CASIO

CLASSWIZ

卡西欧科学函数计算器

fx-999CN CW II 中文版

大学化学与化工计算应用案例集

卡西欧计算器研究中心
版权所有 免费公布



卡西欧计算器研究中心

前 言

化学与化工类专业的学生在无机化学、分析化学、物理化学、化工原理等课程中会遇到大量的计算问题，且涉及的数据繁杂，无法通过手算解决。在这种情况下，使用科学计算器来求解化学与化工类专业课程的计算是十分必要的。

fx-999CN CW II 中文版科学计算器是 CASIO（卡西欧）于 2026 年春季发布的新一代 CLASSWIZ 系列旗舰科学函数计算器，其高性价比、中文菜单显示、用户友好型的操作方式、强大的计算功能、快速的处理过程，受到许多大学生以及经常需要用到科学函数计算的社会人士的喜爱。

fx-999CN CW II 中文版科学计算器拥有计算、统计、分布、数据表格、函数表格、方程、不等式、复数、进制、矩阵、向量、比例等十二个功能应用，每个功能应用在主屏幕中以图标的形式显示。通过全新的操作逻辑设计，用户可轻松地在各个功能应用中实现更加灵活多样的计算。其中，计算应用除了普通的初等函数运算，还可以作一元函数的数值积分、数值求导以及连加求和（Σ）、连乘求积（Π）运算；统计应用可用于数据处理和回归分析；分布应用可进行二项分布、泊松分布、正态分布等计算；数据表格应用可实现与计算机上的电子表格类似的计算；函数表格应用可列出两个函数的表格用于分析函数的变化情况；方程应用可以求解二至四元的线性方程组、二至四次的多项式方程，还可以用方程求解器求解一元超越方程、带有导数或积分的方程；复数应用可进行电学的相量计算；进制应用可作进制转换和逻辑位运算；矩阵应用可对最大 4 行 4 列矩阵进行求逆、计算行列式值、化简为行阶梯形或行最简形等操作；向量应用可计算向量的数量积、向量积、以及两向量的夹角和单位向量等等。此外，计算器中还内置了两个自定义函数 $f(x)$ 和 $g(x)$，以及 47 个科学常数与 9 类单位换算的功能。

本书结合国内高等院校化学与化工类专业实际，从无机化学、分析化学、物理化学以及化工原理等计算量较大的化学与化工类专业课程中，选取常见的题型并按照需要解决的计算问题进行分类，通过案例的形式展现 fx-999CN CW II 中文版科学计算器的高效用法。本书也可作为从事高等院校化学与化工类相关专业教学工作的教师、从事化学或化工领域相关职业的社会人士使用 fx-999CN CW II 中文版、fx-999CN CW II MAX 中文版科学计算器的参考资料。本书除第 5.4 节涉及数据表格功能之外的部分，也适用于使用 fx-991CN CW II 中文版、fx-991CN CW II MAX 中文版科学计算器的用户参考。

本书由卡西欧计算器研究中心组织编写，由于时间仓促，书中难免会出现疏漏，恳请读者批评指正。

卡西欧计算器研究中心

2026 年 7 月

了解更多

● **fx-999CN CW II 的完整版用户说明书：**

https://support.casio.com/global/cn/calc/manual/fx-991CNCWII_999CNCWII_cn/

● **fx-999CN CW II 使用指南可在卡西欧全球教育网下载：**

https://edu.casio.com/cn/support/qsg/

目 录

1 计算器操作入门 …… 1

1.1 计算器基础知识 …… 1
1.2 计算器的操作技巧 …… 3

2 无机化学计算应用 …… 5

2.1 指数与对数计算 …… 5
2.2 定积分计算 …… 7
2.3 多项式方程求解 …… 9
2.4 一元方程求解 …… 13
2.5 二元非线性方程组求解 …… 22

3 分析化学计算应用 …… 28

3.1 平均值、标准偏差等统计量的计算 …… 28
3.2 回归分析及预测 …… 36
3.3 方程或方程组的求解 …… 38
3.4 指数与对数计算 …… 48

4 物理化学计算应用 …… 53
4.1 定积分计算 …… 53
4.2 求导计算 …… 56
4.3 线性方程组求解 …… 60
4.4 多项式方程求解 …… 61
4.5 一元方程求解 …… 63
5 化工原理计算应用 …… 74
5.1 一元方程求解 …… 74
5.2 线性方程组与多项式方程求解 …… 80
5.3 定积分计算 …… 84
5.4 数据迭代计算 …… 86
附录一 常见问题解答 ……101
附录二 常用内置科学常数 ……107
附录三 元素周期表 ……108
参考文献 …… 109

1 计算器操作入门

1.1 计算器基础知识

1.1.1 按键功能

按键表面的标记表示该键的按键功能，直接按此键即可调用相应的功能。按键左上方印在机身上的标记表示该键的第二功能，需要先按 ⬆（SHIFT）再按此键进行调用。



以右图所示的按键为例，按 sin 调用“sin”，按 ⬆ sin (sin⁻¹) 调用“$\sin^{-1}$”（即“arcsin”）。

OK 与 EXE 功能相同，只是所在的位置不同，一般根据操作方便的原则来选择。但在按 ⬆ EXE (Ans) 调用 EXE 的第二功能 Ans 时，只能使用 EXE。

1.1.2 计算器应用

开机后，按 ⌂（主屏幕）打开主屏幕，使用方向键（∧ ∨ < >）或翻页键（⩓ ⩔）可以查看所有应用，如图所示。



选中需要的应用（该应用图标将反色显示）后，按 OK 或 EXE 进入。也可以按应用图标右上角显示的选项编号对应的按键直接进入应用。例如，按 ① 可以进入“计算”应用。

1.1.3 设 置

开机进入任何一个应用后，可按 ☰（设置）打开设置菜单；按方向键 ∧ 或 ∨ 选择需要的设置菜单（该菜单将反色显示），按 > 或 OK 或 EXE 可打开相应子菜单；也可以按菜单项左侧显示的选项编号对应的按键直接打开相应子菜单；然后根据需要进行设置。

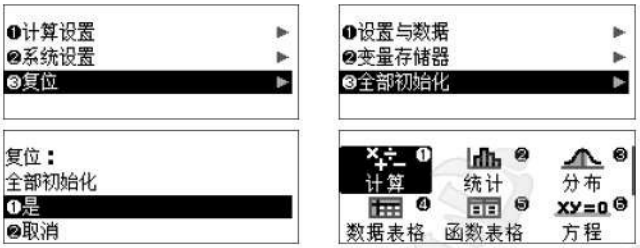
例如设置角度单位为弧度，操作步骤如下：

按 ☰（设置）打开“设置”菜单；按 ① 选择“计算设置”；按 ② 选择“角度单位”；按 ②（弧度(R)）选择“弧度”；按 AC 关闭设置菜单，回到之前的界面。此时计算器屏幕上端会显示“R”，表示角度单位已设置为弧度。



例如将计算器恢复出厂设置（初始化），操作步骤如下：

按 ☰（设置）打开“设置”菜单；按 ③ 选择“复位”；按 ③ 选择“全部初始化”；按 ① 选择“是”，执行复位操作，复位结束后会显示主屏幕。全部初始化完成后，计算器将恢复为出厂设置。



1.2 计算器的操作技巧

1.2.1 分数或分式的输入

输入单个分数时，一般先输入分子，然后按 ▭ 输入分数线，再输入分母。

输入分式时，一般先按 ▭ 输入分数线，再输入分子，然后使用方向键（▽ 或▷）移动光标到分母上输入分母。

对于简单的分式，可以使用除号（÷）代替分数线，以减少移动光标的操作。

1.2.2 可化简的输入操作

小数末尾的 0 可以不输入。例如数据 1.80，输入 1.8 即可。

纯小数（即绝对值小于 1 的小数），小数点前的 0 可以不输入。例如数据 0.08，输入 .08 即可。

输入算式的最后一个右括号可不输入。例如计算$2\times(5+3)$，按 2×(5+3 之后，即可按 EXE 执行计算。

科学记数法数据的输入可使用专用的 $\times10^{\square}$ 键，例如5×10^{8}，不需要按 5×10^8，直接按 5$\times10^{\square}$8 即可。

1.2.3 Ans 功能

Ans 是计算器上的一个特殊的变量，用于临时保存最新一次的计算的答案。需要用到上一步计算的答案时，可以按 ⏫ EXE (Ans) 调用。特别地，如果直接将上一步计算的答案用在下一次计算算式的开头，可直接按运算符（四则运算、乘方），此时计算器会自动代入 Ans。若在算式中已使用 Ans 变量，且再次按下 OK 或 EXE，则又会执行一次计算，此时 Ans 也会自动更新为最新的计算结果。

例如计算123 × 456，然后再将所得的结果除以 2，操作如下：

按 123 ⊗ 456 EXE 执行第一步的计算，然后按 ÷ 2 EXE 执行第二步的计算。





1.2.4 修改算式

输入计算式后，若未进行计算，可以利用方向键（△ ▽ ◁ ▷）移动光标到需要修改的地方进行修改。

如果已经计算出答案，可以先按左右方向键（◁ 或 ▷）返回到算式编辑状态，然后移动光标并进行修改。如果因答案很长导致按左右方向键无法返回时，可以按 ⮌ 返回到算式编辑状态。

2 无机化学计算应用

2.1 指数与对数计算

本节所有操作均在“计算”应用中进行。

按 ⏢ 打开主屏幕，然后按 ① 进入“计算”应用。



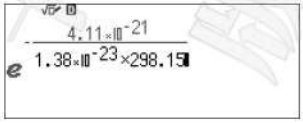


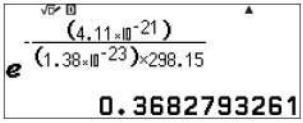
2.1.1 指数计算

化学中经常需要计算以 e（e＝2.718281828459…）为底的指数函数e^x，有时会写成 exp 函数$\exp(x)$。计算指数函数e^x时，先按 ⬆ ⊖ (*e*) 输入底数 e，再按乘方键 ▪°，然后输入指数部分。

例如计算$\exp\left(-\dfrac{4.11\times10^{-21}}{1.38\times10^{-23}\times298.15}\right)$，按键过程如下：

⬆ ⊖ (*e*) ▪° ⊖ ⊟ 4.11 ×10ˣ ⊖ 21 ▽ 1.38 ×10ˣ ⊖ 23 ▷ ⊗ 298.15 EXE



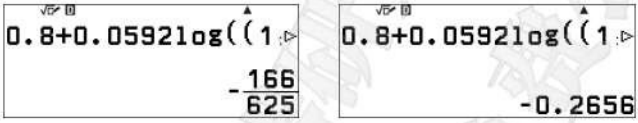


2.1.2 对数计算

以 10 为底的常用对数 lg 在计算器上用“log”表示，按 ⏫ ■² (log) 输入。也可直接按 log■□ 输入任意底的对数模板“$\log_{\blacksquare}\square$”，在底数的框中输入 10。

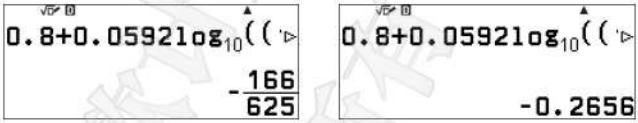
例如计算$0.80+0.0592\lg(1.0\times10^{-18})$，若使用常用对数，按键过程如下：

0.8 ⊕ 0.0592 ⏫ ■² (log) 1 ×10^■ (−) 18 ▷) EXE，然后按 S⇔D 将结果转换为小数形式。



若使用任意底的对数模板，按键过程如下：

0.8 ⊕ 0.0592 log■□ 10 ▷ 1 ×10^■ (−) 18 EXE，然后按 S⇔D 将结果转换为小数形式。

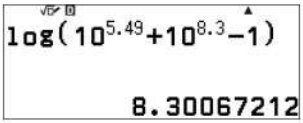


2.1.3 将指数问题转化为对数问题的计算

有些问题以指数的形式呈现，求解的结果也需要以指数的形式表示，此时需要将问题转化为对数问题之后再计算。

例如计算$10^{5.49}+10^{8.3}-1$，要求将结果表示为以 10 为底的指数的形式，本质上是要求$\lg(10^{5.49}+10^{8.3}-1)$。操作过程如下：

⏫ ■² (log) 10 ■^□ 5.49 ▷ ⊕ 10 ■^□ 8.3 ▷ ⊖ 1) EXE



由此得到，计算结果约为$10^{8.3007}$。

2.2 定积分计算

本节所有操作均在“计算”应用中进行。

按 ⏻ 打开主屏幕，然后按 ① 进入“计算”应用。





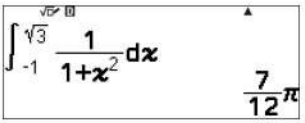
2.2.1 功能说明

fx-999CN CW II 使用数值积分方法计算定积分，一般通过定积分模板来输入积分式。定积分模板位于计算器面板 ⊗ 键的第二功能上，即按 ⇧ ⊗ (∫□□) 进行调用。

例如，计算 $\int_{-1}^{\sqrt{3}} \frac{1}{1+x^2}\,\mathrm{d}x$，按键过程如下：

按 ⇧ ⊗ (∫□□) 输入定积分模板，然后按 1 ▤ 1 ⊕ ⓧ ■² 输入被积式；按 ⓥ 将光标移到积分下限，输入 ⊖ 1；按 ⓐ 将光标移到积分上限，输入 √■ 3；按 EXE 执行计算。





2.2.2 应用例题

例 2-1 在550 °C、1 atm 下，甲醇脱氢生产甲醛的反应中，银催化剂的活性逐渐降低，其光泽也逐渐消失。有人怀疑，此现象是由于有 Ag_2O 生成所致。试评价此观点。已知在298 K 下有如下数据：

$$\Delta_f G_m^{\ominus}(Ag_2O) = -10.837\ \text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H_m^{\ominus}(Ag_2O) = -30.585\ \text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$C_{p,m}(Ag_2O) = 65.7\ \text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$$

$$C_{p,m}(Ag) = 26.8\ \text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$$

$$C_{p,m}(O_2) = 31.38\ \text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$$

解： 对于反应 $2Ag + \frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons Ag_2O$，其在298 K 下的标准摩尔反应熵和反应的摩尔定压热容变化分别为

$$\Delta_r S_m^{\ominus} = \frac{\Delta_f H_m^{\ominus}(Ag_2O) - \Delta_f G_m^{\ominus}(Ag_2O)}{T_0}$$

$$= \frac{-30.585 - (-10.837)}{298}\ \text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1} = -66.27\ \text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$$

$$\Delta_r C_p = C_{p,m}(Ag_2O) - 2C_{p,m}(Ag) - 0.5C_{p,m}(O_2)$$

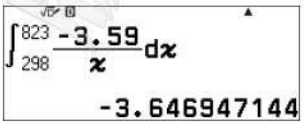
$$= (65.7 - 2\times 26.8 - 0.5\times 31.38)\ \text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$$

$$= -3.59\ \text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$$

则 $\Delta_r S_m(823\ \text{K}) - \Delta_r S_m^{\ominus}(298\ \text{K}) = \int_{298\ \text{K}}^{823\ \text{K}} \frac{\Delta_r C_p}{T}\mathrm{d}T$。

使用 fx-999CN CW II 计算该定积分。

按 ⬆ ⊗ (∫▪▪) 输入定积分模板，然后按 ⊟ (−) 3.59 ▽ ⓧ ▽ 298 △ 823 输入被积式、积分下限和积分上限，按 EXE 执行计算。



由此得到，

$$\Delta_r S_m(823\ \mathrm{K}) - \Delta_r S_m^{\ominus}(298\ \mathrm{K}) = -3.65\ \mathrm{J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}}$$

则823 K下的摩尔反应熵

$$\Delta_r S_m(823\ \mathrm{K}) = (-66.27 - 3.65)\ \mathrm{J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}} = -69.92\ \mathrm{J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}}$$

同理，对于系统的焓变，也有类似的关系

$$\Delta_r H_m^{\ominus}(823\ \mathrm{K},\ Ag_2O) - \Delta_f H_m^{\ominus}(Ag_2O) = \int_{298}^{823} \Delta_r C_p \mathrm{d}T$$

使用 fx-999CN CW II 计算。按 ⬆ ⊗ (∫ₐᵇ) ⊖ 3.59 ⓥ 298 ⓐ 823 输入积分式，然后按 EXE 执行计算。按 S⇔D 将结果转换为小数。





由此得到，

$$\Delta_r H_m^{\ominus}(823\ \mathrm{K},\ Ag_2O) - \Delta_f H_m^{\ominus}(Ag_2O) = -1884.75\ \mathrm{J \cdot mol^{-1}}$$

则823 K下的标准摩尔反应焓

$$\Delta_r H_m^{\ominus}(823\ \mathrm{K}) = (-30585 - 1884.75)\ \mathrm{J \cdot mol^{-1}} = -32469.75\ \mathrm{J \cdot mol^{-1}}$$

进而可以得到Ag_2O的标准摩尔生成 Gibbs 自由能

$$\begin{aligned}\Delta_f G_m(823\ \mathrm{K},\ Ag_2O) &= \Delta_r H_m(823\ \mathrm{K}) - T \cdot \Delta_r S_m(823\ \mathrm{K}) \\ &= -32469.75 - 823 \times (-69.92) \\ &= 25074.41\ \mathrm{J \cdot mol^{-1}} > 0\end{aligned}$$

所以上述反应在给定条件下不能自发向右进行。所以银催化剂的失活并不是由于生成Ag_2O所造成的。

2.3 多项式方程求解

2.3.1 功能说明

求解标准形式的多项式方程，可以在计算器上使用“方程”应用

中的多项式方程求解功能，直接输入系数即可得到所有的解。对于一部分不是多项式形式的方程，也可以化成标准形式的多项式方程之后再进行求解。

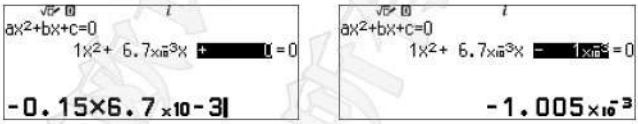
例如，求解方程 $\frac{x^2}{0.15-x}=6.7\times10^{-3}$，操作步骤如下：

原方程可化为 $x^2+(6.7\times10^{-3})x-0.15\times6.7\times10^{-3}=0$。

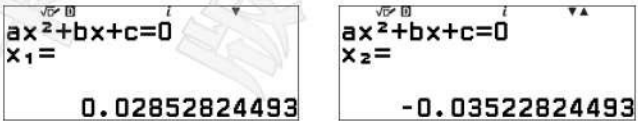
按 ⏢ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ② 选择“多项式方程”，然后按 ① 选择“$ax^2+bx+c=0$”，此时进入标准形式的一元二次方程的系数输入界面。



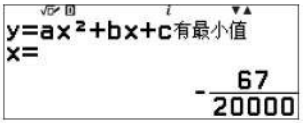
按 1 EXE 6.7 ×10ˣ (−) 3 EXE (−) 0.15 × 6.7 ×10ˣ (−) 3 EXE 输入系数。

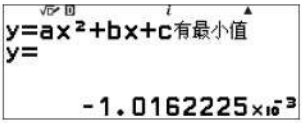


按 EXE 得到第一个解 x_1，再按 EXE 可以得到方程的另一个解 x_2。可以根据题意对解进行取舍。



继续按两次 EXE，还可依次得到原方程对应的二次函数最值点的横坐标和纵坐标。





2.3.2 应用例题

例 2-2 室温下，0.010 mol $AgNO_3$ 溶于 1 升 0.020 mol/L 的氨水中（设体积不变）。求此溶液中 Ag^+，NH_3，$Ag(NH_3)^+$，$Ag(NH_3)_2^+$ 的浓度。（已知 $\beta_1=1.74\times10^3$，$\beta_2=1.12\times10^7$。）

解： 由 $\beta_1=\dfrac{[Ag(NH_3)^+]}{[Ag^+][NH_3]}$，$\beta_2=\dfrac{[Ag(NH_3)_2^+]}{[Ag^+][NH_3]^2}$，易得

$$[Ag(NH_3)^+]=\beta_1[Ag^+][NH_3] \qquad [Ag(NH_3)_2^+]=\beta_2[Ag^+][NH_3]^2$$

由物料守恒，有

$$[Ag^+]+[Ag(NH_3)^+]+[Ag(NH_3)_2^+]=0.010\ \text{mol/L}$$

可得

$$[Ag^+]=\frac{0.010}{1+\beta_1[NH_3]+\beta_2[NH_3]^2}$$

设 $[NH_3]=x$ mol/L，则 $[Ag^+]=\dfrac{0.010}{1+\beta_1 x+\beta_2 x^2}$。

对 NH_3 使用物料守恒，同理可得

$$[NH_3](1+\beta_1[Ag^+]+2\beta_2[Ag^+][NH_3])=0.020\ \text{mol/L}$$

将 $[Ag^+]$ 代入上式并整理，得

$$\beta_2 x^3+\beta_1 x^2+(1-0.010\beta_1)x-0.020=0$$

再将 β_1 和 β_2 的数值代入，得

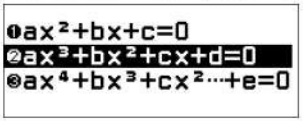
$$(1.12\times10^7)x^3+(1.74\times10^3)x^2-16.4x-0.020=0$$

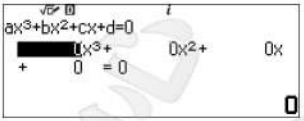
使用 fx-999CN CW II 的多项式方程功能进行求解。

按 ⓐ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ② 选择“多项式方程”，然后按 ② 选择“$ax^3+bx^2+cx+d=0$”，进入标准形式的一元三次方程的系数输入界面。

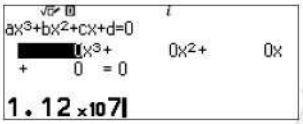


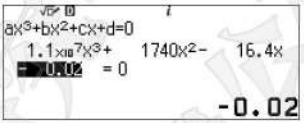




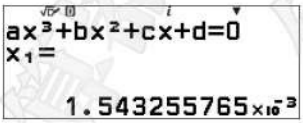


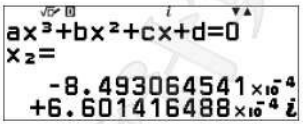
按 1.12 ×10ˣ 7 EXE 1.74 ×10ˣ 3 EXE (−) 16.4 EXE (−) 0.02 EXE 输入系数。

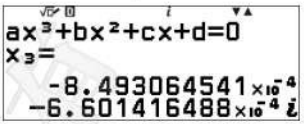




按 EXE 得到第一个解，再按 EXE 得到第二个解，继续按 EXE 得到第三个解。（虚根可按 转换 转换为两行显示。）







三个解中只有x_1是实根，符合题意，故舍去x_2和x_3。

由此得到$[NH_3]=1.54\times10^{-3}$ mol/L，代入其他各离子浓度的表达式即可求得相应的离子浓度：

$$[Ag^+]=3.31\times10^{-4}\ \text{mol/L}$$

$$[Ag(NH_3)^+]=8.87\times10^{-4}\ \text{mol/L}$$

$$[Ag(NH_3)_2^+]=8.79\times10^{-3}\ \text{mol/L}$$

2.4 一元方程求解

2.4.1 功能说明

对于比较复杂的一元方程，可通过计算器的“方程”应用中的方程求解器进行求解。计算器求解一元方程采用牛顿法（切线法）求解，这是一种数值计算方法，根据指定的初始值，按照牛顿法的原理进行迭代，从而得到相应的解。

例如，求解方程$\ln(x+3)=x^2-3x+2$，操作步骤如下：

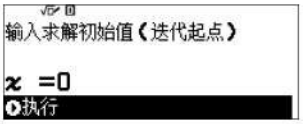
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。

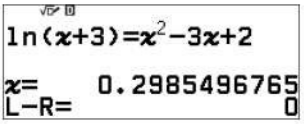


按 ⬆ ⏨ (ln) ⓧ ⊕3) ⬆ ((=) ⓧ ■² ⊖3 ⓧ ⊕2 输入方程，然后按 ⏎ 确认，此时进入输入求解初始值的界面。



先尝试使用默认的 0 作为初始值进行求解。按 0 ⏎ 输入初始值并确认（当显示初始值$x=0$时，也可按 ⓥ 跳过初始值的输入），此时反色光标已移动到“执行”上，按 ⏎ 或 OK 执行求解。

