

K₂B₄O₇ 的 Pitzer 参数的计算

李丽娟, 姚燕, 宋彭生

(中国科学院青海盐湖研究所, 青海 西宁 810008)

摘要: 由于硼酸盐在电解质中的特殊性, 硼酸盐的热力学问题一直被化学家所重视。根据文献数据, 经多种处理获得 K₂B₄O₇ 不同存在形式的硼氧配阴离子的 Pitzer 纯盐参数、K₂B₄O₅(OH)₄ 电离化学计量平衡常数 K_m。采用所获得的 Pitzer 纯盐参数计算 K₂B₄O₇ 不同存在形式的硼氧配阴离子的渗透系数, 并与表观实验值进行比较。

关键词: Pitzer 参数; K₂B₄O₇ 水溶液; 多聚硼氧配阴离子

中图分类号: 0645.164 **文献标识码:** A **文章编号:** 1008-858X(2002)04-0038-06

0 引言

我国青藏高原的盐湖卤水以富含硼、锂而闻名于世。其卤水大多数属于 Li⁺, Na⁺, K⁺, Mg²⁺(Ca²⁺)/Cl⁻, CO₃²⁻(HCO₃⁻), SO₄²⁻, borate-H₂O 盐湖卤水体系。由于硼原子的特殊配位性质, 硼酸盐多聚配阴离子具有单个基团、一维链状、二维层状、三维网状等多种结构。这些不同结构单元, 随着溶液中硼浓度的变化而使硼氧配阴离子发生聚合或缩聚反应, 形成了不同聚合度的硼氧配阴离子, 并同时存在于一种溶液当中, 它们处于相互作用和转化的动态平衡。这就使得含硼酸盐的复杂体系的热力学研究成为尤其复杂的问题。

多年来, 国内外对于含低总硼浓度的硼酸盐溶液进行的研究已有许多报道^[1-2], 近年来对于含高总硼浓度的溶液的研究有较大进展^[3-5]。Platford^[6]在 1968 年用等压法测定了偏硼酸钠和四硼酸钾的渗透系数, 但并未进行理论分析。

Pitzer 在其原始论文中, 仅给出为数不多的几种硼酸盐的 Pitzer 参数。到目前为止有关含高硼的天然盐湖卤水复杂体系还没有完整的理论可以描述它。在近十几年, 宋彭生、姚燕等人试图把电解质溶液的 Pitzer 参数化的模型应用到天然盐湖卤水复杂体系, 从理论上描述富含硼、锂的盐湖卤水的相平衡和热力学性质。其中, Pitzer 模型最为关键的是获取合理的 Pitzer 参数, 他们通过多年的研究已获得了“盐湖卤水体系”Li⁺, Na⁺, K⁺, Mg²⁺/Cl⁻, SO₄²⁻-H₂O 25℃ 下热力学和相平衡所需离子全部参数^[7]。但是, 对含有高硼的天然盐湖卤水复杂体系, 及其二元、三元子体系的硼氧配阴离子的解聚和聚合平衡的热力学研究很缺乏, 因此, 给出准确和合理的 K₂B₄O₇ 不同形式的硼氧配阴离子 Pitzer 参数具有重要的理论和实践意义。

近年来, 宋彭生给出一套 K₂B₄O₇ Pitzer 参数, 其值为 β⁽⁰⁾: -0.2135, β⁽¹⁾: -1.1215, C^(Φ): 0.06399, SD: 0.0077。这套数据是采用 R·F·Platford^[6]的 K₂B₄O₇ 溶液 25℃ 渗透系数和相应

收稿日期: 2002-09-06

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(29871034)

作者简介: 李丽娟(1962-), 女, 高级工程师, 研究方向: 盐溶液热力学。

* 通讯联系人

的活度系数一起按 1-2 价电解质完全离解为 K⁺ 和 B₄O₇²⁻ 离子,对 Pitzer 方程的相互作用参数进行拟合而来的。本文根据硼酸盐溶液中聚硼氧配阴离子的结构研究结果,采用 Pitzer 离子相互作用模型,对该文献^[6]的实验数据进行理论分析,按不同的多聚硼氧配阴离子存在形式分别进行了 K₂B₄O₇ Pitzer 参数拟合,并获得电离化学计量平衡常数。

