

化学类论文中溶液组成的规范表达

马英霞 李学良

(原子能科学技术编辑部, 102413, 北京)

摘要 采用 GB 3102.8—1993 中规定的量名称和量符号是规范溶液组成表达的依据和基础。该标准中列出的相关量名称和量符号可划分为“浓度”类、“分数”类和“比”类。进一步分析指出:对由 SI 基本量“物质的量”导出的导出量,必须遵守使用单位“摩尔”应指明物质的基本单元的使用规则;组合单位中词头的选用应符合有关词头的使用规则;量纲一的量的量值表达则需遵守相关规则。据此,就目前化学类论文中有关溶液组成的几个常见问题进行简析。

关键词 溶液组成;量名称;量符号;规范化

Normalization of solution composition presenting in chemistry papers//MA Yingxia, LI Xueliang

Abstract //The use of standardized quantities and units in GB 3102.8—1993 is a necessary condition for the normalized presenting of solution composition. They can be divided into “concentration” class, “fraction” class and “ratio” class. There are some regulations to be abided by. For the deduced quantities from “amount-of-substance”, the basic unit must be noted. The adoption of the prefix in the complex unit should accord with the regulations. The presenting of quantity value with the dimension of one should be normalized. Based on these regulations, some common problems occurred in chemistry papers are briefly analyzed.

Key words solution composition; quantity name; quantity symbol; normalization

Author's address Editorial Board of Atomic Energy Science and Technology, 102413, Beijing, China

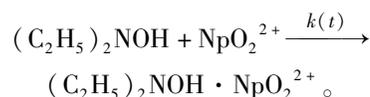
对 GB 3102.8—1993《物理化学和分子物理学的量和单位》^[1]做一分析,可知它规定的表示溶液组成的量名称可分为 3 类,即“浓度”类、“分数”类和“比”类。正确使用 GB 3102.8—1993 规定的量的名称、符号及其单位是规范表达溶液组成的基础和前提。在化学类论文中,表示溶液组成的量名称、量符号、单位符号的使用频率甚高,而目前的使用状况又较为混乱,应废除的仍在使用,法定使用的又不甚规范;因此,规范溶液组成的表达很有必要。笔者试就目前化学类论文中溶液组成规范表达方面的常见问题做一简要分析。

1 表示溶液组成的法定量名称和量符号

1.1 “浓度”类 “浓度”类有 4 个法定量,即 B 的浓度、溶质 B 的质量摩尔浓度、B 的质量浓度和 B 的分子浓度。

B 的浓度,又称 B 的物质的量浓度,符号为 c_B ,定义为“B 的物质的量除以溶液的体积”,即 $c_B = n_B/V$ 。其中: n_B 为 B 物质的量,单位为 mol; V 为溶液体积,单位为 L; c_B 的常用单位为 mol/L。

在化学中,B 的浓度也可表示为 $[B]$ 。实际上, $[B]$ 常用于化学反应中,这时,参与反应的各基本单元 B 处于平衡状态下,所以, $[B]$ 实际上表示化学反应处于平衡状态下的平衡浓度,它与 c_B 表示的通常状态下的 B 的浓度有所区别。例如,在给定温度 t 这一条件下络合反应为



络合反应常数 $k(t)$ 可表示为

$$k(t) = [(C_2H_5)_2NOH \cdot NpO_2^{2+}] / [(C_2H_5)_2NOH][NpO_2^{2+}]$$

式中,参与反应的各组元的浓度均为反应达到平衡时的平衡浓度。当然, $k(t)$ 也可用 c_B 表示。用 c_B 表示时,应加上上标“eq”,以表示其为平衡浓度,这时, $k(t)$ 可表示为

$$k(t) = c^{eq}((C_2H_5)_2NOH \cdot NpO_2^{2+}) / c^{eq}((C_2H_5)_2NOH) c^{eq}(NpO_2^{2+})$$

过去,化学中常使用“克分子浓度”这一量名称,又称为摩尔浓度,以符号“ M ”记之,单位符号为 M。 M 的定义是,表示单位体积溶液中所含溶质的摩尔数;当量浓度也经常使用,以量符号 N 表示,单位符号为 N,表示单位体积溶液中所含溶质的克当量数。