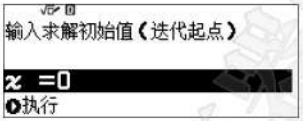




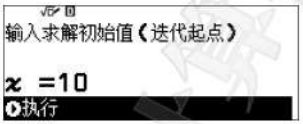
求解结果界面上的“L－R”表示将求解结果代入原方程的左（L，Left）、右（R，Right）两边之后相减的结果，(L－R)越接近0，说明求解结果的精度越高。

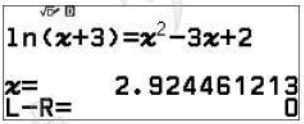
由此得到该方程的一个近似解为$x \approx 0.2985$。

该方程可能还存在另一个解，此时按⑤返回到输入求解初始值的界面，再指定其他初始值，例如10，按 10 ⑧ 输入初始值并确认，然后按 ⑧ 执行求解。









由此得到该方程的另一个近似解为$x \approx 2.9245$。可见，对于存在多个解的方程，可以尝试选取不同的初始值，得到不同的解。

此外，如果原方程中含有分式，且未知数在分母中，为了能够方便地求解，一般需要将方程进行变形之后再求解。

2.4.2 应用例题

例 2-3 在某处高山上测得纯水90 °C 沸腾。100 °C 下3 min 可煮熟的鸡蛋，在这样的高山上需多少分钟方可煮熟？假定鸡蛋煮熟（即蛋白质变质）过程的活化能为$5.18 \times 10^2\ \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$。

解：速率常数k与反应速率v成正比，反应速率v与完成反应所需时间t成反比，故有k与t成反比，即

$$\frac{k_2}{k_1}=\frac{t_1}{t_2}$$

将鸡蛋煮熟即蛋白质变质的过程看成一个复杂的化学反应。其速率常数、反应温度和活化能之间满足阿伦尼乌斯公式。经变换得

$$\lg\frac{k_2}{k_1}=\frac{E_a}{2.303R}\left(\frac{T_2-T_1}{T_1T_2}\right)$$

即

$$\lg\frac{t_1}{t_2}=\frac{E_a}{2.303R}\left(\frac{T_2-T_1}{T_1T_2}\right)$$

代入数据，有

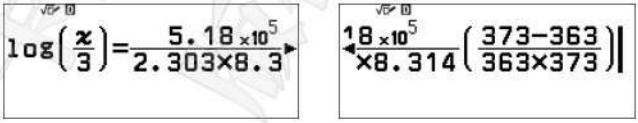
$$\lg\frac{t_1}{3}=\frac{5.18\times10^5}{2.303\times8.314}\left(\frac{373-363}{363\times373}\right)$$

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

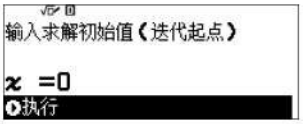
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。

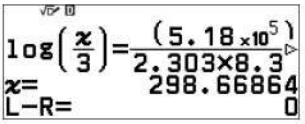


按 ▲ ■² (log) 𝑥 ▦ 3 ▶) ▲ ◀ (=) ▦ 5.18 (×10ⁿ) 5 ▼ 2.303 × 8.314 ▶ ◀ ▦ 373 − 363 ▼ 363 × 373 ▶) 输入方程。



按 EXE 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。按 ▼ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 EXE 执行求解。





由此得到，$t_1 = 299\ \text{min}$，即需要299 min方可煮熟鸡蛋。

例 2-4 计算$0.20\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ H_2SO_4溶液和$0.40\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ Na_2SO_4溶液等体积混合后所得溶液的pH。

解： 查酸的解离常数表，得到H_2SO_4的$K_2 = 1.0\times10^{-2}$。

混合后，
$$c(H_2SO_4) = 0.10\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$$
$$c(SO_4^{2-}) = 0.20\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$$

由反应式$H_2SO_4 + SO_4^{2-} \rightleftharpoons 2HSO_4^-$可知，$SO_4^{2-}$过量，反应后剩余浓度为$0.10\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$，生成$HSO_4^-$的浓度为$0.20\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$。

溶液中存在如下平衡：

	HSO_4^-	$\rightleftharpoons$	H^+	+	SO_4^{2-}
$c_{eq}/(\text{mol}\cdot\text{L}^{-1})$	$0.20-x$		x		$0.10+x$

由此得到

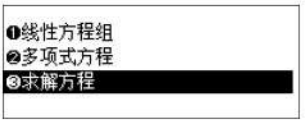
$$K_2 = \frac{x(0.10+x)}{0.20-x} = 1.0\times10^{-2}$$

由于起始浓度较低，且K_2较大，不能近似计算。

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。



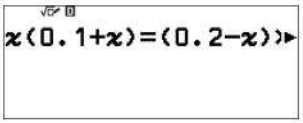




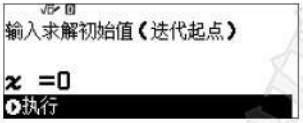
由于原方程是分式方程，需要先将原方程变形为

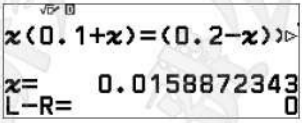
$$x(0.10+x)=(0.20-x)\times 1.0\times 10^{-2}$$

按 ⓧ (0.1 ⊕ ⓧ) ⬆ (= (0.2 ⊖ ⓧ) ⊗ 1 $\times 10^{x}$ ⊖ 2 输入方程。



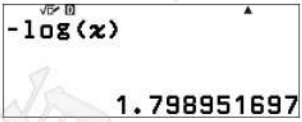
按 EXE 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。按 ⓥ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 EXE 执行求解。





计算器会自动地将求解出的 x 值赋值给变量 x，按 ⌂ 打开主屏幕，按 ① 进入“计算”应用。按 ⊖ ⬆ x^2 (log) ⓧ) EXE 计算 pH 值。





由此得到，混合后所得溶液的 pH = 1.80 。

例 2-5　今有 2.00 L　0.500 mol · L^{-1} 的 $NH_3 \cdot H_2O$ 溶液和 2.00 L 0.500 mol · L^{-1} 的 HCl 溶液，若配置 pH = 9.00 的缓冲溶液，不允许再加水，最多能配置多少升缓冲溶液？

解： 用 $NH_3 \cdot H_2O$ 溶液和 HCl 溶液可以配出 $NH_3 \cdot H_2O - NH_4Cl$ 缓冲溶液。

根据题意，$n(NH_3 \cdot H_2O) = n(HCl)$，则 2.00 L　$NH_3 \cdot H_2O$ 溶液要全部使用，而 HCl 溶液只需使用一部分。设所用 HCl 溶液的体积为 x L，则缓冲溶液的总体积为 $(2.00 + x)$ L。酸碱中和后，有

$$c(\mathrm{NH_3\cdot H_2O})=\frac{0.500\times 2.00-0.500x}{2.00+x}\ \mathrm{mol\cdot L^{-1}}$$

$$c(\mathrm{NH_4^+})=\frac{0.500x}{2.00+x}\ \mathrm{mol\cdot L^{-1}}$$

已知$K_b^\ominus(\mathrm{NH_3\cdot H_2O})=1.8\times10^{-5}$，碱性缓冲溶液 pH 计算公式为

$$\mathrm{pH}=14.00-\mathrm{p}K_b^\ominus(\mathrm{B})+\lg\frac{c(\mathrm{B})}{c(\mathrm{BH^+})}$$

代入数据，得

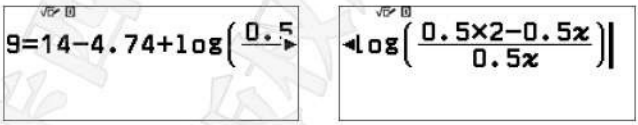
$$9.00=14.00-4.74+\lg\frac{0.500\times 2.00-0.500x}{0.500x}$$

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

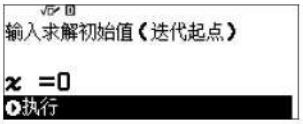
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。

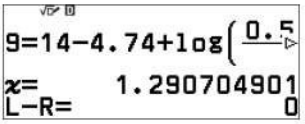


按 9 ⏫ ⏴ (=) 14 ⊖ 4.74 ⊕ ⏫ ■² (log) ⏬ 0.5 ⊗ 2 ⊖ 0.5 x ⏷ 0.5 x ⏵) 输入方程。



按 EXE 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。按 ⏷ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 EXE 执行求解。





由此得到，$x=1.29$，即最多能配置3.29 L 缓冲溶液。

例 2-6　已知$Ba(IO_3)_2$溶于1.0 L 浓度为$0.0020\ mol \cdot L^{-1}$的KIO_3溶液中的量与其溶于1.0 L 浓度为$0.040\ mol \cdot L^{-1}$的$Ba(NO_3)_2$溶液中的量相等。计算$Ba(IO_3)_2$在上述两种溶液中的溶解度及其$K^{\ominus}_{sp}$。

解： 设$Ba(IO_3)_2$溶解的量为$x\ mol \cdot L^{-1}$，由题意可知

$$Ba(IO_3)_2 \rightleftharpoons Ba^{2+} + IO_3^-$$

在KIO_3溶液中：　x　　x　　$0.0020+2x$

在$Ba(NO_3)_2$溶液中：　x　　$0.040+x$　　$2x$

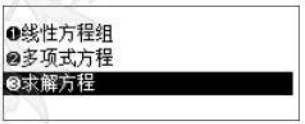
两溶液中离子的浓度均满足$K^{\ominus}_{sp}$，故有

$$x(0.0020+2x)^2=(0.040+x)(2x)^2$$

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

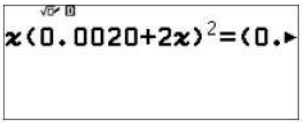
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。

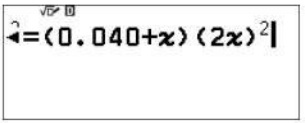






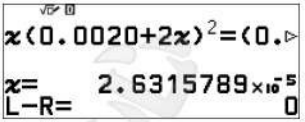
按 ⓧ (0.0020 ⊕ 2 ⓧ) ▪² ⬆ (=) (0.040 ⊕ ⓧ) (2 ⓧ) ▪² 输入方程。





按 EXE 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。按 0.001EXE 指定初始值为0.001，然后按 EXE 执行求解。

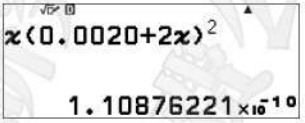




由此得到，$x=2.63\times10^{-5}$。

按 ⌂ 打开主屏幕，按 ① 进入“计算”应用。按 x (0.0020 + 2 x) x² EXE 计算溶度积 $K_{sp}^{\ominus}$。





由此得到，$K_{sp}^{\ominus}[Ba(IO_3)_2]=1.11\times10^{-10}$。

例 2-7 铅蓄电池是常用的充电电池，它的一个电极填充海绵铅，另一个电极填充PbO_2，介质为H_2SO_4。若电池起始时的电动势为2.05 V，试求介质H_2SO_4的浓度。

（已知$\varphi^{\ominus}(Pb^{2+}/Pb)=-0.126$ V，$\varphi^{\ominus}(PbO_2/Pb^{2+})=1.455$ V，$K_{sp}(PbSO_4)=1.82\times10^{-8}$，视硫酸完全电离。）

解： 铅蓄电池放电时，两极发生如下化学反应：

负极： $Pb(s)+SO_4^{2-}\longrightarrow PbSO_4(s)+2e^-$

正极： $PbO_2(s)+4H^++SO_4^{2-}+2e^-\longrightarrow PbSO_4(s)+2H_2O$

由能斯特方程，对于负极，有

$$\varphi^-=\varphi(PbSO_4/Pb)=\varphi^{\ominus}(Pb^{2+}/Pb)+\frac{0.0592}{2}\lg[Pb^{2+}]$$

而$K_{sp}(PbSO_4)=[Pb^{2+}][SO_4^{2-}]$，即$[Pb^{2+}]=\dfrac{K_{sp}(PbSO_4)}{[SO_4^{2-}]}$，代入上式，得

$$\varphi^- = \varphi^\ominus(Pb^{2+}/Pb) + \frac{0.0592}{2}\lg\frac{K_{sp}(PbSO_4)}{[SO_4^{2-}]}$$

同理，对于正极，也有

$$\varphi^+ = \varphi(PbO_2/PbSO_4) = \varphi^\ominus(PbO_2/Pb^{2+}) + \frac{0.0592}{2}\lg\frac{[H^+]^4}{[Pb^{2+}]}$$

$$= \varphi^\ominus(PbO_2/Pb^{2+}) + \frac{0.0592}{2}\lg\frac{[H^+]^4[SO_4^{2-}]}{K_{sp}(PbSO_4)}$$

则电动势

$$\mathscr{E} = \varphi^+ - \varphi^-$$

$$= \left\{\varphi^\ominus(PbO_2/Pb^{2+}) + \frac{0.0592}{2}\lg\frac{[H^+]^4[SO_4^{2-}]}{K_{sp}(PbSO_4)}\right\}$$

$$-\left\{\varphi^\ominus(Pb^{2+}/Pb) + \frac{0.0592}{2}\lg\frac{K_{sp}(PbSO_4)}{[SO_4^{2-}]}\right\}$$

$$= \varphi^\ominus(PbO_2/Pb^{2+}) - \varphi^\ominus(Pb^{2+}/Pb) + \frac{0.0592}{2}\lg\frac{[H^+]^4[SO_4^{2-}]^2}{[K_{sp}(PbSO_4)]^2}$$

设介质 H_2SO_4 的浓度为 $x\ mol\cdot L^{-1}$，则 $[H^+]=2x\ mol\cdot L^{-1}$，$[SO_4^{2-}]=x\ mol\cdot L^{-1}$。代入上式，得

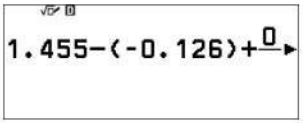
$$1.455-(-0.126)+\frac{0.0592}{2}\lg\frac{(2x)^4x^2}{(1.82\times10^{-8})^2}=2.05$$

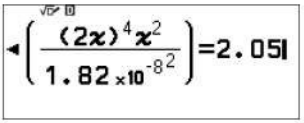
使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。

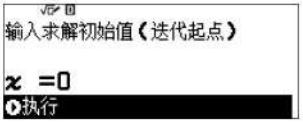


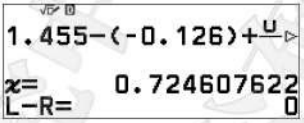
按 1.455 (−) ((−) 0.126) ⊕ 0.0592 ▤ 2 ▷ ▲ ■² (log) ▤ (2 𝑥) ■^□ 4 ▷ 𝑥 ■² ▽ 1.82 ■×10^□ (−) 8 ▷ ■² ▷) ▲ ((=) 2.05 输入方程。





按 EXE 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。按 ▽ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 EXE 执行求解。





由此解得 $x=0.725$，即介质 H_2SO_4 的浓度为 $0.725\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$。

2.5 二元非线性方程组求解

2.5.1 功能说明

对于二元线性方程组，可直接通过计算器的“方程”应用进行求解；而对于二元非线性方程组，计算器是无法直接求解的，因此可以考虑采用消元的方法，将求解二元非线性方程组的问题转化为求解一元方程的问题，然后使用方程求解器进行求解。

例如求解二元非线性方程组

$$\begin{cases}\dfrac{(0.24-2x-2y)^2}{0.1x}=\dfrac{1}{6\times10^{-16}}\\[2ex]\dfrac{(0.24-2x-2y)^2}{0.1y}=\dfrac{1}{8\times10^{-7}}\end{cases}$$

操作过程如下：

观察两个方程的特点，方程左边的分子是相同的，因此用第一个方程和第二个方程相除，得到

$$\frac{y}{x}=\frac{8\times10^{-7}}{6\times10^{-16}},\quad \text{即}\quad y=\frac{8\times10^{-7}}{6\times10^{-16}}x$$

再将上式代入第一个方程，去分母，得

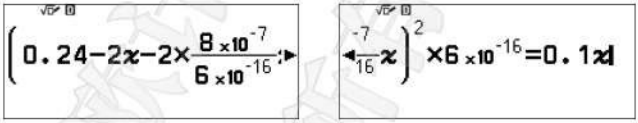
$$\left(0.24-2x-2\times\frac{8\times10^{-7}}{6\times10^{-16}}x\right)^2\times6\times10^{-16}=0.1x$$

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

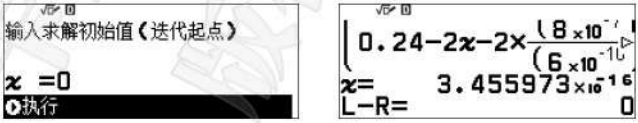
按 ⌂ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。



按 (0.24 − 2 x − 2 × 8 ×10^ (−) 7) ▤ 6 ×10^ (−) 16)) x) ■² × 6 ×10^ (−) 16) ▲ (= 0.1 x 输入方程。



按 EXE 确认，进入输入求解初始值的界面。按 ▽ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 EXE 执行求解。

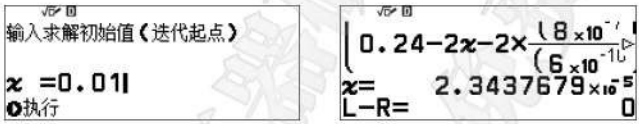


按 ⁴ⁱ（变量）打开变量管理器，当反色光标位于变量 A 上时，按 OK 打开变量操作菜单，按 ① 选择“赋值”，将求解结果赋值给变

量 A。赋值完毕后，可按 (变量) 再次打开变量管理器，可以看到变量 A 的值是求解的结果。



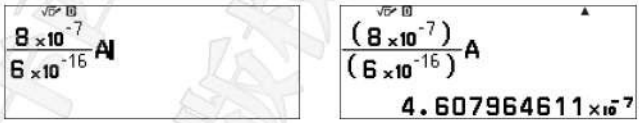
按 返回到输入求解初始值的界面，按 0.01 重新指定初始值为 0.01，按 再次执行求解。



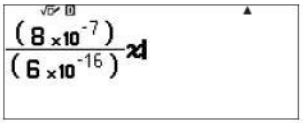
按 打开主屏幕，按 ① 进入“计算”应用。

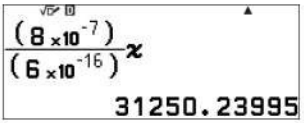


按 8 (-) 7 6 (-) 16 ④（A）输入求 x 的第一个解对应的 y 值的表达式，按 执行计算。



按 返回到表达式编辑的状态，按 删除变量 A，并按 将其修改为变量 x，即将其修改为求 x 的第二个解对应的 y 值的表达式，按 执行计算。





综上，原方程组的解为

$$\begin{cases} x_1 = 3.456 \times 10^{-16} \\ y_1 = 4.608 \times 10^{-7} \end{cases}, \qquad \begin{cases} x_2 = 2.344 \times 10^{-5} \\ y_2 = 3.125 \times 10^{4} \end{cases}$$

可根据实际情况对解进行取舍。

2.5.2 应用例题

例 2-8 将1.00 mol · L^{-1} HAc 溶液和1.00 mol · L^{-1} HF 溶液等体积混合，若已知HAc 的$K_a^\ominus = 1.8 \times 10^{-5}$，HF 的$K_a^\ominus = 6.3 \times 10^{-4}$。试计算此溶液的$c(H^+)$，$c(Ac^-)$和$c(F^-)$。

解： 由$HAc \rightleftharpoons H^+ + Ac^-$，以及$HF \rightleftharpoons H^+ + F^-$，两种酸溶液等体积混合后，HAc 和HF 的起始浓度均为0.50 mol · L^{-1}。

	HAc	+ HF	$\rightleftharpoons$ 2H$^+$	+ Ac$^-$	+ F$^-$
c_0/(mol · L^{-1})	0.50	0.50	0	0	0
c_{eq}/(mol · L^{-1})	$0.50-x$	$0.50-y$	$x+y$	x	y

其中x(mol · L^{-1})为已解离的HAc 的浓度，y(mol · L^{-1})为已解离的HF 的浓度，$(x+y)$(mol · L^{-1})为体系中的H$^+$的浓度。

采用近似计算，$0.50-x \approx 0.50-y \approx 0.50$，由此可得

$$K_a^\ominus(HAc) = \frac{c(H^+)c(Ac^-)}{c(HAc)} = \frac{(x+y)x}{0.50} = 1.8 \times 10^{-5} \qquad ①$$

$$K_a^\ominus(HF) = \frac{c(H^+)c(F^-)}{c(HF)} = \frac{(x+y)y}{0.50} = 6.3 \times 10^{-4} \qquad ②$$

① 式除以 ② 式，得

$$\frac{x}{y} = \frac{1.8 \times 10^{-5}}{6.3 \times 10^{-4}} = \frac{1.8}{63}, \quad 即 \quad x = \frac{1.8}{63} y$$

代入 ② 式，得

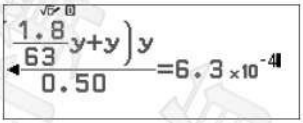
$$\frac{\left(\frac{1.8}{63}y+y\right)y}{0.50}=6.3\times10^{-4}$$

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。



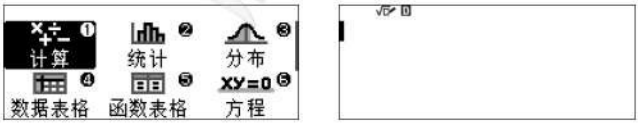
按 ◁ 1.8 ⊟ 63 ▷ ▲ . (y) ⊕ ▲ . (y)) ▲ . (y) ⊟ 0.50 ▷ ▲ ((=) 6.3 ×10ˣ (−) 4 输入方程。



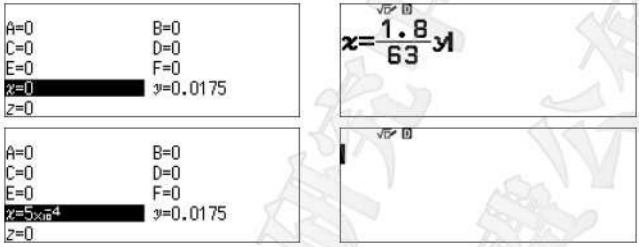
按 EXE 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。按 ▽ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 EXE 执行求解。



按 ⏏ 打开主屏幕，按 ① 进入“计算”应用。



按 (变量) 打开变量管理器，将反色光标移动到变量x上，按 1.8 63 (y)输入x的表达式，然后按 确认，将计算结果赋值给变量x，再按 返回到计算界面。



按 (x) + (y) 计算$c(H^+)$，然后按 将结果转换为小数。



由此得到，$c(H^+)=1.80\times10^{-2}\ mol\cdot L^{-1}$，$c(Ac^-)=5.00\times10^{-4}\ mol\cdot L^{-1}$，$c(F^-)=1.75\times10^{-2}\ mol\cdot L^{-1}$。

卡西欧计算器研究中心 版权所有 免费公开

3 分析化学计算应用

3.1 平均值、标准偏差等统计量的计算

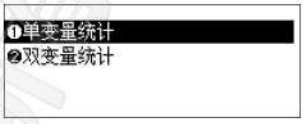
需要求一组或两组数据的平均值、标准偏差、方差等统计量时，可使用计算器的“统计”应用进行计算。

3.1.1 功能说明

使用 fx-999CN CW II 的“统计”应用求一组或两组数据的平均值、标准偏差、方差等统计量的基本操作步骤如下：

1. 按 ⏢ 打开主屏幕，按 ② 进入“统计”应用。





2. 按照统计数据所包含的变量个数选择统计计算的类型，按 ① 选择“单变量统计”，或按 ② 选择“双变量统计”。

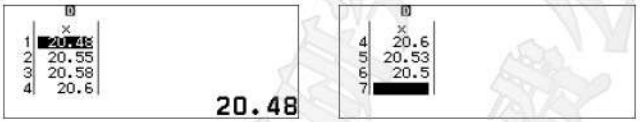
例如，测定某试样的含氮量，进行六次平行测定的结果为

20.48%　20.55%　20.58%　20.60%　20.53%　20.50%

该数据仅包含单一变量，因此按 ① 选择“单变量统计”，此时进入单变量统计数据编辑界面。

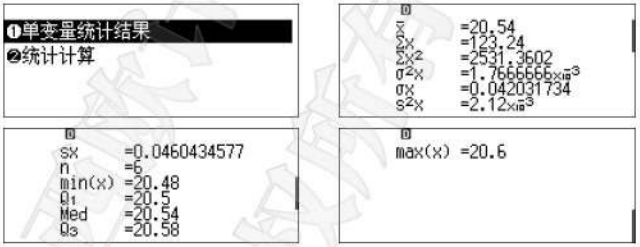


3. 在统计数据编辑界面上输入数据，每输入一个数据，按一次 EXE 确认。按 20.48 EXE 20.55 EXE 20.58 EXE 20.60 EXE 20.53 EXE 20.50 EXE 输入数据。数据输入完毕后，可按方向键（∧ ∨）或翻页键（⏫ ⏬）检查数据输入是否正确，若数据输入有误，可将反色光标移到错误数据上重新输入并按 EXE 确认。



