

水盐体系溶解度计算中的 电解质溶液 Pitzer 模型

宋彭生 房春晖 李 军

(中国科学院青海盐湖研究所, 西宁, 810008)

摘要 水盐体系溶解度的理论计算, 由于受电解质浓溶液理论发展的制约, 长时间以来未能得到解决, 1973 年 Pitzer 提出了他的电解质溶液热力学模型, 这是一种半经验的统计力学模型, 可以处理从很稀直至高浓度范围的电解质溶液。本文作者从七十年代末开始利用此模型于有关盐湖卤水的溶解度计算。本文介绍利用 Pitzer 电解质溶液热力学模型进行水盐体系溶解度计算的有关问题, 以及作者们近年来在此领域的研究工作概况。其中包括含锂盐浓溶液体系的热力学性质研究, Pitzer 模型的参数化问题, 有关计算方法和计算结果。

关键词 Pitzer 模型 水盐体系 溶解度计算

一、盐湖化学中的溶解度

多组分水盐体系溶解度计算在化学、化工中有重要价值, 在盐湖化学中更有其特殊意义。盐湖是天然存在的水和盐类的复杂体系, 在盐湖中发生的许多物理化学过程中, 盐类的结晶沉积和稀释溶解是最基本的, 它关系到盐湖的类型及转化、盐湖物质的补给、盐湖的演化进程, 更关系到盐湖中可资利用的成份之集散程度。由于有工业价值的盐湖卤水多处于气候干旱地区, 卤水加工如采用盐田天然蒸发, 逐步分离各种盐类, 在经济上将会更合理, 而盐田日晒工艺的基础也是体系中各盐类的溶解度关系。因此不论从化学化工还是地球化学角度来看, 多组分水盐体系溶解度的研究, 对于盐湖化学都是具有重要意义的基础领域^[1]。

二、多组分水盐体系溶解度的计算

水盐体系溶解度的研究已经有一个世纪的历史, 但是这种研究是通过大量的实验测定来完成的。例如由著名化学家 J. H. 范特荷夫开创的海水体系和由 J. E. Teeple 博士领导的碱湖卤水体系的相平衡研究。虽然人们早就尝试进行多组分水盐体系溶解度的理论计算, 但很快就发现困难几乎是无法解决的。于是人们开始进行溶解度数据的经验处理。其中最著名的是苏联的 E. H. Алхумов, A. B. Зяновский, 以及后来的 A. Ф. Амирханов 等, 近年来 Ricardo Vega 等, J. R. Wood 等也进行过经验和半经验的处理。

易溶盐在多组分水盐体系中的溶解度一般可达数个 m, 甚至还高。因此水盐体系溶解度

计算中必须使用适合于电解质浓溶液的处理方法。1973 年 Pitzer 提供了他的电解质溶液热力学模型,这是一种半经验的统计力学模型,可以处理从很稀直至高浓度范围的电解质溶液。1977 年我们注意到他的模型,经过研究、计算、对此,从 1980 年起我们开始将它应用于多组分水盐体系溶解度的理论计算。1983 年在“化学通报”上的短文,报道了我们考察 Pitzer 模型适用性的研究结果^[2],下边引述一些结果。

表 1. 几个三元体系溶解度(25℃)计算值和实验结果的对比

计算值	NaCl%	26.45	23.67	20.97	20.55	20.04	15.00	10.00	5.00	0
	KCl%	0	5.00	10.00	10.80	11.11	14.48	18.17	22.16	26.39
实验值	NaCl%	26.45	23.75	21.0	20.4	20	15	10	5	0
	KCl%	0	5	10	11.15	11.3	14.5	18.2	22.16	26.39
计算值	HCl%	0	1.35	2.73	5.57	8.48	11.41	14.32	17.11	19.75
	NaCl%	26.45	24.33	22.20	18.01	14.00	10.34	7.17	4.68	2.87
实验值	HCl%	0	1.35	2.73	5.57	8.48	11.41	14.32	17.11	19.75
	NaCl%	26.45	24.43	22.32	18.09	14.04	10.34	7.17	4.66	2.87
计算值	KCl%	26.4	25.9	20.0	15.0	10.0	5.0	0		
	K ₂ SO ₄ %	0	1.02	2.1	3.1	4.6	7.0	10.75		
实验值	KCl%	26.4	25.6	20.0	15.0	10.0	5.0	0		
	K ₂ SO ₄ %	0	1.10	2.1	3.3	4.9	7.1	10.75		
计算值	NaCl%	26.45	20.1	15.1	10.4	6.3	3.2	1.3		
	MgCL ₂ %	0	5.0	10.0	15.0	20.0	25.0	29.9		
实验值	NaCl%	26.45	20.5	15.2	10.5	6.5	3.3	1.1		
	MgCl ₂ %	0	5.0	10.0	15.0	20.0	25.0	30.0		

