

A vminTEQ program használatának gyakorlása/2

Sorozatszámítás a pH függvényében



Példaként vizsgáljuk meg egy oldat ólomtartalmát a pH függvényében!
 Ehhez ismét a $0,5 \text{ mol/l } \text{Pb}(\text{NO}_3)_2 = \text{Pb}^{++} + 2 * \text{NO}_3^-$ ionjait visszük
 be komponensként a VminteqHF.pdf 3-4 diái szerint.

Components in the present problem

Component name	Total concentration* Molal	Act guess? **
H+1	0	<input checked="" type="checkbox"/>
Pb+2	0.5	<input checked="" type="checkbox"/>
NO3-1	1	<input checked="" type="checkbox"/>

Ezután beállítjuk a főmenü (input menü)
Multi-problem / Sweep menüpontját is.

New file - Visual MINTEQ main menu

File Parameters Solid phases and excluded species Adsorption Gases Redox **Multi-problem / Sweep** Database management Help

Visual MINTEQ



pH

Activity Davies

Concentration unit

Temperature deg C

A kijelölt pontokon (felülről-lefelé) tegye meg az alábbi beállításokat!

Multi-problem menu - Visual MINTEQ

Sweep: one parameter is varied
 Titration / mixing with a titrant with defined composition
 Simulate evaporation / concentration
 Multi-problem generator - add several problems to the same run

State the number of problems

Choose sweep component

pH
 Eh (mV)
 pe
 Fixed log activity / pressure, other species
 Total concentration, any component

Start value Increment between values

Results for the pH / sweep component and for up to thirteen additional species can be shown on a separate page

Choose components / species for sweep output

Add comp. / species	Which type?	Present selection	New selection
<input type="text" value=""/>	<ul style="list-style-type: none">ConcentrationLog ConcentrationActivityLog ActivityTotal dissolvedLog Total dissolvedTotal sorbed <input type="button" value="Add"/>	pH	<input type="button" value="New selection"/>

A kiszámolandó komponenseket az Add comp./species alatti listából választjuk ki. Megadjuk a típust is (Which tipe?).

A pH mellé (amely automatikusan a lista élén áll az ólomtartalmú komponenseket választjuk ki:

- Pb+2, Total dissolved típus

Ezután azokat a komponenseket jelöljük ki, amelyek összegeként az összes oldatban levő oldat ólom adódik (Pb+2, Total dissolved)

- Pb+2, Concentration típus Pb^{2+}
- $PbNO_3^+$ ionpár $Pb^{2+} + NO_3^- = PbNO_3^+$
- $Pb(NO_3)_2$ (aq) $PbNO_3^+ + NO_3^- = Pb(NO_3)_2$
- $PbOH^+$ $Pb^{2+} + OH^- = PbOH^+$
- $Pb(OH)_2$ (aq) $PbOH^+ + OH^- = Pb(OH)_2$
- $Pb(OH)_3^-$ $Pb(OH)_2 + OH^- = Pb(OH)_3^-$
-

Csak az ólomtartalmú komponenseket választjuk ki

Concentration típusal.

Az oxidokat és több ólomatomot tartalmazó komplexeket most nem választjuk ki.

Ezután a **Save and Back** –ra kattintással visszatérünk a főmenübe.

Run
MINTEQ

- re kattintva elindítjuk a számítást

A kezdő pH-n (pH=1) az oldatban levő komponensek (species) koncentrációja leolvasható a fő-output táblázatból.

Visual MINTEQ - Output

File Options

This is a sweep output file - Select Problem no. 1 *No. of iterations* 5

pH 1.000
Ionic strength 0.6883

Sum of cations (eq/kg) 6.3871E-01
Sum of anions (eq/kg) 5.0502E-01
Charge difference (%) 11.689193

Concentrations and activities of aqueous inorganic species (mol / l) [Print to Excel](#)

	Concentration	Activity	Log activity
H+1	1.3371E-01	1.0000E-01	-1.000
NO3-1	5.0502E-01	3.7770E-01	-0.423
OH-	1.3097E-13	9.7954E-14	-13.009
Pb(NO3)2 (aq)	1.1142E-01	1.3055E-01	-0.884
Pb(OH)2 (aq)	2.3697E-17	2.7766E-17	-16.556
Pb(OH)3-	3.6366E-27	2.7198E-27	-26.565
Pb+2	1.1643E-01	3.6431E-02	-1.439
Pb2OH+3	7.0688E-08	5.1757E-09	-8.286
Pb3(OH)4+2	1.7911E-24	5.6042E-25	-24.251
Pb4(OH)4+4	2.1302E-21	2.0417E-23	-22.690
PbNO3+	2.7213E-01	2.0353E-01	-0.691
PbOH+	1.1985E-08	8.9639E-09	-8.048

