

化学实验室

# 简明计算手册

王少怀 刘哲人 编



中国环境科学出版社

# 化学实验室简明计算手册

王少怀 刘哲人 编

中国环境科学出版社

1987

## 内 容 简 介

本书介绍了实验室的计算规则、化学基本运算、试剂配制、酸度计算、比色分析和质量分析，并介绍了EL-5100可编程序计算器及其各种计算程序。有助于科研人员能快速、准确、简便地完成大批量和重复性的计算工作。

可供环境保护各级监测站、研究所及卫生防疫、水文地质、土壤农化、厂矿企业等部门的科研实验人员使用，也可供大专院校有关专业师生参考。

## 化学实验室简明计算手册

王少怀 刘哲人 编

责任编辑 吴淑岱

中国环境科学出版社 出版

北京崇文区东兴隆街69号

通县张家湾印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

1987年2月第一版 开本：787×1092 1/32

1987年2月第一次印刷 印张：8 7/8

印数：0001—20,000 字数：199,000

ISBN 7-80010-003-0 / X0004

统一书号：13239·0039

定价：1.90元

## 出版者的话

计算工作是化学实验室分析工作中不可缺少的一个重要环节，因为任一分析操作从试样预处理、试剂配制直至作出质量评价的全部过程，都贯穿着一系列的计算，而任一环节计算上的错误都会给分析结果造成不应有的误差，甚至导致实验的失败。所以无论是富有经验的高水平的科研人员，还是一般水平的化验人员，都需要备有一本计算手册，随时查找所需的公式和数据，为此我们出版了这本《化学实验室计算手册》。

本书介绍了常用化学分析中基础数据的处理公式，但考虑到随着科学技术的飞速发展，计算器日益广泛的应用，本书还选编了EL-5100可编程序计算器在有关水质、大气、土壤、植物等环境监测项目中的计算程序及部分常用数理统计、分析质量控制方面的计算程序、帮助科研人员能迅速、准确地完成大批量繁锁的计算工作。

由于水平所限、难免有错漏和不当之处，欢迎读者提出宝贵意见，以便再版时改进。

1986年3月

# 目 录

第一章 数学基础.....	( 1 )
第一节 指数.....	( 1 )
第二节 对数.....	( 2 )
第三节 函数.....	( 8 )
第二章 实验室计算规则.....	( 12 )
第一节 有效数字.....	( 12 )
第二节 弃法法则.....	( 13 )
第三节 数据计算法则.....	( 14 )
第三章 化学基本运算.....	( 17 )
第一节 数量单位.....	( 17 )
第二节 数量表示法.....	( 19 )
第三节 换算因数.....	( 20 )
第四节 气态方程式.....	( 21 )
第五节 奈斯特方程式.....	( 24 )
第四章 试剂配制.....	( 27 )
第一节 试剂配制须知.....	( 27 )
第二节 浓度表示法.....	( 29 )
第三节 配制计算.....	( 33 )
第四节 浓度标定.....	( 36 )
第五节 浓度校正.....	( 37 )
第六节 浓度稀释.....	( 37 )
第七节 浓度换算.....	( 41 )
第五章 酸度(pH) 计算.....	( 42 )

第一节	酸度表示法	( 42 )
第二节	酸碱溶液的pH计算	( 43 )
第三节	盐溶液的pH计算	( 47 )
第四节	缓冲溶液的pH计算	( 51 )
第五节	简单缓冲溶液配制	( 57 )
<b>第六章</b>	<b>比色分析</b>	<b>( 60 )</b>
第一节	光的基本性质	( 60 )
第二节	光吸收定律	( 62 )
第三节	光电比色仪器的设计原理	( 63 )
第四节	比色条件的选择	( 64 )
第五节	标准曲线	( 68 )
第六节	分析结果计算	( 72 )
<b>第七章</b>	<b>质量评价</b>	<b>( 74 )</b>
第一节	总体、样本和自由度	( 74 )
第二节	均数( $\bar{x}$ )	( 75 )
第三节	误差	( 76 )
第四节	准确度和精密度	( 78 )
第五节	可信限	( 83 )
第六节	显著性测验	( 87 )
第七节	实验数据之取舍	( 94 )
<b>第八章</b>	<b>EL-5100可编程序计算器的简介</b>	<b>( 98 )</b>
第一节	概述	( 98 )
第二节	EL-5100计算器键盘功能与显示特点	( 99 )
第三节	EL-5100计算器非程序计算方法	( 108 )
第四节	EL-5100计算器程序计算方法	( 110 )
<b>第九章</b>	<b>EL-5100可编程序计算器在水质分析数据</b>	
	处理中的应用	( 116 )
第一节	物理性质计算程序	( 116 )

