

微信化学计算工具 · 使用说明 (XRD 与络合/掩蔽估算补充)

本说明文档介绍小程序中新加入的两项功能：XRD 计算组合包与络合/掩蔽稳定常数快速估算。数值与公式用于教学/快速估算；真实体系受温度、离子强度、pH、活度系数、混合物效应等影响，可能与实际有偏差。

一、XRD 计算组合包

功能包含：

- 收藏/自定义条目（本地保存、可复制分享）

靶材	λ (Å)
Cu K α	1.5406
Co K α	1.7890
Mo K α	0.7093

提示：不同仪器/设置（K α 1/K α 合并、单色器、 β 滤波等）会产生细小差异；本工具用于近似换算与快速预判。

2. d(hkl) 计算（晶胞几何）

- 立方： $1/d^2 = (h^2 + k^2 + l^2)/a^2$
- 四方： $1/d^2 = (h^2 + k^2)/a^2 + l^2/c^2$ 以上与小程序 `utils/xrd.js` 中的实现一致。

二、络合/掩蔽稳定常数快速估算

1. 模型与公式

- 总体稳定常数： $\beta = 10^{\{\log\beta\}}$
- 配比：n 表示配体数（如 $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ 则 $n = 4$ ）
- 条件稳定常数近似： $K^* = \beta \cdot [\text{L}]^n$
- 估算结果（简化）：
 - 络合分数 $\approx K^*/(1 + K^*)$
 - $[\text{M}]_{\text{free}} \approx [\text{M}]_0/(1 + K^*)$
 - $[\text{ML}] \approx [\text{M}]_0 - [\text{M}]_{\text{free}}$

说明：该模型忽略了活度系数、逐步平衡（ $\log K_1 \sim$ ）、竞争反应（酸碱、其他配体/金属）、电荷与离子强度效应，适用于课堂演示与实验前快速预估。

2. 输入参数

- 配体 (Ligand)：从下拉列表中选择
- 金属 (Metal)：随配体变化的可用金属列表
- [L]：自由配体浓度 (M)
- $[\text{M}]_0$ ：金属总浓度 (M)

3. 代表性数据简表

以下为工具预置的若干典型组合（25 °C 代表性数量级），供估算参考。n 为配体数；logβ 为总体稳定常数的对数值。

注：不同来源的数据、离子强度条件、温度等会导致显著差异；本表仅作数量级参考。

配体	金属	n	logβ	示例/备注
EDTA	Fe ³⁺	1	25.1	强螯合，常用于掩蔽高价金属
EDTA	Cu ²⁺	1	18.8	经典强配位
EDTA	Ni ²⁺	1	18.6	经典强配位
EDTA	Zn ²⁺	1	16.5	经典强配位
EDTA	Pb ²⁺	1	18.0	经典强配位
EDTA	Ca ²⁺	1	10.7	硬酸硬碱配位
EDTA	Mg ²⁺	1	8.7	—
EDTA	Fe ²⁺	1	14.3	—
EDTA	Co ²⁺	1	16.3	—
EDTA	Al ³⁺	1	16.1	—
EDTA	Zr ⁴⁺	1	29.0	极强（注意条件依赖）
NH ₃	Cu ²⁺	4	13.0	[Cu(NH ₃) ₄] ²⁺
NH ₃	Ni ²⁺	6	8.6	—
NH ₃	Zn ²⁺	4	9.0	—
NH ₃	Ag ⁺	2	7.0	[Ag(NH ₃) ₂] ⁺
en（乙二胺）	Cu ²⁺	2	11.0	双齿配体
en（乙二胺）	Ni ²⁺	3	18.0	—
en（乙二胺）	Fe ²⁺	3	17.0	—
bpy（联吡啶）	Cu ²⁺	2	12.0	平面芳香双齿
bpy（联吡啶）	Fe ²⁺	3	17.6	—
C ₂ O ₄ ²⁻ （草酸根）	Fe ³⁺	3	20.0	双齿，多配位
C ₂ O ₄ ²⁻ （草酸根）	Ni ²⁺	3	12.0	—
C ₂ O ₄ ²⁻ （草酸根）	Cu ²⁺	2	9.0	—
C ₂ O ₄ ²⁻ （草酸根）	Ca ²⁺	1	3.0	—
柠檬酸根	Fe ³⁺	1	12.0	多齿配体
柠檬酸根	Ca ²⁺	1	4.0	—

