

课题名称：小二号，黑体，加粗，居中，行距 18 磅，段前 0.5 行，段后 0.5 行。上下各空一行。

## 生成函数在稳定常数测定中的应用

### 摘要

四号，黑体，居中。行距 18 磅。段前 0.5 行，段后 0.5 行。

生成函数法是一种测定稳定常数的常用方法。这种方法既可以用于酸稳定常数的测定，又可以用于配合物稳定常数的测定。根据数据处理方式的不同，生成函数法可分为 ……。

空一行

**关键词：** 稳定常数，生成函数，电位滴定，酸，配合物

五号宋体，加粗。

摘要正文 300 字左右，五号宋体，首行缩进 2 个汉字符。行距 18 磅。

关键词 3~5 个，五号宋体。逗号分开，最后一个关键词后面无标点符号。

装  
订  
线

## Application of Bjerrum Function in Determination of Stability Constants

四号 Times New Roman 居中，段前 0.5 行，段后 0.5 行。行距 18 磅。

### ABSTRACT

换页。英文课题名称：小二号，Times New Roman，加粗，居中，行距 18 磅，段前 0.5 行，段后 0.5 行。上下各空一行。

Bjerrum function method is a common method to determinate the stability constants. It can determinate the acid stability constants but also the complexes stability constants. According to the different processing methods of data, Bjerrum function method can be subdivided into .....

五号 Times New Roman, 首行缩进 2 个汉字符，行距 18 磅。

空一行

**Key words:** stability constants, bjerrum function, potential titration, acid, coordination compound

五号 Times New Roman 加粗

五号 Times New Roman，各关键词之间逗号分开，逗号后加一空格。行距 18 磅。

装

订

线

五号宋体（英文 Times New Roman），  
单倍行距

## 目 录

换页，上下各空一行；四号黑体  
居中，目录 2 字中间空 1 格，段  
前 0.5 行，段后 0.5 行。行距 18  
磅。

1 引 言.....	1
1.1 稳定常数测定的意义.....	1
1.2 稳定常数测定常用的方法.....	1
1.2.1 Gorden 法.....	1
1.2.2 Monte Carlo 法.....	1
1.3 生成函数法的基本概况.....	1
1.4 本文所作的工作.....	1
2 理论部分.....	2
2.1 生成函数法的基本关系式.....	2
2.2 各种生成函数法的测定原理.....	2
2.2.1 直接计算生成函数法.....	2
2.2.2 分段拟合生成函数法.....	2
2.2.3 半整数生成函数法.....	2
3 实验部分.....	3
3.1 仪器和试剂.....	3
3.1.1 仪器.....	3
3.1.2 试剂.....	3
3.2 溶液的配制及标定.....	3
3.2.1 NaOH 标准溶液的配制及标定.....	3
3.2.2 氯化钾离子强度调节剂的配制.....	3
3.3 实验步骤.....	3
4 结果和讨论.....	4
4.1 多元酸体系的结果和讨论.....	4
4.1.1 直接计算法.....	4
4.1.2 半整数法.....	4
4.1.3 分段拟合法.....	5
4.2 氨基酸合铜体系的结果和讨论.....	5
4.3 关于计算方法的讨论.....	5
4.4 关于其他问题的讨论.....	5
5 结论和展望.....	6
5.1 结论.....	6
5.2 展望.....	6
参考文献.....	7
谢 辞.....	8

## 1 引言

1 级标题：换页，空一行；四号，黑体（英文 Times New Roman），居中，行距 18 磅，段前 0.5 行，段后 0.5 行。

### 1.1 稳定常数测定的意义

稳定常数是化合物的基本性质之一，稳定常数的测定是化合物研究的一个重要方面。通过对化合物稳定常数的测定，可以……。

2 级标题：五号，黑体（英文 Times New Roman），顶格，序号与题名之间空一格，行距 18 磅，段前 0.5 行，段后 0.5 行。

### 1.2 稳定常数测定常用的方法

#### 1.2.1 Gorden 法

对待测酸是未知浓度及未知组分数值的体系而言，在求解稳定常数前，先需要确定体系的组分数和各个组分的初始浓度<sup>[1]</sup>。在介质和离子强度一定的条件下，……。

#### 1.2.2 Monte Carlo 法

3 级标题：五号，黑体（英文 Times New Roman），缩进 2 个汉字符书写序号，序号与题名之间空一格，行距 18 磅，段前 0.5 行，段后 0.5 行。

