

# 揭阳职业技术学院

Jieyang Vocational & Technical College

## 教 案

系 (部) : 化学工程系

讲授课程: 化工计算

任课教师: 刘月颖

专业班级: 分析检验技术 241& (3+证书) 241

授课学期: 2025-2026 学年第二学期

☒ ☒

揭阳职业技术学院化学工程系

2026年3月

## 化工计算课程综述

### 一. 本课程的主要内容

随着计算机科学与技术的高速发展及其与传统化学、化工学科的不断交叉、渗透与整合，现代计算机技术正在化学、化工专业的科研、生产、教学中起到日益重要的作用。计算机在化、化工专业的应用已不仅局限于传统的办公、图形处理等范围。在化学品开发、反应机理研究、设备设计、过程控制、工艺优化、辅助教学等领域，计算化学和计算化学工程的重要作用日益凸显。对于化学、化工专业的学生和科研人员，熟练应用计算机解决学习、科研、工作中面临的各种问题已成为必备的基本技能。

### 二. 本课程与其他课程的关系

本课程是一门综合性技能课与其它课程，能同很多门检测课程建立联系，但都比其它课程更注重基础和技能的培养。课程以实际分析检测中的应用例子为对象，在叙述和分析中将实验设计与数据处理、化学化工计算通过学习，使学生应用计算机解决分析化学、仪器分析领域一些常见问题的能力在实践中得到培养和提高，并对化工常用软件有较好的了解和掌握，是化工类专业的专业选修课程。

### 三. 本课程的现状

《化工计算》是应用化工技术、商检技术专业一门实用性较强的技能课。课程内容与工作岗位对接性强，是新开课，课程教学经验还需要累积。

### 四. 本课程的发展

努力方向：

- a、采用项目式教学，将教学内容项目化。

授课日期：第1-3周

教案编号：01

课程名称	化工计算	专业班级	分析检验技术
教材名称	自编讲义		
授课题目	化验分析数据处理及结果计算		
授课学时	2节（）；3节（）；其它（ <input checked="" type="checkbox"/> ）		
课型	理论（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；上机（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；见习（）；实训（）；其它（）		
教学目的	1、 了解分析化学常用计量单位。 2、 掌握化学分析中常用的溶液浓度表示方法。 3、 掌握分析化学计算基础。		
教学重点	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 掌握化学分析中常用的溶液浓度表示方法。</li> <li>• 掌握分析化学计算基础。</li> </ul>		
教学难点	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 学会用电脑完成溶液配制的相关计算。</li> </ul>		
教学方法	讲授（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；讨论（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；指导（）；示教（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；其它（）		
电子教案	有（）	Microsoft PowerPoint（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；Author ware（）；其它（）	
	无（）		
教学资源	多媒体（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；模型（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；标本（）；实物（）；音像（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；其它（）		
教学过程时间安排	6学时		
思考题			

# 化验分析数据处理及结果计算

## 本章教学目的:

- 1、了解分析化学常用计量单位。
- 2、掌握化学分析中常用的溶液浓度表示方法。
- 3、掌握 Mathtype 公式编辑软件的应用
- 4、掌握分析化学计算基础。
- 4、掌握可疑值概念, 分析数据的取舍方法 4d、Q 检验法、Grubbs 法, 它们的特点及相互关系。
- 6、理解平均值精密度的表示方法, 平均值的置信区间。

## ☒教学重点与难点:

溶液浓度表示方法; 滴定分析结果计算; 可疑数据的取舍。

## ☒教学内容:

### 第一节 分析化学中的计量关系

#### 一、法定计量单位

什么是法定计量单位? ☒

法定计量单位: 由国家以法令形式规定使用或允许使用的计量单位。我国的法定计量单位: 以国际单位制单位为基础, 结合我国的实际情况制定。国际单位制 SI—International System of Units

表1 SI基本单位

量的名称	单位名称	符号	量的名称	单位名称	符号
长度	米	m	时间	秒	s
热力学温度	开[尔文]	K	光强度	坎[德拉]	cd
质量	千克(公斤)	kg	电流	安[培]	A
物质的量	摩[尔]	mol			

简单介绍 SI基本单位。

## 二、分析化学中常用法定计量单位

**1、物质的量：**用符号  $n_B$ 表示，单位为摩尔（mol）。

规定：1mol是指系统中物质单元B的数目与0.012kg碳-12的原子数目 ( $6.02 \times 10^{23}$ )相等。

物质基本单元：可以是原子、分子、离子、电子及其它粒子和这些粒子的特定组合。

例如：H<sub>2</sub>O为基本单元，则 0.018kg水为 1mol水。

H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>为基本单元，则 0.098kg H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>为 1mol。

1/2 H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>为基本单元，则 0.098kg H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>为 2mol

由此可见：相同质量的同一物质，由于所采用基本单元不同，其物质的量也不同。

表示方法：1 mol H 其质量为 1.008g；

1 mol H<sub>2</sub> 其质量为 2.016g；

1 mol 1/2Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 其质量为 53.00g；

1 mol 1/5 KMnO<sub>4</sub> 其质量为 31.60g。

**2、质量 (m)：**单位为千克 (kg)；克 (g)；毫克 (mg)；微克 (μg)。

1kg=1000g=1×10<sup>6</sup> mg=1×10<sup>9</sup> μg。

**3、体积 (V)：**单位为米<sup>3</sup> (m<sup>3</sup>)

分析化学中：升 (L)；毫升 (ml)；微升 (μl)。

$$1\text{m}^3 = 1000\text{L} = 1 \times 10^6 \text{ml} = 1 \times 10^9 \mu\text{l}$$

4、摩尔质量 ( $M_B$ )：单位为千克/摩 (kg/mol)，常用 g/mol表示。

$$M_B = \frac{m}{n_B}$$

介绍 p331 页附录 1 和附录 2。

5 摩尔体积 ( $V_m$ )：单位为  $\text{m}^3/\text{mol}$ ；常用 L/mol。

理想气体：22.4L/mol。

$$V_m = \frac{V}{n_B}$$

6、密度 ( $\rho$ )：kg/m<sup>3</sup>；g/cm<sup>3</sup>；g/ml。

7、元素的相对原子质量 ( $A_r$ )：

指元素的平均原子质量与 <sup>12</sup>C 原子质量的 1/12 之比。

8、物质的相对分子质量 ( $M_r$ )，即以前的分子量：

指物质的分子或特定单元平均质量与 <sup>12</sup>C 原子质量的 1/12 之比。

### 三、分析化学计算基础

### 四、溶液浓度表示方法

#### 1、物质的量浓度

物质的量浓度=物质的量/混合物的体积

$$c_B = n_B/V$$

式中：

$c_B$ —物质B的物质的量浓度，mol/L；

$n_B$ —物质B的物质的量，mol；

V—混合物（溶液）的体积，L

B—基本单元

## 2、质量分数

B的质量分数 = B的质量/混合物的质量

$\omega_B$ 表示，量纲为1。

$\omega_{(\text{HCl})}=0.38$  或  $\omega_{(\text{HCl})}=38\%$

质量分数表示：mg/g、 $\mu\text{g/g}$ 、ng/g

## 3、质量浓度

B的质量浓度 = B的质量/混合物的体积

$\rho_B$ 表示，单位为g/L或mg/L、 $\mu\text{g/L}$ 、ng/L。

$$\rho_B = m_B/V$$

式中： $\rho_B$ —物质B的质量浓度，g/L；

$m_B$ —物质B的质量，g；

V—混合物（溶液）的体积，L。

## 4、体积分数

B的体积分数 = 混合前B的体积/混合物的体积

$\varphi_B$ 表示，量纲为1。

$\varphi_{(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH})}=0.70$  或  $\varphi_{(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH})}=70\%$

体积分数表示：mL/L、 $\mu\text{L/L}$ 。

## 5、比例浓度

容量比浓度：液体试剂相互混合的表示方法。

(1+5)HCl：1体积浓盐酸与5体积蒸馏水混合。

质量比浓度：两种固体试剂相互混合的表示方法。

(1+100)钙指示剂-氯化钠混合试剂—1单位质量的钙指示剂与100个单位的氯化钠相互混合。

## 6、滴定度(Titer)

滴定度有两种表示方法：

(1)  $T_s$ ：每毫升标准溶液中所含滴定剂（溶质）的克数表示浓度。单位 g/mL。

$$T_s = \frac{\text{溶质的质量}}{\text{溶液的体积}} = \frac{m(g)}{V(ml)}$$

例如： $THCl = 0.001012g/ml$ 的 HCl溶液，表示每毫升此溶液含有 0.001012g 纯 HCl。

(2)  $T_{s/x}$ ：以每毫升标准溶液所相当的被测物的克数表示的浓度。

S：代表滴定剂的化学式。

X：代表被测物的化学式。

$$T_{s/x} = \frac{\text{被测物的质量}}{\text{标准溶液的体积}} = \frac{m(g)}{V(ml)}$$

$THCl/Na_2CO_3=0.005316g/ml$  HCl 溶液，表示每毫升此 HCl 溶液相当于 0.005316g  $Na_2CO_3$ 。这种滴定度表示法对分析结果计算十分方便。

练习：

1、 将10g氯化钠溶于100ml20°C的水中，请用c、w、 $\rho$ 表示溶液中氯化钠的浓度。

解： $M(NaCl) = 58.44g/mol$

$$c = \frac{n_{NaCl}}{V} = \frac{m_{NaCl}}{M_{NaCl}V} = \frac{10g}{58.44g/mol \times 100 \times 10^{-3}L} = 1.7mol/L$$

$$\omega = \frac{m_{NaCl}}{m_{\text{溶液}}} = \frac{10g}{10g + 100g} = 9.1\%$$

$$\rho = \frac{m_{NaCl}}{V_{\text{溶液}}} = \frac{10g}{100 \times 10^{-3}L} = 100g \cdot L^{-1}$$

2、有一试样含37.05gCa(OH)<sub>2</sub>求n[1/2Ca(OH)<sub>2</sub>],已知M[Ca(OH)<sub>2</sub>]=74.10g/mol

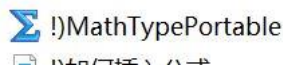
$$\text{解: } n\left[\frac{1}{2}\text{Ca(OH)}_2\right] = \frac{m_{\text{Ca(OH)}_2}}{M\left[\frac{1}{2}\text{Ca(OH)}_2\right]} = \frac{37.05\text{g}}{\frac{1}{2} \times 74.10\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}} = 1.000\text{mol}$$

3、已知n[1/5KMnO<sub>4</sub>]=0.5000mol,求m (KMnO<sub>4</sub>),已知M (KMnO<sub>4</sub>) =158.05g·mol<sup>-1</sup>

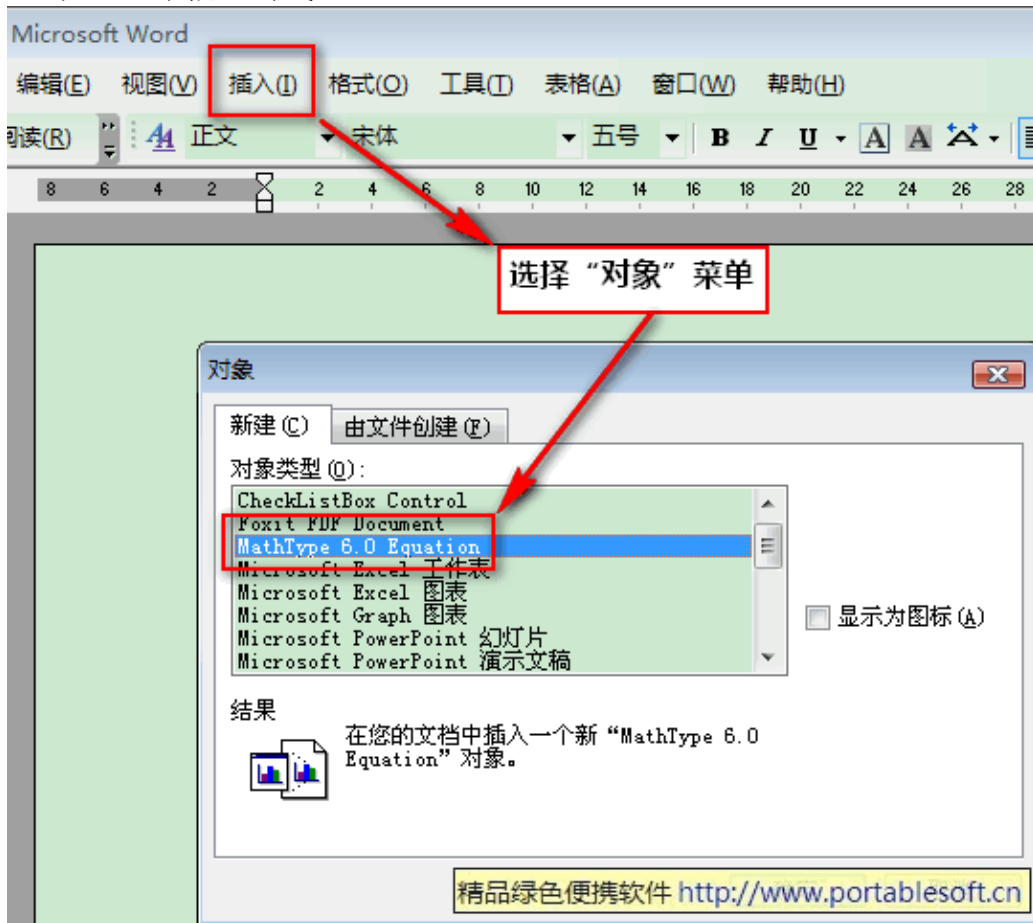
$$m_{\text{KMnO}_4} = n_{\text{KMnO}_4} M_{\text{KMnO}_4} = n\left(\frac{1}{5}\text{KMnO}_4\right) M\left(\frac{1}{5}\text{KMnO}_4\right) = 0.5000\text{mol} \times \frac{1}{5} \times 158.05\text{g}\cdot\text{mol}^{-1} = 31.61\text{g}$$

## 五、MathType软件在word中的使用

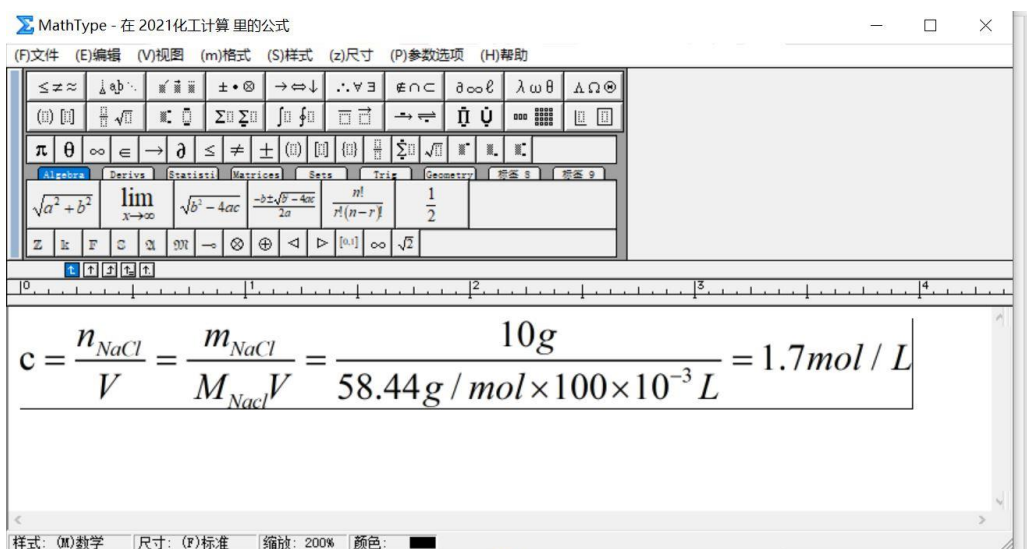
### 1、安装软件



### 2、在word中插入公式



### 3、书写公式



#### 4、修改字体大小

先运行 MathType，点击“Size”菜单中的“Define”命令。

打开“Define Sizes”对话框，我们可以在“Full”后的输入框中要调整的字号大小，

公式中其它的元素会自动进行相应的调整的，所以一般情况下可以不做其它改动。点击“OK”按钮，关闭对话框。

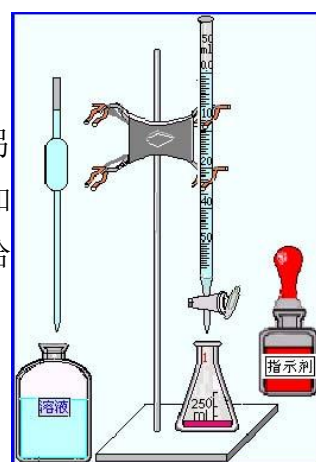
再点击“Preferences”菜单中的“Equation Preferences→Save to File”命令，将我们设置好的选项保存成一个后缀名为“eqp”的文件。

