有的实验点离开曲线距离的平方和为最小,此即“最小二乘法”。通常曲线不应有不能解释的间隙、自身交叉或其他不正常的特性。

(5) 图注:曲线绘制完成后,应标出图形的名称,横、纵坐标所表示变量的名称、刻度、单位等。其他实验条件(如日期、实验人员等)也应在图中或其他合理位置适当标

出。

1.2.3 利用计算机软件进行数据处理

目前,随着计算机技术的发展和应用的普及,物理化学实验数据的处理变得更简单和有效。物理化学常见的数据处理方式包括列表、公式计算、实验数据作图或对实验数据计算后作图、线性拟合求截距和斜率、非线性曲线拟合、作切线求截距或斜率等。用计算机处理实验数据和作图的软件很多,常用的有电子表格软件 Microsoft Excel,专业绘图软件如 Microcal Origin7.5 或者专门设计的实验数据采集及处理的专用软件,如溶解热实验软件等。下面将分别介绍 Origin7.5 和 Excel 2003 软件在实验作图及数据分析中的应用。

1. Microcal Origin 在物理化学实验中的应用 Origin 软件是 Microcal Software 公司推出的一个功能强大的数据分析科学绘图软件,特别适用于经常进行大量数据处理及科学绘图的人员使用。Origin 工作界面如图 1.1 所示,含有菜单栏、工具栏、工作表格和绘图窗口等。下面以 Origin7.5 版为例介绍其对物理化学实验数据处理的基本方法。

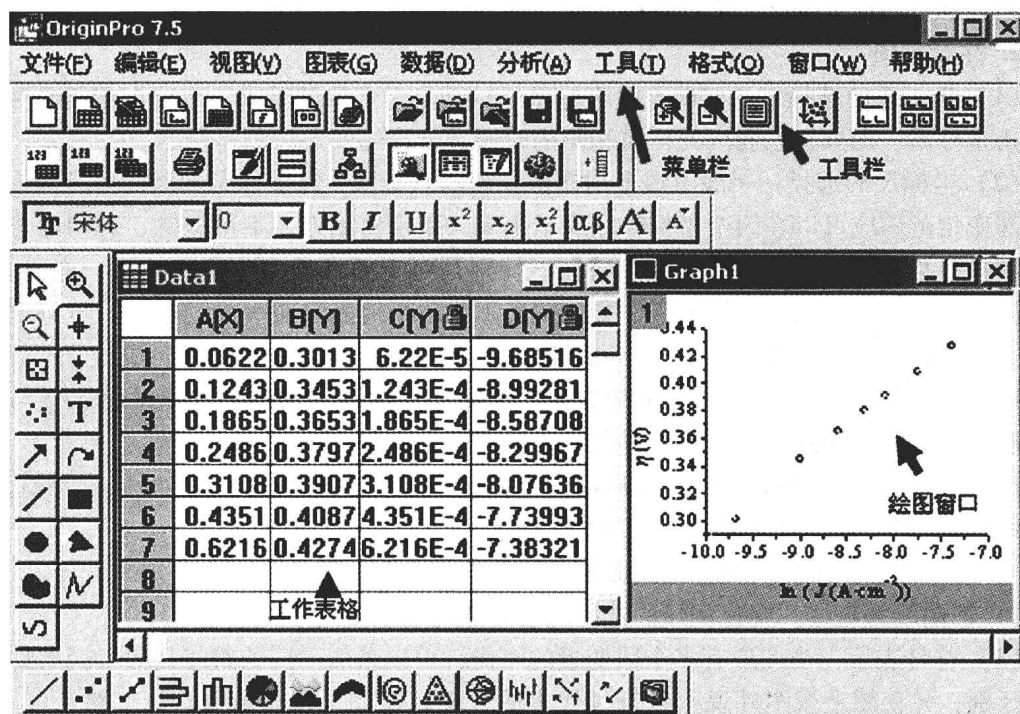


图 1.1 Origin7.5 汉化版工作界面

(1) Origin 软件的一般用法

1) 建立基本数据: 工作表格 (Data1) 窗口中按列输入实验基本数据, 根据数据情况单击鼠标右键可进行列的插入、删除、增加, 列属性设置等。列属性中可进行列名称、绘图指定 (X 轴或 Y 轴)、格式 (数据类型)、数字显示 (小数位数) 等的设置。A [X] 是指 A 列默认情况下作为 X 轴数据使用 (默认情况下)。