### 1.3 生成函数法的基本概况

配合物或酸稳定常数的测定时有报道<sup>[2-5]</sup>。生成函数法是测定稳定常数的常用的方法，……。

### 1.4 本文所作的工作

本文将生成函数法作为一个整体，分别用直接计算生成函数法、分段拟合生成函数法及半整数生成函数法对配合物和酸稳定常数的测定进行了研究。主要做了以下工作：

（1）推导了直接计算生成函数法、分段拟合生成函数法及半整数生成函数法的计算式，并讨论了这几种方法的应用特点，……。

（2）以 NaOH 为滴定剂，用 pH 电位滴定法分别测定了……。

（3）……。

……。

正文：五号，宋体（英文 Times New Roman），两端对齐，段落首行左缩进 2 个汉字符，行距 18 磅，段前 0 行，段后 0 行。

## 2 理论部分

每章另起一页

### 2.1 生成函数法的基本关系式

根据配位（或酸碱）反应的平衡关系，可以得到生成函数<sup>[6]</sup>与配合物（或酸）的各级累积稳定常数及溶液中游离配位剂（或氢离子）的平衡浓度之间的关系：

$$\bar{n} = \frac{\sum_{j=1}^n j\beta_j[L]^j}{1 + \sum_{j=1}^n \beta_j[L]^j} \quad \text{或} \quad \bar{n} = \frac{\sum_{j=1}^n j\beta_j[H^+]^j}{1 + \sum_{j=1}^n \beta_j[H^+]^j} \quad (2.1)$$

式（2.1）中， $\bar{n}$  是配合物（或酸）的生成函数； $\beta_j$  ( $j=1,2,\dots,n$ ) 是配合物（或酸）的各级累积稳定常数； $[L]$ （或 $[H^+]$ ）是溶液中游离配位剂（或氢离子）的平衡浓度（其中， $L$  的电荷已略）。

将式（2.1）写作以下形式，可以得到生成函数法测定配合物（或酸）稳定常数的基本关系式：

$$\bar{n} + \sum_{j=1}^n \beta_j[L]^j(\bar{n} - j) = 0 \quad \text{或} \quad \bar{n} + \sum_{j=1}^n \beta_j[H^+]^j(\bar{n} - j) = 0 \quad (2.2)$$

利用式（2.2），可以……。

……。

### 2.2 各种生成函数法的测定原理

#### 2.2.1 直接计算生成函数法

……。

#### 2.2.2 分段拟合生成函数法

……。

#### 2.2.3 半整数生成函数法

……。

（1）公式应另起一行，正文中的公式、算式或方程式等应编排序号，公式的编号用圆括号括起，序号标注于该式所在行（当有续行时，应标注于最后一行）的行末。公式按章节顺序编号，如（2.2）表示第二章的第二个公式。公式序号必须连续，不得重复或跳缺。重复引用的公式不得另编新序号。公式和编号之间不加虚线。

（2）公式：五号，宋体（英文 Times New Roman），使用公式编辑器，居中，式号右对齐。

（3）公式行行距 1.5 倍，段前 0 行，段后 0 行。

（4）计算式及正文中涉及的物理量和变量，应为斜体；元素符号、记号及运算符号，应为正体。

## 3 实验部分

### 3.1 仪器和试剂

#### 3.1.1 仪器

798-MPT 全自动电位滴定仪（瑞士万通）；  
氢离子选择性复合电极（瑞士万通）；

.....。

#### 3.1.2 试剂

氢氧化钠（A.R.）；  
邻苯二甲酸氢钾（容量基准试剂）；  
氯化钾（A.R.）；

.....。

### 3.2 溶液的配制及标定

#### 3.2.1 NaOH 标准溶液的配制及标定

称 12.0g 固体 NaOH 至 100mL 烧杯，蒸馏水溶解，转移至试剂瓶，用蒸馏水稀释至总体积为 3L，待标定。

将基准邻苯二甲酸氢钾于 105°C~110°C 烘至恒重（约 3 小时），置于干燥器，冷却至室温。精确称取基准邻苯二甲酸氢钾若干（见表 3.1）至 100mL 烧杯，分别加入 50mL 蒸馏水，溶解，用待标定的 NaOH 溶液自动电位滴定，平行实验三次。NaOH 标准溶液的标定结果见表 3.1。

表 3.1 氢氧化钠溶液浓度标定

编号	邻苯二甲酸氢钾质量/g	NaOH 溶液体积/mL	NaOH 溶液浓度/(mol·L <sup>-1</sup> )
1	0.1118	5.91	0.0926
2	0.1028	5.42	0.0929
3	0.1124	5.91	0.0932