4. 按 OK 或 EXE 打开数据处理菜单，选择需要的功能，执行统计计算。

若按 ① 选择“单变量统计结果”，计算器将显示各统计量的计算结果。



各统计量的计算结果以列表的形式呈现，可按方向键（∧ ∨）或翻页键（⏫ ⏬）切换显示不同的结果。

各统计量符号的含义如下：

$\bar{x}$：平均值　　Σx：数据总和　　Σx^2：数据平方和

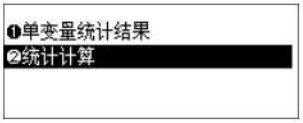
$\sigma^2 x$：总体方差　　σx：总体标准差　　$s^2 x$：样本方差

sx：样本标准差　　n：样本容量　　$\min(x)$：最小值

Q_1：第一四分位数　Med：中位数　　Q_3：第三四分位数

$\max(x)$：最大值

若按 ② 选择“统计计算”，计算器将进入与统计计算类型相对应的统计计算界面。

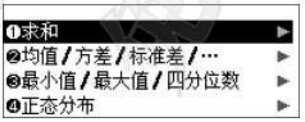




在该界面上可单独调用统计量进行计算。

需要单独调用统计量时，可按 ㊍（目录）打开目录菜单，按 ① 选择“统计”，再进一步选择统计量。





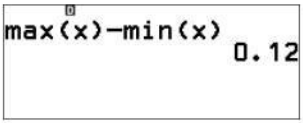
也可按 ㊈ ㊍ (≡)打开目录列表，直接按选项编号对应的按键调用统计量。



以下介绍几个分析化学中常用的统计量的计算方法。

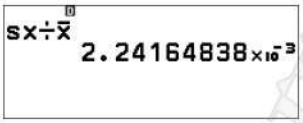
a. 极差 $R = \max(x) - \min(x)$

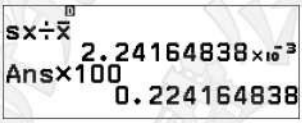
按 ㊍（目录）①（统计）③（最小值 / 最大值 / 四分位数）⑤（max(x)）㊀ ㊍（目录）①（统计）③（最小值 / 最大值 / 四分位数）①（min(x)）㊉ 计算。



b. 相对标准偏差$s_r=\frac{s}{\bar{x}}\times100\%$

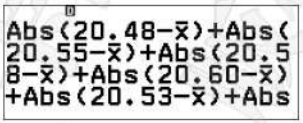
按 ㊍（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）⑤（sx）÷㊍（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）①（$\bar{x}$）㊎ 计算相对标准偏差。如果要得到百分数，再按 ×100㊎。

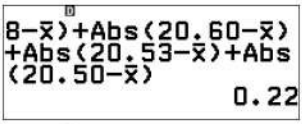


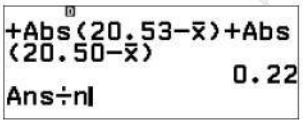


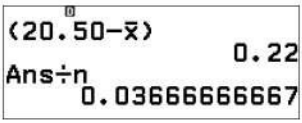
c. 平均偏差$\bar{d}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|x_i-\bar{x}|$和相对平均偏差$\bar{d}_r=\frac{\bar{d}}{\bar{x}}\times100\%$

按 ㊍（目录）④（数值计算）③（绝对值(Abs)）20.48−㊍（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）①（$\bar{x}$）)+㊍（目录）④（数值计算）③（绝对值(Abs)）20.55−㊍（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）①（$\bar{x}$）)+ …… +㊍（目录）④（数值计算）③（绝对值(Abs)）20.50−㊍（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）①（$\bar{x}$）)㊎，然后再按 ÷㊍（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）⑥（n）㊎ 计算平均偏差。

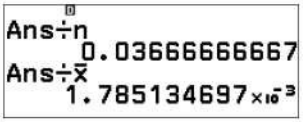








继续按 ÷ ▣（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）① （$\bar{x}$）计算相对平均偏差。如果要得到百分数，再按 ×100 EXE。





3.1.2 应用例题

例 3-1 用光度法测定某试样中微量铜的含量，6 次测定结果分别为 0.21%、0.23%、0.24%、0.25%、0.24%、0.25%，计算单次测定的平均偏差、相对平均偏差、标准偏差、相对标准偏差及极差。

解： 使用 fx-999CN CW II 进行统计计算。

按 ⏏ 打开主屏幕，按 ② 进入“统计”应用；按 ① 选择“单变量统计”，进入单变量统计数据编辑界面。按 0.21 EXE 0.23 EXE 0.24 EXE 0.25 EXE 0.24 EXE 0.25 EXE 输入数据。



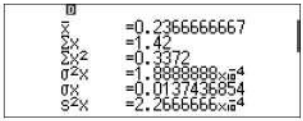


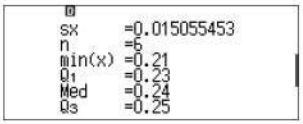


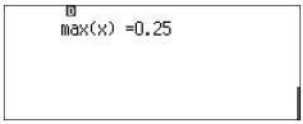


按 OK 或 EXE 打开数据处理菜单，按 ① 选择“单变量统计结果”。









由此得到，平均值$\bar{x}=0.24\%$，标准偏差$s=sx=0.015\%$，最小值$\min(x)=0.21\%$，最大值$\max(x)=0.25\%$，故极差

$$R=\max(x)-\min(x)=0.25\%-0.21\%=0.04\%$$

按⑤或 AC 返回到数据编辑界面，按 OK 打开数据处理菜单，按 ② 选择“统计计算”，进入单变量统计计算界面。

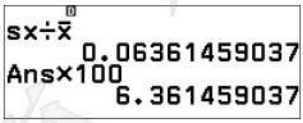






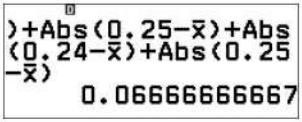
计算相对标准偏差，按 ▣（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）⑤（sx）÷ ▣（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）①（$\bar{x}$）EXE，然后按 ×100 EXE 得到相对标准偏差的百分数。

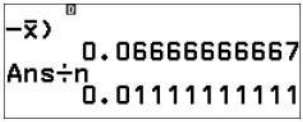




由此得到，相对标准偏差$s_r=6.36\%$。

计算平均偏差，按 ▣（目录）④（数值计算）③（绝对值(Abs)）0.21 − ▣（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）①（$\bar{x}$）) + ▣（目录）④（数值计算）③（绝对值(Abs)）0.23 − ▣（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）①（$\bar{x}$）) + …… + ▣（目录）④（数值计算）③（绝对值(Abs)）0.25 − ▣（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）①（$\bar{x}$）) EXE，然后按 ÷ ▣（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）⑥（n）EXE。

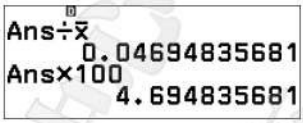




由此得到，平均偏差$\bar{d}=0.011\%$。

计算相对平均偏差，继续按 ÷ ⑩（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）①（$\bar{x}$）EXE，然后按 ×100 EXE 得到相对平均偏差的百分数。





由此得到，相对平均偏差$\bar{d}_r=4.7\%$。

例 3-2 下列两组实验数据的精密度有无显著性差异？（置信度90%）

A 组： 9.56 9.49 9.62 9.51 9.58 9.63

B 组： 9.33 9.51 9.49 9.51 9.56 9.40

解： 比较精密度是否有显著性差异，应使用F检验法，即比较两组数据的样本方差。

查F分布表，$n_1=n_2=6-1=5$，$\alpha=(1-90\%)/2=0.05$的上α分位数为

$$F(5,\ 5)=5.05$$

使用 fx-999CN CW II 计算两组数据的方差之比，与查表结果相比较即可判断实验数据的精密度有无显著性差异。

按 ⏻ 打开主屏幕，按 ② 进入“统计”应用；按 ② 选择“双变量统计”。（注：若两组数据个数不同，则应对两组数据分别使用单变量统计计算方差。）

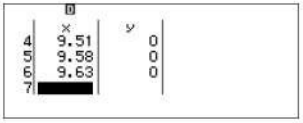


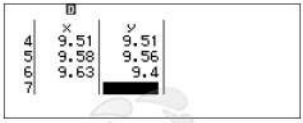




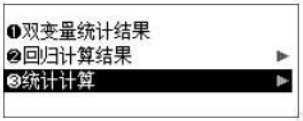
按 9.56 EXE 9.49 EXE 9.62 EXE 9.51 EXE 9.58 EXE 9.63 EXE 在 x 列中输入 A 组数据，然后按 ▽ ▷（或 ▷ ▽）将反色光标移动到 y 列开头，再按 9.33 EXE 9.51 EXE 9.49 EXE

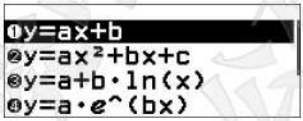
9.51 EXE 9.56 EXE 9.40 EXE 在 y 列中输入 B 组数据。





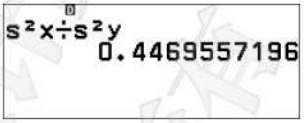
按 OK 打开数据处理菜单，然后按 ③ 选择“统计计算”，再选择任意一个选项（例如按 ① 选择“$y=ax+b$”）。



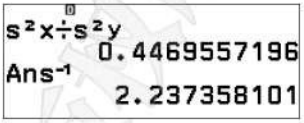




按 MENU（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）④（s^2x）÷ MENU（目录）①（统计）②（均值 / 方差 / 标准差 / …）⓪（s^2y）EXE 计算 A 组数据与 B 组数据的样本方差之比。



该结果小于 1，说明$s_B^2 > s_A^2$。再按 SHIFT ($\blacksquare^{-1}$) EXE 计算s_B^2/s_A^2的值。



由此得到

$$F=\frac{s_B^2}{s_A^2}=2.24<F(5,\ 5)=5.05$$

说明这两组实验数据的精密度没有显著性差异。

3.2 回归分析及预测

分析化学中经常会涉及到求回归方程以及根据回归方程进行预测的问题。利用计算器可求解回归方程的系数，对回归方程的拟合程度进行评价，以及根据回归方程进行预测。

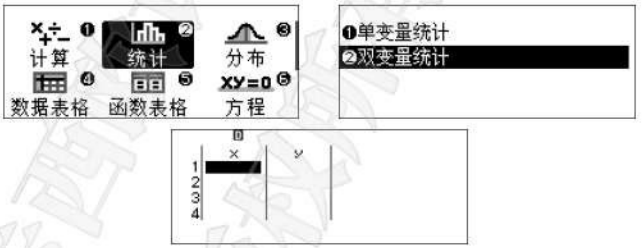
例 3-3 用吸光光度法测定合金钢中 Mn 的含量，测得的数据如下：

m(Mn)/μg	0	0.02	0.04	0.06	0.08	0.10	0.12
吸光度 A	0.032	0.135	0.187	0.268	0.359	0.435	0.511

求标准曲线回归方程，计算相关系数，并利用回归方程计算吸光度为 0.242 时，未知样品中的 Mn 含量。

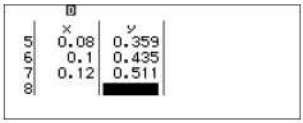
解： 设 Mn 含量为 x [μg]，吸光度为 y，使用 fx-999CN CW II 进行回归计算。

按 ⏏ 打开主屏幕，按 ② 进入“统计”应用；按 ② 选择“双变量统计”，此时显示双变量统计数据编辑界面。

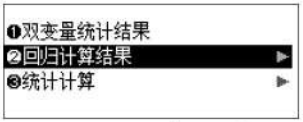


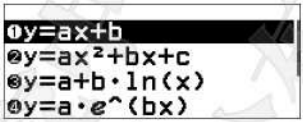
按 0 ⏎ 0.02 ⏎ 0.04 ⏎ 0.06 ⏎ 0.08 ⏎ 0.10 ⏎ 0.12 ⏎ 输入 x 列数据，然后按 ▼ ▶（或 ▶ ▼）将反色光标移动到 y 列开头，按 0.032 ⏎ 0.135 ⏎ 0.187 ⏎ 0.268 ⏎ 0.359 ⏎ 0.435 ⏎ 0.511 ⏎ 输入 y 列数据。

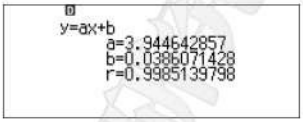




按 OK 或 EXE 打开数据处理菜单，按 ② 选择“回归计算结果”，再按 ① 选择“$y=ax+b$”，得到线性回归方程系数a，b以及相关系数r的计算结果。







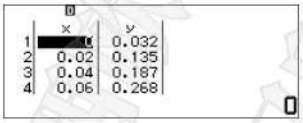
由此得到，标准曲线回归方程为

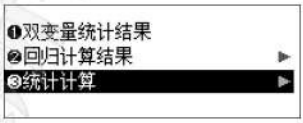
$$y=0.0386+3.9446x$$

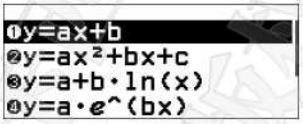
相关系数 $r=0.9985$。

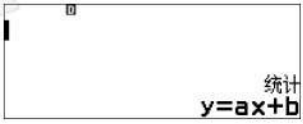
使用回归预测功能，计算吸光度为0.242时，未知样品中的 Mn 含量。

按 ↩ 或 AC 返回到统计数据编辑界面。按 OK 或 EXE 打开数据处理菜单，按 ③ 选择“统计计算”，再按 ① 选择“$y=ax+b$”，此时显示线性回归的统计计算界面。









根据题意，已知吸光度（y值），需要求 Mn 含量（x的估计值$\hat{x}$）。先输入0.242，再按 ⑩（目录）①（统计）④（回归）④（$\hat{x}$）输入求估计值$\hat{x}$的命令，按 EXE 执行计算。



由此得到，未知样品中 Mn 的含量估计值为0.052 μg。

3.3 方程或方程组的求解

3.3.1 功能说明

分析化学中有些分析方法会涉及到方程或方程组的求解问题，使用 fx-999CN CW II 求解方程或方程组时，需要在“方程”应用中进行操作。

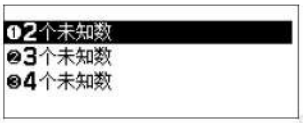
按 ⏢ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用。

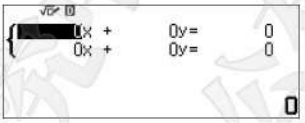


计算器提供三类方程（组）的求解功能，其中“多项式方程”和“方程求解”的功能说明可参考 2.3.1 节（第 9 页）和 2.4.1 节（第 13 页），这里对“线性方程组”的功能进行说明。

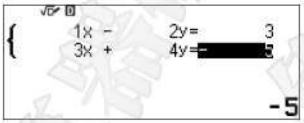
以求解二元线性方程组$\begin{cases} x-2y=3 \\ 3x+4y=-5 \end{cases}$为例，说明在计算器上求解线性方程组的步骤。

按 ① 选择“线性方程组”，此时显示未知数个数的选择界面；按 ① 选择“2 个未知数”，此时显示标准形式的二元线性方程组的系数输入界面。





按 1 EXE (−) 2 EXE 3 EXE 3 EXE 4 EXE (−) 5 EXE 输入系数。



按 EXE 执行求解，得到x的解，再按 EXE 得到y的解。如果求解结果为分数，可在显示解的时候，按 $\frac{S\leftrightarrow D}{a\frac{b}{c}}$ 将结果转换为小数。









3.3.2 线性方程组应用例题

例 3-4 称取不纯的锆、铪混合氧化物0.1000 g，用杏仁酸重量法测定锆、铪的含量，灼烧后，得ZrO_2+HfO_2共0.0994 g，将沉淀溶解后，取1/4 体积的溶液，用 EDTA 滴定，若用去0.01000 mol · L^{-1} EDTA

20.10 mL。求试样中ZrO_2和HfO_2的质量分数。

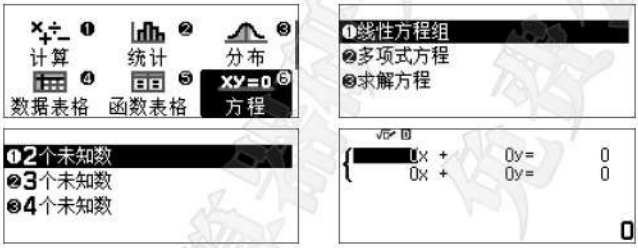
（已知$M_r(ZrO_2)=123.2$，$M_r(HfO_2)=210.5$。）

解：设混合氧化物中ZrO_2为x g，HfO_2为y g，依题意得到

$$\begin{cases} x+y=0.0994 \\ \dfrac{x}{123.2}+\dfrac{y}{210.5}=4\times0.01000\times20.10\times10^{-3} \end{cases}$$

使用 fx-999CN CW II 求解该线性方程组。

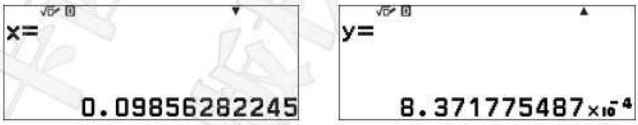
按 ⓐ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ① 选择“线性方程组”，按 ① 选择“2 个未知数”，进入标准形式的二元线性方程组输入系数的界面。



按 1 EXE 1 EXE 0.0994 EXE 1 ▤ 123.2 EXE 1 ▤ 210.5 EXE 4 × 0.01 × 20.10 ×10^ (−) 3 EXE 输入系数。



按 EXE 执行求解，得到x的解；继续按 EXE 得到y的解。



由此得到，$x=m(ZrO_2)\approx0.0986$ g，$y=m(HfO_2)\approx0.0008$ g。

故 $w(ZrO_2)=98.6\%$，$w(HfO_2)=0.8\%$。

例 3-5　称取0.4000 g含NaCl和NaBr的试样，待溶解后用0.1050 $mol \cdot L^{-1}$ $AgNO_3$标准溶液滴定，终点时用去26.20 mL。另称取同样质量的试样，溶解后加过量等浓度的$AgNO_3$溶液，得到的沉淀经过滤、洗涤、烘干后得到0.4502 g沉淀。计算试样中NaCl和NaBr的质量分数。

（已知：$M_r(NaCl)=58.44$，$M_r(NaBr)=102.9$，
$M_r(AgCl)=143.3$，$M_r(AgBr)=187.8$。）

解： 设$m(NaCl)=x$ g，$m(NaBr)=y$ g，由已知条件可得

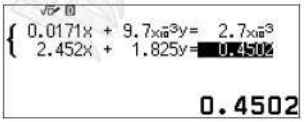
$$\begin{cases} \dfrac{x}{58.44}+\dfrac{y}{102.9}=0.1050\times26.20\times10^{-3} \\ 143.3\times\dfrac{x}{58.44}+187.8\times\dfrac{y}{102.9}=0.4502 \end{cases}$$

使用 fx-999CN CW II 求解该线性方程组。

按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ① 选择“线性方程组”，按 ① 选择“2个未知数”，进入标准形式的二元线性方程组输入系数的界面。

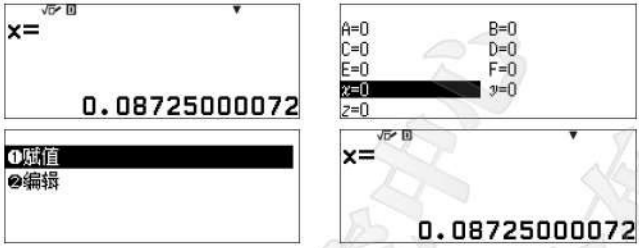


按 1 ⏏ 58.44 EXE 1 ⏏ 102.9 EXE 0.1050 × 26.20 EXP (−) 3 EXE
143.3 ⏏ 58.44 EXE 187.8 ⏏ 102.9 EXE 0.4502 EXE 输入系数。



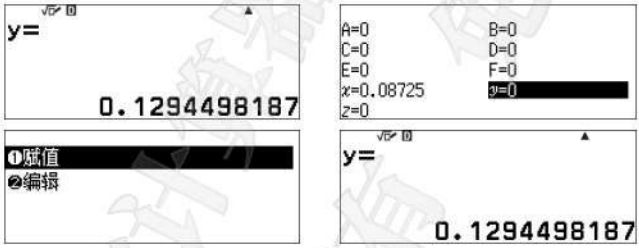
按 EXE 执行求解，得到x的解。按 Ans（变量）打开变量管理器，然后按 ∧ ∧

（或 ⊙⊙⊙）将反色光标移动到变量x上，按[OK]打开变量操作菜单，按 ① 选择“赋值”，将结果赋值给变量x。



由此得到，$m(\mathrm{NaCl})=0.0873\ \mathrm{g}$。

继续按 [EXE] 得到y的解。按[Shift][RCL]（变量）打开变量管理器，然后按⊙⊙（或⊙⊙⊙⊙）将反色光标移动到变量y上，按[OK]打开变量操作菜单，按 ① 选择“赋值”，将结果赋值给变量y。

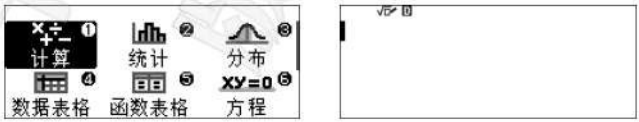


由此得到，$m(\mathrm{NaBr})=0.1294\ \mathrm{g}$。

质量分数按下式计算：

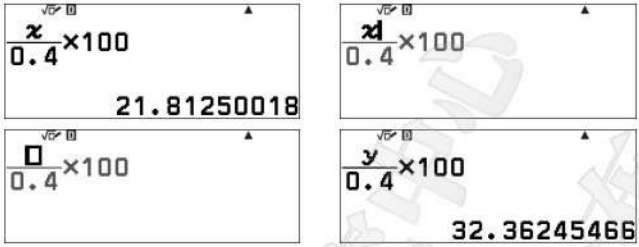
$$w(\mathrm{NaCl})=\frac{m(\mathrm{NaCl})}{0.4000\ \mathrm{g}}\times 100\%,\quad w(\mathrm{NaBr})=\frac{m(\mathrm{NaBr})}{0.4000\ \mathrm{g}}\times 100\%$$

按 ⌂ 打开主屏幕，按 ① 进入“计算”应用。



按[x]⊟0.4⊙⊗100[EXE] 计算NaCl的质量分数，然后按⊙进入表达式编辑

状态，按 ▷ ▷ 将光标移动到 x 的后面，按 ⌫ 删除 x，再按 ⬆ . (y) 输入变量 y，按 EXE 执行计算，得到NaBr的质量分数。



由此得到，$w(\mathrm{NaCl})=21.81\%$，$w(\mathrm{NaBr})=32.36\%$。

3.3.3 多项式方程应用例题

例 3-6 定量计算 $2\times10^{-6}\ \mathrm{mol\cdot L^{-1}}$ 的 d-酒石酸溶液的pH。

（已知25 °C下 d-酒石酸的 $K_{a1}=9.1\times10^{-4}$，$K_{a2}=4.3\times10^{-5}$。）

解： d-酒石酸的 K_{a1} 和 K_{a2} 差别不大，且浓度较低，因此需要根据二元弱酸溶液 H^+ 浓度的精确计算公式来计算：

$$[H^+]^4+K_{a1}[H^+]^3+(K_{a1}K_{a2}-K_{a1}c-K_w)[H^+]^2$$
$$-(K_{a1}K_w+2K_{a1}K_{a2}c)[H^+]-K_{a1}K_{a2}K_w=0$$