2 Pitzer 参数计算模型

Ingri 等人^[8]在他们的论文中报道了对于水合硼酸盐溶液中聚硼氧配阴离子: B(OH)₃, [B(OH)₄]⁻, [B₃O₅(OH)₄]²⁻, [B₄O₅(OH)₄]²⁻ 和 [B₅O₆(OH)₄]⁻ 在硼浓度小于 0.1mol/kg 时,主要以一个硼原子的 B(OH)₃ 和 [B(OH)₄]⁻ 形式存在,在硼浓度为 0.1~0.4mol/kg 时,主要以 [B₃O₅(OH)₄]⁻, [B₃O₅(OH)₄]²⁻ 多聚硼氧配阴离子形式存在,当硼浓度大于 0.4mol/kg 时,水溶液中会同时存在多种聚硼氧配阴离子,其中 [B₄O₅(OH)₄]²⁻ 更多一些。据此,我们按照 Pitzer 相互作用模型^[9]、实验渗透系数计算公式以及不同类型硼氧配阴离子浓度计算公式,采取最小二乘法等全回归分析和电离化学计量平衡常数一起迭代、拟合出 K₂B₄O₇ 综合统计的不同形式硼氧配阴离子 Pitzer 参数和电离化学计量平衡常数,并对线性回归方程的参数进行了显著性统计检验。所用的公式如下:

$$\sum_i m_i (\Phi - 1) = 2 [(-A^\Phi I^{3/2} / (1 + 1.2 I^{1/2}) + \sum_{c=1}^{N_c} \sum_{a=1}^{N_a} m_c m_a (B_{ca}^\Phi + Z C_{ca}) + \sum_{c=1}^{N_c-1} \sum_{a=c+1}^{N_a} m_c m_a' (\Phi_{cc}^\Phi + \sum_{a=1}^{N_a} m_a \Psi_{cc,a}^\Phi) + \sum_{a=1}^{N_a-1} \sum_{c=a+1}^{N_c} m_a m_a' (\Phi_{aa}^\Phi + \sum_{c=1}^{N_c} m_c \Psi_{aa,c}^\Phi) + \sum_{n=1}^{N_n} \sum_{a=1}^{N_a} m_n m_a \lambda_{na} + \sum_{n=1}^{N_n} \sum_{c=1}^{N_c} m_n m_c \lambda_{nc}]$$
$$C_{MX}^\Phi = C_{MX}^\Phi / (2 |Z_M Z_X|^{1/2})$$
$$Z = \sum_i |Z_i| m_i$$
$$B_{MX}^\Phi = \beta_{MX}^{(0)} + \beta_{MX}^{(1)} e^{-a M X \sqrt{I}}$$

$$\Phi_{exp} = \Phi_{RM} / \sum_i m_i$$
$$K_2B_4O_7 + 7H_2O = 2K^+ + 2 [B(OH)_4]^- + 2H_3BO_3 \tag{1}$$

$$m_k = 2m_0; m_B = 2m_0; m_{HB} = 2m_0; I = 2m_0$$
$$\sum_i m_i = m_K + m_B + m_{HB}$$
$$3K_2B_4O_7 + 9H_2O = 6K^+ + 4 [B_3O_3(HO)_4]^{-1} + 2OH^- \tag{2}$$

$$m_k = 2m_0; m_B = 4/3m_0; m_{OH} = 2/3m_0;$$
$$I = 1/2 (m_K + m_B + m_{OH})$$
$$\sum_i m_i = m_K + m_B + m_{OH}$$
$$K_2B_4O_7 + 2H_2O = 2K^+ + [B_4O_5(OH)_4]^{2-} \tag{3}$$

$$m_k = 2m_0; m_B = m_0; I = 3m_0$$
$$\sum_i m_i = m_K + m_B$$
$$K_2B_4O_7 + 2H_2O \rightleftharpoons 2K^+ + [B_4O_5(OH)_4]^{2-} \tag{4}$$

$$m_k = 2m_B; m_{KB} = m_0 - m_B; I = 3m_B$$
$$4m_B^3 + K_m m_B - K_m m_0 = 0$$
$$\sum_i m_i = m_K + m_B + m_{KB}$$