#### 3.2.2 氯化钾离子强度调节剂的配制

.....。

### 3.3 实验步骤

.....。

物理量后不允许出现两次“/”，第二次出现的“/”，用“-1”次方表示。

## 4 结果和讨论

### 4.1 多元酸体系的结果和讨论

#### 4.1.1 直接计算法

.....。

三级以下单独占行标题采用 A、B、C 和 a、b、c.... 或 (1)、(2)、(3) 和 ①、②、③...。黑体五号。标题序号缩进 2 个汉字符。序号和标题之间空一格。五号，黑体（英文 Times New Roman），行距 18 磅，段前 0 行，段后 0 行。

#### 4.1.2 半整数法

##### A. 半整数法的求解过程

##### a. 可以直接得到半整数的情况

从表 4.1 可见，当  $\bar{n}$  为 0.5 和 1.5 时的 pH 分别是 5.32 和 2.74，即.....。

##### b. 无法直接得到半整数的情况

在用半整数生成函数法直接求解时，会遇到这样的问题.....。表 4.4 列出了滴定过程中乙二酸溶液的各主要物理量的部分数据。从表 4.4 可见，.....。

图表可横版

表序写在表题左方不加标点，空一格写表题，表题末尾不加标点，表格逐章编序，表序必须连续，如表 4.4 表示第四章的第四个表。表题：小五，黑体（英文 Times New Roman），居中置于表上方，行距 18 磅，段前 0 行，段后 0 行。

(1) 表格上下与正文之间各空一行；  
(2) 采用三线表，两端与页面对齐；  
(3) 表中文字：小五，宋体（英文 Times New Roman），行距 18 磅，段前 0 行，段后 0 行。

表 4.4 草酸的部分数据列表

$V/\text{mL}$	$E/\text{mV}$	pH	$[\text{H}^+]/(\text{mol}\cdot\text{L}^{-1})$	$\bar{n}$
.....	.....	.....	.....	.....
1.00	$2.62\times 10^2$	2.22	$6.07\times 10^{-3}$	1.14
1.50	$2.60\times 10^2$	2.27	$5.42\times 10^{-3}$	1.10
.....	.....	.....	.....	.....

$V/\text{mL}$	$E/\text{mV}$	pH	$[\text{H}^+]/(\text{mol}\cdot\text{L}^{-1})$
.....	.....	.....	.....
.....	.....	.....	.....
.....	.....	.....	.....

续表 4.4

- (1) 若表格分页，则该表第 2 页的表题省略，但表头（即“ $V/\text{mL}$ ---”所在行）应重写，并在表右上方加注“续表 X.X”；  
 (2) “续表 X.X”的格式：小五，黑体（英文 Times New Roman），行距 18 磅，段前 0 行，段后 0 行，右空 2 格。

- (1) 图居中，上下与正文之间各空一行；  
 (2) 图中文字：小五，宋体（英文 Times New Roman），行距 1 倍，段前 0 行，段后 0 行。

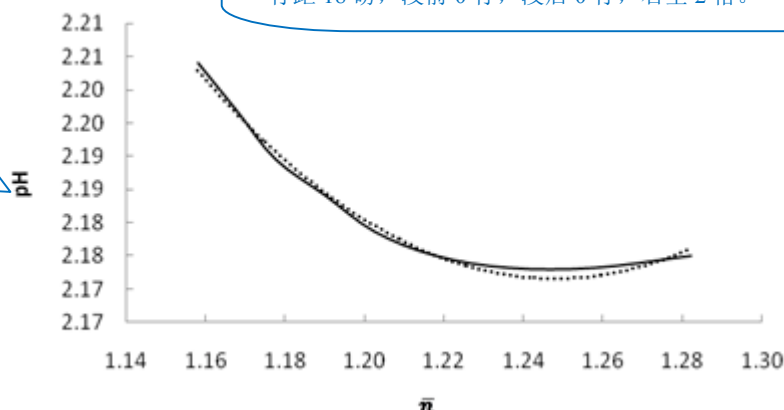


图 4.1 乙二酸  $\bar{n} \geq 1.15$  数据段曲线及其拟合曲线（实线--实际曲线，虚线--拟合曲线）

针对这种情况，可以采用多项式拟合的方法求解。以乙二酸为例，在 Excel 中，选取  $1.28 < \bar{n} < 1.15$  之间的数据，以  $\bar{n}$  为横坐标，pH 为纵坐标，做  $\bar{n}$ -pH 曲线（见图 4.1），并添加趋势线，选择相关系数  $R^2$  最接近 1 的多项式拟合方程，……。