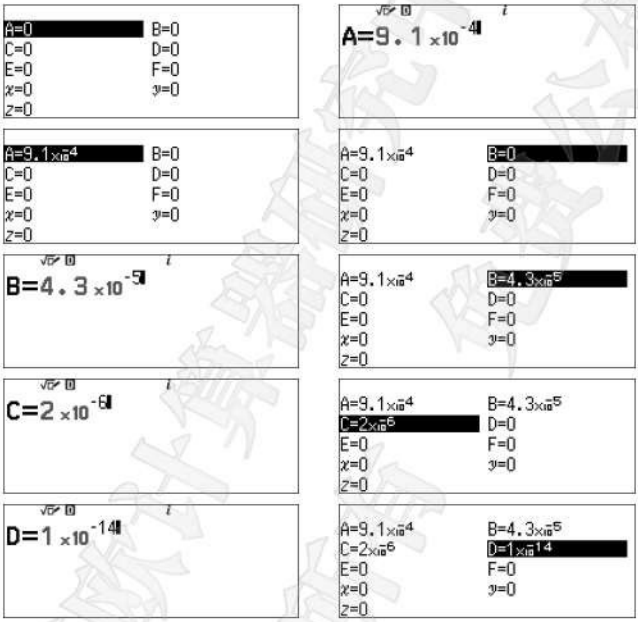
将已知数据代入，求解出 $[H^+]$ 后，再计算pH。

按 ⏻ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ② 选择“多项式方程”，按 ③ 选择“$ax^4+bx^3+cx^2\cdots+e=0$”，进入标准形式的一元四次方程输入系数的界面。



由于原方程中需要多次使用d-酒石酸的解离常数、水的离子积以及溶液浓度，这里可以将这些参数先赋值给一些变量，从而提高输入的效率。

按 (变量)打开变量管理器，当反色光标位于变量 A 上时，输入 9.1 (-) 4，按 (EXE) 确认，将K_{a1}赋值给变量 A。按 ▶ 将反色光标移动到变量 B 上，输入 4.3 (-) 5，按 (EXE) 确认，将K_{a2}赋值给变量 B。采用类似的方法，将溶液浓度$c=2\times10^{-6}$ [mol · L^{-1}]赋值给变量 C，将水的离子积$K_w=1\times10^{-14}$赋值给变量 D。



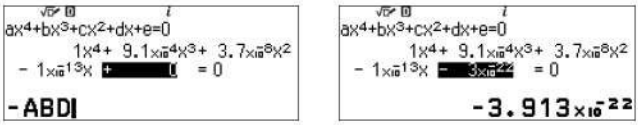
按 ◀ 或 (AC) 返回到方程系数输入界面输入系数，按键过程如下：

1 (EXE) ↑ ④ （A） (EXE)

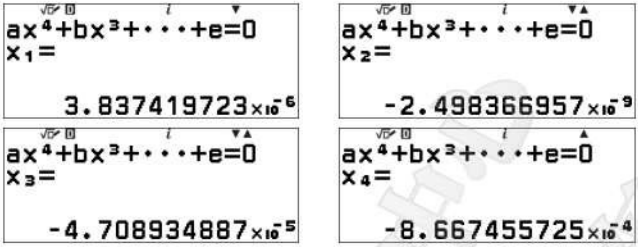
↑ ④ （A） ↑ ⑤ （B） (-) ↑ ④ （A） ↑ ⑥ （C） (-) ↑ ① （D） (EXE)

(-) (↑ ④ （A） ↑ ① （D） (+) 2 ↑ ④ （A） ↑ ⑤ （B） ↑ ⑥ （C）) (EXE)

(-) ↑ ④ （A） ↑ ⑤ （B） ↑ ① （D） (EXE)



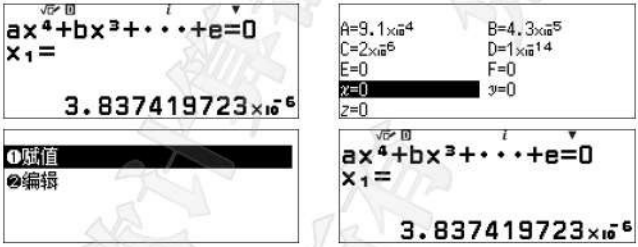
按 EXE 执行求解，得到第一个解x_1；继续按三次 EXE，依次得到x_2，x_3，x_4。



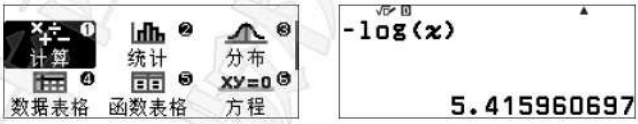
以上四个解中，只有x_1为正实数，符合题意，故舍去其他解，即溶液中的H^+的浓度为

$$[H^+]=3.8\times10^{-6}\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$$

按 ∧∧∧ 切换到显示第一个解x_1的界面，按 (变量) 打开变量管理器，按 ∧∧（或 ∨∨∨）将反色光标移动到变量x上，然后按 OK 打开变量操作菜单，按 ① 选择“赋值”，将求解的结果赋值给变量x。



按 ⏻ 打开主屏幕，按 ① 进入“计算”应用。按 (−) ⬆ ■² (log) x) EXE 计算溶液的pH。



由此得到，$2\times10^{-6}\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$的$d$-酒石酸溶液的pH值为5.4。

3.3.4 方程求解器应用例题

例 3-7 今有0.25 mol · L^{-1}乳酸溶液500 mL，需加入多少克NaOH，才能使溶液的pH等于4.10？（已知乳酸的$pK_a = 3.85$。）

解： 设加入NaOH的量为x mmol，由于浓度较大，可以采用最简式计算：

$$pH = pK_a + \lg \frac{c(B^-)}{c(HB)}$$

代入数据，得

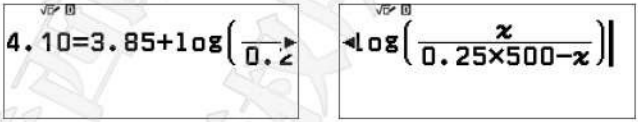
$$4.10 = 3.85 + \lg \frac{x}{0.25 \times 500 - x}$$

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

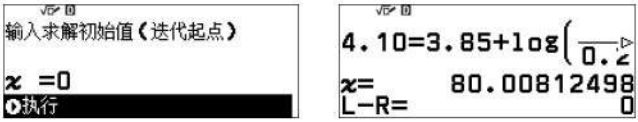
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。



按 4.10 ⏫ ◁ (=) 3.85 ⊕ ⏫ ■² (log) ⓧ ⓑ 0.25 ⊗ 500 ⊖ ⓧ ▷) 输入方程。



按 EXE 确认，进入输入求解初始值的界面。按 ▽ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 EXE 执行求解。



解得$x=80$。

由$M_r(\mathrm{NaOH})=40$，得到

$$m(\mathrm{NaOH})=[M_r(\mathrm{NaOH})\times x\times 10^{-3}]\ \mathrm{g}=(40\times 80\times 10^{-3})\ \mathrm{g}=3.2\ \mathrm{g}$$

故需要加入3.2 g NaOH，才能使溶液的pH＝4.10。

例 3-8 用乙酸乙酯萃取鸡蛋面条中的胆固醇，试样质量为10 g，面条中胆固醇含量为2.0%，如果分配比为3，水相20 mL，用50 mL 乙酸乙酯萃取，需要萃取多少次可以除去鸡蛋面条中95%的胆固醇？（乙酸乙酯总体积为50 mL）。

解： 除去鸡蛋面条中95%的胆固醇，即萃取率达95%。

根据n次萃取的萃取率计算公式

$$E_n=1-\left(\frac{V_w}{DV_o+V_w}\right)^n$$

代入已知数据，得

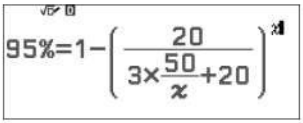
$$95\%=1-\left(\frac{20}{3\times 50/n+20}\right)^n$$

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

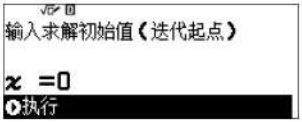
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。

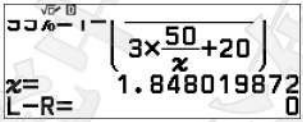


在计算器上，使用变量x代替萃取次数n。按 95㊱（目录）③（概率）①（百分号(%)）⬆ ◁ (=)1⊖ (20㊲3⊗50㊲ ⓧ ▷ ⊕20▷) ▪ ⓧ输入方程。



按 EXE 确认，进入输入求解初始值的界面。按 ▽ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 EXE 执行求解。





解得$x=1.848$，即至少需要萃取 2 次才能除去鸡蛋面条中95%的胆固醇。

3.4 指数与对数计算

本节所有操作均在“计算”应用中进行。

按 ⌂ 打开主屏幕，然后按 ① 进入“计算”应用。





3.4.1 功能说明

分析化学中经常需要使用指数与对数的计算，例如H^+浓度和pH值的换算、配体的副反应系数计算、氧化还原滴定的条件平衡常数计算等问题中都有涉及。

指数函数的计算一般会用到以 10 为底或以 e 为底的指数函数。在计算器上计算以 10 为底的指数函数时，先输入 10，然后按 ▪^□，再输入指数；计算以 e 为底的指数函数时，先按 ⇧ (−) (*e*) 输入 e，然后

按 ▪ ，再输入指数。

对数函数的计算一般会用到以 10 为底的常用对数 lg、以 e 为底的自然对数 ln 以及任意底的对数。在计算器上计算常用对数时，按 ⬆ ▪ (log) 输入“log”；计算自然对数时，按 ⬆ log (ln) 输入“ln”；计算任意底的对数时，按 log 输入“$\log_{\blacksquare}\square$”模板。

3.4.2 应用例题

例 3-9 用 $0.10\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ NaOH 滴定等浓度的 HAc，以酚酞为指示剂（$\text{p}K_{\text{HIn}}=9.1$），计算终点误差。

解： 由题意可知，滴定终点的 $\text{pH}_{\text{sp}}=9.1$，$c_{\text{sp}}(\text{HAc})\approx c_{\text{sp}}(\text{HAc})=0.050\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$；查得 HAc 的解离常数 $K_{\text{a}}=1.8\times10^{-5}$。

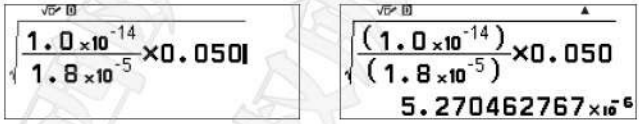
由此得到

$$[\text{OH}^-]_{\text{sp}}=\sqrt{\frac{K_{\text{w}}}{K_{\text{a}}}c_{\text{sp}}(\text{HAc})}$$

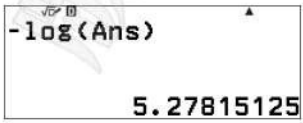
$$=\sqrt{\frac{1.0\times10^{-14}}{1.8\times10^{-5}}\times0.050}\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}=5.27\times10^{-6}\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$$

使用 fx-999CN CW II 计算。

按 √ 1.0 x10 (−) 14 > ▦ 1.8 x10 (−) 5 > > × 0.050 EXE 计算 $[\text{OH}^-]_{\text{sp}}$。



按 (−) ⬆ ▪ (log) ⬆ EXE (Ans)) EXE 计算 pOH_{sp}。



由此得到：

$$pOH_{sp}=5.28 \qquad pH_{sp}=14-pOH_{sp}=14-5.28=8.72$$

$$\Delta pH=9.1-8.72=0.38$$

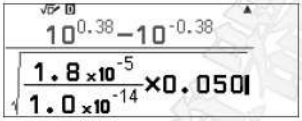
终点误差由表达式

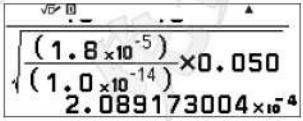
$$E_t=\frac{10^{\Delta pH}-10^{-\Delta pH}}{\sqrt{\frac{K_a}{K_w}c_{sp}(HAc)}}\times 100\%$$

计算，代入以上数据，得

$$E_t=\frac{10^{0.38}-10^{-0.38}}{\sqrt{\frac{1.8\times10^{-5}}{1.0\times10^{-14}}\times 0.050}}\times 100\%$$

按 ⓜ10◉0.38▷ ⊖10◉(−)0.38▽ √■1.8 ×10^ (−)5▷ ⓜ1.0 ×10^ (−)14▷▷ ⊗0.050 EXE 计算E_t。





如果要得到百分数，再按 ⊗100 EXE。



由此得到，终点误差 $E_t=0.021\%$。

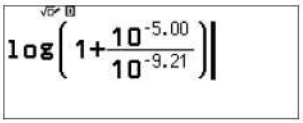
例 3-10 计算pH＝5.00时，氰化物配体的酸效应系数$\alpha_{CN(H)}$以及$\lg\alpha_{CN(H)}$。（已知HCN的$pK_a=9.21$。）

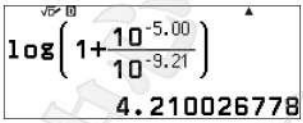
解： 由于HCN是一元酸，因此其酸效应系数

$$\alpha_{CN(H)}=1+K^H[H^+]=1+\frac{[H^+]}{K_a}=1+\frac{10^{-5.00}}{10^{-9.21}}$$

使用 fx-999CN CW II 计算。

酸效应系数$\alpha_{CN(H)}$一般写成以 10 为底的指数形式，故需要计算其常用对数。按 ⏫ ■² (log) 1 ➕ 🖩 10 ■^ ➖ 5.00 ⏬ 10 ■^ ➖ 9.21 ▶ ▶) 输入算式，然后按 EXE 执行计算。





由此得到，$\alpha_{CN(H)}=10^{4.21}$，即$\lg\alpha_{CN(H)}=4.21$。

例 3-11　计算在1 mol · L^{-1} HCl 介质中，Fe^{3+}与Sn^{2+}反应的平衡常数及化学计量点时反应进行的程度。

解： 反应为

$$2Fe^{3+}+Sn^{2+}\rightleftharpoons 2Fe^{4+}+Sn^{4+}$$

已知$\varphi^{\ominus\prime}(Fe^{3+}/Fe^{2+})=0.68\ V$，$\varphi^{\ominus\prime}(Sn^{4+}/Sn^{2+})=0.14\ V$，两电对电子转移数$z_1=1$，$z_2=2$，故$z=2$。

由条件平衡常数K'的计算式

$$\lg K'=\lg\frac{c^{z_2}(Red_1)c^{z_1}(Ox_2)}{c^{z_2}(Ox_1)c^{z_1}(Red_2)}=\frac{(\varphi_1^{\ominus\prime}-\varphi_2^{\ominus\prime})z}{0.059\ V}$$

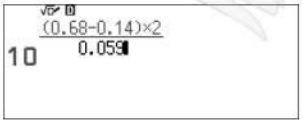
代入数据，得到

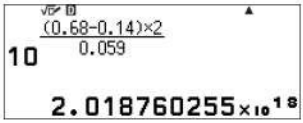
$$\lg K'=\frac{[\varphi^{\ominus\prime}(Fe^{3+}/Fe^{2+})-\varphi^{\ominus\prime}(Sn^{4+}/Sn^{2+})]z}{0.059\ V}$$

$$=\frac{(0.68\ V-0.14\ V)\times 2}{0.059\ V}=18.31$$

使用 fx-999CN CW II 计算K'。

按 10 ■^ 🖩 (0.68 ➖ 0.14) ⊗ 2 ⏬ 0.059 输入算式，然后按 EXE 执行计算。





由此得到，$K'=2.02\times10^{18}$。根据

$$\frac{c^2(Fe^{2+})c(Sn^{4+})}{c^2(Fe^{3+})c(Sn^{2+})}=\frac{c^3(Fe^{2+})}{c^3(Fe^{3+})}=K'=2.02\times10^{18}$$

可得

$$\frac{c(Fe^{2+})}{c(Fe^{3+})}=\sqrt[3]{K'}$$

按 3 ⬆ √■ (√□) ⬆ EXE (Ans) EXE 计算$c(Fe^{2+})/c(Fe^{3+})$。



可认为溶液中的Fe^{3+}有99.999%被还原至Fe^{2+}，所以，此条件下反应进行得很完全。

卡西欧计算器中心 版权所有 免费公布

4 物理化学计算应用

4.1 定积分计算

本节所有操作均在“计算”应用中进行。

按 ⏏ 打开主屏幕，然后按 ① 进入“计算”应用。





有关定积分的功能说明，可参考第 2.2.1 节（第 7 页）的内容。

例 4-1 在423 K，100 kPa时，将1 mol $NH_3(g)$等温压缩到体积等于10 dm^3，假定符合 van der Waals 方程式，求最少需做多少功？（已知 van der Waals 常数$a=0.4169\ Pa\cdot m^6\cdot mol^{-2}$，$b=3.71\times10^{-5}\ m^3\cdot mol^{-1}$，在423 K，100 kPa时$V_m=0.0351\ m^3$。）

解： van der Waals 气体状态方程为

$$\left(p+\frac{an^2}{V^2}\right)(V-nb)=nRT$$

则有

$$p=\frac{nRT}{V-nb}-\frac{an^2}{V^2}$$

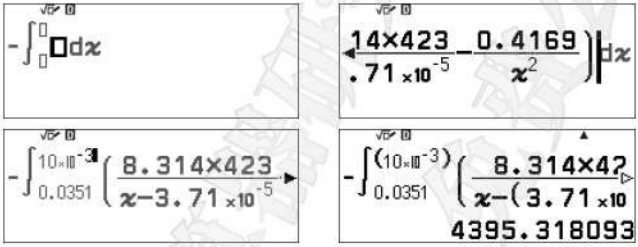
需做的功为

$$W=-\int_{V_1}^{V_2}p\mathrm{d}V=-\int_{V_1}^{V_2}\left(\frac{nRT}{V-nb}-\frac{an^2}{V^2}\right)\mathrm{d}V$$

$$=-\int_{0.0351}^{10\times10^{-3}}\left(\frac{8.314\times423}{V-3.71\times10^{-5}}-\frac{0.4169}{V^2}\right)\mathrm{d}V$$

使用 fx-999CN CW II 计算。

在计算器上使用变量x替代变量V。按 (−)，然后按 ↑ ⊗ (∫dx) 输入定积分模板；按 ( ) 8.314 ⊗ 423 ▽ x) − 3.71 EXP (−) 5 ▷ ▷ − 0.4169) x² ▷) 输入被积式；按 ▽ 将光标移动到积分下限，输入 0.0351；按 △ 将光标移动到积分上限，输入 10 EXP (−) 3；按 EXE 执行计算。



由此得到，$W=4395.3\ \mathrm{J}$。

所以，将1 mol的$NH_3(g)$等温压缩到体积为10 dm^3时体系需得到4395.3 J的功，即需对体系做4395.3 J的功。

例 4-2 已知CO_2的$C_{p,m}=[32.22+22.18\times10^{-3}(T/\mathrm{K})-3.49\times10^{-6}(T/\mathrm{K})^2]\ \mathrm{J\cdot mol^{-1}\cdot K^{-1}}$，今将88 g，0 °C的气体放在一温度为100 °C的恒温器中加热，试求算其ΔS，并与实际过程的热温商进行比较。

解： 由$m(CO_2)=88\ \mathrm{g}$，可得$n(CO_2)=\dfrac{m(CO_2)}{M(CO_2)}=\dfrac{88}{44}\ \mathrm{mol}=2\ \mathrm{mol}$。

对物质的量一定的可逆等压、变温过程，其熵变

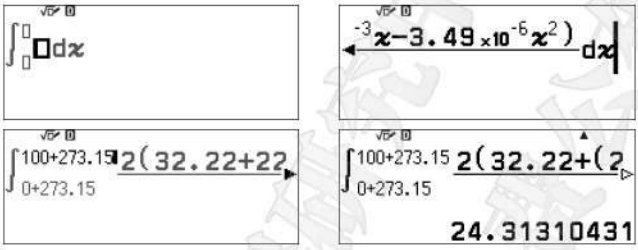
$$\Delta S=\int_{T_1}^{T_2}\frac{nC_{p,m}}{T}\mathrm{d}T$$

代入已知条件，得

$$\Delta S=\int_{0+273.15}^{100+273.15}\frac{2[32.22+(22.18\times10^{-3})T-(3.49\times10^{-6})T^2]}{T}\mathrm{d}T\ (\mathrm{J\cdot K^{-1}})$$

使用 fx-999CN CW II 计算。

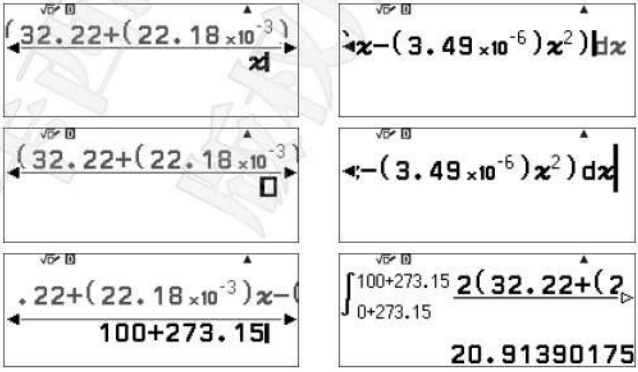
在计算器上使用变量x代替变量T。按 ⏫ ⊗ (∫) ⏬ 2 (32.22 ⊕ 22.18 $\times10^{x}$ ⊖ 3 ▷ x^2 ⊖ 3.49 $\times10^{x}$ ⊖ 6 ▷ x^2 x^2) ▽ x^2 ▽ 0 ⊕ 273.15 △ 100 ⊕ 273.15 输入积分式，然后按 EXE 执行计算。



由此得到，$\Delta S=24.31\ \mathrm{J\cdot K^{-1}}$。

热温商由$\dfrac{Q}{T}=\dfrac{\int_{T_1}^{T_2}nC_{p,\mathrm{m}}\mathrm{d}T}{T_2}$计算。

计算热温商无需重新输入算式，按 ◁ 进入编辑算式的状态，然后按 ◁ ◁ 将光标移动到分母的x后面，按 DEL 删除x，再按 DEL 删除分数模板，此时变为计算Q的积分式；按 ▷ 将光标移到定积分模板之后，按 ⏬ 100 ⊕ 273.15 输入T_2，按 EXE 执行计算。



由此得到，$\frac{Q}{T}=20.91\ \mathrm{J\cdot K^{-1}}$，即$\Delta S>\frac{Q}{T}$，故此过程为不可逆加热过程。

4.2 求导计算

本节所有操作均在“计算”应用中进行。

按 ⏏ 打开主屏幕，然后按 ① 进入“计算”应用。



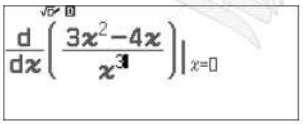


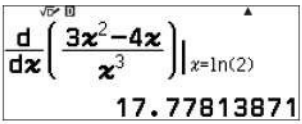
4.2.1 功能说明

fx-999CN CW II 可进行数值求导的计算，一般通过导数模板来计算函数的导数值。导数模板位于计算器面板 ÷ 键的第二功能上，即按 ⇧ ÷ ($\frac{d}{dx}$■) 进行调用。

例如，计算函数$f(x)=\frac{3x^2-4x}{x^3}$在$x=\ln 2$处的导数值，按键过程如下：

按 ⇧ ÷ ($\frac{d}{dx}$■) 输入导数模板，然后按 ▣ 3 ⓧ ■² ⊖ 4 ⓧ ⓥ ⓧ ■□ 3 输入函数表达式；按 ▷ ▷ ▷ 将光标移动到“$x=\square$”的框中，按 ⇧ ㏒ (ln) 2) 输入ln 2；按 EXE 执行计算。





4.2.2 应用例题

例 4-3 从实验测得乙烯的蒸气压与温度的关系为

$$\ln\frac{p}{\mathrm{Pa}}=-\frac{1921\ \mathrm{K}}{T}+1.75\ln\frac{T}{\mathrm{K}}-1.928\times10^{-2}\frac{T}{\mathrm{K}}+12.26$$

试求乙烯在正常沸点169.5 K时的摩尔蒸发焓。

解： 根据 Clausius-Clapeyron 方程的微分形式

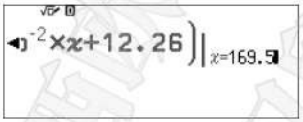
$$\frac{\mathrm{d}\ln p}{\mathrm{d}T}=\frac{\Delta_{\mathrm{vap}}H_{\mathrm{m}}}{RT^2}$$

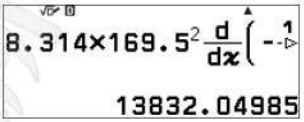
由题意可得

$$\begin{aligned}\Delta_{\mathrm{vap}}H_{\mathrm{m}}&=RT^2\frac{\mathrm{d}\ln p}{\mathrm{d}T}\bigg|_{T=169.5\ \mathrm{K}}\\&=RT^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}T}\left(-\frac{1921\ \mathrm{K}}{T}+1.75\ln\frac{T}{\mathrm{K}}-1.928\times10^{-2}\frac{T}{K}+12.26\right)\bigg|_{T=169.5\ \mathrm{K}}\end{aligned}$$