第二节	金属化合物计算程序·····	( 125 )
第三节	非金属无机物计算程序·····	( 136 )
第十章	EL-5100可编程序计算器在大气分析数据	
	处理中的应用·····	( 159 )
第一节	气态污染物计算程序·····	( 159 )
第二节	颗粒物计算程序·····	( 186 )
第十一章	EL-5100可编程序计算器在土壤与植物分析	
	数据处理中的应用·····	( 205 )
第一节	金属化合物计算程序·····	( 205 )
第二节	非金属无机物计算程序·····	( 208 )
第三节	有机化合物测定·····	( 214 )
第十二章	EL-5100可编程序计算器在常用数理统计和	
	质量控制程序中的应用·····	( 217 )
第一节	直线回归方程和标准偏差·····	( 217 )
第二节	正态分布检验·····	( 219 )
第三节	离群数据的统计检验·····	( 223 )
第四节	协作试验的数据处理·····	( 229 )
第五节	对比分析·····	( 235 )
第十三章	正确编写与使用程序·····	( 237 )
第一节	程序编写技巧·····	( 237 )
第二节	存储器的运用·····	( 242 )
第三节	计算失误及订正·····	( 244 )
第四节	程序的查阅与修改·····	( 251 )
第五节	程序应用中常遇到的变换·····	( 252 )
第六节	程序编写中存储器的再利用·····	( 254 )
第七节	在“COMP”状态下节省操作步·····	( 258 )
第八节	“COMP”状态下中间计算结果的显示·····	( 259 )
附 录	·····	( 261 )

# 第一章 数学基础

## 第一节 指 数

在数学式

$$\overbrace{a \cdot a \cdot a \cdots \cdots a}^{b \text{个}} = a^b = N$$

中， $a$ 为一任意实数（ $a \neq 0$ ），称为底数， $b$ 称为以 $a$ 为底的指数。其算术值 $N$ 称为幂。

例： $2^3 = 8$

式中，底数( $a$ ) = 2

指数( $b$ ) = 3

幂( $N$ ) = 8

1. 指数式 $K \times 10^{+n}$  ( $1 \leq K < 10$ )

任何数都可以写成 $K \times 10^{+n}$ 形式，实验数据常用此式表示。

例： $1000 = 10 \times 10 \times 10 = 10^3$  ( $K = 1$ )

$$134.6 = 1.346 \times 10 \times 10 = 1.346 \times 10^2$$

$$0.000127 = 1.27 \times 10^{-1} \times 10^{-1} \times 10^{-1} \times 10^{-1} \\ = 1.27 \times 10^{-4}$$

2. 运算

乘法：

$$K_1 \times 10^{n_1} \times K_2 \times 10^{n_2} = K_1 \times K_2 \times 10^{n_1+n_2}$$

除法：



$$K_1 \times 10^{n_1} \div K_2 \times 10^{n_2} = K_1 : K_2 \times 10^{n_1 - n_2}$$

例a:  $4.48 \times 10^2 \times 1.6 \times 10^{-3}$   
 $= 4.48 \times 1.6 \times 10^{2+(-3)}$   
 $= 7.168 \times 10^{-1}$   
 $= 0.7168$

例b:  $4.48 \times 10^2 \div 1.6 \times 10^{-3}$   
 $= 4.48 \div 1.6 \times 10^{2-(-3)}$   
 $= 2.8 \times 10^5$   
 $= 280,000$

## 第二节 对 数

在指数式  $a^b = N$  中，若已知幂( $N$ )，求指数 $b$ ，则指数 $b$ 称为以 $a$ 为底，幂( $N$ )的对数，用符号 $\log$ 表示。幂在对数运算中称为真数。