此外,还常用克离子浓度(M)等。无论是摩尔浓度中的摩尔数、克离子数,还是当量浓度中的克当量数,其实质均是物质的量,都可以 B 的物质的量 n_B 代之;因此,摩尔浓度 M 、克离子浓度 M 、当量浓度 N 、克分子浓度、体积克分子浓度等这一类量名称^[2-3]及其符号均应废止使用。

溶质 B 的质量摩尔浓度,又称 B 的质量摩尔浓度,符号为 b_B 和 m_B 。 b_B 和 m_B 的定义为溶质 B 的物质的量 n_B 除以溶剂 A 的质量 m_A ,即 $b_B, m_B = n_B/m_A$ 。 b_B, m_B 的法定单位为 mol/kg。 b_B 和 m_B 这 2 个符号均可使用。在同一文章中若有“质量”这个量出现,而质量的符号为“ m ”,这时,为防止混乱,应避免使用符号

“ m_B ”^[4]。非法定量名称重量克分子浓度、重量摩尔浓度均应废止使用^[2-3]。

B的质量浓度的符号为 ρ_B ,定义为B的质量 m_B 除以混合物的体积 V ,即 $\rho_B = m_B/V$,常用的法定单位为 kg/L 。重量浓度、浓度为非法定量名称^[2-3],应废止使用。

B的分子浓度的符号为 C_B ,定义为B的分子数除以混合物的体积,单位为 m^{-3} ,化学中常用 L^{-1} 。

1.2 “分数”类和“比”类 “分数”类涉及3个法定量,即质量分数、摩尔分数和体积分数;“比”类法定量为B的摩尔比。

1) B的质量分数、B的摩尔分数和B的体积分数。

①B的质量分数。B的质量分数定义为B的物质的量 n_B 与溶液的质量之比,符号为 w_B 。

从 w_B 的定义可知,凡以质量表示的物质B在溶液中的含量均属于质量分数范畴,因此,以往常用的重量百分数、质量百分比浓度、重量百分比浓度、浓度等量名称^[2-3],均应称为质量分数,这些旧的量名称均应废止使用。

②B的摩尔分数。B的摩尔分数定义为溶质B的物质的量 n_B 与溶液中的所有物质的量的总和 $\sum_B n_B$ 之比,符号为 x_B 和 y_B 。标准规定应优先使用量符号 x_B 。 x_B 是基于物质的量 n_B 的一个量,在化学中,有关物质的量,以往常称为克分子数(又称摩尔数)、克原子数、克当量数(又称当量数)、克离子数等,与此相应的常用克分子百分数、摩尔百分数、克原子百分数、克离子百分数等名称^[2]。这些名称均应废止使用,而以指明物质B的基本单元的B的摩尔分数代之。

③B的体积分数。B的体积分数的符号为 φ_B ,其定义为 $x_B V_{m,B}^*/\sum_A x_A V_{m,A}^*$ 。定义式中: x_B 、 x_A 分别为物质B和A的摩尔分数; $V_{m,B}^*$ 和 $V_{m,A}^*$ 分别为纯物质B和A在相同温度和压力下的摩尔体积,而 \sum 表示在全部物质范围求和。随着 φ_B 的使用,以往使用过的体积百分比浓度、体积百分数、体积百分含量、浓度等名称^[2-3]均应废止使用。

2) 溶质B的摩尔比。溶质B的摩尔比的符号为 r_B ,其定义为溶质B的物质的量 n_B 与溶剂的物质的量 n_A 之比,即 $r_B = n_B/n_A$ 。溶质B的摩尔比的替换名称为B物质的量比。化学中,以往常称为克分子比^[2],这一名称应废止使用。

通常,化学中的“溶液”并未从热力学上明确它的意义,只要系统的体积不变,或涉及特定温度(或常温)下的溶液组成,GB 3102.8—1993规定的以上各量名称和量符号均可用于溶液组成的规范表达;但需指

出的是,对于与热力学相关的溶液组成的表达,即对于溶质B的组成标度,该标准只选择了与反应体系的温度和压力无关的溶质B的质量摩尔浓度 b_B 和溶质B的摩尔比 r_B ^[4-5]。这一点是必须遵守的。

2 关于溶液组成规范表达的几个问题

2.1 物质的量和物质的基本单元 在表示溶液组成的法定量中,B的浓度 c_B 、溶质B的质量摩尔浓度 b_B (m_B)、B的摩尔分数 x_B (y_B)、溶质B的摩尔比 r_B 均为SI基本量物质的量 n_B 的导出量。使用这些量的符号时,必须遵守使用“摩尔”时应指明基本单元的使用规则^[1,4]。