使用 fx-999CN CW II 计算。

在计算器上，用变量x代替T。按 8.314⊗169.5(x²)，然后按 ⬆ ÷ (d/dx■) 输入导数模板；按 (−)1921(■) x) + 1.75⬆ 10^■ (ln) x) − 1.928 10^■ (−)2) ⊗ x + 12.26 输入函数表达式；按) 将光标移动到“$x=\square$”的框中，输入 169.5，按 EXE 执行计算。





由此得到，$T=169.5$ K时的摩尔蒸发焓为13832.05 J · mol^{-1}。

例 4-4 在448～688 K的温度区间内，用分光光度计研究下面的气相反应：

$$\mathrm{I_2(g)+环戊烯(g)\rightleftharpoons 2HI(g)+环戊二烯(g)}$$

得到标准平衡常数与温度的关系式为

$$\ln K_p^{\ominus} = 17.39 - \frac{51034\ \mathrm{K}}{4.575T}$$

试计算在573 K时反应的$\Delta_r G_m^{\ominus}$，$\Delta_r H_m^{\ominus}$和$\Delta_r S_m^{\ominus}$。

解：由化学平衡的等温方程式，可得

$$\Delta_r G_m^{\ominus} = -RT\ln K_p^{\ominus} = -RT\left(17.39 - \frac{51034\ \mathrm{K}}{4.575T}\right)$$

由热力学基本公式$\mathrm{d}G = -S\mathrm{d}T + V\mathrm{d}p$，可得

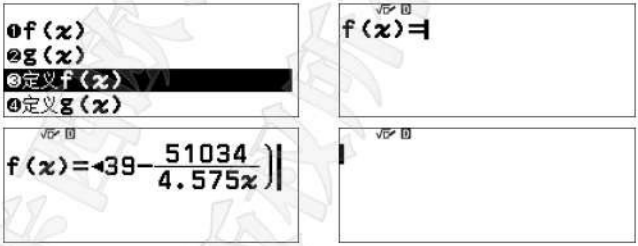
$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -S, \quad \text{即} \quad \Delta_r S_m^{\ominus} = -\left(\frac{\partial \Delta_r G_m^{\ominus}}{\partial T}\right)_p$$

由 Gibbs-Helmholtz 方程$\left[\frac{\partial(\Delta G/T)}{\partial T}\right]_p = -\frac{\Delta H}{T^2}$，得

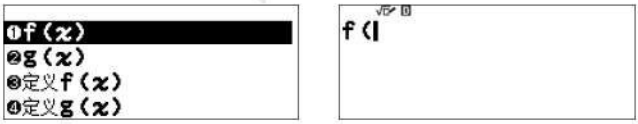
$$\Delta_r H_m^{\ominus} = -T^2\left[\frac{\partial(\Delta_r G_m^{\ominus}/T)}{\partial T}\right]_p$$

使用 fx-999CN CW II 计算。为了方便计算各参数，先在计算器上将$\Delta_r G_m^{\ominus}$的表达式定义到函数管理器中，后续过程中可直接调用函数简化计算。

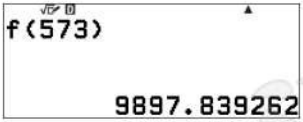
在计算器上，用变量x代替T。按 fx（函数）打开函数管理器，按 ③ 选择“定义$f(x)$”。按 (−) 8.314 x (17.39 − 51034 ÷ 4.575 x) 输入$\Delta_r G_m^{\ominus}$的表达式，按 EXE 完成$f(x)$的定义。



按 fx（函数）①（f() 调用函数$f(x)$。

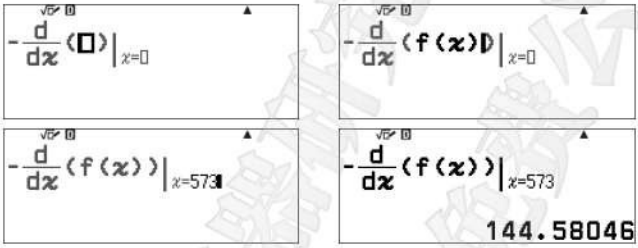


继续输入 573①，按 EXE 执行计算。



由此得到，$\Delta_r G_m^{\ominus} = 9897.84\ \mathrm{J \cdot mol^{-1}}$。

按 (−)，然后按 ↑ ÷ (d/dx■) 输入导数模板；按 f∞（函数）①（f()）x) 输入$\Delta_r G_m^{\ominus}$；按 ▷ 将光标移动到“$x = \square$”的框中，输入 573；按 EXE 执行计算。



由此得到，$\Delta_r S_m^{\ominus} = 144.58\ \mathrm{J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}}$。

按 ▷ 编辑算式，然后按 ▷ 将光标移动到负号后面，输入 573x²；再按 ▷ ▷ ▷ ▷ 将光标移动到 $f(x)$ 的后面，按 DEL x 将需要求导的函数修改为 $\Delta_r G_m^{\ominus}/T$，按 EXE 执行计算。



由此得到，$\Delta_r H_m^{\ominus} = 92742.44\ \mathrm{J \cdot mol^{-1}}$。

4.3 线性方程组求解

有关线性方程组的功能说明，可参考第 3.3.1 节（第 38 页）的相关内容。

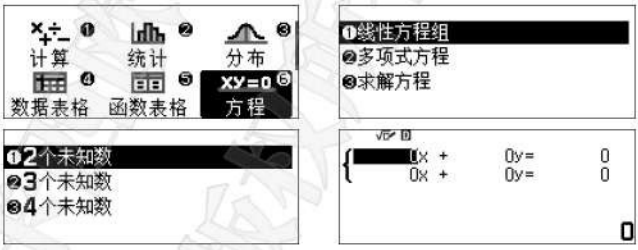
例 4-5 液体 A 与液体 B 能形成理想液态混合物，在343 K时，1 mol 纯 A 与2 mol 纯 B 形成的理想液态混合物的总蒸气压为50.66 kPa，若在液态混合物中再加入3 mol 纯 A，则液态混合物的总蒸气压为 70.93 kPa。试求纯 A 和纯 B 的饱和蒸气压。

解： 由 $p = p_A^* x_A + p_B^* x_B$，可得如下方程组：

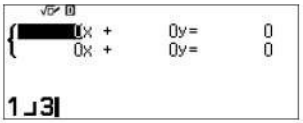
$$\begin{cases} 50.66\ \text{kPa} = \dfrac{1}{3} p_A^* + \dfrac{2}{3} p_B^* \\ 70.93\ \text{kPa} = \dfrac{4}{6} p_A^* + \dfrac{2}{6} p_B^* \end{cases}$$

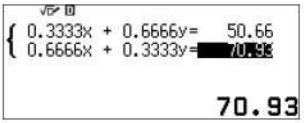
使用 fx-999CN CW II 求解该线性方程组。

按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ① 选择“线性方程组”，按 ① 选择“2 个未知数”，此时显示标准形式的二元线性方程组的系数输入界面。



在计算器上，使用 x，y 分别代替 p_A^*，p_B^*。按 1⏎3⏎2⏎3⏎50.66⏎4⏎6⏎2⏎6⏎70.93⏎ 输入系数。





按 EXE 执行求解，得到x的解，按 S⇔D 将结果转换为小数形式；再按 EXE 得到y的解，按 S⇔D 将结果转换为小数形式。









即纯 A 的饱和蒸气压为91.20 kPa，纯 B 的饱和蒸气压为30.39 kPa。

4.4 多项式方程求解

有关多项式方程的功能说明，可参考第 2.3.1 节（第 9 页）的相关内容。

例 4-6 若甲烷在203 K，2533.1 kPa 条件下服从 van der Waals 方程，试求其摩尔体积。

解： 由 van der Waals 气体状态方程

$$\left(p+\frac{a}{V_{\mathrm{m}}^2}\right)(V_{\mathrm{m}}-b)=RT$$

将该方程展开，得

$$pV_{\mathrm{m}}+\frac{a}{V_{\mathrm{m}}}-bp-\frac{ab}{V_{\mathrm{m}}^2}=RT$$

化为关于V_m的一元三次方程，得

$$V_m^3-\left(b+\frac{RT}{p}\right)V_m^2+\frac{a}{p}V_m-\frac{ab}{p}=0$$

甲烷的 van der Waals 常数可查得$a=0.2303\ \text{Pa}\cdot\text{m}^6\cdot\text{mol}^{-2}$，$b=0.431\times10^{-4}\ \text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$；摩尔气体常量$R=8.314\ \text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$。将已知数据代入上式，得到

$$V_m^3-(7.094\times10^{-4})V_m^2+(9.092\times10^{-8})V_m-3.918\times10^{-12}=0$$

使用 fx-999CN CW II 求解该一元三次方程。

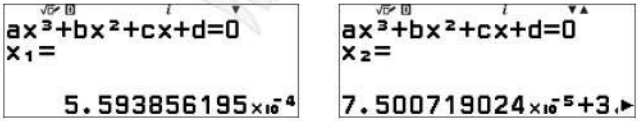
按 ⓐ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ② 选择“多项式方程”，按 ② 选择“$ax^3+bx^2+cx+d=0$”，此时显示标准形式一元三次方程的系数输入界面。

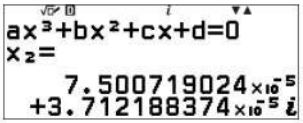


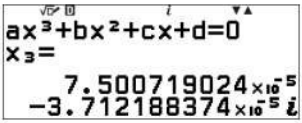
在计算器上，使用x代替V_m。按 1 EXE (−) 7.094 $\times10^n$ (−) 4 EXE 9.092 $\times10^n$ (−) 8 EXE (−) 3.918 $\times10^n$ (−) 12 EXE 输入系数。



按 EXE 执行求解，得到x_1的解；继续按 EXE 得到x_2（当结果显示为虚数时，可按 a b/c 转换为实部与虚部分两行显示的形式），再按 EXE 得到x_3。







舍去虚根x_2和x_3，只有x_1符合要求。

由此得到，甲烷在题设条件下的摩尔体积为$V_m = 5.594 \times 10^{-4}\ m^3 \cdot mol^{-1}$。

本题也可以使用方程求解器直接求解 van der Waals 方程，无需变形，过程可参考例 4-7。

4.5 一元方程求解

对于比较复杂的一元方程，可使用计算器的方程求解器进行求解。有关方程求解器的功能说明，可参考第 2.4.1 节（第 13 页）的相关内容。

例 4-7 在 348 K 时，0.3 kg $NH_3(g)$的压力为1610 kPa，试用 van der Waals 方程式计算其体积。

（已知 van der Waals 常数$a = 0.4169\ Pa \cdot m^6 \cdot mol^{-2}$，$b = 3.71 \times 10^{-5}\ m^3 \cdot mol^{-1}$。）

解： 由 van der Waals 气体状态方程

$$\left(p + \frac{a}{V_m^2}\right)(V_m - b) = RT$$

其中摩尔气体常量$R = 8.314\ J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$，代入已知数据，得到

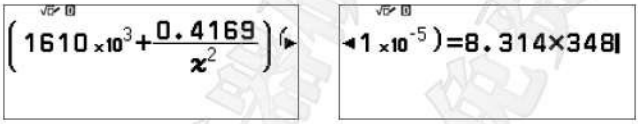
$$\left(1610 \times 10^3 + \frac{0.4169}{V_m^2}\right)(V_m - 3.71 \times 10^{-5}) = 8.314 \times 348$$

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

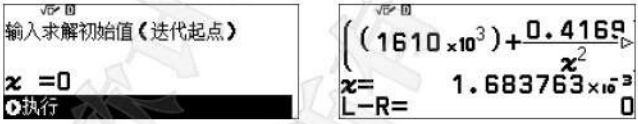
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。



在计算器上，用变量 x 代替 V_m。按 ⓘ 1610 ⑩ 3 ▷ ⊕ 0.4169 ⓑ ⓧ ■² ▷) ⓘ ⓧ ⊖ 3.71 ⑩ (−) 5 ▷) ⬆ ⓘ (=) 8.314 ⊗ 348 输入方程。



按 EXE 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。按 ▽ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 EXE 执行求解。



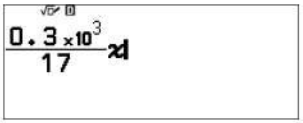
由此得到，$V_m = 1.684 \times 10^{-3}\ \mathrm{m^3 \cdot mol^{-1}}$。

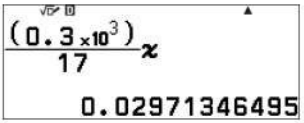
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ① 进入“计算”应用。



体积由 $V = n(\mathrm{NH_3})V_m = \dfrac{m(\mathrm{NH_3})}{M(\mathrm{NH_3})}V_m = \dfrac{0.3 \times 10^3\ \mathrm{g}}{17\ \mathrm{g/mol}}V_m$ 计算。

按 0.3 ⑩ 3 ▷ ⓑ 17 ▷ ⓧ 输入算式，按 EXE 执行计算。





由此得到，气体体积为0.0297 m^3。

本题也可以将 van der Waals 方程变形为一元三次方程，然后使用多项式方程功能求解，过程可参考例 4-6。

例 4-8 通常在大气压力为101.325 kPa时，水的沸点为373 K，而在海拔很高的高原上，当大气压力降为66.9 kPa时，水的沸点为多少？已知水的标准摩尔蒸发焓为40.67 $kJ \cdot mol^{-1}$，并设其与温度无关。

解： 由 Clausius-Clapeyron 方程的积分形式

$$\ln \frac{p_2}{p_1} = \frac{\Delta_{vap} H_m}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$$

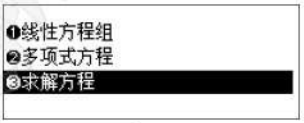
将已知数据代入，有

$$\ln \frac{66.9}{101.325} = \frac{40.67\times10^3}{8.314}\left(\frac{1}{373} - \frac{1}{T_2}\right)$$

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

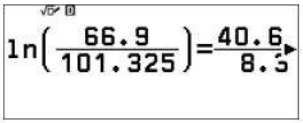
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。

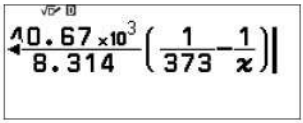




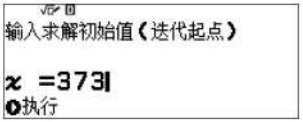


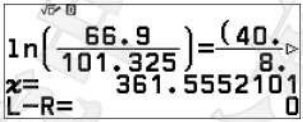
在计算器上，用变量 x 代替 T_2。按 ⬆ ⑩ (ln) ◁ 66.9 ▤ 101.325 ▷ ▷ ⬆ ◁ (=) 40.67 ⑩ 3 ▷ ▤ 8.314 ▷ ◁ 1 ▤ 373 ▷ − 1 ▤ x ▷ ▷ 输入方程。





按 EXE 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。输入 373 EXE 指定初始值为 373，然后按 EXE 执行求解。





由此得到，$T_2 = 361.6\ \mathrm{K}$。

即大气压力降为66.9 kPa时，水的沸点为361.6 K。

例 4-9 设在某一温度下，有一定量的$PCl_5(g)$在100 kPa下的体积为1 L，在该条件下$PCl_5(g)$的解离度$\alpha = 0.5$。用计算说明，使气体的总压降低，直到体积增加到2 L，$PCl_5(g)$的解离度是增大还是减小？

解：

	$PCl_5(g)$	$\rightleftharpoons$	$PCl_3(g)$	$+\ Cl_2(g)$
开始时/mol	1		0	0
平衡时/mol	$1-\alpha$		α	α

由题意得，在$p = p^{\ominus}$时$\alpha = 0.5$，则

$$K_p^{\ominus} = \frac{\left(\dfrac{0.5}{1.5} \times \dfrac{p}{p^{\ominus}}\right)^2}{\dfrac{0.5}{1.5} \times \dfrac{p}{p^{\ominus}}} = \frac{1}{3}$$

设气体为理想气体，$K_p^{\ominus}$只是温度的函数，则

$$K_x = K_p^{\ominus} \frac{p^{\ominus}}{p}$$

因为$K_p^{\ominus}$不变，而p降低，故K_x上升，即α增加。

计算如下：

$$\underset{\text{平衡时/mol}}{\begin{array}{l}\mathrm{PCl_5(g)} \\ 1-\alpha'\end{array}} \rightleftharpoons \underset{\alpha'}{\mathrm{PCl_3(g)}} + \underset{\alpha'}{\mathrm{Cl_2(g)}}$$

由 $\frac{p_1V_1}{n_1}=\frac{p_2V_2}{n_2}$，代入已知数据，有

$$\frac{p^{\ominus}\times 1\ \mathrm{L}}{1.5\ \mathrm{mol}}=\frac{p'\times 2\ \mathrm{L}}{(1+\alpha')\ \mathrm{mol}}$$

解得

$$p'=\frac{1+\alpha'}{3}p^{\ominus}$$

故有

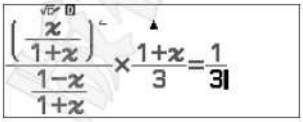
$$K_p^{\ominus}=\frac{\left(\frac{\alpha'}{1+\alpha'}\right)^2}{\frac{1-\alpha'}{1+\alpha'}}\times\frac{p'}{p^{\ominus}}=\frac{\left(\frac{\alpha'}{1+\alpha'}\right)^2}{\frac{1-\alpha'}{1+\alpha'}}\times\frac{1+\alpha'}{3}=\frac{1}{3}$$

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

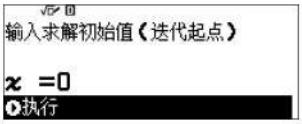
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。

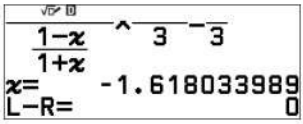


在计算器上，用变量 x 代替 α'。按 ⓛ ⓧ ⓑ 1 ⊕ ⓧ ⓡ ⓝ ⓢ ⓑ ⓑ 1 ⊖ ⓧ ⓥ 1 ⊕ ⓧ ⓡ ⓡ ⊗ ⓑ 1 ⊕ ⓧ ⓥ 3 ⓡ ⓤ ⓛ (=) 1 ⓑ 3 输入方程。

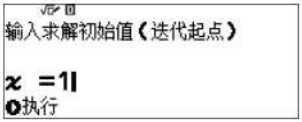


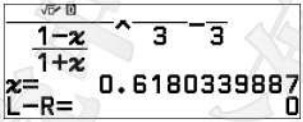
按 EXE 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。按 ⓥ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 EXE 执行求解。





求解结果为负值，不合题意，需要重新选取初始值。按⑤返回到输入求解初始值的界面，按1⑭重新指定初始值为1，然后按⑭执行求解。





由此得到，$\alpha' = 0.62 > \alpha = 0.5$，说明解离度是增大的。

除普通的一元方程之外，fx-999CN CW II 还可以求解包含导数或定积分上下限的一元方程。以下再通过两个例题进行讲解。

例 4-10 NO 分子的电子配分函数可简单表示为

$$q_e = 2 + 2\exp\left(-\frac{\Delta\varepsilon_0}{k_B T}\right)$$

式中 $\Delta\varepsilon_0 = 2.4734 \times 10^{-21}$ J，是电子基态和第一激发态的能量之差。又 NO 分子的核间距及振动波数分别为 $r_0 = 1.154 \times 10^{-10}$ m 和 $\sigma = 1904\ \mathrm{cm}^{-1}$。

（1）试导出室温下气态 NO 的摩尔定容热容的表达式；

（2）在 $T = 20 \sim 300$ K 范围内，上述 NO 的 $C_V - T$ 曲线出现一极值，试证明此极值的存在并确定该极值所处的温度。

解：（1）已知 $q_e = 2 + 2\exp\left(-\frac{\Delta\varepsilon_0}{k_B T}\right)$，则

$$U_{e,m} = Lk_B T^2 \left(\frac{\partial \ln q_e}{\partial T}\right)_V = \frac{L\Delta\varepsilon_0}{1 + \exp\left(\frac{\Delta\varepsilon_0}{k_B T}\right)}$$

$$C_{V,\mathrm{e,m}}=\left(\frac{\partial U_{\mathrm{e,m}}}{\partial T}\right)_V=R\left(\frac{\Delta\varepsilon_0}{k_\mathrm{B}T}\right)^2\frac{1}{\left[1+\exp\left(\frac{\Delta\varepsilon_0}{k_\mathrm{B}T}\right)\right]\left[1+\exp\left(-\frac{\Delta\varepsilon_0}{k_\mathrm{B}T}\right)\right]}$$

又$C_{V,\mathrm{t,m}}=\frac{3}{2}R$，$C_{V,\mathrm{r,m}}=R$，则

$$C_{V,\mathrm{m}}=C_{V,\mathrm{t,m}}+C_{V,\mathrm{r,m}}+C_{V,\mathrm{e,m}}=\frac{5}{2}R+R\frac{x^2}{(1+\mathrm{e}^x)(1+\mathrm{e}^{-x})}$$

其中，$x=\frac{\Delta\varepsilon_0}{k_\mathrm{B}T}$，考虑室温下振动对$C_{V,\mathrm{m}}$没有贡献。

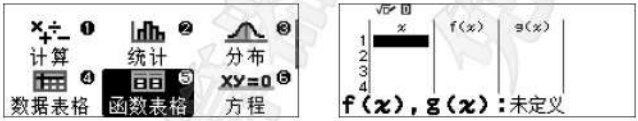
（2）当$C_{V,\mathrm{m}}$有极值时，应有

$$\frac{\mathrm{d}C_{V,\mathrm{m}}}{\mathrm{d}x}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\frac{5}{2}R+R\frac{x^2}{(1+\mathrm{e}^x)(1+\mathrm{e}^{-x})}\right]=0$$

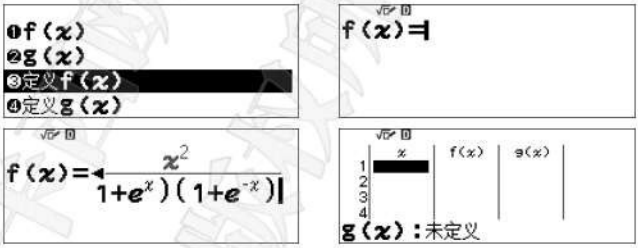
使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

由于方程的形式比较复杂，先使用函数表格估计极值坐标。

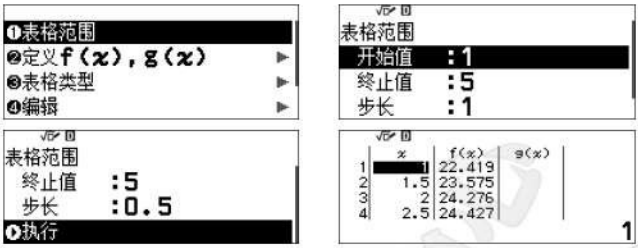
按 ⏢ 打开主屏幕，按 ⑤ 进入“函数表格”应用。



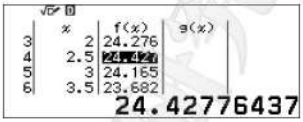
按 fx（函数）打开函数管理器，按 3 选择“定义$f(x)$”；按 5 ▤ 2 ▷ ⊗ 8.314 ⊕ 8.314 ⊗ (x) ■² ▤ (1 ⊕ ⬆ (−) (e) ■^□ (x) ▷) (1 ⊕ ⬆ (−) (e) ■^□ (−) (x) ▷) 输入$C_{V,\mathrm{m}}$的表达式，按 EXE 完成$f(x)$的定义。



按 ⚙（工具）打开工具菜单，按 ① 选择“表格范围”；按 ▽ ▽ 将反色光标移动到“步长”上，输入 0.5 EXE 将步长修改为0.5，然后按 EXE 执行生成表格的操作。



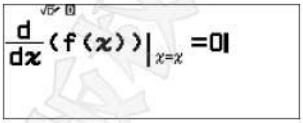
使用方向键（⊙⊙⊙⊙）移动反色光标查看函数表格，可得$x=2.5$时表中的$f(x)$最大，因此选取求解的初始值为$x=2.5$。



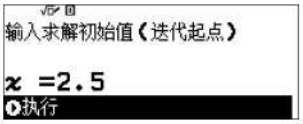
按 ⊙ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。

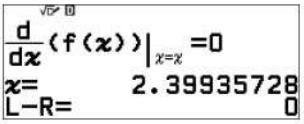


按 ⊙ ÷ (a/b■) f(x) （函数） ① （f(） ⊙ ① ⊙ ⊙ ⊙ ⊙ ⊙ ① (=)0 输入方程。



按 ⊙ 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。按 2.5⊙ 指定初始值为2.5，然后按 ⊙ 执行求解。