### 1. 常用对数

以10为底的对数称为常用对数，记为

$$\log_{10} N, \text{ 简记为 } \lg N$$

例:  $\lg 5 = 0.6990$

### 2. 自然对数

以自然数 $e(2.71828)$ 为底的对数，称为自然对数。记为

$$\log_e N, \text{ 简记为 } \ln N$$

例:  $\ln 5 = 1.6094$

### 3. 常用对数和自然对数之换算

$$\ln N = 2.303 \times \lg N$$

$$\begin{aligned} \text{例: } \ln 5 &= 2.303 \times \lg 5 \\ &= 2.303 \times 0.6990 = 1.6094 \end{aligned}$$

实验室中多用常用对数，遇有自然对数时可换算成常用对数后再进行计算。

#### 4. 性质

1) 零和负数没有对数。

2) 1 的对数为 0。

$$\lg 1 = 0$$

3) 10 的整数次幂的对数等于幂次数。

$$\lg 10^{\pm n} = \pm n$$

例:  $\lg 10^5 = 5$

$$\lg 10^{-5} = -5$$

4) 实数  $K$  ( $1 < K < 10$ ) 的对数为一正的纯小数

$$\lg K = 0.xxxxx\dots$$

例:  $\lg 1.001 = 0.0004$

$$\lg 9.99 = 0.9996$$

5) 指数式  $K \times 10^{\pm n}$  的对数等于幂次数与实数  $K$  对数之和。

$$\lg K \times 10^{\pm n} = \pm n + 0.xxxxx$$

记为  $\lg K \times 10^n = n.xxxxx$

$$\lg K \times 10^{-n} = \overline{n}.xxxxx$$

例:  $\lg 3 \times 10^3 = \lg 3 + \lg 10^3 = 0.4771 + 3 = 3.4771$

$$\lg 3 \times 10^{-3} = \lg 3 + \lg 10^{-3} = 0.4771 + (-3)$$

$$= \overline{3}.4771$$

式中整数部分称为对数的首数，小数部分称为对数的尾数。

数，尾数可查对数表获取。

## 5. 对数表的应用

常用四位对数表可查一任意四位真数的对数。其中标有  $N$  的直列为真数的前两位数字，横列为真数的第三位数字，三位数的对数可从表中直接查取。

右边比例部分第一横列为真数的第四位数字，当真数是四位数时，需用相应的修正值校正对数。

例：求  $\lg 724.6$

$$\text{解： } \lg 724.6 = \lg 7.246 \times 10^2$$

查对数表(如表1-1所示)，得724三位数的对数值为8597，第四位数6的修正值为4，故得对数值(8597+4)为8601，记为0.8601。由此得： $\lg 724.6 = 2.8601$

例：求0.007246的对数

$$\begin{aligned} \text{解： } \lg 0.007246 \\ &= \lg 7.246 \times 10^{-3} \\ &= \overline{3.8601} \end{aligned}$$

## 6. 运算法则

1) 积的对数等于各因数对数之和。

$$\lg MN = \lg M + \lg N$$

2) 商的对数等于两因数之差。

$$\lg M/N = \lg M - \lg N$$

3) 一数倒数之对数等于此数的负对数。

$$\lg 1/M = -\lg M$$

4) 一数任何幂的对数等于比数的对数与幂次数之乘积。

表 1-1 常用对数表 (部分)

N	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	1	2	3	4	5	6	7	8	9
...	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....
70	8451	8457	8463	8470	8476	8482	8488	8494	8500	8506	1	1	2	2	3	4	4	5	6
71	8513	8519	8525	8531	8537	8543	8549	8555	8561	8567	1	1	2	2	3	4	4	5	5
72	8573	8579	8585	8591	8597	8603	8609	8615	8621	8627	1	1	2	2	3	4	4	5	5
73	8633	8639	8645	8651	8657	8663	8669	8675	8681	8686	1	1	2	2	3	4	4	5	5
74	8692	8698	8704	8710	8716	8722	8727	8733	8739	8745	1	1	2	2	3	4	4	5	5
...	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....

