

文章编号:1004-4736(2008)01-0023-03

# 氧化物酸碱性的离子参数标度法

周荣花, 吴启勋

(青海民族学院化学系, 青海 西宁 810007)

**摘要:**采用离子参数电离势  $I$  及有效核电荷数  $Z^*$  与离子半径  $R$  之比  $Z^*/R$  来标度氧化物的酸碱性, 建立了新的氧化物离子参数函数  $A = I + 1.24Z^*/R - 38.87$ ; 通过计算可确定氧化物的  $A$  值, 作为新的标度值可以衡量氧化物酸碱性的相对强弱, 所得结果与实际情况相吻合; 而且还可以预测氧化物的酸碱性, 对于推测氧化物的化学性质有一定指导意义。

**关键词:**氧化物; 离子参数函数; 酸碱性

**中图分类号:** O 641 **文献标识码:** A

## 0 引言

关于氧化物酸碱度的标度方法很多: 孙家跃<sup>[1]</sup>等提出用氧原子的电荷分数来标度, 从氧原子角度出发, 其计算结果符合酸碱顺序; 但是, 实际上非氧原子的离子参数对氧化物酸碱性的贡献也较大。陈念贻<sup>[2]</sup>等用模式识别-化学键参数法总结氧化物形成条件的规律, 利用元素的形式电荷数与实测氧化物键长的比  $Z/d$  和电负性  $X\sigma$  的两个影响最大的特征量得到进行表征的键参数函数:  $L = X\sigma + 0.771Z/d - 2.60$ , 并指出  $L$  函数可看成标志氧化物酸碱性的标度, 但其所选用的两个键参数之间本质意义相同。于军<sup>[3]</sup>选用元素的电离势  $I$  及元素的有效核电荷数  $Z^*$  来标度氧化物的酸碱性, 因为孤立原子的各级电离势反映了原子的结构特性, 然而, 原子的结构特性还和离子半径有密切关系, 因此, 本研究在此基础上进行改进, 增加离子半径  $R$ , 用元素电离势  $I$  以及元素的有效核电荷数  $Z^*$  与离子半径  $R$  之比  $Z^*/R$  来标度氧化物的酸碱性, 以期所得结果更符合实际情况, 效果更好。

## 1 氧化物离子参数标度法的建立

氧化物在自然界中普遍存在, 与人类的生活密切相关, 除了某些稀有气体外, 几乎所有元素都能生成氧化物。一般认为氧化物溶于水, pH 值为 7 是中性氧化物, 大于 7 是碱性氧化物, 小于 7 是酸性氧化物; 氧化物能与碱反应的是酸性氧化物, 能

与酸反应的是酸性氧化物, 既能与酸反应又能与碱反应是两性氧化物。

用统计分析软件 SPSS, 以各种阳离子的电离势  $I$  对有效核电荷数与离子半径比  $Z^*/R$  作散点图如图 1 (图 1 中  $v$  代表  $Z^*/R$ ) 所示, 结果发现在酸性氧化物与碱性氧化物之间有一条明显的分界线, 直线的左下方为强碱性氧化物, 直线的偏右下方为弱碱性氧化物, 直线的偏右上方为强酸性氧化物, 直线的偏左上方为弱酸性氧化物, 直线附近为两性氧化物, 直线过  $Al^{3+}$ 、 $Hf^{4+}$  两点, 得方程:

$$I + 1.24Z^*/R - 38.87 = 0$$

$$\text{令函数 } A = I + 1.24Z^*/R - 38.87$$

将电离势  $I$  和有效核电荷数  $Z^*$  与离子半径  $R$  之比  $Z^*/R$  的值代入, 根据计算结果所在的取值范围可确定各种氧化物酸碱性。

将表 1 中 55 种氧化物的酸碱性的进行分类, 可将氧化物分为强碱性氧化物, 中强碱性氧化物, 弱碱性氧化物, 两性氧化物, 弱酸性氧化物, 中强酸性氧化物和强酸性氧化物。由计算的  $A$  值可划分氧化物酸碱性的范围: 强碱性氧化物在  $-33.36 \sim -26.20$ , 中强碱性氧化物在  $-26.20 \sim -16.56$ , 弱碱性氧化物或两性氧化物在  $-16.56 \sim 0.00$ , 弱酸性氧化物或两性氧化物氧化物在  $0.00 \sim 32.83$ , 中强酸性氧化物在  $32.83 \sim 34.40$  之间, 强酸性氧化物在  $34.40 \sim 71.94$ ; 所得结果与实际情况吻合, 而且还可预测氧化物的某些特殊化学性质。