## 第二节 滴定分析结果计算

### 一、滴定分析计算的依据

**1、滴定：**将试样制备成溶液置于三角瓶中，再将另一种已知准确浓度的试剂溶液（标准溶液）由滴定管滴加到待测组分的溶液中去，直到所加标准溶液和待测组分恰好完全定量反应为止。

### 2、仪器与试剂：



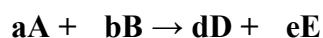
滴定管、三角瓶、标准溶液、被测溶液、指示剂。

### 3、滴定分析法 (titrimetric analysis) :

根据滴定反应的化学计量关系、标准溶液的浓度和体积用量，计算出被测组分含量的定量分析方法。

假如选取分子、离子或原子作为反应物的基本单元，此时滴定分析结果计算的依据为：当滴定到化学计量点时，它们的物质的量之间关系恰好符合其化学反应所表示的化学计量关系。

(1) 待测物的物质的量  $n_A$  与滴定剂的物质的量  $n_B$  的关系：



待测物溶液的体积为  $V_A$ ，浓度为  $c_A$ ，到达化学计量点时消耗了浓度为  $c_B$  的滴定剂的体积为  $V_B$ ，则：

浓度高的溶液稀释为浓度低的溶液，可采用下式计算： $c_1V_1 = c_2V_2$  式中： $c_1$ 、

$V_1$ —稀释前某溶液的浓度和体积；

$c_2$ 、 $V_2$ —稀释后所需溶液的浓度和体积。

实际应用中，常用基准物质标定溶液的浓度，而基准物往往是固体，因此必须准确称取基准物的质量  $m$ ，溶解后再用于标定待测溶液的浓度。

(2) 待测物含量的计算

滴定分析中计算被测物含量的一般通式：

若称取试样的质量为  $m_s$ ，测得待测物的质量为  $m_A$ ，则待测物 A 的质量分数为：

$$\omega_A = \{a/b(c_B V_B M_A)\} / m_s \times 100\%$$

$$c_A V_A = \frac{a}{b} c_B V_B$$

## 二、标准溶液浓度的计算

### 1、标准溶液浓度的计算

例1: 配制 $0.02000 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$   $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ 标准溶液250.0mL, 需称取多少克 $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ ?

解: 已知 $M_{\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7} = 294.2 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$

$$m = n\cdot M = c\cdot V\cdot M$$

$$m = 0.02000 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1} \times 0.2500\text{L} \times 294.2 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} = 1.471\text{g}$$

配制方法: 准确称量  $1.47\text{g}(\pm 10\%)$   $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ 基准物质于容量瓶中, 溶解定容, 再计算出其准确浓度。

例2: 已知浓盐酸的密度为 $1.19\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ , 其中HCl含量为37%。计算:

(1) 浓盐酸的浓度 (物质的量浓度);

(2) 欲配制浓度为 $0.1\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$  的稀盐酸 $1.0\times 10^3 \text{ mL}$ , 需要量取浓盐酸多少毫升?  
( $c_{\text{HCl}} = 12\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ )

(1) 解: 已知 $M_{\text{HCl}} = 36.46\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$

$$c_{\text{HCl}} = (1.19\text{g}\cdot\text{mL}^{-1} \times (1.0 \times 10^3 \text{ mL}) \times 0.37) / 36.46 \text{ g}\cdot\text{mol} = 12 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$$

(2) 解: 根据稀释定律

$$(n_{\text{HCl}})_{\text{前}} = (n_{\text{HCl}})_{\text{后}}$$

$$(c_{\text{HCl}} \cdot V_{\text{HCl}})_{\text{前}} = (c_{\text{HCl}} \cdot V_{\text{HCl}})_{\text{后}}$$

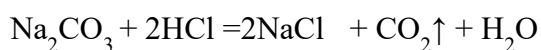
$$V_{\text{HCl}} = 0.1 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1} \times (1.0 \times 10^3 \text{ mL}) / 12 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1} = 8.4 \text{ mL}$$

用10mL量筒量取 9mL 浓盐酸, 注入 1000mL 水中, 摇匀, 贴上标签, 备用。

### 2、标定溶液浓度的有关计算

例3: 用基准无水碳酸钠标定HCl溶液的浓度, 称取 $0.2023\text{gNa}_2\text{CO}_3$ , 滴定至终点时消耗HCl溶液37.70mL, 计算HCl溶液的浓度。

解: 已知  $M_{\text{Na}_2\text{CO}_3} = 105.99 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$



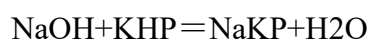
$$c_{\text{HCl}} = 2 (m/M) \text{Na}_2\text{CO}_3 / V_{\text{HCl}} c_{\text{HCl}} = 2 \times (0.2023\text{g} / 105.99\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}) / 37.70 \times 10^{-3} \text{L}$$

$$= 0.1012\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$$

例 4: 要求在标定时用去  $0.10\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$  NaOH 溶液 20~25mL, 问应称取基准试剂邻苯二甲酸氢钾 (KHP) 多少克? 如果改用草酸 ( $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ) 作基准物质, 又应称取多少克? (要求相对误差小于 0.1%)

$$n_{\text{KHP}} = n_{\text{NaOH}}$$

解: 已知  $M_{\text{KHP}} = 204.22 \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$



$$m_{\text{KHP}} = (cV)_{\text{NaOH}} M_{\text{KHP}}$$

$$(1) V = 20\text{mL}$$

$$m_{\text{KHP}} = 0.10\text{mol} \cdot \text{L}^{-1} \times 20 \times 10^{-3} \text{L} \times 204.22 \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$m_{\text{KHP}} = 0.41\text{g}$$

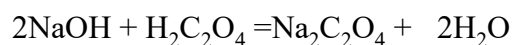
$$(2) V = 25\text{mL}$$

$$m_{\text{KHP}} = 0.10\text{mol} \cdot \text{L}^{-1} \times 25 \times 10^{-3} \text{L} \times 204.22 \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$m_{\text{KHP}} = 0.51\text{g}$$

同理计算以草酸为基准物质情况。

$$\text{已知 } M_{\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4} = 126.07 \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$$



$$(1) V = 20\text{mL}, m = 0.13\text{g}$$

$$(2) V = 25\text{mL}, m = 0.16\text{g}$$

由此可知: 在标定同一浓度的 NaOH 溶液时, 若分析天平的绝对称量误差一定时, 采用摩尔质量较大的邻苯二甲酸氢钾作为基准试剂, 可以减少称量的相

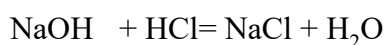
对误差。

如何配制  $0.1\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$  NaOH溶液?

称取 120gNaOH固体, 溶于 100mL水中, 摇匀, 注入聚乙烯容器中, 密闭放置清亮。用塑料管虹吸5mL上层清液, 注入1000mL无二氧化碳的水中, 摇匀, 贴上标签备用。

例5: 准确量取30.00mLHCl溶液, 用 $0.09026\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$  NaOH溶液滴定, 到达化学计量点时消耗NaOH溶液的体积为31.93mL, 计算HCl溶液的浓度。

解:



$$c_{\text{HCl}} \cdot V_{\text{HCl}} = c_{\text{NaOH}} \cdot V_{\text{NaOH}}$$

$$c_{\text{HCl}} = 0.09026 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1} \times 31.93\text{mL} / 30.00\text{mL} = 0.09908 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$$

### 3、物质的量浓度与滴定度之间的换算

例6: HCl标准溶液的浓度为 $0.09908 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ , HCl标准溶液对NaOH的滴定度  $T_{\text{HCl}/\text{NaOH}}$  ( $\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ ) 为多少?

解: 已知  $M_{\text{NaOH}} = 40.00 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$   
 $\text{HCl} + \text{NaOH} = \text{NaCl} + \text{H}_2\text{O}$

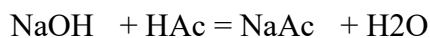
$$T_{\text{HCl}/\text{NaOH}} = 0.09908 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1} \times (1.00 \times 10^{-3} \text{ L}) \times 40.00 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$T_{\text{HCl}/\text{NaOH}} = 0.00396 \text{ g}\cdot\text{mL}^{-1}$$

### 三、滴定分析法计算实例

例7: 准确移取食用白醋25.00mL, 置于250mL容量瓶中, 用蒸馏水稀释至刻度、摇匀。用50mL移液管称取上述溶液, 置于250mL三角瓶中, 加入酚酞指示剂, 用  $0.1000\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$  NaOH标准溶液滴定至微红色, 计算每100mL食用白醋中含醋酸的质量。

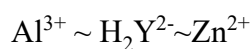
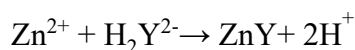
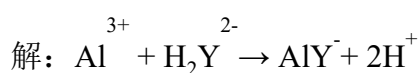
解:



- 1 50mL 溶液中 HAc 浓度:
- 2 25mL 白醋中 HAc 浓度:
- 3 100mL 食用白醋中含醋酸的质量。

$$M_{\text{HAc}} = 60.00 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

例8: 测定铝盐中铝含量。称取样品0.2500g, 溶解后加入EDTA标准溶液,  $c_{(\text{EDTA})} = 0.05000 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ ,  $V_{(\text{EDTA})} = 25.00 \text{ mL}$ 。选择适当条件, 用  $c_{(\text{Zn}^{2+})} = 0.02000 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$  标准溶液返滴定, 用去  $V_{(\text{Zn}^{2+})} = 21.50 \text{ mL}$ , 求铝的含量?



$$n(\text{EDTA}) = 0.05000 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \times 25.00 \times 10^{-3} \text{ L} = 1.25 \times 10^{-3} \text{ mol}$$

$$n(\text{Zn}^{2+}) = 0.02000 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \times 21.50 \times 10^{-3} \text{ L} = 0.43 \times 10^{-3} \text{ mol}$$

$$n(\text{EDTA}) = n(\text{Zn}^{2+}) + n(\text{Al}^{3+})$$

$$n(\text{Al}^{3+}) = 1.25 \times 10^{-3} \text{ mol} - 0.43 \times 10^{-3} \text{ mol} = 0.82 \times 10^{-3}$$

$$\text{铝的含量} = \{ (26.98 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} \times 0.82 \times 10^{-3} \text{ mol}) / 0.2500 \text{ g} \} \times 100\%$$

$$\text{铝的含量} = 8.85\%$$

### 第三节 分析结果数据处理

#### 一、分析结果的判断

**可疑值:** 在消除了系统误差后, 所测得的数据出现显著的特大值或特小值, 这样的数据是值得怀疑的。

对可疑值应做如下判断:

1、分析实验中，已然知道某测定值是操作中的过失所造成的，应立即将此数据弃去。

2、找不出可疑值出现的原因，不应随意弃去或保留，而应按照下面介绍的方法来取舍。

## 二、分析结果数据的取舍

### 1、4d法：也称“4乘平均偏差法”。

例1：我们测得一组数据如下表示：

测得值            30.18    30.56    30.23    30.35    30.32     $\bar{X} = 30.27$

$d = |x_i - \bar{x}|$     0.09                    0.04    0.08    0.05     $\bar{d} = 0.065$

从上表可知30.56为可疑值。

①求可疑值以外其余数据的平均值：

$$\bar{X} = \frac{30.18 + 30.23 + 30.35 + 30.32}{4} = 30.27$$

②求可疑值以外其余数据的平均偏差：

$$\bar{d} = \frac{|d_1| + |d_2| + |d_3| + |d_4|}{n} = \frac{0.09 + 0.04 + 0.08 + 0.05}{4} = 0.065$$

③求可疑值和平均值之间的差值：

$$30.56 - 30.27 = 0.29$$

④将平均偏差  $\bar{d}$  乘 4，再和求出的差值比较，若差值  $\geq 4\bar{d}$  则弃去，若小于  $4\bar{d}$  则保留。

$$4\bar{d} = 4 \times 0.065 = 0.26 < 0.29$$

所以 30.56 值该弃去。

4d 法适用于测定 4 到 6 个数据的测量实验中。

## 2、Q检验法

Q检验法（又叫做舍弃商法）是一种由迪克森(W. J. Dixon)在1951年专为分析化学中少量观测次数( $n < 10$ )提出的简易判据式。

Q检验法的步骤如下：

①将测定数据按大小顺序排列，即  $x_1$ 、 $x_2$ 、…… $x_n$

②计算可疑值与最邻近数据之差，除以最大值与最小值之差，所得商称为Q值。

可疑值出现在首项：

$$Q_{\text{计算}} = \frac{x_2 - x_1}{x_n - x_1} (\text{检验 } x_1)$$

可疑值出现在末项：

$$Q_{\text{计算}} = \frac{x_n - x_{n-1}}{x_n - x_1} (\text{检验 } x_n)$$

查表 8-1：  $Q_{\text{计算}} \geq Q$ ， 弃去

$Q_{\text{计算}} < Q$ ， 保留

表 8-1： 舍弃商 Q值表（置信度 90%和 95%和99%）

测定次数 n	Q (90%)	Q (95%)	Q (99%)
3	0.90	0.97	0.99
4	0.76	0.84	0.93
5	0.64	0.73	0.82
6	0.56	0.64	0.74
7	0.51	0.59	0.68
8	0.47	0.54	0.63
9	0.44	0.51	0.60
10	0.41	0.49	0.57

例如： 标定 NaOH 标准溶液时测得 4 个数据， 0.1016mol/L， 0.1019mol/L,0.1014mol/L,0.1012mol/L。 试用Q检验法确定 0.1019数据是否应舍去？ 置信度 90%。

解： 排列 0.1012， 0.1014， 0.1016， 0.1019

$$\text{计算： } Q_{\text{计算}} = \frac{0.1019 - 0.1016}{0.1019 - 0.1012} = \frac{0.0003}{0.0007} = 0.43$$

查Q表： 4次测定的 Q值 = 0.76，  $0.43 < 0.76$ ， 故数据 0.1019不能弃去。 3、 4d法和 Q检验法的比较

相同处：从误差出现的机率考虑。

不同处：4d法将可疑数据排除在外，方法简单只适合处理一些要求不高的实验数据。Q检验法准确性相对较高，方法也是简单易行。

### 三、平均值精密度的表示方法：

平均值精密度：为说明平均值之间的精密度，用平均值的标准差（ $S_x$ ）表示。

复习前面学过的：

$$\text{平均偏差 } \bar{d} = \frac{|d_1| + |d_2| + |d_3| + \cdots + |d_n|}{n} = \frac{|\sum d_i|}{n}$$

$$\text{标准偏差 } S = \left\{ \frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{(n-1)} \right\}^{1/2} = \left\{ \frac{\sum d^2}{(n-1)} \right\}^{1/2}$$

$\bar{d}$ 和 $S$ 计算出以后，只不过解决了个别测定和它们平均值之间的偏差，那么平均值不是真实值，平均值与真实值之间的误差是怎样处理的呢？

数理统计方法已证明：

$$S_x = S / n^{1/2}$$

$S_x$ ：平均值的标准偏差

$S$ 为：标准偏差

$n$ 为：测定次数

$S_x$ 代表平均值与真实值之间的接近程度。

即真实值 =  $\bar{x} \pm S_x$

#### [讨论]：

- ①增加测定次数可以提高测量的精密度，使所得的平均值更接近真实值。
- ②当  $n > 10$  时， $S_x \downarrow$  慢。
- ③当  $n > 5$  时， $S_x$  几乎没有什么变化，实际分析中测定次数大都在 5 次左右。