通过一些研究对比,我们认为 Pitzer 模型是目前可以广泛应用于多组分水盐体系溶解度预测的很实用的模型。

三、Pitzer 模型的应用和参数

Pitzer 在他的系列论文和其后的专著中^[3],都列有多组分体系中任一电解质的平均活度系数的计算公式,但从多组分水盐体系溶解平衡计算的角度来看,离子活度系数计算的表达式,应用起来更为方便。我们经常使用由 UCSD 的 harvie C. E. 和 Weare J. H. 重新整理的计算离子活度系数的公式^[1]:

$$\begin{aligned} \Sigma m_i(\Phi-1) = & 2[-A^{\Phi}I^{3/2}/(1+1.2I^{1/2}) \\ & + \Sigma \Sigma m_c m_a (B_{ca}^{\Phi} + ZC_{ca}) \\ & + \Sigma \Sigma m_c m_{c'} (\Phi_{cc'}^{\Phi} + \Sigma m_a \psi_{cc'a}) \\ & + \Sigma \Sigma m_a m_{a'} (\Phi_{aa'}^{\Phi} + \Sigma m_c \psi_{aa'c})] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\ln \gamma_M = & Z_M^2 F + \sum m_a (2B_{Ma} + ZC_{Ma}) \\ & + \sum m_c (2\Phi_{Mc} + \sum m_a \psi_{Mca}) \\ & + \sum \sum m_a m_{a'} \psi_{aa'M} \\ & + |Z_M| \sum \sum m_c m_a C_{ca}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\ln \gamma_x = & Z_x^2 F + \sum m_c (2B_{cx} + ZC_{cx}) \\ & + \sum m_a (2\Phi_{xa} + \sum m_c \psi_{xac}) \\ & + \sum \sum m_c m_{c'} \psi_{cc'x} \\ & + |Z_x| \sum \sum m_c m_a C_{ca}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}F = & -A^\circ [I^{1/2}/(1+1.2I^{1/2}) + 2/1.2 \ln(1+1.2I^{1/2})] \\ & + \sum \sum m_c m_a B'_{ca} + \sum \sum m_c m_{c'} \Phi'_{cc'} \\ & + \sum \sum m_a m_{a'} \Phi'_{aa'}\end{aligned}$$

$$C_{MX} = C_{MX}^\circ / 2 |Z_M Z_X|^{1/2}$$

$$Z = \sum |Z_i| m_i$$

$$B_{MX}^\circ = \beta_{MX}^{(0)} + \beta_{MX}^{(1)} e^{-\alpha_{MX} \cdot 1} + \beta_{MX}^{(2)} e^{-12 \cdot 1}$$

$$B_{MX} = \beta_{MX}^{(0)} + \beta_{MX}^{(1)} g(\alpha_{MX} \sqrt{I} + \beta_{MX}^{(2)} g(12 \sqrt{I}))$$

$$B'_{MX} = \beta_{MX}^{(1)} g'(\alpha_{MX} \cdot 1)/I + \beta_{MX}^{(2)} g'(12 \cdot 1)/I$$

$$g(x) = 2[1 - (1+x)e^{-x}]/x^2$$

$$g'(x) = -2[1 - (1+x+x^2/2)e^{-x}]/x^2$$

$$x = \alpha_{MX} \sqrt{I} \quad \text{or} \quad 12 \sqrt{I}$$

$$\Phi_{ij}^\circ = \theta_{ij} + {}^E\theta_{ij}(I) + I {}^E\theta'_{ij}(I)$$

$$\Phi_{ij} = \theta_{ij} + {}^E\theta_{ij}(I)$$

$$\Phi'_{ij} = {}^E\theta'_{ij}(I)$$

我们曾依此进行过许多多组分水盐体系溶解度的计算^[5],以及与此相关的引伸性工作,例如相图中的等水线计算^[6],介稳溶解度计算^[7-8],等温蒸发计算^[9],盐类加工工艺计算^[10]等。