2) 基本数据的计算处理: 工作表格中建立基本数据后, 常常需要对数据进行相关计算处理, 这也是为数据拟合分析及数据作图作好准备。物理化学实验中的数据常见如下计

算处理过程：①数据按照某列进行升序(Ascending)或降序(Decending)排列。②按照列求和(Sum)、平均值(Mean)、标准偏差(sd)等。③按照行求平均值、标准偏差。④对一组数据(如一系列)进行统计分析,如进行 t -检验,可以得到如下的检验结果:平均值、方差 s^2 (variance)、数据量(N)、 t 的计算值、 t 分布和检验的结论等信息。⑤比较两组数据(如两列)的相关性。⑥设置列值。

以上各过程可参考“列(Column)”、“分析(Analysis)”、“统计(S)”菜单中的相关功能完成,这里主要说明一下设置列值的操作。物理化学实验数据处理中常常需要对整列或整行数据按指定公式运算后再进行作图或分析,如对A[X]列数据取对数并在C列显示计算结果,这就需要设置C列的自动计算公式。在“列”菜单中单击“增加新列”,新增C列,单击中C列表头并在“列”菜单中选择“设置列值”,在设置列值对话框中填入C列值自动计算公式: $\text{Col}(C) = \text{Ln}[\text{Col}(A)]$,意指对A列值取对数后赋值于C列。同样方法,也可设置其他列值的自动计算公式。列值或行值计算是实验数据处理中最为常见的,是必须掌握的内容之一。

3) 数据绘图:①页(Page):每个绘图窗口包含一个单一的可编辑页,页可作为组成用户图形的各种图形元素(如层、轴、文本、数据图等)的背景,绘图窗口的每一个页至少包含一个层。②层(Layer):包含文本、轴、数据图的页中绘图单元。一页最多可放50层。当一页包含多个层时,操作是对应于活动层的。用鼠标单击绘图窗口左上角的层图标编号,该层即为活动层。③数据图(Date Plot):一个或多个数据集在绘图窗口的形象显示。一个层中可绘制一个数据图。④图(Graph):由一个或多个数据图以及相应的文本和图形元素组成。一个图可包含许多层,但至少包含一个层。

工作表中建立完整的数据后可进行图形绘制。Origin“绘图(P)”菜单中提供了多种图形绘制功能,包括散点图、点线图、柱形图、条形图、饼图以及双Y轴图形等。单击绘图工具栏相应按钮,按弹出窗口提示指定X、Y轴数据源,确定后绘出相应图形。在物理化学实验中通常使用散点图或点线图,根据需要选择是否进行曲线拟合。

4) 绘制多层图形:图层是Origin中的一个很重要的概念,一个绘图窗口中含有多个图层时,可以方便地创建和管理多个曲线或图形对象,一般绘制一条曲线的单图Origin默认图层为第一层。这里的图层概念和平图图形处理软件Photoshop中的图层概念理解上类似。一个图层就像一张透明的纸,我们可以在这些透明纸上绘出不同的图,最后看到的是不同图层叠加后的总的效果图。

多图层绘图的一般步骤如下:①在工作表区建立多图层绘图所需的数据源。②单击绘图工具栏按钮,弹出窗口中指定X、Y轴数据源,绘制第一层数据散点图或点线图,根据需要选择是否进行曲线拟合。③单击“工具(T)”菜单中的“图层(Layer)”,或图层工具栏相应按钮,根据需要设定增加的图层数量,绘图窗口左上角显示的数字为设定的图层数。④单击“图表(G)”菜单中的“增加绘图到图层之散点图(或点线图)”,弹出窗口中指定X、Y轴数据源,单击“Add”将选择的数据添加到指定层(Layer)列表中,绘出指定层数据图,根据需要选择是否进行曲线拟合。⑤关联图层坐标轴。各图层坐标轴可以关联,如果改变某一图层坐标轴比例,其他图层坐标轴也将自动更新到同样的比例。用鼠标右键单击绘图窗口左上角层图标数字,弹出对话框中选择图