例如：进行污水中铁含量测定，结果如下：

67.48 67.47 67.47 67.43 67.40 mg/L

求：平均偏差、标准偏差和平均值的标准偏差。

解：

Fe, mg/L	$ d  =  x - \bar{x} $	$d^2 = (x - \bar{x})^2$
67.48	0.03	0.0009
67.47	0.02	0.0004
67.47	0.02	0.0004
67.43	0.02	0.0004
67.40	0.05	0.0025
$\bar{X} = 67.45$	$\Sigma d  = 0.14$	$\Sigma d^2 = 0.0046$

$$\text{平均偏差 } \bar{d} = \frac{\sum |d|}{n} = \frac{0.14}{5} = 0.028$$

$$\text{标准偏差 } S = \left( \frac{\sum d^2}{n-1} \right)^{\frac{1}{2}} = \left( \frac{0.0046}{5-1} \right)^{\frac{1}{2}} = 0.034$$

$$\text{平均值的标准偏差: } S_{\bar{x}} = \frac{S}{n} = \frac{0.034}{5} = 0.015$$

#### 四、平均值的置信区间

偶然误差在分析操作中是无法避免的。例如一个很有经验的人，进行很仔细的操作，对同一试样进行多次分析，得到的分析结果仍不能完全一致，进行多次测定的结果绘成曲线后会发现一些规律：正误差和负误差出现的几率相等。

小误差出现的次数多，大误差出现次数少。

**置信度 P：**是指测量结果的准确性有的可靠程度，又称置信水平。它是由分析工作者根据对测定的准确的要求来确定的。

**置信系数t：**查表 P348表 8-3

例：P = 95%，n = 5，则 t = 2.78

**平均值的置信区间：**在一定置信度下，以平均值为中心包括真实值的可能范围称为平均值的置信区间，又称为可靠性区间界限。

$$\text{平均值的置信区间} = \bar{x} \pm t \frac{S}{\sqrt{n}} = \bar{x} \pm t S_{\bar{x}}$$

$\bar{X}$ : 平均值            t: 置信系数  
 S: 标准偏差        Sx: 平均值的标准偏差  
 n: 测定次数

例：在测定水中镁杂质含量，测定结果如下所示。

测定结果, mg/L	$ d = x - \bar{x} $	$d^2 = (x - \bar{x})^2$
60.04	0.01	0.0001
60.11	0.06	0.0034
60.07	0.02	0.0004
60.03	0.02	0.0004
60.00	0.05	0.0025
$\bar{X} = 60.05$	$\Sigma d = 0.16$	$\Sigma d^2 = 0.0070$

测定结果, mg/L	$d = (x - \bar{x})$	$d^2 = (x - \bar{x})^2$
60.04	0.01	0.0001
60.11	0.06	0.0034
60.07	0.02	0.0004
60.03	0.02	0.0004
60.00	0.05	0.0025
$\bar{X} = 60.05$	$\Sigma d = 0.16$	$\Sigma d^2 = 0.0070$

$$S = \frac{\sum d^2}{n-1} = \frac{0.0070}{5-1} = 0.04$$

$$P = 95\% \quad f = 5 - 1 = 4$$

$$\text{置信区间} = \bar{X} \pm t S / n^{1/2} = 60.05 \pm 2.78 \times 0.04 / 5^{1/2} = 60.05 \pm 0.05$$

真实值落在 60.00 ~ 60.10 范围内

此例说明通过 5 次测定，有 95% 的可靠性认为镁杂质的含量是在 60.00mg/L 至 60.10mg/L 之间。

**讲课后评：**平均值精密度的概念，教材中讲解的很模糊，需要在讲课中明确。

授课日期：第4-7周

教案编号：02

课程名称	化工计算	专业班级	分析检验技术
教材名称	自编讲义		
授课题目	分析检测通用计算		
授课学时	2节（）；3节（）；其它（ <input checked="" type="checkbox"/> ）		
课型	理论（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；上机（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；见习（）；实训（）；其它（）		
教学目的	1、滴定分析的计算原理 2、滴定分析计算 Excel 化		
教学重点	滴定分析的计算原理		
教学难点	学会用电脑完成滴定分析的相关计算		
教学方法	讲授（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；讨论（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；指导（）；示教（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；其它（）		
电子教案	有（）	Microsoft PowerPoint（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；Author ware（）；其它（）	
	无（）		
教学资源	多媒体（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；模型（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；标本（）；实物（）；音像（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；其它（）		
教学过程时间安排	6学时		
思考题			

# 滴定分析计算

## 一、教学内容

### 1.1 有效数字及其运算法则

- 1、有效数字
- 2、数字的修约规则
- 3、有效数字的运算规则

有效数字定义：是指在分析工作中实际上能测量到的数字。

原则：在记录测量数据时，只允许保留一位可疑数。有效数字的位数反映了测量的相对误差，不能随意舍去或保留最后一位数字。

有效数字的位数判断：

- 1.在数据中，1至9均为有效数字
- 2.首位数字8或9时，可看成两位有效数字
- 3.算式中的倍数、分数及某些常数(如： $\pi$ ， $e$ 等)，可看成无限位有效数字
- 4.变换单位时，有效数字的位数必须保持不变
- 5.pH及pKa等对数值，其有效数字仅取决于小数部分数字的位数

### 0的位置与有效数字

小数：数字前面的0只起定位作用，数字后面或数字之间的0是有效数字。

如：0.03080共四位有效数字

整数：数字后面的0不一定是有效数字。

如：36000有效数字的位数不确定

例题：

1.0008	五位有效数字
0.1000	四位有效数字
pH=3.32	二位有效数字
0.09	一位有效数字
3600	不确定

总结：数字之间的“0”和末尾的“0”都是有效数字，而数字前面所有的“0”只起定位作用。以“0”结尾的正整数，有效数字的位数不确定。3600 的有效位数可能是 2 位，3 位，也可能是 4 位。遇到这种情况，应根据实际有效数字位数书写成：

$3.6 \times 10^3$                   2 位有效数字

$3.60 \times 10^3$                 3 位有效数字

$3.600 \times 10^3$               4 位有效数字

因此，很大或很小的数，常用 10 的乘方表示。当有效数字确定后，在书写时，一般只保留 1 位可疑数字，多余数字按数字修约规则处理。

## 1.2 滴定管、移液管、吸量管、容量瓶

当用 50ml 滴定管测量溶液体积时，如测量体积大于 10ml 小于 50ml，应记录为 4 位有效数字，例如写成 24.22ml；如测量体积小于 10ml，记录 3 位有效数字，例如写成 8.31ml。

当用 25ml 移液管移取时，记 25.00ml；用 5ml 吸量管移取时记 5.00ml。

当用 250ml 容量瓶配制溶液时，配制溶液体积记录为 250.0ml。用 50ml 容量瓶配制溶液时，记录为 50.00ml。

数字的修约规则：

1. 四舍六入，五后有数进一，没数成双
2. 禁止分次修约
3. 修约标准偏差
4. 可多保留一位有效数字进行运算
5. 与标准限度值比较时
6. 具体运用如下：

具体运用如下：

- (1) 被舍弃第一位数字大于 5。

如，28.2645 只取 3 位有效数字时，被舍弃的第一位数字为 6，大于 5，则有效数字为 28.3。

(2) 被舍弃的第一位数字等于 5，而其后数字全部为零。

视被保留的末尾数字为奇数或偶数（0 视为偶数），而定进或舍，末尾是奇数时进 1，末尾为偶数不加 1。

如 28.350,28.250,28.050 只取 3 位有效数字时，分别应为 28.4,28.2,28.0。

(3) 被舍弃的第一位数字等于 5，而其后数字并非全部为零，则进 1。

如 28.2501 只取 3 位有效数字时，应为 28.3。

(4) 被舍弃的数字包括几位数字时，不得对该数字进行连续修约，而应根据以上各条作一次处理。

如 2.154546，只取 3 位有效数字时，应为 2.15，而不得按一下顺序连续修约为 2.16：

2.154546→2.15455→2.1546→2.155→2.16

### 2.3 有效数字运算规则

加减法：以小数点后位数最少的为准。

乘除法：以有效数字位数最少的为准。

对数运算时，对数尾数的位数应与真数有效数字位数相同。

#### 1)、加减法

列如：

$$0.0121+25.64+1.05782=?$$

正确： $0.01+25.64+1.06=26.71$

不正确： $0.0121+25.64+1.05782=27.70992$

#### 2)、乘除法

例如：

$$0.0121\times 25.64\times 1.05782=?$$

过程应为：

$$0.0121\times 25.6\times 1.06=0.328$$

在乘除法运算中，个数值计算有效数字位数时，当第一位有效数字 $\geq 8$ 时，有

效数字位数可以多计 1 位。如 8.34 是 3 位有效数字，在运损中可以作 4 位有效数字看待。

### 3) .自然数

在分析化学运算中，有时会遇到一些倍数或分数的关系，如：

$$\frac{H_3PO_4\text{的相对分子质量}}{3} = \frac{98.00}{3} = 32.76$$

$$\text{水的相对分子质量}(M_r) = 2 \times 1.008 + 16.00 = 18.02$$

在这里分母“3”和“2×1.008”中的“2”，都不能看做是 1 位有效数字。因为它们是非测量所得到的数，是自然数，其有效数字位数，可视为无限的。

## 二、数据处理

化工计算滴定分析检验数据处理分析案例一

EDTA标准滴定溶液的标定

	1	2	3	4
m倾样前/g	31.1372	29.6418	28.1453	26.6050
m倾样后/g	29.6418	28.1453	26.605	25.1526
m(氧化锌)/g	1.4954	1.4965	1.5403	1.4524
移取试液体积/mL	25.00	25.00	25.00	25.00
滴定管初读数/mL	0.00	0.00	0.00	0.00
滴定管终读数/mL	34.75	34.85	35.86	33.80
滴定消耗EDTA体积/mL	34.75	34.85	35.86	33.80
体积校正值/mL	-0.100	-0.100	-0.100	-0.100
溶液温度/℃	16	16	16	16
温度补正值	0.64	0.64	0.64	0.64
溶液温度校正值/mL	0.022	0.022	0.023	0.022
实际消耗EDTA体积/mL	34.67	34.77	35.78	33.72
空白/mL	0.00			
c/mol/L	0.052991	0.052878	0.052888	0.052918
c平/mol/L	0.05292			
相对极差/%	0.21			

## 硫酸镍的测定

项目	1	2	3
m倾样前/g	130.3605	127.3308	124.4104
m倾样后/g	127.3308	124.4104	121.5220
m(硫酸镍溶液)/g	3.0297	2.9204	2.8884
滴定管初读数/mL	0.00	0.00	0.00
滴定管终读数/mL	25.78	25.11	24.67
滴定消耗EDTA体积/mL	25.78	25.11	24.67
体积校正值/mL	-0.090	-0.090	-0.090
溶液温度/°C	16	16	16
温度补正值	0.64	0.64	0.64
溶液温度校正值/mL	0.016	0.016	0.016
实际消耗EDTA体积/mL	25.71	25.04	24.60
c(EDTA)/mol/L	0.05292		
w(Ni)/g/kg	26.352	26.626	26.447
$\bar{w}$ (Ni)/g/kg	26.47		
相对极差/%	1.03		

### 结果准确度和精密度

	选手数据	真值	相对误差/极差%
标液浓度相对极差/%=	0.21		0.215
$\bar{c}$ 平/mol/L=	0.05292	0.053054	(0.255)
样液浓度相对极差/%=	1.03		1.032
$\bar{w}$ 平(Ni)/g/kg=	26.47	26.408	0.254

## 化工计算滴定分析数据处理与分析案例二

一、硫代硫酸钠( $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ )溶液的标定					
		测定次数			
项目		1	2	3	4
基准物	m(称样前)/g	30.4975			
称量碘酸钾	m(称样后)/g	29.5975			
	m( $\text{KIO}_3$ )/g	0.9094			
移取试液体积/mL		25.00	25.00	25.00	25.00
滴定管初读数/mL		0.00	0.00	0.00	0.00
滴定管终读数/mL		23.59	23.52	23.88	23.92
滴定消耗硫代硫酸钠溶液体积/mL		23.59	23.52	23.88	23.92
体积校正值/mL		-0.10	-0.10	-0.10	-0.10
溶液温度/ $^{\circ}\text{C}$		31 $^{\circ}\text{C}$	31 $^{\circ}\text{C}$	31 $^{\circ}\text{C}$	31 $^{\circ}\text{C}$
温度补正值		-2.58	-2.58	-2.58	-2.58
溶液温度校正值/mL		-0.0609	-0.0607	-0.0616	-0.0617
实际消耗硫代硫酸钠溶液体积/mL		23.4291	23.3592	23.7184	23.7583
空白/mL		0.00			
c/mol/L		0.1088	0.1092	0.1705	0.1073
$\bar{c}$ mol/L		0.1082			
相对极差/%		1.76%			

c( $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ )=0.1082mol/L					
二、碘溶液的标定					
		测定次数			
项目		1	2	3	4
移取试液体积/mL		35.00	35.00	35.00	35.00
滴定管初读数/mL		0.00	0.00	0.00	0.00
滴定管终读数/mL		27.94	27.79	27.79	27.69
滴定消耗 $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ 溶液体积/mL		27.94	27.79	27.79	27.69
体积校正值/mL		-0.08	-0.08	-0.08	-0.08
溶液温度/ $^{\circ}\text{C}$		31 $^{\circ}\text{C}$	31 $^{\circ}\text{C}$	31 $^{\circ}\text{C}$	31 $^{\circ}\text{C}$
温度补正值		-2.58	-2.58	-2.58	-2.58
溶液温度校正值/mL		-0.0721	-0.0717	-0.0717	-0.0714
实际消耗硫代硫酸钠溶液体积/mL		27.7879	27.6383	27.6383	27.5386
空白/mL		0.00			
c/mol/L		0.0429	0.0427	0.0427	0.0426
$\bar{c}$ mol/L		0.0427			
相对极差/%		0.70%			

c(I <sub>2</sub> )=0.0427mol/L			
三、仁和VC含量的测定			
测定次数	1	2	3
项目			
称取VC的质量/g	2.0021	2.0022	2.0020
滴定管初读数/mL	0.00	0.00	0.00
滴定管终读数/mL	25.11	25.39	25.52
滴定消耗碘溶液体积/mL	25.11	25.39	25.52
体积校正值/mL	-0.10	-0.10	-0.10
溶液温度/℃	31℃	31℃	31℃
温度补正值	-2.58	-2.58	-2.58
溶液温度校正值/mL	-0.0648	-0.0655	-0.0653
实际消耗碘溶液体积/mL	24.9452	25.2245	25.1547
空白/mL	0.00		
w/%	9.13%	9.23%	9.21%
$\bar{w}$ /%	9.19%		
相对极差/%	1.09%		

