Origin 软件在物理化学实验数据处理中的应用

夏春兰
(武汉大学化学与分子科学学院　武汉 430072)

摘要　应用 Origin 软件在计算机上对物化实验数据进行作图、线性拟合、非线性曲线拟合等处理,从而求得需要的实验参数,可大大减少数据处理引入的误差,而且方便快速。

物理化学实验中常见的数据处理有:①公式计算;②用实验数据作图或对实验数据计算后作图;③线性拟合,求截距或斜率;④非线性曲线拟合;⑤作切线,求截距或斜率。

目前学生多用坐标纸手工作图;手工拟合直线,求斜率或截距;手工作曲线和切线,求斜率或截距。这种手工作图的方法不仅费时费力,而且误差较大。本来实验数据就有一定的误差,加上数据处理带来的较大误差,可想而知,所得结果的误差就更大。

随着计算机应用的深入发展,计算机作图软件越来越多。利用 Origin 软件可方便地进行作图、线性拟合、非线性曲线拟合等数据处理,能够满足物化实验数据处理的要求。下面介绍用 Origin 软件对物化实验数据处理的方法。

1　Origin 软件的一般用法

1.1　数据作图

Origin 可绘制散点图、点线图、柱形图、条形图或饼图以及双 Y 轴图形等,在物化实验中通常使用散点图或点线图。

Origin 有如下基本功能:①输入数据并作图,②将数据计算后作图,③数据排序,④选择需要的数据范围作图,⑤数据点屏蔽。

1.2　线性拟合

当绘出散点图或点线图后,选择 Analysis 菜单中的 Fit Linear 或 Tools 菜单中的 Linear Fit,即可对图形进行线性拟合。结果记录中显示拟合直线的公式、斜率和截距的值及其误差,相关系数和标准偏差等数据。在线性拟合时,可屏蔽某些偏差较大的数据点,以降低拟合直线的偏差。

1.3　非线性曲线拟合

Origin 提供了多种非线性曲线拟合方式:①在 Analysis 菜单中提供了如下拟合函数:多项式拟合、指数衰减拟合、指数增长拟合、S 形拟合、Gaussian 拟合、Lorentzian 拟合和多峰拟合;在 Tools 菜单中提供了多项式拟合和 S 形拟合。②在 Analysis 菜单中的 Non-linear Curve Fit 选项提供了许多拟合函数的公式和图形。③Analysis 菜单中的 Non-linear Curve Fit 选项可让用户自

© 1995-2006 Tsinghua Tongfang Optical Disc Co., Ltd.　All rights reserved.

定义函数。

在处理实验数据时,可根据数据图形的形状和趋势选择合适的函数和参数,以达到最佳拟合效果。多项式拟合适用于多种曲线,且方便易行,操作如下:

(1) 对数据作散点图或点线图。

(2) 选择 Analysis 菜单中的 Fit Polynomial 或 Tools 菜单中的 Polynomial Fit,打开多项式拟合对话框,设定多项式的级数、拟合曲线的点数、拟合曲线中 X 的范围。

(3) 点击 OK 或 Fit 即可完成多项式拟合。结果记录中显示:拟合的多项式公式、参数的值及其误差,R^2(相关系数的平方)、SD(标准偏差)、N(曲线数据的点数)、P 值($R^2 = 0$ 的概率)等。

2 Origin 软件对物化实验数据处理的方法

以沉降分析实验数据处理为例。

2.1 用实验数据作图

表 1 列出的是一组沉降分析实验数据。

表 1 沉降量 G 与对应的沉降时间 t(实验温度 28 ℃)

t/min	G/mg	t/min	G/mg	t/min	G/mg	t/min	G/mg
2.0	115.0	6.0	182.0	12.0	217.0	23.0	242.0
2.5	130.0	6.5	187.0	13.0	220.0	25.0	244.0
3.0	141.5	7.0	191.0	14.0	223.0	27.0	247.0
3.5	151.0	7.5	195.0	15.0	227.0	29.0	249.0
4.0	160.0	8.0	197.0	16.0	229.0	31.0	250.5
4.5	167.0	9.0	204.0	17.0	230.7	34.0	251.0
5.0	171.0	10.0	208.0	19.0	235.0		
5.5	177.0	11.0	213.0	21.0	239.0		