$$\lg M^{\pm n} = \pm n \times \lg M$$

5) 一数任何根的对数等于此数的对数与根指数之商。

$$\lg^{\pm n} \sqrt[n]{M} = \frac{\lg M}{\pm n}$$

## 7. 反对数

在对数式  $\lg N = b$  中, 若已知对数  $b$ , 求真数 ( $N$ ), 则真数 ( $N$ ) 称为对数  $b$  的反对数, 用符号  $\lg^{-1}$  表示。

$$N = \lg^{-1} \lg N$$

运算法则:

- 1)  $\lg^{-1} 0 = 1$
- 2)  $\lg^{-1} \pm n = 10^{\pm n}$
- 3)  $\lg^{-1} 0.xxxxx = K (1 < K < 10)$
- 4)  $\lg^{-1} n.xxxxx = K \times 10^n$
- 5)  $\lg^{-1} n.xxxxx = K \times 10^{-n}$
- 6)  $\lg^{-1} -n.xxxxx = [\lg^{-1}(1 - 0.xxxxx)] \times 10^{-n-1}$

对数尾数的反对数可查反对数表。

例: 求  $\lg^{-1} 3.871 = (\lg^{-1} 0.871) \times 10^3 = 7.43 \times 10^3$   
 $\lg^{-1} \overline{3.871} = (\lg^{-1} 0.871) \times 10^{-3} = 7.43 \times 10^{-3}$   
 $\lg^{-1} (-3.871)$   
 $= [\lg^{-1}(1 - 0.871)] \times 10^{-3-1}$   
 $= 1.346 \times 10^{-4}$

## 8. 对数在复杂运算中的应用

在化学计算中遇有复杂的乘、除、乘方、开方等运算时, 用对数法解甚为简捷, 法则如下:

1) 调正函数关系式, 置未知数于等式之左边, 已知数于

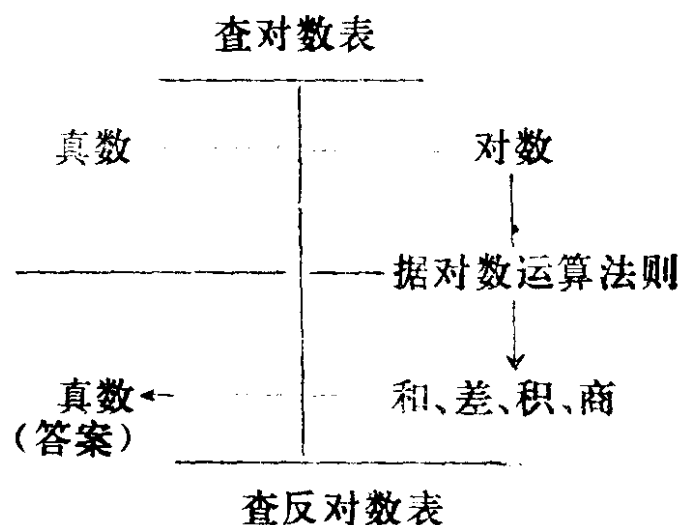
等式之右边。

2) 等式两边取对数

3) 据对数运算法则，求出未知数之对数。

4) 求对数的反对数，即为所求答案。

上述法则用十字顺时针式表示为：



例：计算0.015mol/L乙酸溶液中的氢离子（H<sup>+</sup>）浓度。

解：该题的算式为：

$$[\text{H}^+] = \sqrt{1.8 \times 10^{-5} \times 1.5 \times 10^{-2}}$$

用横式解：

$$\begin{aligned} \lg[\text{H}^+] &= \lg \sqrt{1.8 \times 10^{-5} \times 1.5 \times 10^{-2}} \\ &= \frac{\lg 1.8 \times 10^{-5} + \lg 1.5 \times 10^{-2}}{2} \\ &= \frac{\overline{5.2553} + \overline{2.1761}}{2} \\ &= \frac{\overline{7.4314}}{2} \end{aligned}$$