View species distribution Display saturation indices Equilibrated mass distribution **Selected sweep results**

Execution time (s): 0.375 [Back to input menu](#)

Problem no.	pH	Pb+2	Pb+2	PbNO3+	Pb(NO3)2 (aq)
		Total dissolved	Concentration	Concentration	Concentration
1	1.000	4.9998E-01	1.1643E-01	2.7213E-01	1.1142E-01
2	2.000	5.0001E-01	1.1856E-01	2.7040E-01	1.1104E-01
3	3.000	5.0001E-01	1.1875E-01	2.7022E-01	1.1101E-01
4	4.000	5.0001E-01	1.1871E-01	2.7013E-01	1.1100E-01
5	5.000	2.8352E-01	5.0842E-02	1.4936E-01	8.2992E-02
6	6.000	4.4061E-03	5.0751E-04	2.1529E-03	1.7405E-03
7	7.000	4.4758E-05	5.0671E-06	2.1620E-05	1.7574E-05
8	8.000	4.9327E-07	5.0673E-08	2.1622E-07	1.7577E-07
9	9.000	1.0415E-08	5.0673E-10	2.1622E-09	1.7577E-09
10	10.000	1.7077E-09	5.0672E-12	2.1622E-11	1.7577E-11
11	11.000	2.6002E-09	5.0664E-14	2.1622E-13	1.7576E-13
12	12.000	1.6374E-08	5.0581E-16	2.1623E-15	1.7567E-15
13	13.000	1.5375E-07	4.9570E-18	2.1632E-17	1.7512E-17
14	14.000	1.3892E-06	3.4256E-20	2.1724E-19	1.8709E-19

A fő-Output

Selected sweep results

-re kattintva a
pH
függvényében
a kiválasztott
komponensek
táblázatát
kapjuk meg.

PbOH+	Pb(OH)2 (aq)	Pb(OH)3-
Concentration	Concentration	Concentration
1.1985E-08	2.3697E-17	3.6366E-27
1.1984E-07	2.3917E-15	3.6648E-24
1.2002E-06	2.4013E-13	3.6844E-21
1.1999E-05	2.4011E-11	3.6847E-18
4.9745E-05	1.0094E-09	1.5275E-15
4.9628E-06	1.0141E-09	1.5355E-14
4.9591E-07	1.0139E-09	1.5365E-13
4.9593E-08	1.0139E-09	1.5365E-12
4.9593E-09	1.0139E-09	1.5365E-11
4.9592E-10	1.0139E-09	1.5365E-10
4.9590E-11	1.0138E-09	1.5364E-09
4.9571E-12	1.0123E-09	1.5357E-08
4.9326E-13	9.9836E-10	1.5275E-07
4.5021E-14	8.8102E-10	1.3884E-06