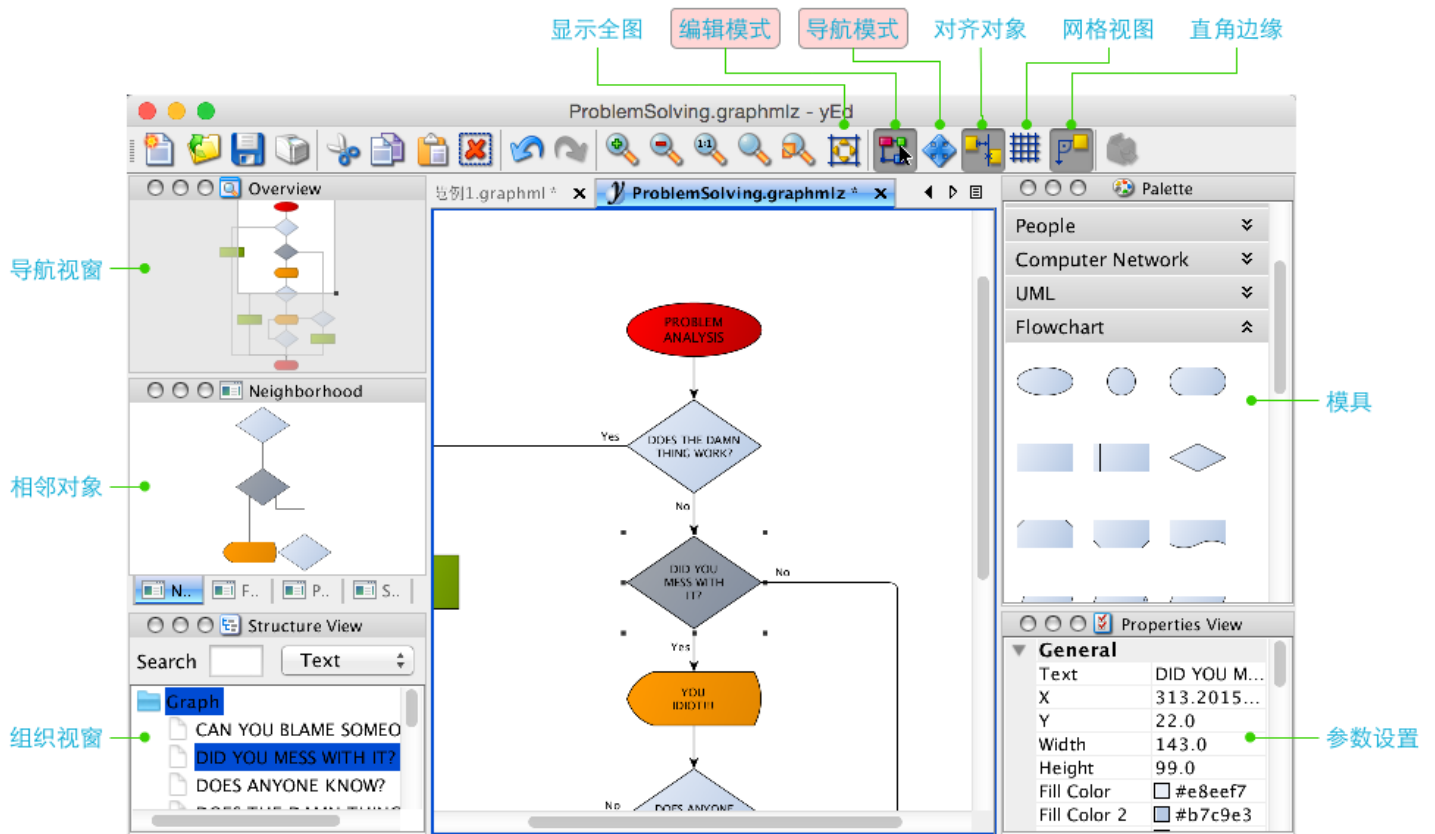
授课日期：第8-10周

教案编号：03

课程名称	化工计算	专业班级	分析检验技术
教材名称	自编讲义		
授课题目	检测流程图的绘制		
授课学时	2节（）；3节（）；其它（ <input checked="" type="checkbox"/> ）		
课型	理论（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；上机（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；见习（）；实训（）；其它（）		
教学目的	1、流程图的组成内容 2、流程图软件的使用		
教学重点	流程图软件的使用		
教学难点	流程图的组成内容		
教学方法	讲授（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；讨论（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；指导（）；示教（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；其它（）		
电子教案	有（）	Microsoft PowerPoint（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；Author ware（）；其它（）	
	无（）		
教学资源	多媒体（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；模型（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；标本（）；实物（）；音像（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；其它（）		
教学过程时间安排	4学时		
思考题			

## yEd的使用介绍

yEd 的软件界面中间是编辑区，左侧分别有几个服务于编辑的视窗，「导航视窗」、「相邻对象」、「组织视窗」，右侧是「模具」面板和「参数设置」面板。



### yEd 软件界面

「导航视窗」用来调整编辑器显示的位置和缩放工作区域，结合工具栏的一系列放大镜图标一起来显示和聚焦对象。「相邻对象」是个动态视窗，当选中某个对象时，视窗中会显示与这个对象相关联的其他对象。「组织视窗」用来罗列对象和群组，在这里可以快速的给对象修改命名。

右侧的「模具」提供了不少模具的选择，双击某个形状或线型后，形状会被蓝色高亮并锁定，此后在画布中随处点击能如同图章一样添加带连续编号的这个形状，而锁定的线型会被作为默认的连接线。

「参数设置」里可以为选中的对象设定位置、大小、填充颜色、线型、文本标签字体、大小、位置、颜色等等，如果觉得窗口的位置狭小，可以直接拖动设置视窗和模具并列来获得更多的显示空间。

### 添加对象和连接线

直接点击画布会添加模具中锁定的默认对象（蓝色高亮的形状），为了提高效率你也可以选择一个模具中的对象双击将其设置成默认形状。


默认对象之外的形状可以从模具面板中直接拖拽到画布，选中对象按 **return** 键或者直接双击以编辑对象的文本标签。由对象上三指滑动到其他对象就是添加连接线，注意这里不需要选中对象，选中后三指滑动是移动对象。也就是说，只要指针处在某个对象之上就可以三指滑动到其他对象为其添加连接线。当指针处于连接线上时，此时三指滑动就是添加连线节点并拉伸。

选中连接线（高亮状态）右键选择「Edit Label」为连接线添加文字标签，选中文字标签可以围绕着连接线自由移动。

### 画布的移动和缩放

双指上下推移是缩放画布（向上缩小向下放大），按住 **command** 键三指移布，如果不按 **command** 键则是圈选对象。

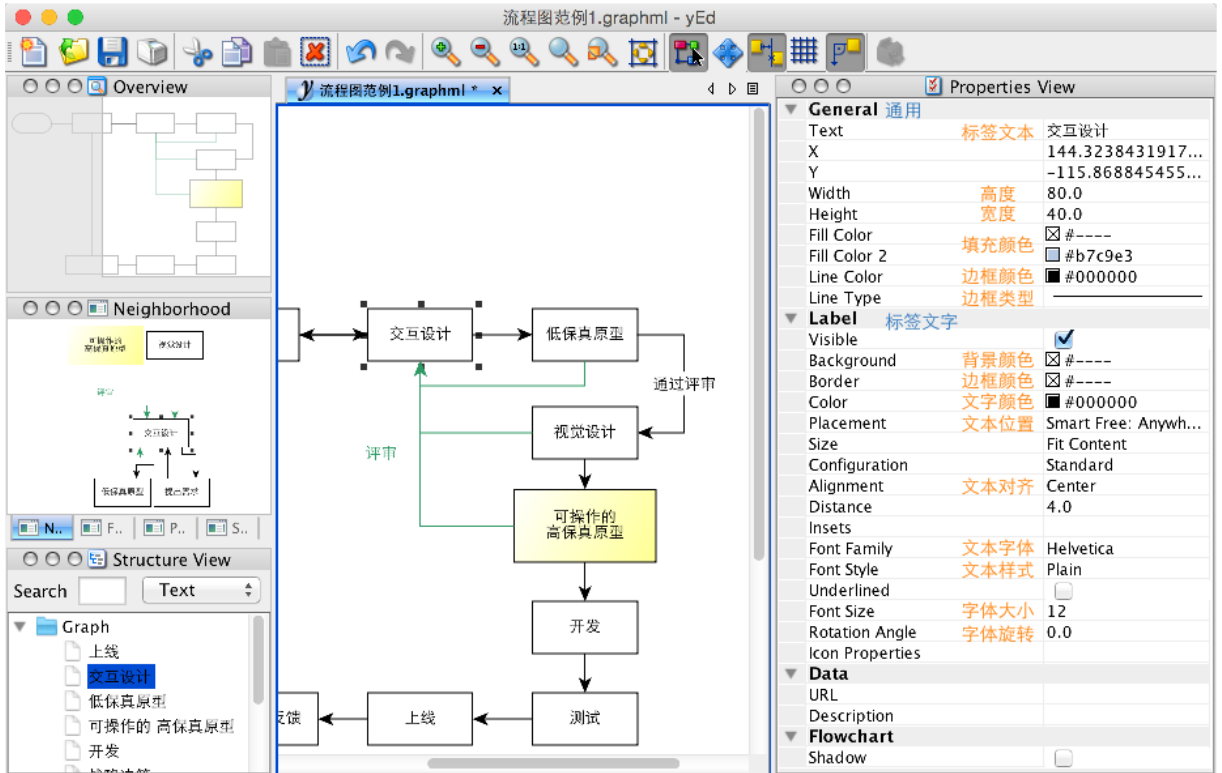
在缩放和定位上，有时候左侧的导航视窗比触摸板更好控制，因为在触摸板上要依靠双指推移的速度来控制缩放比例，很容易缩放过度。

专门移布还可以通过工具栏的「导航模式」图标或者「 **⌘K**」进入导航模式，三指滑动来控制画布的移动。实际操作中，专门切换到导航模式的意义不大，导航视窗的使用频率反而更高一些。

「相邻对象」的视窗里同样可以选择对象并实现画布上的对象定位，如果知道对象的名称，还可以直接通过左侧的「组织视窗」来选中对象实现定位。

## 参数的设置

选中对象左侧的「参数视窗」会显示可供设置的各种参数，为了看的更清楚，可以关闭其他的面板给参数面板腾出更大的显示空间。参数设置一般由四类参数组成：



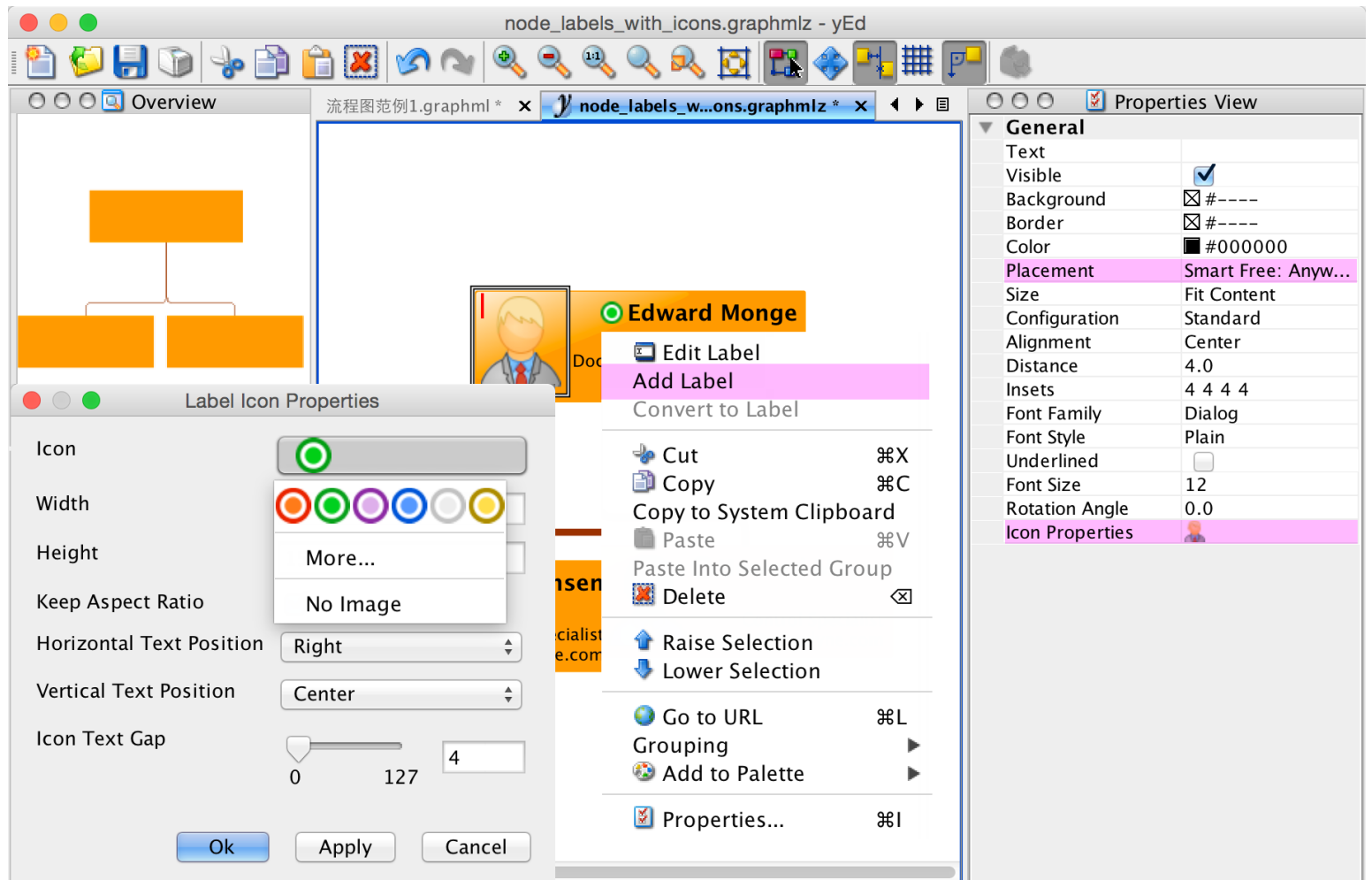
## yEd 参数设置面板

「通用」设置中填充颜色（Fill Color）有两个，都设置就是渐变色填充。文本位置（Placement）是个重要的参数，默认是 Smart Free，如果你想自由移动对象中的文本标签，可以由这里设置成「Free」，这样选中文本标签后你可以自由移动。对象中标签文本的换行可以按「control+return」来实现。

移动对象一般是鼠标直接拖移，精确控制位置可以在参数中调整 X、Y 的坐标值。连线对象被选中时参数设置项会略有不同，多了线条起点和终点形状的设置，其他的基本一样。

## 标签的定义

一个对象上默认会有一个文本标签，通过右键菜单可以为一个对象添加多个标签「Add Label」，图示中我们看到的姓名卡片上实际包含了 3 个标签，其中两个设置了「Icon Properties」。「Icon Properties」的具体设置中可以自定义图像的大小以及和文本之间的相对位置，可以既有文本也有图像，也可以只有图像。

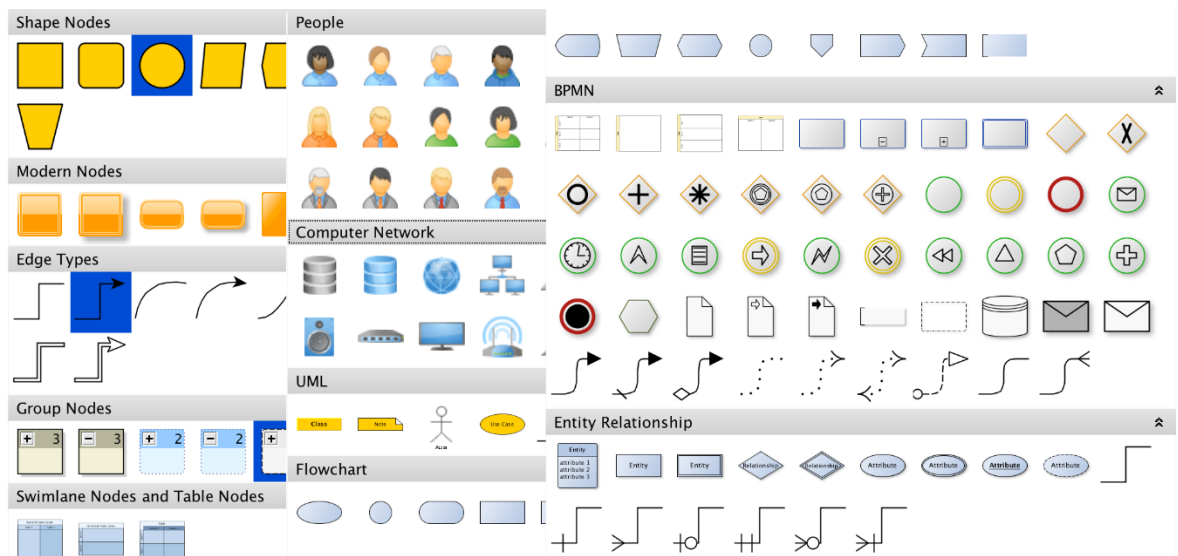


## yEd 标签定义

在对象标签位置上双击来编辑标签，标签被选中后可以直接按 `delete` 键删除它或者移动它的位置。标签是否可以移动以及移动范围由参数面板中的「General」-「Placement」的具体参数决定。