式中 M 和 c 代表阳离子, X 和 a 代表阴离子。Z_M, m_c 及 Z_X, m_a, Φ 分别代表相应离子的价数和离子的质量摩尔浓度(mol·kg⁻¹)及渗透系数。I 是溶液的总离子强度。∑m_c, ∑m_a 表示对所有该种离子质量摩尔浓度求和,双求和符号表示对应所有离子的搭配求和。A^Φ 是 Debye-Hückel 系数,其与溶剂性质有关,对于 25℃ 水溶液其值为 0.3915。β_{MX}⁽⁰⁾, β_{MX}⁽¹⁾, C_{MX}^Φ 为电解质的 Pitzer 纯盐参数。其中常数 a=2。m_R, m₀ 代表等压平衡 NaCl、K₂B₄O₇ 表观浓度(mol·kg⁻¹), m_K, m_B, m_{OH}, m_{KB}, m_{HB} 分别代表 K⁺、硼氧配阴离子、氢氧根离子、溶液中 K₂B₄O₇ 分子、H₃BO₃ 浓度(mol·kg⁻¹)。Φ_R, Φ_{exp} 分别代表参考 NaCl 和 K₂B₄O₇ 溶液的渗透系数。∑m_i 代表体系物种总浓度。m_{NaCl}, Φ_{NaCl} 分别为等压平衡质量摩尔浓度(mol·kg⁻¹)及渗透系数,其值列在表 1 中。

3 Pitzer 参数计算结果与讨论

在全部数据浓度范围内,将 K₂B₄O₇ 完全采用反应方程式(1)、(2)、(3)和(4)形式来拟合 K₂B₄O₇ 的 Pitzer 参数,其结果列在表 2。

表 1 $\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_7\text{—H}_2\text{O}$ 298.15K 体系的等压平衡浓度及渗透系数^[5]

Table 1 Isopiestic molality and osmotic coefficients of $\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_7\text{—H}_2\text{O}$ system for R.F·Platford's data at 298.15K					
m_{NaCl}^* (mol·kg ⁻¹)	Φ_{NaCl}^{**}	$m_{\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_7}$ (mol·kg ⁻¹)	m_{NaCl}^* (mol·kg ⁻¹)	Φ_{NaCl}^{**}	$m_{\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_7}$ (mol·kg ⁻¹)
0.0948	0.9344	0.0377	0.5416	0.9229	0.3447
0.1297	0.9276	0.0523	0.6123	0.9239	0.4106
0.1587	0.9247	0.0668	0.6990	0.9254	0.4980
0.2706	0.9215	0.1321	0.7847	0.9274	0.5917
0.3071	0.9214	0.1542	0.8379	0.9211	0.6484 ^s
0.3177	0.9213	0.1643	1.0045	0.9343	0.8473
0.4095	0.9218	0.2330	1.2670	0.9455	1.1940

* :参考溶液
* * : Φ 采用 Hamer & Wu 的数据拟合的方程计算而来。
s:饱和溶液。

表 2 298.15K $\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_7$ 的不同形式的硼氧配阴离子 Pitzer 纯盐参数

Table 2 Pitzer's single electrolyte parameters of various polyborate anions for $\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_7$ at 298.15K			
反应方程式(1)		反应方程式(2)	
参数	数值	参数	数值
$\beta_{\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_7(\text{OH})_4}^{(0)-}$	-0.03631	$\beta_{\text{K}_2\text{B}_3\text{O}_3(\text{OH})_4}^{(0)-}$	-1.0535
$\beta_{\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_7(\text{OH})_4}^{(1)-}$	-4.4363	$\beta_{\text{K}_2\text{B}_3\text{O}_3(\text{OH})_4}^{(1)-}$	7.2034
$C_{\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_7(\text{OH})_4}^{\Phi-}$	-0.03964	$C_{\text{K}_2\text{B}_3\text{O}_3(\text{OH})_4}^{\Phi-}$	0.4113
SD	0.01101	SD	0.08677
反应方程式(3)		反应方程式(4)	
$\beta_{\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_5(\text{OH})_4}^{(0)2-}$	-1.8240	$\text{K}_m \times 10^{-3}$	5.7009
$\beta_{\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_5(\text{OH})_4}^{(1)2-}$	18.0484	$\beta_{\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_5(\text{OH})_4}^{(0)2-}$	6.7477
$C_{\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_5(\text{OH})_4}^{\Phi 2-}$	0.9161	$\beta_{\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_5(\text{OH})_4}^{(1)2-}$	56.5112
SD	0.1749	$C_{\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_5(\text{OH})_4}^{\Phi 2-}$	-25.4560
		SD	0.0826