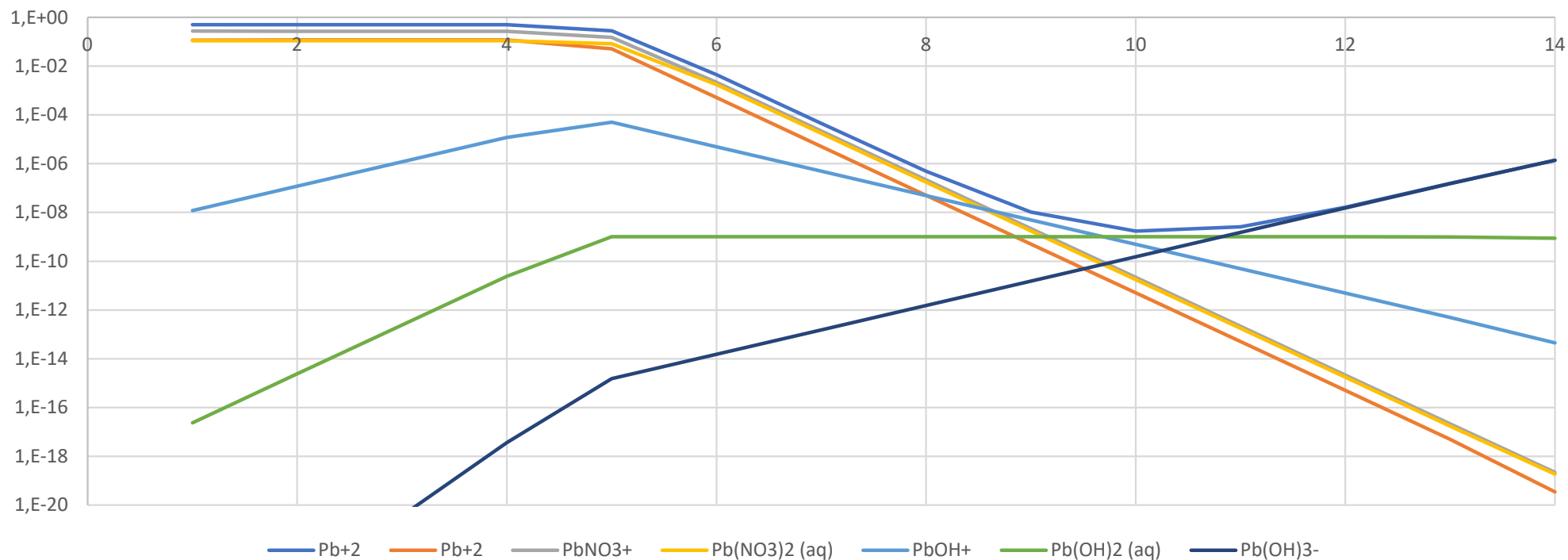
Main output menu

Include last column when pr

Print to Excel

A Print to Excel-re kattintva
kimenthetjük a táblázatot

	Total dissolved	Concentration	Concentration	Concentration	Concentration	Concentration	Concentration	Ellenőrző
pH	Pb+2	Pb+2	PbNO3+	Pb(NO3)2 (aq)	PbOH+	Pb(OH)2 (aq)	Pb(OH)3-	összeg
1	0,49998	0,11643	0,27213	0,11142	1,1985E-08	2,3697E-17	3,6366E-27	0,49998
2	0,50001	0,11856	0,2704	0,11104	1,1984E-07	2,3917E-15	3,6648E-24	0,5
3	0,50001	0,11875	0,27022	0,11101	1,2002E-06	2,4013E-13	3,6844E-21	0,499981
4	0,50001	0,11871	0,27013	0,11100	1,1999E-05	2,4011E-11	3,6847E-18	0,499852
5	0,28352	0,05084	0,14936	0,08299	4,9745E-05	1,0094E-09	1,5275E-15	0,283244
6	4,4061E-03	5,0751E-04	2,1529E-03	1,7405E-03	4,9628E-06	1,0141E-09	1,5355E-14	0,004406
7	4,4758E-05	5,0671E-06	2,1620E-05	1,7574E-05	4,9591E-07	1,0139E-09	1,5365E-13	4,48E-05
8	4,9327E-07	5,0673E-08	2,1622E-07	1,7577E-07	4,9593E-08	1,0139E-09	1,5365E-12	4,93E-07
9	1,0415E-08	5,0673E-10	2,1622E-09	1,7577E-09	4,9593E-09	1,0139E-09	1,5365E-11	1,04E-08
10	1,7077E-09	5,0672E-12	2,1622E-11	1,7577E-11	4,9592E-10	1,0139E-09	1,5365E-10	1,71E-09
11	2,6002E-09	5,0664E-14	2,1622E-13	1,7576E-13	4,959E-11	1,0138E-09	1,5364E-09	2,6E-09
12	1,6374E-08	5,0581E-16	2,1623E-15	1,7567E-15	4,9571E-12	1,0123E-09	1,5357E-08	1,64E-08
13	1,5375E-07	4,957E-18	2,1632E-17	1,7512E-17	4,9326E-13	9,9836E-10	1,5275E-07	1,54E-07
14	1,3892E-06	3,4256E-20	2,1724E-19	1,8709E-19	4,5021E-14	8,8102E-10	1,3884E-06	1,39E-06



A normál egyensúlyi számításokhoz visszaállítjuk
a főmenü (input menü)

Multi-problem / Sweep menüpontját úgy, hogy onnan
a **Cancel and Back** gombbal térünk vissza a főmenübe.



Ügyeljünk arra, hogy főmenüben
a **pH Calculated from mass** ballance állásba kerüljön.

Még egyszerűbb az átállítás a programból kilépve (File menü, Exit),
majd újra belépve.