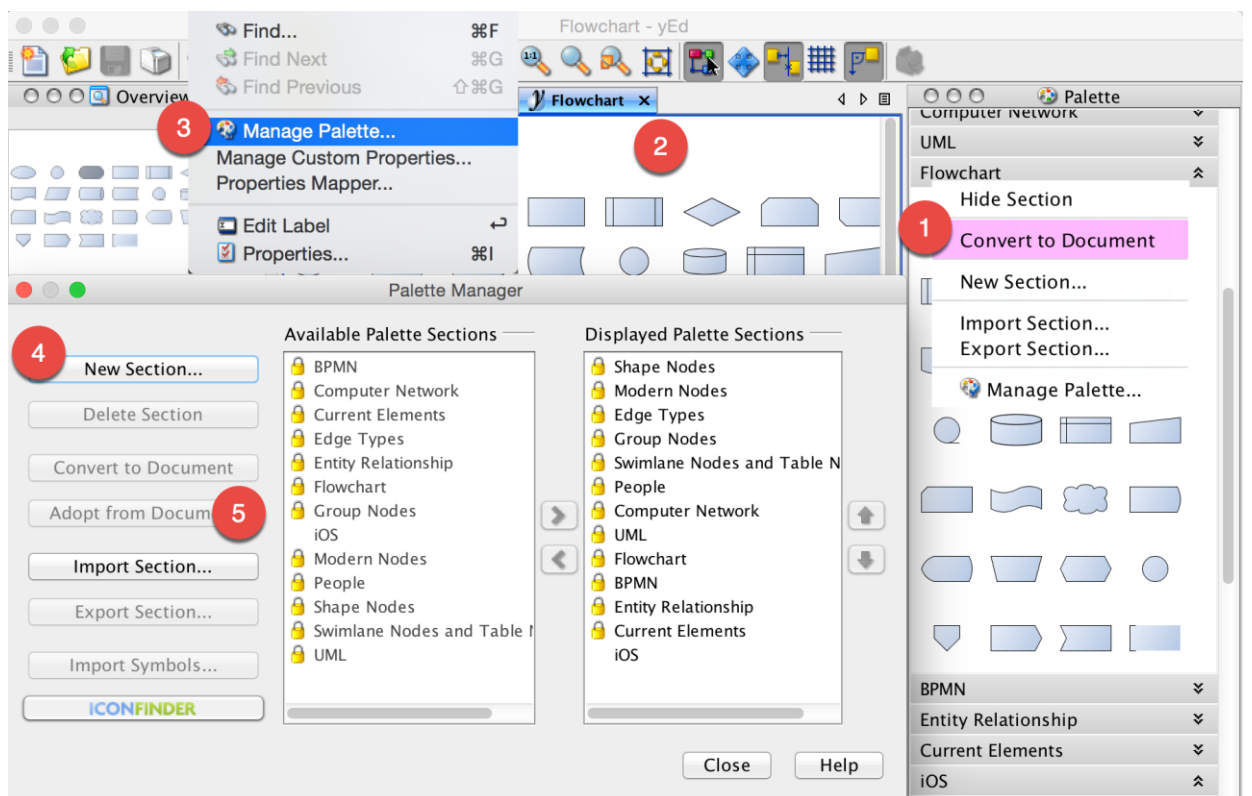
## 模具管理

yEd 中已经预置了很多常用的绘制流程图所需要的模具，蓝色高亮显示的对象属于锁定的对象（双击来修改设定），创建默认对象时会采用高亮锁定的形状、线条和群组。



## yEd 内置模具

基于已有的模具，我们可以编辑修改一套自己的模具，具体方式如下：



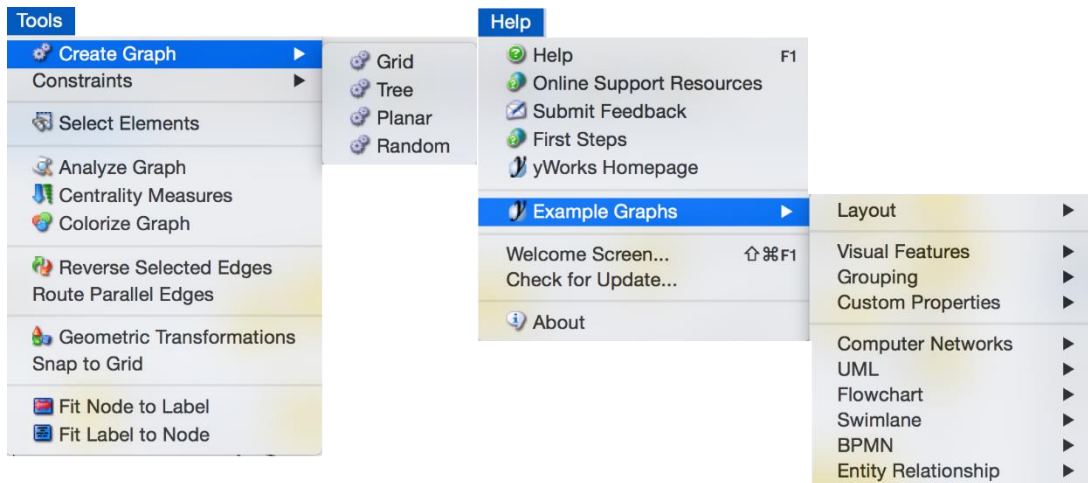
## yEd 创建自己的模具

针对自己定义的新的分类，还可以选择「Import Symbols」导入自己收集的图片、图标文件。另外，yed 还提供了直接从「ICONFINDER」图标素材网站查找和导入图标的功能，非常贴心。打开「ICONFINDER」，输入关键词（英文），选中（支持多选）搜索到的图标就可以方便的将其添加到自己的分类中。对象的右键菜单项「Add to Palette」也可以用来随时收集喜欢的对象到自己的模具分类。

为了显示更多的模具，可以关闭其他的面板拉伸扩大模具面板的显示范围，。删除了其他面板如果想恢复，随时可以通过菜单「Windows - Reset Layout」 重设面板布局还原。

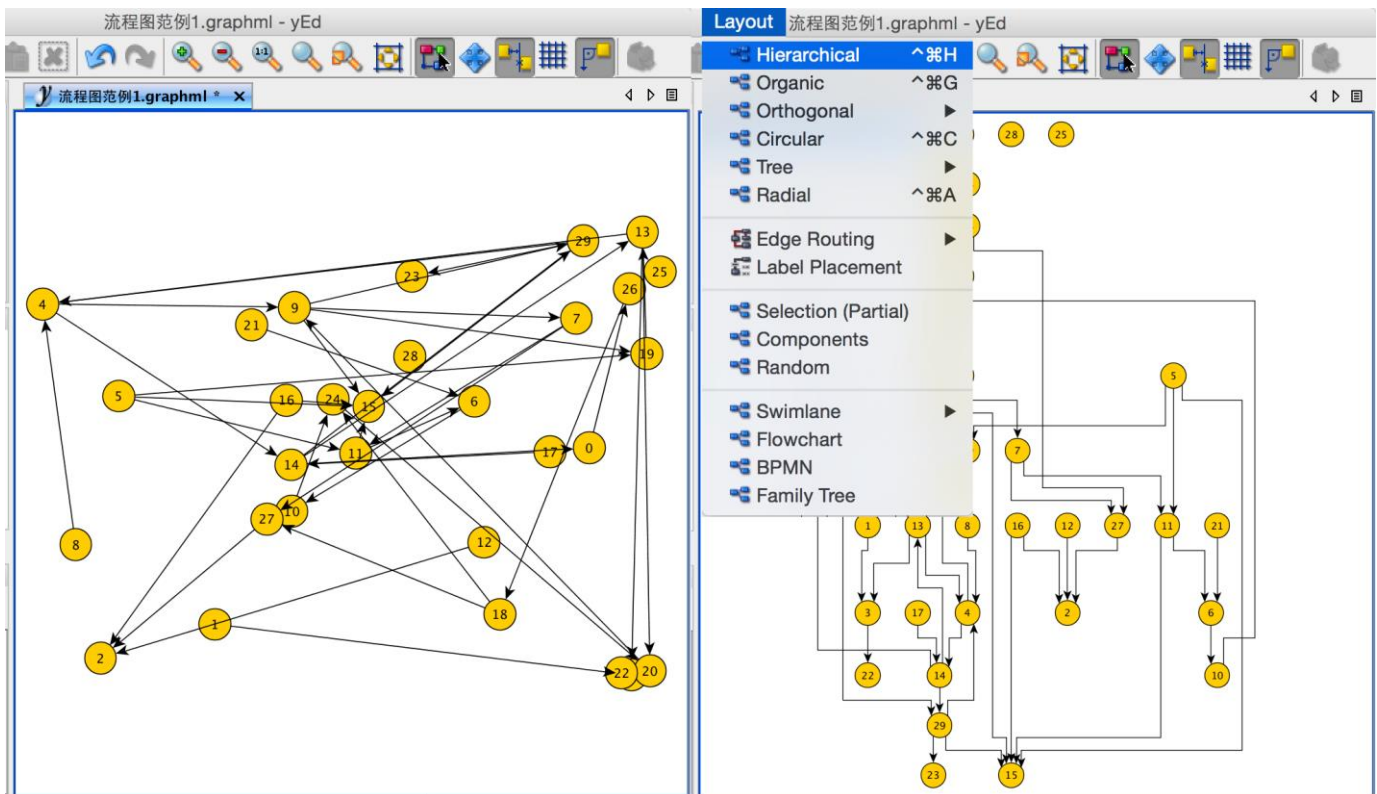
## 布局方案

要了解布局方案的不同，首先需要有内容才好操作演示，可以从帮助菜单「Help - Example Graphs」的范例里新建一个，或者从菜单「Tools - Greate Graph」里快速创建一个。



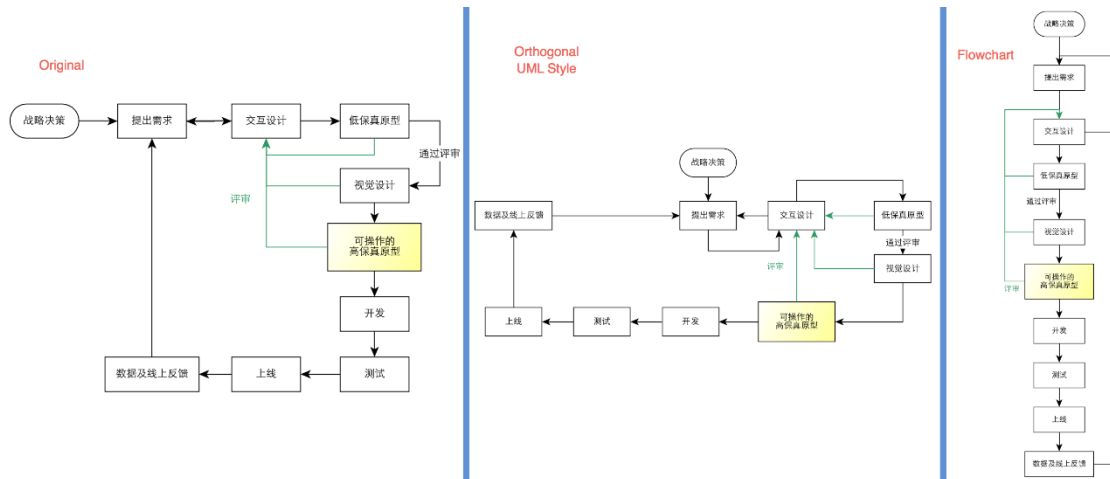
### 工具菜单&帮助菜单

左边的图示是用「Tools」 - 「Greate Graph」 - 「Random」创建的随机布局的30个对象，右侧图示则是操作菜单「Layout」 - 「Hierarchical」排布以后的结果。



## yEd 布局菜单和范例

另一个实际的流程图范例，变化可能会更直观。



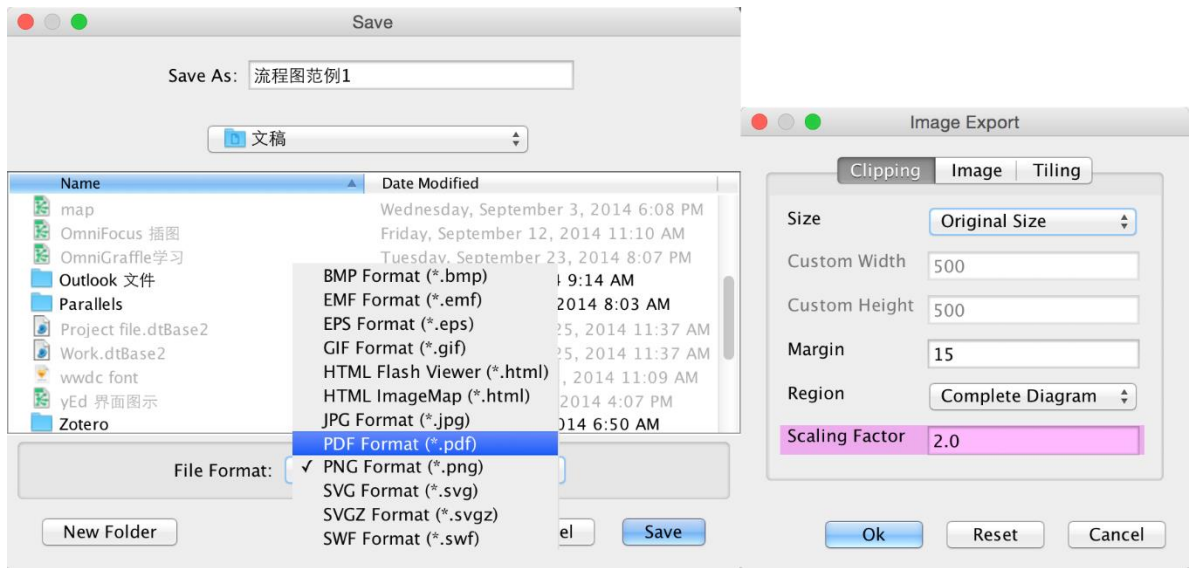
## yEd 布局范例

通过布局进行变化的前提是对象已经都通过连接线确定好了上下级或父子关系而不是孤立的对象。

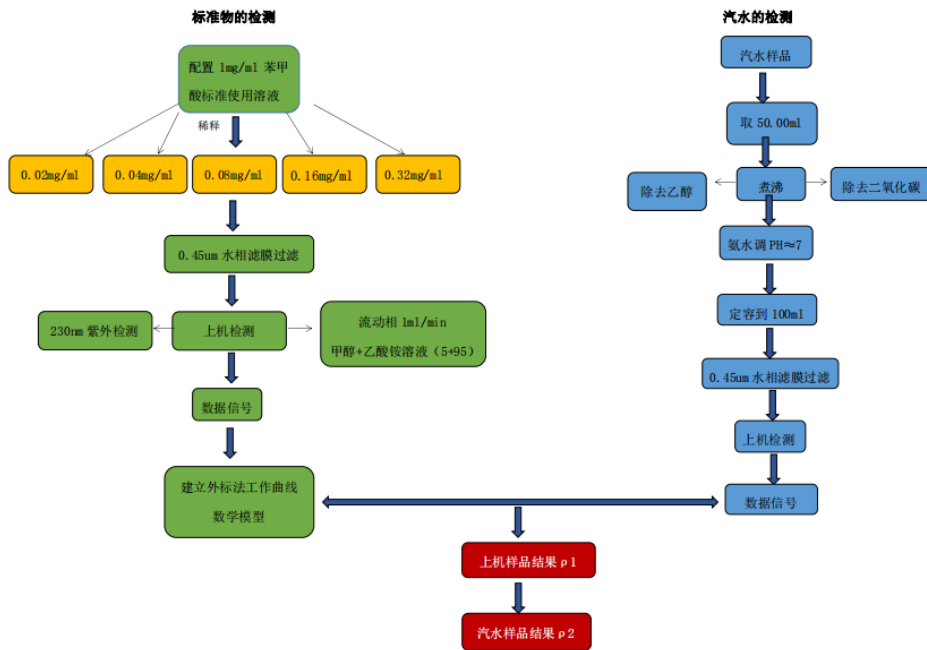
不希望因布局而分散的对象可以通过群组 (Group) 「 $\sim \text{G}$ 」的方式将多个对象绑定在一块。