此时首数不能被分母整除，用加1减1法处理：

$$\begin{aligned} \lg[H^+] &= \frac{(7-1) + (0.4314+1)}{2} \\ &= \frac{8 + 1.4314}{2} \\ &= 4.7157 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [H^+] &= 10^{4.7157} \\ &= 5.2 \times 10^{-4} (\text{mol/L}) \end{aligned}$$

用十字式解:

$1.8 \times 10^{-5}$	$5.2553$
$1.5 \times 10^{-2}$	$2.1761$ ( +
	$7.4314$
	$= 8.1.4314$ ( + 2
$5.2 \times 10^{-4}$	$4.7157$

答: 该液之  $[H^+] = 5.2 \times 10^{-4} (\text{mol/L})$ 。

### 第三节 函 数

在一个相互有关的变量系统中, 从理论上把各变量之间相应的数量关系, 用数学式表示出来, 称为函数关系式, 用通式

$$y = f(x)$$

表示。式中表示  $y$  值决定于  $x$  所取的值,  $x$  称自变量,  $y$  称应变量或自变量  $x$  的函数。

## 1. 正比和正比函数

在相互有关的两个变量中，若一个量扩大（或缩小）若干倍时，另一个量也相应地扩大（或缩小）相同的倍数，此称为正比。这两个变量之间的数学关系，即称为正比函数关系。表示为：

$$y \propto x$$

或  $y = Kx$

式中， $K$ 是一个 $\neq 0$ 的常数。

例：比色分析中所依据的朗伯-比尔氏定律为：

$$A = K L c$$

图象：

正比函数图象的特征为：

$a$ 是一条通过原点的直线；

$b$ 直线的倾斜度和比例常数 $K$ 值的大小有关， $K$ 值愈大，直线愈陡，反之则愈低平，因此常数 $K$ 在图象中称为斜率。

设 $K_1 > 0$ ， $K_2 > K_1$ ，其图象见图(1-1)。

利用正比函数图象的性质是化学分析中绘制工作曲线，以帮助简捷获取测定结果的基本原理。

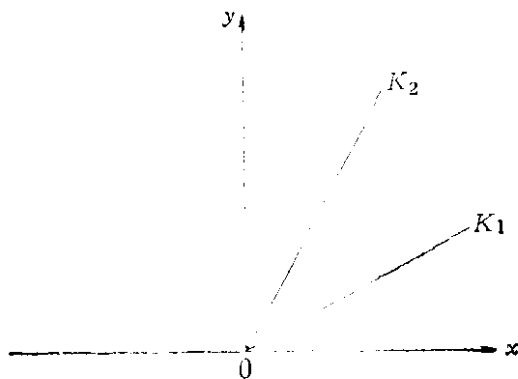


图 1-1 正比函数图象



## 2. 反比和反比函数

在相互有关的两个变量中，若一个量扩大（或缩小）若干倍时，而另一个变量相应地缩小（或扩大）相同的倍数，此称为反比，这两个变量之间的数学关系，即称为反比函数关系。表示为：

$$y \propto \frac{1}{x}$$

或  $y = \frac{K}{x}$

式中， $K =$  比例常数（ $\neq 0$ ）。

例：波义耳-马里奥特定律即是。

$$V \propto \frac{1}{P}$$

图象：

反比函数图象的特征为：以原点为对称的两条曲线，曲线沿 $x$ 和 $y$ 轴无限延伸，永不相交。

当 $K > 0$ 时，其图象见图（1-2）。

转换：

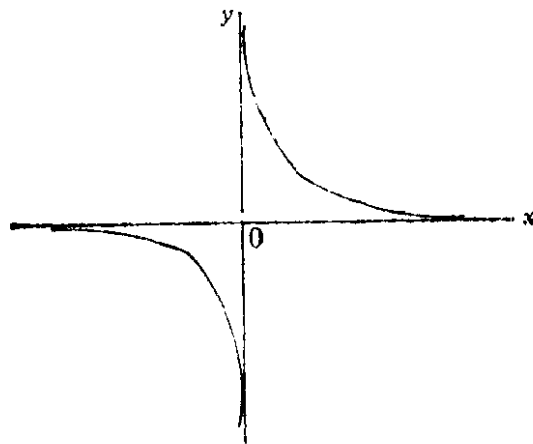


图 1-2 反比函数图象