层属性,“连接轴刻度”选项中设置各图层坐标轴关联。

5) 屏蔽图中数据点: 实验中常会出现个别数据点偏差较大,可以在绘出的图形中把这些点屏蔽,在数据分析和拟合过程中不再使用。被屏蔽的数据既可以是单个数据点,也可以是一个数据范围。如果数据被屏蔽,可以通过选项改变被屏蔽数据的颜色和显示/隐藏状态,当然也可以取消屏蔽。在绘图窗口单击鼠标右键弹出菜单中提供了数据屏蔽功能。

6) 屏幕数据读取: 图形绘制完成后,物理化学实验中常常需要读取图形上的某点的坐标值,Origin 工作界面窗口左侧 Tools 工具栏提供了该项功能。几个常用工具的主要功能介绍如下: ①  屏幕位置读取。②  画数据点。③  数据选择。④  文本工具。⑤  箭头工具。⑥  数据坐标读取。⑦  画线工具。⑧  弯曲箭头。⑨  画框工具。⑩  画圆工具。

7) 曲线拟合: 各图层散点图绘出后,可分别进行曲线拟合。曲线拟合包括线性拟合和非线性拟合,“分析 (Analysis)”菜单中提供了多种曲线拟合功能。当散点图绘出后,选择“线性拟合 (Linear Fit)”,结果记录中显示拟合直线的公式,斜率和截距的值及其误差,相关系数和标准偏差等数据。在线性拟合时,可屏蔽某些偏差较大的数据点,以降低拟合直线的偏差。

Origin 也提供了多种非线性曲线拟合方式,如多项式拟合、指数衰减拟合、指数增长拟合、S 形拟合、高斯 (Caussian) 拟合、洛仑兹 (Lorentzian) 拟合和多峰值拟合;非线性曲线拟合的高级拟合工具中提供了许多拟合函数的公式并可让用户自定义公式。

在处理实验数据时,可根据数据图的形状和趋势选择合适的函数和参数,以达到最佳拟合效果。多项式拟合适用于多种曲线且方便易行,操作方法如下: ① 对数据作散点图。② 选择“分析 (Analysis)”菜单中“多项式拟合 (Polynomial Fit)”,在弹出窗口中设定多项式的级数、拟合曲线的点数、拟合曲线中 X 值的范围。③ 单击“确定”即可完成多项式拟合。结果记录中显示: 拟合的多项式公式、参数值及其误差, R (相关系数)、 SD (标准偏差)、 N (曲线数据的点数)、 P 值 ($R_2=0$ 的概率) 等。

8) 数据分析: ① 插值和外推: 在当前曲线的数据点之间,估算出新的数据点,或延伸到曲线外。“分析 (Analysis)”菜单中提供了“插值/外推”功能,对话框如图 1.2 所示。“Make Curve Xmin”指插值运算最小的 X 值,“Make Curve Xmax”指插值运算最大的 X 值,这两项的缺省值就是当前曲线的最小和最大 X 值。当然我们选择的 X 值可以超出缺省值,这时将进行外推运算。“Make Curve # pts”指总的插值点数。插值运算结束后,在当前活动图层内绘制出插值曲线。② 微分: 求当前活动图层数据曲线的导数。在“分析 (Analysis)”菜单中执行微分功能后,Origin 将计算出该曲线各点的导数值,并创建一个新的工作表 (Derivative1) 来存放这些导数值。同时,Origin 创建一个新的绘图窗口 (DerivPlot1),并在窗口内绘出微分曲线。③ 积分: 对当前激活的数据曲线用梯形法进行积分。积分结果如