## 导出格式

yEd 支持导出 (Flies - Export) 的格式很全, eps、pdf、svg、swf、jpg、png、html。如果配合其他软件使用, 矢量的格式肯定是首选, 不会因为缩放而出现锯齿和模糊, 在文档中直接使用时一般选择 png 这样的图像格式, 不过为了保证清晰度, 我习惯将 png 输出选项中的 Scaling Factor 设置成 2.0, 按两倍的比例输出, 这样再缩小使用就不会模糊, 如果是在 Word 中使用推荐使用 emf 格式。



化工计算检测流程图绘制案例



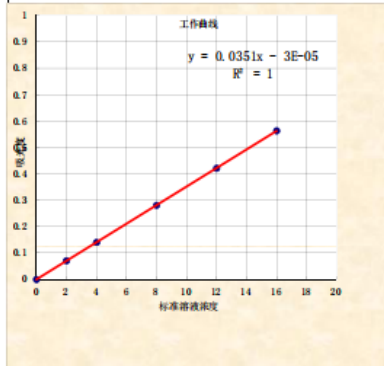
授课日期：第11-14周

教案编号：04

课程名称	化工计算	专业班级	分析检验技术
教材名称	自编讲义		
授课题目	线性方程的求解与标准工作曲线的绘制		
授课学时	2节（）；3节（）；其它（ <input checked="" type="checkbox"/> ）		
课型	理论（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；上机（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；见习（）；实训（）；其它（）		
教学目的	1、线性方程的求解 2、标准工作曲线的绘制 3、origin 软件的使用		
教学重点	标准工作曲线的绘制 origin 软件的使用		
教学难点	线性方程的求解		
教学方法	讲授（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；讨论（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；指导（）；示教（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；其它（）		
电子教案	有（）	Microsoft PowerPoint（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；Author ware（）；其它（）	
	无（）		
教学资源	多媒体（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；模型（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；标本（）；实物（）；音像（ <input checked="" type="checkbox"/> ）；其它（）		
教学过程时间安排	10 学时		
思考题			

### 化工计算线性拟合定量分析案例 定量分析

试样编号	0	1	2	3	4	5	6	7	8	平均值
x	0	2	4	8	12	16	20			8.857
y	0	0.071	0.14	0.281	0.421	0.563	0.701			0.3110



样品测定值					
	空白	测定1	测定2	测定3	平均值
样品测定值	0	0.402	0.400	0.401	0.401
稀释倍数		10	10	10	
测定溶液浓度		11.450	11.393	11.422	11.422
样品原液浓度		114.50	113.93	114.22	114.22

μg/mL

b=	0.0350930	a=	0.0001766
精密度=	0.002	真值=	114.990
RE =	(0.007)	相关系数r=	0.999996

### Origin7.5的工作界面 (Workspace)

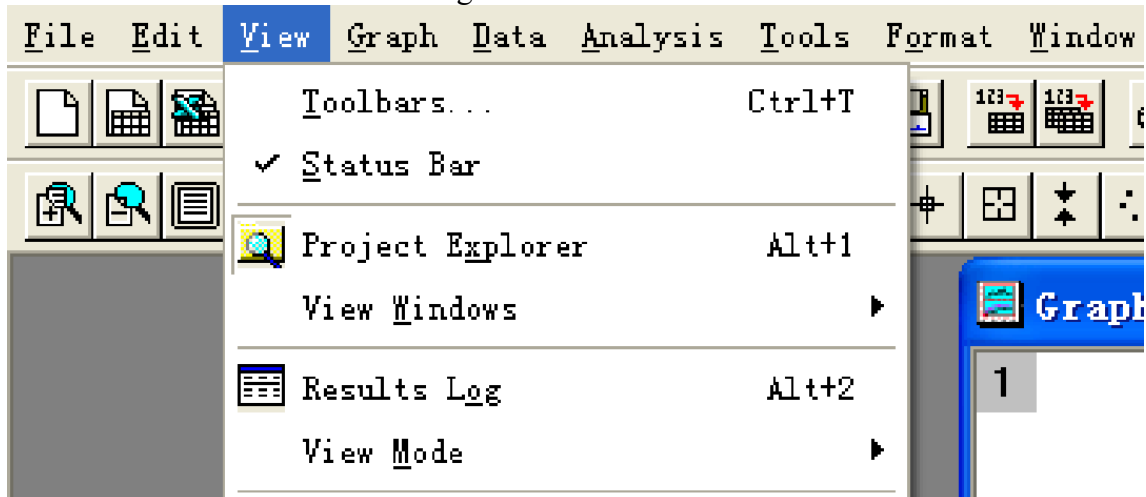
1. 标题栏
2. 菜单栏
3. 工具栏            工具栏的开启方法
4. 子窗口            子窗口种类
5. 工程管理器（Project Explorer）：

The Project Explorer is a tool to help you organize your Origin projects

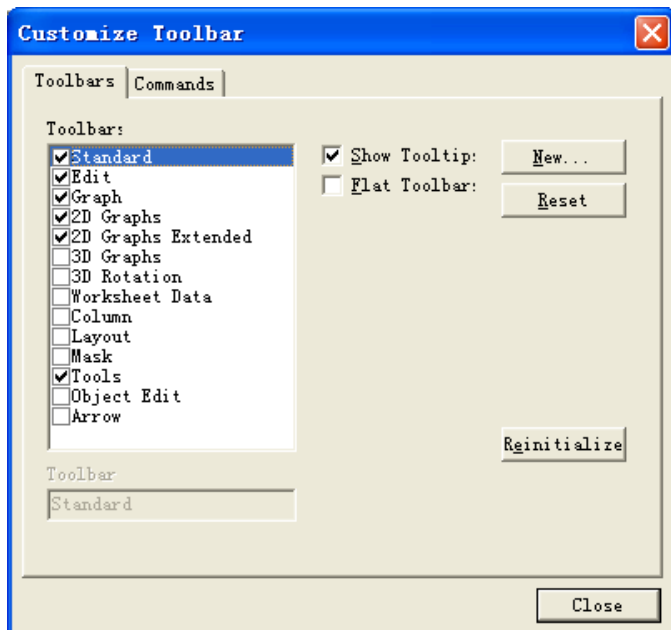
6. 状态栏

工具栏的开启方法:

select View: Toolbars from the Origin menu bar.



When a workbook (Excel) is active, select Window:Origin Toolbars.



子窗口的种类主要有：

The Worksheet Window

工作表窗口

The Excel Workbook Window

Excel 工作表窗口

The Graph Window

图形窗口

The Function Graph Window

函数图形窗口

The Layout Page Window

版面编排窗口

Attention: Each child window has its own menu structure, which is displayed when the window is active.

### 1.3 基本操作方法

1. 使用菜单中的相应命令
2. 使用工具按钮
3. 右击鼠标，在弹出的快捷菜单中选相应命令
4. 选定对象后双击，打开对话框

### 1.4 Origin的启动和退出

#### 1. Origin的启动

“开始” → “程序” → “Microcal Origin7.5 ”



#### 2. Origin 的退出

方法有两种：

单击右上角的关闭按钮；

单击Origin窗口菜单的“File” → “Exit”

注意：要区分Origin的退出和子窗口的退出

### 1.5 Origin文件的保存

Save a project

保存工程

Save a child window separately as a file

单独将子窗口作为一个文件保存

Save a template as a file

保存为模板文件

可保存的文件类型及文件扩展名

Project —— OPJ

It cannot save as template Graph

Worksheet —— OGW

Template extension is OTW

Excel Workbook —— XLS

It cannot save as template

Layout Page —— OTP

It cannot save as file

Matrix —— OGM

Template extension is OTM

Function Graph —— OGG

Template extension is OTP

Notes —— TXT

It cannot save as template

## § 2 数据文件的建立

Origin provides several ways to add data to the worksheet

1. Entering data using the keyboard. 键盘输入
2. Importing a file. 导入文件 例题一示例演示
3. Pasting data from another application using the Clipboard.
4. Pasting data from another (or the same) Origin worksheet using the Clipboard. (3) 和 (4) 是粘贴数据
5. Using Excel Workbook Window. 打开或创建Excel工作表
6. Using a function to set column values. 用函数设置列的值

## § 3 数据的编辑

### 3.1 工作表简介

The worksheet window is organized into vertical columns and horizontal rows.

工作表由垂直的列和水平的行组成

At the intersection of each column and row is a cell.

列与行的交叉处称为单元格

Each cell can contain a single numeric, text, numeric and text, date, or time value.

每个单元格内可包含数、文本、日期、时间等

Origin projects can contain multiple worksheets.

一个Origin projects中可以包含多个工作表

### 3.2 工作表的选定操作

1. 选定若干单元格 (Selecting Cells)

Click-and-drag to select the cells.

2. 选定若干行 (Selecting Rows)

Select the row heading, drag the mouse

Or Select the row heading, Click + SHIFT key

3. 选相邻的列 (Selecting Adjacent Columns)

Select the first column heading, Click-and-drag

Or Select the column heading, Click + SHIFT key

4. 选不相邻的列 (Selecting Nonadjacent Columns)

Select the column heading, + CTRL key

### 3.3 数据的编辑修改

1. 数据的修改

To change a value, select the cell and type the correct value. ( Origin automatically overwrites the value in the cell )

替换单元格中的数据，点击该单元格，输入新的值

To edit a cell value, press F2 or click at the desired position

修改单元格中的数据，点击该单元格后，在拟修改的位置单击鼠标

Delete: Delete one value to the right of the cursor,  
or delete all highlighted values.

## 2. 在列中插入数据 (Inserting Data within a Column)

① To insert a cell in a column, select the cell that is directly below where you want to insert the new cell.

选定拟插入新单元格下方的单元格

② Then select Edit:Insert  
or right-click → select Insert from the shortcut menu.

执行编辑菜单中的插入命令

③ The new cell inserts above the selected cell.

新单元格将插在所选定单元格的上方

## 3. 删除数据 (Deleting Data)

To clear the entire contents of a worksheet,  
select Edit: Clear Worksheet. 删除整个工作表中的内容

To delete the contents of a range of cells from the worksheet,  
select Edit: Clear. 删除单元格或单元格区域中的内容，格子保留

To delete a range of cells from the worksheet,  
select Edit: Delete. 内容和单元格同时删除

Attention: Delete

(1) The Edit: Delete deletes a selected values and cells

(2) The keyboard: Delete deletes the worksheet values only

### 3.4 列的插入、删除和重排

Adding Columns: 增加列

Perform one of the following operations:

Select Column:Add New Columns.

Click the Add New Columns button on the Standard toolbar.

Right-click inside the worksheet window but to the right of the worksheet grid.

Select Add New Column from the shortcut menu.

Inserting Columns: 插入列

Select Edit:Insert

Right-click → select Insert from the shortcut menu..

Deleting Columns: 删除列

Select Edit:Delete

Right-click → select Delete.

Note: To clear the column values but remain the columns, select Edit:Clear.

Moving Columns: 移动列

Select Column:Move to First. Column:Move to Last.

### 3.5 行的插入和删除

Inserting Rows: 插入行

select Edit:Insert

or right-click and select Insert

Deleting Rows: 删除行

Edit:Delete

or right-click and select Delete.

### 3.6 删除工作表 (Deleting a Worksheet from a Project )

To delete a worksheet from the project, perform one of the following operations:

Click the Close Window button

in the upper-right corner of the worksheet.

点击工作表右上方的关闭窗口按钮

Right-click on the worksheet window icon in Project Explorer and select Delete Window from the shortcut menu.

在工程管理器中右击工作表图标，在快捷菜单中选Delete Window

Click on the worksheet window icon in Project Explorer and then press Delete.

在工程管理器中点击工作表图标，按Delete 键

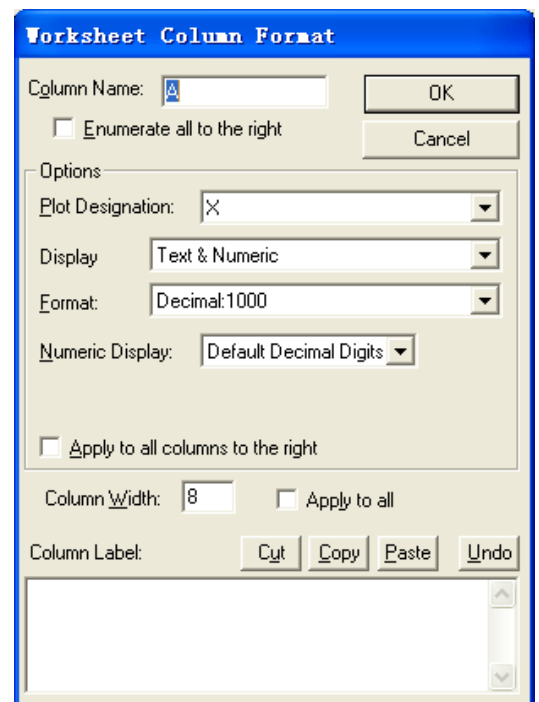
### 3.7 数据表的格式化

方法：双击工作表的列标签

打开Worksheet Column Format

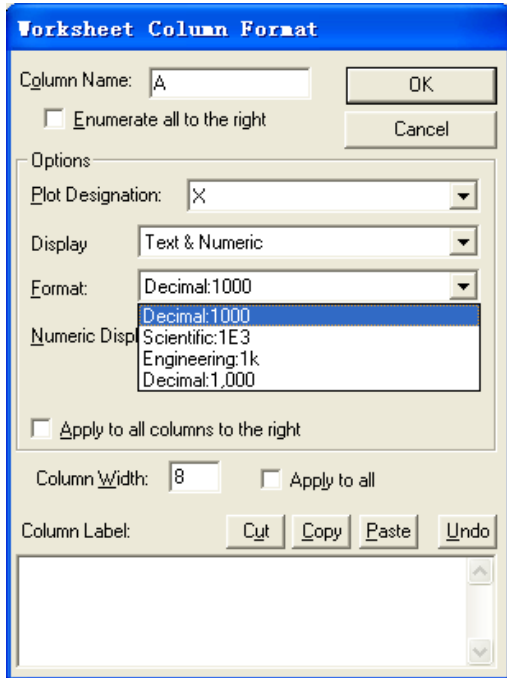
作用：

1. 改变列的名称 (Column Name)
2. 改变列的标识 (Plot Designation)
3. 改变数据的类型 (Display)
4. 改变数的格式 (Format)
5. 改变数的显示格式 (Numeric Display)
6. 改变列宽 (Column Width)
7. 为列标签添加说明 ( Column Label)

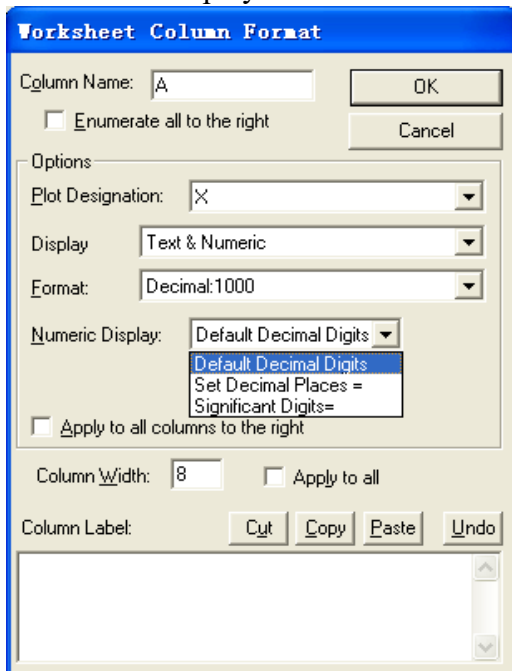


## 4. 改变数的格式

(Format)



## 5. 改变数的显示格式 (Numeric Display)



## 4 绘制图形

### 4.1 图形窗口中的基本术语

Page: Each graph window contains a single editable page. The page serves as a

backdrop 页

Layer: A movable, sizeable unit 层

Frame: The frame is a rectangular box 框架

Graph: A graph includes at least three elements: 图

- a set of X, Y, Z coordinate axes,
- one or more data plots,
- associated text and graphic labels.