Pitzer 发表的系列文章中曾给出 240 种电解质的参数 $\beta^{(0)}$, $\beta^{(1)}$, C° , 后来又列出 10 种 2-2 电解质的 $\beta^{(0)}$, $\beta^{(1)}$, $\beta^{(2)}$, C° , 在以后出版的专著“Activity Coefficients in Electrolyte Solutions”^[(3)]中又增加 20 种电解质,总计 278 种电解质的参数。同时也给出了原始热力学数据的浓度范围及标准偏差。近十年来电解质溶液化学研究又积累了大量新的数据。H-T. Kim^[(11)]搜集了新近发表的数据,重新进行了拟合,得到了 305 种电解质的 Pitzer 参数,原始数据大多数是在 J. Phys. Chem. Ref. Data 上公布的推荐数据。由于 Kim 所用的数据多数浓度高达饱和,故他认为对于低浓度的计算工作, Pitzer 的参数较好,而对于高浓度的计算他的参数更好些。对于许多实际应用的问题,例如卤水中矿物溶解度预测和无机盐化工工艺,无疑需要计算的都是饱和情况下的 γ 和 Φ , 我们曾使用二者的 Pitzer 参数进行了一些盐类 25℃ 溶解度计算^[(12)],以资对比,结果列在表 2 中。

表 2. 使用不同参数计算溶解度结果的对比

盐 类	参 数	$\beta^{(0)}$	$\beta^{(1)}$	C^Φ	$C_{\max}$	计算值	实测值
LiCl · H ₂ O	Pitzer	0.14940	0.3074	.00359	6.0	38.1	45.8
	Kim	0.20972 [*]	-0.34380	-.00433	19.219	45.7	
NH ₄ Cl	Pitzer	0.0522	0.1918	-.00301	6.2	27.5	28.2
	Kim	0.05191	0.17937	-.00301	7.405	27.7	
NaCl	Pitzer	0.0756	0.2664	.00127	6.0	26.3	26.45
	Kim	0.07722	0.25183	.00106	6.144	26.4	
KCl	Pitzer	0.04835	0.2122	-.00084	4.8	26.3	26.4
	Kim	0.04661	0.22341	-0.00044	4.803	26.3	
MgCl ₂ · 6H ₂ O	Pitzer	0.35235	1.6815	.00519	4.5	35.7	35.6
	Kim	0.35573	1.61738	.00474	5.750	35.7	

LiCl · H₂O 在水中的溶解度很大,根据我们的测定结果,25℃时溶解度 45.83%^[13],相当于 19.958m。Kim 拟合 LiCl 的参数时,使用数据的浓度达 19.219m,而 Pitzer 使用的数据,浓度只有 6m。二人所得参数差别也很大,例如 Pitzer 的参数三个都是正的,但 Kim 的参数只有 $\beta^{(0)}$ 为正, $\beta^{(1)}$ 和 C^Φ 都是负值。使用 Kim 的参数计算得到的溶解度与实验值很接近,而使用 Pitzer 参数求得的溶解度却低得多(偏差达 -17%),这表明 Pitzer 使用浓度至 6m 的数据拟合获得的参数,是不能外推到饱和溶液(19.958m)的。对 NH₄Cl 和 MgCl₂ · 6H₂O 而言,两种溶解度计算结果差别不大,从 6.2m 外推至 7.4m 和从 4.5m 外推至 5.75m,都没有带来多大偏差。虽然二组参数值并不完全相同,但依靠三个参数彼此之间的调节,却可以得到几乎一样的结果。MgSO₄ · 7H₂O 的情况与此类似。

在多组分体系溶解度计算中,二离子和三离子作用参数 θ, ψ 是相当重要的,使用它们可以大大改善计算的结果。Furst 和 Renon^[14]曾进行过全部使用这些参数和略掉 θ 和 ψ (或其中之一)时,计算 1-1 型电解质溶解度的对比研究,图 1 给出了部分结果。

Kim 也曾对 49 组三元体系的新数据拟合获得 θ 和 ψ ,此时使用的 $\beta^{(0)}, \beta^{(1)}$ 和 C^Φ 是按三元系混合物最高离子强度范围重新拟合的^[15]。

四、由溶解度数据获得 θ 和 ψ

虽然 θ 和 ψ 对于多组分体系溶解度计算是十分重要的,但文献中 θ 和 ψ 数据并不多,在进行溶解度计算时,经常感到缺乏此类参数,此时我们不得不从三元(甚至四元)体系的溶解度数