解得$x=2.4$。

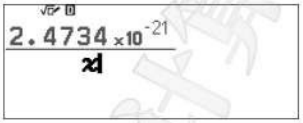
按 ⌂ 打开主屏幕，按 ① 进入“计算”应用。





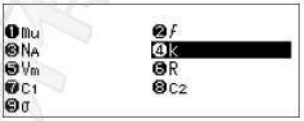
由$x=\dfrac{\Delta\varepsilon_0}{k_{\mathrm{B}}T}$，可得$T=\dfrac{\Delta\varepsilon_0}{xk_{\mathrm{B}}}=\dfrac{2.4734\times10^{-21}}{xk_{\mathrm{B}}}$，其中$k_{\mathrm{B}}$是 Boltzmann 常量，可以在计算器上直接调用。

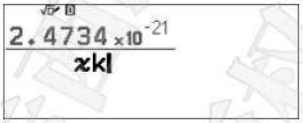
按 2.4734 ⑩ (−) 21 > ≡ (x)；然后按 ⓜ（目录）打开目录菜单，按 ⑦ 选择“科学常数”，按 ④ 选择“物理与化学常数”，按 ④（k）调用 Boltzmann 常量；按 ⓔ 执行计算。

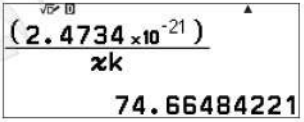












由此得到，极值所处的温度 $T=74.66\ \mathrm{K}$。

实际上，化学计算中常用的摩尔气体常量R也可在计算器上按 ⓜ（目录）⑦（科学常数）④（物理与化学常数）⑥（R）调用。有关化学中常用的科学常数的调用方法，可参考本书的附录二。

例 4-11 有正、逆反应均为一级的对峙反应：

$$\mathrm{D-R_1R_2R_3CBr} \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} \mathrm{L-R_1R_2R_3CBr}$$

正、逆反应的半衰期均为$t_{1/2}=10\ \mathrm{min}$。若起始时$\mathrm{D-R_1R_2R_3CBr}$的物质的量为1 mol，试计算在10 min后，生成$\mathrm{L-R_1R_2R_3CBr}$的物质的量。

解： 设反应系统的体积为1 L，则$\mathrm{D-R_1R_2R_3CBr}$的初始浓度为$a=1.00\ \mathrm{mol\cdot L^{-1}}$，在任一时刻，$\mathrm{L-R_1R_2R_3CBr}$的浓度为$x$，$\mathrm{D-R_1R_2R_3CBr}$的浓度为$a-x$，则

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=k_1(a-x)-k_{-1}x$$

因$k_1=k_{-1}=\dfrac{\ln 2}{t_{1/2}}$，故

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=k_1(a-2x)$$

两边积分，得

$$\int_0^x \frac{\mathrm{d}x}{a-2x}=\int_0^t k_1\mathrm{d}t$$

代入数据，得

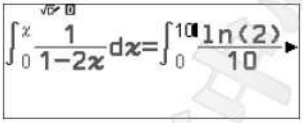
$$\int_0^x \frac{1}{1-2x}\mathrm{d}x=\int_0^{10}\frac{\ln 2}{10}\mathrm{d}t$$

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

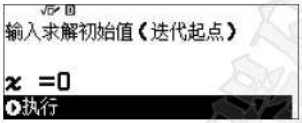
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。

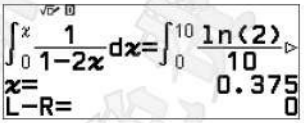


按 ⏫⊗(∫□ᵃ□)1⏬1⊖2𝒳⊙0⊙𝒳⏬⏫(=)⏫⊗(∫□ᵃ□)⏫log(ln)2)⏬10⊙0⊙10 输入方程。



按 EXE 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。按 ⊙ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 EXE 执行求解。





由此得到，10 min 后生成L－$R_1R_2R_3$CBr 的物质的量为0.375 mol 。

卡西欧计算器中心 版权所有

5 化工原理计算应用

5.1 一元方程求解

化工原理中公式繁多，经常会遇到需要求解公式中的某一参数的问题，即求解一元方程，这类方程可使用计算器的方程求解器进行求解。有关方程求解器的功能说明，可参考第 2.4.1 节（第 13 页）的相关内容。

例 5-1 有一冷却器总传热面积为25 m^2，将流量为1.8 kg/s 的某种气体从60 °C 冷却到38 °C，使用的冷却水初温为23 °C，与气体作逆流流动。换热器的总传热系数约为200 W/(m^2 · °C)，气体的平均比热容为1.0 kJ/(kg · °C)。试求冷却水用量及出口水温。

解： 换热器在定态操作时，应满足热量衡算式

$$q_{m1}c_{p1}(T_1-T_2)=q_{m2}c_{p2}(t_2-t_1) \qquad ①$$

以及传热基本方程式

$$q_{m1}c_{p1}(T_1-T_2)=KA\frac{(T_1-t_2)-(T_2-t_1)}{\ln\dfrac{T_1-t_2}{T_2-t_1}} \qquad ②$$

将已知数据代入以上两式，得

$$q_{m2}=\frac{1.8\times1.0\times(60-38)}{4.18\times(t_2-23)} \qquad ③$$

$$7.92\ln\frac{60-t_2}{15}=45-t_2 \qquad ④$$

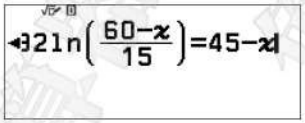
先求解 ④ 式中的t_2，然后再代入 ③ 式中计算q_{m2}。

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器进行求解。

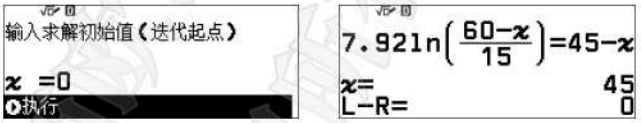
按 ⏻ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。



在计算器上，使用变量x代替t_2。按 7.92 ⬆ log (ln) 60 − 𝑥 ▽ 15 ▷) ⬆ ((=) 45 − 𝑥 输入方程。



按 EXE 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。按 ▽ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 EXE 执行求解。

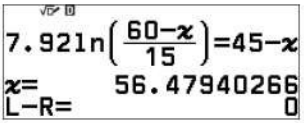


由此得到，$t_2 = 45\,^{\circ}\mathrm{C}$。

这个解是显然能直接观察出来的，实际上该方程还存在另外一个解，可通过函数表格（参考第 68 页的例 4-10）或者根据实际情况直接选取一些初始值进行估计，对于本题而言，逆流传热可以有$T_2 < t_2 < T_1$，可取例如40，50，55等的初始值进行尝试。

按 ↩ 返回到输入求解初始值的界面，按 55 EXE 指定求解的初始值为55，然后按 EXE 执行求解。（初始值取40，50时求解结果仍然是45。）





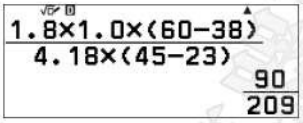
由此得到，另一解为 $t_2=56.48\,^{\circ}\mathrm{C}$。

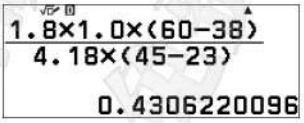
按 ⏻ 打开主屏幕，按 ① 进入“计算”应用。



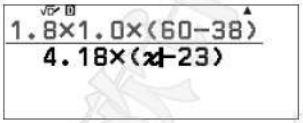


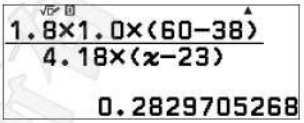
按 ⏻1.8⊗1.0⊗ ⦗60⊖38⦘ ⦗4.18⊗ ⦗45⊖23⦘ ⏎ 计算$t_2=45\,^{\circ}\mathrm{C}$时的冷却水流量$q_{m2}$，按 ⏻ 将结果转换成小数。





按⦗进入编辑算式的状态，再按五次⦗将光标移动到45的后面，按 ⌫⌫ 删除45，再按 x 修改为x，按 ⏎ 执行计算。





由此得到，冷却水用量$q_{m2}=0.431$ kg/s时，出口水温$t_2=45\,^{\circ}\mathrm{C}$；或冷却水用了$q_{m2}=0.283$ kg/s时，出口水温$t_2=56.48\,^{\circ}\mathrm{C}$。两种情况均可满足传热要求。

例 5-2 101.3 kPa，293 K下用清水在吸收塔中逆流吸收SO_2－空气混合物中的SO_2，当操作液气比为32时，回收率可达95%。已知物系在低浓度下的平衡关系为$y=27.6x$，操作范围内总传质系数K_ya与气体流率基本无关。气体的流率、两相的入口浓度、吸收塔的操作压强与操作温度皆维持不变，吸收过程为液相阻力控制，$K_ya\propto L^{0.7}$。

现欲将SO_2的回收率由原来的95%提高至98%，试用吸收因数法计算吸收剂的用量应增加至原用量的多少倍？

解： 原工况下，入塔液体摩尔分数$x_a=0$，气相总传质单元数

$$N_{OG}=\frac{1}{1-S}\ln\left[(1-S)\frac{1}{1-\eta}+S\right]$$

其中，脱吸因数 $S=\frac{mG}{L}=\frac{27.6}{32}=0.8625$，代入上式可得

$$N_{OG}=\frac{1}{1-0.8625}\ln\left[(1-0.8625)\cdot\frac{1}{1-0.95}+0.8625\right]=9.3411$$

对于新工况，因吸收过程为液相阻力控制，液体流率L增加为L'，气相总传质单元高度H_{OG}减小为H'_{OG}，即

$$H'_{OG}=\frac{G}{K_y a'}=\frac{G}{K_y a\left(\frac{L'}{L}\right)^{0.7}}=\left(\frac{L}{L'}\right)^{0.7}H_{OG}$$

因塔高不变，故

$$N'_{OG}=\left(\frac{L'}{L}\right)^{0.7}N_{OG}=9.3411\left(\frac{L'}{L}\right)^{0.7}$$

此时

$$S'=\frac{mG}{L'}=\frac{mG}{L}\cdot\frac{L}{L'}=0.8625\frac{L}{L'}$$

$$N'_{OG}=\frac{1}{1-S'}\ln\left[(1-S')\frac{1}{1-\eta'}+S'\right]$$

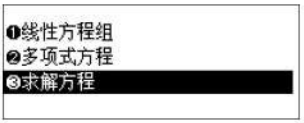
代入数据后，得

$$9.3411\left(\frac{L'}{L}\right)^{0.7}=\frac{1}{1-\frac{0.8625}{L'/L}}\ln\left[\left(1-\frac{0.8625}{L'/L}\right)\cdot\frac{1}{1-0.98}+\frac{0.8625}{L'/L}\right]$$

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解以上方程中的$\frac{L'}{L}$。

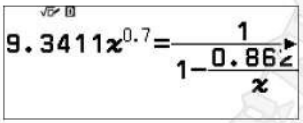
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。

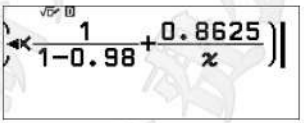




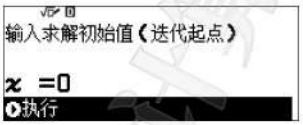


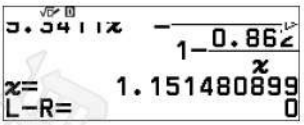
在计算器上，使用变量x代替(L'/L)。按 9.3411 ⓧ ◉ 0.7 ▷ ▲ ◁ (=) 1 ▣ 1 ⊖ 0.8625 ▣ ⓧ ▷ ▷ ▲ (ln) ◁ 1 ⊖ 0.8625 ▣ ⓧ ▷) ⊗ 1 ▣ 1 ⊖ 0.98 ▷ ⊕ 0.8625 ▣ ⓧ ▷) 输入方程。





按 ㊎ 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。按 ▽ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 ㊎ 执行求解。





由此得到，吸收剂的用量应增加至原来用量的 1.15 倍。

例 5-3 苯-甲苯溶液的初浓度$x_1=0.4$，共100 kmol，在常压下进行简单蒸馏，到残液浓度$x_2=0.3$为止，求馏出液的量和浓度。

解： 已知苯-甲苯可作为理想溶液，在$x=0.3\sim0.4$之间，相对挥发度取$\alpha=2.45$。

由简单蒸馏的物料衡算公式

$$\ln\frac{W_1x_1}{W_2x_2}=\alpha\ln\frac{W_1(1-x_1)}{W_2(1-x_2)}$$

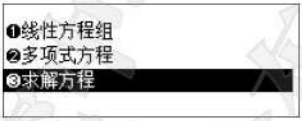
代入已知数据，得

$$\ln\frac{100\times0.4}{W_2\times0.3}=2.45\ln\frac{100(1-0.4)}{W_2(1-0.3)}$$

使用 fx-999CN CW II 的方程求解器求解该方程。

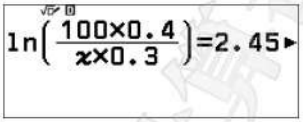
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ③ 选择“求解方程”，进入方程求解器输入方程的界面。

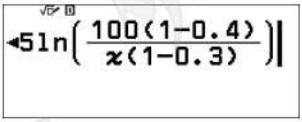




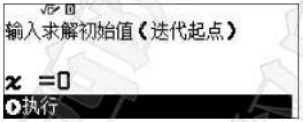


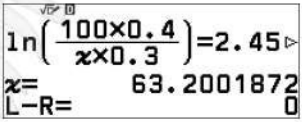
在计算器上，使用变量x代替W_2。按 ↑ (ln) 100×0.4▼ x ×0.3▶) ↑ ((=)2.45↑ (ln) 100 (1−0.4) ▼ x (1−0.3) ▶) 输入方程。





按 EXE 确认，此时计算器进入输入求解初始值的界面。按 ▼ 跳过初始值的输入，使用默认的 0 作为初始值，然后按 EXE 执行求解。





由此得到，$W_2=63.2$ kmol，则馏出液的量

$$W_D=W_1-W_2=(100-63.2)\ \text{kmol}=36.8\ \text{kmol}$$

馏出液浓度

$$x_D=\frac{100\times0.4-63.2\times0.3}{36.8}=0.572$$

5.2 线性方程组与多项式方程求解

有关线性方程组与多项式方程的功能说明，可参考第 3.3.1 节（第 38 页）以及第 2.3.1 节（第 9 页）的相关内容。

例 5-4 采用过滤面积为$0.2\ \mathrm{m}^2$的过滤机，对某悬浮液进行过滤常数的测定。操作压强差为$0.15\ \mathrm{MPa}$，温度为$20\ ^\circ\mathrm{C}$，过滤进行到$5\ \mathrm{min}$时共得滤液$0.034\ \mathrm{m}^3$；进行到$10\ \mathrm{min}$时，共得滤液$0.050\ \mathrm{m}^3$。

试估算：（1）过滤常数K和q_e；（2）按这种操作条件，过滤到$1\ \mathrm{h}$时的滤液总量。

解：（1）过滤时间$t_1=5\ \mathrm{min}=300\ \mathrm{s}$时，

$$q_1=\frac{V_1}{A}=\frac{0.034}{0.2}\ \mathrm{m}^3/\mathrm{m}^2=0.17\ \mathrm{m}^3/\mathrm{m}^2$$

过滤时间$t_2=10\ \mathrm{min}=600\ \mathrm{s}$时，

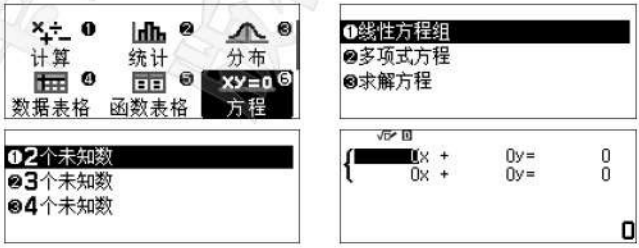
$$q_2=\frac{V_2}{A}=\frac{0.050}{0.2}\ \mathrm{m}^3/\mathrm{m}^2=0.25\ \mathrm{m}^3/\mathrm{m}^2$$

由$q^2+2qq_e=K\tau$，有

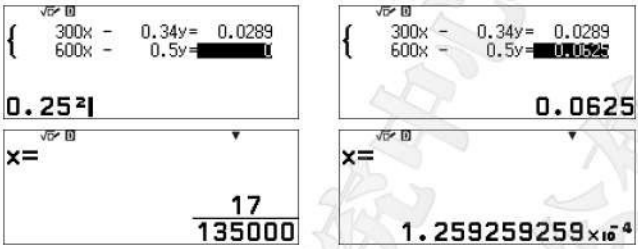
$$\begin{cases}0.17^2+2\times0.17q_e=300K\\0.25^2+2\times0.25q_e=600K\end{cases}\Longrightarrow\begin{cases}300K-(2\times0.17)q_e=0.17^2\\600K-(2\times0.25)q_e=0.25^2\end{cases}$$

使用 fx-999CN CW II 求解该线性方程组。

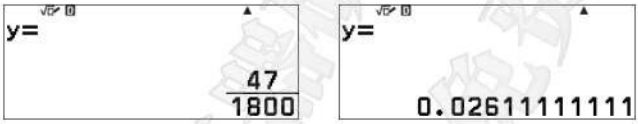
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ① 选择“线性方程组”，按 ① 选择“2 个未知数”，进入标准形式的二元线性方程组输入系数的界面。



在计算器上，令$x=K$，$y=q_e$。 按 300 EXE (−) 2 × 0.17 EXE 0.17 x^2 EXE 600 EXE (−) 2 × 0.25 EXE 0.25 x^2 EXE 输入系数。按 EXE 执行求解，得到x的解。当结果显示为分数时，可按 $S\leftrightarrow D$ 转换为小数。



继续按 EXE 得到y的解，按 $S\leftrightarrow D$ 转换为小数。



由此得到，$K=1.26\times10^{-4}\ \mathrm{m^2/s}$，$q_e=0.0261\ \mathrm{m^3/m^2}$。

（2）由（1）的结果，可得

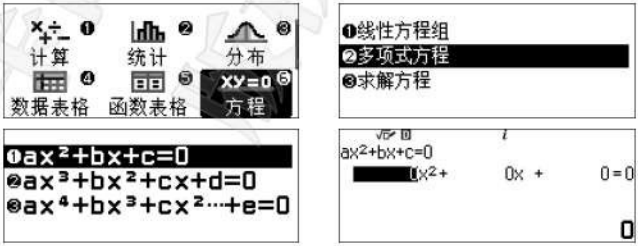
$$V_e=Aq_e=(0.2\times0.0261)\ \mathrm{m^3}=5.22\times10^{-3}\ \mathrm{m^3}$$

代入恒压过滤方程 $V^2+2VV_e=KA^2\tau$，得

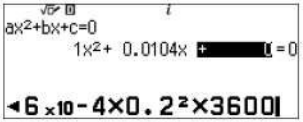
$$V^2+2\times5.22\times10^{-3}V=1.26\times10^{-4}\times0.2^2\times3600$$

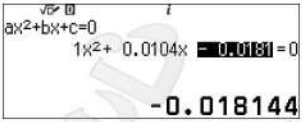
继续使用 fx-999CN CW II 求解该方程。

按 ⏻ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ② 选择“多项式方程”，按 ① 选择“$ax^2+bx+c=0$”，进入标准形式的一元二次方程输入系数的界面。

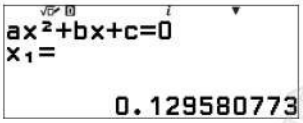


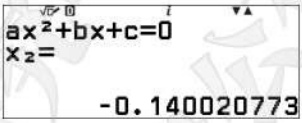
在计算器上，使用x代替V。按 1 EXE 2 × 5.22 $\times 10^{x}$ (−) 3 EXE (−) 1.26 $\times 10^{x}$ (−) 4 × 0.2 x^{2} × 3600 EXE 输入系数。





按 EXE 执行求解，得到第一个解x_1，再按 EXE 得到第二个解x_2。





由于$x_2<0$，故舍去。即按这种操作条件，过滤进行到1 h的滤液总量为$V=0.130\ \mathrm{m^3}$。

例 5-5　需用一常压连续精馏塔分离含苯40%（质量分数，下同）的苯-甲苯混合液，要求塔顶产品含苯97%以上，塔底产品含苯2%以下。试计算当进料量为2500 $\mathrm{kg\cdot h^{-1}}$时，塔顶、塔底产品的摩尔流率。（已知苯的摩尔质量$M_m(\mathrm{C_6H_6})=78.1\ \mathrm{kg\cdot kmol^{-1}}$，甲苯的摩尔质量$M_m(\mathrm{C_7H_8})=92.1\ \mathrm{kg\cdot kmol^{-1}}$。）

解：根据全塔物料衡算方程

$$\begin{cases} F=D+W \\ Fx_F=Dx_D+Wx_W \end{cases}$$

其中，料液的摩尔流率

$$F=\left[\frac{2500\times0.4}{78.1}+\frac{2500\times(1-0.4)}{92.1}\right]\mathrm{kmol\cdot h^{-1}}=29.09\ \mathrm{kmol\cdot h^{-1}}$$

料液中易挥发组分（苯）的摩尔分数

$$x_F=\frac{\dfrac{0.4}{78.1}}{\dfrac{0.4}{78.1}+\dfrac{1-0.4}{92.1}}=0.4401$$

塔顶产品（苯）的摩尔分数

$$x_D=\frac{0.97}{0.97+(1-0.97)\times\frac{78.1}{92.1}}=0.9744$$

塔底产品（甲苯）的摩尔分数

$$x_W=\frac{0.02}{0.02+(1-0.02)\times\frac{78.1}{92.1}}=0.0235$$

由此可列出方程组

$$\begin{cases}D+W=29.09\\0.9744D+0.0235W=0.4401\times29.09\end{cases}$$

使用 fx-999CN CW II 求解该线性方程组。

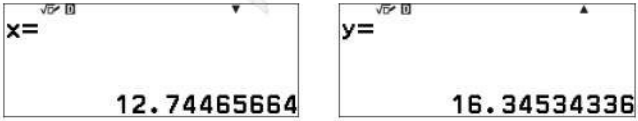
按 ⏏ 打开主屏幕，按 ⑥ 进入“方程”应用；按 ① 选择“线性方程组”，按 ① 选择“2 个未知数”，进入标准形式的二元线性方程组输入系数的界面。



在计算器上，令$x=D$，$y=W$。按 1 EXE 1 EXE 29.09 EXE 0.9744 EXE 0.0235 EXE 0.4401 ⊗ 29.09 EXE 输入系数。



按 EXE 执行求解，得到x的解；再按 EXE 得到y的解。



由此得到，塔顶、塔底的产品摩尔流率分别为

$$D=12.74\ \text{kmol}\cdot\text{h}^{-1},\quad W=16.35\ \text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$$

5.3 定积分计算

有关定积分的功能说明，可参考第 2.2.1 节（第 7 页）的内容。

例 5-6 暖水瓶瓶胆的夹层中抽成真空，以防止对流散热；夹层双面镀银，以削弱辐射散热。镀银采用还原沉淀法，其黑度可取为0.10。5 磅（2.268 kg）暖水瓶瓶胆的内部尺寸可作为直径110 mm、高250 mm的圆柱体处理（忽略瓶塞增加的散热）。求室温20 °C下瓶内盛满100 °C沸水后，保温到70 °C的时间。

解： 瓶胆内的水给热到内层玻璃壁面，以导热方式通过内层玻璃，继而依靠辐射通过真空夹层，再以导热方式通过外层玻璃，然后以对流加辐射方式散发至室内（经过瓶壳）。其中主要的热阻在于常温下低黑度的辐射传热，其他部分热阻可忽略。

假设在微分时间dτ内，水温的变化为dT(K)，则水减少的热量为

$$\mathrm{d}Q=-mc_p\mathrm{d}T \qquad ①$$

100 °C沸水的密度为958.4 kg·m^{-3}，则瓶胆中的水量为

$$m=\left[\frac{\pi}{4}\times(110\times10^{-3})^2\times(250\times10^{-3})\times958.4\right]\text{kg}=2.277\ \text{kg}$$

70 °C～100 °C范围内水的平均定压比热容$c_p=4.20\ \text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot{}^{\circ}\text{C}^{-1}$，代入①式，可得

$$\mathrm{d}Q=-2.277\times4.20\times10^3\mathrm{d}T=-9563.4\mathrm{d}T\ (\text{J}) \qquad ②$$