Data Plot: The data plot is the visual display of one or more datasets in a graph window.

数据点

OriginPro 7.5 - C:\Users\user\AppData

	A[X]	B[Y]
1	0	0
2	0.01564	43.97391
3	0.02958	60.66091
4	0.04362	77.3392
5	0.05732	93.5343
6	0.07069	109.02091
7	0.08331	123.02064
8	0.09692	138.37136
9	0.11006	151.85839
10	0.12353	164.50434
11	0.13699	176.74932
12	0.15051	188.02271
13	0.16451	198.59107
14	0.17792	208.16202
15	0.19187	216.89108
16	0.20584	225.40423
17	0.22043	233.38693
18	0.23482	240.79453
19	0.25026	246.93401
20		
21		

绘图工具

Y Axis Title

X Axis Title

创建文件opj格式

选中数据

### 1. 单层二维图形

选定列或数据范围

单击 的某一个按钮

自动画出图形

课堂练习

现有某活性炭吸附甲醇的实验数据，请将其制成实验数据图。实验数据如下：

某活性炭吸附量实验数据

温度 (°C)	压力 (mmHg) / 吸附量 (g/g)					
	20	40	80	120	140	160
20	0.23	0.28	0.33	0.36	0.38	0.39
40	0.15	0.21	0.25	0.28	0.31	0.32
70	0.05	0.09	0.14	0.17	0.19	0.20

### 2. 多层二维图形

当需要在一个绘图窗口绘制坐标轴范围不同或度量单位不同的图形时，需要多层

图形来实现。

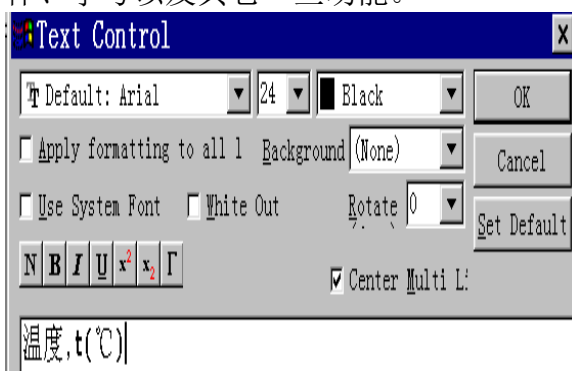
常见的有双Y轴，垂直两栏，水平两栏，四栏，九栏等。

用Origin软件画出某电池的放电电压和极化电流随时间的变化曲线

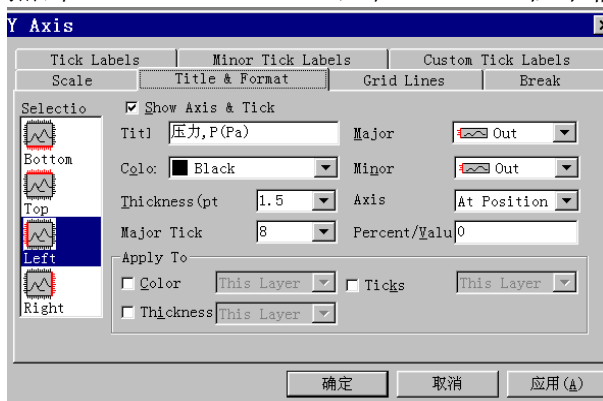
t/min	0	30	60	80	100	120	140	150
i/mA	10	9.51	9.11	8.45	7.8	7.50	4.50	3.00
V/V	1.711	1.290	1.256	1.201	1.141	1.101	1.030	1.000

## 5 图形的编辑和格式化

- 1、 将鼠标移到标有“X axis title”和“Y axis title”处，双击之，系统弹出如右图的对画框，输入坐标轴的中文名、英文字母、单位，同时可选择字体、字号以及其它一些功能。



- 2、 点击“Format”，在其下拉式菜单中选择“Axis—Y Axis”系统弹出对话框，点击“Title & Format”，在“Title”栏中输入“压力, P (Pa)”。



## 6 Tools工具栏的使用

### 6.1 Tools工具栏



## 6.2 Tools工具栏 的打开

点击菜单View→

Toolbars

## 6.3 Tools工具的功能

Arrow Tool

(箭头工具)



Line Tool

(线工具)



Curved Arrow Tool

(弯型箭头工具)



Text Tool

(文本工具)



Box Tool

(画框工具)



Circle Tool

(画圆工具)



Screen Reader

(屏幕读数)



Data Reader

(显示数据)



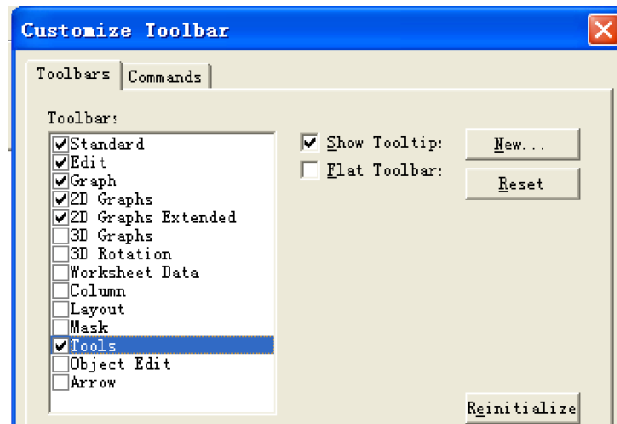
Data Selector

(数据选择)



Draw Data

(画数据点)

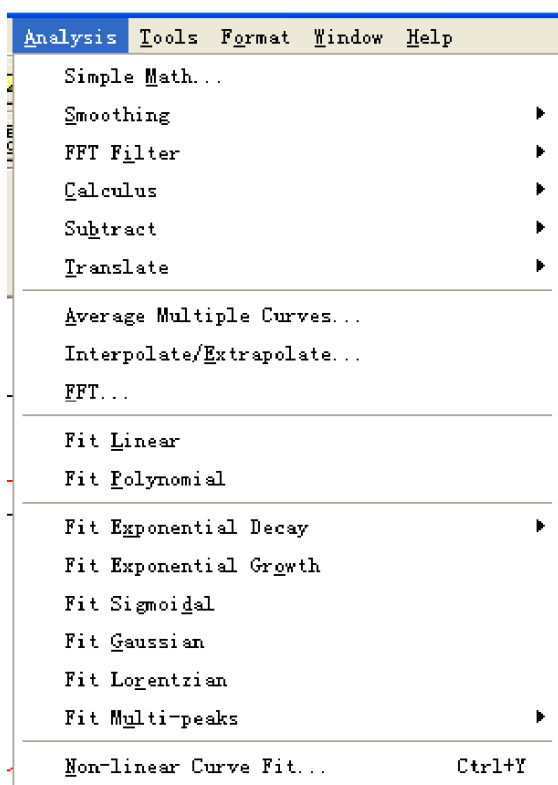


## 7 数据分析——曲线拟合

在图形窗口下进行拟合

的方法:

选菜单Analysis



对被激活的数据组用 $Y=A+BX$ 进行拟合

操作：分析→线性拟合

实例分析

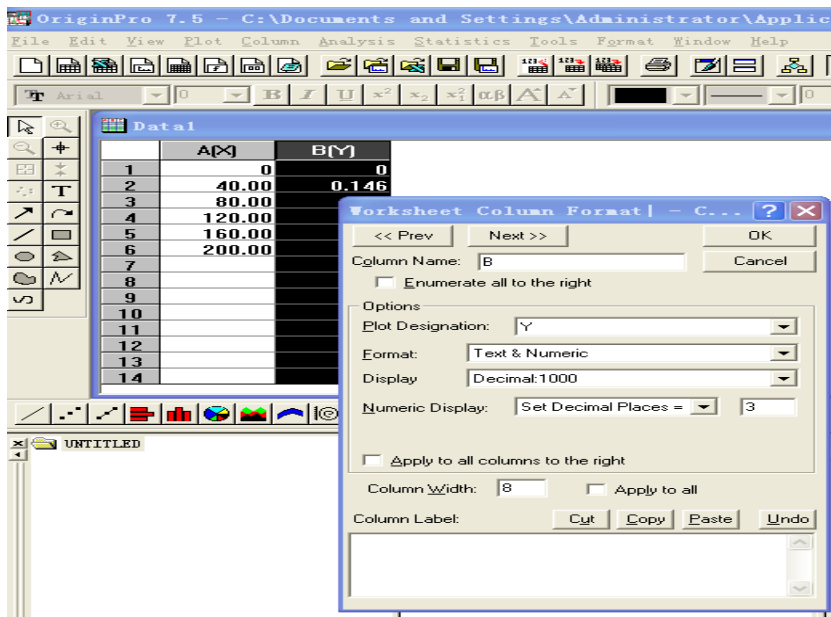
将“分光光度法测定磷（或铁）含量”的实验数据输入或调入Origin程序，练习线性回归的方法、操作及结果的识读。

容量瓶 编号	0	1	2	3	4	5	待测1	待测2
50mL 溶液中 P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> 含 量	0.00	40.00	80.00	120.00	160.00	200.00		
吸光度 A	0.000	0.146	0.210	0.381	0.427	0.577	0.443	0.436

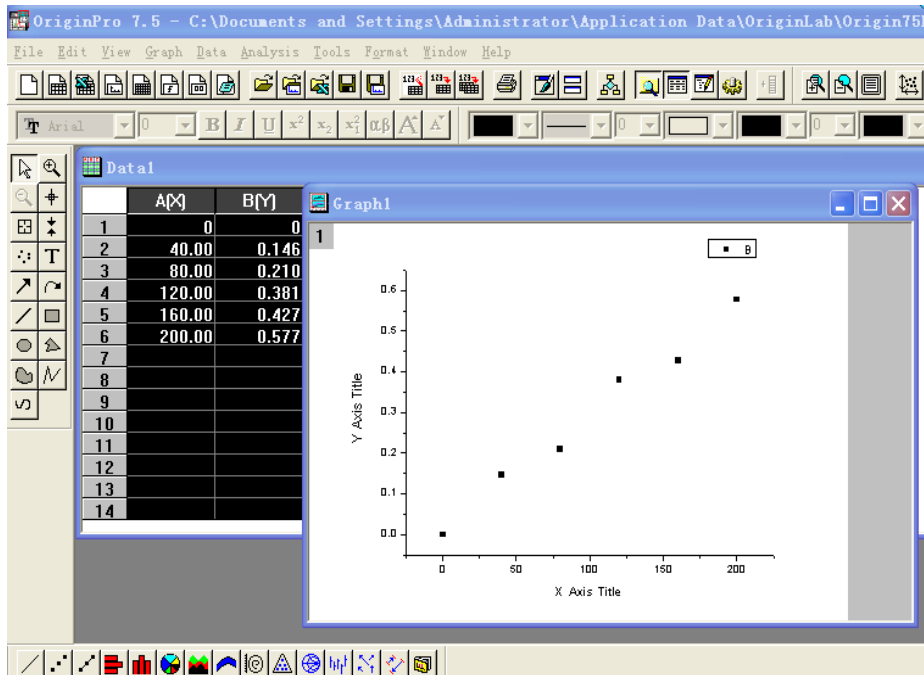
注意：

- 1.输入时数据位数的控制
- 2.线性回归的命令与操作
- 3.坐标轴的修改
- 4.数据处理结果的解读
- 5.文件的保存
- 6.回归图形粘帖到word文档的方法

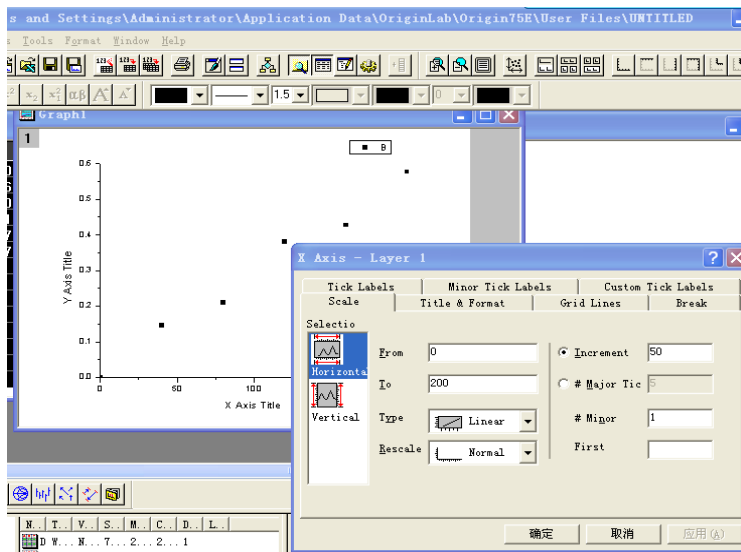
数据输入：



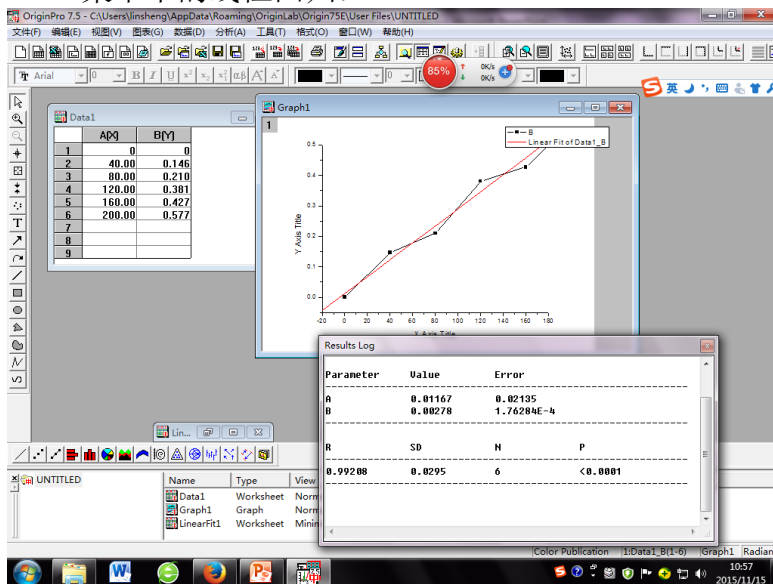
3、数据点绘图：



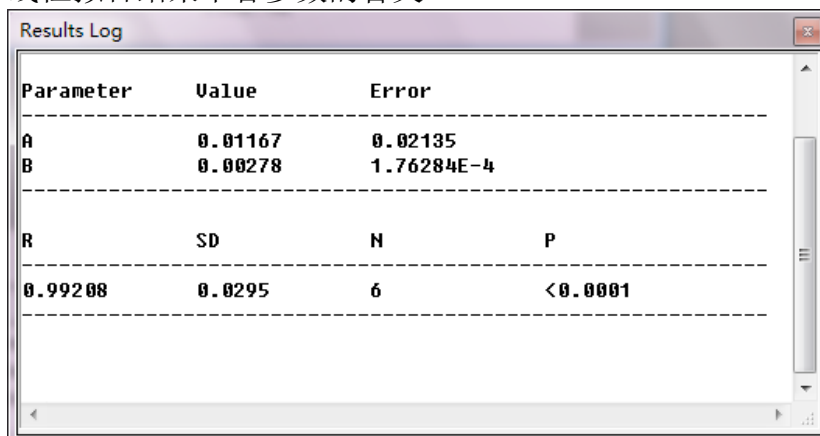
4、根据需要更改坐标轴显示范围：



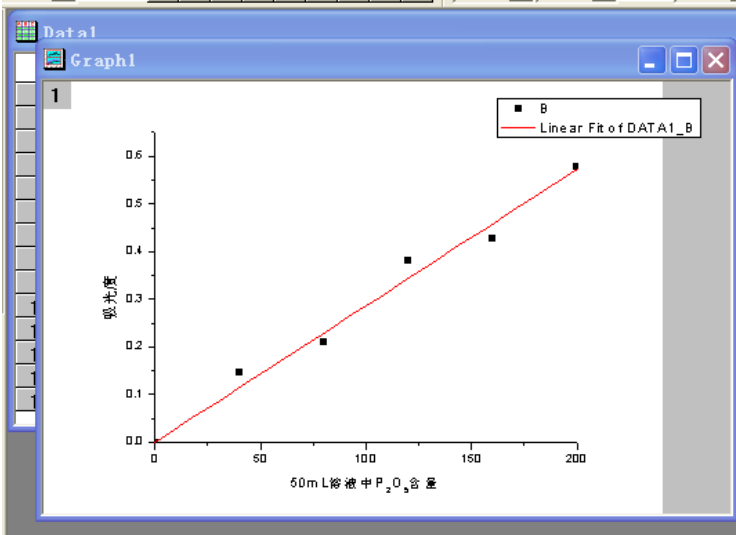
### Tools菜单中的线性回归:



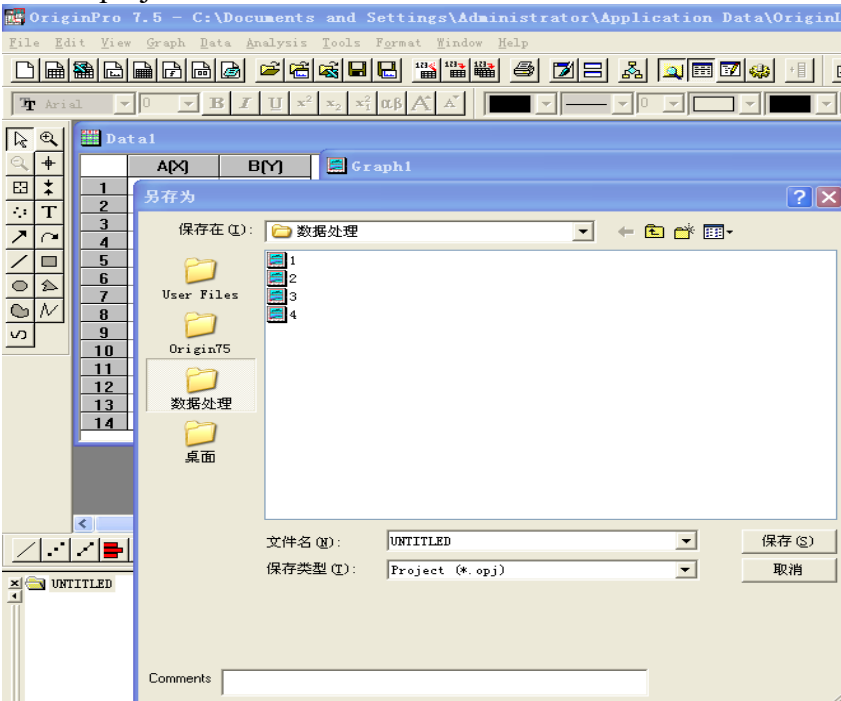
### 线性拟合结果中各参数的含义



- A: Intercept value and its standard error.      截距值及它的标准误差
  - B: Slope value and its standard error.              斜率值及它的标准误差
  - R: Correlation coefficient.                              相关系数
  - p: value - Probability (that R is zero).              R=0的概率
  - N: Number of data points.                              数据点个数
  - SD: Standard deviation of the fit.                      拟合的标准偏差
- 双击轴名称位置就可更改了



用save project as 命令保存文件:



课堂练习

用邻二氮菲法测定Fe<sup>2+</sup>得下列实验数据，请确定工作曲线的直线回归方程，并计算相关系数和待测液的浓度？

标准溶液 c / mol·L <sup>-1</sup>	0.001	0.002	0.003	0.004	0.006	0.008	浓度？
吸光度A	0.114	0.212	0.335	0.434	0.670	0.868	0.400待测液

授课日期：第15-17周

教案编号：05

课程名称	化工计算	专业班级	分析检验技术
教材名称	自编讲义		
授课题目	分子结构式的绘制		
授课学时	2节 ( ) ; 3节 ( ) ; 其它 (✓)		
课型	理论 (✓) ; 上机 (✓) ; 见习 ( ) ; 实训 ( ) ; 其它 ( )		
教学目的	1、分子结构式的绘制 2、Chemistry sketch 软件的使用		
教学重点	Chemistry sketch 软件的使用		
教学难点	分子结构式的绘制		
教学方法	讲授 (✓) ; 讨论 (✓) ; 指导 ( ) ; 示教 (✓) ; 其它 ( )		
电子教案	有 ( )	Microsoft PowerPoint (✓) ; Author ware ( ) ; 其它 ( )	
	无 ( )		
教学资源	多媒体 (✓) ; 模型 (✓) ; 标本 ( ) ; 实物 ( ) ; 音像 (✓) ; 其它 ( )		
教学过程时间安排	4 学时		
思考题			

## 3. 绘制简单结构

---

### 3.1 目标


本章介绍绘制结构的一些基本知识, 这些功能只在结构模式适用。您将掌握以下的功能:



- 画原子, 化学键(单键, 双键, 三键, 共价键, 等等), 和标签。
- 翻转分子结构式。
- 选择, 旋转和扩大与缩小结构图。
- 将结构式输出至文件夹, 文件及打印机。
- 清理屏幕。

### 3.2 画原子、化学键和标签

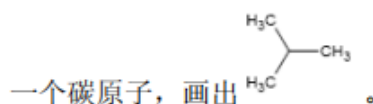
**ChemSketch** 的基本功能是画化学键和原子, 您必须在结构模式进行以下操作: 

#### 3.2.1 使用常用画图工具

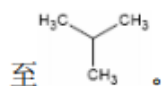
当程序开始时, 常用画图工具  是默认的。在这种模式下, 您可以很容易地画直键和分支结构, 并用元素周期表中的原子取代所画的原子。


5. 在画图模式(**Draw Mode**)下  从原子工具条选择碳原子 。
6. 单击空白处, 画出CH<sub>4</sub>。

7. 单击CH<sub>4</sub>以增加一个CH<sub>3</sub>基团，并以标准键长连接。再双击同

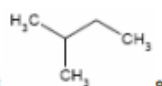


8. 单击**Set Bond Vertically** ，将从上一步得到的结构旋转

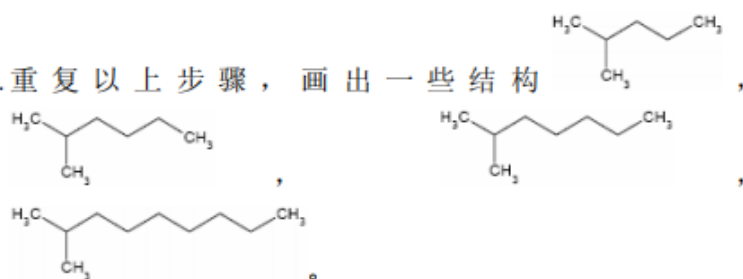


9. 单击结构工具栏中常用画图工具 。

10. 单击最右边的碳原子，画出

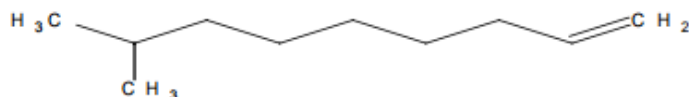


11. 重复以上步骤，画出一些结构

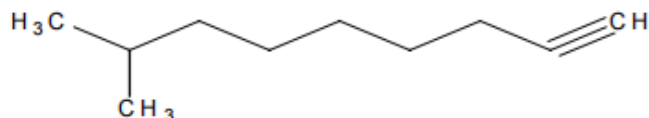


### 3.2.2 双键和三键

1. 在3.2.1节的第7步所画的结构式中的最后一个单键上再次单击获得双键:



2. 再次在双键上单击获得三键:



3. 再次在三键上点击将重新得到单键.


### 3.2.3 个别原子的删除

如果您加了过多的原子，可以逐一去除原子：

1. 点击**Delete** 键 
2. 在以上的分子结构上进行逐一去除原子的练习。

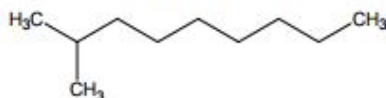
### 3.2.4 撤销命令

另外一个重要的功能是如何恢复以前的界面设置：

1. 单击 **Undo**  键。这会将 **ChemSketch** 的界面恢复到以前的设置。

**注意：** 点击 Undo 键将会击活重做(Redo)键。

2. 多次单击恢复 **Undo**  键，直到将其恢复至以下结构：

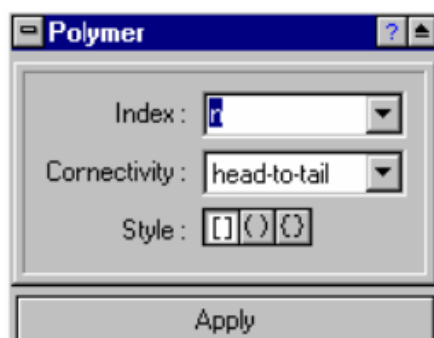


**注意：** Undo 键可以连续点击 50 次。当您画比较复杂的结构或者物体时，我们建议您养成及时保存文件的习惯。

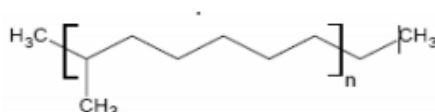
### 3.2.5 聚合物

**ChemSketch**提供了聚合物结构的绘制功能：

1. 在结构工具栏上点击**Polymers**  键，出现聚合物面板后就可以进行如下设置的更改了：



2. 通过点击或拖拽来选定产生聚合物的区域。当区域被选择，  
聚合物出现在工作区：



3. 再次点击 **Polymers** 键就可以离开聚合物绘制模式。

### 3.2.6 非原子

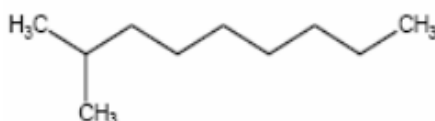
按照以下步骤来创建无终止的聚合物和弯键：

1. 在原子工具栏，点击 **Pseudo Atom** 键。
2. 点击结构的结束原子用空的原子替换他们。那么就可以得到一个无终止的聚合物了。

### 3.2.7 改变原子

按以下方式用一个原子工具栏中没有的元素替换当前元素：

1. 点击撤销键 直至回到下面的结构或者画出它：



2. 单击原子工具条下的元素周期表 (**Periodic Table**) 键 ，打开元素周期表 (**Periodic Table of Elements**)：

Periodic Table of Elements

1	F Fluorine 9																18	
II	2											13	14	15	16	17	He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg								
		*	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	D
		**	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	T

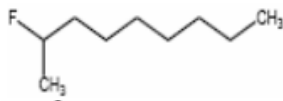
Characters : green-yellow gas, poisonous  
 Discoverer : 1896, H. Moissan, France  
 Name Origin : from 'fluere' (Latin) - to flow  
 Atomic Radius, A : 0.67      Ionization Potential, kJ/mol : 1681  
 Electronegativity : 3.98      Electron Affinity, kJ/mol : 328  
 Density, g/L : 1.7  
 Melting Point, K : 54  
 Boiling Point, K : 85

General NMR Mass Coloration

Cancel Help


3. 单击元素周期表中的氟 (**Fluorine**) 键 **F**，注意现在氟 (**Fluorine**) 键出现在原子工具条中。



4. 单击最左边的碳 (**Carbon**)，用氟原子替代碳原子：

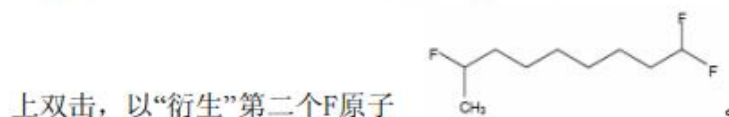


**注意：**当您选择了元素周期表中的某个元素时，相应的元素键将自动加到原子工具条中。去除工具条中的原子键可以通过双击任何一个原子键或者双击原子工具条，然后选择 YES。但是后者将删除默认原子以外的所有原子键。



### 3.2.8 使用连续画图工具


当连续画图工具 (**Draw continuous Tool**)  被激活后，只有在原子工具条中被选定的原子才能用于画化学键。点击工具条中的原子键，可使其成为被选中的原子。这种连续画图工具模式在由一个选定原子“衍生”多个相同原子时，非常方便。

1. 在结构工具栏中，点击连续画图键 。或者单击鼠标右键，选择画图模式。
2. 在原子工具栏 (**Atoms**) 中选择  原子。
3. 点击最右边的碳原子，双击以“衍生”出F原子。在同一碳原子上双击，以“衍生”第二个F原子。



### 3.2.9 使用鼠标拖拽绘图

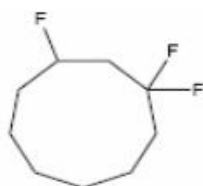
在正常画图 (**Draw Normal**)  和连续画图 (**Draw Continuous**)  两种模式下，您可以从一个原子拖动鼠标到另一个原子，画出单键。如果您从一个空白处开始(或结束)拖动，将在开始处(或结束处)生成一个新的原子。在下面结构中，点击一端的碳原子，拖动鼠标到另一端的碳原子。

当正常画图 (**Draw Normal**)  和连续画图 (**Draw Continuous**)  被激活后，指向到终端碳的当中一个和扯拽到其它终端碳画以下结构：




### 3.2.10 优化结构


点击结构工具栏中“清洁”命令，将使结构中所有的键长与角度平均化，得到如下结构：



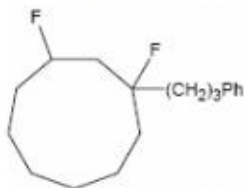
**Clean**命令不仅使键长和角度平均化，令结构看上去更好看，更使该结构符合于化学意义。例如循环结构，它将SP<sup>2</sup>轨道上的碳原子的键按120度分布，将SP<sup>3</sup>轨道上的碳原子的键按180度分布。当画平面和立体异构体时，**Clean**命令保持以上特性将键长和角度平均化。

### 3.2.11 编辑原子标签

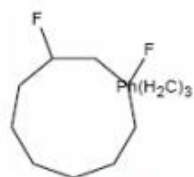
编辑原子标签工具允许您用简短的缩写代替最终端的原子。

1. 在原子工具栏中，点击原子标签工具键，然后将鼠标移动到结构中最右端的F原子上。



2. 在打开的编辑标签(**Edit Label**)对话框中，键入(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>Ph，再点击插入键(**Insert**)，画出如下结构。

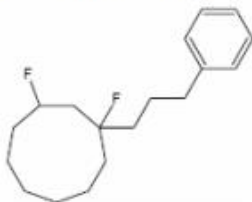


3. 选择改变位置(**Change Position**)，然后点击原子标签，调换Ph 和(CH<sub>2</sub>)的位置得到以下结构：




**提示：**如果在选中 Change Position  键后，用手指按住 Shift，同时点击结构中的原子标签将达到与 3. 同样的效果。

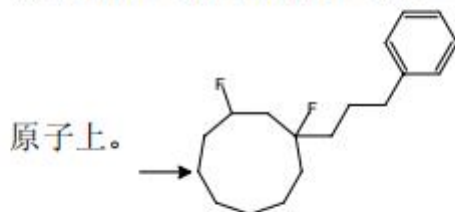
4. 利用已激活的编辑原子标签工具 (**Edit Atom Label**) , 点击已得到的缩写，将编辑标签对话框再次打开，点击“展开” (**Expand**)  键，得到如下结构：



### 3.2.12 使用画链工具

使用画链  工具，通过点击和拖动鼠标，您可以很容易地画出长、短键。

1. 点击结构工具栏中画链工具键 , 将鼠标移动到键头所指的



2. 按下鼠标键，向左拖动。当鼠标离开结构时，自动生成碳链。

注意鼠标箭头旁的碳原子数 (C#) 随着碳原子的增减而变化：

授课日期：第18周

教案编号：06

课程名称	化工计算	专业班级	分析检验技术
教材名称	自编讲义		
授课题目	考查		
授课学时	2节(✓)；3节( )；其它( )		
课型	理论( )；上机(✓)；见习( )；实训( )；其它( )		
教学目的	完成期末考查		
教学重点			
教学难点			
教学方法	讲授( )；讨论( )；指导( )；示教( )；其它( )		
电子教案	有( )	Microsoft PowerPoint(✓)；Author ware( )；其它( )	
	无( )		
教学资源	多媒体(✓)；模型(✓)；标本( )；实物( )；音像(✓)；其它( )		
教学过程时间安排	2学时		
思考题			