配体	金属	n	logβ	示例/备注
柠檬酸根	Al ³⁺	1	8.0	—
CN ⁻	Ag ⁺	2	21.0	[Ag(CN) ₂] ⁻ : 强配体 (注意安全)
CN ⁻	Fe ³⁺	6	35.0	极强
CN ⁻	Ni ²⁺	4	26.0	—
CN ⁻	Cu ²⁺	4	25.0	—
SCN ⁻	Fe ³⁺	6	9.0	软配体趋势
SCN ⁻	Cu ²⁺	4	8.0	—
SCN ⁻	Ag ⁺	2	6.0	—
S ₂ O ₃ ²⁻	Ag ⁺	2	13.0	定影/溶银思路相关
F ⁻	Fe ³⁺	6	6.0	硬配体 (如 Zr ⁴⁺ 强)
F ⁻	Zr ⁴⁺	6	30.0	极强 (条件依赖)
F ⁻	Al ³⁺	6	12.0	—
Cl ⁻	Ag ⁺	2	5.0	中等偏弱
Cl ⁻	Cu ²⁺	4	1.2	—
Cl ⁻	Fe ³⁺	6	2.0	—
Br ⁻	Ag ⁺	2	6.5	—
I ⁻	Ag ⁺	2	8.0	软配体对软金属偏强

完整数据以小程序内置表为准，后续会不定期更新与微调。

4. 典型使用流程

- 1. 选择配体 → 选择金属 (列表会随配体变化)
- 2. 输入 [L] (自由配体浓度) 与 [M]₀ (金属总浓度)，单位均为 M
- 3. 点击“估算”，查看 K*、络合分数、[M]_{free} 与 [ML]，可一键复制

三、常见问题 (FAQ)

- Q: 为什么和文献值有差异?
 - A: 文献通常给出逐步稳定常数 (logK₁, logK₂, ...) 与实验条件; 本工具使用代表性的总体常数 (logβ) 并忽略离子强度/活度等, 故仅供估算。
- Q: XRD 计算的 2θ 与库中波长不完全一致怎么办?
 - A: 不同设备/设置 (如 Kα₁/Kα₂ 分辨、单色器、滤波) 会略有差异。可作为初步判定与预估, 再以实验数据为准。
- Q: 能否加入更多配体/金属或导出 CSV?
 - A: 可以。欢迎提出需求清单, 我会按优先级补充; 也可考虑增加导出功能。

最后更新：2025-09-27

四、谱学参考小表（XPS 与拉曼/IR）

本工具内置离线简表，便于快速参考与记录：

- XPS：常见元素与价态的结合能（eV），如 C 1s 284.8、Au 4f7/2 84.0、Ti 2p3/2 (TiO2) ≈458.8 等。
- 振动光谱（拉曼/IR）：常见官能团与材料峰位，如 Si 520 cm⁻¹、C=O 1650–1750 cm⁻¹、Si–O–Si 1000–1150 cm⁻¹ 等。

使用方法：

1. 在“常用谱学参考小表”页签输入关键词（元素/能级/峰位/备注），XPS 与振动表将同步过滤。
2. 点击任意行“复制”可将该行摘要复制到剪贴板，方便粘贴到实验记录或沟通工具。
3. 表头支持横向滚动，移动端采用紧凑布局，数值列右对齐，备注列可换行显示。

说明：数值仅作数量级参考，具体峰位/结合能会受材料组成、化学环境、仪器与测试条件影响。建议结合文献与标准样校准结果。

五、电极电位换算与 Nernst

支持将 E vs 参比 换算为 vs NHE/RHE，并按 Nernst 方程在给定条件下计算 E。

- 参比列表：Ag/AgCl（饱和/3 M）、SCE、NHE、RHE（pH 依赖）。
- 输入：参比类型、温度（°C）、pH（用于 RHE）、E vs 参比（V）。
- 输出：E vs NHE、E vs RHE；可复制结果摘要。
- Nernst：输入 E0（vs NHE）、n、温度、Q，输出 E。

注：参比对 NHE 的位差采用 25 °C 代表值；RHE 校正按 2.303RT/F·pH（25 °C 约 0.05916·pH）。不同盐桥/活度条件可能有细微差异。