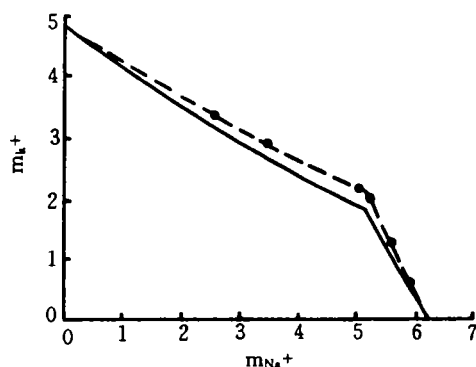


图 1 NaCl—KCl—H₂O 体系溶解度曲线实测值和计算结果对比

- ▲ 实验测定值
- 不使用混合参数的计算结果
- 使用混合参数的计算结果

据获得 θ 和 ψ , 然后将其用于更高组分体系的溶解度计算中。下面以 $\text{NaCl}-\text{KCl}-\text{H}_2\text{O}$ 体系为例, 考察获得参数的差异, 结果列于表 3 中。

表 3. $\text{NaCl}-\text{KCl}-\text{H}_2\text{O}$ 25 C 的有关参数

NO.	$\theta_{\text{Na,K}}$	$\psi_{\text{Na,K,Cl}}$	σ	说 明
1	-0.00838	-0.00281	0.023	由较好的溶解度数据 ^[16] 拟合
2	0.0853	-0.0225	0.080	由较差的溶解度数据 ^[17] 拟合
3	-0.0378	0.00346	0.019	同 1, 同时拟合两种盐的生成自由能
4	0.1038	-0.01023	0.029	将 $I=2.3248\sim 6.0839$ 的 57 个 Φ 数据拟合 ^[18]
5	-0.0167	0.00135	0.064	将 1 的溶解度与 4 的数据一起拟合

C. E. Harvie 等在进行 Pitzer 模型的应用研究时, 是将可能获得的 Φ 或 γ 数据与溶解度数据一起拟合得到了各有关参数, 然后用于多组分水盐体系溶解平衡计算。我们也依此进行过 $\text{Li, Na, K, Mg/Cl, SO}_4-\text{H}_2\text{O}$ 六元体系有关参数的拟合, 然后用于多组分体系溶解度预测^[19]。但是必须指出的是, 在某些情况下, 在三元体系中并不形成的复盐, 而在四元体系中却会形成。此时, 必需由四元体系溶解度数据来拟合, 同时获得有关参数 θ 和 ψ 及新复盐的标准生成自由能(或溶度积), 以便用来进行更高组分体系的溶解度的预测。

五、含锂水盐体系的 Pitzer 参数的获得及溶解度预测

虽然我们做过了 $\text{Li, Na, K, Mg/Cl, SO}_4-\text{H}_2\text{O}$ 六元体系溶解度的预测, 但由于从低组分体系数据拟合参数时, 标准偏差较大, 我们仍希望对此能进一步加以完善。为此我们开展了两方面的工作: 1) 实验测定含锂水盐体系高浓度下的渗透系数或活度系数。我们测定的这些含锂水盐体系大多是没有测定过的, 或虽有人研究过但浓度范围太低, 因此, 由我们测得的这些热力学数据拟合获得的参数, 就可以用于高组分水盐体系的溶解度预测; 2) 实验测定含锂水盐体系的溶解度, 这些研究工作中的低组分体系的结果, 可以与其他热力学性质一起用于拟合 Pitzer 参数, 而高组分体系的结果, 可以用来检验溶解度预测的可信程度。

第一方面的工作, 有采用离子选择性电极测定 $\text{LiCl}-\text{KCl}-\text{H}_2\text{O}$ 体系 25 C^[20] ($I=0.1-4.0\text{m}$), $\text{Li}_2\text{SO}_4-\text{MgSO}_4-\text{H}_2\text{O}$ 体系 25 C^[21] ($I=0.1-6.6\text{m}$) 盐类组分的平均活度系数, $\text{LiCl}-\text{MgCl}_2-\text{H}_2\text{O}$ 体系 ($I=0.05-6.0\text{m}$) 25 C 热力学性质^[22]; 以等压法测定 $\text{LiCl}-\text{MgCl}_2-\text{H}_2\text{O}$ ^[23], $\text{Li}_2\text{SO}_4-\text{MgSO}_4-\text{H}_2\text{O}$ ^[24], $\text{LiCl}-\text{KCl}-\text{H}_2\text{O}$ ^[25] 等体系 25 C 溶液的渗透系数等研究工作。先前, 我们曾将这些结果做过简单报道^[26]。