标准规定,基本单元可以是原子、分子、离子、电子及其他粒子,或是这些粒子的特定组合。实际上,特定组成还可根据需要人为选定具有一定物理意义的组合形式,不必限于那些已知的或想象存在的独立单元,或含整数原子的组合^[4]。现举一示例具体说明之。

示例 碳酸钠溶液浓度为 1 mol/L 。

这句话没有指明溶质B的基本单元,其浓度值不确定。若将“碳酸钠”改为“ Na_2CO_3 ”,则指明了其基本单元为 Na_2CO_3 分子,并应记写为 $c(\text{Na}_2\text{CO}_3) = 1 \text{ mol/L}$ 。在 Na_2CO_3 溶液中,1个 Na_2CO_3 分子离解为2个 Na^+ 离子和1个 CO_3^{2-} 离子,该溶液中 CO_3^{2-} 离子的浓度 $c(\text{CO}_3^{2-}) = 1 \text{ mol/L}$,而 $c(\text{Na}^+) = 2 \text{ mol/L}$ 。

这一示例显示, c_B 的量值与其基本单元密切相关,说明对基于物质的量的导出量,指明物质B的基本单元的必要性。

2.2 量符号中下标B的记写 表示溶液组成的各法定量符号均具有下标“B”,它泛指溶质B。GB 3102.8—1993规定:“一般宜将具体物质的符号及其状态置于与主符号齐线的括号中。”

在化学类论文中,有人习惯将溶质B的具体物质符号或基本单元写为主符号的下标,如将含钍(Th)和钾(K)的溶液浓度写为 c_{Th} 和 c_{K} ^[6]。显然,这一记写方法与标准推荐的记写规则不符,而应记写为 $c(\text{Th})$ 和 $c(\text{K})$ 。

以此类推,对于 H_2SO_4 、 Na^+ 、 ${}^6\text{Li} + {}^7\text{Li}$,写成 $c(\text{H}_2\text{SO}_4)$ 、 $w(\text{Na}^+)$ 、 $r({}^6\text{Li} + {}^7\text{Li})$ 等是规范的,而不应写成 $c_{\text{H}_2\text{SO}_4}$ 、 w_{Na^+} 、 $r_{{}^6\text{Li} + {}^7\text{Li}}$ 等。

2.3 组合单位中的词头 前面提到的 c_B 、 b_B 、 ρ_B 均为组合单位。 c_B 、 b_B 、 ρ_B 的单位中的词头必须符合词头的使用规则。

GB 3100—1993^[7]规定:“组合单位的倍数单位一般只用一个词头,并尽量用于组合单位中的第一个单位”;“通过相除构成的组合单位,或通过乘和除构成

的组合单位,其词头一般都应加在分子的第一个单位之前,分母中一般不用词头,但质量单位 kg 在分母中时例外”(如 b_B 的单位为 mol/kg);“一般不在组合单位的分子分母中同时采用词头”。

在化学分析中,特别是微量化学分析中,许多人习惯把“ $\mu\text{g}/\text{mL}$ ”“ $\text{ng}/25\ \mu\text{L}$ ”作为 ρ_B 的单位,例如,将钙的质量浓度表示为 $\rho(\text{Ca}) = 1.00\ \mu\text{g}/\text{mL}$ ^[8],将 $\rho(\text{Mn}(\text{II}))$ 的质量浓度表示为 $\rho(\text{Mn}(\text{II})) = 0.4\ \text{ng}/25\ \mu\text{L}$ ^[9]。这种单位的使用显然与上述规则相悖。实际上,“ $\mu\text{g}/\text{mL}$ ”和“ $\text{ng}/25\ \mu\text{L}$ ”的使用与取样量和溶液制备操作条件有关,这种表示方法将取样量和操作条件信息附加在单位之中。GB 3100—1993 规定,“在单位符号上附加表示量的特性和测量过程信息的标志是不正确的”^[7]。据此,单位“ $\mu\text{g}/\text{mL}$ ”和“ $\text{ng}/25\ \mu\text{L}$ ”必须修正,实际上,前者等同于单位“ mg/L ”,后者应改为“ $\mu\text{g}/\text{L}$ ”,并将原单位中的数字“25”折算到量的数值中;因此, $\rho(\text{Ca}) = 1.00\ \mu\text{g}/\text{mL}$ 应改为 $\rho(\text{Ca}) = 1.00\ \text{mg}/\text{L}$,而 $\rho(\text{Mn}(\text{II})) = 0.4\ \text{ng}/25\ \mu\text{L}$ 应改为 $\rho(\text{Mn}(\text{II})) = 16\ \mu\text{g}/\text{L}$ 。