根据 Pitzer 模型，使用我们获得的各种 Pitzer 参数，我们分别进行了 $\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_7$ 不同存在形式硼氧配阴离子体系的渗透系数理论计算。这里我们给出计算结果和表观实验结果，其数据分别列在表 3、表 4 中。SD 为渗透系数计算值与表观实验值的标准偏差， K_m 为 $\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_5(\text{OH})_4$ 解离化学计量平衡常数。

从表 3、4 中数据可见，若将硼完全采用反应方程式(1)综合统计形式来拟合 Pitzer 参数时，虽然其理论计算值与实验值有较好吻合，但并不完全符合客观事实；若将硼完全采用反应方程式(2)、(3)综合统计形式来拟合 Pitzer 参数时，在硼浓度较低时，其计算结果偏差较大。但

考虑了中性分子 $\text{K}_2\text{B}_4\text{O}_5(\text{OH})_4$ 作用后，采用反应方程式(4)综合统计形式来拟合 Pitzer 参数，在拟合中，除获得了相应的 Pitzer 参数外，同时还得到了解离化学计量平衡常数，计算精度有所改善，但并不令人十分满意。

为了提高计算精度，我们根据硼酸盐结构研究的文献^[8]报道，在硼的不同浓度范围内分段拟合 Pitzer 参数。在低浓度时，将硼完全以(1)综合统计形式来计算其渗透系数；在较高浓度时，将硼完全以(2)综合统计形式来计算其渗透系数，在接近饱和或过饱和浓度时，将硼完全以(3)、(4)综合统计形式来计算其渗透系数，所获得 Pitzer 参数见表 5。在此基础上，利用 Pitzer 模型计算了其渗透系数，并与表观实验值

进行比较,结果列在表 6 中。

从表中数据可以看出,分段拟合的 Pitzer 参数,渗透系数的理论计算值和表观实验值有很好的吻合。这表明,结合硼酸盐溶液物种分布的研究结果,根据 Pitzer 离子相互作用模型对实验数据进行理论分析,获得参数化模型可以用于描述含硼酸盐的复杂体系的热力学性质。然而,从理论上准确、合理和定量的表述硼酸盐体系的不同形式的硼氧配阴离子的分布,这项研究工作才刚刚起步。含硼酸盐的复杂盐湖卤水体系的参数化模型,还有待于更深入的理论和实验研究。

表 3 298.15K K₂B₄O₇ 渗透系数的计算值与试验值对比

Table 3 Comparison of calculated osmotic coefficients values using Pitzer's parameters with experimental values at 298.15K						
K ₂ B ₄ O ₇		反应方程式(1)			反应方程式(2)	
m /(mol·kg ⁻¹)	Φ_{exp}	Φ_{cal}	$\Delta\Phi$	Φ_{exp}	Φ_{cal}	$\Delta\Phi$
0.0377	0.78317	0.81535	0.03218	1.17476	0.99244	-0.18232
0.0523	0.76679	0.77436	0.00757	1.15019	0.99884	-0.15135
0.0668	0.73229	0.73976	0.00747	1.09843	1.00130	-0.09713
0.1321	0.62921	0.62927	0.00006	0.94381	0.98002	0.03621
0.1542	0.61167	0.60265	-0.00902	0.91751	0.96522	0.04771
0.1643	0.59383	0.59174	-0.00209	0.89074	0.95764	0.06690
0.2330	0.53931	0.53296	-0.00634	0.80896	0.89733	0.08837
0.3447	0.48338	0.47475	-0.00862	0.72506	0.78859	0.06353
0.4106	0.45924	0.45247	-0.00677	0.68886	0.72624	0.03738
0.4980	0.43298	0.43089	-0.00209	0.64947	0.65113	0.00167
0.5917	0.40995	0.41383	0.00388	0.61493	0.58343	-0.03150
0.6484	0.40022	0.40531	0.00509	0.60033	0.54984	-0.05049
0.8473	0.36921	0.37955	0.01033	0.55382	0.48006	-0.07377
1.1940	0.33445	0.32903	-0.00541	0.50167	0.54633	0.04466
SD		0.01101			0.08677	

