

文章编号:1002-1124(2001)01-0033-02

# 表面络合理论中常用 计算机模型软件

王向天<sup>1,2</sup> 汤鸿霄<sup>2</sup> 黄君礼<sup>1</sup>

(1哈尔滨工业大学 2中国科学院生态环境研究中心 150001)

**摘要:**本文介绍了表面络合模式计算中用到的相关计算机软件,如 MIRCQL、MINEQL、HYDKAQL 和 FITEQL 等,为其利用与开发提供了信息和依据。

**关键词:**表面络合理论;计算模型软件;MINEQL;MIRCQL;FITEQL

**中图分类号:**TQ 015.9

**文献标识码:**A

## The Computer Model Software of Surface Complexation Theory

Wang Xiangtian<sup>1,2</sup> Tang Hongxiao<sup>2</sup> Huang Junli<sup>1</sup>

(1 Harbin Industry university)

**Abstract:** This paper describes the main computer model software of surface complexation theory, such as MINEQL, MICROQL, HYDKAQL, FITEQL and provides the foundation for research and application.

**Keywords:** Surface complexation model; Computer model software; MINEQL, MIRCQL, FITEQL

## 1 前言

环境水中各类颗粒物,或是具有较大的比表面积或是拥有大量的活性官能团,对水体中各种

微量污染物如重金属、化学品等有强烈的结合能力,成为它们的主要载体,在水体中扩散迁移,决定着它们的去向和归宿。同时,颗粒物还会与各种污染物发生多种溶液和界面的反应,很大程度决定着水质。水体中固体颗粒物和溶质之间的相互作用,包括吸附、凝聚、絮凝过程。这些过程的

收稿日期:2000-11-23

作者简介:王向天,27岁,哈尔滨工业大学在读博士

该系统把在配料系统中经脱气处理的比例单体 MMA 和 St,溶剂和添加剂,连续地用泵输送到反应系统。为获得最终产品最佳的分子量和物理性能,需控制反应系统的液位、温度、压力和进料速度,第一反应器的部分聚合溶液连续用泵送到第二反应器继续反应,同样,第二反应器的聚合溶液连续地泵送到第三反应器继续反应完全。

### 3.3 脱挥发和精制系统

来自反应系统中第三反应器的共聚物溶液经脱挥发予热器升高到 290℃,然后进入负压操作的脱挥发器进行汽提,以除去熔融粘性共聚物中的溶剂和未反应的单体 MMA 和 St。脱挥发后的熔融共聚物用聚合物挤出泵输送到造粒机造粒包

装。

### 3.4 溶剂净化和回收系统

这个系统把来自脱挥发器脱除的溶剂和未反应的单体送入蒸馏塔,重组份经蒸馏后在塔底排出,轻组份从塔顶排出后冷凝,冷凝液体用泵循环到配料系统而进入反应系统循环使用。

## 4 结论

综上所述,可以清楚地了解 MMA 和 St 共聚反应的共聚物组成及其控制,以及连续溶液聚合生产 MMA/St 共聚物的工艺过程。由此看出它对理论研究和实际工业生产都具有指导意义。

作用机理和定量规律历来是胶体和界面化学的重要内容<sup>[1]</sup>。

自 W. Stumm 提出表面络合理论后,在几十年间,表面络合模式得到了广泛的应用,其研究的范围涉及纯金属氧化物、硫化物、粘土矿物、天然土壤、沉积物、以及微生物表面<sup>[2]</sup>。而吸附质则包括金属阳离子、阴离子、有机化合物和聚合物。各种模式也建立了多种图解法和应用计算程序,如 HTYDRAQL, MICROQL, MINEQL, FITEQL, REDEQL 等<sup>[3]</sup>。这些软件根据不同的数学原理,通过实验数据可以求定静电项的校正值和表面络合常数。

## 2 软件介绍

由于水体中金属形态的复杂性,在分类方法、分离和分析技术上很难直接通过实验得出结论。计算机软件模拟化学平衡计算的方法虽然不能完全真实的表征金属的形态,但作为一种近似定量计算的方法,正在迅速的发展之中。根据不同的应用目的和设计程序,发展起来了几种不同类型的天然水化学模型。本文主要介绍与表面络合理论相关的软件。主要有 MINEQA、MICROQL、MINEQL、HTYDRAQL、FITEQL。

### 2.1 MINEQA 程序

美国环保局阿森斯实验室开发的一系列地球化学热力学平衡模型 MINEQA 程序<sup>[6]</sup>,目前流行的版本为 MINEQA2,该程序可用于模拟人工配制的溶液和天然水体中的金属化学形态,预测沉淀的形成,也能预测金属的吸附和金属有机络合物的形成。它可以模拟 70 种组分、500 多种水溶液形态、400 多种矿物质、16 种气体形态和 21 种氧化还原反应。另外,还有 7 种吸附模型,可用于模拟吸附过程。1996 年 Serkiz 等人对其组分的热力学平衡常数进行校正。

该程序可以在 <ftp://aqua.cccwr.ac.za/pub/minteqa2/home.html> 下载。

### 2.2 MICROQL 程序

1979 年 Westall 开发,并于 1986 年改进,目前最新的版本是 1998 年 Geller 根据新的数学模型制作的扩展版  $\mu$ QL - MICROQL V1.9。该软件可以在 <ftp://ftp.ito.umnw.ethz.ch/outdata/soilProtection/microql/> 自由下载。