## B. 半整数法的计算结果

利用半整数生成函数法，对各种多……实验数据分别进行处理，并求平均值，结果见……。

## C. 半整数法计算结果的

……。

### 4.1.3 分段拟合法

……。

## 4.2 氨基酸合铜体系的结果和讨论

……。

## 4.3 关于计算方法的讨论

## 4.4 关于其他问题的讨论

- (1) 插图应有图序和图题，全文插图以章分组编序号，图序必须连续，不得重复或跳缺。如图 4.1 表示第四章的第一幅图。  
 (2) 图题：小五，黑体（英文 Times New Roman），居中置于图下方，行距 18 磅，段前 0 行，段后 0 行。



同  
注  
mm  
段落号: (1) ...。  
(2) ...。  
(3) ...。

5 结论和展望

5.1 结论

(1) 生成函数法可以分为直接计算生成函数法、分段拟合生成函数法及半整数生成函数法。这三种方法有如下特点：①……；②……；③……。

(2) 本文运用三种不同生成函数法，测定了多元酸和氨基酸合铜配合物的稳定常数，得到了……。

(3) 三种生成函数法中无论哪一种方法，对待测酸或配合物稳定常数的大小均有一定的要求，如……。

……。

5.2 展望

(1) 生成函数法理论可靠，计算方便，但……。

(2) 在生成函数法的应用中，还有以下问题有待研究和解决：①……；②……。

……。

段内层次号：①…；②…。

装  
订  
线

注：外文期刊若只有卷，没有（或不分）期，则可以省略期号，如参考文献[1]英文示例。

## 参考文献

期刊中析出的文献

专著

报纸中析出的文献

学位论文

电子文献

论文集集中的析出文献

专利文献

- [1] 作者名. 题名[J]. 刊名, 年, 卷号(期号): 所引用文献在期刊中的起止页码.  
陈桂娥, 樊行雪, 许振良. 线性滴定中稳定常数测定方法比较[J]. 华东理工大学学报, 1996, 22(5): 620-6255.  
PETER G, ANTONIO S, ALBERTO V. Investigation of equilibria in solution determination of equilibrium constants with the HYPERQUAD suite of programs[J]. Talanta, 1996, 43: 1739-1753.
- [2] 作者名. 书名[M]. 出版地: 出版单位, 出版年: 引文页码.  
武汉大学. 分析化学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2000: 319-320.  
蒋有绪, 郭泉水, 马娟, 等. 中国森林群落分类及其群落学特征[M]. 北京: 科学出版社, 1998.
- [3] 作者名. 题名[D]. 授予单位所在地: 授予单位, 授予年. ————— 学位论文  
王燕. 氨基酸-金属离子体系的测定[D]. 上海: 同济大学化学系, 2009.
- [4] 作者名. 题名[N]. 报刊名, 年-月-日(版次).  
丁文祥. 数字革命与竞争国际化[N]. 中国青年报, 2000-11-20(15).
- [5] 作者名. 题名[C]// 论文集作(编)者. 论文集名. 出版地: 出版单位, 出版年: 所引用文献在文集集中的起止页码. ————— 论文集集中的析出文献  
钟文发. 非线性规划在可燃毒物配置中的应用[C]// 赵玮. 运筹学的理论与应用: 中国运筹学会第五届大会论文集. 西安: 西安电子科技大学出版社, 1996: 468-471.
- [6] 作者名. 电子文献名[DB/OL]. (发表或更新日期) [引用日期]. 获取或访问路径(即网址).  
萧钮. 出版业信息化迈入快车道[EB/OL]. (2001-12-19)[2002-04-15]. <http://www.creader.com/news/20011219/200112190019.html>.  
T URCOTTE D L. Fractals and chaos in geology and geophysics[M/OL]. New York: Cambridge University Press, 1992[1998-09-23]. <http://www.seg.org/reviews/mccorm30.html>.
- [7] 申请者. 专利名: 专利国别, 专利号[P]. 公告日期. ————— 专利文献  
刘加林. 多功能一次性压舌板: 中国, 92214985.2[P]. 1993-04-01.

.....  
.....

- (1) 按论文中参考文献出现的次序, 用阿拉伯数字自然编号, 序号加方括号, 顶格书写。
- (1) 五号, 宋体(英文 Times New Roman), 行距 18 磅, 段前 0 行, 段后 0 行。
- (2) 不同类别文献的著录格式, 见 GB/T7714-2005。
- (3) 参考文献不少于 10 篇, 其中外文文献不少于 2 篇(这是最低要求。各学院可以根据本学院情况制定数量要求)。
- (4) 作者三名以内的全部列出, 四名以上的列前三名, 中文后加“等”, 英文后加“et al”。

## 谢辞

正文内容

出自内心，有感而发。正文：五号，宋体（英文 Times New Roman），两端对齐，段落首行左缩进 2 个汉字符，行距 18 磅，段前 0 行，段后 0 行。

装

订

线