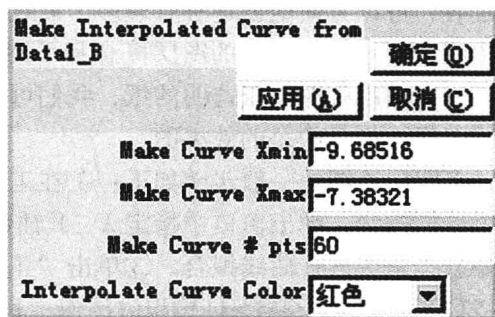


图 1.2 插值和外推

图 1.3 所示。其中 i 表示曲线的数据点范围； X 表示曲线 X 值范围；Area 表示曲线和 X 轴之间区域的面积，即积分值；Peak at 表示曲线峰值位置；Width 表示曲线峰值宽度；Height 表示曲线尖峰至 X 轴高度（峰值）。④ 谱峰分析：Origin 也可对谱图进行分析。物理化学实验得到的许多谱图中常常“隐藏”着谱 y 对 x 的响应。例如两个难分辨的组分，其组合色谱响应图往往不能明显看出两个组分的共同存在，谱图显示的可能是单峰而不是“肩峰”。微分谱图 ($dy/dx - x$) 比原谱图 ($y - x$) 对谱特征的细微变化反应要灵敏得多，因此常常采用微分谱对被隐藏的谱的特征加以区分。Origin 对曲线进行拟合，可以从拟合的曲线中得到许多的谱参数，如谱峰的位置、半峰宽、峰高、峰面积等。有关谱峰分辨等更多的内容可参阅相关专业书籍及 Origin 帮助系统。

[2009-4-12 14:26 "/Graph1" (2454933)]			
Integration of Data1_B from zero:			
i = 1 --> 15			
x = 1 --> 15			
Area	Peak at	Width	Height
24.01	15	7	3

图 1.3 积分结果

9) 图形的导出：激活绘图窗口，“编辑”菜单中“复制”绘图窗口图形，“粘贴”即可。

(2) Origin 软件对物理化学实验数据处理实例：以氢超电势的测定实验处理为例进行说明。氢超电势的测定实验数据如表 1.1 所示。

表 1.1 氢超电势的测定实验数据

电流密度 $J/\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2}$	0.062 2	0.124 3	0.186 5	0.248 6	0.310 8	0.435 1	0.621 6
氢超电势 η/V	0.301 3	0.345 3	0.365 3	0.379 7	0.390 7	0.408 7	0.427 4

1) 在工作表中输入数据：Origin 启动后，自动给出名称为 Data1 的工作表格，在工作表格的 A (X)、B (Y) 栏分别输入电流密度和氢超电势值。

2) 输入公式自动计算：将 J 的单位由 $\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ 换算成 $\text{A} \cdot \text{cm}^{-2}$ ，再计算 $\ln J$ 的值。在“列”菜单中单击“增加新列”，新增 C 和 D 列，单击 C 列表头并在“列”菜单中选择“设置列值”，在设置列值对话框中填入 C 列值自动计算公式： $\text{Col}(C) = \text{col}(A)/1\,000$ ，如图 1.4 所示。同样方法，设置 D 列值自动计算公式： $\text{Col}(D) = \ln[\text{Col}(C)]$ 。

3) 以 $\eta(\text{V})$ 对 $\ln[J(\text{A} \cdot \text{cm}^{-2})]$ 作散点图并线性拟合：工作表格中 B、D 列分别是 $\eta(\text{V})$ 和 $\ln[J(\text{A} \cdot \text{cm}^{-2})]$ 数据。单击散点图绘制图标 ，弹出对话框如图 1.5 所示，选择 D 列为 X 轴数据、B 列为 Y 轴数据，单击“Add”将选择的数据添加到层 1 (Layer1) 列表中，单击“确定”后即绘出散点图。