2.4 量纲一量值的表达 w_B 、 x_B 、 φ_B 、 r_B 均为量纲一的量。GB 3100—1993^[7]规定:量纲一的量的一贯单位是一,符号是 1,在表示量值时,单位 1 不明确写出,量值用 10 的幂表示;质量分数 w_B 和体积分数 φ_B 也可用 $\mu\text{g}/\text{g}$ 和 mL/L 形式表示;可使用百分符号%,但应避免使用千分符号‰;不能使用 ppm、ppb 等这类缩写。对于以上各量的量值表达均应遵守这一规则,并禁止使用“‰”“ppm”“ppb”等这类符号。

百分符号%的使用经常出现不规范现象。例如,在百分符号%上加其他信息,表示成诸如 (m/m) 、 $\%(V/V)$ 、 $\text{wt}\%$ ^[9]、 $\text{at}\%$ 等形式,分别意指质量百分或质量比、体积百分或体积比、重量百分和原子百分。实际上,质量百分、体积百分、重量百分和原子百分之类的称谓,在原则上是无意义的,在单位符号上附加表示量的特性和测量过程信息的标志也是不正确的。因此,对质量分数 w_B 可直接使用符号%,而不必也不应写成 $\%(m/m)$ 和 $\text{wt}\%$;对体积分数 φ_B 可直接使用%,而不必也不应使用 $\%(V/V)$;而原子百分数本质上就是摩尔分数 x_B ,因此,可直接使用%,不必也不应使用 $\text{at}\%$ 。

此外,在不同的化学分支学科中,有关溶液组成的

表达惯用本学科特有的量名称和量符号。例如,在核化学中,人们用“活度浓度”^[10]表示放射性溶液的组成,并用 C 作为量符号,如,¹³¹I 示踪溶液的活度浓度为 $3\ \text{MBq}/\text{L}$,记写为 $C(^{131}\text{I}) = 3\ \text{MBq}/\text{L}$ 。以上这类表示溶液组成的量名称和量符号非属 GB 3102.8—1993 规定的表示溶液组成的法定量名称和量符号,但它是特定学科认定的名词术语而被普遍采用。对于这种情况,当该量名称和量符号在论文中首次出现时,必须说明它们的含义。

3 结束语

GB 3102.8—1993《物理化学和分子物理学的量和单位》是规范论文中溶液组成表达的基础,只有采用该标准规定的法定量名称、量符号及其单位符号,废止使用非法定量名称和量符号,并遵守 GB 3100—1993《国际单位制及其应用》中规定的相关使用规则,方能做到对溶液组成的规范表达。

4 参考文献

- [1] GB 3102.8—1993 物理化学和分子物理学的量和单位 [S]//GB 3100~3102 量和单位.北京:中国标准出版社,1994:214-245
- [2] 中国标准出版社总编室.科技图书中量和单位的规范用法(试行)[M].北京:中国标准出版社,2002
- [3] 张铁垣.分析化学中的量和单位[M].2版.北京:中国标准出版社,2002
- [4] 国家技术监督局计量司,标准化司.量和单位国家标准实施指南[M].北京:中国标准出版社,2006:298-309
- [5] 刘天和,周恩绚.液体混合物和液体溶液中的化学平衡[J].化学通报,1994(11):19-24
- [6] 夏晓丹,卢新卫.宝鸡燃煤电厂原煤及粉煤灰中天然放射性水平[J].辐射防护,2006,26(5):310-313
- [7] GB 3100—1993 国际单位制及其应用[S]//GB 3100~3102 量和单位.北京:中国标准出版社,1994:3-9
- [8] 文希孟,俞晓琛.真空蒸馏-ICP-AES 法分析核级钠中的钙[J].核化学与放射化学,2006,28(2):94-98
- [9] 李岩,董秀文,陈新,等.高杂质钼铁中 Mo 等元素的能量色散 X 射线分析[J].分析化学学报,2006,22(5):547-550
- [10] GB/T 4960.1—1996 核科学技术术语:核物理与核化学 [S].北京:中国标准出版社,1997

(2007-04-06 收稿;2007-06-30 修回)