收稿日期: 2007-09-10

作者简介: 周荣花 (1978-), 女, 山东济宁人, 硕士研究生, 从事物理化学计算的研究。

指导老师: 吴启勋, 教授, 硕士研究生导师, 享受国务院政府津贴, 研究方向: 物理学。



- 研组,华东化工学院无机化学教研组,译.北京:人民教育出版社,1982:248-249.
- [5] Stark J G, Wallace H G, 化学数据手册[M]. 杨厚昌,译. 北京:石油工业出版社,1980:11-13.
- [6] 刘昆元,俞汝勤. 聚类分析法研究广义酸碱的分类[J]. 化学通报,1988,(3):43-46.
- [7] 刘昆元,李郁章.《化学计量学导论》评价[J]. 化学通报,1992,(5):24.
- [8] 陈念贻,陈钦佩,陈瑞亮,等. 模式识别方法在化学化工中的应用[M]. 北京:科学出版社,2002:187-189.

## A method of scaling acidity and alkalinity of oxides with ion parameters

ZHOU Rong-hua, WU Qi-xun

(Qinghai University for Nationalities of Chemistry, Qinghai Xining 810007, China)

**Abstract:** Based on the relationship between acidity and alkalinity of oxides and ion parameters, some ion parameters, such as elemental ionization power  $I$ , effective nuclear electricity  $Z^*$  and ionic radius  $R$ . Were selected to scale acidity and alkalinity of oxides, and the ionic parameter function,  $A = I + 1.24 Z^* / R - 38.87$ , was established. Though calculation the  $A$  values were obtained, which can measure the relative strength of acidity and alkalinity of oxides, and the results coincide with the actual situations. As a new method, it can predict and measure the relative strength of acidity and alkalinity of oxides, and acid and alkali of the oxide can be defined.

**Key words:** oxide; ion parameter function; acidity and alkalinity

本文编辑:陈晓革



(上接第22页)

- [6] 苏世花,陈樟儿,陈建贤,等. 软锰矿—黄铁矿直接酸浸生产硫酸锰的工艺研究[J]. 三明高等专科学校学报,2001,18(4):10-14.
- [7] 谭立群. 硫酸锰厂新工艺的设计[J]. 中国锰业,2000,18(4):34-35.
- [8] 王长兴. 软锰矿直接酸浸生产硫酸锰的工艺[J]. 无机盐工业,1997,(2):23-25.
- [9] 曹柏林,黄斌. 用贫软锰矿制备硫酸锰[J]. 湖南有色金属,2000,16(3):18-20.
- [10] 周登凤,李军旗,杨志彬,等. 硫酸锰深度净化的研究[J]. 贵州工业大学学报(自然科学版),2006,35(1):4-6.
- [11] 贺周初,彭爱国,郑贤福,等. 两矿法浸出低品位软锰矿的工艺研究[J]. 中国锰业,2004,22(2):35-37.
- [12] 刘建本,陈上,鲁广. 硫酸锰的生产技术及发展方向[J]. 无机盐工业,2005,37(9):5-7.

## A study on preparation of manganese sulfate with low grade manganese ore

CHEN Rong, CHEN Qi-ming, CHEN Jin-fang, LI Fei-kuo

(School of Chemical Engineering and Pharmacy, Wuhan Institute of Technology; Key Laboratory for Green Chemical Process of Ministry of Education, Hubei Key Lab of Novel Reactor and Green Chemical Technology, Wuhan 430074, China)

**Abstract:** With the pyrite as reducer, the method that utilize sulfuric acid to directly leaching low grade manganese ore which Mn content approximately 15% can prepare preferably techno-eligible manganese sulfate, the leaching ratio of Mn is above 97%, and the recovery rate of Mn is up to 92.34%. The results from experiment show that when the quality ratio of manganese ore, pyrite and sulfuric acid is 1 : 0.2 : 0.46 and the leaching interval is ten hours, the effect of leaching Mn is optimum, the productive rate of by-product acidic white soil is 51%~72%.

**Key words:** low grade; manganese ore; manganese sulfate; acidic white soil

本文编辑:陈晓革