通过夹层的辐射散热速率因内层被外层包围，角系数$\varphi=1$；且两层相距很近而有$A_1/A_2\approx1$；已知黑度$\varepsilon_1=\varepsilon_2=0.10$，则

$$Q_{1\text{-}2}=C_{1\text{-}2}A_1\left[\left(\frac{T_1}{100}\right)^4-\left(\frac{T_2}{100}\right)^4\right]$$

其中：$C_{1\text{-}2}=\dfrac{C_0}{\dfrac{1}{\varepsilon_1}+\dfrac{A_1}{A_2}\left(\dfrac{1}{\varepsilon_1}-1\right)}=\dfrac{5.6704}{\dfrac{1}{0.1}+\left(\dfrac{1}{0.1}-1\right)}=0.2984$，

$C_0=\sigma_0\times10^8$，$\sigma_0=5.6704\times10^{-8}\ \mathrm{W\cdot m^{-2}\cdot K^{-4}}$为斯特藩-玻尔兹曼常量，

$A_1=\left[\pi\times(110\times10^{-3})\times(250\times10^{-3})+\dfrac{\pi}{4}\times(110\times10^{-3})^2\times2\right]\mathrm{m^2}=0.1054\ \mathrm{m^2}$，

$T_1=T$，$T_2=(20+273.15)\ \mathrm{K}=293.15\ \mathrm{K}$。

代入上式，得到

$$Q_{1\text{-}2}=0.2984\times0.1054\left[\left(\frac{T}{100}\right)^4-\left(\frac{293.15}{100}\right)^4\right]\ (\mathrm{W}) \qquad ③$$

在时间$\mathrm{d}\tau$内，辐射散失的热量$Q_{1\text{-}2}\mathrm{d}\tau$与水因降温而减少的热量$\mathrm{d}Q$相等，综合 ②，③ 式，得

$$0.2984\times0.1054\left[\left(\frac{T}{100}\right)^4-\left(\frac{293.15}{100}\right)^4\right]\mathrm{d}\tau=-2.277\times4.20\times10^3\mathrm{d}T$$

整理并分离变量，得

$$\mathrm{d}\tau=-\frac{3.0407\times10^5}{\left(\dfrac{T}{100}\right)^4-73.8515}\mathrm{d}T$$

温度区间为100 °C～70 °C，即373.15 K～343.15 K，在该区间上进行积分，得到保温时间为

$$\tau=\int_{373.15}^{343.15}-\frac{3.0407\times10^5}{\left(\dfrac{T}{100}\right)^4-73.8515}\mathrm{d}T$$

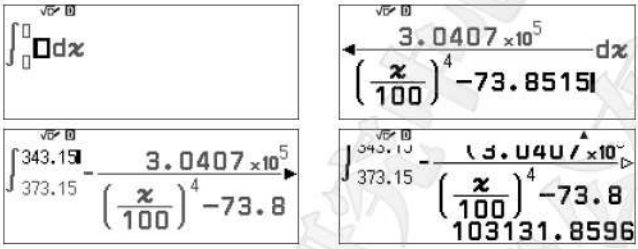
使用 fx-999CN CW II 计算该定积分。

按 ⏏ 打开主屏幕，按 ① 进入“计算”应用。

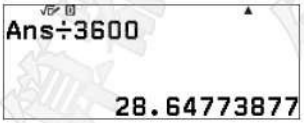




在计算器上，使用变量x代替T。按 ⏫⊗(∫) 输入定积分模板，然后按 ⊖ 3.0407 ^ 5 ▽ (x^2) 100 ▷) ■ 4 ▷ ⊖ 73.8515 输入被积式；按 ▽ 将光标移动到积分下限，输入 373.15；按 △ 将光标移动到积分上限，输入 343.15；按 EXE 执行计算。



该结果是以秒（s）为单位表示的，继续按 ÷ 3600 EXE 将结果换算成以小时（h）为单位表示。



由此得到，暖水瓶保温到70 °C 的时间约为28.6 h。

需要注意的是，以上计算过程忽略了瓶塞的作用，实际保温时间将会更短。

5.4 数据迭代计算

化工原理中的部分生产工艺的计算涉及到数据的迭代，例如精馏过程计算理论板数的过程，涉及到两个变量的相互迭代，可使用计算器的多语句与赋值计算功能或数据表格功能完成。

5.4.1 多语句与赋值计算功能说明

fx-999CN CW II 具有A～F以及x，y，z等 9 个变量，在“计算”应用中，可使用赋值命令将表达式的结果对变量进行赋值，同时还可以将多个表达式使用多语句分隔符（:）进行连接，实现多个表达式的连续计算。

例如通过递推公式计算 Fibonacci 数列，使用多语句与赋值计算功能实现的过程如下：

按 ⏢ 打开主屏幕，按 ① 进入“计算”应用。



Fibonacci 数列的递推公式为

$$a_{n+2}=a_{n+1}+a_n,\ a_1=1,\ a_2=1$$

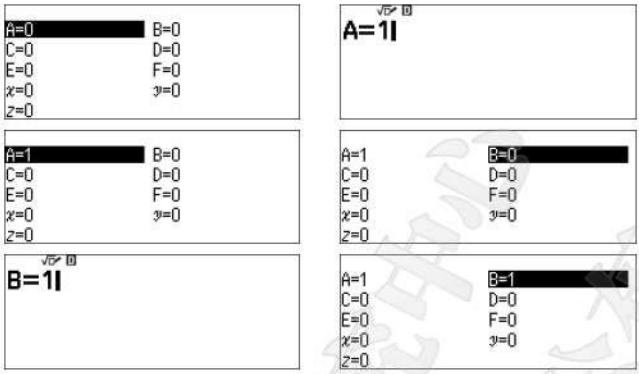
在计算器上，将a_n，a_{n+1}，a_{n+2}分别用变量 A，B，C 代替，并构造如下所示的多语句表达式：

$$\mathrm{A}+\mathrm{B}\rightarrow\mathrm{C}:\mathrm{B}\rightarrow\mathrm{A}:\mathrm{C}\rightarrow\mathrm{B}$$

该表达式的含义如下：

先计算 A＋B 的值，并将计算结果赋值给变量 C，即计算$a_{n+2}=a_{n+1}+a_n$；然后将变量 B 中的值赋值给变量 A，再将变量 C 中的值赋值给变量 B，完成$a_{n+1}\rightarrow a_n$以及$a_{n+2}\rightarrow a_{n+1}$的替换过程。计算前，将 1 赋值给变量 A 和变量 B，即可进行迭代。

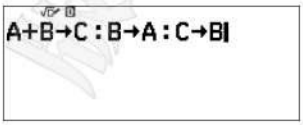
按 ㏑（变量）打开变量管理器，当反色光标位于变量 A 上时，输入 1，按 EXE 确认，为变量 A 赋值 1；再按 ▷ 将反色光标移动到变量 B 上，输入 1，按 EXE 确认，为变量 B 赋值 1。此时变量 A 的值为 1，对应$a_1=1$；变量 B 的值也为 1，对应$a_2=1$。



按⑤或 AC 返回到计算界面，按 ⬆④（A）＋⬆⑤（B）输入 A＋B；然后按 ▤（目录）打开目录菜单，按 ⑨ 选择“多语句 / 赋值”，按 ④（→C）调用赋值给变量 C 的命令。

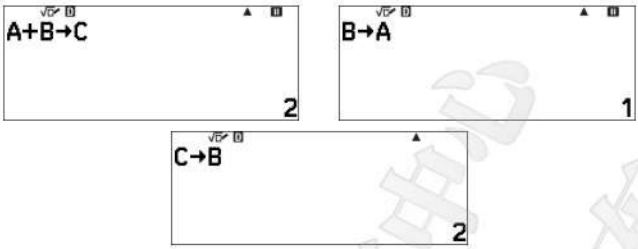


继续按 ▤（目录）⑨（多语句 / 赋值）①（:）输入多语句分隔符，然后按 ⬆⑤（B）▤（目录）⑨（多语句 / 赋值）②（→A）▤（目录）⑨（多语句 / 赋值）①（:）⬆⑥（C）▤（目录）⑨（多语句 / 赋值）③（→B）补全表达式。

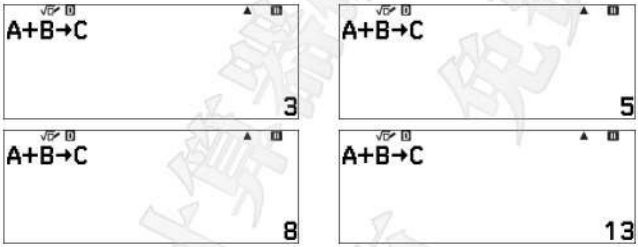


按 EXE 执行第一步 “A＋B→C”的计算，其结果为a_{n+2}的值，此处为$a_3=2$；按 EXE 执行第二步“B→A”，将a_{n+1}变为a_n；再按 EXE

执行第三步“C→B”，将a_{n+2}变为a_{n+1}。



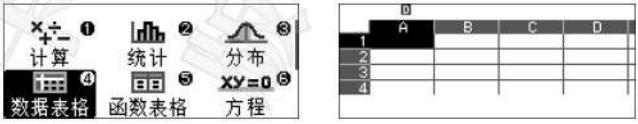
以上即完成了一次迭代。继续按 EXE 可进入下一次迭代，以后每按三次 EXE，显示“A＋B→C”的计算结果时，即可得到 Fibonacci 数列的下一项。



5.4.2 数据表格功能说明

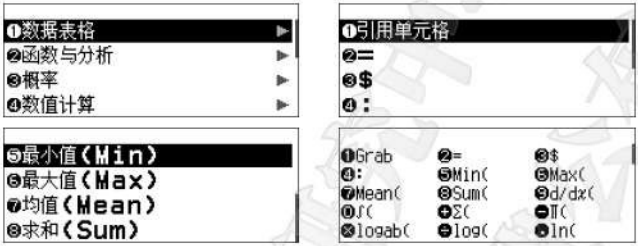
fx-999CN CW II 的数据表格功能可对 45 行 5 列的数据表格进行类似计算机上的电子表格软件的计算。

按 ⌂ 打开主屏幕，按 ④ 进入“数据表格”应用。

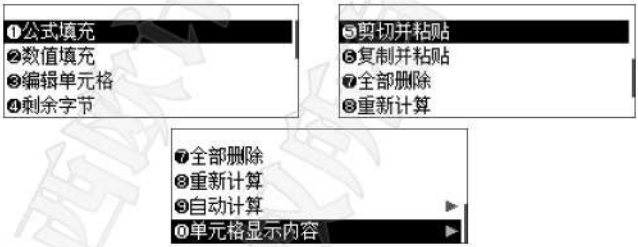


数据表格的部分计算功能可通过目录菜单或目录列表进行调用。目录菜单中包括引用单元格、公式符号（＝）、绝对单元格引用符号

（$）、范围符号（:）、最小值（Min）、最大值（Max）、均值（Mean）、求和（Sum）等功能、符号或命令，按 ⓜ（目录）打开目录菜单，再按 ① 选择“数据表格”即可调用；也可按 ⬆ ⓜ (≡)打开目录列表，直接按选项编号对应的按键进行调用。

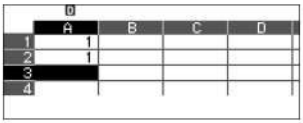


数据表格的数据处理等相关功能可通过工具菜单进行调用。工具菜单中有批量处理数据的功能（公式填充、数值填充、全部删除、重新计算），也有数据编辑的功能（编辑单元格、剪切并粘贴、复制并粘贴），还有数据表格相关属性或设置的功能（剩余字节、自动计算、单元格显示内容）。

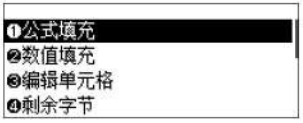


使用数据表格功能也可实现 Fibonacci 数列的计算。例如在数据表格的 A 列中表示该数列，则行号就是数列的下标，例如a_1＝A1，a_2＝A2，a_3＝A3……。假设要求计算前 20 项，操作过程如下：

当反色光标位于 A1 单元格上时，按 1EXE 令A1＝1，再按 1EXE 令A2＝1。



当反色光标位于 A3 单元格上时，按 ⚙（工具）打开工具菜单，按 ① 选择“公式填充”，进入公式填充界面。

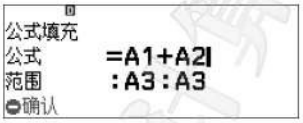


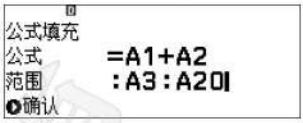


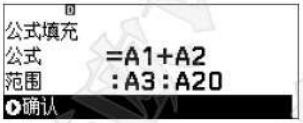
由 Fibonacci 数列通项公式可知，应当填充公式

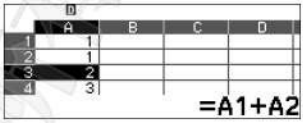
$$A3 = A2 + A1$$

按 ⬆④（A）1⊕⬆④（A）2 输入公式，按 EXE 确认；再按 ▷⏬⌫ 删除范围的最后一个数字，然后输入 20，按 EXE 确认；按 EXE 执行计算。

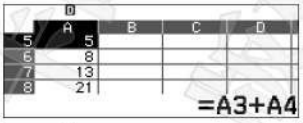


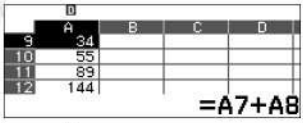


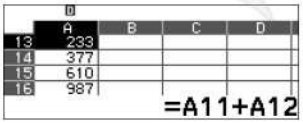


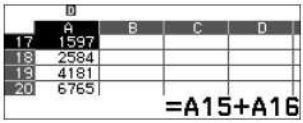


按方向键（△▽）或翻页键（⏫⏬）可查看计算结果。









5.4.3 应用例题

例 5-7 需用一常压连续精馏塔分离含苯40%（质量分数，下同）的苯-甲苯混合液，要求塔顶产品含苯97%以上，塔底产品含苯2%以下。采用的回流比$R=3.5$，泡点回流，塔顶为全凝器。试求20 °C的进料状况（进料热状态$q=1.354$）下所需的理论板数。常压下苯-甲苯混合物可视为理想溶液，相对挥发度取$\alpha=2.475$。

解： 相平衡方程为

$$y=\frac{\alpha x}{1+(\alpha-1)x}=\frac{2.475x}{1+(2.475-1)x}$$

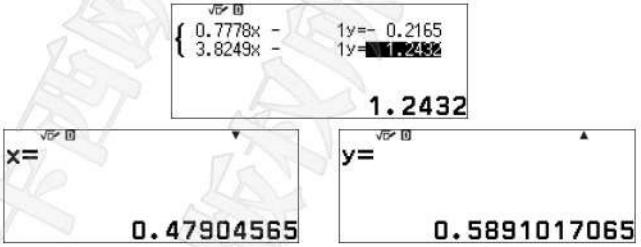
根据例 5-5（第 82 页）的结果，$x_D=0.9744$，$x_W=0.0235$，$x_F=0.4401$，可得精馏段操作线方程为

$$y=\frac{R}{R+1}x+\frac{x_D}{R+1}=0.7778x+0.2165$$

进料方程（q线方程）为

$$y=\frac{q}{q-1}x-\frac{x_F}{q-1}=3.8249x-1.2432$$

使用 fx-999CN CW II 的线性方程组功能联立以上两式求解（参考第 38 页 3.3.1 节的功能说明）。

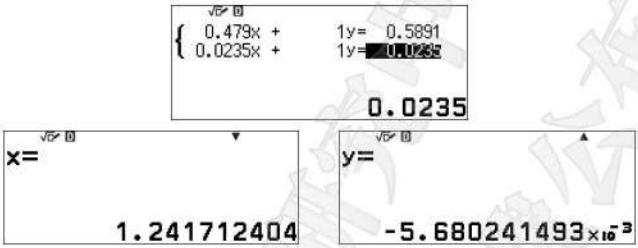


解得交点坐标为 (0.4790, 0.5891)。

提馏段操作线方程由点(0.4790, 0.5891)和点$(x_W, x_W)=(0.0235, 0.0235)$确定。列方程组

$$\begin{cases} 0.4790k + b = 0.5891 \\ 0.0235k + b = 0.0235 \end{cases}$$

使用 fx-999CN CW II 的线性方程组功能求解该方程组，在计算器上令 $x = k$，$y = b$。



由此得到提馏段操作线方程为 $y = 1.2417x - 0.0057$。

以下分别使用图解法、多语句与赋值计算功能、数据表格功能进行求解。

1. 使用图解法求解

（1）在 $x - y$ 图中根据相平衡方程作出平衡曲线，并连接对角线；

（2）在 x 轴上定出 $x = x_D$，x_F，x_W 三点，作 x 轴的垂线，与对角线分别交于点 a，f，b；

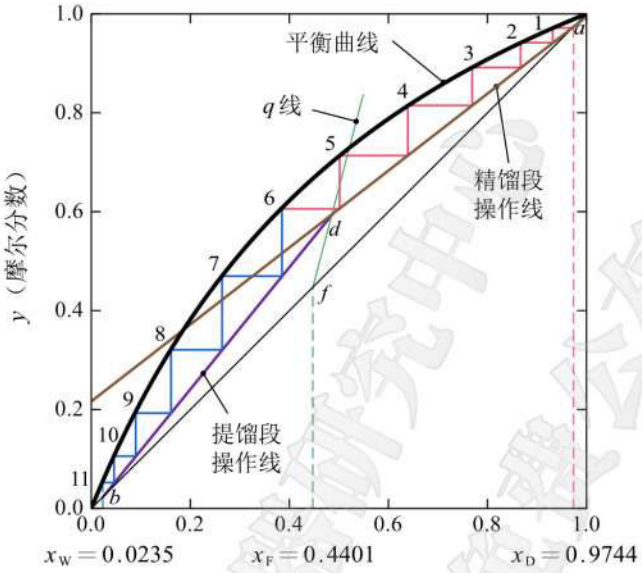
（3）由精馏段操作线方程 $y = 0.7778x + 0.2165$，过点 a 作精馏段操作线；

（4）由进料方程（q 线方程）$y = 3.8249x - 1.2432$，过点 f 作 q 线，并与精馏段操作线交于点 d；

（5）连接点 d 和点 b，作提馏段操作线；

（6）从点 a 开始，在平衡曲线和精馏段操作线之间作梯级，当梯级跨过点 d 之后，改在平衡曲线和提馏段操作线之间作梯级，直到跨过点 b 为止。

根据作图结果，由图中的梯级数目可知，全塔的理论板数为 11 层，在第 6 层跨过点 d，即精馏段为第 1～5 层，第 6 层进料，提馏段为第 7～11 层。



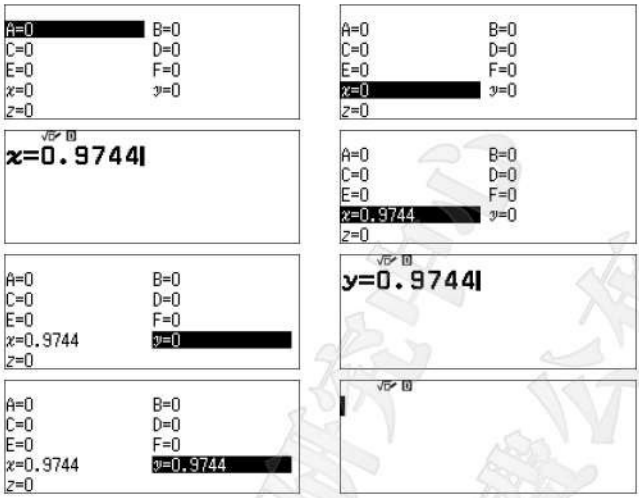
理论塔板数图解

2. 使用多语句与赋值计算功能求解

按 ⏻ 打开主屏幕，按 ① 进入“计算”应用。



按 SHIFT（变量）打开变量管理器，当反色光标位于变量 A 上时，若变量 A 的值不为 0，需要按 0 EXE 将变量 A 的值改为 0；按 ∧ ∧（或 ∨ ∨ ∨）将反色光标移动到变量 x 上，输入 0.9744，按 EXE 确认，将 x_D 的值赋值给变量 x；按 > 将反色光标移动到变量 y 上，输入 0.9744，按 EXE 确认，将 $y_1 = x_D$ 的值赋值给变量 y；赋值完成后按 ↩ 或 AC 返回到计算界面。

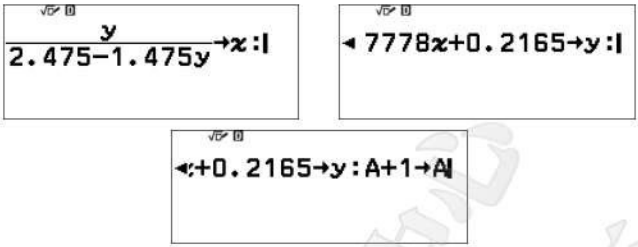


根据图解过程，令x和y在平衡曲线和精馏段操作线之间进行相互迭代，迭代到$x<x_d=0.4790$时，改在平衡曲线和提馏段操作线之间进行相互迭代，直到$x<x_W$结束。为便于记录塔板层数，使用变量 A 进行计数。

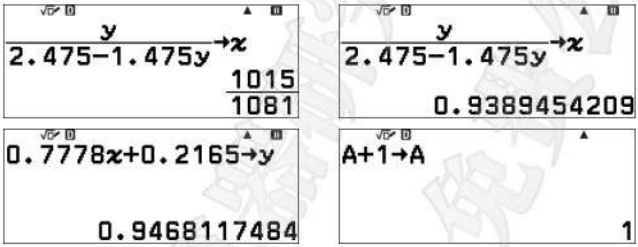
在图解过程中，从操作线到平衡曲线是画水平线，因此需要将相平衡方程进行变形，即

$$y=\frac{2.475x}{1+(2.475-1)x} \quad \Longrightarrow \quad x=\frac{y}{2.475-1.475y}$$

按 ⬆ . (y) = 2.475 − 1.475 ⬆ . (y) > ▭（目录）⑨（多语句 / 赋值）⑧（→x）输入相平衡方程，按 ▭（目录）⑨（多语句 / 赋值）①（:）输入多语句分隔符；按 0.7778 ⓧ + 0.2165 ▭（目录）⑨（多语句 / 赋值）⑨（→y）输入精馏段操作线方程，按 ▭（目录）⑨（多语句 / 赋值）①（:）输入多语句分隔符；按 ⬆ ④（A）+ 1 ▭（目录）⑨（多语句 / 赋值）②（→A）输入记录塔板层数的算式。

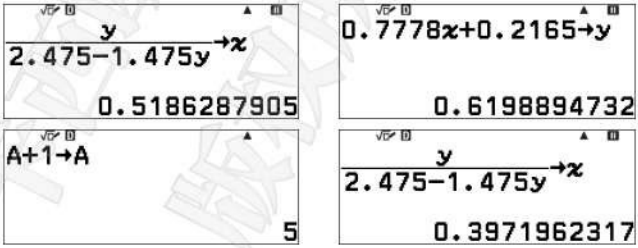


按 EXE 执行计算（x_1的结果为分数，可按 S⇔D 转换为小数形式），连续按 EXE 进行迭代。



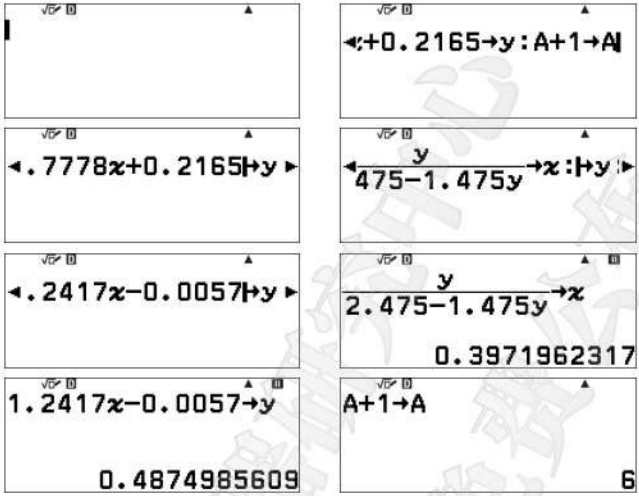
当梯级跨过点$d(0.4790,\ 0.5891)$后，需要在平衡曲线和提馏段操作线之间进行相互迭代，因此应注意每次迭代的x值结果。当x值计算结果小于0.4790时，应立即暂停计算。