第二方面的工作, 包括了从三元至五元的许多体系溶解度的研究, 这些工作有 $\text{Li, K/SO}_4-\text{H}_2\text{O}$ ^[27,28], $\text{Li, Mg/SO}_4-\text{H}_2\text{O}$ ^[29-31], $\text{Li, K, Mg/SO}_4-\text{H}_2\text{O}$ ^[32], $\text{Li/SO}_4, \text{B}_4\text{O}_7-\text{H}_2\text{O}$ ^[33], $\text{Li, Mg/Cl, B}_4\text{O}_7-\text{H}_2\text{O}$ ^[34], $\text{Li/Cl, SO}_4-\text{H}_2\text{O}$ 和 $\text{Li/Cl, SO}_4, \text{B}_4\text{O}_7-\text{H}_2\text{O}$ ^[13], $\text{Li, Mg/SO}_4, \text{B}_4\text{O}_7-\text{H}_2\text{O}$ ^[35], $\text{Li, Mg/Cl, SO}_4-\text{H}_2\text{O}$ ^[36,37], $\text{Li, Na, K, Mg/SO}_4-\text{H}_2\text{O}$ ^[38,39], $\text{Li, K, Mg/Cl, SO}_4, \text{H}_2\text{O}$ ^[40] 等。

根据测定所获得的含锂体系活度系数和渗透系数, 并结合测得的溶解度数据一起拟合, 获得了有关 Pitzer 参数, 然后进行了 $\text{Li, K/Cl, SO}_4-\text{H}_2\text{O}$ 和 $\text{Li, Mg/Cl, SO}_4-\text{H}_2\text{O}$ 四元体系^[11,12], $\text{Li, K, Mg/SO}_4-\text{H}_2\text{O}$ 四元体系^[43] 25 C 溶解度的理论预测。由结果的对比可知, 即使在

如 Li, K, Mg/Cl, $\text{SO}_4\text{--H}_2\text{O}$ 体系这种非对称电解质构成的复杂体系, 预测的溶解度和实测的结果也是相当吻合的。根据对更高组分体系溶解度的预测, 已经对该体系的研究起了相当大的指导作用。

参 考 文 献

- [1] 宋彭生, 第六届全国相图学术会议文集, 213—215 (1990 年 11 月, 沈阳)
- [2] 宋彭生, 罗志农, 化学通报, 1983 年, 第 12 期, 13—18 页。
- [3] K. S. Pitzer, in "Activity Coefficients in Electrolyte Solutions", Ed. by R. M. Pytkowicz, Vol. 1, 157—208, 1979.
- [4] C. E. Harvie, et al., *Geochim. Cosmochim. Acta*, 48, 723—751 (1984).
- [5] 宋彭生, Abstracts of papers, VIII International Conference on Computers in Chemical Research and Education, D—25, 1987.
- [6] 宋彭生, 化工学报, No. 1, 104~112 (1989).
- [7] 宋彭生, 第四届溶液化学、热力学、热化学、热分析论文报告会摘要集, B—45, 146—147 (1988 年 8 月, 沈阳)。
- [8] 房春晖, 牛自得, 刘子琴, 陈敬清, 化学学报, 49, 1062—1070 (1991)。
- [9] 宋彭生, 中国海洋湖沼化学中国海洋化学学术报告会论文摘要汇编, 62 (1986 年 12 月, 成都)。
- [10] 宋彭生, 中国海洋和湖沼化学学术讨论会, 论文摘要汇编, 85, (1988 年 5 月, 厦门)。
- [11] H—T. Kim, et al., *J. Chem. Eng. Data*, 33(2), 177—184 (1988)。
- [12] 宋彭生, 盐湖研究, No. 1, 15—22 (1989)。
- [13] 宋彭生, 杜宪惠, 科学通报, 1986, 3, 209—213。
- [14] W. Furst, et al., *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 21(3), 396—399 (1982)。
- [15] H—T. Kim, et al., *J. Chem. Eng. Data*, 33(3), 278—283 (1988)。
- [16] Злановский А. В., и. т. д. справочник экспериментальных данных по растворимости содовых систем, Том II, стр. 169 (1954), Ленинград.
- [17] Solubilities Of Inorganic and Organic Compounds, Vol. 3, Part 2, 1149 (1979), Ed. by H. L. Silcock, Pergamon Press. Oxford.
- [18] Robinson R. A., *J. Phys. Chem.*, 65(4), 662—667 (1961)。
- [19] 宋彭生, 第六届全国相图学术会议文集, 206—209 (1990 年 11 月, 沈阳)。
- [20] 李军, 宋彭生, 姚燕, 王瑞陵, 物理化学学报, Vol. 8, No. 1, 94—99 (1992)。
- [21] 吴荣宣, 姚燕, 吴国梁, 青海省化学学会论文摘要汇编 (1991 年 7 月, 西宁)。
- [22] 王瑞陵, 姚燕, 吴国梁, 物理化学学报, Vol. 9, No. 3, 357—365 (1993)。
- [23] 姚燕, 孙柏, 宋彭生, 张忠, 化学学报, Vol. 50, No. 9, 839—848 (1992)。
- [24] 张忠, 姚燕, 宋彭生, 陈敬清, 物理化学学报, Vol. 9, No. 3, 366—373 (1993, Jun.)。
- [25] 王瑞陵, 姚燕, 张忠, 吴国梁, 青海省化学学会论文摘要汇编, (1991 年 7 月, 西宁)。
- [26] Yan Yao (姚燕), Pengsheng song (宋彭生), Zhong Zhang (张忠), Bai Sun (孙柏), Thermodynamics of Concentrated Electrolyte Mixtures and the prediction of Solubilities for Li