首先将数据输入 Origin 数据表中,然后作 G-t 点线图,如图 1。

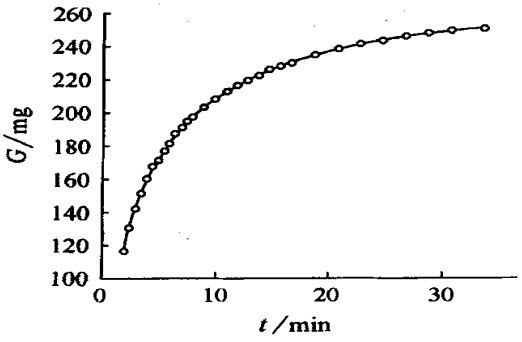

图 1 沉降量对沉降时间作图

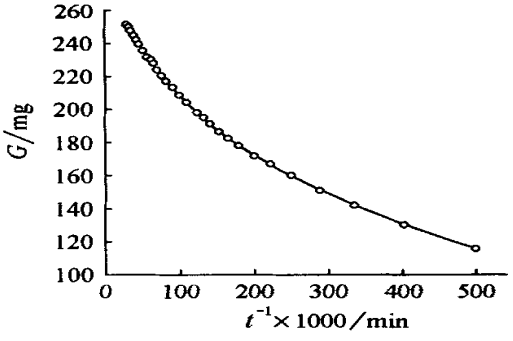

图 2 沉降量对 1000/t 作图

2.2 对实验数据计算后作图

将沉降量 G 对 1000/t 作图。右击 t 行顶部,在快捷菜单中选择 Set Column Values,在文本框中输入计算公式,点击 OK,即刷新 t 行的值。选择 1000/t 与沉降量 G 作图,如图 2。

2.3 线性拟合

沉降量的极限值 G_∞可用作图外推法求得,即在沉降曲线(图 2)上,由 t 值较大的若干个

© 1995-2006 Tsinghua Tongfang Optical Disc Co., Ltd. All rights reserved.

点作直线外推,与纵轴相交即为 G_∞。

在图 2 上取 8 个点作散点图,选择 Analysis 菜单中 Fit Linear,对该散点图进行线性拟合。

线性拟合的结果为 $Y = 273.29 - 0.72X$, $R = -0.995$。由 R 值可以看出拟合效果较好。拟合直线截距的值即 G_∞,为 273.3mg。

3 Origin 软件在物化实验数据处理中的应用

以氢超电势的测定实验数据处理为例,实验数据如表 3。

表 3 电流密度 J 与对应的氢超电势 η 的实验数据(实验温度 28 ℃)

J/(mA·cm^{-2})	η/V	J/(mA·cm^{-2})	η/V
0.6216	0.4274	0.1865	0.3653
0.4351	0.4087	0.1243	0.3453
0.3108	0.3907	0.0622	0.3013
0.2486	0.3797		

将 J 与 η 的实验数据输入 Origin 数据表中后,将 J 的单位由 mA/cm^2 换算成 A/cm^2,再转换成 ln$J$,然后以 η(V) 对 ln(J(A·cm^{-2})) 作散点图,进行线性拟合,结果如图 3。

线性拟合的结果显示,直线斜率 b 为 0.054,截距 a 为 0.826。截距 a 的值即电流密度为 1 时氢超电势的值。由直线拟合的相关系数 R(0.998) 可知拟合结果较好。

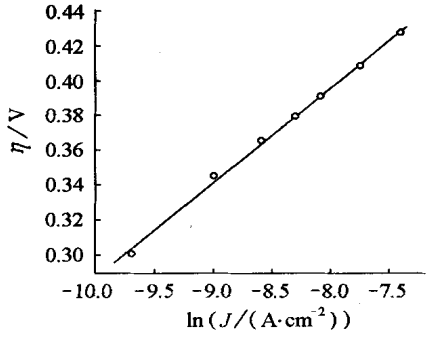

图 3 氢超电势 η 对 lnJ 作图

4 结论

如果使用手工作图,同一组数据不同的操作者处理,得到的结果很可能是不同的;即使同一个操作者在不同时间处理,结果也不会完全一致。而 Origin 软件能够准确、快速、方便地处理物化实验的数据,能够满足物化实验对数据处理的要求,用 Origin 软件处理物化实验的数据,只要方法选择合适,则得到的结果更为准确。

参 考 文 献

1 武汉大学化学与环境科学学院编. 物理化学实验. 武汉:武汉大学出版社,2000

2 郝红伟,施光凯. Origin 6.0 实例教程. 北京:中国电力出版社,2000

© 1995-2006 Tsinghua Tongfang Optical Disc Co., Ltd. All rights reserved.