六、Beer–Lambert（UV-Vis）

关系式 $A = \epsilon l c$ ，任意已知两项可求第三项，支持多行批量：

- 输入：每行可填写 A、 ϵ (L·mol⁻¹·cm⁻¹)、l (cm)、c (mol·L⁻¹) 中的任意两项或三项。
- 输出：自动求解缺项并汇总；支持复制。
- 单位建议： ϵ (L·mol⁻¹·cm⁻¹)、l (cm)、c (mol·L⁻¹)。

示例：若已知 A 与 ϵ 、l，则 $c = A/(\epsilon l)$ ；已知 ϵ 、l、c 则 $A = \epsilon l c$ 。

七、溶度积（Ksp）与沉淀判断 + 离子强度/活度估算（新）

本模块包含两部分：

1. Ksp 与沉淀判断（针对二元盐）：

- 数据：内置约 50 条常见盐的 K_{sp} (25 °C 代表值)，如 AgCl、BaSO₄、CaCO₃、PbX₂、金属硫化物/氢氧化物/草酸盐/磷酸盐等。
- 输入：
 - 盐（下拉选择）
 - 温度 (°C，用于 Debye–Hückel 系数 A 的简化温度修正)
 - 离子 1 和离子 2 的自由浓度 c (M)
- 输出：
 - 离子强度 I (M)
 - 活度系数 γ_1 、 γ_2 (Debye–Hückel 限定式, $\log_{10} \gamma = -A z^2 \sqrt{I}$, $A(25^\circ\text{C}) \approx 0.509$, 随温度简化修正)
 - 有效浓度 a_1 、 a_2 ($a = c\gamma$)
 - IAP 与 K_{sp} 的比较及“是否沉淀/近似饱和”判断
 - 在给定另一离子浓度时的“忽略活度”的饱和浓度快速估算（以及内在溶解度 s 的估算）

2. 自定义“离子强度/活度”批量估算（多离子场景）：

- 输入：任意多行离子条目，每行包含标签、浓度 c (M)、电荷数 z 。
- 输出：总离子强度 I (M)；逐行给出 γ 与 $a=c\gamma$ 的估算值；可复制汇总。

注意：

- Debye–Hückel 限定式在低离子强度下更适用；高 I 、特定介质/温度、离子尺寸等条件会导致误差。
- K_{sp} 数据为代表性近似值；真实体系会受温度、离子强度、络合、酸碱/缓冲、共离子效应等影响，结果仅供教学与快速预估。
- 饱和浓度“快速估算”忽略活度，作为初步判据；更精细的体系建议联动“络合估算”和 pH 平衡。

A. 浓度单位切换 (M \leftrightarrow mmol/L)

- 顶部可选择“浓度单位”为 M 或 mmol/L。
- 输入框随所选单位填写；内部计算统一按 M 进行，复制的结果默认以 M 展示。

B. 活度模型选择 (Debye–Hückel / Davies)

- 在“活度模型”中选择：
 - Debye–Hückel (限定式)： $\log_{10} \gamma = -A z^2 \sqrt{I}$
 - Davies： $\log_{10} \gamma = -A z^2 [\sqrt{I}/(1+\sqrt{I}) - 0.3 I]$
- A(T) 采用与主程序一致的简化温度修正；Davies 在中等离子强度时通常较 DH 更稳健。
- “自定义离子强度/活度批量”也使用当前选定模型进行 γ 与 a 的估算。

C. 反解另一离子浓度（含活度）

- 当已知其中一个离子的浓度、温度与活度模型后，可点击相邻的“反解离子1/反解离子2”按钮，数值求解另一离子浓度使 $IAP = K_{sp}$ 。
- 算法采用区间扩展 + 二分法 (0–10 M 搜索)，求解成功后自动写回输入框（按所选单位显示）。
- 若条件不产生可行解，会提示“未找到合适的解区间”。

示例（思路演示）：

- 以 AgCl (25 °C, $K_{sp} \approx 1.8 \times 10^{-10}$) 为例，若溶液中 $[Cl^-] = 1.0 \times 10^{-3}$ M：
 - 忽略活度的粗略估算： $c(Ag^+) \approx K_{sp} / [Cl^-] \approx 1.8 \times 10^{-7}$ M；

- 在工具中选择模型（如 Davies），填写温度与 $[\text{Cl}^-]$ ，点击“反解离子1”，得到考虑活度后的 $c(\text{Ag}^+)$ 精细值；
- 若需考察离子强度影响，可在“批量 $I/\gamma/a$ ”中输入多种离子（含背景电解质）查看 I 与 γ 的变化。