第 5 次迭代结束后，开始第 6 次迭代时，$x_6=0.3972<0.4790$，此时应立即暂停计算。

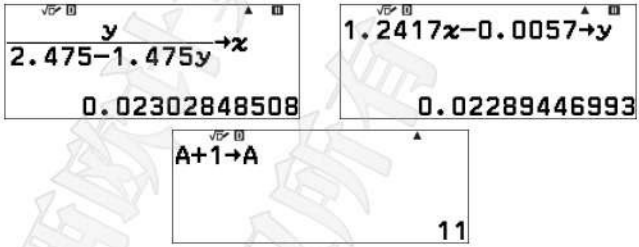


按 AC 暂停计算，然后按◁进入编辑表达式的状态，连续按 6 次◁将光标移动到“$\rightarrow y$”的前面，再按 14 次 DEL 删除$0.7778x+0.2165$，输入 1.2417 x − 0.0057，将第二个表达式改为提馏段操作线方程，继续连续按 EXE 执行计算。修

改表达式后首次迭代的 A 值记为进料板的层数。



继续连续按 EXE 进行迭代，直到 x 的值小于 0.0235，将本次迭代作为最后一次迭代过程，算出 A 值后结束。



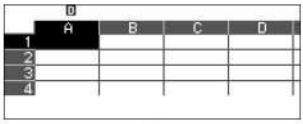
由此得到，理论塔板数为 11 层，精馏段为第 1～5 层，第 6 层进料，提馏段为第 7～11 层。

可见，使用多语句与赋值计算功能进行计算得到的结果与图解法是一致的。

3. 使用数据表格功能求解

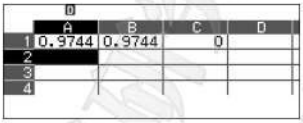
按 ⏻ 打开主屏幕，按 ④ 进入“数据表格”应用。





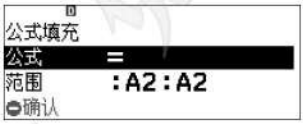
参照图解过程，在数据表格中，使用 A 列代入相平衡方程计算 x 值，使用 B 列代入精馏段或提馏段操作线方程计算 y 值，使用 C 列记录塔板层数。

当反色光标位于 A1 单元格上时，输入 0.9744，按 EXE 确认；按 ▷ ▲ 将反色光标移动到 B1 上，输入 0.9744，按 EXE 确认；按 ▷ ▲ 将反色光标移动到 C1 上，输入 0，按 EXE 确认；按 ◁ ◁ 将反色光标移动到 A2 上。



按 ⚙（工具）打开工具菜单，按 ① 选择“公式填充”，进入公式填充界面。

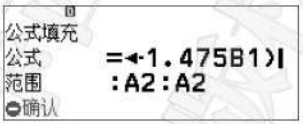


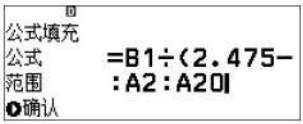


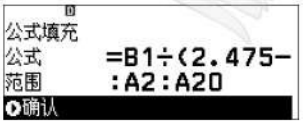
根据相平衡方程，应当填充公式

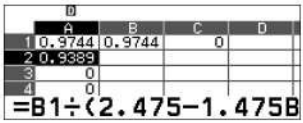
$$A2 = B1 \div (2.475 - 1.475B1)$$

按 ⬆ ⑤（B）1 ÷ (2.475 − 1.475 ⬆ ⑤（B）1) 输入公式，按 EXE 确认；按 ▷ 修改范围，按 ▼ 将光标移动到末尾，输入 0 将范围修改为 A2:A20，按 EXE 确认；按 EXE 执行计算。









按▷将反色光标移动到 B2 上，按 ⚙（工具）打开工具菜单，按 ① 选择“公式填充”，进入公式填充界面。根据精馏段操作线方程，应当填充公式

$$B2=0.7778A2+0.2165$$

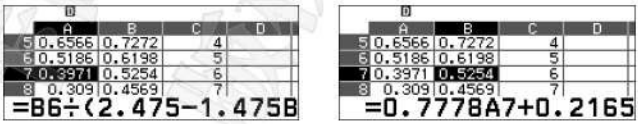
按 0.7778 ↑ ④（A）2 ⊕ 0.2165 输入公式，按 EXE 确认；按▷修改范围，按▽将光标移动到末尾，输入 0 将范围修改为 B2:B20，按 EXE 确认；按 EXE 执行计算。



按▷将光标移动到 C2 上，按 ⚙（工具）打开工具菜单，按 ① 选择“公式填充”，进入公式填充界面。仿照上面的方法，填充公式C2＝C1＋1，范围修改为 C2 : C20。



使用方向键（△▽◁▷）或翻页键（△▽）查看数据表格计算结果。当层数C7＝6时，出现A7＝x_6＜0.4790 的情况，此时应当按▷将光标移动到 B7 上，将 B7 以下的单元格公式修改为提馏段操作线方程。



按 ⚙（工具）打开工具菜单，按 ① 选择“公式填充”，进入公式填充界面。根据提馏段操作线方程，应当填充公式

$$B7=1.2417A7-0.0057$$

按 1.2417 ⏫ ④（A）7 ⊖ 0.0057 输入公式，按 EXE 确认；按 ⊳ 修改范围，按 ⏬ 将光标移动到末尾，按 ⌫ 删除最后一个数字 7，输入 20 将范围修改为 B7：B20，按 EXE 确认；按 EXE 执行计算。



使用方向键（⏶⏷⏴⏵）或翻页键（⏫⏬）查看数据表格计算结果。可按 ⚙（工具）打开工具菜单，按 ⓪ 选择“单元格显示内容”，然后按 ②（数值）将单元格显示内容更改为数值。可以看到，当层数 C12 = 11 时，出现 A12 = x_{11} < 0.0235 的情况，即该行计算结果表示最后一层理论塔板。



由此得到，理论塔板数为 11 层，精馏段为第 1～5 层，第 6 层进料，提馏段为第 7～11 层。

可见，使用数据表格功能进行计算得到的结果也是与图解法一致的。

附录一　常见问题解答

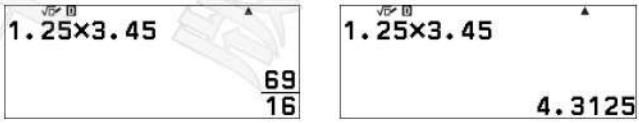
问题 1　如何将计算器恢复为出厂设置？（初始化计算器）

按 ⌂ 打开主屏幕，然后进入任意一个应用之后，按 ☰（设置）打开设置菜单，按 ③ 选择“复位”；再按 ③ 选择“全部初始化”；最后按 ① 选择“是”，此时计算器显示主屏幕，表明计算器已恢复为出厂设置。



问题 2　计算器显示的结果是分数或带根号、π 的结果，如何切换为小数？

按 ⑬ 即可。



也可以按 ⬆ ⑬ (↻) 打开转换菜单，然后按 ② 选择“小数”。

转换菜单内容随着计算结果类型的不同可能会有所不同。



如果需要计算结果直接以小数形式输出，可以将计算器的输入/输出设置更改为“**数学输入/小数输出**”。按 ☰（设置）①（计算设置）①（输入/输出）②（数学输入/小数输出）完成设置后，按 AC 退出。（若计算器显示主屏幕，需要进入任意一个应用之后再进行设置。）

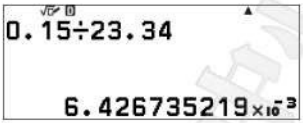


问题 3　计算器显示的结果含有指数，这是什么原因？如何解决？

为了显示更多的有效数字位数，计算器默认的显示格式是将绝对值大于或等于1×10^{10}（普通记数法表示上限）和绝对值小于0.01的数（普通记数法表示下限）用科学记数法（有关科学记数法的知识请参考中学数学教材相关内容）来表示。由于计算器的显示位数是10位，因此普通记数法表示上限是一定的，而普通记数法表示下限可以降到

1×10^{-9}。这样有些比较小的数可以恢复为小数的表示。

例如计算0.15 ÷ 23.34，计算器默认给出的结果（转换为小数后）如下图所示：



如果将记数法的下限设置为“常规格式 2”的类型，即可恢复为小数的形式。

按 ☰（设置）①（计算设置）③（显示格式）③（常规格式(Norm)）②（Norm2:0.00123）完成设置，按 AC 退出，再按 EXE 重新执行计算即可。（可能还需要按 S⇔D 转换成小数；若计算器显示主屏幕，需要进入任意一个应用之后再进行设置。）



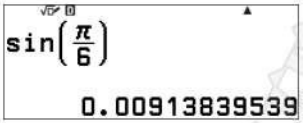
问题 4　屏幕上方出现“D”，“E”，“i”，“∠”等符号，是何含义？对计算结果是否有影响？

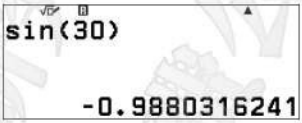
屏幕上方的这些符号是指示当前计算器所处状态的指示符。各指示符的含义及对结果的影响如下表所示：

指示符	含义	对计算的影响
S	⇧（SHIFT）键被按下。	此时可输入面板上按键左上方印刷的功能。
√	计算器处于数学输入状态。	无
D R G	计算器当前使用的角度单位指示符。D 代表角度制，R 代表弧度制，G 代表百分度制。	涉及到三角函数、反三角函数的计算结果。
FIX SCI E	显示 FIX 表示用户指定了定点小数位数，显示 SCI 表示用户指定了固定位数的科学记数法，显示 E 表示计算结果将带有工学词头符号（μ、k、M 等）。	仅影响显示的格式。
i ∠	“复数”应用或“方程”应用中，显示 i 代表复数结果以代数形式 $a+b\mathrm{i}$ 输出，显示∠代表复数结果以极坐标形式 $r\angle\theta$ 输出。	仅影响复数的输出结果形式。
⇩	开启了分数结果手动化简的功能。	仅影响分数计算的结果。
✔	开启了运算验证功能。	该状态下计算器只能判断关系式的真值，无法执行计算。
◀	可返回到上一级菜单。	无
▼▲	有可以重现的计算历史记录，或者在当前界面之前或之后有其他界面内容。	无
II	表示此时的结果是多语句表达式的中间结果。	无
☀	太阳能电池板能够接受到光能并转化为电能供计算器使用。	无

问题 5　为何三角函数或反三角函数计算结果不正确、含有三角函数、反三角函数的定积分计算结果不正确？如何解决？

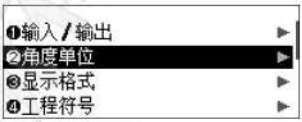
用户没有设置正确的角度单位。凡是涉及到三角函数、反三角函数的计算，必须设置好角度单位。在不适当的角度单位下执行的计算，对于计算器而言并没有算错，而是用户没有指定正确的角度单位而导致的错误。例如：





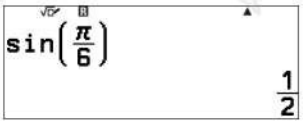
按 ☰（设置）①（计算设置）②（角度单位），可以在度（D，角度制）、弧度（R，弧度制）、百分度（G，百分度制）三个选项中选择需要的角度单位制，然后按 OK 或选项编号对应的按键确认完成设置，再按 AC 退出。（若计算器显示主屏幕，需要进入任意一个应用之后再进行设置。）







设置正确的角度单位后，重新执行计算，即可得到正确结果。





此外，还可以在计算的时候直接指定参与计算的角度单位。例如当计算器的角度单位使用角度制的时候，要计算$\sin\frac{\pi}{6}$，在输入$\frac{\pi}{6}$之后，按 ⑩（目录）④（角度 / 坐标转换 / 度分秒），然后按 ②（弧度）即可输入弧度单位（也可按 ↑ ⑩ (≡) ∨ ⓪ 输入），再按 › EXE 得到计算结果。



卡西欧计算器研究社 版权所有

附录二　常用内置科学常数

名称	符号	数值及单位	所在类别
普朗克常量	h	$6.62607015\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s}$	普适常数
质子静止质量	m_p	$1.67262192595\times10^{-27}\ \mathrm{kg}$	原子与原子核常数
中子静止质量	m_n	$1.67492750056\times10^{-27}\ \mathrm{kg}$	
电子静止质量	m_e	$9.1093837139\times10^{-31}\ \mathrm{kg}$	
里德伯常量	R_∞	$10973731.568157\ \mathrm{m^{-1}}$	
原子质量单位	m_u	$1.66053906892\times10^{-27}\ \mathrm{kg}$	物理与化学常数
法拉第常量	F	$96485.33212\ \mathrm{C\cdot mol^{-1}}$	
阿伏伽德罗常量	N_A	$6.02214076\times10^{23}\ \mathrm{mol^{-1}}$	
玻尔兹曼常量	k	$1.380649\times10^{-23}\ \mathrm{J\cdot K^{-1}}$	
标准状态气体摩尔体积	V_m	$0.02271095464\ \mathrm{m^3\cdot mol^{-1}}$	
理想气体常量	R	$8.314462618\ \mathrm{J\cdot mol^{-1}\cdot K^{-1}}$	
斯特藩-玻尔兹曼常量	σ	$5.670374419\times10^{-8}\ \mathrm{W\cdot m^{-2}\cdot K^{-4}}$	
标准大气压	atm	101325 Pa	采用值
摄氏温标	t	273.15 K	其他

科学常数使用国际科技数据委员会 CODATA（2022）的推荐值，表中数据为 fx-999CN CW II 在计算中所使用的数值。

附录三　元素周期表

周期	IA 1	IIA 2	IIIB 3	IVB 4	VB 5	VIB 6	VIIB 7	8	VIII 9	10	IB 11	IIB 12	IIIA 13	IVA 14	VA 15	VIA 16	VIIA 17	0 18	电子层	各层电子数
1	1 H 氢 $1s^1$ 1.008																	2 He 氦 $1s^2$ 4.003	K	2
2	3 Li 锂 $2s^1$ 6.94*	4 Be 铍 $2s^2$ 9.012											5 B 硼 $2s^22p^1$ 10.81	6 C 碳 $2s^22p^2$ 12.01	7 N 氮 $2s^22p^3$ 14.01	8 O 氧 $2s^22p^4$ 16.00	9 F 氟 $2s^22p^5$ 19.00	10 Ne 氖 $2s^22p^6$ 20.18	L K	8 2
3	11 Na 钠 $3s^1$ 22.99	12 Mg 镁 $3s^2$ 24.31											13 Al 铝 $3s^23p^1$ 26.98	14 Si 硅 $3s^23p^2$ 28.09	15 P 磷 $3s^23p^3$ 30.97	16 S 硫 $3s^23p^4$ 32.06	17 Cl 氯 $3s^23p^5$ 35.45	18 Ar 氩 $3s^23p^6$ 39.95	M L K	8 8 2
4	19 K 钾 $4s^1$ 39.10	20 Ca 钙 $4s^2$ 40.08	21 Sc 钪 $3d^14s^2$ 44.96	22 Ti 钛 $3d^24s^2$ 47.87	23 V 钒 $3d^34s^2$ 50.94	24 Cr 铬 $3d^54s^1$ 52.00	25 Mn 锰 $3d^54s^2$ 54.94	26 Fe 铁 $3d^64s^2$ 55.85	27 Co 钴 $3d^74s^2$ 58.93	28 Ni 镍 $3d^84s^2$ 58.69	29 Cu 铜 $3d^{10}4s^1$ 63.55	30 Zn 锌 $3d^{10}4s^2$ 65.38**	31 Ga 镓 $4s^24p^1$ 69.72	32 Ge 锗 $4s^24p^2$ 72.63	33 As 砷 $4s^24p^3$ 74.92	34 Se 硒 $4s^24p^4$ 78.97	35 Br 溴 $4s^24p^5$ 79.90	36 Kr 氪 $4s^24p^6$ 83.80	N M L K	8 18 8 2
5	37 Rb 铷 $5s^1$ 85.47	38 Sr 锶 $5s^2$ 87.62	39 Y 钇 $4d^15s^2$ 88.91	40 Zr 锆 $4d^25s^2$ 91.22	41 Nb 铌 $4d^45s^1$ 92.91	42 Mo 钼 $4d^55s^1$ 95.95	43 Tc 锝 $4d^55s^2$ [99]	44 Ru 钌 $4d^75s^1$ 101.1	45 Rh 铑 $4d^85s^1$ 102.9	46 Pd 钯 $4d^{10}$ 106.4	47 Ag 银 $4d^{10}5s^1$ 107.9	48 Cd 镉 $4d^{10}5s^2$ 112.4	49 In 铟 $5s^25p^1$ 114.8	50 Sn 锡 $5s^25p^2$ 118.7	51 Sb 锑 $5s^25p^3$ 121.8	52 Te 碲 $5s^25p^4$ 127.6	53 I 碘 $5s^25p^5$ 126.9	54 Xe 氙 $5s^25p^6$ 131.3	O N M L K	8 18 18 8 2
6	55 Cs 铯 $6s^1$ 132.9	56 Ba 钡 $6s^2$ 137.3	57~71 镧系 La~Lu	72 Hf 铪 $5d^26s^2$ 178.5	73 Ta 钽 $5d^36s^2$ 180.9	74 W 钨 $5d^46s^2$ 183.8	75 Re 铼 $5d^56s^2$ 186.2	76 Os 锇 $5d^66s^2$ 190.2	77 Ir 铱 $5d^76s^2$ 192.2	78 Pt 铂 $5d^96s^1$ 195.1	79 Au 金 $5d^{10}6s^1$ 197.0	80 Hg 汞 $5d^{10}6s^2$ 200.6	81 Tl 铊 $6s^26p^1$ 204.4	82 Pb 铅 $6s^26p^2$ 207.2	83 Bi 铋 $6s^26p^3$ 209.0	84 Po 钋 $6s^26p^4$ [210]	85 At 砹 $6s^26p^5$ [210]	86 Rn 氡 $6s^26p^6$ [222]	P O N M L K	8 18 32 18 8 2
7	87 Fr 钫 $7s^1$ [223]	88 Ra 镭 $7s^2$ [226]	89~103 锕系 Ac~Lr	104 Rf 𬬭 $(6d^27s^2)$ [267]	105 Db 𬭛 $(6d^37s^2)$ [268]	106 Sg 𬭳 $(6d^47s^2)$ [271]	107 Bh 𬭛 $(6d^57s^2)$ [272]	108 Hs 𬭶 $(6d^67s^2)$ [277]	109 Mt 鿏 $(6d^77s^2)$ [276]	110 Ds 𫟼 $(6d^87s^1)$ [281]	111 Rg 𬬭 $(6d^{10}7s^1)$ [280]	112 Cn 鿔 $(6d^{10}7s^2)$ [285]	113 Nh 鉨 $(7s^27p^1)$ [278]	114 Fl 鈇 $(7s^27p^2)$ [289]	115 Mo 镆 $(7s^27p^3)$ [289]	116 Lv 鉝 $(7s^27p^4)$ [293]	117 Ts 𫓧 $(7s^27p^5)$ [293]	118 Og 氿 $(7s^27p^6)$ [294]	Q P O N M L K	8 18 32 32 18 8 2

3 Li 锂 $2s^1$ 6.94* — 元素符号 / 元素名称 / 价层电子排布 / 相对原子质量 / 原子序数

1. 虚线框的元素为人造元素。
2. 带圆括号的价层电子排布为可能的价层电子排布方式。
3. 相对原子质量选自IUPAC原子量表（2025），保留四个有效数字，带方括号的为从放射性元素的各同位素中，选取一个作为质量数示例。

* 由于人为因素，锂的相对原子质量保留三个有效数字，且最后一位±6。

** 锌的相对原子质量在最后一位±2。

镧系	57 La 镧 $5d^16s^2$ 138.9	58 Ce 铈 $4f^15d^16s^2$ 140.1	59 Pr 镨 $4f^36s^2$ 140.9	60 Nd 钕 $4f^46s^2$ 144.2	61 Pm 钷 $4f^56s^2$ [145]	62 Sm 钐 $4f^66s^2$ 150.4	63 Eu 铕 $4f^76s^2$ 152.0	64 Gd 钆 $4f^75d^16s^2$ 157.2	65 Tb 铽 $4f^96s^2$ 158.9	66 Dy 镝 $4f^{10}6s^2$ 162.5	67 Ho 钬 $4f^{11}6s^2$ 164.9	68 Er 铒 $4f^{12}6s^2$ 167.3	69 Tm 铥 $4f^{13}6s^2$ 168.9	70 Yb 镱 $4f^{14}6s^2$ 173.0	71 Lu 镥 $4f^{14}5d^16s^2$ 175.0
锕系	89 Ac 锕 $6d^17s^2$ [227]	90 Th 钍 $6d^27s^2$ 232.0	91 Pa 镤 $5f^26d^17s^2$ 231.0	92 U 铀 $5f^36d^17s^2$ 238.0	93 Np 镎 $5f^46d^17s^2$ [237]	94 Pu 钚 $5f^67s^2$ [239]	95 Am 镅 $5f^77s^2$ [243]	96 Cm 锔 $5f^76d^17s^2$ [247]	97 Bk 锫 $5f^97s^2$ [247]	98 Cf 锎 $5f^{10}7s^2$ [252]	99 Es 锿 $5f^{11}7s^2$ [252]	100 Fm 镄 $5f^{12}7s^2$ [257]	101 Md 钔 $(5f^{13}7s^2)$ [258]	102 No 锘 $(5f^{14}7s^2)$ [259]	103 Lr 铹 $(5f^{14}6d^17s^2)$ [262]

参考文献

[1] 张祖德，刘双怀，郑化桂. 无机化学：要点·例题·习题[M]. 4 版. 合肥：中国科学技术大学出版社，2011.

[2] 王莉，张丽荣，于杰辉，宋天佑. 无机化学习题解答[M]. 5 版. 北京：高等教育出版社，2024.

[3] 杨文博，牟文生，于永鲜，孟长功. 无机化学（第七版）精要与习题解析[M]. 北京：高等教育出版社，2025.

[4] 武汉大学. 分析化学（上册）[M]. 6 版. 北京：高等教育出版社，2016.

[5] 曾百肇，赵发琼. 分析化学习题解答（上册）[M]. 北京：高等教育出版社，2018.

[6] 江万权，金谷. 分析化学：要点·例题·习题·真题[M]. 3 版. 合肥：中国科学技术大学出版社，2019.

[7] 武汉大学化学系分析化学教研室. 分析化学例题与习题：定量化学分析及仪器分析[M]. 北京：高等教育出版社，1999.

[8] 侯文华，吴强，郭琳，彭路明. 物理化学学习辅导[M]. 北京：高等教育出版社，2022.

[9] 印永嘉，奚正楷，张树永，等. 物理化学简明教程[M]. 5 版. 北京：高等教育出版社，2023.

[10] 天津大学物理化学教研室. 物理化学（上册）[M]. 7 版. 北京：高等教育出版社，2024.

[11] 陈敏恒，丛德滋，齐鸣斋，潘鹤林，黄婕. 化工原理（上册）[M]. 5 版. 北京：化学工业出版社，2019.

[12] 陈敏恒，丛德滋，齐鸣斋，潘鹤林，黄婕. 化工原理（下册）[M]. 5 版. 北京：化学工业出版社，2020.

[13] 杨祖荣. 化工原理[M]. 4 版. 北京：化学工业出版社，2020.
[14] 谭天恩，窦梅. 化工原理（上册）[M]. 4 版. 北京：化学工业出版社，2013.
[15] 谭天恩，窦梅. 化工原理（下册）[M]. 4 版. 北京：化学工业出版社，2013.

郑 重 声 明

本书著作权归卡西欧（中国）贸易有限公司所有，仅供 CASIO fx-999CN CW II 中文版、fx-999CN CW II MAX 中文版（或 CASIO fx-991CN CW II 中文版、fx-991CN CW II MAX 中文版）计算器的用户作为参考资料。

未经卡西欧（中国）贸易有限公司的书面允许，严禁除卡西欧（中国）贸易有限公司之外的任何单位或个人对本书的部分或全部内容进行包括但不限于复制、抄袭、转载、模仿、引用、影印、翻译、将本书的案例等相关内容直接或间接上传至网络平台传播或销售等之中的一项或多项行为。

最终解释权归卡西欧（中国）贸易有限公司所有。

CASIO

CLASSWIZ

卡西欧计算器研究中心

卡西欧科学函数计算器

fx-999CN CW II 中文版

版权所有 免费公布

大学化学与化工计算应用案例集

卡西欧（中国）贸易有限公司 https://www.casio.com.cn/scientific-calculators/

上海市浦东新区海阳西路 555 号前滩中心 16 楼 邮政编码：200062

客户咨询中心：400-700-6655 受理时间：9:00—18:00（双休日、节假日及本公司休假日除外）