$\Delta\Phi=\Phi_{\text{cal}}-\Phi_{\text{exp}}$

表 4 298.15K K₂B₄O₇ 渗透系数的计算值与试验值对比

Table 4 Comparison of calculated osmotic coefficients values using Pitzer's parameters with experimental valuer at 298.15K						
K ₂ B ₄ O ₇		反应方程式(3)			反应方程式(4)	
m /(mol·kg ⁻¹)	Φ_{exp}	Φ_{cal}	$\Delta\Phi$	Φ_{exp}	Φ_{cal}	$\Delta\Phi$
0.0377	1.56634	1.18619	-0.38015	1.98658	1.99491	0.00834
0.0523	1.53358	1.23725	-0.29634	2.10034	2.08544	-0.01490
0.0668	1.46457	1.27386	-0.19071	2.13067	2.13354	0.00287
0.1321	1.25841	1.33066	0.07225	2.16564	2.17492	0.00927
0.1542	1.22335	1.32496	0.10162	2.18291	2.16624	-0.01668
0.1643	1.18765	1.31968	0.13202	2.15022	2.16092	0.01070
0.2330	1.07861	1.25325	0.17464	2.10759	2.11475	0.00717
0.3447	0.96675	1.09362	0.12687	2.03818	2.03527	-0.00291
0.4106	0.91848	0.99343	0.07495	1.99699	1.99227	-0.00472
0.4980	0.86596	0.86906	0.00311	1.94324	1.94089	-0.00235
0.5917	0.81990	0.75571	-0.06419	1.88866	1.89232	0.00366
0.6484	0.80044	0.69983	-0.10060	0.86812	1.86576	-0.00236
0.8473	0.73843	0.59158	-0.14685	1.78531	1.78618	0.00087
1.1940	0.66890	0.75810	0.08920	1.68161	1.68271	0.00111
SD		0.17490			0.0826	

* 溶液中存在中性分了 K₂B₄O₅(OH)₄

(C)1994-2022 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. <http://www.cnki.net>

表 5 298.15K K₂B₄O₇ 的不同形式的硼氧配阴离子 Pitzer 纯盐参数

Table 5 Pitzer's single electrolyte parameters of various polyborate anions for K₂B₄O₇ at 298.15K

反应方程式(1)			反应方程式(2)		
浓度范围 (mol·kg ⁻¹)	参数	数值	浓度范围 (mol·kg ⁻¹)	参数	数值
0.0523~0.1643	$\beta_{K,B(OH)_4}^{(0)-}$	0.6527	0.1321~0.3447	$\beta_{K,B_3O_3(OH)_4}^{(0)-}$	-2.491024
	$\beta_{K,B(OH)_4}^{(1)-}$	-5.8427		$\beta_{K,B_3O_3(OH)_4}^{(1)-}$	10.419847
	$C_{K,B_3O_3(OH)_4}^\Phi$	-0.7057		$C_{K,B_3O_3(OH)_4}^\Phi$	1.804935
	SD	0.003014		SD	0.005140
反应方程式(3)			反应方程式(4)		
浓度范围 (mol·kg ⁻¹)	参数	数值	浓度范围 (mol·kg ⁻¹)	参数	数值
0.4106~1.1940			0.4106~1.1940	Km	2.40100
	$\beta_{K,B_4O_5(OH)_4}^{(0)2-}$	-0.2867		$\beta_{K,B_4O_5(OH)_4}^{(0)2-}$	-1.316578
	$\beta_{K,B_4O_5(OH)_4}^{(1)2-}$	6.7620		$\beta_{K,B_4O_5(OH)_4}^{(1)2-}$	16.53425
	$C_{K,B_4O_5(OH)_4}^\Phi$	0.1248		$C_{K,B_4O_5(OH)_4}^\Phi$	1.733978
	SD	0.005384		SD	0.001825

表 6 298.15K K₂B₄O₇ 渗透系数的计算值与试验值对比

Table 6 Comparison of calculated osmotic coefficients values using Pitzer's parameters with experimental values at 298.15K