接下来进行线性拟合。单击“工具”菜单中的“线性拟合”，在弹出的线性拟合对话

框中单击“拟合”，即得如图 1.1 所示的 $\eta(V) - \ln[J(A \cdot \text{cm}^{-2})]$ 曲线。线性拟合的结果显示：直线截距 A 为 0.827，斜率 B 为 0.054，相关系数 R 为 0.999。截距 A 的值即电流密度为 1 时氢超电势的值。

4) 对绘图窗口进行编辑修饰：图形绘出后，为了得到较好的效果，往往需要对图形进行编辑修饰。如坐标轴的形式、坐标范围、标题、点的大小和形状、线条粗细等的编辑均可通过用鼠标双击图中相应位置打开的对话框来调整。

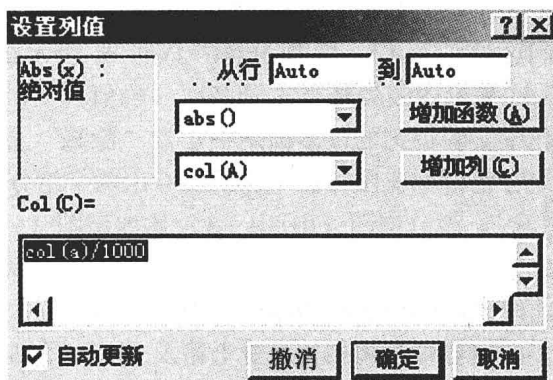


图 1.4 设置列值

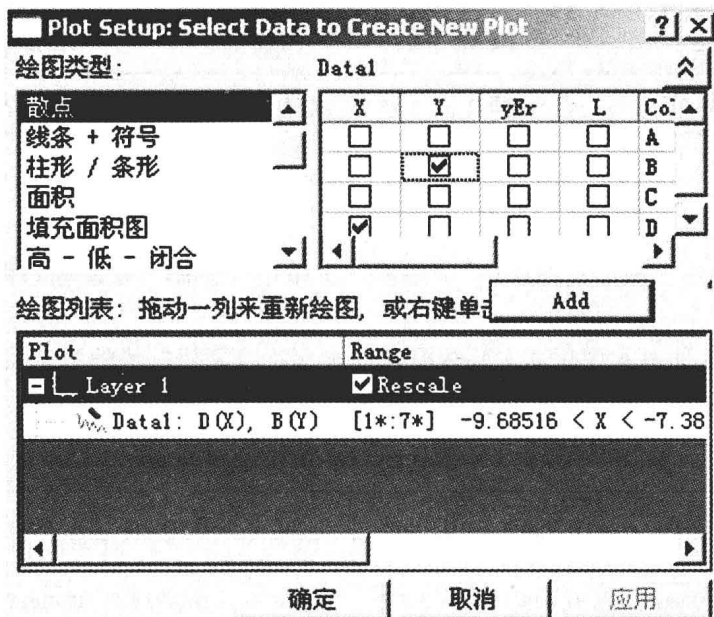


图 1.5 选择绘图数据源

2. Microsoft Excel 在物理化学实验中的应用 Excel 是专门用于数据计算、统计分析和报表处理的软件。如图 1.6 所示，Excel 2003 的工作窗口包括菜单栏、工具栏、状态栏和表格工作区。工作簿可以包含有多个不同类型的工作表，如 Sheet1、Sheet2、Sheet3。每个工作表（如 Sheet1）由众多单元格组成，为了单元格中数据的统计与计算，每个单元格对应一地址，如 A1、A2、A3、B1、B2、B3 等。

(1) 工作表的建立、编辑和格式化

1) 工作表的建立：①输入数据：按事先拟定的规范表格样式在选定工作区的单元格内输入数据。这里的“数据”包含文字、字符、数值和图形等对象，如表头文字说明及表中部分内容说明用的是文字类数据，实验中测得的是数值类数据。单元格内文字及英文字符可以直接输入。文字类数字输入时在数字前加单引号（'），如 5 作为文字用时应输入 '5，表明 5 是文字而不是数值。输入数值时可采用十进制形式或科学计数形式。分数的输