— K — Mg — Cl — SO₄ — H₂O system at 25 °C, Abstracts of Papers, 5th International Symposium on Solubility Phenomena, Moscow, Russia, July, Session 5, 189, 1992.

[27]李冰,王庆忠,宋彭生,房春晖,第六届全国相图学术会议文集,216—218(1990年11月,沈阳).

[28]李冰,王庆忠,房春晖,宋彭生,盐湖研究,1991年,第3期,10—13.

[29]李冰,房春晖,王庆忠,李军,宋彭生,盐湖研究,1993年,第3期,1—5.

[30]李冰,王庆忠,李军,房春晖,宋彭生,物理化学学报,Vol. 10, No. 6, 536—542, (1994).

[31]李冰,李军,房春晖,王庆忠,宋彭生,Chinese J. of Chem. Vol. 13, No. 2, 112—117 (1995).

[32]房春晖,李冰,李军,王庆忠,宋彭生,化学学报,Vol. 52, No. 10, 954—959, (1994).

[33]宋彭生,杜宪惠,许恒存,科学通报,1983年,第2期,106—110.

[34]凌云,陈敬清,宋彭生,硕士论文,1987年4月,中国科学院盐湖研究所.

[35]宋彭生,傅宏安,无机化学学报,344—348 (1991).

[36]任开武,宋彭生,青海省化学学会论文摘要汇编(1991年7月,西宁).

[37]任开武,宋彭生,硕士论文,1992年5月,中国科学院盐湖研究所.

[38]李冰,孙柏,房春晖,杜宪惠,宋彭生,盐湖研究,Vol. 3, No. 2, 34—39 (1995).

[39]李冰,孙柏,房春晖,杜宪惠,宋彭生,化学学报,Vol. 55, No. 6, 545—552, (1997).

[40]孙柏,李冰,房春晖,宋彭生,盐湖研究,Vol. 3, No. 4, 50—56 (1995).

[41]任开武,宋彭生,应用化学,Vol. 11, No. 1, 7—11, (1994, Feb.).

[42]任开武,宋彭生,无机化学学报,Vol. 10, No. 1, 69—74, (1994, March).

[43]李军,李冰,房春晖,王庆忠,宋彭生,第七届全国相图学术会议文集, (1993年3月,上海).

Pitzer Thermodynamics Model of Aqueous Electrolyte for Prediction of Solubility in Salt—Water System

Song Pengsheng Fang Chunhui Li Jun
(Qinghai Institute of Salt Lakes, CAS, Xining, 810008)

Abstract

Pitzer ion interaction model for electrolyte solution is an semi—empirical statistics theory. Some aspects of solubility prediction in salt—water system are given in this paper including research work on thermodynamics of aqueous Li—salts systems, parameterization for the model, method and results of solubility calculation in multi—component salt water systems.

Keywords Pitzer model, salt—water system, prediction of solubility