K ₂ B ₄ O ₇				K ₂ B ₄ O ₇			
反应方程式(1)				反应方程式(2)			
m (mol·kg ⁻¹)	Φ _{exp}	Φ _{cal}	△Φ	m (mol·kg ⁻¹)	Φ _{exp}	Φ _{cal}	△Φ
0.0523	0.766791	0.766131	-0.00066	0.1321	0.94381	0.94173	0.00208
0.0668	0.732286	0.732848	0.000562	0.1542	0.91751	0.91298	-0.00453
0.1321	0.629207	0.631014	0.001807	0.1643	0.89074	0.89937	0.00863
0.1542	0.611673	0.606868	-0.00408	0.2330	0.80896	0.80648	-0.00248
0.1643	0.593826	0.596865	0.003039	0.3447	0.68892	0.68930	0.00039
SD		0.00301426		SD		0.005140	
K ₂ B ₄ O ₇				K ₂ B ₄ O ₇			
反应方程式(3)				反应方程式(4)			
m (mol·kg ⁻¹)	Φ _{exp}	Φ _{cal}	△Φ	m (mol·kg ⁻¹)	Φ _{exp}	Φ _{cal}	△Φ
0.4106	0.91848	0.912232	-0.00625	0.4106	1.31828	1.31735	-0.00093
0.4980	0.86596	0.869591	0.003636	0.4980	1.30421	1.30462	0.00041
0.5917	0.81991	0.826229	0.006325	0.5917	1.28911	1.29226	0.00315
0.6484	0.80043	0.801930	0.001495	0.6484	1.28733	1.28551	-0.00182
0.8437	0.73842	0.731509	-0.00697	0.8437	1.26725	1.26584	-0.00141
1.1940	0.66890	0.670494	0.001597	1.1940	1.24216	1.24275	0.00060
SD		0.005384		SD		0.001825	

参考文献:

[1] J·M·Simonson, R·N·Roy, D·Mrad, P·L·Yord, L·N·Johnson. Thermodynamics of Aqueous Borate Solution, II· Mixtures of Boric Acid with Calcium and Magnesium Borate and Chloride [J]. J. Solution Chem., 1998, 17(5), 435-446.

[2] A·G·Dickson. Thermodynamics of The Dissociation of Boric Acid In Synthetic Seawater from 273.15 to 18.15 K[J]. Deep Sea Research, 1990, 37(5), 755-766.

[3] 贾永忠, 高世扬, 夏树屏, 等. 硼酸镁过饱和水溶液稀释和酸化过程中的 Raman 光谱[J]. 高等学校化学学报, 2001, 22(1), 99-103.

[4] Jia Yongzhong, Gao Shiyang, Xia Shuping, Li Jun. FT-IR spectroscopy of supersaturated aqueous solutions of magnesium borate [J]. SPECTRO CHEMICAL ACTA, PART A, 2001, 56, 1291-

1297.

[5] 田海滨,姚燕,宋彭生. 298.15K 下 LiCl—Li₂B₄O₇—H₂O 体系中 LiCl 的活度系数和缔合平衡研究[J]. 化学研究与应用, 2000, 12(4): 403-408.

[6] Platford R.E. . Osmotic and activity coefficients of some simple borater in aqueous solution at 25℃ [J]. Can. J. Chem. , 1969, 47; 2271-2273.

[7] Roy M Adams. Boron Metallo—Boron Compounds and borones [M]. New York ;John Wiley Sons Inc USA, 1964. 80-90.

[8] Ingri N, Hegerstrom G, Frydman M. et al. Equilibrium studies of polyanoion 1. Poolyborates in NaClO₄ meduim [J]. Acta Chem. Scand, 1957, 11; 1034-1058.

[9] 宋彭生,姚燕,李军. 盐湖卤水体系热力学和相平衡研究进展[J]. 化学进展, 2000, 12(3); 255-267.

Pitzer Parameters of Potassium Tetraborate
in Aqueous Solution at 298.15K

LI Li—juan, YAO Yan, SONG Pen—sheng
(Qinghai Institute of Salt Lakes, Chinese Academy of Sciences, Xinning 810008, China)

Abstract: Thermodynamic properties of borates are important because its particular behavior. The Pitzer’s single electrolyte parameters with respect to various polyborate anions for potassium tetraborate based on osmotic coefficients data in literatures are given in this report. The osmotic coefficients calculated with the parameters using the Pitzer’s model have been compared with the experimental data.

Key words: Pitzer Parameters; Aqueous K₂B₄O₇; Polyborate anion

声 明

1. 为适应我国信息化建设需要,扩大作者学术交流渠道,本刊已加入《中国学术期刊(光盘版)》和“中国期刊网”。作者著作权使用费与本刊稿酬一次性给付。如作者不同意将文章编入该数据库,请在来稿时声明,本刊将作适当处理。
2. 本刊已入万方数据资源系统(China Info.)数字化期刊群。