本程序根据 Newton - Raphson 代数式可以计算特定 pH 下,滴定过程中离子不同形态的浓度;根据表面络合理论对于 Stern 模式、恒定容量、双电层、三层模式都能模拟计算其电动势和表面电荷<sup>[7]</sup>。

具体实例,可以计算饱和  $Al(OH)_3$  溶液中,铝的形态分布及其表面平衡常数。

### 2.3 MINEQLT 程序

MINEQL 程序通过平衡常数、Gibbs 自由能等热力学程序计算化学物质的相互作用及通过质量作用表达式来判断化学物质的形成分布。可以在 <http://www.mineql.com> 上找到相关的信息和下载最新版本的演示版。

### 2.4 HYDRAQL 程序

HYDRAQL 程序用于计算水系统中化学成分在氧化物/溶液界面,表面络合、吸附平衡常数,是斯坦福大学环境工程系开发的。

该程序可以在 <ftp://www-seep-server.stanford.edu/hydraqldata> 下载。

### 2.5 FITEQL 程序

FITEQL 程序是 Westall 1978 年开发的,计算依据是高斯法。用于通过实验数据求定表面常数和表面吸附常数,采用非线性最小平方优化程序。该程序是为确定适配于一套实验数据的化学平衡模式中的平衡常数或总组分浓度的最佳值而设计的,适于解决无约束问题,即未知数可以设定任何值。

程序适用于恒定容量、扩散层、Stern、三层模式以及利用 Davis 公式计算离子强度和活度系数<sup>[8]</sup>。

## 3 应用与讨论

计算机软件的出现使传统的实验方法得到了补充,利用不同的数学模型,使研究的领域扩大到仪器及化学分析方法无法触及的层次。微观上讲,上面介绍的软件能够模拟到分子间的反应和传统方法难以模拟的动态微观平衡;宏观上,一些系统模拟软件可以模拟复杂生态的系统。随着计算机计算能力的不断增强和互联网的发展,计算机越来越成为科学研究中必要的工具。与此同时仪器分析技术也不断的发展,现代光谱分析技术,诸如粉末 X 射线衍射、红外/拉曼光谱、固体核磁

文章编号:1002-1124(2001)01-0035-02

# 薄层比色法测定甘草中甘草酸含量的研究

邓立育 姚德海 李铁柱 鞠文东

(黑龙江出入境检验检疫局 哈尔滨 150001)

**摘要:**采用薄层比色法测定了黑龙江甘草中甘草酸的含量,实验结果表明甘草中甘草酸的含量较高,为7.09%,是甘草的有效成分,该测定方法操作简便,准确可靠。

**关键词:**甘草;甘草酸;薄层比色

**中图分类号:**O 665.9

**文献标识码:**A

## Study on the Content of Glycyrrhiza Acid in *Glycyrrhiza uralensis* Fisch by Thin - Layer Colorimetry

Deng Liyu Yao Dehai Li Tiezhu Ju Wendong

(Heilongjiang Entry, Exit Inspection and Quarantine Bureau Harbin 150001)

**Abstract:** A research on the content of Glycyrrhiza acid was given in *Glycyrrhiza uralensis* Fisch from Heilongjiang by Thin - layer Colorimetry. The result showed that the contents of Glycyrrhiza acid was high, 7.09% and was available composition in *Glycyrrhiza uralensis* fisch. The method was simple, accurate and reliable.

**Keywords:** Glycyrrhiza acid; *Glycyrrhiza uralensis* fisch; Thin - Layer colorimetry

## 1 前言

甘草为豆科,属(*Glycyrrhiza uralensis* Fisch)植

收稿日期:2000-10-10

作者简介:邓立育,男,工程师,毕业于黑龙江大学化学系有机化学专业,现从事进出口化工、矿产品的检验、检疫工作。

物,其根茎是常用的中草药。广泛分布于我国的东北、新疆、内蒙古等地,常用于溃疡、抗炎、镇咳、祛痰疾病<sup>[1,2]</sup>。甘草除药用外,还广泛应用于食品工业作甜味剂,代替蔗糖,其中的甜味素不仅具有甜味,还具有生理活性。因此广泛应用于医药、食品、化妆品的行业,是重要的精细化工产品<sup>[3]</sup>。目前甘草中具有比较重要开发价值的成分主要是甘

共振、各类X射线吸收光谱等,作为强有力的工具可以提供与宏观化学反应行为相一致的、互补的直接信息,尤其为讨论各种表面/界面反应的机制、动力学以及产物的鉴别提供了多角度、多方面的综合判断据。

### 参 考 文 献

- [1] 汤鸿霄. 环境水质学进展. 环境科学进展, 1993, (1): 25-39.
- [2] Stumm W., C. P. Huang, S. R. Jenkins, 1970, Croat. Chem. Acta, (42): 233.
- [3] 何孟常. 水质模型、生态模型及计算机模型软件. 环

境科学进展, 1999, 7(3): 62-69.

- [4] Nordstorm et al. Chemical Modeling in Aqueous System. Amer Chem Soc., P857, 1978.
- [5] Brown D. S. MINTEQA1 Equilibrium Metal Speciation Model: A User Manual. EPA/600/387/012., 1987.
- [6] Geller, M. (1995), Portable MICROQL: Summary of mathematics, Technical Report 96.2, Institute of Terrestrial Ecology, Swiss Federal Institute of Technmology.
- [7] Westall J. C. FITEQL: a computer program for the determination of chemical equilibrium constants from experimental data. Rep. 82-01. Department of Chem., Oregon State University, Corvallis (1982).